

Dissertation

Numerische Methoden für die Analyse von Quantenbauelementen auf Grundlage der Liouville-von-Neumann-Gleichung

Lukas Schulz

Juli 2021



Lehrstuhl für Hochfrequenztechnik

Genehmigte Dissertation zur Erlangung des akademischen Grades Doktor der Ingenieurwissenschaften (Dr.-Ing.) der Fakultät für Elektrotechnik und Informationstechnik der Technischen Universität Dortmund

Ort und Datum der Einreichung:

Dortmund, 17.03.2021

Ort und Datum der mündlichen Prüfung:

Dortmund, 28.06.2021

Hauptreferent:

apl. Prof. Dr.-Ing. Dirk Schulz

Korreferent:

ao. Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Hans Kosina

Kurzzusammenfassung

Heutzutage ist die numerische Modellierung des Transportverhaltens innerhalb von Quantenbauelementen für die Analyse und das Design moderner Komponenten der Nanoelektronik, Hochfrequenztechnik und Terahertz-Technik unabdingbar. Neben der Analyse des stationären Regimes erlangt dabei insbesondere die Erfassung transienter Phänomene unter Berücksichtigung von Wechselwirkungsmechanismen eine große Bedeutung. Während sich Ansätze auf Basis von Greenschen-Funktionen mittlerweile zur Analyse des stationären Transportverhaltens als erfolgreich erwiesen haben, ist ihr Einsatz im transienten Regime aufgrund der hohen Anforderungen an Rechenressourcen zur Analyse von ingenieurmäßigen Anwendungen zu aufwendig. Eine numerisch zielgerichtete Analyse des transienten Transportverhaltens auf Basis der statistischen Dichtematrix erscheint vor diesem Hintergrund sinnvoll.

Hierzu wird vor allem die Wigner-Transportgleichung herangezogen. Die korrespondierende numerische Approximation auf Basis von Finiten-Differenzen ist jedoch mit einer Vielzahl von Problemen behaftet. Stark oszillierende Integralkerne im Phasenraum innerhalb der Wigner-Transportgleichung bereiten Schwierigkeiten bei der Approximation. Kohärente Effekte und nichtlokale Randbedingungen werden im Grundsatz nicht erfasst. Oberflächenterme infolge eines abgeschlossenen Rechengebiets werden nicht berücksichtigt. Als Konsequenz kommt es zu unphysikalischen Reflexionen an den Rändern. Die Ergebnisse weichen bereits stark im stationären Regime von anerkannten Referenzlösungen auf Grundlage Greenscher-Funktionen ab.

In dieser Arbeit werden neu konzipierte Formalismen zur numerischen Approximation der Transportgleichungen vorgestellt, mit denen die genannten Probleme vermieden werden können. Grundlage für dieses Vorhaben ist einerseits eine semi-analytische Lösung auf Basis eines Exponentialoperators und andererseits die Einführung eines komplexen Potentials hinsichtlich der Einbindung der Oberflächenterme. Unter Verwendung der Liouville-von-Neumann-Gleichung in Schwerpunkt- und Relativkoordinaten wird ein weiteres Feld zur Analyse des Transportverhaltens eröffnet. Hiermit gelingt nicht nur die Kombination der Vorteile einer Ortsraumdiskretisierung mit denen einer Phasenraumdarstellung, sondern auch die Formulierung eines numerisch effizienten Unterraum-Verfahrens. Die entwickelten Formalismen werden anhand von Intra-, Inter- und Multisubbandtransportmodellen im stationären und transienten Regime untersucht. Im Vergleich zu den ursprünglich eingesetzten Methoden wird eine hervorragende Übereinstimmung mit anerkannten Verfahren im stationären Regime erzielt und somit der Grundstein für die ingenieurmäßige Analyse von zeitabhängigen Phänomenen in Quantenbauelementen gelegt.

Danksagung

Meinen größten Dank möchte ich meinem Doktorvater Herrn apl. Prof. Dr.-Ing. Dirk Schulz aussprechen. In den vielen Jahren, die wir uns nun schon seit meinem Bachelorstudium kennen, hat er mich als Student, Hilfskraft und Mitarbeiter immer unterstützt. Bei all meinen Anliegen schenkte er mir stets Gehör, förderte meine Ideen und engagierte sich dabei auch weit über seine Arbeitszeit hinaus. Seine uneingeschränkte Diskussionsbereitschaft und zahllosen Anregungen haben entschieden zur Entstehung dieser Arbeit beigetragen.

Mein allerherzlichster Dank gilt ebenso Herrn ao. Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Hans Kosina, der sich innerhalb weniger Minuten dazu entschlossen hat, das Zweitgutachten für meine Arbeit zu übernehmen.

Herrn Prof. Dr.-Ing. Peter Krummrich möchte ich dafür danken, dass er mich mit offenen Armen an seinem Lehrstuhl empfangen hat und mir durch die Teilnahme am Promotionskolloquium eine Möglichkeit gab, neue Blickwinkel auf meine Arbeit zu erlangen.

Allen Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern, die ich in meiner Zeit am Lehrstuhl kennenlernen durfte, danke ich für den konstruktiven Ideenaustausch und die angenehme Arbeitsatmosphäre.

Besonderer Dank gilt auch meiner Familie und Verlobten für ihre kontinuierliche Unterstützung und ihre Rücksichtnahme.

Auch der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) möchte ich für ihre finanzielle Unterstützung im Rahmen des DFG-Projektes SCHU 1016/8-1 danken, in welchem diese Arbeit entstanden ist.

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung und Motivation	1
2. Grundlagen der Quantentheorie des Festkörpers	7
2.1. Hierarchische Beschreibung von Quantensystemen	7
2.1.1. Vielteilchen-Schrödingergleichung	8
2.1.2. Born-Oppenheimer-Approximation	9
2.1.3. Mean-Field-Theorie	10
2.2. Elektronische Bandstruktur	12
2.2.1. kp-Formalismus	13
2.2.2. Kohn-Luttinger-Hamiltonoperator	14
2.2.3. Einhüllende-Funktion	16
2.3. Quantenstatistik	17
2.3.1. Statistischer Dichteoperator und statistische Dichtematrix	17
2.3.2. Liouville-von-Neumann-Gleichung	19
2.3.3. Spur und Erwartungswerte	19
2.4. Quantenmechanik im Phasenraum	20
2.4.1. Weyl-Quantisierung	21
2.4.2. Wigner-Formalismus	22
2.4.3. Konstruktion der Wigner-Funktion	23
2.4.4. Momente der Wigner-Funktion	25
3. Modellierung des Quantentransports	27
3.1. Niederdimensionale Beschreibung der Bauelemente	27
3.2. Intraband-Quantentransport	30
3.2.1. Örtlich konstante effektive Masse	30
3.2.2. Örtlich variierende effektive Masse	33
3.3. Interband-Quantentransport	35
3.3.1. Formulierung des gekoppelten Transportproblems	36
3.3.2. Modellreduktion für den Interbandtransport	41
3.4. Multisubband-Quantentransport	43
3.4.1. Mode-Space-Approximation	43
3.4.2. Modale Transportgleichungen	46
3.5. Modellierung der Elektron-Phonon-Wechselwirkung	47
3.5.1. Relaxationszeitnäherung	48
4. Selbstkonsistenz - Hartree-Potenzial	49
4.1. Poisson-Gleichung	49
4.2. Diskretisierung der Poisson-Gleichung	50
4.2.1. Formulierung für eindimensionale Probleme	50

4.2.2.	Formulierung für zweidimensionale Probleme	52
4.3.	Methoden zur Lösung der Poisson-Gleichung	54
4.3.1.	Direktes Lösungsverfahren	54
4.3.2.	Newton-Raphson-Verfahren	55
5.	Theorie offener Quantensysteme	57
5.1.	Inflow-Randbedingungen für die Schwerpunktkoordinate	57
5.1.1.	Formulierung für eindimensionale Transportprobleme	58
5.1.2.	Formulierung für zweidimensionale Transportprobleme	60
5.1.3.	Kritikpunkte	60
5.1.4.	Semiklassische Berechnung des Fermi-Niveaus	61
5.2.	Offene Randbedingungen für die Relativkoordinate	63
5.2.1.	Formalismus des komplex absorbierenden Potentials	65
5.2.2.	Effizienz der absorbierenden Schicht	67
5.2.3.	Evaluation anhand des Quantentransports in einer Tunnelodiode	73
5.2.4.	Analyse des Quantentransports im Ortsraum	74
5.2.5.	Analyse des Quantentransports im Phasenraum	79
5.2.6.	Transparente Randbedingungen und Perfectly Matched Layer	83
6.	Semidiskrete Transportgleichungen	85
6.1.	Semidiskrete Wigner-Transportgleichung	85
6.1.1.	Diskretisierung des Phasenraums	85
6.1.2.	Semidiskrete Operatoren	90
6.1.3.	Semidiskrete Formulierung des Intrabandmodells	91
6.1.4.	Semidiskrete Formulierung des Interbandmodells	92
6.2.	Semidiskrete Liouville-von-Neumann-Gleichung	93
6.2.1.	Finite-Volumen-Approximation	93
6.2.2.	Semidiskrete Formulierung des Intrabandmodells	97
6.2.3.	Semidiskrete Formulierung des Interbandmodells	98
6.2.4.	Einbindung der Inflow-Randbedingungen	100
6.2.5.	Verbindung zum Wigner-Formalismus	104
7.	Upwind-Verfahren zur Approximation der Wigner-Transportgleichung	107
7.1.	Mathematische Formulierung	107
7.1.1.	Upwind-Verfahren erster Ordnung	108
7.1.2.	Upwind-Verfahren zweiter Ordnung	108
7.1.3.	Formulierung der numerischen Stromdichte	108
7.1.4.	Implementierungsaspekte	109
7.2.	Kritikpunkte	110
7.3.	Numerische Untersuchungen	111
7.3.1.	Evaluierung der I-V-Kennlinie	111
8.	Neuartige numerische Approximationen der semidiskreten Transportgleichungen	115
8.1.	Vorüberlegungen zum Lösungsansatz	115
8.2.	Generische Transportgleichung erster Ordnung	116
8.2.1.	Integration über Teilgebiete	116
8.2.2.	Assemblierung der Systemmatrix	118

8.2.3.	Einbindung der Inflow-Randbedingungen	118
8.2.4.	Bezug zu Differenzenquotienten	119
8.3.	Generische Transportgleichung zweiter Ordnung	120
8.3.1.	Integration über Teilgebiete	121
8.3.2.	Bezug zu Differenzenquotienten	121
8.3.3.	Assemblierung der Systemmatrix	123
8.3.4.	Einbindung der Inflow-Randbedingungen	125
8.4.	Formulierung der numerischen Stromdichte	127
8.5.	Vergleich zum Upwind-Verfahren	127
8.6.	Numerische Evaluation des Intrabandmodells	128
8.6.1.	Analyse auf Basis des Dichtematrix-Formalismus	129
8.6.2.	Analyse auf Basis des Wigner-Formalismus	134
8.7.	Numerische Evaluation der Bandkopplungsmechanismen	137
8.7.1.	Vorüberlegungen	138
8.7.2.	Evaluiierung der Ladungsträger- und Stromdichten	138
8.7.3.	Komponenten der Wigner-Funktion	139
8.8.	Ansatz einer langsam veränderlichen Einhüllenden-Funktion	142
8.8.1.	Definition der Einhüllenden-Funktion	142
8.8.2.	Semidiskrete Transportgleichung	143
8.8.3.	Numerische Evaluation	143
8.9.	Transfermatrixmethode	146
8.9.1.	Theorie	146
8.9.2.	Numerischen Eigenschaften	147
8.9.3.	Grenzen der Transfermatrixmethode	147
8.10.	Transiente Formulierung des Exponentialoperator-Ansatzes	149
8.11.	Untersuchungen zur Genauigkeit der Verfahren	150
8.11.1.	Stationäre Lösungsverfahren	150
8.11.2.	Unterraum-Lösungsverfahren	152
8.11.3.	Transiente Lösungsverfahren	153
9.	Anwendungsbeispiele	157
9.1.	Simulation einer AlGaAs/GaAs-Intraband-Tunnelodiode	157
9.1.1.	Hysterese-Verhalten	158
9.1.2.	Einsatz als THz-Oszillator	162
9.2.	Simulation eines Si-Double-Gate-Feldeffekttransistors	163
9.2.1.	Ausgangskennlinienfeld	165
9.3.	Simulation eines GaInAs-Double-Gate-Feldeffekttransistors	166
9.3.1.	Analyse des stationären Verhaltens	167
9.3.2.	Analyse des Schaltverhaltens im C-Betrieb	168
10.	Zusammenfassung und Fazit	173
	Liste der Publikationen	179
	Literaturverzeichnis	181
	Anhang	191

A. Schwerpunkt- und Relativkoordinaten	191
B. Algorithmus zur Assemblierung des diskreten Poisson-Operators	193
C. Nebenrechnung zum komplex absorbierenden Potenzial	195
D. Nebenrechnungen zum Exponentialoperator	197
D.1. Verknüpfung der Differenzenquotienten	197
D.2. Über die physikalischen Ausbreitungseigenschaften	198
E. Verfahren zur numerischen Zeitintegration	201
E.1. Euler-Verfahren	201
E.2. Crank-Nicolson-Verfahren	201
E.3. Runge-Kutta-Verfahren	202
E.4. Krylov-Unterraum-Verfahren	203
F. Referenzmethoden zur Bestimmung des Quantentransports	205
F.1. QTBM - Quantum Transmitting Boundary Method	205
F.2. NEGF - Nichtgleichgewichts-Greensche-Funktionen	206
G. Abkürzungsverzeichnis	209

1. Einleitung und Motivation

UNSERE moderne Informationsgesellschaft wäre heutzutage ohne die wegweisende Entwicklung leistungsfähiger Halbleiterkomponenten nur noch schwer vorstellbar. Das Rückgrat für diese Entwicklung bildet der Transistor. Von der Erfindung des Transistors im Jahre 1947 bis heute sind nun mehr als 70 Jahre vergangen [1]. In diesem kurzen Zeitraum gelang eine bahnbrechende Verringerung der Strukturgröße von $50\mu\text{m}$ auf 5nm innerhalb der CMOS-Technologieknoten¹. Ferner entwickelte sich die Halbleitertechnologie auch abseits der herkömmlichen Silizium-basierten CMOS-Technologie rasant [2]. Auf Basis modernster Molekularstrahlepitaxie ist eine gezielte Schichtung von III-V- und II-VI-Verbindungshalbleitern möglich. Insbesondere im Umfeld der Hochfrequenztechnik und Terahertz-Technik, der Leistungselektronik sowie der Optoelektronik sind diese Materialien unverzichtbar. Hierzu zählen unter anderem Laser, Detektoren und photovoltaische Zellen, um nur einige Beispiele zu nennen.

Ebenso vielfältig wie die Anwendungsbereiche sind die damit verbundenen Anforderungen an die jeweiligen Komponenten sowie die entsprechenden zukünftigen Herausforderungen bei fortschreitender Entwicklung. So liegen beispielsweise andere Anforderungen für IoT-Sensoren als für Hochleistungsprozessoren oder Halbleiterlaserdioden vor.

Die wachsenden Herausforderungen bei der Leistungsskalierung, 3D-Integration, Wahl der Materialsysteme (z. B. *Band Tailoring*) und insbesondere der Wärmetransport nehmen einen zentralen Stellenwert innerhalb der Halbleiterindustrie ein [3]. Um auch in der Zukunft moderne Komponenten zu wirtschaftlichen Bedingungen anbieten zu können, bedarf es neben Experimenten auch den massiven Einsatz von numerischer Modellierung. Hierdurch sollen teure und vor allem langjährige Fehlentwicklungen in der Technologie vermieden werden und Potenziale frühzeitig erkannt werden.

Numerische Simulationen beschränken sich dabei nicht nur auf die erkennbare Bauelementmodellierung, sondern ermöglichen auch die Modellierung von Technologieprozessen. Wenngleich beide Arten der Simulationen sich gegenseitig bedingen, so ist die Bauelementmodellierung jedoch unbestreitbar die treibende Kraft jeglicher Innovation.

Zur Beschreibung des makroskopischen Transportverhaltens werden Drift-Diffusionsmodelle [4, 5] sowie die Boltzmann-Transportgleichung (BTG) [6] mit numerischen Methoden gelöst. Im Umfeld der Mikroelektronik sind diese semiklassischen Ansätze auch heute noch das Mittel der Wahl. Hinsichtlich der Modellierung von mesoskopischen Bauelementen in der Nanoelektronik, Hochfrequenztechnik und Terahertz-Technik liegen jedoch Schichtstrukturen oder Abmessungen vor, in denen Quanteneffekte nicht mehr zu vernachlässigen sind. Folglich ist eine quantentheoretische Modellierung der Transportphänomene notwendig. Neben ballistischen Verfahren auf Grundlage der numerischen Lösung der Schrödingergleichung, wie der sogenannten Quantum Transmitting Boundary Method (QTBM) [7, 8], erlangen dissipative Transportmodelle auf Basis

¹<https://www.tsmc.com>

von Nichtgleichgewichts-Greensche-Funktionen (NEGF) [9, 10] sowie des Wigner-Formalismus [11, 12] zur Berücksichtigung von Wechselwirkungsmechanismen große Bedeutung. Während der NEGF-Formalismus stetig großen Forschungsbemühungen, u. a. in Form von Großprojekten wie NanoElectronic MOdeling (NEMO) in den USA [13] und Nano-Electronic Simulation Software (NESS) in der EU [14], unterliegt und heute den industriellen Standard verkörpert, spielt der Wigner-Formalismus in dem Umfeld der Modellierung der elektrischen Eigenschaften eine untergeordnete, aber stetig zunehmende Rolle [12]. Insbesondere birgt der Wigner-Formalismus wesentliches Potenzial bei der Beschreibung von Wechselwirkungsmechanismen sowie der Modellierung des transienten Quantentransports [15, 16]. Bezüglich dieser beiden Punkte erweist sich der NEGF-Ansatz als äußerst aufwendig für ingenieurmäßige Anwendungen [9, 17]. Darüber hinaus liefert der Wigner-Formalismus als Phasenraumdarstellung einen nahtlosen Übergang von Konzepten der klassischen Mechanik zur Quantenmechanik, die als quantenmechanisches Analogon zum Boltzmann-Formalismus intuitiv interpretiert werden kann [11, 12].

Neben Monte-Carlo-Methoden [18, 19], Finite-Volumen-Verfahren [20] und spektralen Elementen [21] werden insbesondere Finite-Differenzen-Verfahren, basierend auf einem Upwind-Differenzen-Schema (UDS) [22–24], zur numerischen Approximation der Bewegungsgleichung des Wigner-Formalismus, der sogenannten Wigner-Transportgleichung (WTG), eingesetzt.

Der Einsatz von konventionellen Finite-Differenzen-Verfahren ist jedoch mit einer Vielzahl von Problemen behaftet [20, 25–28], die im Folgenden in ihren wesentlichen Punkten zusammengefasst werden sollen:

- **Nichtlokale Randbedingungen** [25, 29] und **Kohärenz-Effekte** [28] werden im Grundsatz nicht erfasst.
- Die **antiproportionale Kopplung** der unabhängigen Variablen des Phasenraums führt zu schlechten **Konvergenzeigenschaften** [20]. Bei einer Verkleinerung der Diskretisierungsweiten konvergieren die Ergebnisse sogar gegen **unphysikalische Lösungen** [27].
- Durch die inhärent **semiklassische Randbedingung** ist die Abgrenzung von Bauelement zu Reservoir nur für unendlich ausgedehnte Strukturen [26, 30] gerechtfertigt.
- Die **numerische Diffusion** führt zu einer Überbewertung der diffusen Effekte [27, 28].

Zusammenfassend resultieren diese Kritikpunkte schließlich darin, dass die Ergebnisse des Wigner-Formalismus nicht mit denen des anerkannten NEGF-Formalismus übereinstimmen, zum Teil sind diese sogar unphysikalisch [27, 29, 31]. Hierdurch büßt der Wigner-Formalismus maßgeblich an Integrität ein und der ernsthafte Einsatz im transienten Regime ist fragwürdig.

Dennoch ist eine Analyse und Modellierung von Quantenbauelementen auf Basis des Wigner-Formalismus aufgrund seiner Schlüsselfähigkeiten zur zielgerichteten Zeitbereichssimulation und Einbindung von Wechselwirkungsmechanismen vor allem für Ingenieursanwendungen erstrebenswert [15, 16].

Im Rahmen dieser Arbeit sollen daher sowohl neuartige Formalismen zur numerischen Approximation der WTG als auch der Liouville-von-Neumann-Gleichung in Schwerpunkt- und Relativkoordinaten (LVNG-RS) entwickelt werden, mit welchen die genannten Nachteile überwunden werden. Neben den in der Literatur vorwiegend eingesetzten Inbandmodellen unter Annahme einer konstanten effektiven Masse soll eine Erweiterung im Hinblick auf verschiedene Modelle erfolgen:

-
- Die für **Heterostrukturen** bedeutsame **örtliche Variation der effektiven Masse** soll Berücksichtigung finden.
 - **Bandkopplungsmechanismen** sollen durch **Interbandmodelle** einbezogen werden. Hierdurch gelingt eine Modellierung von technisch relevanten Bauelementen auf Grundlage des **Zener-Tunneleffekts**.
 - Die Methoden sollen in Kombination mit bewährten **Multisubbandmodellen**, wie z. B. der **Mode-Space-Approximation**, zur Beschreibung von mehrdimensionalen Komponenten eingesetzt und bezüglich der **Modellierung von transienten Phänomenen** erweitert werden.

Insbesondere soll mithilfe der LVNG-RS ein Formalismus entwickelt werden, der die Vorteile einer ortsraumbasierten Diskretisierung mit denen einer Phasenraumdarstellung vereint. Wechselwirkungsmechanismen sollen auch in dieser Darstellung Berücksichtigung finden.

Zum Erreichen dieser Ziele werden, ausgehend von der analytischen Formulierung der Transportgleichung, formale Lösungen bestimmt und den physikalischen Gesetzmäßigkeiten entsprechende Approximationen durchgeführt. Insbesondere sollen dabei die Kenntnisse über ein durch die Numerik bedingtes, abgeschlossenes Rechengebiet systematisch einbezogen werden, auf dessen Grundlage eine künstlich absorbierende Schicht eingeführt wird. Die formale Gestalt der Transportgleichung erlaubt eine Analyse sowohl auf Basis einer Einhüllenden-Funktion als auch einer Transfermatrixmethode. Diese sollen in die Untersuchungen einbezogen werden. Die entwickelten Formalismen sollen sowohl mit den anerkannten Methoden im stationären Regime als auch den ursprünglichen Methoden zur Approximation der WTG verglichen werden. Zusätzlich sollen die Transportgleichungen hinsichtlich verschiedener Verfahren zur numerischen Zeitintegration untersucht und verglichen werden. Auf dieser Grundlage soll eine Beurteilung der Formalismen bezüglich der praktischen Modellierung des Quantentransports erfolgen.

Übersicht zu den Kapiteln: Das Transportverhalten in Quantenbauelementen basiert auf zahlreichen Annahmen und Vereinfachungen, deren Verständnis Grundvoraussetzung für eine erfolgreiche Analyse und Modellierung ist. In Kapitel 2 werden daher wesentliche quantentheoretische Grundlagen und Näherungen zusammengefasst. Die darauf aufbauende Transporttheorie wird in Kapitel 3 eingeführt. Die Einbindung der Poisson-Gleichung zur Erfassung des durch die Ladungsträgerdichten hervorgerufenen Potenzials erfolgt in Kapitel 4. Anschließend werden die Randbedingungen zur Modellierung des Quantentransports in Kapitel 5 vorgestellt und untersucht. Dieses Kapitel umfasst auch die Analyse und Evaluierung der künstlich absorbierenden Schicht. In Kapitel 6 wird die Transportgleichung durch eine generalisierte Diskretisierung in eine semidiskrete Darstellung gebracht. Auf dieser Grundlage werden in Kapitel 7 die konventionellen Methoden vorgestellt und untersucht, bevor in Kapitel 8 auf die Entwicklung und Bewertung der neuartigen Methoden eingegangen wird. Im Anschluss werden in Kapitel 9 technisch relevante Anwendungsbeispiele sowohl im stationären als auch im transienten Regime unter Berücksichtigung von Wechselwirkungsmechanismen mit dem entwickelten Formalismus auf Basis der LVNG-RS simuliert. Die erzielten Ergebnisse werden zum Schluss in Kapitel 10 zusammengefasst. Erweiterungen und Potenziale im Hinblick auf zukünftige Untersuchungen werden genannt.

Leitfaden zur Arbeit

Ein unmittelbarer Einstieg in die Tiefen des Quantentransports innerhalb von Halbleiterstrukturen kann für den Ingenieur mit einer Vielzahl von Schwierigkeiten behaftet sein kann. Dementsprechend soll gleich zu Beginn dieser Arbeit über einen schematischen Simulationsablauf zur Bestimmung des Quantentransports Klarheit bezüglich der benötigten Konzepte geschaffen werden. Der vereinfachte Algorithmus ist als Flussdiagramm in Abbildung 1.1 dargestellt und wird im Folgenden erläutert. Die Konzepte werden in den Kapiteln der Arbeit im Detail erarbeitet.

Initialisierung: Die **Struktur- und Materialparameter** des zu analysierenden Bauelements werden vorgeben.

- Mithilfe der Materialparameter, welche das Dotierungsprofil beinhalten, wird das **Fermi-Niveau** berechnet (Kapitel 5).
- Auf Grundlage der Strukturparameter wird das **Rechengebiet** generiert. Anschließend werden die Materialparameter auf das Rechengebiet abgebildet (Kapitel 6).

Stationäre Simulation: Die stationäre Rechnung setzt sich im Grundsatz aus zwei Komponenten zusammen, die so lange wechselseitig gelöst werden, bis eine Fehlerschranke unterschritten wird (s zählt hierbei die Iterationen):

- Die **stationären Transportgleichungen** (Theorie: Kapitel 2 - 3, Randbedingungen: Kapitel 5, Numerik: Kapitel 6 - 8, Referenzmethoden: Anhang F) liefern dabei in **Abhängigkeit des sogenannten Hartree-Potenzials** U^s Größen wie die Strom-, Energie- oder Raumladungsdichte ϱ^s . Da die Raumladungsdichte ϱ^s jedoch selbst ein Potenzial infolge von Ladungsträgerwechselwirkungsmechanismen hervorruft, ist eine Anbindung an die **Poisson-Gleichung** sinnvoll. Weiterhin erfolgt in diesem Funktionsblock die Anbindung an weitere Methoden wie z. B. der Mode-Space-Approximation oder Relaxationszeitnäherung zur Modellierung von Streumechanismen.
- Die **Poisson-Gleichung** (Theorie: Kapitel 2, Theorie/Numerik/Randbedingungen: Kapitel 4) liefert in **Abhängigkeit von der Raumladungsdichte** ϱ^s ein neues Potenzial U^{s+1} . Hierfür ist im Anschluss wiederum die stationäre Transportgleichung auszuwerten, dann wieder die Poisson-Gleichung usw. Falls die Differenz zwischen zwei Werten U^s und U^{s-1} klein genug ist, kann mit dem nächsten Spannungsschritt weiter gemacht oder die stationäre Simulation beendet werden.

Transiente Simulation: Bei der transienten Simulation ist zur Modellierung des Quantentransports ein **vorheriger Durchlauf der stationären Simulation** zur Berechnung der (selbstkonsistenten) **initialen Verteilungsfunktion und des Hartree-Potenzials** notwendig. Die **transiente Simulation** erfolgt dann unter Verwendung der **transienten Transportgleichungen** (Theorie/Numerik/Randbedingungen: Kapitel 8), welche **für jeden Zeitschritt mit der Poisson-Gleichung** (transiente Randbedingungen: Kapitel 4) gelöst wird. Die **Anpassung des Potenzials** an die Raumladungsdichte erfolgt dabei **instantan**.

In Kapitel 9 werden auf Basis des Algorithmus zeitabhängige Phänomene in Quantenbauelementen untersucht.

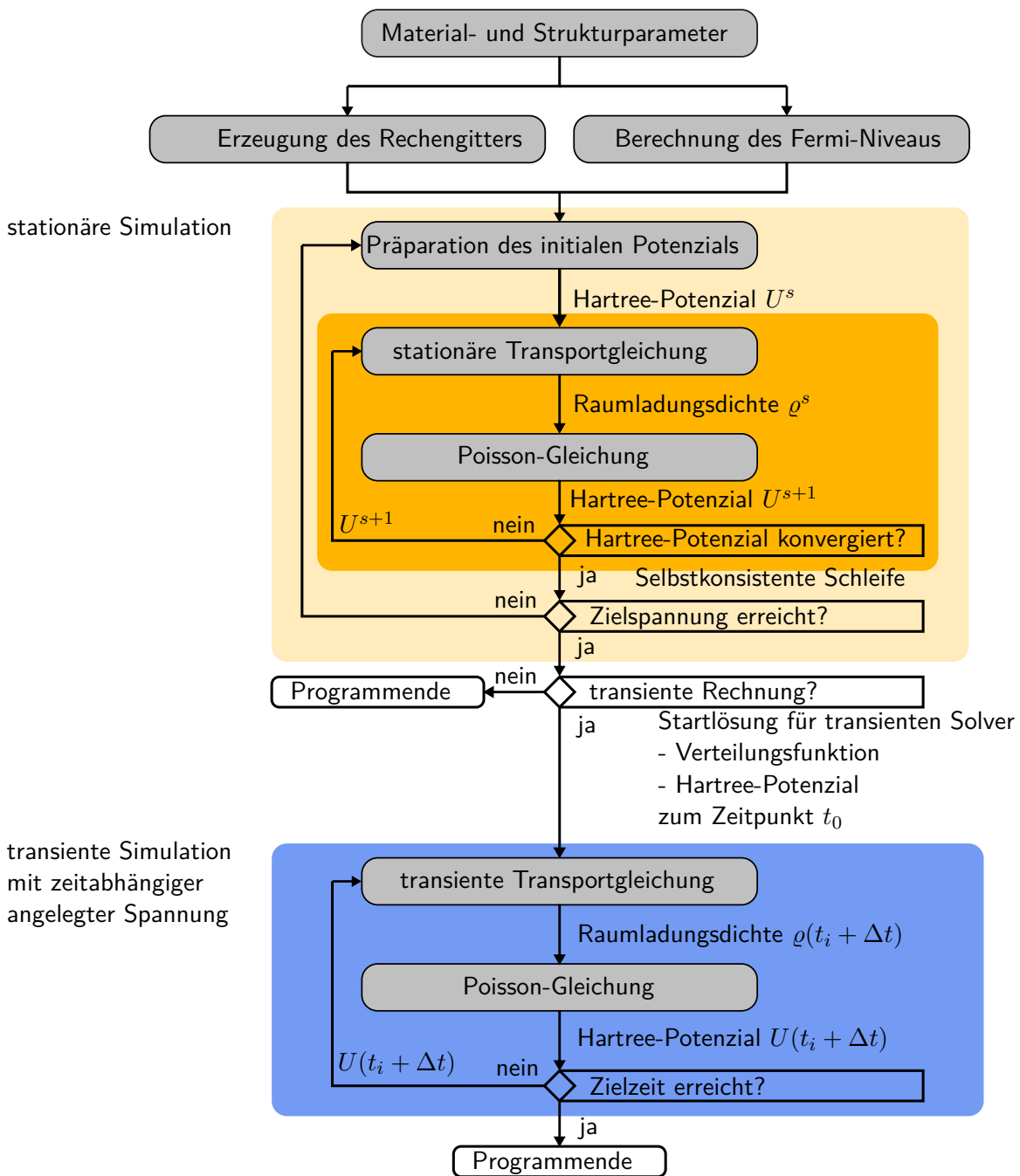


Abbildung 1.1. Algorithmus zur Simulation des Quantentransports. Die grauen Boxen beinhalten jeweils die Module, welche in Kombination zur Simulation des Quantentransports verwendet werden. Der orangefarbene Bereich beinhaltet hierbei die Module für den stationären Quantentransport, während der blaue die Module zur Simulation des transienten Quantentransports beinhaltet. Auf die Beschreibung der Module wird im Text eingegangen.

2. Grundlagen der Quantentheorie des Festkörpers

In diesem Kapitel werden die Grundlagen der Quantentheorie des Festkörpers in der für diese Arbeit benötigten Tiefe dargelegt. Eine komplette Rezension der Theorie würde den Rahmen dieser Arbeit bei Weitem überschreiten. Grundlegende Konzepte der Quantenmechanik, wie die Dirac-Notation, Quantisierung sowie der Aufbau von Kristallgittern und die damit verbundenen Konsequenzen, werden daher als bekannt vorausgesetzt und sind in Standardwerken wie [6, 32, 33] ausführlich dargestellt. Unter dem Gesichtspunkt der ingenieurmäßigen Modellierung ist die vollständige Analyse von Halbleiterbauelementen als Vielteilchenproblem weder möglich noch sinnvoll. In Abschnitt 2.1 erfolgt daher eine hierarchische Einordnung der Approximationen und den damit einhergehenden physikalischen Grenzen der Modelle. Das Ziel dieser approximativen Behandlung ist die Formulierung einer Einteilchen-Schrödingergleichung [6, 33]. Anschließend werden in Abschnitt 2.2 Methoden zur numerischen Lösung der Einteilchen-Schrödingergleichung vorgestellt. Der Schwerpunkt liegt hier auf dem kp-Formalismus [34–36], der mit der Einhüllenden-Approximation [37] den Grundstein für diese Arbeit legt. In Abschnitt 2.3 werden die wesentlichen Konzepte der Quantenstatistik auf Basis des statistischen Dichteoperators gelegt [37]. Diese Betrachtungen umfassen auch die Bewegungsgleichung des statistischen Dichteoperators, die zentrale Größe dieser Arbeit. In Analogie zur klassischen Mechanik, welche einem statistischen Formalismus im Phasenraum folgt, wird in Abschnitt 2.4 eine systematische Beschreibung der Quantenmechanik im Phasenraum über die Weyl-Quantisierung [38, 39] erarbeitet, wodurch die Basis für den Wigner-Formalismus [11] gelegt wird.

2.1. Hierarchische Beschreibung von Quantensystemen

Die Beschreibung von Festkörpern ist naturgemäß ein Vielteilchenproblem, welches in Abschnitt 2.1.1 diskutiert wird. Wie bereits erwähnt, stellen Vielteilchenprobleme die gezielte Modellierung von Komponenten der Nanoelektronik und Photonik vor große Herausforderungen, die selbst mit modernen Rechenclustern nicht überwindbar erscheinen. Aus diesem Grund sind einige Approximationen notwendig, um die Komplexität des Vielteilchensystems auf numerisch "handhabbare" Gleichungen zu reduzieren. Ziel der Näherungen ist es, eine Einteilchen-Schrödingergleichung zu erhalten, in welcher der Einfluss der übrigen Elektronen auf das betrachtete Elektron über ein effektives Potenzial, dem sogenannten Hartree-Potenzial, modelliert wird. Ein systematischer Zugang erfolgt hierbei über die Separation der Elektronenbewegung von jener der Ionen, der sogenannten Born-Oppenheimer-Approximation in Abschnitt 2.1.2. Das verbleibende Vielteilchenproblem der Elektronen wird in Abschnitt 2.1.3 unter Verwendung der Mean-Field-Theorie in eine Einteilchen-Schrödingergleichung überführt. Konsequenzen der jeweiligen Approximation hinsichtlich der Tragweite werden diskutiert.

Eine ausführliche Abhandlung dieser Approximationen und heute immer noch stark debattierten Forschungsfelder kann Standardwerken, wie z. B. [6, 33, 40], entnommen werden.

2.1.1. Vielteilchen-Schrödingergleichung

Die zeitliche Entwicklung eines Zustands $|\Psi\rangle$ ist durch die grundlegende Bewegungsgleichung der Quantenmechanik, namentlich der Schrödingergleichung, bestimmt:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \mathcal{H}^{\text{MB}} |\Psi(t)\rangle. \quad (2.1)$$

Hierbei repräsentieren i und \hbar die imaginäre Einheit und das reduzierte Plancksche Wirkungsquantum. Unter Verwendung des Separationsansatzes $|\Psi(t)\rangle = \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right) |\Psi\rangle$ für zeitlich eingeschwungene Systeme lässt sich die Schrödingergleichung auch als ein Eigenwertproblem bezüglich der Energie E darstellen:

$$E |\Psi\rangle = \mathcal{H}^{\text{MB}} |\Psi\rangle. \quad (2.2)$$

Der Operator \mathcal{H}^{MB} stellt den nicht-relativistischen Vielteilchen-Hamiltonoperator dar, welcher sich in eine Summe von wechselwirkenden und nicht-wechselwirkenden Anteilen zerlegen lässt:

$$\mathcal{H}^{\text{MB}} = \mathcal{H}_{\text{el},0} + \mathcal{H}_{\text{el,el}} + \mathcal{H}_{\text{ion},0} + \mathcal{H}_{\text{ion,ion}} + \mathcal{H}_{\text{el,ion}} + \mathcal{H}_{\text{ext}}. \quad (2.3)$$

Die nicht-wechselwirkenden Anteile bezüglich der Elektronen und der Ionen werden durch den Anteil $\mathcal{H}_{\text{el},0}$, beziehungsweise durch den Anteil $\mathcal{H}_{\text{ion},0}$ erfasst. Die Anteile $\mathcal{H}_{\text{el,el}}$, $\mathcal{H}_{\text{ion,ion}}$ und $\mathcal{H}_{\text{el,ion}}$ erfassen in dieser Reihenfolge die Elektron-Elektron-, Ion-Ion- und Elektron-Ion-Wechselwirkung. Bezüglich der Wechselwirkung mit allen weiteren externen Feldern wird an dieser Stelle \mathcal{H}_{ext} angesetzt.

Für die weiteren Betrachtungen wird der abstrakte Ketvektor $|\Psi\rangle$ unter Einführung der Wellenfunktion gemäß

$$\langle \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n, \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N | \Psi \rangle = \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n, \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N) \quad (2.4)$$

in die Ortsbasis projiziert, wobei die Koordinaten \mathbf{r}_j die n Elektronen beschreiben. Die Koordinaten \mathbf{R}_k beschreiben die Lagen der N Ionen innerhalb des Systems. Die Matrixelemente des Hamiltonoperators \mathcal{H}^{MB} können in dieser Darstellung aus der Hamiltonfunktion und der Anwendung des Korrespondenzprinzips, welches die Observablen in ihre Operatorform übersetzt, als

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{el},0} &= \sum_{i=1}^n -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla_{\mathbf{r}_i}^2 & \mathcal{H}_{\text{el,el}} &= \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i<j}^n \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} & \mathcal{H}_{\text{el,ion}} &= \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,k} \frac{-Z_k}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_k|} \\ \mathcal{H}_{\text{ion},0} &= \sum_{k=1}^N -\frac{\hbar^2}{2M_k} \nabla_{\mathbf{R}_k}^2 & \mathcal{H}_{\text{ion,ion}} &= \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{k<l}^N \frac{Z_k Z_l}{|\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_l|} \end{aligned} \quad (2.5)$$

geschrieben werden. Die Konstanten m_0 und M_j stellen die Ruhemasse eines Elektrons und die Masse des j -ten Atomkerns dar. Darüber hinaus besitzt der j -te Atomkern eine Kernladungszahl Z_j . Die Konstanten q und ε_0 repräsentieren die Elementarladung und die Dielektrizitätskonstante. Unter Berücksichtigung der unterschiedlichen Massenverhältnisse von den Atomkernen zu den Elektronen wird im nächsten Abschnitt die erste einschneidende Approximation eingeführt.

2.1.2. Born-Oppenheimer-Approximation

Als Konsequenz der deutlich größeren Masse der Atomkerne im Vergleich zu den Elektronen, mit einem Verhältnis in der Größenordnung 10^3 , wird die Ionenkonfiguration sich nur geringfügig an die aktuelle Elektronenkonfiguration anpassen [6]. Vielmehr passt sie sich dem zeitlichen Mittelwert der Elektronenkonfiguration an. Die Elektronenkonfiguration stellt sich hingegen adiabatisch auf die Ionenkonfiguration ein.

Mit dieser Vorüberlegung scheint es nun in erster Näherung zweckmäßig zu sein, das Elektronensystem nur noch für feste Ionenkonfigurationen, dem sogenannten Gitter, zu betrachten. Die Bewegung der Ionen kann anschließend mit störungstheoretischen Methoden betrachtet werden [6, 32]. Dementsprechend wird auch der Vielteilchen-Hamiltonoperator entkoppelt, in welchem die Bewegung der Ionen als Störung aufgefasst wird:

$$\begin{aligned}\mathcal{H}^{\text{MB}} &= \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{ion},0} \\ \mathcal{H}_0 &= \mathcal{H}_{\text{el},0} + \mathcal{H}_{\text{el,el}} + \mathcal{H}_{\text{ion,ion}} + \mathcal{H}_{\text{el,ion}}.\end{aligned}\tag{2.6}$$

Dieses Vorgehen ist in der Literatur unter dem Begriff der Born-Oppenheimer-Approximation bekannt [6]. Die Schrödingergleichung zu \mathcal{H}_0 beschreibt das Verhalten der Elektronen innerhalb eines starren Gitters. Ferner weist diese Gleichung bezüglich der Ionenkoordinaten \mathbf{R}_j nur noch eine parametrische Abhängigkeit auf.

Hiermit können die Eigenlösungen des Elektronensystems konzeptionell als

$$\mathcal{H}_0 \Phi_\alpha(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N) = E_\alpha(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N) \Phi_\alpha(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N)\tag{2.7}$$

geschrieben werden, wobei die parametrische Abhängigkeit an dieser Stelle explizit durch die Trennung mit einem Semikolon gekennzeichnet wird. Der Multiindex α erfasst einen vollständigen Satz von Quantenzahlen. Die Menge an Eigenlösungen $\{\Phi_\alpha(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N)\}$ zu den Eigenenergien E_α bildet für jede Ionenkonfiguration ein vollständiges Funktionensystem. Mit diesen Eigenfunktionen kann nun die allgemeine Wellenfunktion des Vielteilchensystems unter Einführung der Entwicklungskoeffizienten χ_α

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N) = \sum_\alpha \chi_\alpha(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N) \cdot \Phi_\alpha(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n; \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N)\tag{2.8}$$

entwickelt werden. Der Entwicklungskoeffizient ist hierbei als Wellenfunktion des Ionensystems zu interpretieren. Mit dem Ziel, eine Bestimmungsgleichung für die Ionen-Wellenfunktion zu erhalten, wird der Ausdruck (2.8) nun in die Vielteilchen-Schrödingergleichung (2.1) eingesetzt. Zur Projektion des Systems in die Darstellung der Entwicklungskoeffizienten wird die Orthogonalität der Funktionen Φ_α ausgenutzt. Hierzu wird die Gleichung zuerst von links mit Φ_β^\dagger multipliziert und anschließend über das Raumvolumen integriert. Die Koppellemente zwischen

den Quantenzahlen α und β werden wie üblich vernachlässigt [6]. Als Konsequenz ergibt sich hieraus eine in der Praxis viel diskutierte Einschränkung, nämlich dass Übergänge des Elektronensystems durch die Ionenbewegung im Grundsatz nicht erfasst werden. Dennoch bildet das durch (2.7) beschriebene Elektronensystem auch jetzt noch ein Vielteilchenproblem, dessen direkte Lösung auch mit numerischen Methoden nicht trivial ist. Im folgenden Abschnitt wird daher eine Methode vorgestellt, die eine Formulierung des Vielteilchensystems durch effektive Einteilchen-Schrödingergleichungen erlaubt.

2.1.3. Mean-Field-Theorie

Eine wichtige Klasse von Näherungen für Vielteilchenprobleme beruht auf der Idee, dass der Einfluss aller wechselwirkenden Teilchen durch einen Mittelwert berücksichtigt werden kann. Das Vielteilchensystem zerfällt dann in eine Summe von über den Mittelwert gekoppelten Einteilchenproblemen. Von dieser Vorgehensweise stammt auch der Name Mean-Field-Theorie ab. Bekannte Beispiele sind die Stoner-Theorie des Ferromagnetismus, die Barden-Cooper-Schrieffer (BCS)-Theorie der Supraleitung sowie die hier betrachtete Hartree-Fock-Approximation für die Elektronenwechselwirkung im starren Gitter.

Hartree-Fock-Approximation: Ausgangspunkt für die folgenden Betrachtungen ist ein Elektronengas, welches in ein starres, positiv geladenes Gitter eingebettet ist:

$$\mathcal{H}^{\text{HF}} = \mathcal{H}_{el,0} + V + \mathcal{H}_{el,el}. \quad (2.9)$$

Die ersten beiden Operatoren, $\mathcal{H}_{el,0}$ und V , stellen Einteilchenoperatoren dar. Der letzte Operator $\mathcal{H}_{el,el}$ stellt hingegen einen Zweiteilchenoperator dar. Die Elektronen-Ionen-Wechselwirkung ist aufgrund der Born-Oppenheimer-Näherung über $V = \sum_i \sum_k \frac{-q^2 Z_k}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_k|}$ auch als Einteilchenoperator aufzufassen.

Der Grundgedanke hinter der Hartree-Fock-Approximation ist es, ein Funktional bezüglich der Elektronen-Wellenfunktion aufzustellen und zu variieren [6, 33]. Gemäß dem Pauli-Prinzip soll die Wellenfunktion der Vertauschungsrelation für Fermionen gehorchen und wird daher als sogenannte Slater-Determinante, bestehend aus Einteilchen-Wellenfunktionen,

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) = \begin{vmatrix} \Phi_1(\mathbf{r}_1) & \dots & \Phi_n(\mathbf{r}_1) \\ \vdots & & \vdots \\ \Phi_1(\mathbf{r}_n) & \dots & \Phi_n(\mathbf{r}_n) \end{vmatrix} \quad (2.10)$$

angesetzt [6]. Mit diesem Ansatz wird nun das Funktional bezüglich der Energie gebildet $E\{\Psi\} = \langle \Psi | \mathcal{H}^{\text{HF}} | \Psi \rangle / \langle \Psi | \Psi \rangle$. Die Variation des Funktionals bezüglich der Einteilchen-Wellenfunktion Φ_j^* liefert unter der Nebenbedingung der Orthogonalität der Φ_j schließlich die sogenannte Hartree-Fock-Gleichung:

$$E_j \Phi_j(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + V(\mathbf{r}) + \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{k \neq j} \int d\mathbf{r}' \frac{|\Phi_k(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{\substack{k \neq j \\ \text{Spin } \parallel}} \int d\mathbf{r}' \frac{\Phi_k^*(\mathbf{r}') \Phi_j^*(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right] \Phi_j(\mathbf{r}). \quad (2.11)$$

Der erste Wechselwirkungsterm wird als Hartree-Beitrag und der zweite als Fock-Beitrag¹ bezeichnet [6]. Unter Vernachlässigung des nichtlokalen Fock-Beitrags ergibt sich die Hartree-Näherung. Die verbleibende Gleichung wird als Hartree-Gleichung bezeichnet, dessen Hartree-Beitrag wie folgt zu interpretieren ist. Die Elektronen, welche die Einteilchen-Zustände besetzen, rufen eine mittlere Raumladungsdichte, entsprechend $\varrho(\mathbf{r}') = q \sum_k |\Phi_k(\mathbf{r}')|^2$, hervor. Wird angenommen, dass der Einfluss der Wechselwirkung des Elektrons im Zustand Φ_j mit sich selbst an der gesamten Raumladungsdichte einen kleinen Anteil hat², lässt sich der Hartree-Beitrag (2.11) mithilfe einer mittleren Raumladungsdichte ϱ formulieren. Diese ist dann entsprechend

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int d\mathbf{r}' \frac{\varrho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (2.12)$$

mit einem elektrostatischen Potenzial $\phi(\mathbf{r})$ verknüpft, auch selbstkonsistentes (Hartree-)Potenzial genannt. Offensichtlich ist diese Näherung für mesoskopische Bauelemente mit vielen Elektronen gerechtfertigt. Bei sehr kleinen Abmessungen hingegen, wie z. B. bei einem Ein-Elektronentransistor, ist diese Approximation inadäquat. Jedoch stellt dieses Problem ein nicht-lineares Problem dar, denn die gesuchte Elektronenkonfiguration hängt von dem effektiven Potenzial ab und das effektive Potenzial hängt wiederum von der Elektronenkonfiguration ab. Diese Art von Problem ist auch unter dem Begriff des Selbstkonsistenz-Problems bekannt [6], welches in der Praxis durch einen iterativen Ansatz [5] gelöst wird, der wie folgt abläuft:

1. Vorgabe eines elektrostatischen Potenzials³.
2. Löse die Hartree-Gleichung für das aktuelle elektrostatische Potenzial.
3. Bestimme die Raumladungsdichte.
4. Löse die Poisson-Gleichung, um eine neue Vorgabe für das elektrostatische Potenzial zu erhalten.
5. Falls die vorgegebene Genauigkeit, zum Beispiel der Konvergenzfehler bezüglich der Änderung der Raumladungsdichte, erreicht ist, wird die selbstkonsistente Iteration abgebrochen. Andernfalls wird für das neue Potenzial mit Schritt 2 fortgefahren.

Eine genauere Betrachtung dieses wichtigen Aspekts inklusive der Einbindung in die Modellierung des Quantentransports erfolgt in Kapitel 4.

¹In der Literatur auch als Austauschbeitrag bekannt.

²Für mesoskopische Systeme ist diese Näherung in der Regel gerechtfertigt. Die Summe des Hartree-Beitrags in (2.11) lässt sich dann entsprechend $\sum_{k \neq j} \rightarrow \sum_k$ überführen.

³Dieses kann für das thermodynamische Gleichgewicht mithilfe der Differenz der bekannten Fermi-Niveaus der verschiedenen Kontakte berechnet werden, wobei der Spannungsabfall über der Struktur erfolgen soll. Nahe der Randbereiche soll das Potenzial konstante Werte einnehmen. Angelegte Spannungen sind mit dem Potenzial zu verrechnen.

2.2. Elektronische Bandstruktur

Für die Modellierung von Komponenten der Nanoelektronik und Photonik ist die elektronische Bandstruktur eine der wichtigsten Kenngrößen. Eine Klassifikation anhand des Verlaufs der Bandstruktur als Metall, Halbleiter oder Isolator kann erfolgen. Optische Eigenschaften und mögliche abgedeckte Wellenlängenbereiche lassen sich direkt ablesen. Zusätzlich kann auf die effektive Masse geschlossen werden, welche in einem direkten Zusammenhang mit der Beweglichkeit steht.

Für die Bestimmung der Bandstruktur existiert eine Vielzahl an Verfahren. Den allgemeinsten, aber auch numerisch aufwendigsten Zugang liefern die sogenannten *ab-initio*-Verfahren, wie die Dichtefunktionaltheorie (DFT) [40, 41]. Da Berechnungen mit der DFT numerisch derart anspruchsvoll sind, insbesondere wenn ausgedehnte Strukturen wie nanoelektronische Komponenten betrachtet werden, bedarf es alternativer Verfahren. Eine deutlich weniger rechenintensive Methode ist durch die Tight-Binding-Methode (TBM) gegeben [42]. Die Idee ist es, die Wellenfunktion pro Atom in einen bekannten Satz von lokal begrenzten Orbitalen zu entwickeln. Aufgrund der lokalen Begrenzung ist nur die Wechselwirkung zum nächst benachbarten Atom zu berücksichtigen. Die Überlappintegrale mit benachbarten Orbitalen sind durch Experimente oder DFT-Berechnungen bekannt. Ein weiterer Ansatz zur Bestimmung der Bandstruktur ist die Pseudo-Potenzial-Methode [43], bei welcher die Wellenfunktion in ebene Wellen entwickelt wird. Auch bei dieser Methode werden gemessene oder numerisch berechnete Parameter in Gestalt von Struktur- und Formfaktoren benötigt. Die mit der Pseudo-Potenzial-Methode berechneten Bandstrukturen für den binären Halbleiter Galliumarsenid (GaAs) und den Halbleiter Silizium (Si) sind beispielsweise in Abbildung 2.1 dargestellt.

Mit der Annahme, dass der elektronische Transport im Wesentlichen durch die Bandextrema um das Fermi-Niveau bestimmt ist [44], ist es ausreichend, nur jene Bereiche im Umfeld der Extrema in die Rechnungen mit einzubeziehen. Eine vollständige Berücksichtigung des Bandverlaufs über die Brillouin-Zone ist folglich nicht notwendig. In einer mathematischen Sprache ist diese Annahme mit einer Reihenentwicklung der Bandstruktur zu übersetzen. In der Literatur ist dieses Vorgehen unter dem Begriff der *kp*-Methode bekannt [34–37, 44–46], wobei nur wenige Terme zur Beschreibung der Bandextrema berücksichtigt werden müssen. Moderne Ansätze sind jedoch auch durchaus in der Lage, die Bänder innerhalb der gesamten ersten Brillouin-Zone korrekt wiederzugeben [47–49].

Mit der *kp*-Methode können sowohl Volumenhalbleiter als auch Heterostrukturen auf derselben Basis beschrieben werden [36]. In Kombination mit der vergleichsweise einfachen Systembeschreibung ist dieser Ansatz für die Modellierung von Bauelementen prädestiniert.

Der nächste Abschnitt 2.2.1 widmet sich daher den Grundlagen des *kp*-Formalismus. Auf diesem Fundament wird dann der Kohn-Luttinger-Hamiltonoperator in Abschnitt 2.2.2 hergeleitet. Im Gegensatz zum konventionellen Ansatz werden die Interbandkopplungseffekte in dieser Arbeit jedoch nicht vernachlässigt. Im Anschluss wird in Abschnitt 2.2.3 über die Einführung einer Einhüllenden-Funktion eine Darstellung ohne die gitterperiodischen Anteile erzielt. Hiermit wird der zentrale Ausgangspunkt für alle weiteren Betrachtungen dieser Arbeit gelegt. Weitere Details und insbesondere der hier nicht betrachtete gruppentheoretische Zugang sind z. B. in [36] ausführlich diskutiert.

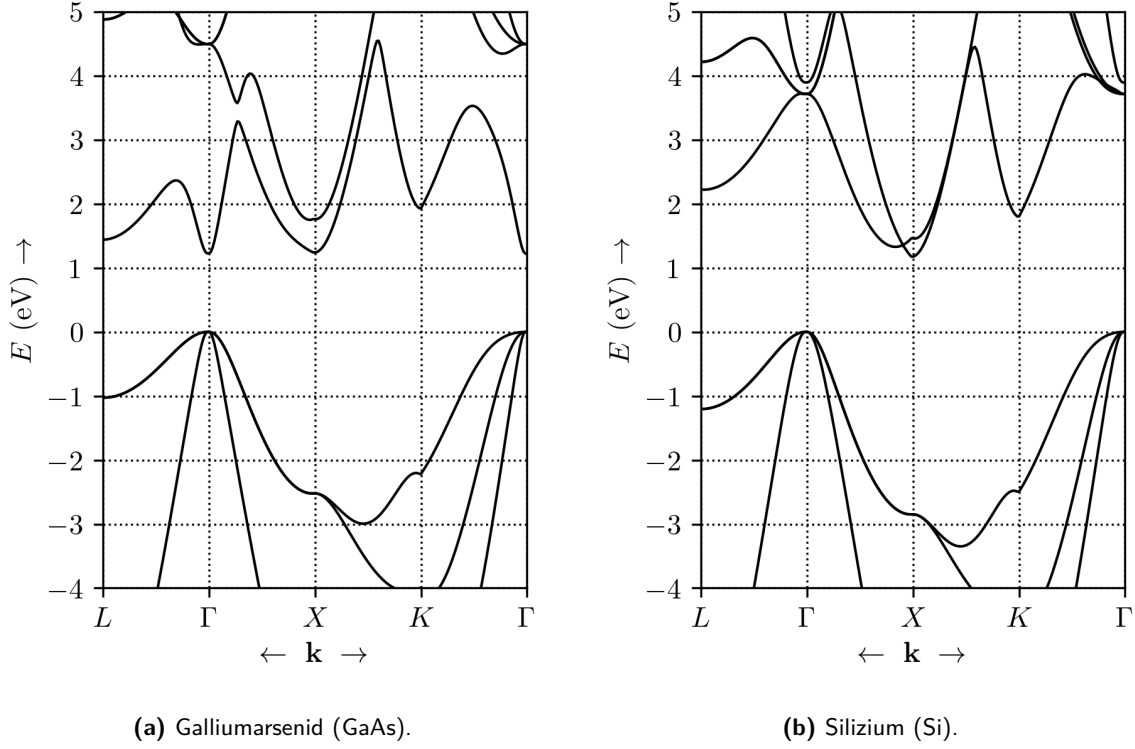


Abbildung 2.1. Bandstruktur $E(\mathbf{k})$ des III-V Volumenhalbleiters GaAs (a) und des Gruppe IV Volumenhalbleiters Si (b) entlang der Symmetriepunkte innerhalb der ersten Brillouin-Zone [33]. Die Bandstrukturen werden mithilfe der Pseudo-Potenzial-Methode mit den Parametern aus [43] bestimmt.

2.2.1. kp -Formalismus

Durch Einführung der Abkürzung V , welche das durch die Ionen hervorgerufene gitterperiodische Potenzial beschreibt, kann die in Abschnitt 2.1.3 eingeführte Hartree-Gleichung in der Ortsraumdarstellung auch als

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.13)$$

geschrieben werden. Das weitere Potenzial U variiert hingegen nur sehr langsam auf den Skalen des Gitters und enthält sowohl externe Effekte als auch das selbstkonsistente Hartree-Potenzial. Das Eigenwertproblem ohne ein externes Potenzial wird als bekannt vorausgesetzt

$$E_\lambda(\mathbf{k}) \Psi_{\lambda, \mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \Psi_{\lambda, \mathbf{k}}(\mathbf{r}) \equiv \mathcal{H}_0 \Psi_{\lambda, \mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.14)$$

wobei die Eigenwerte $E_\lambda(\mathbf{k})$ die Bandstruktur des Bands λ für den Wellenvektor \mathbf{k} repräsentieren. Aus der Translationsinvarianz des Kristalls folgt die Anwendbarkeit des Bloch-Theorems, sodass die Eigenlösungen über Blochfunktionen $\Psi_{\lambda, \mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \cdot u_{\lambda, \mathbf{k}}(\mathbf{r})$ dargestellt werden können. Die ebene Welle ist als Einhüllende-Funktion zu interpretieren. Diese wird von der

sogenannten gitterperiodischen Blochamplitude $u_{\lambda,\mathbf{k}}$ moduliert [36, 45]. Während der letzte gitterperiodische Anteil sich schnell auf den Gitterskalen ändert, variiert die Einhüllende-Funktion nur langsam auf diesen Skalen.

Die grundsätzliche Idee hinter dem kp-Formalismus [34–37, 44, 45, 47] ist es nun, die Wellenfunktion inklusive des externen Potentials in Eigenlösungen des ungestörten Systems zu entwickeln. In dem nächsten Abschnitt wird die Entwicklung nach Kohn-Luttinger skizziert [35]. Dieser weist gegenüber der anderen häufig verwendeten Variante des Kane-Ansatzes [34] den Vorteil auf, dass die Bandkopplungsmechanismen proportional zum Gradienten des externen Potentials sind und nicht zum Gradienten der Wellenfunktion [50, S1]. Diese Eigenschaft zeichnet den Kohn-Luttinger-Ansatz aus und kann besonders vorteilhaft innerhalb der Modellierung des Quantentransports ausgenutzt werden. Eine gesonderte Betrachtung einschließlich der Formulierung von Randbedingungen wird nachfolgend in Abschnitt 5.1 durchgeführt.

2.2.2. Kohn-Luttinger-Hamiltonoperator

Der Kohn-Luttinger-Ansatz basiert auf der Einführung des Funktionensystems gemäß:

$$\chi_{\lambda',\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}'\mathbf{r}) \cdot u_{\lambda',0}. \quad (2.15)$$

Die Wellenfunktion kann in dieses Funktionensystem entwickelt werden [35, 36]

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda'} \int d\mathbf{k}' A_{\lambda'}(\mathbf{k}') \cdot \chi_{\lambda',\mathbf{k}'}(\mathbf{r}), \quad (2.16)$$

wobei die Funktion $A_{\lambda'}(\mathbf{k}')$ den Entwicklungskoeffizienten repräsentiert. Falls nicht anders beschrieben, erfolgt die Integration des Wellenvektors \mathbf{k} über die erste Brillouin-Zone. Da die Eigenlösungen $\Psi_{\lambda,\mathbf{k}}$ aus (2.14) ein vollständiges und orthogonales Funktionensystem bilden, erfüllen die Funktionen $\chi_{\lambda',\mathbf{k}'}$ diese Eigenschaft in demselben Maße [35]. Unter Ausnutzung der Orthogonalität kann die Hartree-Gleichung (2.13) in ein Eigenwertproblem für die Entwicklungskoeffizienten umgeschrieben werden:

$$\sum_{\lambda'} \int d\mathbf{k}' \langle \chi_{\lambda,\mathbf{k}} | \mathcal{H}_0 + U | \chi_{\lambda',\mathbf{k}'} \rangle A_{\lambda'}(\mathbf{k}') = E A_{\lambda}(\mathbf{k}). \quad (2.17)$$

Die im Matrixelement $\langle \chi_{\lambda,\mathbf{k}} | \mathcal{H}_0 | \chi_{\lambda',\mathbf{k}'} \rangle$ enthaltenen Terme weisen die Symmetrie des zugrundeliegenden Gitters auf. Für die Auswertung ist es daher zweckmäßig, diese Terme gemeinsam in eine Fourierreihe mit der Gitterperiode \mathbf{G} zu entwickeln. Im Ergebnis liegt das Matrixelement dann entsprechend

$$\langle \chi_{\lambda,\mathbf{k}} | \mathcal{H}_0 | \chi_{\lambda',\mathbf{k}'} \rangle = \underbrace{\left(E_n(0) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_0} \right) \delta_{\lambda,\lambda'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')}_{\langle \chi_{\lambda,\mathbf{k}} | \mathcal{H}^{\text{intra}} | \chi_{\lambda',\mathbf{k}'} \rangle} + \underbrace{\frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{\lambda,\lambda'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')}_{\langle \chi_{\lambda,\mathbf{k}} | \mathcal{H}^{\text{inter}} | \chi_{\lambda',\mathbf{k}'} \rangle} \quad (2.18)$$

vor. In dieser Darstellung kann eine Zuordnung der jeweiligen Anteile zu den Inter- und Intra-bandprozessen erfolgen. Die darin enthaltenen Überlappintegrale bezüglich des Impulsoperators $\mathbf{p}_{\lambda,\lambda'}$ (Impulsmatrixelemente) können aufgrund der Symmetrie des Gitters innerhalb der Wigner-Seitz-Zelle bestimmt werden:

$$\mathbf{p}_{\lambda,\lambda'} = \frac{(2\pi)^3}{V_{\text{WS}}} \int_{\text{WS}} d\mathbf{r} u_{\lambda',0}^*(\mathbf{r}) \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \right) u_{\lambda,0}(\mathbf{r}). \quad (2.19)$$

Die Normalisierungskonstante V_{WS} definiert das Volumen der Wigner-Seitz-Zelle [35, 37].

In einer analogen Weise wird bei der Berechnung des Matrixelements zu dem externen Potenzial $\langle \chi_{\lambda, \mathbf{k}} | U | \chi_{\lambda', \mathbf{k}'} \rangle$ vorgegangen. Hierbei wird jedoch zuerst noch eine Fourierreihenentwicklung des Potenzials U bezüglich des reziproken Gittervektors \mathbf{G} vorgenommen. Da das Potenzial U eine auf den Gitterskalen langsam veränderliche Funktion darstellt, ist bei der Fourierreihenentwicklung nur der konstante Term zu berücksichtigen. Hiermit ergibt sich das Matrixelement zu

$$\langle \chi_{\lambda, \mathbf{k}} | U | \chi_{\lambda', \mathbf{k}'} \rangle = \tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta_{\lambda, \lambda'}, \quad (2.20)$$

wobei die Funktion \tilde{U} die Fourier-Transformierte von U darstellt. Zusammenfassend kann das Eigenwertproblem für die Entwicklungskoeffizienten (2.17) mithilfe der berechneten Matrixelemente, (2.18) und (2.20), nun als

$$\left(E_n(0) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_0} \right) A_\lambda(\mathbf{k}) + \frac{\hbar}{m_0} \sum_{\lambda' \neq \lambda} \mathbf{k} \mathbf{p}_{\lambda, \lambda'} A_{\lambda'}(\mathbf{k}) + \int d\mathbf{k}' \tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') A_\lambda(\mathbf{k}') = E A_\lambda(\mathbf{k}) \quad (2.21)$$

formuliert werden [35]. In dieser Näherung sind die Bandkopplungsmechanismen linear in dem Wellenvektor. Aufgrund der linearen Proportionalität zum Wellenvektor der Impulsmatrixelemente einschließenden Terme soll eine Transformation mit dem Ziel eingeführt werden, dass diese Elemente in quadratische oder höhere Ordnungen verschoben werden. Hierzu wird eine Transformationsmatrix T eingeführt [35, 37]:

$$A_\lambda(\mathbf{k}) = \sum_{\lambda'} \int d\mathbf{k} \langle \chi_{\lambda, \mathbf{k}} | T | \chi_{\lambda', \mathbf{k}'} \rangle B_{\lambda'}(\mathbf{k}'). \quad (2.22)$$

Um weiterhin eine kompakte Schreibweise beizubehalten, wird das Eigenwertproblem (2.22) konzeptionell in die abstrakte Darstellung $\mathcal{H}^{\text{LK}} A = (\mathcal{H}^{\text{inter}} + \mathcal{H}^{\text{intra}} + U) A = E A$ gebracht. Die Transformationsvorschrift wird über den Ausdruck $B = T A = \exp(S) A$ definiert, wodurch eine äquivalente Darstellung in der Basis \mathbf{B} durch

$$\exp(-S) \mathcal{H}^{\text{LK}} \exp(S) B = \tilde{\mathcal{H}}^{\text{LK}} B = E B \quad (2.23)$$

erzielt wird. Für die Auswertung des transformierten Eigenwertproblems (2.23) werden die Matrixexponentialfunktionen mithilfe der Taylor-Entwicklung approximiert:

$$\tilde{\mathcal{H}}^{\text{LK}} = \mathcal{H}^{\text{inter}} + \mathcal{H}^{\text{intra}} + U + [\mathcal{H}^{\text{inter}}, S] + [\mathcal{H}^{\text{intra}}, S] + [U, S] + \frac{1}{2} [[\mathcal{H}^{\text{inter}}, S], S] + \dots \quad (2.24)$$

Aus dieser Darstellung ist unverzüglich ersichtlich, dass die Transformation die linearen Terme in dem Wellenvektor \mathbf{k} innerhalb $\mathcal{H}^{\text{inter}}$ genau dann aufhebt, wenn

$$\mathcal{H}^{\text{inter}} + [\mathcal{H}^{\text{intra}}, S] = 0 \quad (2.25)$$

gilt [37]. Hierdurch lässt sich dann schließlich die explizite Transformationsvorschrift ermitteln. Nach einer länglichen, aber konzeptionell einfachen Rechnung [37] kann schließlich das transformierte Eigenwertproblem

$$\left(E_\lambda(0) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_0} + \sum_{\alpha, \beta, \lambda' \neq \lambda} \frac{\hbar^2}{m_0^2} k_\alpha k_\beta \frac{p_{\lambda', \lambda, \alpha} p_{\lambda, \lambda', \beta}}{E_\lambda(0) - E_{\lambda'}(0)} \right) B_\lambda(\mathbf{k}) + \int d\mathbf{k}' \tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') B_\lambda(\mathbf{k}') + \sum_{\lambda' \neq \lambda} \frac{\hbar}{m_0} \frac{\mathbf{p}_{\lambda, \lambda'}}{E_\lambda(0) - E_{\lambda'}(0)} \int d\mathbf{k}' (\mathbf{k} - \mathbf{k}') \tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') B_{\lambda'}(\mathbf{k}') = E B_\lambda(\mathbf{k}) \quad (2.26)$$

aufgestellt werden [50]. Die Indizes α und β beschreiben die örtlichen Komponenten ($k_x, p_{\lambda, \lambda', z}$ etc.) der entsprechenden Vektoren. Im Gegensatz zu der herkömmlichen Herleitung ist der Kommutator $[U, S]$ explizit berücksichtigt worden, welcher eine Erfassung der Interbandprozesse ermöglicht.

Effektive-Masse-Approximation: Der erste Term innerhalb des transformierten Eigenwertproblems (2.26), der unabhängig von dem Potenzial \tilde{U} ist, kann auch als Taylor-Entwicklung der Bandstruktur um die Extrema bis zum quadratischen Glied interpretiert werden. Der Entwicklungskoeffizient kann dabei mit der effektiven Masse m_λ des Bands λ identifiziert werden [35, 37, 50]:

$$E_\lambda(\mathbf{k}) = E_\lambda(0) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_\lambda} = E_\lambda(0) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_0} + \sum_{\alpha, \beta, \lambda' \neq \lambda} \frac{\hbar^2}{m_0^2} k_\alpha k_\beta \frac{p_{\lambda', \lambda, \alpha} p_{\lambda, \lambda', \beta}}{E_\lambda(0) - E_{\lambda'}(0)}. \quad (2.27)$$

Hierdurch wird nicht nur eine kompaktere Notation, sondern auch eine direkte physikalische Zuordnung erzielt, da die effektive Masse u. a. direkt proportional zur Beweglichkeit ist. Der Einfluss des Kristallgitters auf das Teilchen wird durch eine effektive Masse erfasst.

2.2.3. Einhüllende-Funktion

Die inverse Fourier-Transformation des Entwicklungskoeffizienten $B_\lambda(\mathbf{k})$ kann mit einer Wellenfunktion im Ortsraum verknüpft werden [35, 36], welche explizit nicht mehr den schnell oszillierenden Anteil der Blochamplitude beinhaltet:

$$\psi_\lambda(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{k} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \cdot B_\lambda(\mathbf{r}). \quad (2.28)$$

Aufgrund dieser Eigenschaft wird die Wellenfunktion $\psi_\lambda(\mathbf{r})$ auch Einhüllende-Funktion genannt. Dementsprechend kann dann auch die Schrödingergleichung für die Einhüllende-Funktion aus (2.26) mithilfe der inversen Fourier-Transformation ermittelt werden [50]:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_\lambda(\mathbf{r}, t) = \underbrace{\left[E_n(-i\nabla) + U(\mathbf{r}) \right]}_{\mathcal{H}_{\lambda, \lambda}} \psi_\lambda(\mathbf{r}, t) - \sum_{\lambda' \neq \lambda} i\nabla U(\mathbf{r}) \underbrace{\frac{\hbar}{m_0} \frac{p_{\lambda, \lambda'}}{E_\lambda(0) - E_{\lambda'}(0)}}_{-\mathcal{H}_{\lambda, \lambda'}} \psi_{\lambda'}(\mathbf{r}, t). \quad (2.29)$$

Der erste Term proportional zu $\mathcal{H}_{\lambda, \lambda}$ innerhalb (2.29) erfasst die Intrabanddynamik und stellt somit die Schrödingergleichung in der effektiven Masse Approximation dar. Der zweite Term proportional zu $\mathcal{H}_{\lambda, \lambda'}$ mit $\lambda \neq \lambda'$ adressiert hingegen die Bandkopplungsmechanismen und wird in herkömmlichen Betrachtungen normalerweise vernachlässigt [35]. Diese Darstellung erlaubt eine direkte Beurteilung der Bandkopplungsmechanismen. Die Stärke der Bandkopplung hängt

vom Gradienten des externen Potentials, aber auch von internen Größen wie dem selbstkonsistenten Hartree-Potenzial, ab. Eine gezielte Manipulation der Eigenschaften ist somit über Bauelementstruktur und Dotierung sowie der äußeren Felder, beispielsweise durch eine angelegte Spannung, möglich. Das Impulsmatrixelement hängt von dem Überlappintegral der Blochamplituden mit dem Impulsoperator ab. Dieses ist somit auch abhängig vom Materialsystem. Bisherige Betrachtungen haben sich noch nicht mit thermodynamischen Prozessen beschäftigt. Diese führen schließlich zu einer Auszeichnung bestimmter Übergänge von $\lambda \rightarrow \lambda'$. Weiterhin ist ein antiproportionales Verhalten zur Energiedifferenz zwischen den Bändern festzustellen.

Symmetrisierung der Operatoren: Eine wichtige Fragestellung innerhalb der Quantenmechanik ist die nach der Anordnung der Operatoren. Während in der klassischen Mechanik alle Operatoren miteinander kommutieren, spielt es in der Quantenmechanik eine Rolle, in welcher Reihenfolge die Operatoren auf die Wellenfunktion wirken. In derselben Art und Weise spielt dies dann auch eine Rolle bei der Transformation aus dem Impulsraum in den Ortsraum ($\mathbf{k} \rightarrow -i\nabla$). Insbesondere wenn ortsabhängige Eigenschaften, wie z. B. bei Heterostrukturen, analysiert werden sollen, ist die Anordnung der Operatoren von größter Bedeutung. In dieser Arbeit wird einem Standardansatz [36] gefolgt:

$$\begin{aligned} a(\mathbf{r})\mathbf{k} &= \frac{1}{2}(a(\mathbf{r})\mathbf{k} + \mathbf{k}a(\mathbf{r})) && \rightarrow -\frac{i}{2}(a(\mathbf{r})\nabla + \nabla a(\mathbf{r})) \\ a(\mathbf{r})\mathbf{k}^2 &= \mathbf{k}a(\mathbf{r})\mathbf{k} && \rightarrow -\nabla a(\mathbf{r})\nabla. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Mit dieser Symmetrisierung stellt der Hamiltonoperator einen hermiteschen Operator dar und die Stetigkeitsbedingungen der Wellenfunktion an Heteroübergängen werden erfüllt [36]. Ein systematischer Ansatz, der eine klassische Phasenraumdarstellung mit einem quantenmechanischen Operator verknüpft, wird in Abschnitt 2.4 vorgestellt, nachdem zuerst noch die wesentlichen Konzepte der Quantenstatistik behandelt werden.

2.3. Quantenstatistik

Die wesentlichen Konzepte der quantenstatistischen Systembeschreibung werden mit dem statistischen Dichteoperator in Abschnitt 2.3.1 eingeführt. Durch die Liouville-von-Neumann-Gleichung (LVNG) kann die zeitliche Entwicklung des statistischen Dichteoperators und somit des Quantensystems bestimmt werden, wie in Abschnitt 2.3.2 beschrieben wird. Mit der Bestimmung der Erwartungswerte wird dann in Abschnitt 2.3.3 ein praktischer Zugang zur Beschreibung interner Größen des Quantensystems, wie Ladungsträger- und Stromdichten, ermöglicht.

2.3.1. Statistischer Dichteoperator und statistische Dichtematrix

Die Systembeschreibung mit der statistischen Dichtematrix ist eine Alternative zur bisherigen zustandsbasierten Betrachtung. Bisher folgte die Beschreibung der Annahme, dass das System durch eine einzige Wellenfunktion charakterisiert ist. Dies wird als reiner Zustand bezeichnet. Neben den reinen Zuständen können auch gemischte Zustände vorliegen, nämlich genau dann,

wenn das System nicht eindeutig in einem Zustand präpariert ist. Insbesondere bei Quantenelementen ist davon auszugehen, dass diese durch ein Zustandsgemisch beschrieben werden. Hier liefert der Dichtematrix-Formalismus eine vorteilhafte und vor allem übersichtlichere Darstellung als der zustandsbasierte Ansatz. Insbesondere dann, wenn zeitabhängiges Verhalten und Wechselwirkungen eine Rolle spielen [16, 37]. Die formale Definition des statistischen Dichteoperators ist als Projektion durch den Zusammenhang

$$\hat{\rho} = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \quad (2.31)$$

definiert. Die Gewichtungskoeffizienten p_i beschreiben hierbei die Wahrscheinlichkeit, dass der Zustand $|\psi_i\rangle$ gemessen wird. Für einen reinen Zustand gilt somit per Definition $p_i = 1$.

Einführung der statistischen Dichtematrix: Die statistische Dichtematrix ist eine Darstellung des statistischen Dichteoperators $\hat{\rho}$ in einer beliebigen Basis. Die statistische Dichtematrix legt, wie zuvor beschrieben, die Wahrscheinlichkeit für jegliche Messungen am System fest. Es wird formal angenommen, dass die Wellenfunktion in eine gemeinsame Basis $\{|\Phi_n\rangle\}$, aber mit unterschiedlichen Koeffizienten a_n^i entwickelt werden $|\psi_i\rangle = \sum_n a_n^i |\Phi_n\rangle$ kann, was den statistischen Dichteoperator in

$$\hat{\rho} = \sum_m |\Phi_m\rangle \langle \Phi_m| \hat{\rho} \sum_n |\Phi_n\rangle \langle \Phi_n| = \sum_{m,n} \rho_{m,n} |\Phi_m\rangle \langle \Phi_n| \quad (2.32)$$

überführt. Das Matrixelement zum statistischen Dichteoperator $\rho_{m,n}$ repräsentiert die statistische Dichtematrix. In dieser Basis ist die statistische Dichtematrix beispielsweise durch $\rho_{m,n} = \langle \Phi_m | \hat{\rho} | \Phi_n \rangle = \sum_i p_i a_m^i a_n^{i\dagger}$ gegeben. Eine weniger abstrakte Darstellung wird durch die Analyse der hier betrachteten Systeme erzielt. Hierzu wird zuerst der statistische Dichteoperator für den Fall der Eigenlösungen $\psi_{\lambda,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \lambda, \mathbf{k} \rangle$ aus dem Multibandsystem innerhalb der effektiven-Massen-Näherung

$$\hat{\rho} = \sum_{\lambda,\lambda',\mathbf{k}} p_{\lambda,\lambda',\mathbf{k}} |\lambda, \mathbf{k}\rangle \langle \lambda', \mathbf{k}| = \sum_{\lambda,\lambda'} \hat{\rho}_{\lambda\lambda'} \quad (2.33)$$

definiert. Der statistische Dichteoperator in Abhängigkeit der Bänder $\hat{\rho}_{\lambda\lambda'}$ wird in der Ortseigenbasis entsprechend

$$\rho_{\lambda\lambda'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \langle \mathbf{r} | \hat{\rho}_{\lambda\lambda'} | \mathbf{r}' \rangle = \sum_{\mathbf{k}} p_{\lambda,\lambda',\mathbf{k}} \cdot \psi_{\lambda,\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) \psi_{\lambda',\mathbf{k}}^\dagger(\mathbf{r}', t) \quad (2.34)$$

als statistische Dichtematrix dargestellt. Für den Fall, dass sich das betrachtete Halbleitersystem im thermodynamischen Gleichgewicht befindet, wird die Wahrscheinlichkeit, dass ein Teilchen den Zustand \mathbf{k} im Band E_λ besetzt, durch die Fermi-Dirac-Statistik $f_{3D}^{\text{FD}}(E_\lambda)$ beschrieben⁴. Für die Gewichtungskoeffizienten gilt also $p_{\lambda,\lambda,\mathbf{k}} = f_{3D}^{\text{FD}}(E_\lambda(\mathbf{k}))$, woraus der Ausdruck

$$\rho_{\lambda\lambda}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \sum_{\mathbf{k}} f_{3D}^{\text{FD}}(E_\lambda(\mathbf{k})) \cdot \psi_{\lambda,\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) \psi_{\lambda,\mathbf{k}}^\dagger(\mathbf{r}', t) \quad (2.35)$$

⁴Die Fermi-Dirac-Statistik beschreibt die Besetzungsstatistik für Fermionen im thermodynamischen Gleichgewicht.

resultiert. Aus dieser Darstellung folgt unmittelbar der Zusammenhang $\rho_{cv} = \rho_{vc}^\dagger$ für die Komponenten der statistischen Dichtematrix. Weiterhin ergibt sich unmittelbar die Ladungsträgerdichte im Band λ , welche durch die Diagonalelemente der statistischen Dichtematrix in der Ortseigenbasis beschrieben wird:

$$n_\lambda(\mathbf{r}, t) = \rho_{\lambda\lambda}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} = \sum_{\mathbf{k}} f_{3D}^{\text{FD}}(E_\lambda(\mathbf{k})) \cdot |\psi_{\lambda,\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)|^2. \quad (2.36)$$

Das Betragsquadrat der Wellenfunktion liefert hierbei die Wahrscheinlichkeit dafür, dass ein Elektron im Band λ , am Ort \mathbf{r} und im Zustand \mathbf{k} zu finden ist. Die Fermi-Dirac-Statistik

$$f_{3D}^{\text{FD}}(E(\mathbf{k})) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E(\mathbf{k})}{k_B T}\right)} \quad (2.37)$$

gibt an, mit welcher Wahrscheinlichkeit dieser Zustand dann im zeitlichen Mittel besetzt ist. Die Temperatur T wird dabei noch mit der Boltzmann-Konstante k_B gewichtet. Der Vergleich der beiden Ansätze, nämlich der Dichtematrix-Formalismus mit dem zustandsbasierten Formalismus, zeigt, dass mit der statistischen Dichtematrix keine gewichtete Akkumulation über die Zustände in λ, \mathbf{k} notwendig ist, sondern nur die Diagonale bestimmt werden muss. Um die Eigenschaften der statistischen Dichtematrix gezielt ausnutzen zu können, ist es zweckmäßig, eine Bewegungsgleichung aufzustellen. Diese ist dann unter Einbeziehung von geeigneten Randbedingungen zu lösen.

2.3.2. Liouville-von-Neumann-Gleichung - Zeitentwicklung des Dichteoperators

Die Bewegungsgleichung zur Bestimmung der Zeitentwicklung des statistischen Dichteoperators ist durch die LVNG definiert. Ihre Herleitung erfolgt unter Ausnutzung der Definition der Dichtematrix, welche unter Verwendung der Produktregel und der Schrödingergleichung (2.1) als

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho} = [\mathcal{H}, \hat{\rho}] \quad (2.38)$$

geschrieben werden kann. Sowohl für zeitabhängige als auch dissipative Beschreibungen des Quantentransports stellt sie die Grundlage dar [15, 16, 31].

2.3.3. Spur und Erwartungswerte

Innerhalb der Modellierung von Quantenbauelementen und Nanostrukturen ist die Analyse der statistischen Dichtematrix letztendlich zu abstrakt, um direkte Aussagen zum Bauelement zu treffen. Einschlägige Aussagen über das Systemverhalten lassen sich über die Erwartungswerte, wie z. B. die Ladungsträger-, die Strom- und die Energiedichte treffen. Für einen reinen Zustand ist der Erwartungswert $\langle \mathcal{A} \rangle$ zum Operator \mathcal{A} durch $\langle \psi | \mathcal{A} | \psi \rangle$ festgelegt. Dementsprechend kann

der Erwartungswert eines Zustandsgemisches als gewichtete Summe der korrespondierenden Erwartungswerte der reinen Zustände des Gemisches

$$\langle \mathcal{A}(t) \rangle = \sum_i p_i \langle \psi_i(t) | \mathcal{A} | \psi_i(t) \rangle \quad (2.39)$$

definiert werden. Eine günstigere Darstellung kann bezüglich des statistischen Dichteoperators, bzw. der statistischen Dichtematrix, durch

$$\langle \mathcal{A}(t) \rangle = \text{tr}(\hat{\rho}(t)\mathcal{A}) \quad (2.40)$$

erreicht werden, wobei der Spuroperator tr als Summe über die Diagonale in einer beliebigen orthonormalen Basis $\{|\Phi_n\rangle\}$

$$\text{tr}(\hat{\rho}(t)\mathcal{A}) = \sum_n \sum_i p_i \langle \Phi_n | \psi_i \rangle \langle \psi_i | \mathcal{A} | \Phi_n \rangle = \sum_n \sum_i p_i \langle \psi_i | \mathcal{A} | \Phi_n \rangle \langle \Phi_n | \psi_i \rangle = \sum_i p_i \langle \psi_i(t) | \mathcal{A} | \psi_i(t) \rangle \quad (2.41)$$

zu interpretieren ist. In dem letzten Rechenschritt wird dabei die Vollständigkeit der Basis ausgenutzt. Zuvor ist bereits die Diagonale der statistischen Dichtematrix mit der Ladungsträgerdichte identifiziert worden. Mathematisch entspricht dies dem Erwartungswert des quantenmechanischen Einheitsoperators:

$$n_\lambda(\mathbf{r}, t) = \langle 1 \rangle = \text{tr}(\hat{\rho}) = \rho_{\lambda\lambda}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'}. \quad (2.42)$$

Die Formulierung der Stromdichte hängt hingegen vom Hamiltonoperator ab, welcher das System beschreibt. Prinzipiell folgt die Idee der Herleitung der quantenmechanischen Kontinuitätsgleichung. Wie in Kapitel 3 noch genauer betrachtet wird, führt ein Hamiltonoperator in der effektiven-Masse-Approximation beispielsweise zu einer Stromdichte entsprechend [51]:

$$j_\lambda(\mathbf{r}, t) = \frac{-iq\hbar}{2m_\lambda(\mathbf{r})} (\nabla_{\mathbf{r}} - \nabla_{\mathbf{r}'}) \rho_{\lambda\lambda}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'}. \quad (2.43)$$

2.4. Quantenmechanik im Phasenraum

In der klassischen Mechanik erfolgt die statistische Beschreibung mithilfe von Verteilungsfunktionen innerhalb des Phasenraums in Impuls- und Ortskoordinaten. Unter Verwendung des Hamilton-Formalismus lässt sich die zeitliche Entwicklung der Verteilungsfunktion über die klassische Liouville-Gleichung beschreiben [37]. Die Erwartungswerte werden schließlich über die Momente der Verteilungsfunktion bestimmt. In Analogie zu dieser klassischen Beschreibung wird ein Formalismus erarbeitet, der eine komfortable Phasenraumdarstellung unter Einbeziehung von Quanteneffekten ermöglicht. Das entsprechende mathematische Handwerkszeug liefert die sogenannte Weyl-Quantisierung [38, 39, 52–54], welche eine Verknüpfung von Operator- und Phasenraumdarstellung unter Berücksichtigung der Vertauschungsrelationen erlaubt. Sie soll im Folgenden in den Blick genommen werden.

2.4.1. Weyl-Quantisierung

Ein allgemeiner quantenmechanischer Operator \mathcal{A} kann auf einen Ausdruck, bestehend aus dem Kristallimpulsoperator $\mathcal{K} = \mathcal{P}/\hbar$ (\mathcal{P} ist der Impulsoperator) und Ortsoperator \mathcal{R} , zurückgeführt werden. Mithilfe der Distributionentheorie und der Fourier-Transformation kann der Operator schließlich als

$$\mathcal{A} = \frac{1}{(2\pi)^6} \int d\mathbf{r} \int d\boldsymbol{\zeta} \int d\mathbf{y} \int d\mathbf{k} A(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \exp \{i [\boldsymbol{\zeta}(\mathbf{r} - \mathcal{X}) + \mathbf{y}(\mathbf{k} - \mathcal{K})]\} \quad (2.44)$$

geschrieben werden. Die zusätzlichen Orts- \mathbf{y} und Kristallimpulskoordinaten $\boldsymbol{\zeta}$ resultieren dabei aus der Distributionentheorie (infolge der Fourier-Transformationen der beteiligten Dirac-Distributionen) [39, 54]. Die Funktion $A(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ ist die Darstellung des Operators \mathcal{A} im Phasenraum. Unter der Ausnutzung der Baker-Campbell-Hausdorff-Beziehung

$$\exp \{-i(\boldsymbol{\zeta}\mathcal{X} + \mathbf{y}\mathcal{K})\} = \exp \{-i\boldsymbol{\zeta}\mathcal{X}\} \exp \{-i\mathbf{y}\mathcal{K}\} \exp \{i^2 [\boldsymbol{\zeta}\mathcal{X}, \mathbf{y}\mathcal{K}] / 2\} \quad (2.45)$$

sowie des Verschiebungsoperators

$$\exp \{-i\mathbf{y}\mathcal{K}\} \psi(\mathbf{z}) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \mathbf{y}\mathcal{P} \right\} \psi(\mathbf{z}) = \psi(\mathbf{z} - \mathbf{y}) \quad (2.46)$$

kann die Wirkung des Operators \mathcal{A} auf einen Zustand in der Ortsbasis entsprechend

$$\mathcal{A}\psi(\mathbf{z}) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{r} A\left(\mathbf{k}, \frac{\mathbf{z} + \mathbf{r}}{2}\right) \exp \{i\mathbf{k}(\mathbf{z} - \mathbf{r})\} \psi(\mathbf{r}) \quad (2.47)$$

formuliert werden [39]. Weiterhin soll angenommen werden, dass zu dem quantenmechanischen Operator \mathcal{A} eine Darstellung mit einem Integralkern $K_{\mathcal{A}}$ entsprechend

$$\mathcal{A}\psi(\mathbf{z}) = \int d\mathbf{r} K_{\mathcal{A}}(\mathbf{z}, \mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) \quad (2.48)$$

existiert. Aus dem Vergleich von (2.47) mit (2.48) liefert dies nun eine Beziehung, welche die Integralkernerdarstellung des quantenmechanischen Operators mit seiner Darstellung im Phasenraum verknüpft [39]:

$$K_{\mathcal{A}}(\mathbf{z}, \mathbf{r}) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} A\left(\mathbf{k}, \frac{\mathbf{z} + \mathbf{r}}{2}\right) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \mathbf{k}(\mathbf{z} - \mathbf{r}) \right\}. \quad (2.49)$$

Unter der Einführung der Schwerpunktkoordinate $\boldsymbol{\chi}$ sowie der Relativkoordinate $\boldsymbol{\xi}$, wie im Anhang A beschrieben ist

$$\mathbf{z} = \boldsymbol{\chi} + \frac{\boldsymbol{\xi}}{2} \quad \mathbf{r} = \boldsymbol{\chi} - \frac{\boldsymbol{\xi}}{2}, \quad (2.50)$$

wird die Gleichung (2.49) in eine Form gebracht, in welcher die inverse Transformation offensichtlich ist:

$$K_{\mathcal{A}}\left(\boldsymbol{\chi} + \frac{\boldsymbol{\xi}}{2}, \boldsymbol{\chi} - \frac{\boldsymbol{\xi}}{2}\right) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} A(\mathbf{k}, \boldsymbol{\chi}) \exp \{i\mathbf{k}\boldsymbol{\xi}\}. \quad (2.51)$$

Hieraus ergibt sich nun die gesuchte Transformation, die einen quantenmechanischen Operator mit seiner äquivalenten Phasenraumdarstellung in Verbindung setzt:

$$A(\mathbf{k}, \boldsymbol{\chi}) = \int d\xi \exp\{-i\mathbf{k}\xi\} K_{\mathcal{A}}\left(\boldsymbol{\chi} + \frac{\xi}{2}, \boldsymbol{\chi} - \frac{\xi}{2}\right). \quad (2.52)$$

Zusammenfassend kann die mit dem Operator \mathcal{A} korrespondierende Darstellung im Phasenraum über drei elementare Schritte bestimmt werden:

1. Berechnung der **Integalkerndarstellung** $K_{\mathcal{A}}$ zum quantenmechanischen Operator \mathcal{A} .
2. **Transformation** der ermittelten Integalkerndarstellung in die **Schwerpunkt- und Relativkoordinaten**.
3. Die Anwendung der **Fourier-Transformation bezüglich der Relativkoordinate** liefert schließlich die korrespondierende Phasenraumdarstellung.

In dem nächsten Abschnitt wird eine der zentralen Größen dieser Arbeit eingeführt, die Wigner-Funktion. Diese kann auch als Weyl-Quantisierung des statistischen Dichteoperators aufgefasst werden.

2.4.2. Wigner-Formalismus

Die Standardformulierung der Quantenmechanik folgt der Beschreibung in Dichtefunktionen, welche aus der Wellenfunktion bestimmt werden. Im Hinblick auf die örtliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens wird das Betragsquadrat der Wellenfunktion in der Ortseigenbasis $|\langle \mathbf{x} | \Psi \rangle|^2$ gebildet. Das Betragsquadrat bezüglich der Impulseigenbasis $|\langle \mathbf{p} | \Psi \rangle|^2$ liefert hingegen die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion für die Impulse.

Unter dem Gesichtspunkt der Modellierung wäre es wünschenswert, eine Verteilungsfunktion zur Hand zu haben, welche die Wahrscheinlichkeiten für beide Koordinaten, Ort und Impuls, gleichermaßen beinhaltet.

Historie: Genau diese Verteilungsfunktion, namentlich die Wigner-Funktion, publizierte Eugene P. Wigner in seinen Arbeiten über Quantenkorrekturen für das thermodynamische Gleichgewicht im Jahr 1932 [11, 55]. Hiermit legte er nicht nur den Grundstein für die äquivalente Formulierung der Quantenmechanik im Phasenraum, sondern demonstrierte auch gleichzeitig eindrucksvoll die Stärke des Formalismus, indem er einen Zusammenhang zur klassischen Mechanik herstellte. In den darauf folgenden Jahren gab es zahlreiche theoretische Ausarbeitungen. Diese wurden unabhängig voneinander durch Groenewold [52] und Moyal [53] getrieben, sodass ein vom Hilbert-Raum unabhängiger Formalismus entstand. Ab Mitte der 1960er Jahren fand der Formalismus dann auch Einzug ins Ingenieurwesen, wobei zuerst die Kohärenzeigenschaften von optischen Feldern untersucht wurden [56]. In den frühen 1980er Jahren wurden die Vorzüge des Formalismus für die Berechnung der Transporteigenschaften in Quantenbauelementen ausgearbeitet [57, 58]. Gegen Ende der 1980er Jahre sind dann erste numerische Berechnungen zur Analyse des Transportverhaltens in Quantenbauelementen basierend auf dem Tunneleffekt durchgeführt worden [24, 59–61]. Diese Arbeiten bilden das Rückgrat für zahlreiche Weiterentwicklungen. Heute hat sich der Wigner-Formalismus als eine Alternative zur operatorbasierten Quantenmechanik etabliert und erstreckt sich über einen weiten Anwendungsbereich [12], von

der Signalverarbeitung [62] über Quantenchemie [63, 64] und Quanteninformationstheorie [65–67] bis hin zur numerischen Analyse von Quantenbauelementen, zum Beispiel [18, 20, 22, 31, S1, 60, 61, S2–S10, 68–70].

Für eine weitaus detailliertere Darstellung zur Historie des Wigner-Formalismus und Informationen zu den Anwendungsgebieten wird auf den kürzlich veröffentlichten Überblickartikel [12] und die dort enthaltenen Referenzen verwiesen.

2.4.3. Konstruktion der Wigner-Funktion

Nun soll die mathematische Formulierung der Wigner-Funktion erfolgen. In dieser Arbeit wird die Wigner-Funktion als Weyl-Quantisierung des Dichteoperators eingeführt. In diesem Sinne wird die Darstellung des statistischen Dichteoperators (2.34) als Integralkern benötigt. Diese ist durch den folgenden Ausdruck

$$K_{\rho_{\lambda\lambda'}}(\mathbf{z}, \mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} p_{\lambda,\lambda',\mathbf{k}} \psi_{\lambda,\mathbf{k}}(\mathbf{z}) \cdot \psi_{\lambda',\mathbf{k}}^\dagger(\mathbf{r}) \quad (2.53)$$

gegeben. Unter formaler Anwendung der Weyl-Quantisierung (2.52) ergibt sich daraus dann schließlich die Wigner-Funktion $f_{\lambda\lambda'}$:

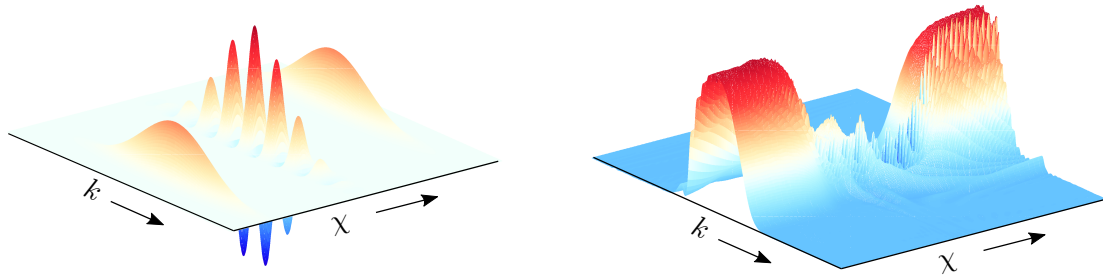
$$\begin{aligned} f_{\lambda\lambda'}(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{k}, t) &= \int d\boldsymbol{\xi} \exp(-i\mathbf{k}\boldsymbol{\xi}) \sum_{\mathbf{k}'} p_{\lambda,\lambda',\mathbf{k}'} \psi_{\lambda,\mathbf{k}'}\left(\boldsymbol{\chi} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}, t\right) \cdot \psi_{\lambda',\mathbf{k}'}^\dagger\left(\boldsymbol{\chi} - \frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}, t\right) \\ &= \int d\boldsymbol{\xi} \exp(-i\mathbf{k}\boldsymbol{\xi}) \rho_{\lambda\lambda'}\left(\boldsymbol{\chi} + \frac{\boldsymbol{\xi}}{2}, \boldsymbol{\chi} - \frac{\boldsymbol{\xi}}{2}, t\right) \equiv \int d\boldsymbol{\xi} \exp(-i\mathbf{k}\boldsymbol{\xi}) \rho_{\lambda\lambda'}^D(\boldsymbol{\chi}, \boldsymbol{\xi}, t) \end{aligned} \quad (2.54)$$

In dem letzten Schritt wird dabei die statistische Dichtematrix in Schwerpunkt- und Relativkoordinaten entsprechend $\rho_{\lambda\lambda'}^D(\boldsymbol{\chi}, \boldsymbol{\xi}, t) \equiv \rho_{\lambda\lambda'}\left(\boldsymbol{\chi} + \frac{\boldsymbol{\xi}}{2}, \boldsymbol{\chi} - \frac{\boldsymbol{\xi}}{2}, t\right)$ für eine kompaktere Notation definiert. Mit dieser Definition lässt sich die inverse Transformation als

$$\rho_{\lambda\lambda'}^D(\boldsymbol{\chi}, \boldsymbol{\xi}, t) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \exp(i\mathbf{k}\boldsymbol{\xi}) f_{\lambda\lambda'}(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{k}, t) \quad (2.55)$$

schreiben. Durch die Fourier-Transformation bezüglich der Relativkoordinate $\boldsymbol{\xi}$, sprich die Entwicklung in die Basis ebener Wellen, ist eine mit der Fourier-Transformation einhergehende Unschärferelation inhärent enthalten. Vor dem Hintergrund der quantenmechanischen Betrachtung kann diese Eigenschaft der Heisenbergschen Unschärferelation zugeordnet werden.

Im strengeren Sinne kann es sich bei der Wigner-Funktion nur um eine Quasi-Wahrscheinlichkeitsverteilungsfunktion und nicht um eine echte Wahrscheinlichkeitsverteilungsfunktion handeln. Im Gegensatz zu einer klassischen Verteilungsfunktion kann die Wigner-Funktion negative Werte annehmen [55, 71]. Die Erwartungswerte und Dichtefunktionen, die sich aus den Momenten der Wigner-Funktion ergeben, bleiben jedoch weiterhin positiv. Die Physik wird somit adäquat erfasst. Die Bereiche, in denen die Wigner-Funktion negative Werte annimmt, können Verschränkungsprozesse charakterisieren [12, 55] und erlangen insbesondere im Umfeld der Quanteninformationstechnologie eine tragende Rolle.



(a) Schematische Darstellung einer Wigner-Funktion, die aus der Überlagerung zweier gaussförmiger Wellenfunktionen berechnet wird. (b) Schematische Darstellung einer Wigner-Funktion für eine Tunnelodiode im Nichtgleichgewicht unter Berücksichtigung des Hartree-Potenzials.

Abbildung 2.2. Beispiele für Wigner-Funktionen f in Abhängigkeit der Ortskoordinate χ und Wellenzahl k .

Die Wigner-Funktion von zwei in entgegengesetzt propagierenden, gaussförmigen Wellenpaketen ist schematisch in Abbildung 2.2a dargestellt. Im Phasenraum kommt es hierbei, wie aus Abbildung 2.2a ersichtlich ist, zu einem einzigartigen Interferenzmuster zwischen den beiden Wellenfunktionen, welches auch negative Werte annimmt. Dieses Interferenzmuster kennzeichnet die Verschränkung der beiden Wellenfunktionen und verschwindet im kohärenten Fall auch dann nicht, wenn die Wellenfunktionen sich unendlich weit voneinander entfernen [55].

Ein weiterer Grund, der die Wigner-Funktion als Quasi-Wahrscheinlichkeitsfunktion auszeichnet, spiegelt sich bei der numerischen Analyse von Multibandmodellen wider, welche insgesamt in der Literatur bisher nur wenig Beachtung gefunden haben [S1, S11, 72–75]. Während die Diagonalkomponenten hinsichtlich des Bandindex $\lambda = \lambda'$ reelle und, wie oben erläutert, teilweise negative Quasi-Wahrscheinlichkeitsverteilungsfunktionen [11, 39] beschreiben, stellen die Nebendiagonalen $\lambda \neq \lambda'$ komplexwertige Funktionen dar [S1, 76]. Dieser Zusammenhang ist direkt aus den Nebendiagonalen der statistischen Dichtematrix $\rho_{\lambda\lambda'} = \rho_{\lambda'\lambda}^\dagger$ ersichtlich, sodass offenbar auch für die Komponenten der Wigner-Funktion der Beziehung $f_{\lambda\lambda'} = f_{\lambda'\lambda}^\dagger$ gilt. Anschaulich spiegeln diese komplexwertigen Funktionen den endlich andauernden Übergang zwischen den Bändern wider.

Ein weiteres Beispiel einer Wigner-Funktion ist für den Fall einer resonanten Tunnelodiode (RTD) im Nichtgleichgewicht basierend auf dem Elektronentransport im Leitungsband in Abbildung 2.2b schematisch dargestellt. Im Bereich der Kontakte, welche an die Grenzen der χ -Richtung anknüpfen, sind die einfließenden Ladungsträger im Leitungsband durch die klassische Fermi-Dirac-Statistik beschrieben. Innerhalb des Bauelements wird deutlich von dieser Statistik abgewichen. Der Punkt, der hiermit betont werden soll, ist, dass die Quantenstatistik im Nichtgleichgewicht und insbesondere in Quantenbauelementen stark von der klassischen Beschreibung abweicht. Um die damit verbundenen Effekte zu erfassen, bedarf es einer Methode, mit welcher die Wigner-Funktion für beliebige Quantensysteme sowohl stationär als auch transient berechnet werden kann. Diesen Aspekt adressiert gerade die WTG, welche in Kapitel 3 für verschiedene Modelle hergeleitet wird.

2.4.4. Momente der Wigner-Funktion - Erwartungswerte im Phasenraum

Ein wesentlicher Vorteil ist, dass die Erwartungswerte in Analogie zur klassischen Mechanik über die Verteilungsfunktion bestimmt werden [38, 39]. Mit der Wigner-Funktion sind die Erwartungswerte einer beliebigen Observablen $\langle \mathcal{A}_{\lambda\lambda'} \rangle$ bezüglich der Matrixelemente unter Berücksichtigung der verschiedenen Bänder als

$$\langle \mathcal{A}_{\lambda\lambda'} \rangle = \langle \psi_\lambda | \mathcal{A}_{\lambda\lambda'} | \psi_{\lambda'} \rangle = \int \frac{d\mathbf{k}}{2\pi} d\boldsymbol{\chi} A_{\lambda\lambda'}(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{k}) \cdot f_{\lambda\lambda'}(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{k}, t) \quad (2.56)$$

definiert. Hieraus ergibt sich die Ladungsträgerdichte n_λ des Bands λ als Moment nullter Ordnung aus den Diagonalelementen der Wigner-Funktion zu:

$$n_\lambda(\boldsymbol{\chi}, t) = \rho_{\lambda\lambda}^D(\boldsymbol{\chi}, \boldsymbol{\xi} = 0, t) = \int \frac{d\mathbf{k}}{2\pi} f_{\lambda\lambda}(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{k}, t). \quad (2.57)$$

Unter der Voraussetzung, dass nur ein Band betrachtet wird, wie zum Beispiel für den in der Literatur vorherrschenden Fall des Intrabandtransports, zum Beispiel [22, 24], kann auf die dezidierte Darstellung des Bandindex λ verzichtet werden. Im Ergebnis liegt dann der konventionelle Ausdruck für die Ladungsträgerdichte $n(\boldsymbol{\chi}, t) = \int \frac{d\mathbf{k}}{2\pi} f(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{k}, t)$ vor [23]. Für die hier betrachteten Hamiltonoperatoren kann die Stromdichte j_λ , welche durch das Band λ getragen wird, aus den Diagonalelementen der Wigner-Funktion als Moment erster Ordnung ermittelt werden:

$$\mathbf{j}_\lambda(\boldsymbol{\chi}, t) = -i \frac{q\hbar}{m_\lambda(\boldsymbol{\chi})} \nabla_{\boldsymbol{\xi}} \rho_{\lambda\lambda}^D(\boldsymbol{\chi}, \boldsymbol{\xi}, t) \Big|_{\boldsymbol{\xi}=0} = q \int \frac{d\mathbf{k}}{2\pi} \frac{\hbar\mathbf{k}}{m_\lambda(\boldsymbol{\chi})} f_{\lambda\lambda}(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{k}, t). \quad (2.58)$$

Die Phasenraumdarstellung des Stromoperators $\hbar\mathbf{k}/m_\lambda(\boldsymbol{\chi})$ kann hierbei gemäß den Newtonschen Gesetzen mit der Geschwindigkeit eines Teilchens mit dem Impuls $\hbar\mathbf{k}$ verknüpft werden.

3. Modellierung des Quantentransports

Das Fundament für die Modellierung des Quantentransports auf Grundlage der statistischen Dichtematrix bildet die quantenmechanische Bewegungsgleichung, namentlich die Liouville-von-Neumann-Gleichung. Hierauf sollen in diesem Kapitel verschiedene theoretische Modelle zur Analyse des Quantentransports erarbeitet werden.

Hierzu wird in Abschnitt 3.1 zunächst eine niederdimensionale Beschreibung der Bauelemente unter Ausnutzung der geometrischen Symmetrie eingeführt. Im Anschluss werden in Abschnitt 3.2 die in der Literatur vorwiegend eingesetzten Intrabandmodelle unter Annahme einer konstanten effektiven Masse erarbeitet, welche den Ausgangspunkt für die Modellierung darstellen werden. Anschließend wird die Modellkomplexität sukzessive erweitert. Dabei wird zuerst auf die für Heterostrukturen relevante, ortsabhängige effektive Masse eingegangen. Die Erweiterung der Theorie im Hinblick auf Interbandmodelle erfolgt in Abschnitt 3.3, die eine Erfassung von Bandkopplungsmechanismen erlaubt. In Abschnitt 3.4 wird ein zeitabhängiges Multisubbandmodell auf Basis der Mode-Space-Approximation zur Analyse räumlich mehrdimensionaler Bauelemente in den Blick genommen. Abschließend wird auf die Modellierung der Elektron-Phonon-Wechselwirkung in Abschnitt 3.5 eingegangen.

3.1. Niederdimensionale Beschreibung der Bauelemente

Die geometrischen Symmetrien von Bauelementen spielen in der Modellierung eine zentrale Rolle, da nur Komponenten der Wellenfunktion explizit in die Rechnung einbezogen werden müssen, in denen keine Symmetrie bezüglich des Gitters vorliegt. Auch externe, angelegte Felder heben diese Symmetrie auf. Hierdurch müssen nur die Richtungen einbezogen werden, bei welchen die letzten beiden Punkte gelten, wodurch in der Regel eine Reduktion des numerischen Rechenaufwands ermöglicht wird. Um dies anhand eines Beispiels zu verdeutlichen, wird

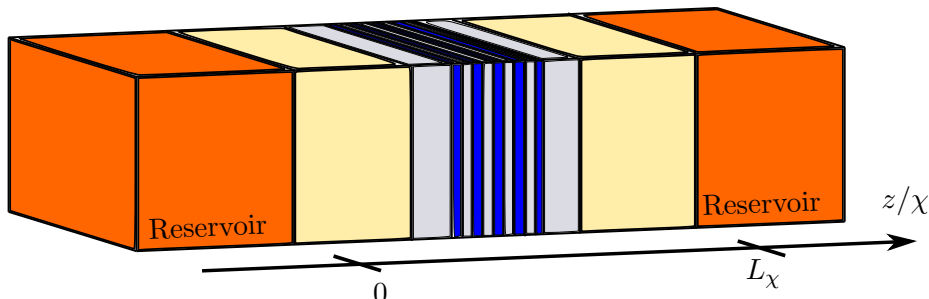


Abbildung 3.1. Schematische Darstellung einer Heterostruktur der Länge L_χ . Die Kontaktbereiche werden über die Reservoirs, welche in Kapitel 5 im Detail beschrieben werden, modelliert. Die Änderung der Materialeigenschaften (unterschiedliche Farben) erfolgt nur entlang der z -Richtung.

eine Heterostruktur betrachtet, wie in Abbildung 3.1 dargestellt. Es ist zu erkennen, dass eine Änderung der Materialeigenschaften nur in die Schichtrichtung z erfolgt. Im Ergebnis wird das entsprechende Potenzial der Heterostruktur auch nur von der Schichtrichtung z abhängig sein. Basierend auf diesen Ergebnissen bietet sich im Folgenden ein Separationsansatz an.

Separationsansatz für die Wellenfunktion: Die zur Schichtrichtung z laterale Richtung \mathbf{r}_{\parallel} wird unter der Annahme von periodischen Randbedingungen modelliert. Für jeden Punkt innerhalb der Schichtstruktur unterliegt die laterale Richtung somit der Translationsinvarianz des Gitters. Diese Betrachtung erlaubt eine direkte Separation der Wellenfunktion. In der Näherung der Einhüllenden-Funktion lässt sich dieser Ansatz als

$$\psi_{\lambda}(\mathbf{r}, t) = \phi_{\lambda}(z, t) \cdot \frac{\exp(\mathbf{i}\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{r}_{\parallel})}{\sqrt{A}} \quad (3.1)$$

formulieren [45]. Der Anteil $\exp(\mathbf{i}\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{r}_{\parallel})/\sqrt{A}$ spiegelt die Translationsinvarianz der Struktur in transversaler Richtung \mathbf{r}_{\parallel} wider. Die Konstante A normiert die Wellenfunktion bezüglich der lateralen Fläche. Die Schichtrichtung z , hier auch die Transportrichtung, unterliegt hingegen nicht mehr der Translationsinvarianz und wird daher durch eine eigene Einhüllende $\phi_{\lambda}(z, t)$ mit örtlicher Abhängigkeit erfasst.

Zweiband-Schrödingergleichung für die Einhüllenden-Funktion: Unter Berücksichtigung eines Leitungsbandes ($\lambda = c$) und eines Valenzbandes ($\lambda = v$) reduziert sich die Multiband-Schrödingergleichung in der Einhüllenden-Näherung (2.29) formal zu:

$$\mathbf{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_c(\mathbf{r}, t) \\ \psi_v(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_{cc} & \mathcal{H}_{cv} \\ \mathcal{H}_{vc} & \mathcal{H}_{vv} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \psi_c(\mathbf{r}, t) \\ \psi_v(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix}. \quad (3.2)$$

Die Hamiltonoperatoren werden dabei aus den Definitionen in (2.29) mithilfe von (2.27) und (2.30) abgeleitet. Die Diagonalkomponenten beschreiben das Leitungsband \mathcal{H}_{cc} sowie das Valenzband \mathcal{H}_{vv} und sind entsprechend

$$\mathcal{H}_{cc} = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{m_c(\mathbf{r})} \nabla + E_c(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}) \quad \mathcal{H}_{vv} = +\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{m_v(\mathbf{r})} \nabla + E_v(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}) \quad (3.3)$$

definiert, wobei die negative effektive Masse der Löcher im Valenzband Berücksichtigung findet. Die Nebendiagonalelemente beschreiben die Bandkopplungsmechanismen, welche von den Impulsmatrixelementen abhängig sind.

Bestimmung der Impulsmatrixelemente: Die Orbitale des Leitungs- und Valenzbandes setzen sich am Entwicklungspunkt¹ typischerweise aus Überlagerungen von s- und p-Orbitalen zusammen [36, 45]. Diese Konfigurationen sind durch die Blochamplituden $|S\rangle$ für s-Orbitale und $|X\rangle, |Y\rangle$ und $|Z\rangle$ für p-Orbitale festgelegt, sodass sich die Impulsmatrixelemente entsprechend

$$p_{c,v} = p_{v,c}^* = \langle S|p_x|X\rangle = -\mathbf{i}\hbar \langle S|\partial_x|X\rangle = \mathbf{i}\hbar \langle S|\partial_z|Y\rangle = \mathbf{i}\hbar \langle S|\partial_z|Z\rangle = \mathbf{i}\hbar P \quad (3.4)$$

¹Bei direkten Halbleitern ist dies der Γ -Punkt.

formulieren lassen² [34]. Die Bandlückenenergie ergibt sich aus der Differenz der betrachteten Bänder $E_g = E_c - E_v$. Mit diesen Beziehungen resultieren die Nebendiagonalelemente, welche die Bandkopplung beschreiben, in [72]:

$$\mathcal{H}_{cv} = \mathcal{H}_{vc} = -\frac{\hbar^2 P}{m_0 E_g} \nabla U(\mathbf{r}). \quad (3.5)$$

Der Separationsansatz für die Einhüllenden-Funktion (3.1) wird nun unter Berücksichtigung der Hamiltonoperatoren, (3.3) und (3.5), in die Schrödingergleichung (3.2) eingesetzt. Die Differentiation bezüglich des lateralen Anteils wird explizit ausgeführt. Im Ergebnis liegt schließlich ein System von gekoppelten eindimensionalen Schrödingergleichungen für die Einhüllenden-Funktionen vor [74]:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi_c(z, t) &= \underbrace{\left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m_c(z)} \frac{\partial}{\partial z} + E_c(z) + U(z) + \frac{\hbar \mathbf{k}_{\parallel}^2}{2m_c(z)} \right\}}_{\mathcal{H}_{cc}(z)} \phi_c(z, t) - \underbrace{\frac{\hbar^2 P}{m_0 E_g} \frac{\partial}{\partial z} U(z)}_{\mathcal{H}_{cv}(z)} \phi_v(z, t) \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi_v(z, t) &= \underbrace{\left\{ +\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m_v(z)} \frac{\partial}{\partial z} + E_v(z) + U(z) + \frac{\hbar \mathbf{k}_{\parallel}^2}{2m_v(z)} \right\}}_{\mathcal{H}_{vv}(z)} \phi_v(z, t) - \underbrace{\frac{\hbar^2 P}{m_0 E_g} \frac{\partial}{\partial z} U(z)}_{\mathcal{H}_{vc}(z)} \phi_c(z, t). \end{aligned} \quad (3.6)$$

Zur weiteren Vereinfachung bei der Auswertung wird das gesamte Potenzial $V_{\lambda}(z) = E_{\lambda}(z) + U(z)$ des Bands λ definiert, welches sich aus der ortsabhängigen Bandkantenenergie $E_{\lambda}(z)$ und dem Hartree-Potenzial $U(z)$ zusammensetzt.

Zweiband-Liouville-von-Neumann-Gleichung: Da die Wellenfunktion in lateraler Richtung bereits über den Separationsansatz (3.1) festgelegt ist, ist es ausreichend die statistische Dichtematrix in den Koordinaten der Transportrichtung $\rho_{\lambda\lambda'}(z, z', t) = \langle z | \hat{\rho}_{\lambda\lambda'} | z' \rangle$ zu betrachten. Mit der LVNG (2.38) sowie dem Einfügen des quantenmechanischen Einheitsoperators³ zwischen Hamilton- und Dichteoperator führt dies zu:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \underbrace{\begin{pmatrix} \rho_{cc} \\ \rho_{cv} \\ \rho_{vc} \\ \rho_{vv} \end{pmatrix}}_{\boldsymbol{\rho}} = \underbrace{\begin{pmatrix} \mathcal{H}_{cc}(z) - \mathcal{H}_{cc}^{\dagger}(z') & -\mathcal{H}_{cv}^{\dagger}(z') & \mathcal{H}_{cv}(z) & 0 \\ -\mathcal{H}_{vc}^{\dagger}(z') & \mathcal{H}_{cc}(z) - \mathcal{H}_{vv}^{\dagger}(z') & 0 & \mathcal{H}_{cv}(z) \\ \mathcal{H}_{vc}(z) & 0 & \mathcal{H}_{vv}(z) - \mathcal{H}_{cc}^{\dagger}(z') & -\mathcal{H}_{cv}^{\dagger}(z') \\ 0 & \mathcal{H}_{vc}(z) & -\mathcal{H}_{vc}^{\dagger}(z') & \mathcal{H}_{vv}(z) - \mathcal{H}_{vv}^{\dagger}(z') \end{pmatrix}}_{\mathcal{L}} \underbrace{\begin{pmatrix} \rho_{cc} \\ \rho_{cv} \\ \rho_{vc} \\ \rho_{vv} \end{pmatrix}}_{\boldsymbol{\rho}}. \quad (3.7)$$

Aus Gründen der Übersichtlichkeit wird auf ein explizites Ausschreiben der Ortsabhängigkeit z, z' und der Zeit t innerhalb der statistischen Dichtematrix verzichtet. Der Operator \mathcal{L} wird

²Eine formale Verknüpfung des Impulsmatrixelements P kann zu dem üblicherweise verwendeten Kane-Parameter [36] gemäß $i\hbar P = i \frac{m_0}{\hbar} P_{\text{Kane}}$ gefunden werden.

³In der Ortsbasis ist der quantenmechanische Einheitsoperator über die Beziehung $\int dz'' |z''\rangle \langle z''|$ definiert.

auch als Liouville-Operator bezeichnet. Seine Elemente setzen sich aus Linearkombinationen der Hamiltonoperatoren, (3.3) und (3.5), zusammen. Die einzelnen Hamiltonoperatoren sind zwar jeweils selbstadjungiert, sodass auf die explizite Darstellung von \dagger verzichtet werden kann, aber im Hinblick auf die Einbindung eines komplex absorbierenden Potenzials in Abschnitt 5.2 soll die theoretische Ausführung der Adjungierung dennoch berücksichtigt werden.

3.2. Intradband-Quantentransport

Die Diagonalelemente $\rho_{\lambda\lambda}$ mit $\lambda \in c, v$ der Dichtematrix erfassen die Dynamik innerhalb des Bands λ . Falls die Kopplung zu den anderen Bändern vernachlässigt werden kann, z. B. bei unipolaren Halbleiterstrukturen mit einer großen Bandlücke, dominiert der Intradband-Quantentransport das Systemverhalten entsprechend:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho_{\lambda\lambda}(z, z', t) = \left\{ \mathcal{H}_{\lambda\lambda}(z) - \mathcal{H}_{\lambda\lambda}^\dagger(z') \right\} \rho_{\lambda\lambda}(z, z', t). \quad (3.8)$$

Das genaue Band λ spielt im weiteren Verlauf keine entscheidende Rolle. Auf eine dezidierte Darstellung des Bandindex λ kann somit verzichtet werden. Bei der Auswertung der Transportgleichung (3.8) sind zwei Fälle zu unterscheiden:

- **Örtlich konstante effektive Masse:** Im Umfeld der Modellierung der elektrischen Eigenschaften von Quantenbauelementen wird überwiegend eine konstante effektive Masse vorausgesetzt [20, 23, 24, 28, 59, 61, 65, 68–70, 77–83]. Während dieses Modell zur Beschreibung von Homostrukturen mit beliebigen Dotierungsprofilen angewendet werden kann, ist der Einsatz für Heterostrukturen nicht gerechtfertigt. Oftmals wird es dennoch zur Evaluation neuer numerischer Methoden für die WTG anhand von Heterostrukturen herangezogen, da durch die Annahme einer konstanten effektiven Masse eine vergleichsweise simple partielle Integro-Differenzialgleichung zu lösen ist, die in ihren Grundzügen große Ähnlichkeit zur bekannten BTG aufweist [12].
- **Örtlich variierende effektive Masse:** Zur adäquaten Modellierung von Heterostrukturen ist die korrespondierende Einbindung der örtlichen Variation der effektiven Masse eine Grundvoraussetzung. In der Literatur findet dieser wichtige Anwendungsfall jedoch weitaus weniger Beachtung [22, S9, S11, S12, 84–87]. Im direkten Vergleich zur konstanten effektiven Masse resultiert die Berücksichtigung der örtlichen Variation der effektiven Masse in mathematisch deutlich komplexeren Transportgleichungen.

3.2.1. Örtlich konstante effektive Masse

Die Auswertung der Differenz der Hamiltonoperatoren in (3.8) mithilfe von (3.3) liefert unter Annahme einer konstanten effektiven Masse⁴ m :

$$\mathcal{H}(z) - \mathcal{H}(z') = -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\partial^2}{\partial z'^2} \right\} + \{V(z) - V(z')\}. \quad (3.9)$$

Um diesen Ausdruck in die Phasenraumdarstellung zu überführen, wird die Weyl-Quantisierung angewendet.

⁴Die negative effektive Masse des Löchersystems ist in dieser Darstellung nicht berücksichtigt.

Liouville-von-Neumann-Gleichung: In einem ersten Schritt wird die Transformation in Schwerpunkt- und Relativkoordinaten vorgenommen. Für eine kompakte Notation wird die Funktion

$$B(\chi, \xi) = V\left(\chi + \frac{\xi}{2}\right) - V\left(\chi - \frac{\xi}{2}\right) \quad (3.10)$$

eingeführt. Der Zusammenhang zwischen den Ableitungen der Koordinaten z, z' und den Schwerpunkt- und Relativkoordinaten χ, ξ zur Transformation von (3.9) ist im Anhang A beschrieben. Hiermit resultiert (3.8) schließlich in der LVNG-RS entsprechend:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho^D(\chi, \xi, t) = \frac{i\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial \chi} \frac{\partial}{\partial \xi} \rho^D(\chi, \xi, t) + \frac{1}{i\hbar} B(\chi, \xi) \cdot \rho^D(\chi, \xi, t). \quad (3.11)$$

Auf der physikalischen Ebene stellt der erste Term die Diffusionsprozesse dar, während der zweite Term, proportional zur Funktion B , die Driftbewegungen infolge elektrischer Felder beschreibt. Der korrespondierende Driftoperator zeigt mit

$$B(\chi, \xi) = -B(\chi, -\xi) \quad (3.12)$$

eine ungerade Parität bezüglich der Relativkoordinate ξ .

Wigner-Transportgleichung: Der zweite Schritt der Weyl-Quantisierung führt schließlich über die Fourier-Transformation bezüglich der Relativkoordinate ξ zur Bewegungsgleichung im Phasenraum. Entsprechend der Fourier-Transformation sind dabei alle Produkte von Funktionen in Abhängigkeit der Relativkoordinate ξ mit Faltungsintegralen der Fourier-Transformierten in Abhängigkeit der Wellenzahl k verknüpft. Eine besondere Bedeutung erlangt der Diffusionsoperator, wie nachfolgend beschrieben wird. Die formale Anwendung der Fourier-Transformation auf den Diffusionsoperator resultiert mithilfe des Gaußschen Satz in [S8]:

$$\begin{aligned} & i \frac{\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial \chi} \int d\xi \exp(-ik\xi) \cdot \frac{\partial}{\partial \xi} \rho^D(\chi, \xi, t) = \\ & i \frac{\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial \chi} \left[\exp(-ik\xi) \rho^D(\chi, \xi, t) \right]_{-\infty}^{+\infty} - \int d\xi (-ik) \exp(-ik\xi) \rho^D(\chi, \xi, t) = -\frac{\hbar k}{m} \frac{\partial}{\partial \chi} f(\chi, k, t) \end{aligned} \quad (3.13)$$

Die Relativkoordinate ξ wird über den gesamten Raum integriert. Da die Wellenfunktion eine quadratintegrierbare Funktion über die L_2 -Norm darstellt und daher im Unendlichen verschwindet, gilt dieser Zusammenhang gleichermaßen auch für die statistische Dichtematrix. Der Oberflächenterm in (3.13) verschwindet somit. Als Resultat liegt somit die WTG für den Fall einer konstanten effektiven Masse vor [23, 24]:

$$\frac{\partial}{\partial t} f(\chi, k, t) = -\frac{\hbar k}{m} \frac{\partial}{\partial \chi} f(\chi, k, t) + \frac{1}{i\hbar} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{V}(\chi, k - k') \cdot f(\chi, k', t). \quad (3.14)$$

Der Integralkern \tilde{V} innerhalb des Faltungsintegrals repräsentiert die Fourier-Transformierte des Driftoperators:

$$\tilde{V}(\chi, k) = \int d\xi \exp(-ik\xi) \cdot B(\chi, \xi) = \int d\xi \exp(-ik\xi) \cdot \left\{ V\left(\chi + \frac{\xi}{2}\right) - V\left(\chi - \frac{\xi}{2}\right) \right\}. \quad (3.15)$$

Der Driftoperator im Phasenraum stellt somit einen nichtlokalen Operator bezüglich der Wellenzahl k dar.

Anmerkung: In der Praxis erweist sich die Annahme eines unendlich ausgedehnten Rechengebiets bezüglich der ξ -Richtung jedoch als schwierig und es wird auf endliche Rechengebiete für die Berechnung zurückgegriffen. Rein formal ist eine Vernachlässigung des Oberflächenterms dann nicht mehr gerechtfertigt. Dieser wichtige Aspekt wird im Detail in Kapitel 5 adressiert.

Kontinuitätsgleichung und Stromdichte: Aus der WTG (3.14) kann durch Integration über den Wellenvektor k eine Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} n(\chi, t) = -\frac{1}{q} \frac{\partial}{\partial \chi} j(\chi, t) \quad (3.16)$$

hergeleitet werden [23]. Hierdurch gelingt die Verknüpfung der Wigner-Funktion mit der Stromdichte. Unter Ausnutzung des Zusammenhangs zwischen Wigner-Funktion und Ladungsträgerdichte (2.57) liefert die linke Seite von (3.14) nach Integration über die Wellenzahl k :

$$\frac{\partial}{\partial t} n(\chi, t) = \int \frac{dk}{2\pi} \frac{\partial}{\partial t} f(\chi, k, t). \quad (3.17)$$

Auf der rechten Seite verbleibt hingegen ein Integral über den Drift- als auch Diffusionsoperator. Zuerst sollen die Eigenschaften des Driftoperators untersucht werden. Da das systematische Vorgehen zur Herleitung der Kontinuitätsgleichung aus der WTG konzeptionell gleich ist, werden im Folgenden einige Zwischenschritte für das bessere Verständnis angegeben. Ferner sollen die gewonnenen Kenntnisse in die Entwicklung der numerischen Methoden einfließen WTG [S9].

Der Driftoperator beinhaltet als Integralkern den Ausdruck $\tilde{V}(\chi, k - k')$ gemäß (3.15). Da die Reihenfolge der Integration an dieser Stelle vertauschbar ist, kann zuerst die Integration über k vor der in k' ausgeführt werden. Auf dieser Grundlage kann über die Beziehung $\int \frac{dk}{2\pi} \exp(-ik\xi) = \delta(\xi)$ eine Dirac-Distribution eingeführt werden. Zusammengefasst ergibt sich somit:

$$\begin{aligned} \int \frac{dk'}{2\pi} \int d\xi \int dk \exp(-i(k - k')\xi) B(\chi, \xi) \cdot f(\chi, k', t) = \\ \int dk' \int d\xi \exp(+ik'\xi) \cdot \delta(\xi) \cdot B(\chi, \xi) \cdot f(\chi, k', t). \end{aligned} \quad (3.18)$$

Nun kann die Ausblendeigenschaft der Dirac-Distribution in (3.18) ausgenutzt werden:

$$\int dk' \int d\xi \exp(+ik'\xi) \delta(\xi) \cdot B(\chi, \xi) \cdot f(\chi, k', t) = B(\chi, \xi = 0) \int dk' f(\chi, k', t) = 0. \quad (3.19)$$

Aufgrund der ungeraden Parität der Funktion $B(\chi, \xi)$ hinsichtlich der Relativkoordinate ξ ergibt sich für den Ausdruck an der Stelle $B(\chi, \xi = 0) = 0$. Daraus folgt, dass der gesamte Term Null ist und keinen Beitrag zur Stromdichte liefert.

Bei der Betrachtung des Diffusionsoperators werden Integration nach k und Differentiation nach χ vertauscht, daraus ergibt sich aus dem Vergleich mit (3.16) der anschauliche Ausdruck:

$$-\frac{\partial}{\partial \chi} \int \frac{dk}{2\pi} \frac{\hbar k}{m} f(\chi, k, t) \equiv -\frac{1}{q} \frac{\partial}{\partial \chi} j(\chi, t). \quad (3.20)$$

Folglich ist die Stromdichte j über die Beziehung

$$j(\chi, t) = q \int \frac{dk}{2\pi} \frac{\hbar k}{m} f(\chi, k, t) \quad (3.21)$$

mit der Wigner-Funktion verbunden. Im stationären Fall stellt die Stromdichte eine örtlich konstante Funktion dar.

Mit einem analogen Vorgehen ergibt sich durch Auswertung der LVNG-RS (3.11) an der Relativkoordinate $\xi = 0$ die Stromdichte j zu:

$$\frac{j(\chi, t)}{q} = -i \frac{\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial \xi} \rho^D(\chi, \xi, t) \Big|_{\xi=0} = \frac{\hbar}{m} \Im \left\{ \frac{\partial}{\partial \xi} \rho^D(\chi, \xi, t) \Big|_{\xi=0} \right\}. \quad (3.22)$$

Die Stromdichte ist folglich mit dem imaginären Anteil der statistischen Dichtematrix verknüpft.

3.2.2. Örtlich variierende effektive Masse

Im Hinblick auf die Modellierung von Heterostrukturen ist nicht nur die Einbindung der Banddiskontinuitäten, sondern auch die korrespondierende örtliche Variation der effektiven Masse notwendig [22, S9, S12]. Unter Berücksichtigung der örtlichen Variation der effektiven Masse in (3.3) kann die Differenz der Hamiltonoperatoren aus der LVNG (3.7) in

$$\mathcal{H}(z) - \mathcal{H}(z') = -\frac{\hbar^2}{2} \left\{ \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z'} \frac{1}{m(z')} \frac{\partial}{\partial z'} \right\} + \{V(z) - V(z')\} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_{\parallel}^2}{2} \left\{ \frac{1}{m(z)} - \frac{1}{m(z')} \right\} \quad (3.23)$$

überführt werden. Während sich die Terme bezüglich des lateralen Anteils des Wellenvektors \mathbf{k}_{\parallel} für den Fall einer konstanten effektiven Masse gegenseitig aufgehoben haben, ist dieser Term für den Fall der örtlichen Variation der effektiven Masse zu berücksichtigen. Für eine übersichtliche Darstellung nach Anwendung der Koordinatentransformation werden die Ausdrücke bezüglich der effektiven Masse zusammengefasst und anschließend über die Funktionen

$$m_{\pm}(\chi, \xi) \equiv \frac{1}{m\left(\chi + \frac{\xi}{2}\right)} \pm \frac{1}{m\left(\chi - \frac{\xi}{2}\right)} \quad (3.24)$$

definiert. Die Funktion $m_+(\chi, \xi)$ ($m_-(\chi, \xi)$) weist eine gerade (ungerade) Parität bezüglich der Relativkoordinate ξ auf. Weitere Vereinfachungen können durch die folgenden Zusammenhänge zu den Ableitungen der definierten Funktionen m_{\pm} [22]

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z')} = 0 &= + \frac{\partial}{\partial z'} \frac{1}{m(z)} \implies \frac{\partial}{\partial \xi} m_+(\chi, \xi) = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} m_-(\chi, \xi) \\ \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z')} = 0 &= - \frac{\partial}{\partial z'} \frac{1}{m(z)} \implies \frac{\partial}{\partial \xi} m_-(\chi, \xi) = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} m_+(\chi, \xi) \end{aligned} \quad (3.25)$$

erzielt werden. In der Literatur ist es dabei gebräuchlich, die Ableitungen der Funktionen $m_{\pm}(\chi, \xi)$ in Richtung der Relativkoordinate ξ mithilfe von (3.25) in äquivalente Ableitungen bezüglich der Schwerpunktkoordinate χ umzuformen⁵ [22, 84–87].

⁵Eine Auswertung der umgekehrten Verhältnisse ist in der Literatur noch nicht vorgenommen worden und wäre prinzipiell ein interessanter Ansatzpunkt für weitere Arbeiten.

Liouville-von-Neumann-Gleichung: Mit diesen Vorüberlegungen resultiert die LVNG-RS für den Operator (3.23) unter Ausnutzung der Definitionen (3.24) und deren Zusammenhängen untereinander (3.25) schließlich in:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho^D(\chi, \xi, t) = & \frac{i\hbar}{2} m_-(\chi, \xi) \frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} \rho^D(\chi, \xi, t) + \frac{i\hbar}{2} \left\{ \left(\frac{\partial}{\partial \chi} m_-(\chi, \xi) \right) \frac{1}{2} + m_+(\chi, \xi) \frac{\partial}{\partial \xi} \right\} \frac{\partial}{\partial \chi} \rho^D(\chi, \xi, t) \\ & + \frac{i\hbar}{2} \left\{ \left(\frac{\partial}{\partial \chi} m_+(\chi, \xi) \right) \frac{\partial}{\partial \xi} + m_-(\chi, \xi) \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \right\} \rho^D(\chi, \xi, t) + \frac{1}{i\hbar} B(\chi, \xi) \cdot \rho^D(\chi, \xi, t) \\ & - \frac{i\hbar}{2} \mathbf{k}_{\parallel}^2 \cdot m_-(\chi, \xi) \rho^D(\chi, \xi, t). \end{aligned} \quad (3.26)$$

Da der Transport im Wesentlichen innerhalb der Extrema der Bandstruktur in der Umgebung des Fermi-Niveaus stattfindet [44], sind die für den Transport relevanten Anteile des lateralen Wellenvektors \mathbf{k}_{\parallel} gering. Zusätzlich ist der Differenzterm $m_-(\chi, \xi)$ entweder Null oder nimmt kleine Werte an. Auf dieser Grundlage kann der letzte Term in (3.26) proportional zu $\mathbf{k}_{\parallel}^2 m_-(\chi, \xi)$ in erster Näherung vernachlässigt werden [22, 84]. Eine Einbindung des Terms ist mit einem erheblichen Mehraufwand bei der Lösung verbunden, da die Transportgleichung für jeden Wert des lateralen Wellenvektors \mathbf{k}_{\parallel} gelöst werden muss [85].

Wigner-Transportgleichung: Durch die Anwendung der Fourier-Transformation bezüglich der Relativkoordinate ξ lässt sich die LVNG-RS (3.26) in die entsprechende WTG unter Berücksichtigung der örtlichen Variation der effektiven Masse als

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f(\chi, k, t) = & \frac{i\hbar}{2} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{m}_-(\chi, k - k') \frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} f(\chi, k', t) + \frac{i\hbar}{2} \int \frac{dk'}{2\pi} \frac{\partial}{\partial \chi} \tilde{m}_-(\chi, k - k') \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} f(\chi, k', t) \\ & + \frac{i\hbar}{2} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{m}_+(\chi, k - k') \cdot (ik') \cdot \frac{\partial}{\partial \chi} f(\chi, k', t) + \frac{i\hbar}{2} \int \frac{dk'}{2\pi} \frac{\partial}{\partial \chi} \tilde{m}_+(\chi, k - k') \cdot (ik') \cdot f(\chi, k', t) \\ & + \frac{i\hbar}{2} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{m}_-(\chi, k - k') \cdot (ik')^2 \cdot f(\chi, k', t) + \frac{1}{i\hbar} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{V}(\chi, k - k') \cdot f(\chi, k', t) \end{aligned} \quad (3.27)$$

schreiben [22, S9, 84]. In Analogie zum vorangegangenen Abschnitt wird eine quadratintegrierbare statistische Dichtematrix vorausgesetzt. Oberflächenterme sind daher nicht zu berücksichtigen. Die Integralkerne $\tilde{m}_{\pm}(\chi, k)$ in den Faltungsgleichungen innerhalb der WTG (3.27) sind als Fourier-Transformationen der Funktionen m_{\pm}

$$\tilde{m}_{\pm}(\chi, k) \equiv \int d\xi \exp(-ik\xi) \cdot m_{\pm}(\chi, \xi) = \int d\xi \exp(-ik\xi) \cdot \left[\frac{1}{m\left(\chi + \frac{\xi}{2}\right)} \pm \frac{1}{m\left(\chi - \frac{\xi}{2}\right)} \right] \quad (3.28)$$

definiert [22, S9, 84]. Während im Fall der konstanten effektive Masse (3.14) nur der Driftoperator nichtlokal ist, sind bei der Variation der effektiven Masse alle Operatoren nichtlokal bezüglich der Wellenzahl k .

Verbindung zur Wigner-Transportgleichung mit konstanter effektiver Masse: Unter Annahme einer konstanten effektiven Masse ist (3.27) systematisch in (3.14) zu überführen. Die dabei gewonnenen Kenntnisse sollen für die Entwicklung der numerischen Verfahren genutzt werden. Gebräuchliche numerische Methoden zur Einbindung einer örtlichen Variation der effektiven Masse in der Literatur sind bei der Anwendung auf Problemen mit einer konstanten effektiven Masse mit Problemen⁶ behaftet [22, 84].

Bei der Untersuchung der Integralkerne \tilde{m}_\pm ist festzustellen, dass die Integralkerne proportional zur Funktion \tilde{m}_- keinen Beitrag liefern, wie aus den Definitionen (3.24) und (3.28) ersichtlich ist. Außerdem nimmt die Ableitung der Funktion $\frac{\partial}{\partial \chi} \tilde{m}_+(\chi, \xi)$ den Wert Null an, da die zugrundeliegende Funktion $m_+(\chi, \xi)$ eine Konstante darstellt. Der einzig verbleibende Term im Kontext der effektiven Masse kann unter Ausnutzung der Dirac-Distribution $\int d\xi \exp(-i(k - k')\xi) = 2\pi\delta(k - k')$ als

$$\frac{i\hbar}{2} \int \frac{dk'}{2\pi} \underbrace{\int d\xi \exp(-i(k - k')\xi)}_{\tilde{m}_+(\chi, k-k')} \frac{2}{m} \cdot (ik') \cdot \frac{\partial}{\partial \chi} f(\chi, k', t) = -\frac{\hbar k}{m} \frac{\partial}{\partial \chi} f(\chi, k, t) \quad (3.29)$$

geschrieben werden. Schlüsseleigenschaft ist die Ausblendeigenschaft der Dirac-Distribution an der Stelle $\xi = 0$, welche in das numerische Verfahren eingearbeitet werden soll.

Kontinuitätsgleichung und Stromdichte: Mit einer analogen Vorgehensweise wie im vorangegangenen Abschnitt 3.2.1 wird eine methodische Verknüpfung zur Kontinuitätsgleichung durch eine Integration über den Wellenvektor erzielt. Aufgrund der Ausblendeigenschaft der nach Integration vorliegenden Dirac-Distribution liefern nur noch Integralkerne mit gerader Parität einen Beitrag zur Stromdichte. Nach der partiellen Integration der verbleibenden zwei Terme mit gerader Parität \tilde{m}_+ lässt sich die Stromdichte j zu

$$\frac{1}{q} j(\chi, t) = \int \frac{dk}{2\pi} \frac{\hbar k}{m(\chi)} f(\chi, k, t) \quad (3.30)$$

bestimmen [S9, 84, 85].

Durch Untersuchung der LVNG-RS (3.26) an der Stelle $\xi = 0$ kann ein Zusammenhang für die Stromdichte aus der statistischen Dichtematrix entsprechend

$$\frac{j(\chi, t)}{q} = -i \frac{\hbar}{m(\chi)} \frac{\partial}{\partial \xi} \rho^D(\chi, \xi, t) \Big|_{\xi=0} = \frac{\hbar}{m(\chi)} \Im \left\{ \frac{\partial}{\partial \xi} \rho^D(\chi, \xi, t) \Big|_{\xi=0} \right\} \quad (3.31)$$

hergeleitet werden.

3.3. Interband-Quantentransport

Der Interband-Quantentransport spielt eine große Rolle bei vielen modernen Komponenten der Nanoelektronik. Im Wesentlichen basieren die Bauelemente auf dem Interbandtunneleffekt, welcher auch als Zener-Tunneleffekt bekannt ist [88, 89]. Dieser Effekt beschreibt das

⁶Die Nebendiagonalelemente des diskreten Diffusionsoperators nehmen bei numerischer Berechnung nicht den Wert Null an, wie es eine direkte Diskretisierung des Diffusionsoperators für den Fall einer konstanten effektiven Masse erfordert. Weiterhin können Probleme im Hinblick auf den Massenerhalt festgestellt werden [84].

Tunneln von Leitungsbandelektronen in das Valenzband ohne Energieänderung und umgekehrt. In Abbildung 3.2 ist der Zener-Tunneleffekt für einen hoch dotierten pn-Übergang, einer sogenannten Esaki-Diode, unter Einwirkung einer Vorspannung schematisch dargestellt. Ein bekannter Vertreter dieser Bauelementklasse ist beispielsweise der sogenannte Tunnel-

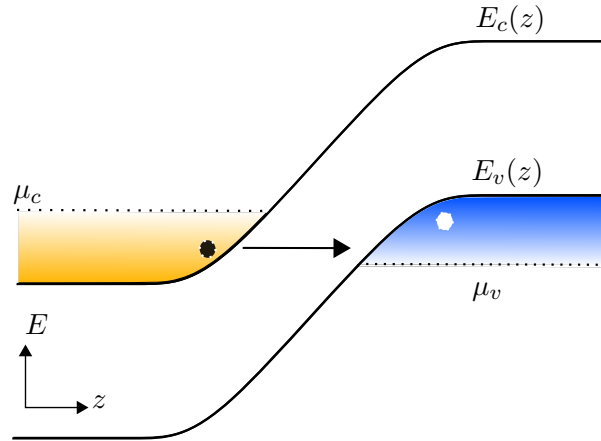


Abbildung 3.2. Schematische Darstellung eines Interbandtunnelprozesses am Beispiel einer vorgespannten Esaki-Diode. Ein durch den schwarzen Punkt konzeptionell dargestelltes Elektron tunnelt vom Leitungsband E_c ins Valenzband E_v .

Feldeffekttransistor (TFET). Wegen der grundsätzlich verschiedenen Funktion zur Steuerung des Kanals ist der TFET ein geeigneter Kandidat für eine weitere Miniaturisierung der Transistoren⁷. Andere Bauelemente, die auf diesem Effekt basieren, wie z. B. die Resonante Interband-Tunneldiode (RITD), erlauben die Entwicklung hocheffizienter, schneller Komponenten für die Hochfrequenztechnik, zu welchen Verstärker, Oszillatoren und Schalter zählen [90].

Für die Modellierung dieser Komponenten, welche auf dem Interbandtunneleffekt basieren, ist somit die Einbeziehung von Bandkopplungsmechanismen erforderlich. Der Zusammenhang hierzu ist bereits durch das Zweibandmodell (3.7) eingeführt worden. Dieses Modell soll im folgenden Abschnitt von der LVNG-RS in die WTG überführt werden. Dabei wird in Abschnitt 3.3.1 zunächst eine allgemeine Form hergeleitet, welche auch die örtliche Variation der effektiven Masse mit einschließt. Für die späteren numerischen Analysen wird das Modell unter Annahme einer konstanten effektiven Masse in Abschnitt 3.3.2 vereinfacht. Mit dieser Vereinfachung ergeben sich dann die in der Literatur bekannten Modelle der Multiband-WTG [72–74].

3.3.1. Formulierung des gekoppelten Transportproblems

Bevor die Transformation in Schwerpunkt- und Relativkoordinaten erfolgt, wird zuerst eine zum elektrischen Feld korrespondierende Größe \mathcal{E} als Hilfsgröße über den Ausdruck

$$\mathcal{E}(z) = \frac{\partial}{\partial z} U(z) \quad (3.32)$$

⁷Unterswellensteilheiten von unter 60mV/dec sind bereits erzielt worden.

eingeführt. Mit dieser Hilfsgröße lassen sich die Interbandkoppelterme \mathcal{H}_{cv} und \mathcal{H}_{vc} , welche den Gradienten des Potentials enthalten, im weiteren Verlauf deutlich übersichtlicher beschreiben⁸.

Interband-Liouville-von-Neumann-Gleichung: Unter Berücksichtigung der ortsabhängigen effektiven Masse des Valenzbands als auch des Leitungsbands werden sämtliche Matrixelemente des Liouville-Operators (3.7) mithilfe der Schrödingergleichung (3.6) aufgestellt. Anschließend werden die Matrixelemente in Schwerpunkt- und Relativkoordinaten transformiert.

Um eine kompakte Notation zu gewährleisten, ist es zweckmäßig, die Abkürzungen m_{\pm} bezüglich der effektiven Massen und den Driftoperator B zu generalisieren. Diese Abkürzungen werden für den Multibandfall wie folgt definiert

$$m_{\lambda\lambda'}^{\pm}(\chi, \xi) \equiv \frac{1}{m_{\lambda}\left(\chi + \frac{\xi}{2}\right)} \pm \frac{1}{m_{\lambda'}\left(\chi - \frac{\xi}{2}\right)} \quad \lambda, \lambda' \in c, v, \quad (3.33)$$

und

$$B_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi) \equiv V_{\lambda}\left(\chi + \frac{\xi}{2}\right) - V_{\lambda'}\left(\chi - \frac{\xi}{2}\right) \quad \lambda, \lambda' \in c, v. \quad (3.34)$$

Der Driftoperator $B_{\lambda\lambda'}$ weist bezüglich der Relativkoordinate ξ eine ungerade Parität unter einfacher Permutation der Bandindizes auf $B_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi) = -B_{\lambda'\lambda}(\chi, -\xi)$. Weiterhin kann ein Zusammenhang zwischen den Ableitungen der Abkürzungen $m_{\lambda\lambda'}^{\pm}(\chi, \xi)$ angegeben werden:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m_c(z')} = 0 = + \frac{\partial}{\partial z'} \frac{1}{m_v(z)} &\implies \frac{\partial}{\partial \xi} m_{cv}^{-}(\chi, \xi) = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} m_{vc}^{+}(\chi, \xi) \\ \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m_c(z')} = 0 = - \frac{\partial}{\partial z'} \frac{1}{m_v(z)} &\implies \frac{\partial}{\partial \xi} m_{cv}^{+}(\chi, \xi) = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} m_{vc}^{-}(\chi, \xi) \end{aligned} \quad (3.35)$$

Im Ergebnis liegen wiederum zwei theoretisch äquivalente Optionen zur Formulierung der Transportgleichungen vor. Einerseits können die Ableitungen der Abkürzungen $m_{\lambda\lambda'}^{\pm}$ bezüglich der Schwerpunktkoordinate χ aufgelöst werden. Andererseits existiert eine Variante, bei welcher eine Umstellung bezüglich der Relativkoordinate ξ erfolgt. In dieser Arbeit wird die erste Option verfolgt⁹. Dies ermöglicht auch weiterhin, dass die Gleichungen im Grenzfall des entkoppelten Multibandsystems in die Modellgleichungen des in der Literatur gebräuchlichen Intradbandtransports (3.27) übergehen.

Zusammen mit den Definitionen (3.33) und (3.34) sowie den Beziehungen (3.35) ergibt sich die den Interbandtransport charakterisierende LVNG-RS zu:

⁸Weiterhin bietet diese Betrachtung hinsichtlich der Diskretisierung (siehe Abschnitt 6) einen Vorteil, da sich die Auswertung des sich ergebenden Ableitungsoperators bezüglich der Koordinaten z, z' in Schwerpunkt- und Relativkoordinaten deutlich aufwendiger gestaltet.

⁹Natürlich ist für diese Gleichung eine Reformulierung bezüglich der Ableitungen in ξ für die Abkürzungen denkbar und könnte in zukünftigen Arbeiten gemeinsam mit dem analogen Fall des Intradbandtransports mit der örtlichen Variation der effektiven Masse adressiert werden.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_{cc}^D(\chi, \xi, t) = & + \frac{i\hbar}{2} \left\{ \left(\frac{\partial}{\partial \chi} m_{cc}^- \right) \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} + \left(\frac{\partial}{\partial \chi} m_{cc}^+ \right) \frac{\partial}{\partial \xi} + m_{cc}^- \frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} + m_{cc}^+ \frac{\partial}{\partial \chi} \frac{\partial}{\partial \xi} \right. \\ & \left. + m_{cc}^- \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \right\} \rho_{cc}^D(\chi, \xi, t) + \frac{1}{i\hbar} B_{cc}(\chi, \xi) \cdot \rho_{cc}^D(\chi, \xi, t) \end{aligned} \quad (3.36a)$$

$$- \frac{i\hbar P}{m_0 E_g} \mathcal{E} \left(\chi - \frac{\xi}{2} \right) \rho_{cv}^D(\chi, \xi, t) + \frac{i\hbar P}{m_0 E_g} \mathcal{E} \left(\chi + \frac{\xi}{2} \right) \rho_{vc}^D(\chi, \xi, t)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_{cv}^D(\chi, \xi, t) = & + \frac{i\hbar}{2} \left\{ \left(\frac{\partial}{\partial \chi} m_{cv}^+ \right) \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} + \left(\frac{\partial}{\partial \chi} m_{cv}^- \right) \frac{\partial}{\partial \xi} + m_{cv}^+ \frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} + m_{cv}^- \frac{\partial}{\partial \chi} \frac{\partial}{\partial \xi} \right. \\ & \left. + m_{cv}^+ \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \right\} \rho_{cv}^D(\chi, \xi, t) + \frac{1}{i\hbar} B_{cv}(\chi, \xi) \cdot \rho_{cv}^D(\chi, \xi, t) \end{aligned} \quad (3.36b)$$

$$- \frac{i\hbar P}{m_0 E_g} \mathcal{E} \left(\chi - \frac{\xi}{2} \right) \rho_{cc}^D(\chi, \xi, t) + \frac{i\hbar P}{m_0 E_g} \mathcal{E} \left(\chi + \frac{\xi}{2} \right) \rho_{vv}^D(\chi, \xi, t)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_{vc}^D(\chi, \xi, t) = & - \frac{i\hbar}{2} \left\{ \left(\frac{\partial}{\partial \chi} m_{vc}^+ \right) \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} + \left(\frac{\partial}{\partial \chi} m_{vc}^- \right) \frac{\partial}{\partial \xi} + m_{vc}^+ \frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} + m_{vc}^- \frac{\partial}{\partial \chi} \frac{\partial}{\partial \xi} \right. \\ & \left. + m_{vc}^+ \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \right\} \rho_{vc}^D(\chi, \xi, t) + \frac{1}{i\hbar} B_{vc}(\chi, \xi) \cdot \rho_{vc}^D(\chi, \xi, t) \end{aligned} \quad (3.36c)$$

$$- \frac{i\hbar P}{m_0 E_g} \mathcal{E} \left(\chi - \frac{\xi}{2} \right) \rho_{vv}^D(\chi, \xi, t) + \frac{i\hbar P}{m_0 E_g} \mathcal{E} \left(\chi + \frac{\xi}{2} \right) \rho_{cc}^D(\chi, \xi, t)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_{vv}^D(\chi, \xi, t) = & - \frac{i\hbar}{2} \left\{ \left(\frac{\partial}{\partial \chi} m_{vv}^- \right) \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} + \left(\frac{\partial}{\partial \chi} m_{vv}^+ \right) \frac{\partial}{\partial \xi} + m_{vv}^- \frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} + m_{vv}^+ \frac{\partial}{\partial \chi} \frac{\partial}{\partial \xi} \right. \\ & \left. + m_{vv}^- \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \right\} \rho_{vv}^D(\chi, \xi, t) + \frac{1}{i\hbar} B_{vv}(\chi, \xi) \cdot \rho_{vv}^D(\chi, \xi, t) \end{aligned} \quad (3.36d)$$

$$- \frac{i\hbar P}{m_0 E_g} \mathcal{E} \left(\chi - \frac{\xi}{2} \right) \rho_{vc}^D(\chi, \xi, t) + \frac{i\hbar P}{m_0 E_g} \mathcal{E} \left(\chi + \frac{\xi}{2} \right) \rho_{cv}^D(\chi, \xi, t).$$

Mit demselben Argument wie im vorherigen Abschnitt sind Anteile in Abhängigkeit des lateralen Anteils des Wellenvektors \mathbf{k}_{\parallel} zu vernachlässigen [23, 73]. Auf der physikalischen Ebene spiegeln die Terme folgende Prozesse wider [S1, 72]:

- Diffusionsprozesse sind proportional zu den Funktionen $m_{\lambda\lambda'}^{\pm}(\chi, \xi)$ (3.33) (Diffusionsoperator).
- Driftprozesse innerhalb desselben Bands werden durch die auf der Diagonalen liegenden Komponente von $B_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi)$ (3.34) beschrieben (Intrabanddriftoperator). Effekte zwischen den Bändern sind proportional zur Funktion $\mathcal{E} \left(\chi \pm \frac{\xi}{2} \right)$ (3.32) (Interbanddriftoperator).

Interband-Wigner-Transportgleichung: Die mit der Weyl-Quantisierung verbundene Anwendung der Fourier-Transformation bezüglich der Relativkoordinate ξ führt zu Faltungsintegralen und darin enthaltenen Integrkernen.

Im Hinblick auf die generalisierten Terme bezüglich der Variation der effektiven Masse (3.33)

$\tilde{m}_{\lambda\lambda'}^\pm(\chi, \xi)$ werden die korrespondierenden Fourier-Transformierten als

$$\tilde{m}_{\lambda\lambda'}^\pm(\chi, k - k') = \int d\xi \exp(-i(k - k')\xi) \cdot m_{\lambda\lambda'}^\pm(\chi, \xi) \quad (3.37)$$

definiert. Für die Fourier-Transformierten der generischen Intradbanddriftoperatoren $B_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi)$ und Interbanddriftoperatoren $\mathcal{E}\left(\chi \pm \frac{\xi}{2}\right)$ ergeben sich die Ausdrücke

$$\tilde{V}_{\lambda\lambda'}(\chi, k - k') = \int d\xi \exp(-i(k - k')\xi) \cdot B_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi) \quad \lambda, \lambda' \in c, v \quad (3.38)$$

sowie

$$\tilde{\mathcal{E}}^\pm(\chi, k - k') = \int d\xi \exp(-i(k - k')\xi) \cdot \mathcal{E}\left(\chi \pm \frac{\xi}{2}\right) \quad \lambda, \lambda' \in c, v. \quad (3.39)$$

Mit diesen Beziehungen (3.37) - (3.39) lässt sich die WTG für den Interbandtransport aus der LVNG-RS (3.36) schließlich wie folgt schreiben:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f_{cc}(\chi, k, t) = & \\ & + \frac{i\hbar}{2} \int \frac{dk'}{2\pi} \frac{\partial}{\partial \chi} \tilde{m}_{cc}^-(\chi, k - k') \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} f_{cc}(\chi, k', t) \quad + \frac{i\hbar}{2} \int \frac{dk'}{2\pi} \frac{\partial}{\partial \chi} \tilde{m}_{cc}^+(\chi, k - k') (ik') f_{cc}(\chi, k', t) \\ & + \frac{i\hbar}{2} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{m}_{cc}^-(\chi, k - k') \frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} f_{cc}(\chi, k', t) \quad + \frac{i\hbar}{2} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{m}_{cc}^+(\chi, k - k') (ik') \frac{\partial}{\partial \chi} f_{cc}(\chi, k', t) \\ & + \frac{i\hbar}{2} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{m}_{cc}^-(\chi, k - k') (ik')^2 f_{cc}(\chi, k', t) \quad + \frac{1}{i\hbar} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{V}_{cc}(\chi, k - k') f_{cc}(\chi, k', t) \\ & - \frac{i\hbar P}{m_0 E_g} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{\mathcal{E}}^-(\chi, k - k') f_{cv}(\chi, k', t) \quad + \frac{i\hbar P}{m_0 E_g} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{\mathcal{E}}^+(\chi, k - k') f_{vc}(\chi, k', t) \end{aligned} \quad (3.40a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f_{cv}(\chi, k, t) = & \\ & + \frac{i\hbar}{2} \int \frac{dk'}{2\pi} \frac{\partial}{\partial \chi} \tilde{m}_{cv}^+(\chi, k - k') \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} f_{cv}(\chi, k', t) \quad + \frac{i\hbar}{2} \int \frac{dk'}{2\pi} \frac{\partial}{\partial \chi} \tilde{m}_{cv}^-(\chi, k - k') (ik') f_{cv}(\chi, k', t) \\ & + \frac{i\hbar}{2} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{m}_{cv}^+(\chi, k - k') \frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} f_{cv}(\chi, k', t) \quad + \frac{i\hbar}{2} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{m}_{cv}^-(\chi, k - k') (ik') \frac{\partial}{\partial \chi} f_{cv}(\chi, k', t) \\ & + \frac{i\hbar}{2} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{m}_{cv}^+(\chi, k - k') (ik')^2 f_{cv}(\chi, k', t) \quad + \frac{1}{i\hbar} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{V}_{cv}(\chi, k - k') f_{cv}(\chi, k', t) \\ & - \frac{i\hbar P}{m_0 E_g} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{\mathcal{E}}^-(\chi, k - k') f_{cc}(\chi, k', t) \quad + \frac{i\hbar P}{m_0 E_g} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{\mathcal{E}}^+(\chi, k - k') f_{vv}(\chi, k', t) \end{aligned} \quad (3.40b)$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} f_{vc}(\chi, k, t) = & \\
 & - \frac{i\hbar}{2} \int \frac{dk'}{2\pi} \frac{\partial}{\partial \chi} \tilde{m}_{vc}^+(\chi, k - k') \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} f_{vc}(\chi, k', t) \quad - \frac{i\hbar}{2} \int \frac{dk'}{2\pi} \frac{\partial}{\partial \chi} \tilde{m}_{vc}^-(\chi, k - k') (ik') f_{vc}(\chi, k', t) \\
 & - \frac{i\hbar}{2} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{m}_{vc}^+(\chi, k - k') \frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} f_{vc}(\chi, k', t) \quad - \frac{i\hbar}{2} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{m}_{vc}^-(\chi, k - k') (ik') \frac{\partial}{\partial \chi} f_{vc}(\chi, k', t) \\
 & - \frac{i\hbar}{2} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{m}_{vc}^+(\chi, k - k') (ik')^2 f_{vc}(\chi, k', t) \quad + \frac{1}{i\hbar} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{V}_{vc}(\chi, k - k') f_{vc}(\chi, k', t) \\
 & - \frac{i\hbar P}{m_0 E_g} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{\mathcal{E}}^-(\chi, k - k') f_{vv}(\chi, k', t) \quad + \frac{i\hbar P}{m_0 E_g} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{\mathcal{E}}^+(\chi, k - k') f_{cc}(\chi, k', t)
 \end{aligned} \tag{3.40c}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} f_{vv}(\chi, k, t) = & \\
 & - \frac{i\hbar}{2} \int \frac{dk'}{2\pi} \frac{\partial}{\partial \chi} \tilde{m}_{vv}^-(\chi, k - k') \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} f_{vv}(\chi, k', t) \quad - \frac{i\hbar}{2} \int \frac{dk'}{2\pi} \frac{\partial}{\partial \chi} \tilde{m}_{vv}^+(\chi, k - k') (ik') f_{vv}(\chi, k', t) \\
 & - \frac{i\hbar}{2} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{m}_{vv}^-(\chi, k - k') \frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} f_{vv}(\chi, k', t) \quad - \frac{i\hbar}{2} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{m}_{vv}^+(\chi, k - k') (ik') \frac{\partial}{\partial \chi} f_{vv}(\chi, k', t) \\
 & - \frac{i\hbar}{2} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{m}_{vv}^-(\chi, k - k') (ik')^2 f_{vv}(\chi, k', t) \quad + \frac{1}{i\hbar} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{V}_{vv}(\chi, k - k') f_{vv}(\chi, k', t) \\
 & - \frac{i\hbar P}{m_0 E_g} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{\mathcal{E}}^-(\chi, k - k') f_{vc}(\chi, k', t) \quad + \frac{i\hbar P}{m_0 E_g} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{\mathcal{E}}^+(\chi, k - k') f_{cv}(\chi, k', t).
 \end{aligned} \tag{3.40d}$$

Da die Integration über den gesamten Raum der Relativkoordinate erfolgt, stellen die statistische Dichtematrix und die in ihr enthaltenen Komponenten quadratintegrierbare Funktionen dar. Eine explizite Behandlung von Oberflächentermen entfällt. Wie bereits erwähnt, ist diese Grundannahme in der Praxis nicht gerechtfertigt und wird in Kapitel 5 thematisiert.

Im Vergleich zum herkömmlichen Intrabandmodell können einige Aussagen getroffen werden:

- Während die Wigner-Funktion des Intrabands eine reelle Funktion darstellt, nimmt sie bei Bandkopplungsmechanismen auch komplexe Werte an. Dieser Zusammenhang folgt unmittelbar aus den Komponenten f_{cv} und f_{vc} der Wigner-Funktion. Kopplungsmechanismen zwischen der Wigner-Funktion des Leitungsbands f_{cc} und des Valenzbands f_{vv} erfolgen ausschließlich über die Nebendiagonalen, f_{cv} und f_{vc} , der Wigner-Funktion. Vor diesem Hintergrund ist eine Interpretation der Nebendiagonalen als Rekombinations- und Generationsterme möglich. Eine anschauliche Begründung zur Komplexwertigkeit dieser Komponenten liegt in der Tatsache, dass sowohl der Rekombinations- als auch der Generationsprozess eine endliche Zeit in Anspruch nimmt. Dieses Verhalten ist mathematisch über eine abklingende Exponentialfunktion beschrieben, deren Fourier-Transformierte ein komplexes Spektrum aufweist. Dieses abklingende Verhalten spiegelt sich innerhalb der Imaginärteile der Komponenten f_{cv} und f_{vc} der Wigner-Funktion wider.
- Für große Bandlückenenergien E_g oder kleine Werte des Impulsmatrixelements $P \approx 0$ spielen Bandkopplungsmechanismen eine vernachlässigbar kleine Rolle, infolgedessen dominiert der unipolare Transport das Bauelementverhalten. Mit Vernachlässigung der Bandkopplungsmechanismen reduzieren sich diese Gleichungen dementsprechend zu der WTG für das Intrabandmodell mit ortsabhängiger effektiver Masse (3.27).

3.3.2. Modellreduktion für den Interbandtransport

Zur späteren Evaluation der numerischen Methoden ist es vorerst zweckmäßig, einige Näherungen durchzuführen. Dabei wird der Grundidee aus [50] gefolgt - das durch die Heterostruktur hervorgerufene Potenzial als auch das Potenzial aller weiteren externen Einflüsse werden in eine gemeinsame Funktion $U(z)$ eingebettet und die effektiven Massen des Leitungs- und Valenzbands werden als betragsmäßig gleich sowie örtlich invariant angenommen [50, 72–74]. Da sich die Banddiskontinuitäten sowohl unterschiedlich im Betrag als auch im Vorzeichen (Typ I/II und III-Heteroübergänge [45]) auf die verschiedenen Bänder verteilen, ist es offensichtlich, dass es sich bei dieser Näherung nur um eine für konzeptionelle Zwecke brauchbare Approximation handelt. Die Bandkantenenergien E_c und E_v stellen somit konstante Funktionen über den Ort dar. Diese können somit aus den Integralkernen $\tilde{B}_{\lambda\lambda'}$ (3.38) herausgezogen werden [72]. Das Vorgehen resultiert dann in Termen, die proportional zur Bandlückenenergie E_g sind sowie dem Integralkern entsprechend:

$$\tilde{U}(\chi, k - k') = \int d\xi \exp(-i(k - k')\xi) \cdot \left\{ U\left(\chi + \frac{\xi}{2}\right) - U\left(\chi - \frac{\xi}{2}\right) \right\} \equiv \int d\xi \exp(-i(k - k')\xi) \cdot \hat{U}(\chi, \xi). \quad (3.41)$$

Reduzierte Interband-Wigner-Transportgleichung: Mit diesen Approximationen ergibt sich eine deutlich vereinfachte WTG, die im Grundsatz die zu untersuchenden Bandkopplungsmechanismen beinhaltet [S1, 72–74]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f_{cc}(\chi, k, t) &= -\frac{\hbar k}{m} \frac{\partial}{\partial \chi} f_{cc}(\chi, k, t) + \frac{1}{i\hbar} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{U}(\chi, k - k') f_{cc}(\chi, k', t) \\ &\quad - \frac{i\hbar P}{m_0 E_g} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{\mathcal{E}}^-(\chi, k - k') f_{cv}(\chi, k', t) + \frac{i\hbar P}{m_0 E_g} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{\mathcal{E}}^+(\chi, k - k') f_{vc}(\chi, k', t) \end{aligned} \quad (3.42a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f_{cv}(\chi, k, t) &= \left\{ +\frac{i\hbar}{4m} \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} - \frac{i\hbar k^2}{m} + \frac{1}{i\hbar} E_g \right\} f_{cv}(\chi, k, t) + \frac{1}{i\hbar} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{U}(\chi, k - k') f_{cv}(\chi, k', t) \\ &\quad - \frac{i\hbar P}{m_0 E_g} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{\mathcal{E}}^-(\chi, k - k') f_{cc}(\chi, k', t) + \frac{i\hbar P}{m_0 E_g} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{\mathcal{E}}^+(\chi, k - k') f_{vv}(\chi, k', t) \end{aligned} \quad (3.42b)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f_{vc}(\chi, k, t) &= \left\{ -\frac{i\hbar}{4m} \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} + \frac{i\hbar k^2}{m} - \frac{1}{i\hbar} E_g \right\} f_{vc}(\chi, k, t) + \frac{1}{i\hbar} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{U}(\chi, k - k') f_{vc}(\chi, k', t) \\ &\quad - \frac{i\hbar P}{m_0 E_g} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{\mathcal{E}}^-(\chi, k - k') f_{vv}(\chi, k', t) + \frac{i\hbar P}{m_0 E_g} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{\mathcal{E}}^+(\chi, k - k') f_{cc}(\chi, k', t) \end{aligned} \quad (3.42c)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f_{vv}(\chi, k, t) &= +\frac{\hbar k}{m} \frac{\partial}{\partial \chi} f_{vv}(\chi, k, t) + \frac{1}{i\hbar} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{U}(\chi, k - k') f_{vv}(\chi, k', t) \\ &\quad - \frac{i\hbar P}{m_0 E_g} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{\mathcal{E}}^-(\chi, k - k') f_{vc}(\chi, k', t) + \frac{i\hbar P}{m_0 E_g} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{\mathcal{E}}^+(\chi, k - k') f_{cv}(\chi, k', t). \end{aligned} \quad (3.42d)$$

Für kleine Werte des Kane-Parameters P sowie große Bandlückenenergien E_g , nehmen die Interbandoperatoren kleine Werte nahe bei Null an. Die Interbandterme können dann vernachlässigt

werden. Mit dieser Näherung kann das System von gekoppelten Integro-Differenzialgleichungen (3.42) in die vorwiegend eingesetzte WTG (3.14) überführt werden. Dieses Modell kann somit als simple Multiband-Erweiterung des konventionellen Falls aufgefasst werden.

Reduzierte Interband-Liouville-von-Neumann-Gleichung: Die äquivalente Darstellung der reduzierten Interband-WTG (3.42) in Schwerpunkt- und Relativkoordinaten lautet:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{cc}^D = i \frac{\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial \chi} \frac{\partial}{\partial \xi} \rho_{cc}^D + \frac{1}{i\hbar} \hat{U}(\chi, \xi) \cdot \rho_{cc}^D - i \frac{\hbar P}{m_0 E_g} \mathcal{E} \left(\chi - \frac{\xi}{2} \right) \cdot \rho_{cv}^D + i \frac{\hbar P}{m_0 E_g} \mathcal{E} \left(\chi + \frac{\xi}{2} \right) \cdot \rho_{vc}^D \quad (3.43a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_{cv}^D &= i \frac{\hbar}{m} \left\{ \frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \right\} \rho_{cv}^D + \frac{1}{i\hbar} \{ E_g + \hat{U}(\chi, \xi) \} \rho_{cv}^D - i \frac{\hbar P}{m_0 E_g} \mathcal{E} \left(\chi - \frac{\xi}{2} \right) \cdot \rho_{cc}^D \\ &\quad + i \frac{\hbar P}{m_0 E_g} \mathcal{E} \left(\chi + \frac{\xi}{2} \right) \cdot \rho_{vv}^D \end{aligned} \quad (3.43b)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_{vc}^D &= -i \frac{\hbar}{m} \left\{ \frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \right\} \rho_{vc}^D + \frac{1}{i\hbar} \{ -E_g + \hat{U}(\chi, \xi) \} \rho_{vc}^D - i \frac{\hbar P}{m_0 E_g} \mathcal{E} \left(\chi - \frac{\xi}{2} \right) \cdot \rho_{vv}^D \\ &\quad + i \frac{\hbar P}{m_0 E_g} \mathcal{E} \left(\chi + \frac{\xi}{2} \right) \cdot \rho_{cc}^D \end{aligned} \quad (3.43c)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{vv}^D = -i \frac{\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial \chi} \frac{\partial}{\partial \xi} \rho_{vv}^D + \frac{1}{i\hbar} \hat{U}(\chi, \xi) \cdot \rho_{vv}^D - i \frac{\hbar P}{m_0 E_g} \mathcal{E} \left(\chi - \frac{\xi}{2} \right) \cdot \rho_{vc}^D + i \frac{\hbar P}{m_0 E_g} \mathcal{E} \left(\chi + \frac{\xi}{2} \right) \cdot \rho_{cv}^D, \quad (3.43d)$$

wobei für eine kompakte Notation auf die Darstellung der Funktionsargumente χ , ξ und t innerhalb der statistischen Dichtematrizen $\rho_{\lambda\lambda'}$ verzichtet wird. Diese soll im Folgenden auch als reduzierte Interband-LVNG-RS bezeichnet werden.

Kontinuitätsgleichung und Stromdichte: Die Momente nullter Ordnung der Wigner-Funktion beschreiben die Ladungsträgerdichten des jeweiligen Bands. Für die Elektronen- n_c und die Löcherdichte n_v ergeben sich daraus explizit:

$$n_c(\chi, t) = \int \frac{dk}{2\pi} f_{cc}(\chi, k, t) \quad \text{und} \quad n_v(\chi, t) = \int \frac{dk}{2\pi} f_{cc}(\chi, k, t). \quad (3.44)$$

Für die Herleitung der Stromdichte des jeweiligen Bands können an dieser Stelle zwei verschiedene Ansätze verfolgt werden.

- Auf der einen Seite kann der Tatsache Rechnung getragen werden, dass sich die Erwartungswerte unabhängig und entkoppelt aus der Wellenfunktion desselben Bands berechnen lassen [50]. Diese Eigenschaft gilt dann auch innerhalb des Wigner-Formalismus, sodass sich die Stromdichte des Leitungs- j_c und Valenzbands j_v als Momente erster Ordnung der Wigner-Funktionen des jeweiligen Bands unabhängig von der Komponenten f_{cv} und f_{vc} bestimmen lassen:

$$j_c(\chi, t) = q \int \frac{dk}{2\pi} \frac{\hbar k}{m} f_{cc}(\chi, k, t) \quad \text{und} \quad j_v(\chi, t) = q \int \frac{dk}{2\pi} \frac{\hbar k}{m} f_{vv}(\chi, k, t). \quad (3.45)$$

- Auf der anderen Seite lässt sich dieser Zusammenhang zu den Stromdichten geschlossen aus dem Wigner-Formalismus bestimmen. Hierzu wird eine Kontinuitätsgleichung durch Integration der gekoppelten Transportgleichungen (3.42) über die Wellenzahl aufgestellt, in ähnlicher Weise wie zuvor anhand des Intrabandmodells in Abschnitt 3.2 gezeigt worden ist. Aufgrund der ungeraden Parität der Intrabanddriftoperatoren, welche proportional zum Integralkern \tilde{U} sind, sind die entsprechenden Terme nach Integration und Ausnutzung der Ausblendeigenschaft der Dirac-Distribution Null. Der Interbanddriftoperator, welcher proportional zu den Funktionen $\tilde{\mathcal{E}}^\pm$ ist, verschwindet an der Stelle $\xi = 0$ hingegen nicht. Vielmehr können diese Terme in ihrer Gestalt als Generations- und Rekombinationsterme aufgefasst werden. Darüber hinaus gilt an der Stelle $\xi = 0$ der Zusammenhang:

$$\mathcal{E}^+(\chi, \xi = 0) = \mathcal{E}^-(\chi, \xi = 0). \quad (3.46)$$

Aus dieser Eigenschaft folgt unmittelbar, dass die letzten beiden Terme in (3.42a) und (3.42d), welche die Bandkopplungsmechanismen beschreiben, sich nach der Integration über die Wellenzahl k bei einer Addition gegenseitig kompensieren, da die korrespondierenden Terme zu f_{cv} sowie f_{vc} in (3.42a) und f_{cv} sowie f_{vc} in (3.42d) gerade unterschiedliche Vorzeichen aufweisen. Dieses Verhalten spiegelt die Physik adäquat wider, da der Generationsprozess den Rekombinationsprozess zwischen Elektronen- und Löchersystem in diesem Modell balancieren muss. Aus dem verbleibenden Ausdruck lassen sich nach der Akkumulation die beiden Stromdichten (3.45) ableiten.

Bei dem Kane-Modell [34], das bereits aufgrund der mathematischen Beschreibung von Bandkopplungsmechanismen im Hinblick auf die Formulierung von Randbedingungen benachteiligt ist [S1], unterliegt die Stromdichte einem komplexeren Zusammenhang, da im Vergleich zum vorgestellten Ansatz auf Grundlage des Kohn-Luttinger-Hamiltonoperators auch Bandkopplungsterme einbezogen werden müssen [91].

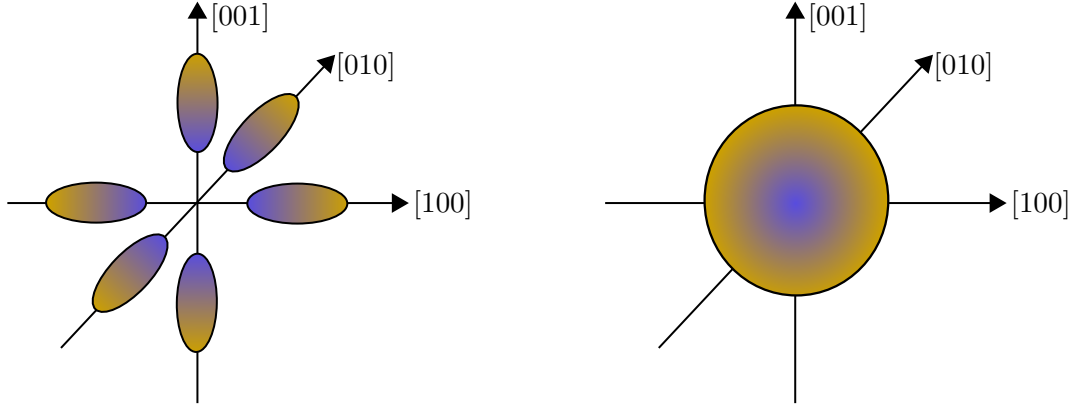
3.4. Multisubband-Quantentransport

In einer Vielzahl moderner Komponenten der Nanoelektronik, wie beispielsweise MOSFETs [19, 65, S10, 92–95], HEMTs [96] und Strukturen basierend auf Quantendrähten [79, 86, 87, 97], findet eine starke Quantisierung der Ladungsträger transversal zur Transportrichtung statt. Aufgrund dieser Quantisierung kann die transversale Richtung auch in der Basis der korrespondierenden Eigenlösungen des transversalen Anteils des Hamiltonoperators, den sogenannten Moden, dargestellt werden. Dies führt zu einer effektiv eindimensionalen Beschreibung des Transports, wodurch die mit numerisch hohem Aufwand verbundene Lösung von zwei- und dreidimensionalen Bauelementen umgangen werden kann. Die Umsetzung einer solchen Multisubband-Formulierung des Quantentransports [94], auch Mode-Space-Approximation genannt, wird im folgenden Abschnitt erläutert.

3.4.1. Mode-Space-Approximation

Unter Berücksichtigung der Anzahl der äquivalenten Leitungsbandminima, welche bei der Betrachtung von indirekten Halbleitern erforderlich ist (siehe Abbildung 3.3), wird für die Wellenfunktion ein weiterer Index ν eingeführt. Dieser Index adressiert das Tal ν des Leitungsbands,

in welchem der Transport stattfindet. Dies geschieht vor dem Hintergrund, dass die Mode-



(a) Äquivalente Leitungsband Minima (Täler) für einen indirekten Halbleiter, wie beispielsweise Si. (b) Leitungsband Minimum eines direkten Halbleiters, zum Beispiel GaAs.

Abbildung 3.3. Flächen konstanter Energie in Abhängigkeit der kristallographischen Richtungen für einen indirekten (a) und einen direkten (b) Halbleiter. Die Symmetrien der Energieflächen eines indirekten Halbleiters sind wesentlich komplexer und werden hier am Beispiel von Si über die sechs äquivalenten Täler einbezogen.

Space-Approximation (MSA) in dieser Arbeit systematisch für die Anwendung auf Double-Gate-Feldeffekttransistoren (DGFETs) entwickelt wird, welche typischerweise auch mit indirekten Halbleitern, wie z. B. Silizium, realisiert werden.

Eine mögliche Realisierung eines DGFETs ist in Abbildung 3.4 dargestellt. Da das Bauelement in die y -Richtung als periodisch angenommen wird, kann diese Koordinate separat betrachtet werden. Bei der Formulierung von Randbedingungen in Abschnitt 5.1.2 ist diese jedoch zu berücksichtigen. Für den DGFET lässt sich die Einteilchen-Schrödingergleichung somit als

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^\nu(x, z, t) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_z^\nu} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m_x^\nu} \frac{\partial^2}{\partial x^2}}_{\mathcal{H}_{\text{trans}}} + V(x, z, t) \right\} \psi^\nu(x, z, t) \quad (3.47)$$

darstellen [S10, 94, S13], wobei ψ^ν die Einhüllende des Tals ν beschreibt. Die effektive Masse m_α^ν wird als anisotrop bezüglich der Richtung α im Tal ν angenommen. Wie in Abbildung 3.4 schematisch gezeigt ist, kann der Hamiltonoperator für jeden Ort z' diagonalisiert werden. Unter Einführung der Subbänder E_n^ν und der korrespondierenden Moden Ψ_n^ν ergibt sich das folgende Eigenwertproblem:

$$\mathcal{H}_{\text{trans}}^\nu \Psi_n^\nu(x; z', t) = E_n^\nu(z', t) \cdot \Psi_n^\nu(x; z', t). \quad (3.48)$$

Dieses Eigenwertproblem (3.48) kann mithilfe numerischer Methoden für jeden Wert von z' innerhalb des Bauelements gelöst werden, wie schematisch in Abbildung 3.4 gezeigt ist. Die Abhängigkeit von z' und t ist hierbei nur noch parametrisch. Mit den bekannten orthonormalen Basen für die Paare z' und t , welche durch die Eigenlösungen Ψ_n^ν für jeden Ort z' aufgespannt werden, kann die Wellenfunktion ψ^ν in eine äquivalente Darstellung entwickelt werden:

$$\psi^\nu(x; z', t) = \sum_{n'} \phi_{n'}^\nu(z', t) \cdot \Psi_{n'}^\nu(x; z', t). \quad (3.49)$$

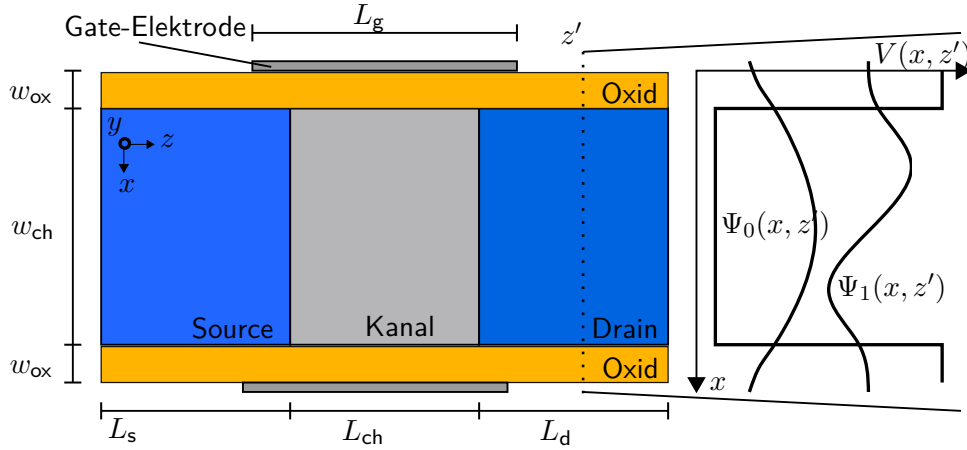


Abbildung 3.4. Schematische Abbildungen eines DGFETs. Zusätzlich ist der Querschnitt entlang der Ortskoordinate z' mit dem Potenzialverlauf $V(x, z')$ und der quantisierten Wellenfunktion, den Moden $\Psi_n(x, z')$, dargestellt. Der graue Bereich repräsentiert den Kanal der Länge L_{ch} in die Transportrichtung z . Die in Blau dargestellten Source- und Drain-Bereiche weisen eine Länge L_s , bzw. L_d , bezüglich der Transportrichtung auf und sind in der Regel hoch dotiert. Die Weite des Kanals sowie des Source- und Drain-Bereichs ist w_{ch} . Zwischen Transportbereich und der Gate-Elektrode (dunkelgrauer Bereich) ist eine Oxidschicht (orangefarbener Bereich) der Dicke w_{ox} aufgebracht. Die Länge der Gate-Elektrode beträgt L_g .

Physikalische Informationen bezüglich des Transportverhaltens liefern nur die Moden mit einer Eigenenergie in der Nähe des Fermi-Niveaus. Für moderne Bauelemente der Nanoelektronik mit einer starken Quantisierung erweist sich die Berücksichtigung weniger Entwicklungskoeffizienten innerhalb der Summe als hinreichend genau ($n' < 10$). Durch die Beschränkung auf die wesentlichen Entwicklungskoeffizienten ergibt sich ein erhebliches Potenzial im Hinblick auf die numerische Analyse des mehrdimensionalen Quantentransports.

Modale Schrödingergleichung: Ziel ist daher, eine Schrödingergleichung für den Entwicklungskoeffizienten $\phi_{n'}$ aufzustellen. Hierzu wird der Ansatz (3.49) in (3.47) eingesetzt und von links mit der adjungierten Eigenlösung $\Psi_n^{\dagger}(x; z, t)$ multipliziert und anschließend bezüglich der lateralen Richtung x integriert. Aus diesem Vorgehen ergibt sich schließlich die modale Schrödingergleichung [98]

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi_n^{\nu}(z, t) = -\frac{\hbar^2}{2m_z^{\nu}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \phi_n^{\nu}(z, t) + E_n^{\nu}(z, t) \cdot \phi_n^{\nu}(z, t) - \frac{\hbar^2}{2m_z^{\nu}} \sum_{n'} \left\{ S_{n',n}^{\nu}(z, t) \frac{\partial}{\partial z} + D_{n',n}^{\nu}(z, t) \right\} \phi_n^{\nu}(z, t) \quad (3.50)$$

mit den Koppellelementen:

$$S_{n',n}^{\nu}(z, t) = 2 \int dx \Psi_{n'}^{\nu*}(x; z; t) \cdot \frac{\partial}{\partial z} \Psi_n^{\nu*}(x; z; t) \quad (3.51)$$

$$D_{n',n}^{\nu}(z, t) = \int dx \Psi_{n'}^{\nu*}(x; z; t) \cdot \frac{\partial^2}{\partial z^2} \Psi_n^{\nu*}(x; z; t).$$

Im Folgenden wird angenommen, dass die Eigenlösungen unterschiedlicher Subbänder weder in der Zeit $\frac{\partial}{\partial t}\Psi_n^\nu(x; z, t) = 0$ noch über den Ort $\frac{\partial}{\partial z}\Psi_n^\nu(x; z, t) = 0$ miteinander gekoppelt sind [S10]. Entsprechende Koppelemente sind somit vernachlässigbar. Dies stellt die ungekoppelte MSA dar, die im Rahmen dieser Arbeit für Zeitbereichssimulationen erweitert worden ist.

In der Praxis ist die Annahme über die örtliche Veränderung des Modenprofils für DGFETs des hier betrachteten Typs (vgl. Abbildung 3.4) gerechtfertigt, da die Koppelemente (3.51) vernachlässigbar kleine Werte annehmen [98]. Die Grenzen der Anwendbarkeit der ungekoppelten MSA werden in [94, 99] diskutiert.

3.4.2. Modale Transportgleichungen

Die Beschreibung des Transportverhaltens erfolgt nun über die bereits bestimmte LVNG-RS (3.11). Hierzu werden die statistische Dichtematrix $\rho^\nu(z, z', x, x', t)$ des Tals ν unter Betrachtung der Diagonalen in y -Richtung¹⁰ sowie die modale statistische Dichtematrix $\rho_n^\nu(z, z', t)$ bezüglich der Transportrichtung definiert:

$$\rho^\nu(z, z', x, x', t) = \sum_n \underbrace{\sum_{k_y, k_z} \frac{1}{L} f_{3D}^{\text{FD}}(E_n^\nu(k_y, k_z)) \cdot \phi_n(z, t) \phi_n^\dagger(z', t)}_{\rho_n^\nu(z, z', t)} \Psi_n^\nu(x; z; t) \Psi_n^{\nu\dagger}(x'; z', t). \quad (3.52)$$

Die Normalisierungskonstante L bezieht sich auf die y -Richtung. Die Quantisierung der Energie bezüglich der transversalen Richtung x ist in Form von Subbändern mit dem Index n in der Fermi-Dirac-Statistik $f_{3D}^{\text{FD}}(E_n)$ enthalten.

Modale Liouville-von-Neumann-Gleichung: Die zeitliche Entwicklung der modalen statistischen Dichtematrix gehorcht nach der Transformation in Schwerpunkt- und Relativkoordinaten der LVNG-RS (3.11). Unter Berücksichtigung des Tals und des zugehörigen Subbands ergibt sich die modale Transportgleichung [S10]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_n^{D\nu}(\chi, \xi, t) = \frac{i\hbar}{m_z^\nu} \frac{\partial^2}{\partial \chi \partial \xi} \rho_n^{D\nu}(\chi, \xi, t) + \frac{1}{i\hbar} \left\{ E_n^\nu \left(\chi + \frac{1}{2} \xi, t \right) - E_n^\nu \left(\chi - \frac{1}{2} \xi, t \right) \right\} \rho_n^{D\nu}(\chi, \xi, t). \quad (3.53)$$

Mithilfe der modalen statistischen Dichtematrix (3.52) resultieren die modale Ladungsträgerdichte $n_{n'}^\nu(\chi, t)$ sowie die modale Stromdichte $j_{n'}^\nu(\chi, t)$ im Tal ν in:

$$n_{n'}^\nu(\chi, t) = \rho_{n'}^{D\nu}(\chi, \xi, t) \Big|_{\xi=0} \quad \text{und} \quad j_{n'}^\nu(\chi, t) = q \frac{\hbar}{m_z^\nu} \text{Im} \left\{ \frac{\partial}{\partial \xi} \rho_{n'}^{D\nu}(\chi, \xi, t) \Big|_{\xi=0} \right\}. \quad (3.54)$$

Die gesamte Ladungsträgerdichte innerhalb des Bauelements, welche über die Diagonale der statistischen Dichtematrix (3.52) definiert ist, setzt sich schließlich aus den modalen Anteilen

¹⁰Dies bedeutet, dass in der statistischen Dichtematrix $y = y'$ angesetzt wird. Aufgrund des Separationsansatzes mit der ebenen Welle $\propto \exp(ik_y y)$ hebt sich der Einfluss in der statistischen Dichtematrix gerade auf.

je Tal kumulativ zusammen:

$$n(x, z, t) = \sum_{\nu, n} n_n^\nu(z, t) \cdot |\Psi_n^\nu(x; z; t)|^2. \quad (3.55)$$

Hierbei ist die Schwerpunktkoordinate mit dem ursprünglichen Koordinatensystem über $\chi = z$ für die Relativkoordinate $\xi = 0$ verknüpft, wodurch eine direkte Formulierung im ursprünglichen System möglich ist. Die Stromdichte j erfordert hingegen keine Gewichtung mit den lateralen Eigenlösungen und kann direkt als Summe der Teilströme dargestellt werden:

$$j(z, t) = \sum_{\nu, n} j_n^\nu(z, t). \quad (3.56)$$

Modale Wigner-Transportgleichung: Die Herleitung der modalen WTG erfolgt unter Anwendung der Fourier-Transformation bezüglich der Relativkoordinate auf die LVNG-RS (3.53) und resultiert in

$$\frac{\partial}{\partial t} f_n^\nu(\chi, k, t) = -\frac{\hbar k}{m_z^\nu} \frac{\partial}{\partial \chi} f_n^\nu(\chi, k, t) + \frac{1}{i\hbar} \int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{V}_n^\nu(\chi, k - k', t) \cdot f_n^\nu(\chi, k', t), \quad (3.57)$$

wobei der modale Driftoperator als

$$\tilde{V}_n^\nu(\chi, k - k', t) = \int d\xi \exp(-i(k - k')\xi) \left\{ E_n^\nu\left(\chi + \frac{1}{2}\xi, t\right) - E_n^\nu\left(\chi - \frac{1}{2}\xi, t\right) \right\}. \quad (3.58)$$

definiert ist [79, 87]. Die Integration erfolgt über den gesamten Raum, sodass die Oberflächenterme verschwinden. Die modalen Ladungsträgerdichten $n_{n'}^\nu$ und modalen Stromdichten $j_{n'}^\nu$ ergeben sich schließlich aus den Momenten der Wigner-Funktion zu

$$n_{n'}^\nu(\chi, t) = \int \frac{dk}{2\pi} f_{n'}^\nu(\chi, k, t) \quad \text{und} \quad j_{n'}^\nu(\chi, t) = q \int \frac{dk}{2\pi} \frac{\hbar k}{m_z^\nu} f_{n'}^\nu(\chi, k, t), \quad (3.59)$$

mit denen die gesamte Ladungsträgerdichte n und Stromdichte j gemäß (3.55) und (3.56) zu berechnen sind. Die zur Lösung der Transportgleichung benötigten Randbedingungen werden in Kapitel 5 erarbeitet.

3.5. Modellierung der Elektron-Phonon-Wechselwirkung

Der Ausgangspunkt für die Modellierung der Elektron-Phonon-Wechselwirkungsmechanismen ist der Hamiltonoperator $\mathcal{H}_{\text{el,ion}}$ entsprechend (2.3). In der Born-Oppenheimer-Approximation¹¹ ist ein starres Gitter angenommen worden. Zur Berücksichtigung der Gitterschwingungen, denen als Quasiteilchen die Phononen zugeordnet werden können [6, 32], wird zusätzlich eine lineare Auslenkung um die Ruhelage, gemäß dem Hamiltonoperator $\mathcal{H}_{\text{el,ph}}$, modelliert. Unter Verwendung der zweiten Quantisierung lässt sich dieser konzeptionell als

$$\mathcal{H}_{\text{el,ph}} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} M_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \cdot (b_{-\mathbf{q}}^\dagger + b_{\mathbf{q}}) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{k}} \quad (3.60)$$

¹¹Siehe Abschnitt 2.1.2.

schreiben [32]. Hierbei stellen b_{-q}^\dagger (b_q) den Phonon-Erzeugungsoperator (-Vernichtungsoperator) und c_k^\dagger (c_k) den Elektron-Erzeugungsoperator (-Vernichtungsoperator) dar. Das Matrixelement $M_{k,q}$ beschreibt die Stärke der Elektron-Phonon-Kopplung. Zur Bestimmung der Dynamik ist die Heisenbergsche Bewegungsgleichung für den gesamten Hamiltonoperator zu lösen. Hierbei werden Bewegungsgleichungen für die Erwartungswerte $\langle b_q \rangle$ sowie $\langle c_k^\dagger c_{k'} \rangle$ aufgestellt¹². Aus diesem Vorgehen ergibt sich unmittelbar ein Hierarchie-Problem, welches auf der physikalischen Ebene in einem System mit Gedächtnis resultiert. Das Hierarchie-Problem der Bewegungsgleichungen wird bis zur phonon-assistierten Dichtematrix der Form $\langle c_{k+q}^\dagger b_q c_k \rangle$ entwickelt und anschließend mithilfe der Korrelationsentwicklung, Badannahme, Hartree-Fock-Faktorisierung und Random-Phase-Approximation genähert [100]. Durch analytische Integration kann die Differenzialgleichung für die phonon-assistierte Dichtematrix in die Bewegungsgleichung für die Verteilungsfunktion $\dot{f}_k = \langle c_k^\dagger c_k \rangle$ eingesetzt werden. Diese Gleichung stellt die sogenannte quantenkinetische Boltzmann-Transportgleichung dar. In der Markov-Näherung ergibt sich die semiklassische Formulierung schließlich konzeptionell zu [23]

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} f_k \right)_{\text{coll}} = - \sum_q W_{k,k+q} \cdot (1 - f_{k+q}) \cdot f_k + \sum_q W_{k+q,k} \cdot (1 - f_k) \cdot f_{k+q}, \quad (3.61)$$

wobei $W_{k,k+q}$ die Übergangswahrscheinlichkeit von Zustand $|k\rangle$ zu $|k+q\rangle$ pro Zeiteinheit darstellt.

3.5.1. Relaxationszeitnäherung

Bei der Annahme einer kleinen Auslenkung vom thermodynamischen f_{eq} Gleichgewicht lässt eine Störungsrechnung gemäß $f_k = f_{\text{eq}} + \tilde{f}_k$ eine weitere Vereinfachung zu [32]. Terme zweiter Ordnung werden vernachlässigt, während die Terme nullter Ordnung zusammengefasst werden. Hierbei wird die Relaxationszeit τ_k als

$$\frac{1}{\tau_k} = \sum_q W_{k,k+q} \cdot (1 - f_{\text{eq},k+q}) + W_{k+q,k} \cdot f_{\text{eq},k+q} \quad (3.62)$$

eingeführt [69, 70]. Weiterhin wird die Gleichgewichtsverteilung noch mit dem örtlichen Verhältnis der zu bestimmenden Ladungsträgerdichte n mit der Ladungsträgerdichte des Gleichgewichts n_{eq} gewichtet. Schließlich ergibt sich der Kollisionsoperator zur Beschreibung der Elektron-Phonon-Wechselwirkung zu [65, 69, 101]:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} f(\chi, k, t) \right)_{\text{coll}} = - \frac{1}{\tau} \left\{ f(\chi, k, t) - \frac{n(\chi, t)}{n_{\text{eq}}(\chi)} \cdot f_{\text{eq}}(\chi, k) \right\}. \quad (3.63)$$

Die Gleichgewichtsverteilung $f_{\text{eq}}(\chi, k)$ wird als Wigner-Funktion des thermodynamischen Gleichgewichts der untersuchten Komponente angesetzt. Der Kollisionsoperator wird den Transportgleichungen additiv hinzugefügt. Für die Anwendung von (3.63) innerhalb der LVNG-RS ist der Ausdruck noch in den Ortsraum zu transformieren.

¹²Die Verteilungsfunktion der Elektronen entspricht dabei $f_k = \langle c_k^\dagger c_k \rangle$ und die Verteilungsfunktion der Phononen entspricht $n_q = \langle b_q^\dagger b_q \rangle$.

4. Selbstkonsistenz - Hartree-Potenzial

Mit den entwickelten theoretischen Transportgleichungen des vorangegangenen Kapitels ist eine Berechnung der Ladungsträgerdichte in Abhängigkeit des Potenzials möglich. Die Tatsache, dass das Potenzial infolge von Ladungsträgerwechselwirkungsmechanismen selbst von der Ladungsträgerdichte abhängt, hat bisher keine Berücksichtigung gefunden. Dabei ist dieses nichtlineare Problem bereits als Selbstkonsistenz-Problem in der Hartree-Näherung im Grundlagenkapitel 2 vorgestellt worden.

Im Folgenden werden daher nun die entsprechende mathematische Theorie und deren Einbindung in den Quantentransport vorgestellt. Zunächst werden in Abschnitt 4.1 die Poisson-Gleichung und die möglichen Sätze von Randbedingungen erläutert. In Abschnitt 4.2 wird die Diskretisierung mithilfe der Finiten-Differenzen-Methode erarbeitet, bevor in Abschnitt 4.3 auf die verschiedenen Lösungsmöglichkeiten eingegangen wird.

4.1. Poisson-Gleichung

Mithilfe der Maxwell-Gleichungen der Elektrodynamik lässt sich die Poisson-Gleichung gemäß

$$-\nabla(\varepsilon(\mathbf{r})\nabla\phi(\mathbf{r})) = \varrho(\mathbf{r}) = q(N_D(\mathbf{r}) - n(\mathbf{r}) + p(\mathbf{r}) - N_A(\mathbf{r})) \quad (4.1)$$

herleiten. Die Raumladungsdichte ϱ setzt sich hierbei aus der örtlich festen Verteilung der Donatoren N_D und Akzeptoren N_A sowie den freien Elektronen- n und Löcherdichten p zusammen. Die Permittivität ε enthält sowohl den Vakuumanteil ε_0 als auch den orts- und materialabhängigen Anteil ε_r , die sogenannte relative Permittivität. Das Hartree-Potenzial U ist mit dem elektrostatischen Potenzial ϕ über die Beziehung

$$U(\mathbf{r}) = -q\phi(\mathbf{r}) \quad (4.2)$$

verknüpft [45, 68]. Mit dieser Beziehung (4.2) lässt sich die Poisson-Gleichung (4.1) schließlich in

$$\nabla(\varepsilon(\mathbf{r})\nabla U(\mathbf{r})) = \varrho(\mathbf{r}) = q^2(N_D(\mathbf{r}) - n(\mathbf{r}) + p(\mathbf{r}) - N_A(\mathbf{r})) \quad (4.3)$$

überführen.

Selbstkonsistenz-Problem: Gemeinsam mit der Poisson-Gleichung wird die Transportgleichung durch einen iterativen Ansatz gelöst, bis eine Konvergenz erreicht wird, wie zuvor schematisch in dem Flussdiagramm 1.1 dargestellt ist. Neben dem Gummel-Algorithmus [5], der eine

wechselseitige Lösung zwischen Transportgleichung und Poisson-Gleichung vorsieht, können die beiden Gleichungen auch gemeinsam in einem einzigen Schritt mit der Newton-Formulierung gelöst werden [68, 102]. Im Vergleich der beiden Algorithmen kann eine größere numerische Stabilität für die Newton-Formulierung festgestellt werden, die jedoch auch einen höheren Speicherbedarf aufweist und die numerische Lösung eines größeren linearen Gleichungssystems erfordert [68]. Der Stabilitätsbereich des Gummel-Algorithmus hat sich in dieser Arbeit jedoch als ausreichend erwiesen, sodass dieser für alle hier betrachteten Untersuchungen verwendet wird¹.

Zur Lösung der Poisson-Gleichung sind Randbedingungen zu formulieren. Im Umfeld des Quantentransports werden dabei zwei Arten unterschieden [S10, 68, 93]:

- **Neumann-Randbedingungen:** Mit den Neumann-Randbedingungen wird die Ableitung des Hartree-Potenzials auf den Randknoten (vgl. z. B. Abbildung 4.1) festgelegt. Bei der stationären Modellierung des Ladungsträgertransports liegt im Bereich der Kontakte gerade eine **Ladungsträgerneutralität** vor, d. h. die freie Ladungsträgerdichte kompensiert das Dotierungsprofil $\varrho = 0$. Die Ableitung des Hartree-Potenzials ist in diesen Bereichen dann null. Aufgrund der Ladungsträgerneutralität ist der Einsatzbereich der Neumann-Randbedingungen auf **stationäre Simulationen** limitiert. Die alleinige Anwendung der Neumann-Randbedingungen führt darüber hinaus zu Singularitätsproblemen in der Systemmatrix nach der Diskretisierung. Durch einen iterativen Lösungsansatz mit dem **Newton-Raphson-Verfahren** zur stationären Lösung, welcher in Abschnitt 4.3 beschrieben wird, können diese Probleme vermieden werden.
- **Dirichlet-Randbedingungen:** Mit den Dirichlet-Randbedingungen werden die Werte des Hartree-Potenzials auf den Randknoten festgelegt. In den Kontaktbereichen sind diese Werte über die entsprechenden externen, angelegten Spannungen gegeben. Da diese Randbedingungen keine Ladungsträgerneutralität in den Kontaktbereichen voraussetzen, sind die Dirichlet-Randbedingungen für **transiente Simulationen** geeignet. Aber auch innerhalb von **stationären Simulationen** finden die Dirichlet-Randbedingungen Einsatz. Während für die transiente Lösung nur die **direkte Lösung** des Systems physikalisch sinnvoll ist, kann die stationäre Lösung sowohl direkt als auch mit dem **Newton-Raphson-Verfahren** erfolgen. Beide Methoden zur Lösung werden in Abschnitt 4.3 vorgestellt.

4.2. Diskretisierung der Poisson-Gleichung

Die Poisson-Gleichung wird mithilfe der Finiten-Differenzen-Methode approximiert. In dieser Arbeit ist neben der effektiv eindimensionalen auch die zweidimensionale Formulierung im Hinblick auf DGFETs zu berücksichtigen.

4.2.1. Formulierung für eindimensionale Probleme

Der Transport innerhalb einer RTD kann beispielsweise über ein eindimensionales Transportproblem beschrieben werden. Dementsprechend ist auch die Poisson-Gleichung hinsichtlich der

¹Sehr große Zeitschrittweiten, bei denen die Newton-Formulierung vorzuziehen ist, wären ohnehin inadäquat zur Erfassung der Bauelementdynamik.

Transportrichtung zu lösen:

$$\frac{d}{dz} \left(\varepsilon(z) \frac{d}{dz} U(z) \right) = q(N_D(z) - n(z) + p(z) - N_A(z)). \quad (4.4)$$

Die Diskretisierung erfolgt mit N äquidistanten Abtastpunkten über die physikalische Ausdehnung L des betrachteten Bauelements, wie in Abbildung 4.1 dargestellt ist. Die diskreten

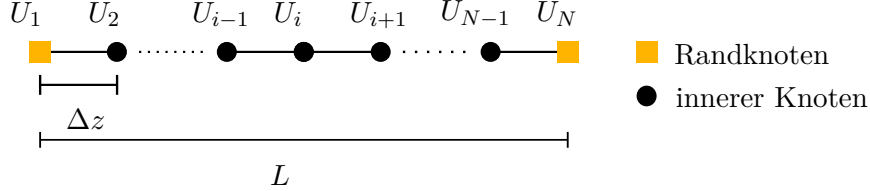


Abbildung 4.1. Schematische Darstellung der Diskretisierung eines eindimensionalen Bauelements der Länge L mit N Punkten. Die inneren Punkte des Rechengebiets werden über schwarze Kreise dargestellt, während die Randknoten über orangefarbene Kästchen gekennzeichnet werden.

Werte U_i repräsentieren hierbei die Werte des Hartree-Potenzials an der Stelle z_i entsprechend $U(z_i) = U_i$ des i -ten Knotens. Auf den inneren Knoten wird die Poisson-Gleichung über die Differenzengleichung

$$\frac{\varepsilon_{i+\frac{1}{2}}}{\Delta z^2} U_{i+1} - \frac{\varepsilon_{i+\frac{1}{2}} + \varepsilon_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta z^2} U_i + \frac{\varepsilon_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta z^2} U_{i-1} = \varrho_i = q(N_{D_i} - n_i + p_i - N_{A_i}) \quad (4.5)$$

approximiert [68]. Die Werte des Hartree-Potenzials auf den Randknoten, U_1 und U_N , sind über die Randbedingungen einzubinden. Da die Permittivität ε analytisch durch die Struktur- und Materialparameter vorgegeben ist, können die korrespondierenden Werte auf dem Zwischengitter entweder durch den Funktionswert an der exakten Stelle $\varepsilon_{i+\frac{1}{2}} = \varepsilon\left(\frac{z_i+z_{i+1}}{2}\right)$ bestimmt werden oder über den Zusammenhang $\varepsilon_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\varepsilon(z_i)+\varepsilon(z_{i+1})}{2}$ mithilfe der diskreten Funktionswerte auf dem Rechengitter gemittelt werden.

Schließlich wird die diskrete Form der Poisson-Gleichung (4.5) für jeden Knoten $1, 2, \dots, N$ innerhalb des Rechengebiets aufgestellt. Unter der Einführung der Abkürzungen

$$\alpha_i = \frac{\varepsilon_{i+\frac{1}{2}}}{\Delta z^2} \quad \text{und} \quad \gamma_i = -\frac{\varepsilon_{i+\frac{1}{2}} + \varepsilon_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta z^2}, \quad (4.6)$$

lässt sich die diskrete Poisson-Gleichung hiermit in einer Matrix-Vektor-Form

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \gamma_2 & \alpha_2 & & & & & \\ \alpha_2 & \gamma_3 & \alpha_3 & & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & & \alpha_{i-1} & \gamma_i & \alpha_{i+1} & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & \alpha_{N-3} & \gamma_{N-2} & \alpha_{N-2} \\ & & & & & \alpha_{N-2} & \gamma_{N-1} \end{pmatrix}}_{[M]} \underbrace{\begin{pmatrix} U_2 \\ \vdots \\ U_{i-1} \\ U_i \\ U_{i+1} \\ \vdots \\ U_{N-1} \end{pmatrix}}_U = \underbrace{\begin{pmatrix} \varrho_2 \\ \vdots \\ \varrho_{i-1} \\ \varrho_i \\ \varrho_{i+1} \\ \vdots \\ \varrho_{N-1} \end{pmatrix}}_{\boldsymbol{\varrho}} - \underbrace{\begin{pmatrix} \alpha_1 U_1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \alpha_{N-1} U_N \end{pmatrix}}_b \quad (4.7)$$

zusammenfassen. Für den Fall von Dirichlet-Randbedingungen wird angenommen, dass eine Seite, z. B. $U_1 = 0$, als Referenz dient und die andere Seite über $U_N = -qV_a$ die angelegte

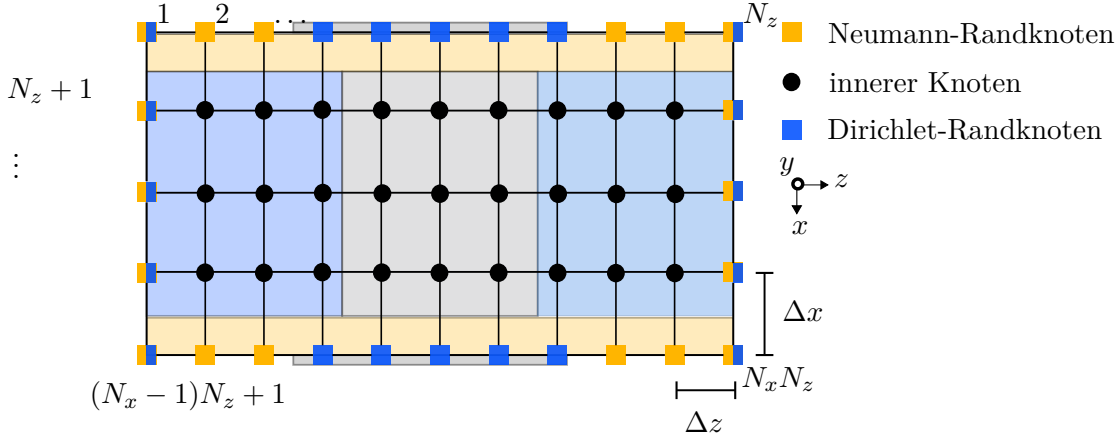


Abbildung 4.2. Schematische Darstellung der Diskretisierung eines DGFETs mit dem möglichen Satz an Randbedingungen, die entsprechend der Legende farblich hervorgehoben sind. Die Diskretisierungsparameter sowie Einsatzmöglichkeiten der Randbedingungen sind im Text definiert.

Farben für die unterschiedlichen Knotentypen gezeigt ist. Während auf der Gate-Elektrode die Randbedingungen immer durch Dirichlet-Randbedingungen festgelegt sind, können für den Source- und Drain-Kontakt je nach Simulation Dirichlet- oder Neumann-Randbedingungen formuliert werden. Für die stationären Analysen bieten sich die Neumann-Randbedingungen an den Source- und Drain-Kontakten an [93–95]

$$\begin{aligned} U(x, z) \Big|_{x, z \in \text{gate}} &= \mu + q\phi_m - q\chi_{\text{ch}} - qU_G, \\ \frac{\partial U(x, z)}{\partial \eta} \Big|_{x, z \notin \text{gate}} &= 0 \end{aligned}, \quad (4.12)$$

wohingegen sich für den zeitabhängigen Quantentransport Dirichlet-Randbedingungen an den Source- und Drain-Kontakten

$$\begin{aligned} U(x, z, t) \Big|_{x, z \in \text{gate}} &= \mu + q\phi_m - q\chi_{\text{ch}} - qU_G(t) \\ U(x, z, t) \Big|_{x, z \in \text{source/drain}} &= -qU_{\text{D/S}}(t) \\ \frac{\partial U(x, z, t)}{\partial \eta} \Big|_{x, z \notin \text{gate, source, drain}} &= 0. \end{aligned} \quad (4.13)$$

als erfolgreich erweisen [S10, S13]. Dabei stellen χ_{ch} die Elektronenaffinität des Kanalmaterials, ϕ_m die Austrittsarbeit des Metalls, U_G die angelegte Spannung an der Gate- und $U_{\text{D/S}}$ die angelegten Spannungen an Source- und Drain-Elektrode dar.

Im Vergleich zum eindimensionalen Fall ist eine explizite Angabe der Systemmatrix aufgrund der komplexeren Gestalt der Randbedingungen nicht mehr trivial. Konzeptionell resultiert der Diskretisierungsprozess in Analogie zum eindimensionalen Fall in einer Matrix-Vektor-Form. Einige Aspekte bei der Implementierung sollen kurz beleuchtet werden.

Implementierungsaspekte: Neben den Knotennummern der Diskretisierungspunkte ist der korrespondierende Knotentyp zu berücksichtigen, der die Informationen über innere Punkte oder Randpunkte enthält. Für den Fall eines Randpunktes kann noch die Untergliederung in Dirichlet- oder Neumann-Knoten vorgenommen werden (vgl. 4.2).

Bezüglich der Assemblierung der Systemmatrix wird die Differenzengleichung (4.11) entsprechend

$$\alpha_{i+1,j} \cdot U_{i+1,j} + \alpha_{i-1,j} \cdot U_{i-1,j} + \alpha_{i,j} \cdot U_{i,j} + \alpha_{i,j-1} \cdot U_{i,j-1} + \alpha_{i,j+1} \cdot U_{i,j+1} = q\rho_{i,j} \quad (4.14)$$

umformuliert. Die Bestimmung der Koeffizienten $\alpha_{i,j}$ erfolgt durch trivialen Vergleich mit (4.11). Die Koeffizienten erfüllen dabei die folgende Relation:

$$\alpha_{i,j} = -(\alpha_{i+1,j} + \alpha_{i-1,j} + \alpha_{i,j+1} + \alpha_{i,j-1}). \quad (4.15)$$

Hiermit kann die dünnbesetzte Diskretisierungsmatrix aus den Differenzenquotienten unter direkter Einarbeitung der Dirichlet- sowie Neumann-Randbedingungen im COO-Format aufgestellt werden, wie durch den Algorithmus in Anhang B explizit beschrieben ist.

4.3. Methoden zur Lösung der Poisson-Gleichung

Nach dem Diskretisierungsprozess kann die Poisson-Gleichung konzeptionell in einer Matrix-Vektor-Form

$$[\hat{M}] \cdot U = \varrho - \hat{b} \quad (4.16)$$

dargestellt werden. Neben der direkten Lösung des linearen Gleichungssystems wird auch ein Newton-Raphson-Verfahren [68, 102] zur Lösung herangezogen.

4.3.1. Direktes Lösungsverfahren

Ausgangspunkt für das direkte Lösungsverfahren ist das Gleichungssystem (4.16). Aus diesem ergibt sich das Hartree-Potenzial in Abhängigkeit der Raumladungsdichte und der angelegten Spannung direkt zu:

$$U = [\hat{M}]^{-1} (\varrho - \hat{b}). \quad (4.17)$$

Das direkte Lösungsverfahren findet überwiegend bei der Beschreibung des transienten Quantentransports seinen Einsatz [S10, 68], aber auch bei der Modellierung des stationären Quantentransports kann das direkte Verfahren eingesetzt werden. Jedoch neigt das Verfahren zu numerischen Instabilitäten und schlechten Konvergenzeigenschaften im Vergleich zum Newton-Raphson-Verfahren [68]. Daher findet das direkte Lösungsverfahren in der Praxis beim stationären Quantentransport keine Anwendung.

Bezüglich des transienten Quantentransports beschreibt (4.17) dann die Anpassung des Hartree-Potenzials an die Raumladungsdichte zum Zeitpunkt t_i :

$$U(t_i) = [\hat{M}]^{-1} (\varrho(t_i) - \hat{b}(t_i)). \quad (4.18)$$

Der Vektor $\hat{\mathbf{b}}(t_i)$ beinhaltet dabei den zeitabhängigen Verlauf der angelegten Spannung. Um die Physik adäquat wiederzugeben und Singularitätsprobleme innerhalb der Matrix $[\hat{\mathbf{M}}]^{-1}$ zu vermeiden, sind die Werte an den Kontakten durch Dirichlet-Randbedingungen festgelegt [S10, 68, S13, 102].

4.3.2. Newton-Raphson-Verfahren

Hinsichtlich der Formulierung des Newton-Raphson-Verfahrens ist es notwendig, ein Funktional F in Abhängigkeit des Hartree-Potenzials zu definieren [68]:

$$F \{ \mathbf{U} \} = [\mathbf{M}] \cdot \mathbf{U} - \mathbf{q}. \quad (4.19)$$

Die Lösung des Gleichungssystems korrespondiert mit der Nullstellensuche des Funktionals. Mithilfe der Taylor-Entwicklung kann eine Linearisierung des Funktionals vorgenommen werden. Hierdurch kann der Wert zum darauffolgenden Iterationsschritt \mathbf{U}^{s+1} in Abhängigkeit des aktuellen Hartree-Potenzials zum Iterationsschritt \mathbf{U}^s bestimmt werden:

$$F \{ \mathbf{U}^s \} + \left. \frac{dF \{ \mathbf{U} \}}{d\mathbf{U}} \right|_{\mathbf{U}=\mathbf{U}^s} \underbrace{(\mathbf{U}^{s+1} - \mathbf{U}^s)}_{\delta \mathbf{U}^s} = 0. \quad (4.20)$$

Der Ausdruck $\frac{dF \{ \mathbf{U} \}}{d\mathbf{U}}$ repräsentiert die sogenannte Jacobi-Matrix. Über die Abweichung der Hartree-Potenziale $\delta \mathbf{U}^s$ ist ein Abbruchkriterium für die selbstkonsistente Schleife² zu bestimmen. In der Praxis wird diesbezüglich eine Toleranz festgelegt. In dieser Arbeit stützt sich der Vergleichswert für das Abbruchkriterium auf die L₂-Norm der Abweichung $\|\delta \mathbf{U}^s\|$.

Implementierungsaspekte: Ferner wird als Startlösung für das Potenzial im Nichtgleichgewicht ein linearer Spannungsabfall über dem Bauelement angenommen. Eine gute Startlösung ist entscheidend für eine schnelle Konvergenz der Ergebnisse. Zusätzlich beeinflusst die Startlösung für das Newton-Raphson-Verfahren auch die Stabilität des Algorithmus. Um diesen Aspekt zu adressieren, werden innerhalb der Implementierung die jeweils in der Toleranz konvergier-ten Endlösungen des Hartree-Potenzials gespeichert. Mithilfe von zwei aufeinander folgenden Spannungen kann der Startwert für das nächste Hartree-Potenzial durch lineare Interpolation berechnet werden. Hierdurch werden hervorragende Startlösungen erzielt, die den Algorithmus deutlich beschleunigen und stabilisieren.

Falls eine Vorberechnung nicht möglich sein sollte und der Algorithmus divergiert, besteht die Möglichkeit mit einem Overrelaxation-Parameter β eine Dämpfung in das System einzubringen

$$\mathbf{U}^{s+1} = \mathbf{U}^s + \beta \cdot \delta \mathbf{U}^s, \quad (4.21)$$

wobei $\beta \in [0, 1]$ ist. Da die Ladungsträgerdichte exponentiell von der Spannung abhängt, können ein "Overshoot" und die damit verbundenen numerischen Instabilitäten durch die langsamere Anpassung vermieden werden. Der Preis für die Stabilität wird dann jedoch über längere Rechenzeiten erkauft.

²Siehe hierzu vorherige Abbildung 1.1.

Formulierung der Jacobi-Matrix: Innerhalb der Jacobi-Matrix ist eine Differenziation der Raumladungsdichte bezüglich des Hartree-Potenzials auszuwerten. Für diese Terme wird angenommen, dass die Abhängigkeit der Raumladungsdichte vom Potenzial durch eine Boltzmann-Verteilung approximiert werden kann [22, 68]. Hiermit ergeben sich die Ausdrücke

$$\begin{aligned} n(U) &= N_c \cdot \exp\left(+\frac{U}{k_B T/q}\right) \rightarrow \frac{d}{dU} n = +\frac{q}{k_B T} n \\ p(U) &= N_v \cdot \exp\left(-\frac{U}{k_B T/q}\right) \rightarrow \frac{d}{dU} p = -\frac{q}{k_B T} p \end{aligned} \quad (4.22)$$

für die Elektronen- n und Löcherdichte p . Die formelmäßigen Zusammenhänge für die effektiven Zustandsdichten N_c und N_v sind an dieser Stelle irrelevant.

5. Theorie offener Quantensysteme

Die Beschreibung von Komponenten der Nanoelektronik kann nicht als ein geschlossenes Quantensystem betrachtet werden. Durch die Kontakte findet ein ständiger Austausch der Teilchen im Bauelement mit der Umgebung statt. Dies ermöglicht schließlich erst einen Stromfluss. Zur Modellierung dieser Verhältnisse werden offene Randbedingungen benötigt [23, 104–106].

Zur Formulierung der offenen Randbedingungen wird das Bauelement konzeptionell um sogenannte Reservoirs erweitert, wie zuvor in Abbildung 3.1 dargestellt worden ist. Diese Reservoirs besitzen dieselben materiellen Eigenschaften wie die angrenzende Schicht des Bauelements und sind in ihrer theoretischen Beschreibung bis ins Unendliche ausgedehnt. Das Reservoir ist in der Lage, alle eintretenden Teilchen reflexionsfrei zu absorbieren und beliebig viele Teilchen gemäß der vorliegenden Statistik zu injizieren, ohne selbst zu verarmen [23, 104, 105].

Auf der Grundlage des Reservoirs werden in dem folgenden Abschnitt 5.1 zunächst die Randbedingungen für die Schwerpunktkoordinate, die sogenannten Inflow-Randbedingungen [23] erarbeitet, sodass eine Modellierung der Bauelemente als offene Quantensysteme ermöglicht wird. Einschränkungen in der Anwendbarkeit dieses Konzepts werden genannt. Anschließend erfolgt in Abschnitt 5.2 die systematische Entwicklung und Analyse von neuartigen Randbedingungen [S4–S6, S8] für die Relativkoordinate, mit welcher Oberflächenterme infolge eines abgeschlossenen Rechengebiets adäquat adressiert werden.

5.1. Inflow-Randbedingungen für die Schwerpunktkoordinate

Zur Herleitung der Inflow-Randbedingungen wird ein Reservoir untersucht, welches durch die Fermi-Dirac-Statistik mit dem Fermi-Niveau μ beschrieben wird. In dem Reservoir lässt sich die statistische Dichtematrix entsprechend (2.35)

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\mathbf{k}} f_{3D}^{\text{FD}}(E(\mathbf{k}) - \mu) \cdot \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \cdot \psi_{\mathbf{k}}^{\dagger}(\mathbf{r}') \quad (5.1)$$

formulieren, wobei die Wellenfunktion $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ die Schrödingergleichung des Bauelements erfüllt.

In Abschnitt 5.1.1 wird zunächst aus der statistischen Dichtematrix die Inflow-Randbedingung für eindimensionale und anschließend in Abschnitt 5.1.2 für zweidimensionale Transportprobleme in Kombination mit der MSA erarbeitet. Kritikpunkte, die in einem unmittelbaren Zusammenhang mit den Inflow-Randbedingungen stehen, werden in Abschnitt 5.1.3 genannt. Abschließend erfolgt die semiklassische Berechnung des Fermi-Niveaus in Abschnitt 5.1.4.

5.1.1. Formulierung für eindimensionale Transportprobleme

Die statistische Dichtematrix wird in ihrer Diagonalen ($\mathbf{r}_{||} = \mathbf{r}'_{||}$) lateral zur Transportrichtung z betrachtet

$$\rho(z, z') = \frac{1}{A} \sum_{k_z} \sum_{\mathbf{k}_{||}} f_{3D}^{\text{FD}}(E(\mathbf{k}_{||}, k_z) - \mu) \phi_{k_z}(z) \phi_{k_z}^\dagger(z'), \quad (5.2)$$

wobei der Wellenvektor in einen lateralen $\mathbf{k}_{||}$ und einen longitudinalen Anteil k_z unterteilt wird. Die Abhängigkeit der Wellenfunktion vom lateralen Wellenvektor kann für die hier betrachteten Modelle vernachlässigt werden [23, 24]. Eine Berücksichtigung erfolgt z. B. in [85]. Die Auswertung der Summe über den lateralen Wellenvektor $\mathbf{k}_{||}$ führt unter der Verwendung von $\sum_{\mathbf{k}_{||}} \rightarrow \frac{A}{(2\pi)^2} \int dk_{||} 2\pi k_{||}$, wobei $k_{||}$ in Polarkoordinaten dargestellt wird, zu:

$$\rho(z, z') = \sum_{k_z} f_{2D}^{\text{FD}}(E(k_z) - \mu) \phi_{k_z}(z) \phi_{k_z}^\dagger(z'). \quad (5.3)$$

Hierbei wird das zweidimensionale Fermigas $f_{2D}^{\text{FD}}(E(k_z) - \mu)$ entsprechend

$$f_{2D}^{\text{FD}}(E(k_z) - \mu) \equiv \frac{m k_B T}{2\pi \hbar^2} \cdot \ln \left\{ 1 + \exp \left(-\frac{E(k_z) - \mu}{k_B T} \right) \right\} \quad (5.4)$$

definiert. In dem Reservoir kann die Wellenfunktion als ebene Welle $\phi_{k_z}(z) = \exp(ik_z z)/\sqrt{L}$ mit L als Normierungskonstante interpretiert werden [23]. Die statistische Dichtematrix in Schwerpunkt- und Relativkoordinaten innerhalb des Reservoirs resultiert somit in

$$\rho^D(\chi, \xi) = \frac{1}{L} \sum_{k_z} f_{2D}^{\text{FD}}(E(k_z) - \mu) \exp(ik_z \xi) \quad (5.5)$$

und liefert bereits einen Zusammenhang für die Randbedingungen in der LVNG-RS. Die äquivalente Darstellung von (5.5) im Phasenraum ergibt sich unter Anwendung von (2.54) zu:

$$\begin{aligned} f(\chi, k) &= \frac{1}{L} \sum_{k_z} f_{2D}^{\text{FD}}(E(k_z) - \mu) \int d\xi \exp(-ik\xi) \exp(ik_z \xi) = \frac{2\pi}{L} \sum_{k_z} f_{2D}^{\text{FD}}(E(k_z) - \mu) \delta(k_z - k) \\ &= \int dk_z f_{2D}^{\text{FD}}(E(k_z) - \mu) \delta(k_z - k) = f_{2D}^{\text{FD}}(E(k) - \mu). \end{aligned} \quad (5.6)$$

Die Werte der Wigner-Funktion im Reservoir werden folglich durch das zweidimensionale Fermigas angegeben. Zur Formulierung der Inflow-Randbedingungen [23, 24] werden die am linken Kontakt L eintretenden Teilchen aus dem Reservoir bei $\chi = 0$ mit den positiven Anteilen der Wellenzahl k und am rechten Kontakt R bei $\chi = L_\chi$ mit den negativen Anteilen der Wellenzahl k identifiziert:

$$\begin{aligned} f(\chi = 0, k > 0) &= 2_{\text{Spin}} \cdot f_{2D}^{\text{FD}}(E_L(k) - \mu_L) && \text{für } k > 0 \\ f(\chi = L_\chi, k < 0) &= 2_{\text{Spin}} \cdot f_{2D}^{\text{FD}}(E_R(k) - \mu_R) && \text{für } k < 0. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Außerdem soll am Übergang zwischen Reservoir und Bauelement ein lokales Fließgleichgewicht herrschen, sodass keine örtliche Abhängigkeit der Verteilungsfunktion in diesen Bereichen vorliegt [22, 23, S9]:

$$\frac{\partial}{\partial \chi} f(\chi = 0, k) = 0 \quad \text{und} \quad \frac{\partial}{\partial \chi} f(\chi = L_\chi, k) = 0. \quad (5.8)$$

Mit der inversen Fourier-Transformation ergibt sich der Zusammenhang für die Randbedingungen der LVNG-RS.

Erweiterung auf den Multiband-Quantentransport: Die Bandkopplungsmechanismen sind im Kohn-Luttinger-Modell proportional zum Gradienten des Potentials, wie zuvor in Abschnitt 3.3 erläutert. Das Potenzial ist innerhalb des Reservoirs per Definition eine örtlich konstante Funktion, wodurch die Bänder in diesem Bereich entkoppelt sind. Im Unterschied zum Kane-Modell¹ ist die mathematische Formulierung von Inflow-Randbedingungen deutlich leichter [S1, S11].

Die in das Leitungsband eintretenden Elektronen werden entsprechend

$$\begin{aligned} f_{cc}(\chi = 0, k > 0) &= 2_{\text{Spin}} \cdot f_{2\text{D}}^{\text{FD}}(E_{c,L}(k) - \mu_L) && \text{für } k > 0 \\ f_{cc}(\chi = L_\chi, k < 0) &= 2_{\text{Spin}} \cdot f_{2\text{D}}^{\text{FD}}(E_{c,R}(k) - \mu_R) && \text{für } k < 0 \end{aligned} \quad (5.9)$$

und die ins Valenzband injizierten Löcher werden durch

$$\begin{aligned} f_{vv}(\chi = 0, k < 0) &= 2_{\text{Spin}} \cdot f_{2\text{D}}^{\text{FD}}(\mu_L - E_{v,L}(k)) && \text{für } k < 0 \\ f_{vv}(\chi = L_\chi, k > 0) &= 2_{\text{Spin}} \cdot f_{2\text{D}}^{\text{FD}}(\mu_R - E_{v,R}(k)) && \text{für } k > 0 \end{aligned} \quad (5.10)$$

beschrieben. Auf der physikalischen Ebene entspricht dies einer Injektion von Löchern an der Stelle, wo die Elektronen aus dem System austreten [S1]. Die negative effektive Masse der Löcher findet in der Darstellung (5.10) bereits Berücksichtigung.

Für die Elemente der Nebendiagonalen, f_{cv} und f_{vc} , ist eine Injektion von Teilchen aus dem Reservoir in das Bauelement hinein aus der physikalischen Perspektive für die hier betrachteten Fälle des Quantentransports nicht gerechtfertigt², sodass

$$f_{cv}(\chi = 0, k > 0) = f_{vc}(\chi = 0, k > 0) = f_{cv}(\chi = L_\chi, k < 0) = f_{vc}(\chi = L_\chi, k < 0) = 0 \quad (5.11)$$

gilt. Zusätzlich herrscht am Übergang zwischen Bauelement und Reservoir ein lokales Fließgleichgewicht, woraus sich die Beziehungen

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \chi} f_{cc}(\chi = 0, k) = 0 \quad \frac{\partial}{\partial \chi} f_{vv}(\chi = 0, k) = 0 \quad \frac{\partial}{\partial \chi} f_{cv/vc}(\chi = 0, k) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial \chi} f_{cc}(\chi = L_\chi, k) = 0 \quad \frac{\partial}{\partial \chi} f_{vv}(\chi = L_\chi, k) = 0 \quad \frac{\partial}{\partial \chi} f_{cv/vc}(\chi = L_\chi, k) = 0 \end{aligned} \quad (5.12)$$

ergeben [S1, S11]. Die Randbedingungen für die Analysen auf Basis der LVNG-RS ergeben sich unmittelbar aus der inversen Fourier-Transformation der vorliegenden Randbedingungen (5.9)-(5.12).

¹Beim Kane-Modell ist die Interbandkopplung proportional zum Gradienten der Wellenfunktion. Die Kopplung ist somit auch im Bereich des Reservoirs noch vorhanden.

²Diese beiden Komponenten können genau dann Werte ungleich Null aufweisen, wenn eine Generation von Ladungsträgern innerhalb der Kontakte stattfindet. Denkbar wäre eine Anwendung für optische Detektoren, bei denen auch im Bereich der Kontakte eine starke Generation von Ladungsträgern durch die optisch einfallenden Wellen hervorgerufen wird.

5.1.2. Formulierung für zweidimensionale Transportprobleme

Auf Grundlage der modalen statistischen Dichtematrix des Tals ν (3.52) gemäß

$$\rho_n^\nu(z, z') = \frac{1}{L} \sum_{k_y, k_z} f_{3D}^{\text{FD}}(E_n^\nu(k_y, k_z) - \mu) \phi_{n, k_z}^\nu(z) \cdot \phi_{n, k_z}^{\nu\dagger}(z') \quad (5.13)$$

kann die Summe über die Wellenzahl k_y ausgeführt werden. Die Injektion bei der Wellenzahl k_z in das Band n wird an dieser Stelle explizit in der obigen Darstellung aufgeführt. Unter der Ausnutzung der Relation $\sum_{k_y} = \frac{L}{2\pi} \cdot 2 \int_0^\infty dk_y$ resultiert die Integration in

$$\rho_n^\nu(z, z') = \sum_{k_z} f_{1D}^{\text{FD}}(E_n^\nu(k_z) - \mu) \phi_{n, k_z}^\nu(z) \cdot \phi_{n, k_z}^{\nu\dagger}(z'), \quad (5.14)$$

wobei die Abkürzung für das eindimensionale Fermigas

$$f_{1D}^{\text{FD}}(E_n^\nu(k_z) - \mu) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dk_y \frac{1}{1 + \exp\left\{\frac{E_n^\nu(k_y, k_z) - \mu}{k_B T}\right\}} \quad (5.15)$$

eingeführt wird [79, 93]. Die mathematische Beschreibung des eindimensionalen Fermigas entspricht dem Fermi-Integral $\mathcal{F}_{-1/2}$ der Ordnung $-1/2$ [95]. Die Bandstruktur ist durch die quadratische Relation

$$E_n^\nu(k_y, k_z) = E_n^\mu + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y^\nu} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_z^\nu} \quad (5.16)$$

gegeben³. Für die Verteilungsfunktion (5.15) existiert keine geschlossene Lösung, sodass diese mithilfe numerischer Integrationsverfahren zu bestimmen ist. Die Wellenfunktion im Reservoir wird über ebene Wellen angesetzt. Hiermit ergibt sich die statistische Dichtematrix in Schwerpunkt- und Relativkoordinaten zu:

$$\rho_n^{D\nu}(\chi, \xi) = \frac{1}{L} \sum_{k_z} f_{1D}^{\text{FD}}(E_n^\nu(k_z) - \mu) \exp(ik_z \xi). \quad (5.17)$$

Nach Anwendung der Fourier-Transformation lässt sich die modale Wigner-Funktion des Tals ν innerhalb des Reservoirs als $f_n^\nu(\chi, k) = f_{1D}^{\text{FD}}(E_n^\nu(k) - \mu)$ schreiben, woraus die Inflow-Randbedingungen folgen [79, 93]:

$$\begin{aligned} f_n^\nu(\chi = 0, k > 0) &= 2_{\text{Spin}} \cdot f_{1D}^{\text{FD}}(E_{n,L}^\nu(k) - \mu_L) && \text{für } k > 0 \\ f_n^\nu(\chi = L_\chi, k < 0) &= 2_{\text{Spin}} \cdot f_{1D}^{\text{FD}}(E_{n,R}^\nu(k) - \mu_R) && \text{für } k < 0. \end{aligned} \quad (5.18)$$

5.1.3. Kritikpunkte

Die Angabe einer physikalisch gerechtfertigten Verteilungsfunktion ist ein nicht triviales Problem und aktuell stark debattiertes Forschungsfeld [25, 26, 29, 30, 77, 107, 108], dessen Kritikpunkte im Folgenden zusammengefasst werden:

³Potenziale durch äußere angelegte Spannungen sind bereits in dem Bandminimum E_n^ν enthalten.

- **Eindeutigkeit der Wigner-Funktion und Nichtlokalität:** In [25, 29] wird das Konzept für den kohärenten Fall gänzlich infrage gestellt, da die Lösung der WTG unter Verwendung der Inflow-Randbedingungen nicht eindeutig ist. Unter Berücksichtigung von semiklassischen Streuoperatoren, wie dem Boltzmann-Kollisionsoperator [23, 69] und der Relaxationszeitnäherung [69, 70], ist die Lösung zwar eindeutig, kann aber unphysikalisch sein [31]. Außerdem ist eine nichtlokale Formulierung der Randbedingungen mit dem konventionellen Finiten-Differenzen-Verfahren [23, 24] im Grundsatz nicht möglich.
- **Semiklassische Formulierung:** Bedingt durch die semiklassische Formulierung der Fermi-Dirac-Statistik, die in den Inflow-Randbedingungen implementiert wird, ist diese in der theoretischen Beschreibung nur unendlich weit von der Bauelementstruktur gültig [26, 29, 77]. Praktische Untersuchungen anhand einfacher, eindimensionaler Geometrien zeigen, dass der Einfluss der Bauelementstruktur bereits für Kontaktbereiche im Längenbereich ab ungefähr 30nm vernachlässigbar gering ist [107]. Ferner kann für die notwendige Länge eine Abhängigkeit zur angelegten Spannung festgestellt werden [20, S9, 107]. Als Abhilfe dient ein adaptiver Algorithmus [30], der die Bestimmung einer adäquaten Randbedingung auf Basis der Schrödingergleichung erlaubt. Dieses Vorgehen hat jedoch einen wesentlichen Nachteil. In der Praxis ist es nur für begrenzte Anwendungen⁴ sinnvoll, die WTG zur Berechnung der Wigner-Funktion zu lösen, wenn die räumlichen Wellenfunktionen bereits bekannt sind. Ein in sich geschlossener Formalismus basierend auf dem Wigner-Ansatz ist zu bevorzugen.
- **Heisenbergsche Unschärferelation:** Zusätzlich wird in [108] festgestellt, dass die Bewegung der Teilchen nicht mit dem mathematisch zugeordneten Vorzeichen übereinstimmen muss.

5.1.4. Semiklassische Berechnung des Fermi-Niveaus

Die Berechnung des Fermi-Niveaus an den Kontakten erfolgt unter der Annahme eines lokalen Fließgleichgewichts sowie Ladungsträgerneutralität in den Reservoiren. Die Ladungsträgerdichten des Leitungs- n_c und Valenzbands n_v eines Volumenhalbleiters ergeben sich zu [45]

$$n_c = \int_{E_c}^{\infty} dE g_c(E) f_{3D}^{\text{FD}}(E - \mu_c) \quad \text{und} \quad n_v = \int_{-\infty}^{E_v} dE g_v(E) f_{3D}^{\text{FD}}(\mu_v - E), \quad (5.19)$$

wobei die Zustandsdichten $g_{c,v}(E)$ durch

$$g_c(E) = \frac{(2m_{c,v})^{\frac{3}{2}}}{2\pi^2\hbar^3} \cdot \sqrt{E - E_c} \quad \text{und} \quad g_v(E) = \frac{(2m_v)^{\frac{3}{2}}}{2\pi^2\hbar^3} \cdot \sqrt{E_v - E} \quad (5.20)$$

bestimmt werden. Unter Ausnutzung der Ladungsträgerneutralität kann ein Funktional in Abhängigkeit von μ_c für den n-dotierten und μ_v für den p-dotierten Halbleiter formuliert werden. Am Beispiel des n-dotierten Halbleiters ergibt sich die Suche des Fermi-Niveaus als ein Nullstellenproblem:

$$\mathcal{F}\{\mu_c\} = N_D - n_c(\mu_c) \equiv 0. \quad (5.21)$$

⁴Denkbar wären transiente Simulationen, bei denen die Startlösung für die Wigner-Funktion aus den Wellenfunktionen ermittelt wird.

Analog ist für das Fermi-Niveau des p-dotierten Halbleiters vorzugehen.

Die Berechnung erfolgt mit numerischen Methoden. Hierbei sind die Integrale in (5.19) geeignet zu approximieren. Die Bandkantenenergie $E_{c/v}$ ist dabei durch das verwendete Material im Reservoir vorgegeben und legt die untere Integrationsgrenze inklusive der Verschiebung durch angelegte Spannungen fest⁵. Die obere Integrationsgrenze muss geeignet abgeschätzt werden. Dabei reicht es in der Regel aus, zwischen 0.5eV und 2eV auf die Bandkantenenergie zu addieren, bzw. für Löcher zu subtrahieren. Mit einem Brute-Force-Ansatz werden dann verschiedene Fermi-Niveaus im Bereich $\pm 0.3\text{eV}$ um die Bandkantenenergie gewählt, um das Funktional zu minimieren. Am Beispiel eines n-dotierten Halbleiters wird dabei das Fermi-Niveau ausgewählt, welches

$$\min_{\mu_c} |\mathcal{F}\{\mu_c\}| = \min_{\mu_c} |N_D - n_c(\mu_c)| \quad (5.22)$$

erfüllt. Anschließend kann diese Lösung noch als Startwert für das Newton-Raphson-Verfahren dienen, um somit die Genauigkeit der Lösung in iterativer Weise zu erhöhen. Der Wert für die nächste Iteration des Fermi-Niveaus μ_c^{n+1} wird dabei in Abhängigkeit von dem aktuellen Wert des Fermi-Niveaus μ_c^n durch Linearisierung des Funktionals dargestellt:

$$\delta\mu_c^n = \mu_c^{n+1} - \mu_c^n = -\frac{\mathcal{F}\{\mu_c^n\}}{\left.\frac{d\mathcal{F}\{\mu_c\}}{d\mu_c}\right|_{\mu_c=\mu_c^n}}. \quad (5.23)$$

Das Abbruchkriterium basiert auf der Abweichung $\delta\mu_c^n$. Diese Vorgehensweise ermöglicht eine vergleichsweise grobe Abtastung der möglichen Fermi-Niveaus mit dem Brute-Force-Ansatz. In der Praxis kann der Brute-Force-Ansatz in Kombination mit einer hohen Abtastung jedoch auch alleine verwendet werden, da die benötigte Rechenzeit zur Bestimmung des Fermi-Niveaus im Vergleich zur restlichen numerischen Berechnung des Quantentransports irrelevant ist.

Vorgehen beim Mode-Space-Ansatz: Im Vergleich zu eindimensionalen Transportproblemen liegt im Reservoir kein Volumenhalbleiter, sondern eine Schichtfolge in x -Richtung vor (vgl. Abbildung 3.4).

Zur Berechnung des Fermi-Niveaus erfolgt eine Projektion auf eine sogenannte Oberflächenladungsträgerdichte σ_D . Dementsprechend wird die Dotierungskonzentration N_D sowohl im Source-Kontakt als auch im Drain-Kontakt mit der Weite des Kanals w_{ch} gewichtet. Die Oberflächenladungsträgerdichte σ_D berechnet sich aus den Subbändern unter Berücksichtigung der anisotropen Bandstruktur zu:

$$\sigma_D = \sum_{\nu} \sum_n \frac{\sqrt{m_y^{\nu} m_z^{\nu}} k_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left\{ 1 + \exp \left(-\frac{E_n^{\nu} - \mu}{k_B T} \right) \right\}. \quad (5.24)$$

Der Ausdruck entspricht der zweidimensionalen Fermi-Dirac-Statistik, welche jedoch über die Täler ν und die Subbänder n summiert wird. Die effektive Masse wird durch den Ausdruck $\sqrt{m_y^{\nu} m_z^{\nu}}$ ersetzt, der die Anisotropie der Bandstruktur beinhaltet. Die Berechnung des Fermi-Niveaus erfolgt mithilfe eines Brute-Force-Ansatzes zur Lösung des Nullstellenproblems:

$$\mathcal{F}\{\mu\} = |N_D w_{\text{ch}} - \sigma_D(\mu)| \equiv 0. \quad (5.25)$$

⁵Falls nur ein Band von Interesse ist, wird die Bandenergie dieses Bands typischerweise als Referenzwert betrachtet und zu dem Wert Null gesetzt.

5.2. Offene Randbedingungen für die Relativkoordinate

In den vorherigen Kapiteln ist bei der theoretischen Herleitung der Transportgleichungen ein unendlich ausgedehntes Gebiet bezüglich der Relativkoordinate ξ vorausgesetzt worden. Auf dieser Grundlage verschwindet die statistische Dichtematrix im Unendlichen

$$\lim_{\xi \rightarrow \pm\infty} \rho_{\lambda\lambda'}^D(\chi, \xi, t) = 0,$$

da die Wellenfunktion ψ im Unendlichen verschwinden muss⁶. Wie zuvor in Kapitel 3 herausgearbeitet worden ist, liefern die Oberflächenterme innerhalb des Phasenraums infolge der Fourier-Transformation keinen Beitrag.

Die Annahme eines unendlich ausgedehnten Gebiets ist jedoch bei der Approximation mit numerischen Verfahren, denen ein abgeschlossenes Rechengebiet zugrunde liegt, ungerechtfertigt. Dementsprechend verschwinden die Werte der statistischen Dichtematrix auf den Rändern des Rechengebiets nicht und die Oberflächenterme im Phasenraum sind somit explizit zu berücksichtigen.

Nichtsdestotrotz werden die Oberflächenterme in der Praxis vernachlässigt [22–29, 59, 61, 65, S2, S3, 68–70, 73, 74, 77–83, S12, 84–87, 92, 93, 97, 101, 102, 107, 109–113]. Dieses Vorgehen ist mit wesentlichen, konzeptionellen Fehlern verbunden [S4–S6, S8, 114], dessen Konsequenzen im Folgenden erläutert werden.

Konzeptionelle Betrachtung eines abgeschlossenen Gebiets: Die Betrachtung des Formalismus erfolgt nun explizit auf einem endlichen Gebiet bezüglich der Relativkoordinate ξ , welches durch das Intervall $\mathcal{I}_\xi = [-L_\xi/2, +L_\xi/2]$ der Länge L_ξ (vgl. Abbildung 5.1) beschrieben wird. Bei der Überführung der LVNG-RS in die WTG mithilfe der Fourier-Transformation sind konzeptionell Integrale des Typs

$$\int_{\mathcal{I}_\xi} d\xi \exp(-ik\xi) \cdot \frac{\partial}{\partial \xi} \rho_{\lambda\lambda'}^D(\chi, \xi, t) = \exp(-ik\xi) \rho_{\lambda\lambda'}^D(\chi, \xi, t) \Big|_{\partial \mathcal{I}_\xi} - \underbrace{\int_{\mathcal{I}_\xi} d\xi (-ik) \exp(-ik\xi) \rho_{\lambda\lambda'}^D(\chi, \xi, t)}_{ik \cdot f_{\lambda\lambda'}(\chi, k, t)} \quad (5.26)$$

auszuwerten, wobei die partielle Integrationsregel ausgenutzt wird. Der erste Term in Abhängigkeit der Randwerte $\partial \mathcal{I}_\xi$ repräsentiert den nun nicht mehr wegfallenden Oberflächenterm. Der zweite Term kann hingegen in einen Ausdruck der Wigner-Funktion überführt werden. Unglücklicherweise sind die Werte der statistischen Dichtematrix auf dem Rand $\partial \mathcal{I}_\xi$ nicht bekannt, sodass eine adäquate Berücksichtigung des Oberflächenterms nicht möglich ist.

Konsequenzen der Vernachlässigung des Oberflächenterms: Die Vernachlässigung des Oberflächenterms entspricht der mathematischen Formulierung von Dirichlet-Randbedingungen für die statistische Dichtematrix mit dem Wert Null im Ortsraum [S4–S6, S8]. Auf der physikalischen Seite entspricht diese Randbedingung einem Abschluss der Ränder mit einer perfekt reflektierenden Schicht, welche durch ein Material mit unendlich hohem Potenzial dargestellt

⁶Die Forderung folgt unmittelbar aus der Bornschen Wahrscheinlichkeitsinterpretation und damit verbundenen Quadratintegrierbarkeit der Wellenfunktion [37, 45].

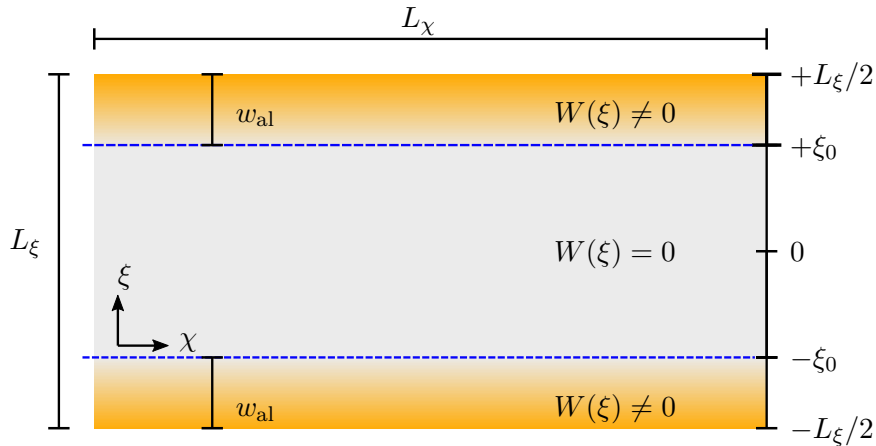


Abbildung 5.1. Schematische Darstellung des Rechengebiets einschließlich der absorbierenden Schicht. Das Rechengebiet weist eine Länge L_ξ (L_χ) bezüglich der Relativkoordinate (Schwerpunktkoordinate) auf. Die absorbierende Schicht hat eine Weite von w_{al} und wirkt nur in der Nähe der Ränder im orangefarbenen Bereich zwischen $\pm\xi_0$ und $\pm L_\xi/2$. Der graduelle Farbverlauf soll den adiabatischen Übergang zwischen Bauelement und absorbierender Schicht kennzeichnen.

wird. Infolgedessen werden die Anteile der statistischen Dichtematrix, die auf den Rand $\partial\mathcal{I}_\xi$ treffen, reflektiert und überlagern sich anschließend der ursprünglichen Lösung [S5]. Da die Reflexionen alleine auf die Vernachlässigung der Oberflächenterme, bzw. der Formulierung der Dirichlet-Randbedingungen, zurückzuführen sind, kommt es somit zu einer unphysikalischen Beschreibung des Systems, die zu unphysikalischen Lösungen führen kann, wie in den nachfolgenden Abschnitten gezeigt wird.

In [114] ist diesbezüglich die Einbindung eines zusätzlichen Dämpfungsterms vorgeschlagen worden⁷, jedoch wird der vorgestellte Ansatz ohne die Kenntnisse der hier erarbeiteten Auswirkungen im Ortsraum formuliert. Als Konsequenz wird der Impuls der Teilchen ebenso wie die Wigner-Funktion von der reellen Achse in die komplexe Ebene verschoben, wodurch die physikalische Interpretation der Momente mit Problemen behaftet ist.

Vor diesem Hintergrund bedarf es somit der systematischen Entwicklung eines Formalismus, mit dem die Oberflächenterme, bzw. Werte der statistischen Dichtematrix, adäquat eingebunden werden können. Weiterhin sollen die physikalischen Eigenschaften der Verteilungsfunktion erhalten bleiben.

Im folgenden Abschnitt 5.2.1 wird eine absorbierende Schicht auf Grundlage eines sogenannten komplex absorbierenden Potentials erarbeitet [S4–S6, S8], die sich bereits bei der numerischen Lösung der Schrödingergleichung als hilfreich erwiesen hat [115–117]. Die Evaluation und Validierung des Formalismus erfolgt anhand von numerischen Untersuchungen in Abschnitt 5.2.2 für ein Spielzeugmodell, für das eine analytische Vergleichslösung existiert, sowie in Abschnitt 5.2.3 für ein praxisorientiertes Transportproblem, bei welchem die anerkannte QTBM [7, 8] zum Vergleich herangezogen wird. Notwendigerweise werden zur numerischen Untersuchung Konzepte aus den nachfolgenden Kapiteln 6 - 8 herangezogen. In Abschnitt 5.2.6 werden transparente Randbedingungen und Perfectly Matched Layer (PML) vorgestellt, deren Einsatz sich jedoch aufgrund numerischer Instabilitäten als ungeeignet erwies.

⁷Mathematisch ist das Vorgehen vergleichbar mit der Laplace-Transformation.

5.2.1. Formalismus des komplex absorbierenden Potentials

Die Grundidee hinter dem komplex absorbierenden Potential ist die Einführung einer künstlich absorbierenden Schicht an den Rändern des Rechengebiets [S4–S6, S8], wie in Abbildung 5.1 schematisch dargestellt. Innerhalb dieser lokal absorbierenden Schichten (orangefarbene Bereiche in Abbildung 5.1) wird ein zusätzlicher Term eingeführt, welcher ein imaginäres Potential $iW(\xi)$ enthält, auch komplex absorbierendes Potential im Umfeld der Schrödingergleichung genannt [115–117]. Dieses komplex absorbierende Potential $iW(\xi)$ verursacht ein abklingendes Verhalten der statistischen Dichtematrix innerhalb der absorbierenden Schichten [S5], wie nachfolgend mathematisch gezeigt wird. Ziel ist, dass die statistische Dichtematrix bis zu den Rändern auf einen vernachlässigbar kleinen Wert nahe Null abklingt, sodass Reflexionen an den Rändern des Rechengebiets vermieden werden. Das komplex absorbierende Potential ist dabei im Idealfall nicht reflektierend [S5, 116]. Der Oberflächenterm verschwindet somit auf einer mathematisch-physikalischen Basis und die statistische Dichtematrix erfüllt die Dirichlet-Randbedingungen [S5]. Infolgedessen werden unphysikalische Reflexionen durch eine inadäquate Adressierung der Randbedingungen effektiv vermieden. Für einen inneren Betrachtungspunkt des Rechengebiets kann jede Welle über den Rand des Rechengebiets laufen, ohne den Betrachtungspunkt zu beeinflussen, was der Implementierung von offenen Randbedingungen gleichzusetzen ist.

Die Implementierung des Formalismus in bestehende und neu entwickelte Methoden erfolgt durch eine einfache Substitution des Intradriftoperators $B_{\lambda\lambda'}$ ⁸ durch einen komplexen Intradriftoperator, welcher das komplex absorbierende Potential $iW(\xi)$ enthält:

$$B_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi) \rightarrow B_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi) - iW(\xi). \quad (5.27)$$

Anforderungen an das komplex absorbierende Potential: Damit dieses Konzept in der Praxis erfolgreich anwendbar ist, muss das komplex absorbierende Potential innerhalb der absorbierenden Schicht einige relevante Eigenschaften erfüllen [S4–S6, S8], die im Folgenden zusammengefasst werden:

- Das komplex absorbierende Potential $iW(\xi)$ weist bezüglich der ξ -Richtung eine **gerade Parität** auf $W(\xi) = W(-\xi)$. Eine Herleitung dieser Eigenschaft erfolgt aus der Schrödingergleichung, wie in Anhang C gezeigt ist.
- Das komplex absorbierende Potential $iW(\xi)$ nimmt nur innerhalb der **absorbierenden Schicht Werte ungleich Null** an (vgl. die orangefarbenen Bereiche innerhalb Abbildung 5.1). Insbesondere am **Übergang** $\pm\xi_0$ zur absorbierenden Schicht **verschwindet das komplex absorbierende Potential** $iW(\pm\xi_0) = 0$.
- Innerhalb der absorbierenden Schicht stellt das komplex absorbierende Potential $iW(\xi)$ eine **monoton steigende** Funktion in Richtung der Ränder dar. Im Idealfall erfolgt der **Anstieg adiabatisch**, sodass keine Reflexion am komplex absorbierenden Potential selbst stattfindet.

⁸Dieser Zusammenhang folgt auch unmittelbar für die Multisubbandbeschreibung, wobei lediglich die Funktionen V_λ in dem Intradriftoperator durch die Funktionen E_m^ν zu ersetzen sind.

Da das komplex absorbierende Potenzial über den komplexen Intra-banddriftoperator eingeht, werden entsprechend nur die Diagonalelemente des Liouville-Operators (3.36) beeinflusst. Die Diagonalelemente bestimmen dabei die Dynamik der homogenen Lösung der einzelnen Transportgleichungen.

Heuristische Lösung der Transportgleichung: Unter der Einführung des allgemeinen Diffusionsoperators $\hat{R}_{\lambda\lambda'}$, dessen explizite Gestalt im Folgenden nicht von Bedeutung ist, ergibt sich die Dynamik der jeweils ungekoppelten Anteile der statistischen Dichtematrix zu:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{\lambda\lambda'}^D(\chi, \xi, t) = \left\{ \hat{R}_{\lambda\lambda'} + \frac{1}{i\hbar} \{B_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi, t) - iW(\xi)\} \right\} \rho_{\lambda\lambda'}^D(\chi, \xi, t). \quad (5.28)$$

Die formale Integration bezüglich der Zeit t liefert den Ausdruck

$$\rho_{\lambda\lambda'}^D(\chi, \xi, t) = \exp\left(\int_{t_0}^t dt' \hat{R}_{\lambda\lambda'} + \frac{1}{i\hbar} B_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi, t')\right) \cdot \exp\left(-\frac{W(\xi)}{\hbar}(t - t_0)\right) \cdot \rho_{\lambda\lambda'}^D(\chi, \xi, t_0), \quad (5.29)$$

da das komplex absorbierende Potenzial selbst nicht zeitabhängig ist. Die gesamte Lösung ergibt sich durch die Berücksichtigung der partikulären Lösung, welche durch die Bandkopplungsmechanismen getrieben wird.

Wie aus der heuristischen Lösung (5.29) ersichtlich ist, führt die Einbindung des komplex absorbierenden Potenzials $iW(\xi)$ zu einem zusätzlichen Faktor:

- Außerhalb der absorbierenden Regionen ist das komplex absorbierende Potenzial per Definition Null. Der zusätzliche Faktor nimmt daher den Wert Eins an. Die ursprüngliche Lösung wird somit nicht durch das komplex absorbierende Potenzial beeinflusst.
- In den absorbierenden Regionen hingegen nimmt das komplex absorbierende Potenzial Werte ungleich Null an. Da das komplex absorbierende Potenzial innerhalb dieser Regionen per Definition eine monoton steigende Funktion darstellt [S5, S8], läuft der zusätzliche Faktor gegen den Wert Null. Folglich klingen die Werte der statistischen Dichtematrix in Richtung der Ränder des Rechengebiets exponentiell auf einen sehr kleinen Wert nahe bei Null ab. Der Oberflächenterm bestimmt sich somit zu dem Wert Null. Die Dirichlet-Randbedingungen im Ortsraum sind erfüllt. Unphysikalische Reflexionen als Folge der unangemessenen Einbindung der Ränder können somit effektiv vermieden werden und die Physik des Bauelements zwischen den absorbierenden Schichten wird korrekt wiedergegeben [S4–S6, S8].

Im Vergleich zum Ansatz auf Grundlage der Verschiebung der Impulse in die komplexe Ebene [114] ist hervorzuheben, dass die Wigner-Funktion der Komponenten $f_{\lambda\lambda}$ (des Intra-bandtransports) auch unter Einbindung des komplex absorbierenden Potenzials eine reelle Funktion bleibt [S8] und die physikalische Interpretation der Wigner-Funktion somit erhalten bleibt. Diese herausragende Eigenschaft ergibt sich unmittelbar aus der geraden Symmetrie des komplex absorbierenden Potenzials hinsichtlich der Relativkoordinate ξ .

Expliziter Monom-Ansatz für die absorbierende Schicht: Mit Blick auf die nachfolgenden Untersuchungen ist es zweckmäßig, eine explizite mathematische Gestalt für das imaginäre Potenzial einzuführen. Hierdurch wird eine systematische Evaluation des Formalismus des komplex absorbierenden Potenzials ermöglicht. In dieser Arbeit werden hierzu einfache Monome

entsprechend

$$W(\xi) = \begin{cases} b_{\text{al}} \cdot \left(\frac{|\xi| - \xi_0}{w_{\text{al}}} \right)^{n_{\text{al}}}, & |\xi| > \xi_0 \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (5.30)$$

verwendet [S5, S8]. Mit dem Grad des Monoms n_{al} kann dabei der prinzipielle Verlauf des komplex absorbierenden Potenzials festgelegt werden (vgl. Abbildung 5.2). Die Amplitude b_{al} sowie die Weite w_{al} stellen weitere Parameter zur Kontrolle der absorbierenden Schicht dar. Für die

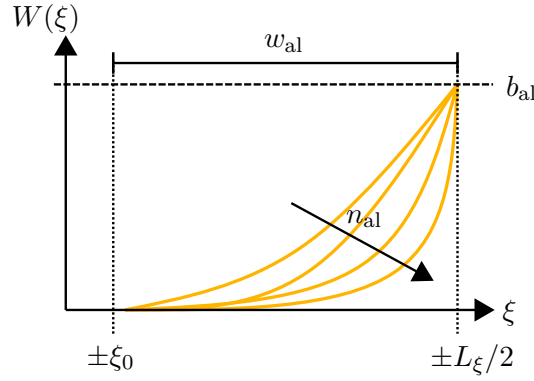


Abbildung 5.2. Kurvenverläufe der Funktion $W(\xi)$ in Abhängigkeit des Monomgrads n_{al} für eine feste Weite w_{al} und Amplitude b_{al} .

Betrachtungen im Phasenraum wird noch die Fourier-Transformierte des komplex absorbierenden Potenzials $i\tilde{W}$ eingeführt:

$$i\tilde{W}(k) = \int_{\mathcal{I}_\xi} d\xi \exp(-ik\xi) \cdot iW(\xi). \quad (5.31)$$

5.2.2. Effizienz der absorbierenden Schicht

Zur Evaluation der absorbierenden Schicht werden verschiedene Untersuchungen in Abhängigkeit der Amplitude b_{al} , der Weite w_{al} sowie des Monomgrads n durchgeführt. Hierzu wird die zeitliche Ausbreitung der statistischen Dichtematrix auf einem abgeschlossenen Rechengebiet mit absorbierender Schicht numerisch bestimmt und mit einer analytischen Referenzlösung verglichen. Als Maß zur Beurteilung der Genauigkeit wird der relative Fehler herangezogen.

Definition des relativen Fehlers: Der relative Fehler der numerischen Lösung ρ_{num} zu der analytischen Referenzlösung ρ_{ref} wird zum Betrachtungszeitpunkt t_{max} wie folgt definiert:

$$e_{\text{rel}} = \frac{\|\rho_{\text{num}}(t_{\text{max}}) - \rho_{\text{ref}}(t_{\text{max}})\|}{\|\rho_{\text{ref}}(t_{\text{max}})\|} \quad \text{mit } \xi \in [-\xi_0, \xi_0] \quad (5.32)$$

Die Operation $\|\cdot\|$ stellt die Betragsbildung in Form der L_2 -Norm dar. Die Vektoren ρ enthalten die diskreten Werte der statistischen Dichtematrix infolge der örtlichen Diskretisierung, wie sie in den Kapiteln 6 und 8 beschrieben wird.

Testkonfiguration: Das Rechengebiet weist bezüglich der Schwerpunktkoordinate χ mit $\chi \in [-15\text{nm}, 15\text{nm}]$ eine Länge von $L_\chi = 30\text{nm}$ und bezüglich der Relativkoordinate ξ eine Länge von $L_\xi = 60\text{nm}$ ($\xi \in [-30\text{nm}, 30\text{nm}]$) auf. Beide Richtungen werden mit $N_\chi = N_\xi = 200$ äquidistanten Diskretisierungspunkten abgetastet. Die Zeitschrittweite wird zu $\Delta t = 0.125\text{fs}$ gesetzt. Für die zeitliche Propagation werden sowohl explizite Exponentialintegratoren [118, 119] als auch das implizite Crank-Nicolson-Verfahren [101] verwendet, welche im Anhang E erläutert werden. Die Ortsraumdiskretisierung erfolgt unter Verwendung eines vom Exponentialoperator abgeleiteten Diskretisierungsschemas aus Abschnitt 8.2.

Die Untersuchung des komplex absorbierenden Potenzials erfolgt für verschiedene Monome der Grade $n_{\text{al}} \in [2, 5]$. Die Amplituden b_{al} variieren im Bereich von 0eV bis 3eV mit einer Schrittweite von 0.1eV. Der Fall 0eV repräsentiert den Fall ohne absorbierende Schicht. Zusätzlich wird der Einfluss der Weite der absorbierenden Schicht w_{al} von 1nm bis 22nm in 1nm Schritten analysiert. Da die Punktzahl konstant gehalten wird, entsprechen die Erkenntnisse, welche im Hinblick auf die Weite w_{al} erzielt werden, denen mit fester Weite w_{al} , aber veränderlicher Anzahl an Diskretisierungspunkten N_ξ .

Als analytische Referenzlösung dient die exemplarische Propagation eines gaussförmigen Wellenpakets innerhalb des Leitungsbands eines GaAs-Halbleiters. Die korrespondierende Wellenfunktion ist durch

$$\phi(z, t) = \left(\frac{1}{2\pi\sigma^2(1+i\beta t)^2} \right)^{\frac{1}{4}} \exp(i(k_0(z-z_0) - \omega_0 t)) \exp\left(-\frac{((z-z_0) - v_0 t)^2}{4\sigma^2(1+i\beta t)}\right) \quad (5.33)$$

beschrieben [102], wobei $\sigma^2 = 0.5^2\text{nm}^2$ die Varianz darstellt. Die Konstante β , die Gruppengeschwindigkeit v_0 und die Kreisfrequenz ω sind über

$$\beta = \frac{\hbar}{2m\sigma^2} \quad v_0 = \frac{\hbar k_0}{m} \quad \omega_0 = \frac{k_0 v_0}{2} \quad (5.34)$$

definiert, wobei $k_0 = 1,5\text{nm}^{-1}$ die mit der Gruppengeschwindigkeit v_0 korrespondierende Wellenzahl darstellt. Die effektive Masse beträgt $m = 0.065m_0$. Die analytische Referenzlösung der statistischen Dichtematrix bestimmt sich mithilfe der Wellenfunktion (5.33) durch:

$$\rho_{\text{ref}}(\chi, \xi, t) = \phi\left(\chi + \frac{\xi}{2}, t\right) \phi^\dagger\left(\chi - \frac{\xi}{2}, t\right). \quad (5.35)$$

Der Imaginärteil der Referenz-Dichtematrix ist zu den Zeitpunkten $t = 0\text{fs}$ in Abbildung 5.3a und $t = 15\text{fs}$ in Abbildung 5.3b dargestellt. Wie aus dieser Abbildung ersichtlich ist, ist die statistische Dichtematrix zum Betrachtungszeitpunkt $t = 15\text{fs}$ deutlich über die Ränder ausgeht. Deshalb wird dieser als Bestimmungszeitpunkt t_{max} zur Untersuchung der Reflexionen in Form des relativen Fehlers herangezogen.

Zeitpropagation mit absorbierender Schicht: Um den Einfluss des abgeschlossenen, diskretisierten Rechengebiets qualitativ zu bewerten, wird die Zeitpropagation des Wellenpakets (5.33) betrachtet. Die Anfangswerte der statistischen Dichtematrix werden durch die analytische Referenzlösung zum Zeitpunkt $t = 0\text{fs}$ (5.35) festgelegt (vgl. Abbildung 5.3a).

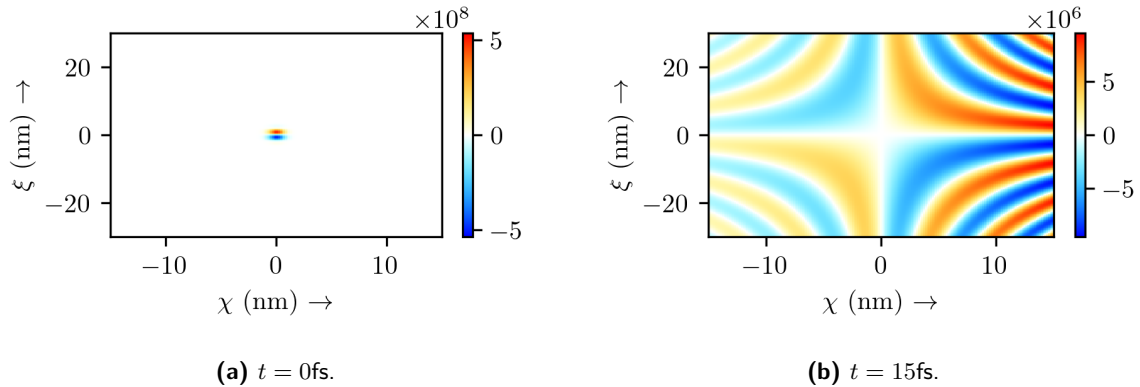


Abbildung 5.3. Analytisch berechneter Imaginärteil der statistischen Dichtematrix zu den Zeitpunkten $t = 0\text{fs}$ (a) und $t = 15\text{fs}$ (b).

Für die Ausbreitung werden die Ergebnisse des Rechengebiets mit der absorbierenden Schicht denen ohne die absorbierende Schicht gegenübergestellt. Hierzu wird der Imaginärteil der statistischen Dichtematrix $\Im\{\rho^D(\chi, \xi, t)\}$ für einige markante Zeitpunkte in Abbildung 5.4 aufgetragen.

Zum Zeitpunkt $t = 1\text{fs}$ können die beiden Imaginärteile der statistischen Dichtematrix ohne (Abbildung 5.4a) und mit absorbierender Schicht (Abbildung 5.4b) nicht voneinander unterschieden werden. Nach $t = 4\text{fs}$ erreicht der Imaginärteil der statistischen Dichtematrix ohne absorbierende Schicht den Rand des Rechengebiets, wie aus Abbildung 5.4c ersichtlich ist. Für den Fall der absorbierenden Schicht klingen die einfallenden Anteile der statistischen Dichtematrix hingegen nahe dem Rand des Rechengebiets gegen den Wert Null ab, wie in Abbildung 5.4d deutlich zu erkennen ist. Zur besseren Übersicht ist der Querschnitt des Imaginärteils der statistischen Dichtematrix für den Wert der Schwerpunktkoordinate $\chi = 7,5\text{nm}$ zum Zeitpunkt $t = 4\text{fs}$ in Abbildung 5.5a dargestellt.

Bisher hat der Rand noch keinen Einfluss auf das innere Verhalten gehabt. Bei weiterer Zeitpropagation nimmt dieser jedoch eine zentrale Rolle ein. Nach $t = 8\text{fs}$ sind die am Rand reflektierten Anteile der statistischen Dichtematrix ohne absorbierende Schicht bereits innerhalb des Imaginärteils zu erkennen (siehe Abbildung 5.4e). Diese unphysikalischen Reflexionen interferieren mit der physikalisch validen Lösung.

Zum Betrachtungszeitpunkt $t = 15\text{fs}$ ist ein signifikanter, hoch oszillierender Anteil im Imaginärteil der statistischen Dichtematrix in Abbildung 5.4g zu sehen, welche ohne absorbierende Schicht berechnet wird. Dieser Interferenzterm lässt sich alleine der inadäquaten Adressierung der Randbedingungen zuordnen. Mit der absorbierenden Schicht können diese von Rand verursachten unphysikalischen Lösungen zu allen Zeitpunkten effektiv vermieden werden, wie aus dem Betrachtungszeitpunkt zu $t = 8\text{fs}$ (Abbildung 5.4f) und $t = 15\text{fs}$ (Abbildung 5.4h) ersichtlich ist.

Zusätzlich ist in Abbildung 5.5b der Querschnitt der Imaginärteile der statistischen Dichtematrix zum Zeitpunkt $t = 15\text{fs}$ mit und ohne absorbierende Schicht im Vergleich zur analytischen Lösung dargestellt. In dieser Darstellung lassen sich die unphysikalischen Reflexionen und deren Auswirkungen besonders gut erkennen.

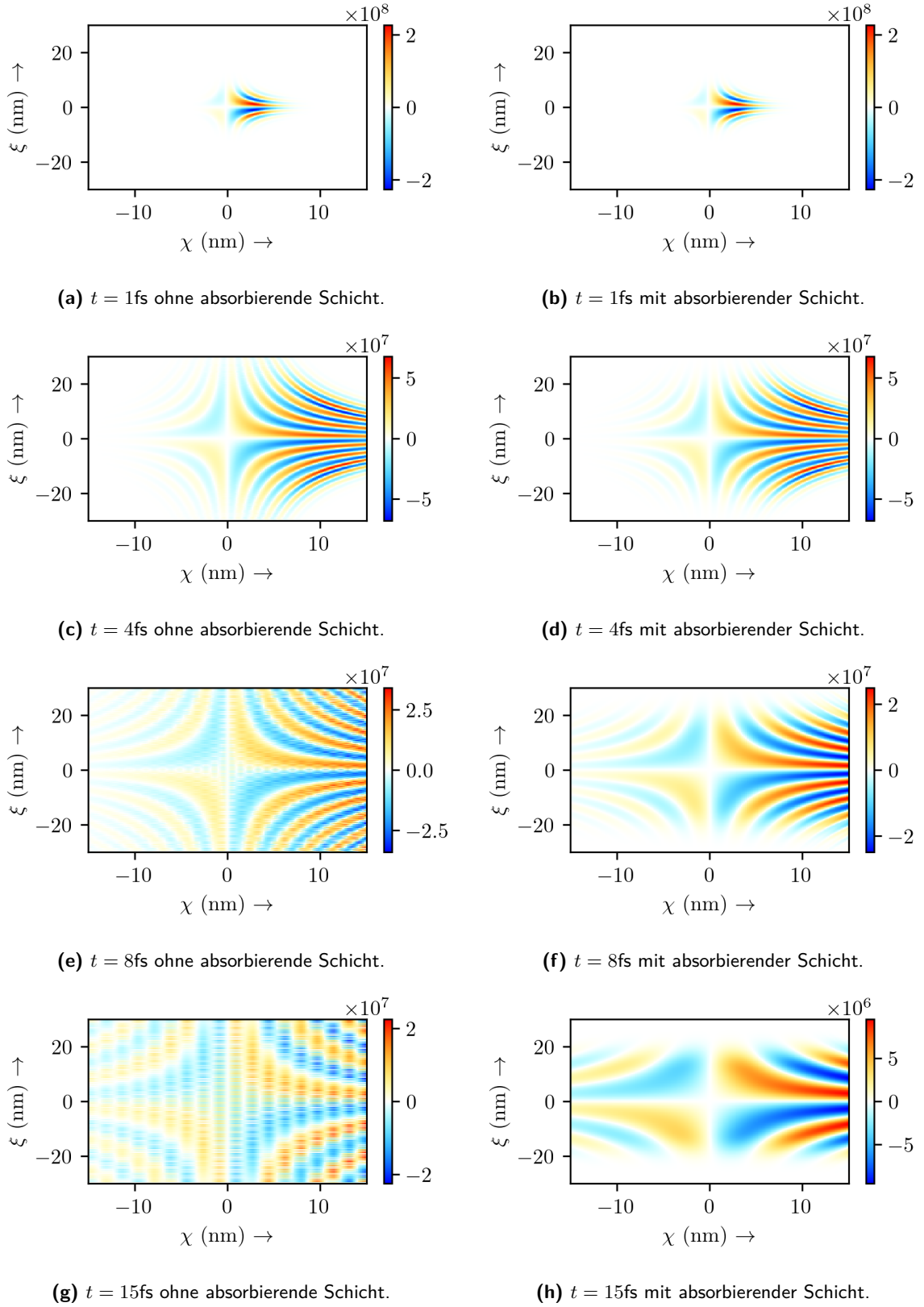


Abbildung 5.4. Ausbreitung des Imaginärteils der statistischen Dichtematrix $\Im\{\rho^D(\chi, \xi, t)\}$ für eine gaussförmige Wellenfunktion zu verschiedenen Zeitpunkten t mit und ohne absorbierende Schicht. Die Parameter der absorbierenden Schicht liegen der Simulation wie folgt zugrunde: $b_{\text{al}} = 2\text{eV}$, $w_{\text{al}} = 20\text{nm}$ und $n_{\text{al}} = 2$.

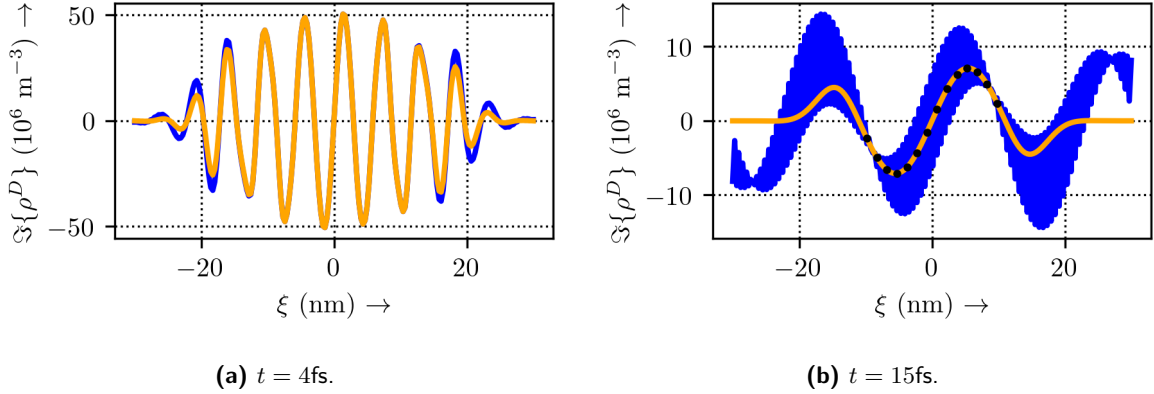


Abbildung 5.5. Querschnitt des Imaginärteils der statistischen Dichtematrix $\Im\{\rho^D(\chi = 7,5\text{nm}, \xi, t)\}$ zu verschiedenen Zeitpunkten $t = 4\text{fs}$ (a) und $t = 15\text{fs}$ (b). Die blaue Linie kennzeichnet die Simulation ohne und die orangefarbene Linie kennzeichnet die Simulation mit absorbierender Schicht. Die schwarzen Punkte zum Zeitpunkt $t = 15\text{fs}$ in (b) sind die Werte der analytischen Referenzlösung innerhalb des Intervalls $\xi \in [-\xi_0, \xi_0]$.

Im Vergleich zur analytischen Referenzlösung, welche in Abbildung 5.3b dargestellt ist sowie im Querschnitt in Abbildung 5.5b, ist eine sehr gute Übereinstimmung der Imaginärteile der statistischen Dichtematrix innerhalb des reduzierten Rechengebiets $[-\xi_0, +\xi_0]$ für den Fall einer absorbierenden Schicht zum Beobachtungszeitpunkt $t = 15\text{fs}$ festzustellen. Für den Fall ohne absorbierende Schicht liefert der Vergleich mit der Referenzlösung zum Betrachtungszeitpunkt $t = 15\text{fs}$ aufgrund der unphysikalischen Reflexionen durch die Ränder keine Übereinstimmung, wie nachfolgend näher erläutert wird. Zum einen ist dies direkt aus dem hoch oszillierenden unphysikalischen Interferenzterm in Abbildung 5.4g sowie Abbildung 5.5b ersichtlich. Zum anderen liefert der Vergleich der Größenordnung einen mehr als doppelt so großen betragsmäßigen Maximalwert für den numerisch bestimmten Imaginärteil der statistischen Dichtematrix ohne absorbierende Schicht. Mit weiterer Zeitpropagation wird auch der unphysikalische Interferenzterm durch mehrfache Reflexionen anwachsen und somit der im Modell induzierte Fehler.

Alle hier getroffenen Aussagen gelten in gleicher Weise für den Realteil der statistischen Dichtematrix. Auf dessen explizite Darstellung wird an dieser Stelle jedoch verzichtet, da er keine neuen Erkenntnisse bezüglich des Systemverhaltens liefert.

Der Imaginärteil stellt oftmals die numerisch weniger robuste Größe der statistischen Dichtematrix dar. Da die Stromdichte proportional zum Gradienten hinsichtlich der ξ -Richtung ist, liegt hier eine große Sensitivität hinsichtlich des hoch oszillierenden, reflektierten Anteils vor, wie auch die Untersuchungen zum Quantentransport in den nachfolgenden Abschnitten bestätigen. Die Ladungsträgerdichte hingegen ist als einfache Funktionsauswertung am Ort $\xi = 0$ in einem gewissen Maß robuster gegenüber dieser Art von Fehlern.

Quantitative Analyse basierend auf dem relativen Fehler: Nachdem das Konzept im letzten Abschnitt bereits mit qualitativen Betrachtungen validiert worden ist, soll nun eine quantitative Beurteilung erfolgen. Hierzu wird der zuvor definierte relative Fehler e_{rel} (5.32) für die verschiedenen Konfigurationen der absorbierenden Schicht untersucht.

In Abbildung 5.6 sind die relativen Fehler e_{rel} in Abhängigkeit der Amplitude b_{al} und Weite w_{al} der absorbierenden Schicht für die verschiedenen Monomgrade $n_{\text{al}} = 2$ (Abbildung 5.6a), $n_{\text{al}} = 3$ (Abbildung 5.6b), $n_{\text{al}} = 4$ (Abbildung 5.6c) und $n_{\text{al}} = 5$ (Abbildung 5.6d) dargestellt. Wie bereits erwähnt, lassen sich die Ergebnisse der variierenden Weite w_{al} bei konstanter Anzahl an Diskretisierungspunkten N_{ξ} auf die einer festen Weite w_{al} bei variierender Punktzahl N_{ξ} übertragen.

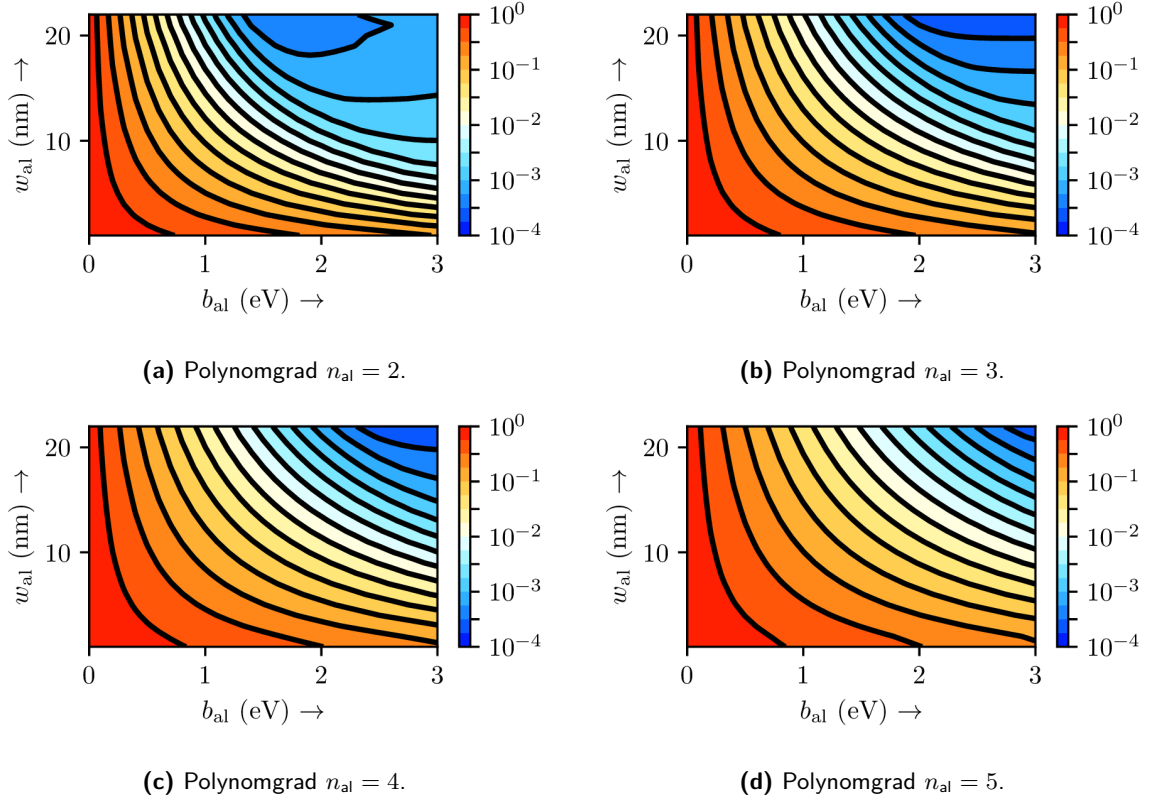


Abbildung 5.6. Relativer Fehler zur Einschätzung der Effizienz der absorbierenden Schicht in Abhängigkeit der Schichtweite w_{al} und der Amplitude b_{al} für verschiedene Polynomgrade n_{al} . Die Referenzlösung ist durch eine analytische Lösung gegeben. Die Anzahl der Diskretisierungspunkte bezüglich der Relativkoordinate N_{ξ} wird bei den Betrachtungen festgehalten.

Prinzipiell ist aus den Abbildungen 5.6a-5.6d festzustellen, dass ein niedriger Wert der Amplitude $b_{\text{al}} < 1\text{eV}$ in Kombination mit den betrachteten Weiten zu einem hohen relativen Fehler $e_{\text{rel}} \approx 1$ führt. Dies korrespondiert mit einer starken, von den Rändern ausgehenden Reflexion infolge einer unzureichenden Dämpfung der statistischen Dichtematrix. Weiterhin führt ein gleichzeitiges Erhöhen der Weite w_{al} als auch der Amplitude b_{al} zu einem kleiner werdenden relativen Fehler e_{rel} und somit zur Reduktion der Reflexionen an den Rändern des Rechengebiets. Besonders niedrige relative Fehler im Bereich von ca. 10^{-4} ergeben sich für hinreichend große Weiten im Bereich von $w_{\text{al}} \approx 20\text{nm}$ gepaart mit großen Amplituden $b_{\text{al}} \approx 2\text{eV}-3\text{eV}$. Wie aus den Abbildungen 5.6a-5.6d ersichtlich ist, wird das Verhalten dabei maßgeblich durch den Monomgrad bestimmt. Dieser beschreibt den Verlauf des Anstiegs des komplex absorbierenden Potentials. Mit steigendem Monomgrad flacht der anfängliche Anstieg des imaginären Potentials deutlich ab - der Anstieg auf die vorgegebene Amplitude erfolgt dann in einem scharfen

Bereich und wird immer steiler (vgl. Abbildung 5.2). Ein zu abrupter Übergang, wie er durch große Monomgrade vorliegt, führt wiederum auch zu Reflexionen. Diesmal aber nicht vom Rand, sondern von der absorbierenden Schicht selbst⁹. Dieses Verhalten spiegelt sich auch in dem relativen Fehler e_{rel} wider. Beispielsweise ist für einen großen Monomgrad $n_{\text{al}} = 5$, wie in Abbildung 5.6d dargestellt, sowohl eine große Amplitude als auch große Weite für einen geringen Fehler unerlässlich. Im direkten Vergleich ist der Monomgrad von $n_{\text{al}} = 2$ hier deutlich leistungsfähiger, der auch schon bei kleineren Weiten niedrigere relative Fehler liefert, wie in Abbildung 5.6a dargestellt ist.

Die hier bestimmten relativen Fehler ergeben sich sowohl unter Verwendung von Exponentialintegratoren, die eine Reduktion des Approximationsfehlers in der Größenordnung der CPU-Genauigkeit erlauben [118, 119], als auch unter der Verwendung des weniger akkuraten Crank-Nicolson-Verfahrens [101].

Für die Approximation der Ableitung in ξ -Richtung wird ein Approximationsschema der Ordnung $O(\Delta\xi^6)$ verwendet. Auch der Vergleich gegen eine numerische Referenzlösung auf einem deutlich größeren Gitter (keine Reflexionen vom Rand) mit mehr Randpunkten und ohne absorbierende Schicht, beeinflusst die Größenordnung des relativen Fehlers nur unwesentlich.

Alle diese Betrachtungen lassen darauf schließen, dass der Fehler durch das numerische Verfahren eine untergeordnete, zu vernachlässigende Rolle spielt. Ferner wird dieser Fehler durch den Modellfehler maskiert, der durch die minimalen Reflexionen an der absorbierenden Schicht der vorgestellten mathematischen Gestalt entsteht. Der Einfluss der Numerik auf den relativen Fehler ist somit für die hier verwendeten Methoden zu vernachlässigen, wodurch das Maß des relativen Fehlers hier eine geeignete Größe zur Charakterisierung der absorbierenden Schicht darstellt und eine wichtige Basis zur Einordnung realer Fehler liefert.

Fazit: Zusammenfassend können zwei Richtlinien aus den Ergebnissen bei fester Anzahl an Diskretisierungspunkten bezüglich der Relativkoordinate gefolgert werden. Je höher der Grad des Monoms, desto länger muss die Schicht gewählt werden. Je länger die Schicht gewählt wird, desto größer kann auch die Amplitude gewählt werden, ohne dass das komplex absorbierende Potenzial selbst zur Quelle von Reflexionen wird.

5.2.3. Evaluation anhand des Quantentransports in einer Tunnelodiode

Die bisherigen Betrachtungen zur absorbierenden Schicht beinhalten weder den Effekt von örtlich variierenden Potenzialen noch den Effekt einer kontinuierlichen Injektion von Ladungsträgern durch die Inflow-Randbedingungen - sprich, der ingenieurmäßige Quantentransport ist bisher nicht abgebildet worden.

Am Beispiel einer resonanten Tunnelodiode (RTD) [90], deren materieller und struktureller Aufbau in Abbildung 5.7 dargestellt ist, soll daher nun der Einfluss der absorbierenden Schicht auf den Quantentransport untersucht werden. Diese Untersuchungen beinhalten sowohl die stationäre Modellierung im Ortsraum als auch im Phasenraum auf Basis des Wigner-Formalismus. Zur Evaluation und Validierung der absorbierenden Schicht wird das Standard-Transportmodell

⁹Mit der Erhöhung der Punktzahl N_ξ kann dieses Problem adressiert werden.

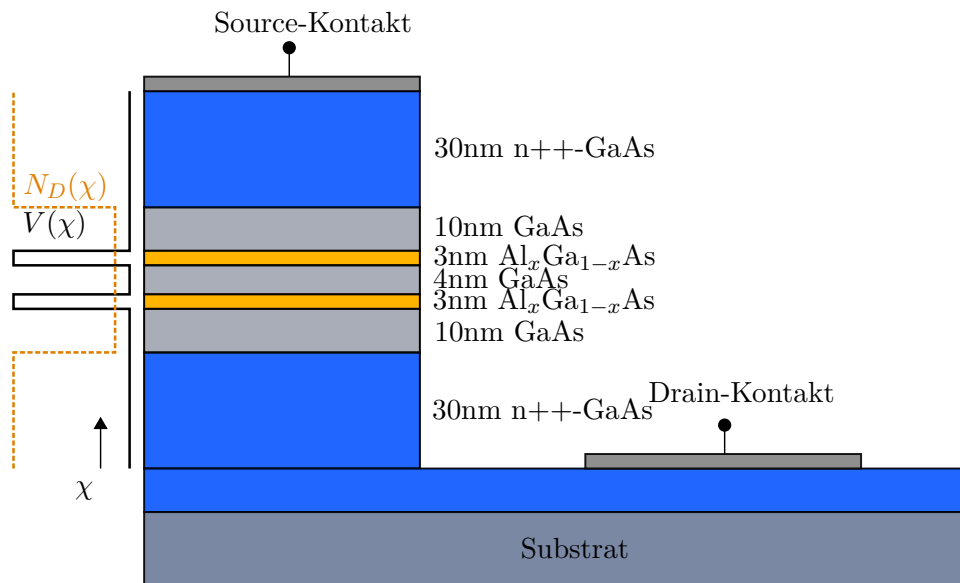


Abbildung 5.7. Schematische Darstellung der RTD im AlGaAs-GaAs Materialsystem. Während die in blau dargestellten Kontaktbereiche hochdotiert sind, ist der unmittelbare Bereich um die Doppelbarrierenstruktur schwach oder undotiert. Die orangefarbenen Bereiche kennzeichnen die AlGaAs-Barrieren. Die Modellierung erfolgt in Schichtrichtung χ . Die charakteristischen Verläufe des Dotierungsprofils N_D (orangefarbene Linie) sowie des Leitungsbandpotenzials V (schwarze Linie) sind über der Schichtrichtung entlang der RTD skizziert.

der Literatur auf Basis einer konstanten effektiven Masse [23, 24] herangezogen. Die erzielten Ergebnisse werden dabei mit denen aus der anerkannten QTBM [7, 8] verglichen und im Hinblick auf die absorbierende Schicht diskutiert. Da das Hartree-Potenzial keine Auswirkung auf die absorbierende Schicht hat, wird es in den folgenden Berechnungen methodischen Werts nicht berücksichtigt.

Struktur- und Materialparameter des RTD-Prototyps: Die symmetrisch aufgebaute RTD basiert auf dem $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ -GaAs-Materialsystem. Die GaAs-Source- und GaAs-Drain-Kontaktregionen sind, wie in Abbildung 5.7 gezeigt ist, mit einer Donatordichte von $2 \cdot 10^{18}\text{cm}^{-3}$ hoch dotiert und weisen eine Länge von 30nm auf. Darauf folgt jeweils eine undotierte, 10nm weite GaAs-Spacer Region. Die resonante Struktur wird durch die zwei 3nm weiten $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ -Schichten gebildet. Diese umschließen die 4nm weite GaAs-Schicht.

Die Modellierung erfolgt in Schichtrichtung, wie in Abbildung 5.7 schematisch dargestellt ist. Für die Simulation werden die Materialparameter der einzelnen Schichten der Tabelle 5.1 entnommen. Die Temperatur des Bauelements beträgt $T = 300\text{K}$.

5.2.4. Analyse des Quantentransports im Ortsraum

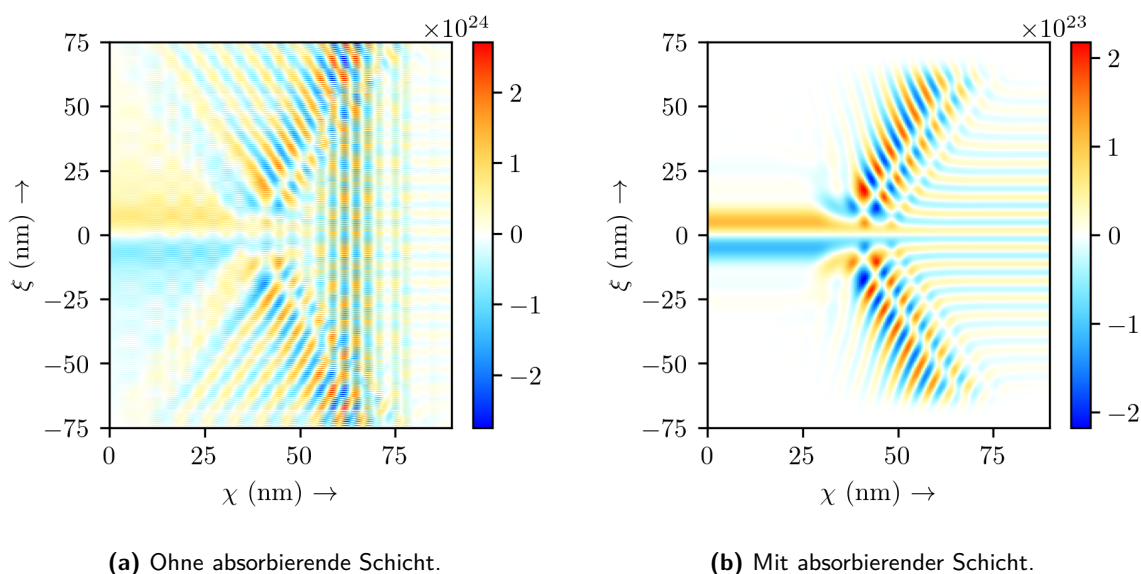
Für die Analyse des Quantentransports im Ortsraum mithilfe der LVNG-RS wird das Rechengebiet hinsichtlich der ξ -Richtung im Intervall $[-75\text{nm}, 75\text{nm}]$ in $N_\xi=400$ Gitterzellen unterteilt,

Schichtnummer	1	2	3	4	5	6	7
Weite in nm	30	10	3	4	3	10	30
Dotierung in 10^{18}cm^{-3}	2	0	0	0	0	0	2
Potenzial in eV	1,424	1,424	1,7013	1,424	1,7013	1,424	1,424
Effektive Masse in m_0	0,063	0,063	0,063	0,063	0,063	0,063	0,063

Tabelle 5.1. Struktur- und Materialparameter der AlGaAs-GaAs-RTD.

bzw. mit $N_\chi = 360$ Punkten bezüglich der Schwerpunktkoordinate¹⁰ χ . Die Parameter der absorbierenden Schicht werden dabei auf Grundlage der Kenntnisse aus dem vorherigen Abschnitt zu $w_{\text{al}} = 26.25\text{nm}$ für die Weite, $b_{\text{al}} = 4\text{eV}$ für die Amplitude und $n_{\text{al}} = 4$ für den Monomgrad bestimmt.

Vergleich der Imaginärteile der statistischen Dichtematrix: In Abbildung 5.8 sind die Imaginärteile der statistischen Dichtematrix ohne absorbierende (Abbildung 5.8a) und mit absorbierender Schicht (Abbildung 5.8b) für eine angelegte Spannung von $U = 0,5\text{V}$ dargestellt. Im Vergleich der beiden Imaginärteile der statistischen Dichtematrix kommt es ohne eine ab-


Abbildung 5.8. Imaginärteile der statistischen Dichtematrix $\text{Im}\{\rho^D(\chi, \xi)\}$ im Vergleich: (a) ohne die absorbierende Schicht und (b) mit der absorbierenden Schicht.

sorbierende Schicht am Rand des Rechengebiets zu Reflexionen, die sich als hoch oszillierender Interferenzterm der ursprünglichen Lösung im gesamten Rechengebiet überlagern, wie in Abbildung 5.8a zu erkennen ist. Derart hoch oszillierende Anteile sind für den Fall mit absorbierender

¹⁰Eine detaillierte Betrachtung der Diskretisierung des Rechengebiets erfolgt in den Kapiteln 6 und 8. Für den Driftoperator wird dabei die Trapezregel verwendet. Als Basis zur Entwicklung des diskreten Diffusionsoperators wird die den Diffusionoperator diagonalisierende Eigenbasis verwendet. Hierbei werden $N = 120$ Eigenvektoren verwendet. Die verbleibende semidiskrete Transportgleichung wird durch die Approximation eines Exponentialoperators erster Ordnung genähert.

Schicht nicht festzustellen (vgl. Abbildung 5.8b). Außerdem sind die Werte des Imaginärteils der statistischen Dichtematrix ohne absorbierende Schicht ca. eine Größenordnung oberhalb des Ergebnisses mit absorbierender Schicht.

Vergleich der Erwartungswerte: Um die Auswirkungen der unphysikalischen Reflexionen zu untersuchen, werden im Folgenden die weniger abstrakten Erwartungswerte in Gestalt der Elektronen- n und der Stromdichte j aus den statistischen Dichtematrizen mit und ohne absorbierende Schicht bestimmt. Wie zuvor in Abschnitt 3.2 bereits erläutert wurde, ist das Verhalten der Elektronendichte dabei mit dem Realteil und die Stromdichte mit dem Imaginärteil der statistischen Dichtematrix verbunden. Die Stromdichte j ist in Abhängigkeit der extern an-

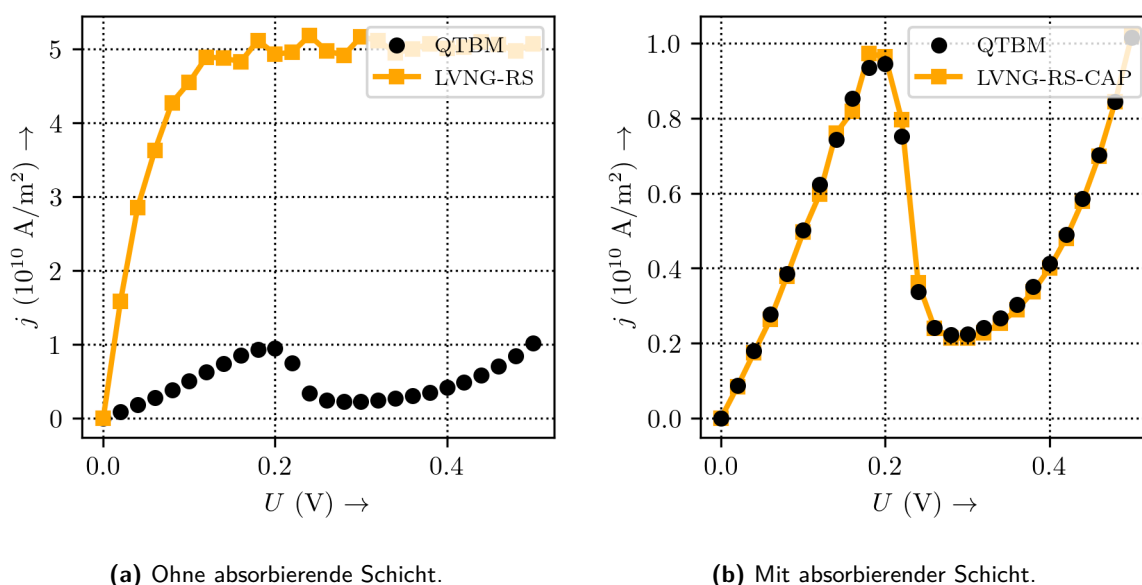


Abbildung 5.9. I-V-Kennlinie ohne (a) und mit (b) absorbierender Schicht (orangefarbene Linie) im Vergleich zur Referenzlösung aus QTBM (schwarze Punkte). Zusätzlich ist in die Legende für die Einbindung der absorbierenden Schicht das Suffix CAP angefügt.

gelegten Spannung U , die sogenannte I-V-Kennlinie, in Abbildung 5.9a mit und in Abbildung 5.9b ohne absorbierende Schicht dargestellt. Zusätzlich sind innerhalb der Abbildungen die Referenzwerte der Stromdichte, welche aus der anerkannten QTBM [7, 8] bestimmt werden, als schwarze Punkte eingetragen. Da die Stromdichte über den Zusammenhang (3.22) proportional zum Gradienten des Imaginärteils der statistischen Dichtematrix hinsichtlich der Relativkoordinate ξ ist, ist sie gegenüber schnell veränderlichen Anteilen in dieser Richtung sehr sensitiv. Unglücklicherweise verursachen die Reflexionen infolge der inadäquaten Einbindung des Rands des Rechengebiets genau einen solch hoch oszillierenden, unphysikalischen Anteil¹¹. Als direkte Konsequenz ergibt sich eine deutlich größere Stromdichte ohne absorbierende Schicht im Vergleich zu den Referenzwerten aus der QTBM. Zusätzlich folgt der Verlauf der Stromdichte ohne absorbierende Schicht keiner physikalisch begründbaren Argumentation im Hinblick auf einen negativen differentiellen Widerstand (NDR). Dieses Verhalten kann darauf zurückgeführt

¹¹Dieser Zusammenhang ist bereits aus dem Vergleich der Imaginärteile der statistischen Dichtematrix in Abbildung 5.8a und in Abbildung 5.5a ersichtlich.

werden, dass keine feste Phasenbeziehung der am Rand reflektierten Terme über die angelegte Spannung besteht.

Die Auswirkungen der unphysikalischen Reflexionen sind somit folgenschwer und keinesfalls vernachlässigbar.

Unter Berücksichtigung der absorbierenden Schicht werden die unphysikalischen Reflexionen an den Rändern des Rechengebiets effektiv vermieden. Wie aus Abbildung 5.9b zu erkennen ist, stimmt die Stromdichte j für den Fall mit absorbierender Schicht quantitativ hervorragend mit der Referenzstromdichte aus der QTBM überein. Der für die RTD charakteristische NDR wird korrekt nachgebildet.

Neben der Abhängigkeit der Stromdichte j von der angelegten Spannung ist auch die Analyse der Abhängigkeit von Ort χ aufschlussreich. Hierzu ist in Abbildung 5.10 der örtliche Verlauf der Stromdichte innerhalb der RTD mit und ohne absorbierende Schicht im Vergleich zur Referenzlösung aus der QTBM für eine angelegte Spannung von $U=0,5V$ dargestellt. Die Werte der

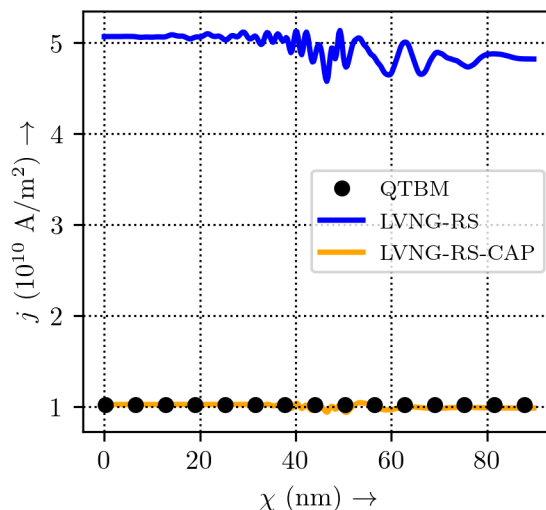


Abbildung 5.10. Örtliche Abhängigkeit der Stromdichten j innerhalb der RTD für eine angelegte Spannung von $U = 0,5V$ im Vergleich. Die blaue Linie (LVNG-RS) zeigt die Stromdichte ohne und die orangefarbene Linie (LVNG-RS-CAP) die Stromdichte mit absorbierender Schicht. Die Referenzwerte der Stromdichte aus der QTBM sind als schwarze Punkte eingezeichnet.

Stromdichte für den Fall ohne absorbierende Schicht (blaue Linie) sind im Vergleich zu denen mit absorbierender Schicht sowie der Referenzlösung einen Faktor von ungefähr fünf größer (vgl. Abbildung 5.10). Wie zuvor diskutiert, ist die Stromdichte als Ableitung des Imaginärteils der statistischen Dichtematrix besonders sensitiv gegenüber hoch oszillierenden Anteilen, die durch die Reflexionen am Rand entstehen. Diese bewirken ein starkes, unphysikalisches Anwachsen der Stromdichte.

Außerdem stellt die Stromdichte j ohne die Implementierung der absorbierenden Schicht eine örtlich variierende Funktion dar, wie in Abbildung 5.10 zu sehen ist. Diese örtliche Variation kann jedoch auf keinem physikalischen Effekt beruhen, da Elektron-Phonon-Wechselwirkungsmechanismen oder Transienten, die ein solches Verhalten bedingen, nicht in der Simulation

berücksichtigt werden. Der hier untersuchte stationäre Fall erfordert gemäß der Kontinuitätsgleichung (3.16) eine örtlich konstante Stromdichte. Auch im Hinblick auf diese grundlegende physikalische Eigenschaft kommt es somit zu erheblichen Fehlern durch die Reflexionen von den Rändern des Rechengebiets.

Unter Berücksichtigung der absorbierenden Schicht (orangefarbene Linie), ist die Forderung des Massenerhalts jedoch erfüllt und stimmt mit den Referenzwerten aus der QTBM (schwarze Punkte) überein.

Die Auswirkungen der absorbierenden Schicht auf den Realteil der statistischen Dichtematrix können über die Elektronendichte n (2.57) bewertet werden. Die Elektronendichten sind für eine exemplarische, angelegte Spannung von $U = 0,5V$ in Abbildung 5.11a mit und in Abbildung 5.11b ohne absorbierende Schicht (orangefarbene Linie) im Vergleich zu den Referenzwerten aus der QTBM (schwarze Punkte) dargestellt. Darüber hinaus ist in den Abbildungen auch das

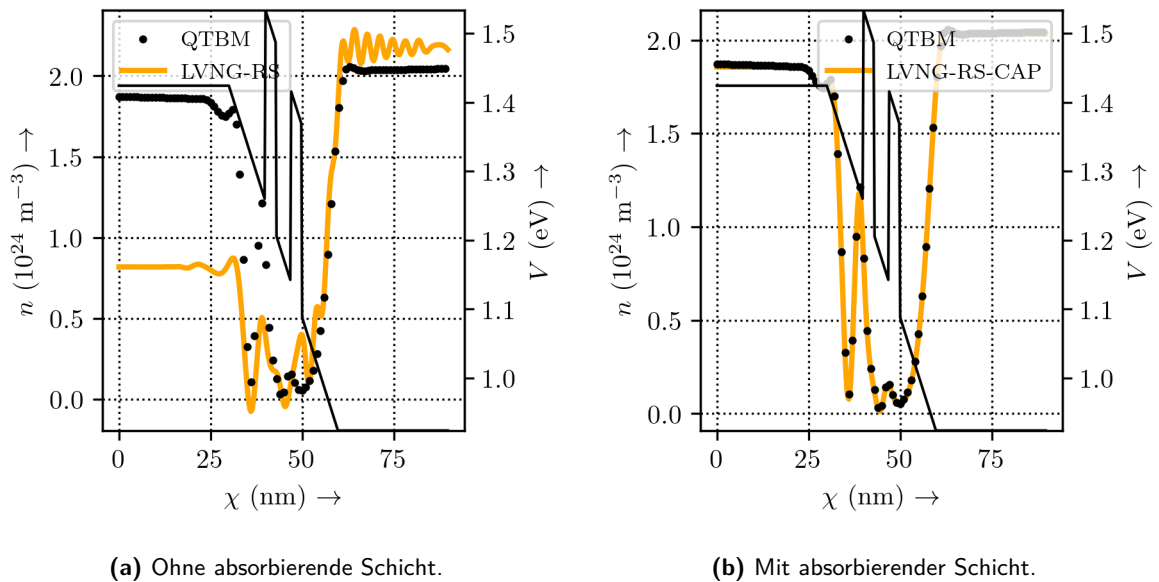


Abbildung 5.11. Vergleich der Elektronendichten $n(\chi)$ für eine angelegte Spannung von $U = 0,5V$. In (a) ist die Elektronendichte ohne (LVNG-RS) und in (b) mit (LVNG-RS-CAP) der Implementierung der absorbierenden Schicht dargestellt (orangefarbene Linie). Die schwarz durchgezogene Linie stellt das Leitungsbandpotenzial in Abhängigkeit der Ortskoordinate χ dar. Die schwarzen Punkte repräsentieren die Werte der Referenzelektronendichte.

gesamte Potenzial (schwarze durchgezogene Linie) dargestellt, welches sich aus dem Leitungsbandpotenzial sowie dem durch die externe Spannung hervorgerufenen Potenzial zusammensetzt.

Ohne die absorbierende Schicht können aus Abbildung 5.11a mehrere unphysikalische Phänomene beobachtet werden: Einerseits liegt die Elektronendichte mit einem Wert von $1 \cdot 10^{24}m^{-3}$ im Source-Bereich $[0nm, 30nm]$ deutlich unterhalb der geforderten Konzentration von $N_D = 2 \cdot 10^{24}m^{-3}$ des Dotierungsprofils. Die im stationären Fall geforderte Ladungsträgerneutralität wird somit nicht erfüllt. Andererseits liegt in den Bereichen $[30nm, 40nm]$ eine unphysikalische, negative Elektronendichte vor. Darüber hinaus weist die Elektronendichte im Drain-Bereich

[60nm, 90nm] ein stark oszillierendes Verhalten auf. Insgesamt liegt daher auch keine Übereinstimmung zu den Referenzwerten aus der QTBM vor.

Unter der Berücksichtigung der absorbierenden Schicht wird eine hervorragende Übereinstimmung der Elektronendichte mit der Referenzelektronendichte aus der QTBM erzielt, wie aus Abbildung 5.11b ersichtlich ist. Unphysikalische Lösungen, welche auf die inadäquate Beschreibung der Ränder zurückzuführen sind, können effektiv vermieden werden.

5.2.5. Analyse des Quantentransports im Phasenraum

Im Phasenraum ist die Notwendigkeit einer absorbierenden Schicht bezüglich der Relativkoordinate ξ infolge der nichtlokal wirkenden Fourier-Transformation weitaus weniger einsichtig als bei der direkten Betrachtung innerhalb des Ortsraums. Die Nichtlokalität führt dazu, dass durch die Ränder hervorgerufene unphysikalische Reflexionen mit verschiedenen Wellenvektoren zu einer Verfälschung der entsprechenden Amplitude¹² nach der Fourier-Transformation innerhalb der Wigner-Funktion führen [S8]. Daher sollen die Vernachlässigung des Oberflächenterms und seine Folgen untersucht werden.

Rechengebiet im Phasenraum: Zur numerischen Approximation der WTG werden sowohl konventionelle als auch die in dieser Arbeit neu entwickelten Methoden herangezogen, welche in den Kapiteln 6 - 8 beschrieben werden. Die folgenden Untersuchungen beinhalten exemplarisch das Upwind-Verfahren zweiter Ordnung (UDS2) [80, 84] als auch das Verfahren auf Basis eines Exponentialoperators erster Ordnung (EO1) [28, S8, S10].

Die numerische Simulation erfolgt innerhalb des Gebiets $[0\text{nm}, 90\text{nm}] \times [-2.25\text{nm}^{-1}, 2.25\text{nm}^{-1}]$, wobei die k -Richtung mit $N_k = 320$ und die χ -Richtung mit $N_\chi = 360$ äquidistanten Punkten diskretisiert werden. Die Diskretisierung der Wellenzahl entspricht gemäß (6.10) einer Länge von $L_\xi \approx 445\text{nm}$. Auf Grundlage der gewonnenen Kenntnisse aus Abschnitt 5.2.2 wird für die absorbierende Schicht daher eine Weite von $w_{\text{al}} = 77\text{nm}$ angesetzt, sowie $n_{\text{al}} = 4$ und $b_{\text{al}} = 4\text{eV}$.

Vergleich der Wigner-Funktionen: Die Wigner-Funktionen sind in Abbildung 5.12 für eine exemplarisch angelegte Spannung von $U = 0,2\text{V}$ für die verschiedenen numerischen Methoden mit und ohne absorbierende Schicht dargestellt.

Die Wigner-Funktion für das Upwind-Verfahren ohne die Implementierung einer absorbierenden Schicht stellt die Lösung dar, welche in der Literatur mit konventionell eingesetzten numerischen Verfahren, z. B. [23, 80, 84], erzielt wird und ist innerhalb von Abbildung 5.12a gezeigt.

Im Vergleich zum hier entwickelten Formalismus der absorbierenden Schicht, für welchen die Wigner-Funktion unter Verwendung des Upwind-Verfahrens in Abbildung 5.12c dargestellt ist, ergeben sich wesentliche Unterschiede. Zum einen liegt ohne absorbierende Schicht ein zusätzliches Interferenzmuster um $k \approx -0,25\text{nm}^{-1}$ vor, welches sich bis zum drainseitigen Kontakt entlang des Orts χ durchzieht. Auch das Interferenzmuster um $k \approx 0,25\text{nm}^{-1}$, welches zwar auch

¹²Im Multiband-Regime wird bei den komplexwertigen Komponenten f_{cv} und f_{vc} auch die Phasenlage durch die Reflexionen verfälscht.

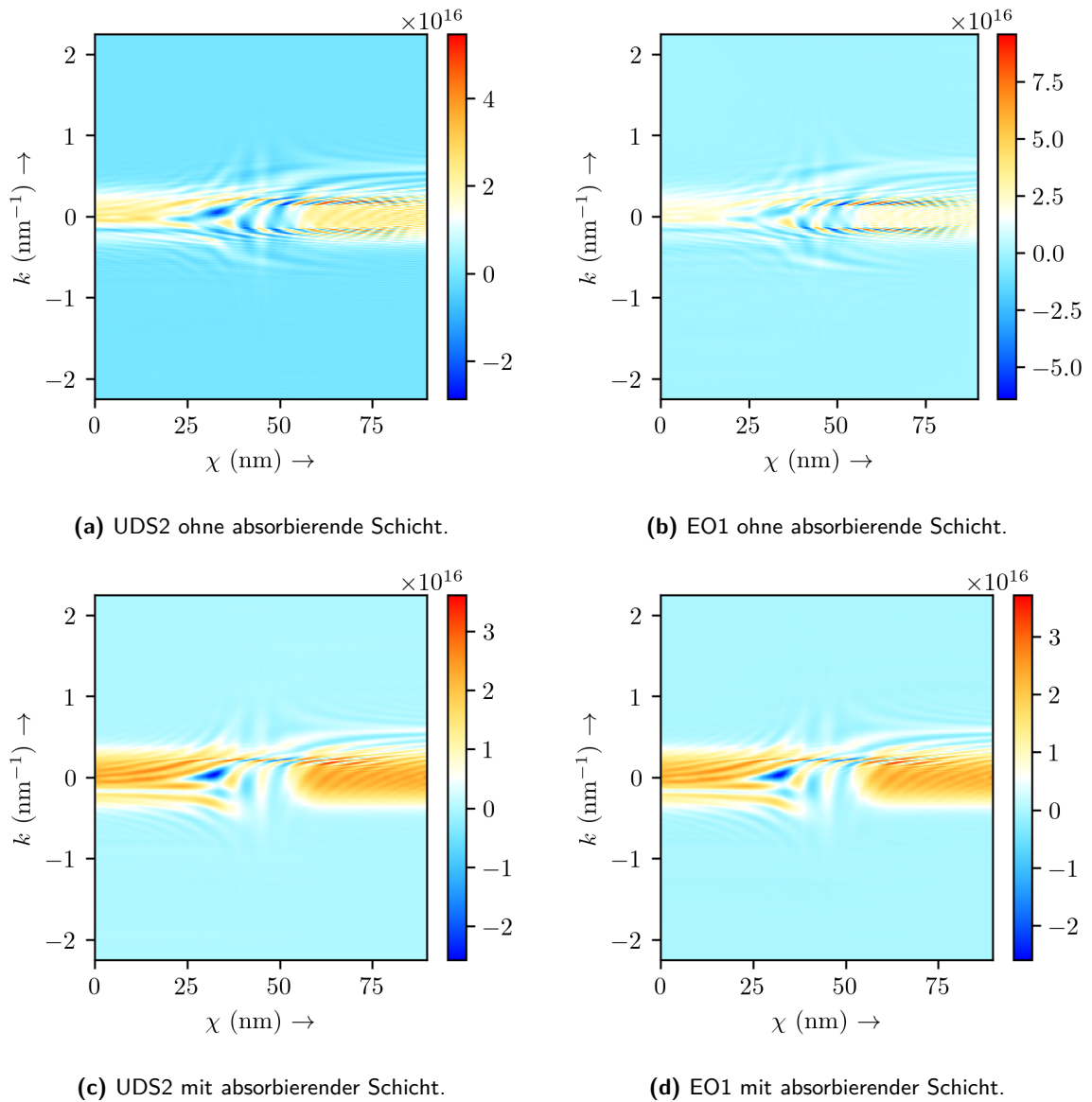


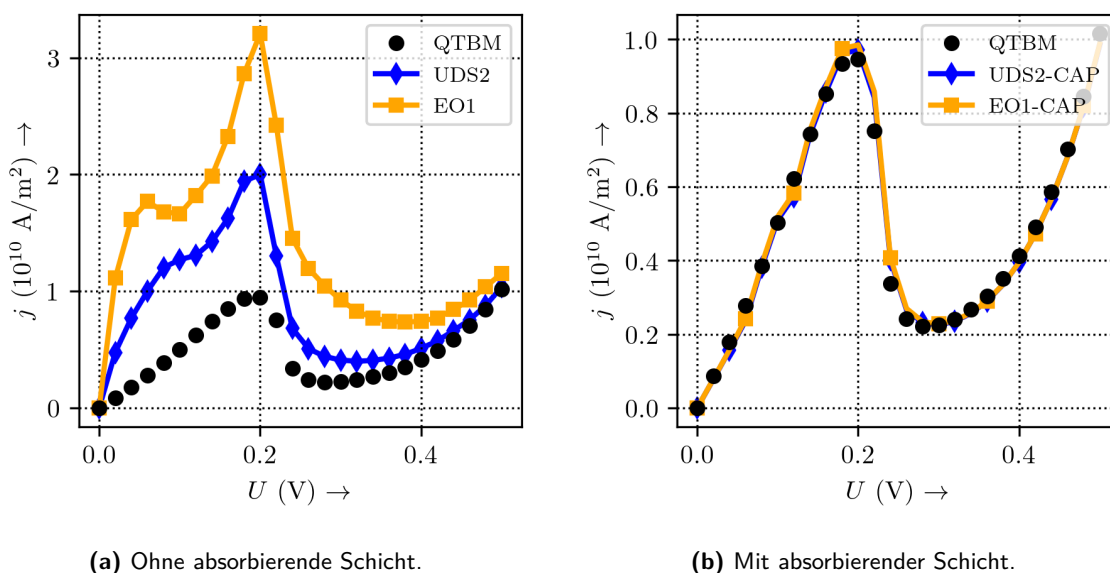
Abbildung 5.12. Wigner-Funktionen $f(\chi, k)$ der Resonante Tunneldiode (RTD) für eine angelegte Spannung von $U = 0.2\text{V}$ im Vergleich. Für das Upwind-Verfahren ist die Wigner-Funktion in (a) ohne und in (c) mit absorbierender Schicht dargestellt. Das Verfahren auf Basis eines Exponentialoperators ist in (b) ohne und in (d) mit absorbierender Schicht dargestellt.

in der Lösung mit absorbierender Schicht vorliegt, zieht sich jedoch im Gegensatz bis zum drauseitigen Kontakt durch. Zum anderen nimmt die Wigner-Funktion ohne absorbierende Schicht größere Werte als mit absorbierender Schicht an (vgl. Abbildungen 5.12a und 5.12c). Für die Wigner-Funktionen aus der Approximation auf Basis eines Exponentialoperators, welche in Abbildung 5.12b für den Fall ohne und in Abbildung 5.12d für den Fall mit absorbierender Schicht dargestellt sind, ergibt sich ein analoger Zusammenhang, wobei der Extremalwert der Wigner-Funktion ohne absorbierende Schicht ungefähr doppelt so groß ist wie derjenige mit absorbierender Schicht.

Im Grundsatz kennzeichnen diese Interferenzmuster das Auftreten von Quanteneffekten, z. B. Quantenverschränkungen oder Tunnelprozesse [55]. Eine angemessene Berücksichtigung dieser Effekte ist somit entscheidend für die Analyse von Quantenbauelementen. Infolge der Vernachlässigung von den Oberflächentermen (Annahme von Dirichlet-Randbedingungen im Ortsraum) kommt es zu zusätzlichen unphysikalischen Interferenzmustern innerhalb der Wigner-Funktion, welche in zahlreichen Publikationen beobachtet werden können, z. B. [65, 97]. Mit der Implementierung einer absorbierenden Schicht können die unphysikalischen Effekte vermieden werden [S8].

Um die Auswirkungen der unphysikalischen Interferenzmuster aufgrund der Vernachlässigung der Oberflächenterme zu untersuchen, wird im Folgenden die Stromdichte für die verschiedenen Methoden analysiert.

Vergleich der Stromdichten: Die Stromdichten j werden als Moment erster Ordnung¹³ aus der Wigner-Funktion berechnet. Dementsprechend sensitiv ist die Größe gegenüber den unphysikalischen Interferenzmustern, wie sie zuvor in den Abbildungen 5.12 dargestellt worden sind.



(a) Ohne absorbierende Schicht.

(b) Mit absorbierender Schicht.

Abbildung 5.13. I-V-Kennlinie: Stromdichte j für eine RTD in Abhängigkeit der angelegten Spannung U für die verschiedenen Verfahren mit (a) und ohne (b) Implementierung der absorbierenden Schicht im Vergleich. Die blaue Linie markiert dabei die Anwendung des Upwind-Verfahrens zweiter Ordnung (UDS2) und die orangefarbene Linie kennzeichnet die Anwendung des Exponentialoperator-Verfahrens erster Ordnung (EO1) zur numerischen Lösung der stationären WTG. Die schwarzen Punkte repräsentieren die Werte der Referenzstromdichte aus der QTBM. Das in der Legende vorzufindende Suffix CAP deutet auf die Anwendung der absorbierenden Schicht hin.

Die berechneten I-V-Kennlinien ohne die Implementierung einer absorbierenden Schicht sind

¹³Der genaue Zusammenhang im numerischen Fall folgt (7.5) für das Upwind-Verfahren sowie (8.46) für den Ansatz auf Basis des Exponentialoperators.

innerhalb Abbildung 5.13a dargestellt. Darüber hinaus sind die Werte der Referenzlösung aus der QTBM als schwarze Punkte in dieser Abbildung eingezeichnet. Die Stromdichte nimmt für das Upwind-Verfahren (blaue Linie) doppelt so große und für das Exponentialoperator-Verfahren (orangefarbene Linie) ungefähr dreimal so große Werte bei der Spannung $U = 0, 2V$ an. Auch außerhalb dieser Spannung liegen die Werte der Stromdichte oberhalb der Referenzlösung, wobei die Abweichung mit größeren angelegten Spannungen abnimmt. Die hohen Werte der Stromdichte sind auf die unphysikalischen Interferenzmuster innerhalb der Wigner-Funktion (vgl. Abbildungen 5.12a und 5.12c) zurückzuführen, die bei der Auswertung des Moments erster Ordnung zusätzliche Anteile liefern. Dies spiegelt auch die mit dem konventionellen Upwind-Verfahren erzielten Ergebnisse innerhalb der Literatur wider, z. B. [24, 27, 81], bei denen die Werte der Stromdichte deutlich über denen der Referenzlösung aus der Schrödingergleichung liegen. Trotz der Abweichung erfasst die Stromdichte ohne absorbierende Schicht den NDR¹⁴. Ein wichtiger Aspekt, der in diesem Zusammenhang nicht unerwähnt bleiben soll, adressiert die Konvergenz bezüglich der Diskretisierungsweite $\Delta\chi$, bei welcher die Stromdichte gegen eine unphysikalische Lösung ohne NDR konvergiert [27]. Die Diskussion des Aspekts überschreitet jedoch die Intention dieses Abschnitts und wird daher gesondert in Kapitel 7 diskutiert.

Die Stromdichten j , die mit der Implementierung der absorbierenden Schicht erzielt werden, sind in Abbildung 5.9b in Abhängigkeit der angelegten Spannung U gezeigt. Sowohl die Stromdichte aus dem Upwind-Verfahren (blaue Linie) als auch die Stromdichte aus dem Ansatz auf Basis des Exponentialoperators (orangefarbene Linie) stimmen mit den Referenzwerten (schwarze Punkte) der Stromdichte aus der QTBM überein. Der mittlere relative Fehler im Hinblick auf die Referenzlösung liegt für beide numerische Verfahren zur Lösung der WTG in einer Größenordnung von 10^{-2} .

Fazit: Infolge eines abgeschlossenen Gebiets, auf welchem die Wigner-Transportgleichung mit numerischen Verfahren gelöst wird, müssen Oberflächenterme berücksichtigt werden. Es konnte gezeigt werden, dass eine Vernachlässigung der Oberflächenterme der Implementierung von Dirichlet-Randbedingungen im Ortsraum entspricht. An den Rändern des Rechengebiets kommt es somit zu starken Reflexionen, welche zu unphysikalischen Ergebnissen führen. Da die konventionellen Methoden [22–24, 26–29, 59, 61, 65, S2, S3, 68–70, 73, 74, 77–83, S12, 84–87, 92, 93, 97, 101, 102, 107, 109–113] innerhalb der Literatur die Oberflächenterme nicht berücksichtigen, unterliegen diese somit einem wesentlichen konzeptionellen Fehler.

Um die unphysikalischen Reflexionen infolge des abgeschlossenen Gebiets zu vermeiden, ist eine absorbierende Schicht auf Grundlage eines komplex absorbierenden Potenzials für den Einsatz innerhalb des Dichtematrix-Formalismus entwickelt, demonstriert und validiert worden [S4–S6, S8]. Die Einbindung der absorbierenden Schicht in bestehende und neue numerische Verfahren ist denkbar einfach, da nur der Driftoperator modifiziert werden muss. Die physikalischen Eigenschaften der Wigner-Funktion als originelle Verteilungsfunktion im Phasenraum bleiben erhalten. Insgesamt führt die absorbierende Schicht zu einer wesentlichen Verbesserung im Umfeld der Transportgleichungen, welche von der LVNG-RS abstammen. Mittlerweile wird die absorbierende Schicht sogar schon in anderen Arbeitsgruppen erfolgreich eingesetzt [120].

¹⁴Vermutlich ist dieser Zusammenhang der Grund dafür, dass trotz dieser Abweichungen an der Upwind-Diskretisierung festgehalten wird.

5.2.6. Transparente Randbedingungen und Perfectly Matched Layer

Weiterhin sind in dieser Arbeit Perfectly Matched Layer (PML) [121] und transparente Randbedingungen [122] umgesetzt worden. Beide Methoden erwiesen sich jedoch als numerisch instabil. Die Idee hinter den Methoden und deren Einschränkung sollen im Folgenden kurz erläutert werden.

Uniaxiale PML: Die PML ist eine künstlich absorbierende Schicht zur Vermeidung unphysikalischer Reflexionen von den Rändern des Rechengebiets [121]. Im Vergleich zur vorgestellten absorbierenden Schicht auf Grundlage eines komplex absorbierenden Potentials wird die Dämpfung der einlaufenden Wellen durch eine komplexe Koordinatenstreckung durch den Parameter $\sigma(\xi)$ erreicht. In Bereichen $\sigma > 0$ erfährt die Lösung in ξ -Richtung eine zusätzliche Dämpfung. Diese Bereiche liegen in Analogie zur bereits etablierten absorbierenden Schicht auch in der Nähe der Ränder.

Für eine uniaxiale PML führt die komplexe Koordinatenstreckung zu einer Transformation der Differenzialoperatoren [121]

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \rightarrow \frac{1}{s} \frac{\partial}{\partial \xi} \quad \text{mit} \quad s = 1 - \frac{\sigma(\xi)}{i\omega}, \quad (5.36)$$

wobei ω die Kreisfrequenz darstellt. Mit diesem Zusammenhang (5.36) ergibt sich am Beispiel der LVNG-RS (3.11) die Transportgleichung¹⁵

$$-i\omega \hat{\rho}(\chi, \xi, \omega) = i \frac{\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial \chi} \frac{1}{\left(1 - \frac{\sigma(\xi)}{i\omega}\right)} \frac{\partial}{\partial \xi} \hat{\rho}(\chi, \xi, \omega) + \frac{1}{i\hbar} \hat{B}(\chi, \xi, \omega) * \hat{\rho}(\chi, \xi, \omega), \quad (5.37)$$

in welcher die PML implementiert ist. Mit der Einführung der Hilfsfunktion $\hat{G}(\chi, \xi, \omega) = -\frac{\sigma}{i\omega} \hat{B}(\chi, \xi, \omega) * \hat{\rho}(\chi, \xi, \omega)$ wird die LVNG-RS mit PML (5.37) in

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho(\chi, \xi, t) &= i \frac{\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial \chi} \frac{\partial}{\partial \xi} \rho(\chi, \xi, t) + \frac{1}{i\hbar} (B(\chi, \xi, t) - i\hbar\sigma(\xi)) \rho(\chi, \xi, t) + G(\chi, \xi, t) \\ \frac{\partial}{\partial t} G(\chi, \xi, t) &= \frac{\sigma(\xi)}{i\hbar} \cdot B(\chi, \xi, t) \cdot \rho(\chi, \xi, t) \end{aligned} \quad (5.38)$$

innerhalb des Zeitbereichs überführt. Neben der Transportgleichung muss somit auch eine weitere partielle Hilfsdifferenzialgleichung in der Zeit integriert werden. Aus dem Vergleich mit der zuvor vorgestellten absorbierenden Schicht kann der Ausdruck $i\hbar\sigma(\xi)$ in (5.38) dabei offensichtlich mit dem komplex absorbierenden Potential $iW(\xi)$ identifiziert werden.

Bei numerischen Untersuchungen stellte sich dieses System jedoch als instabil heraus. Bei der Zeitintegration der Hilfsdifferenzialgleichung kommt es im Bereich der absorbierenden Schicht innerhalb der Barrierenstruktur zu einer anwachsenden Lösung.

¹⁵Für die Überführung in den Frequenzbereich mithilfe der Fourier-Transformation werden die folgenden Relationen $\frac{\partial}{\partial t} \circ \bullet - i\omega$ und $f(t) \cdot g(t) \circ \bullet \hat{f}(\omega) * \hat{g}(\omega)$ ausgenutzt.

Transparente Randbedingungen: Als Grundannahme für die Implementierung von transparenten Randbedingungen wird davon ausgegangen, dass der Anfangszustand einen Systemzustand ohne wesentliche Anteile am Rand in ξ -Richtung darstellt¹⁶ [S4, 122].

Bei einer Zeitpropagation wird angenommen, dass das Verhältnis der außerhalb des Rechengebiets¹⁷ liegenden Werte, $\rho(\chi, \xi_0, t)$ und $\rho(\chi, \xi_{N_\xi+1}, t)$, in Abhängigkeit der Verhältnisse der inneren, angrenzenden Randwerte ausgedrückt werden kann:

$$\gamma_1 = \frac{\rho(\chi, \xi_2, t)}{\rho(\chi, \xi_1, t)} \approx \frac{\rho(\chi, \xi_1, t)}{\rho(\chi, \xi_0, t)} \quad \text{und} \quad \gamma_{N_\xi} = \frac{\rho(\chi, \xi_{N_\xi-1}, t)}{\rho(\chi, \xi_{N_\xi}, t)} \approx \frac{\rho(\chi, \xi_{N_\xi}, t)}{\rho(\chi, \xi_{N_\xi+1}, t)}. \quad (5.39)$$

Die außerhalb des Rechengebiets liegenden Werte der statistischen Dichtematrix können hiermit für jeden Zeitschritt geschätzt und in die Diskretisierungsmatrizen (siehe Kapitel 6) eingearbeitet werden.

Für die im Rahmen dieser Arbeit betrachteten Quantenbauelemente führt der Ansatz zu numerischen Instabilitäten. Auf der einen Seite werden schnelle Änderungen des Imaginärteils der statistischen Dichtematrix nur bei sehr feiner Diskretisierungsweite hinreichend gut erfasst. Auf der anderen Seite können nicht senkrecht auf den Rand einfallende Wellen (Komponenten mit χ -Abhängigkeit) numerische Probleme verursachen.

¹⁶Dieser Sachverhalt entspricht im kohärenten Fall z. B. dem thermodynamischen Gleichgewicht.

¹⁷Die Definition der diskreten statistischen Dichtematrix erfolgt in Kapitel 6.

6. Semidiskrete Transportgleichungen

In den vorherigen Kapiteln sind die theoretischen Transportgleichungen auf Basis der Liouville-von-Neumann-Gleichung hergeleitet und Randbedingungen zur Beschreibung der Bauelemente als offene Quantensysteme formuliert worden. Da eine analytische Lösung der Transportgleichungen jedoch nicht möglich ist, müssen numerische Methoden herangezogen werden.

In diesem Kapitel soll daher, vorbereitend zur eigentlichen numerischen Lösung der Transportgleichungen in den nachfolgenden Kapiteln, eine Überführung in semidiskrete Transportgleichungen durch Diskretisierung der Wellenzahl k , beziehungsweise der Relativkoordinate ξ , erfolgen. Im Ergebnis liegt eine Darstellung der semidiskreten Transportgleichung vor, die sowohl konzeptionell unabhängig von der Diskretisierung als auch der entsprechenden Basis ist und somit für weitere, allgemeingültige Betrachtungen geeignet ist.

Zu Beginn wird die Wigner-Transportgleichung in Abschnitt 6.1 bezüglich der Wellenzahl k diskretisiert. Hierzu wird auch eine alternative Diskretisierung des Phasenraums vorgeschlagen, die zu einer Entkopplung der unabhängigen Variablen führt. In diesem Zusammenhang fließen auch die Kenntnisse der analytischen Eigenschaften der Operatoren im Hinblick auf die Kontinuitätsgleichung aus Kapitel 3 in die Diskretisierung ein. Neben diesen Betrachtungen wird eine neue Methode auf Basis der LVNG-RS unter Verwendung einer Finiten-Volumen-Approximation in Abschnitt 6.2 vorgestellt. Übergangsbedingungen sind lokal im Ortsraum und können über das Finite-Volumen-Verfahren adäquat eingebunden werden. Eine Beschreibung des Einströmverhaltens mit den Inflow-Randbedingungen gelingt unter Anwendung verschiedener Basistransformationen. Diese sollen im Hinblick auf ihre Anwendbarkeit sowie ihren Zusammenhang zu einer Phasenraumdarstellung untersucht werden.

6.1. Semidiskrete Wigner-Transportgleichung

Die Diskretisierung des Phasenraums ist ein tiefgreifendes Problem innerhalb des Wigner-Formalismus [20, 123]. Eine alternative Diskretisierung wird daher zunächst in Abschnitt 6.1.1 formuliert. Auf dieser Grundlage werden anschließend in Abschnitt 6.1.2 die entsprechenden semidiskreten Operatoren in einer generalisierten Form hergeleitet. Mit den ermittelten Zusammenhängen werden die semidiskreten Operatoren und Transportgleichungen schließlich in Abschnitt 6.1.3 für die Intrabandmodelle, beziehungsweise Abschnitt 6.1.4 für die Interbandmodelle angegeben.

6.1.1. Diskretisierung des Phasenraums

Die Diskretisierung des Phasenraums, wie sie üblicherweise dem Upwind-Verfahren zugrunde liegt, führt zu zwei wesentlichen Problemen:

- Die Diskretisierungsweiten des Phasenraums, $\Delta\chi$ und Δk , sind über eine **antiproportionale Relation** gemäß $\Delta k \propto \Delta\chi^{-1}$ miteinander verbunden [22–24, 61, 65, 68, 79, 83, 84, 93].
- Die **Massenerhaltung** im Hinblick auf die Kontinuitätsgleichung wird über eine Zwangsbedingung bezüglich der **Diskretisierungsweiten** Δk oder $\Delta\xi$ gefordert [21, 23].

Der erste Punkt führt nicht nur zu einem unphysikalischen Zusammenhang zwischen den theoretisch **unabhängigen** Variablen des Phasenraums, sondern auch zu schlechten Konvergenzeigenschaften [20, S10], da eine Verkleinerung der Schrittweite $\Delta\chi$ unmittelbar zu einer schlechteren Auflösung bezüglich des diskreten Gitters der Wellenzahl k führt ($\Delta\chi \rightarrow 0 \Rightarrow \Delta k \rightarrow \infty$). Der Hintergrund für die Einführung dieser Kopplung liegt in der Tatsache begründet, dass die Gitterpunkte der diskreten Schwerpunkt- und Relativkoordinate, χ und ξ , sich die diskreten Gitterpunkte mit dem diskreten Ursprungssystem in z und z' teilen sollen [23, 102], wie in späteren Abschnitten dieses Kapitels noch diskutiert wird.

Zur Vermeidung der offensichtlichen Probleme der Diskretisierung schlagen die Autoren in [81, 82] ein sogenanntes Balancieren der Diskretisierungsweiten $\Delta\chi$ und Δk vor, bei welchem nur bestimmte Verhältnisse der Diskretisierungsweiten auf empirischer Basis zu physikalischen Ergebnissen führen.

Der zweite Punkt ist für das üblicherweise herangezogene Modell auf Grundlage einer örtlich konstanten effektiven Masse mathematisch zwar valide, führt jedoch bereits bei einer Erweiterung bezüglich einer variierenden effektiven Masse zu einer unphysikalischen Beschreibung des Systems [22]. Für den Massenerhalt müssen dann unterschiedliche Gitter zur Auswertung der Faltungsintegrale herangezogen werden [84]¹.

Um diese fundamentalen Probleme zu vermeiden, wird im Folgenden ein alternativer Ansatz zur Diskretisierung des Phasenraums entwickelt, bei welchem die Kenntnisse über die analytischen Eigenschaften der Operatoren im Hinblick auf den Massenerhalt aus Kapitel 3 einbezogen werden.

Quantisierung des Wellenvektors: Zunächst wird die statistische Dichtematrix innerhalb des Intervalls \mathcal{I}_ξ in eine Basis, bestehend aus ebenen Wellen entwickelt [S9]

$$\rho_{\lambda\lambda'}^D(\chi, \xi, t) = \sum_n f_{\lambda\lambda'}(\chi, k_n, t) \cdot \frac{\exp(ik_n\xi)}{\sqrt{L_\xi}}, \quad (6.1)$$

wobei $f_{\lambda\lambda'}(\chi, k_n, t)$ den Entwicklungskoeffizienten darstellt. Um eine eindeutige Lösung zu erhalten, müssen die Basisfunktionen der Orthogonalitätsrelation

$$\int_{\mathcal{I}_\xi} \frac{\exp(-ik_n\xi)}{\sqrt{L_\xi}} \frac{\exp(ik_m\xi)}{\sqrt{L_\xi}} = \delta_{n,m} \quad (6.2)$$

genügen, sodass als mögliche Argumente der Basisfunktionen nur die Menge

$$k_n = \frac{2\pi}{L_\xi} n + \Phi_0 \quad (6.3)$$

¹Eine einfache Erklärung dieses Zusammenhangs folgt unmittelbar aus der Betrachtung der Integralkerne. Da die Annahme im Standardmodell auf einem verschwindenden sin-Term beruht, kommt es bei der Erweiterung mit örtlich variierender effektiver Masse auch zu cos-Termen, die auf demselben Gitter nicht verschwinden.

mit $n \in \mathbb{Z}$ und der konstanten Phase Φ_0 in Betracht kommt. Der Entwicklungskoeffizient kann dabei leicht mit der Definition der Wigner-Funktion (2.54) identifiziert werden, nun aber auf einem abgeschlossenen Rechengebiet² entsprechend:

$$f_{\lambda\lambda'}(\chi, k_n, t) = \frac{1}{\sqrt{L_\xi}} \int_{\mathcal{I}_\xi} d\xi \exp(-ik_n\xi) \cdot \rho_{\lambda\lambda'}^D(\chi, \xi, t). \quad (6.4)$$

In diesem Kontext entspricht das Argument der Basisfunktion der Wellenzahl k , welche jedoch infolge des abgeschlossenen Gebiets in ξ -Richtung quantisiert ist [S9]. Dies führt zu einer natürlichen Diskretisierungsweite von:

$$\Delta k = \frac{2\pi}{L_\xi}. \quad (6.5)$$

Bereits an dieser Stelle ist zu erkennen, dass kein antiproportionaler Zusammenhang zur Diskretisierungsweite $\Delta\chi$ besteht, sondern ein physikalischer Zusammenhang zur Länge L_ξ des Intervalls \mathcal{I}_ξ der Relativkoordinate³.

Aus physikalischer Sicht beschreibt der Wert $k_n = 0$ die gebundenen Zustände der Quantenstruktur. Diese führen jedoch bei der stationären numerischen Lösung zu einer singulären Systemmatrix [124]. Mithilfe der konstanten Phase Φ_0 erfolgt daher eine Verschiebung, sodass der Wert $k_n = 0$ wie üblich vermieden wird [23, 124].

In dem kürzlich veröffentlichten Beitrag [120] wird ein Petrov-Galerkin-Verfahren zur Beschreibung der gebundenen Zustände erfolgreich vorgeschlagen.

Vollständigkeitsrelation und Massenerhalt: Als Schlüsseleigenschaft für den Massenerhalt ist in Kapitel 3 die Symmetrie der Operatoren gemeinsam mit der Ausblendeigenschaft der Dirac-Distribution am Punkt $\xi = 0$ erarbeitet worden.

Die letzte Eigenschaft steht in einem engen Zusammenhang mit der Vollständigkeitsrelation, die sich durch das Einsetzen von (6.4) in (6.1) zu

$$\sum_n \frac{\exp(ik_n\xi)}{\sqrt{L_\xi}} \frac{\exp(-ik_n\xi')}{\sqrt{L_\xi}} = \delta(\xi - \xi') \quad (6.6)$$

ergibt und somit auch für das abgeschlossene Gebiet gilt [S9]. Neben dieser Eigenschaft ist es weiterhin entscheidend, die Symmetrie der Operatoren am Punkt $\xi = 0$ einzubeziehen.

Damit ist die Diskretisierung innerhalb des Intervalls \mathcal{I}_ξ nicht frei wählbar, sondern unterliegt der Zwangsbedingung, den diskreten Abtastwert $\xi = 0$ einzubinden [S9].

Im Vergleich zu dem Standardverfahren, bei dem eine Zwangsbedingung bezüglich der Diskretisierungsweiten Δk beziehungsweise $\Delta\xi$ [21, 23] gefordert wird, basiert der vorgestellte Ansatz auf den analytischen Eigenschaften der Operatoren und gilt daher im Gegensatz für beliebige Hamiltonoperatoren.

²Bereits in Abschnitt 5.2 zur absorbierenden Schicht ist dieser Zusammenhang ausgenutzt worden.

³Dies ist eine inhärente Eigenschaft der Fourier-Transformation.

Diskretisierungsvorschrift: Auf Grundlage der erzielten Erkenntnisse der vorherigen beiden Abschnitte kann nun die Diskretisierung des Phasenraums erfolgen [S9].

Hierzu wird das Intervall \mathcal{I}_χ bezüglich der Schwerpunktkoordinate χ mit N_χ Abtastpunkten diskretisiert, was zu den diskreten Abtastpunkten χ_i und einer Diskretisierungsweite $\Delta\chi$ führt, wie schematisch in Abbildung 6.1 gezeigt ist. Auf einem abgeschlossenen Gebiet für die Relativko-

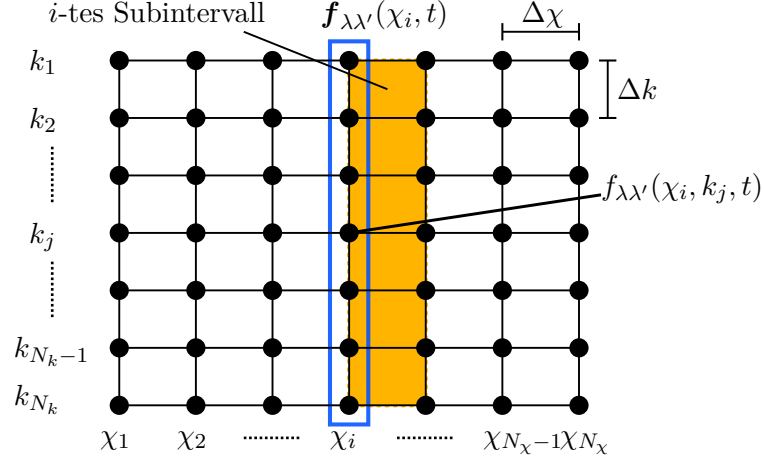


Abbildung 6.1. Schematische Diskretisierung des Phasenraums. Als schwarze Punkte sind die diskreten Abtastwerte exemplarisch für die Wigner-Funktion $f_{\lambda\lambda}(\chi_i, k_j)$ dargestellt. Die Diskretisierung mit N_χ Abtastpunkten führt zu einer Diskretisierungsweite von $\Delta\chi$ zwischen den diskreten Werten χ_i . Für die Diskretisierung der Wellenzahl werden N_k Abtastpunkte verwendet. Benachbarte Abtastwerte k_j liegen entsprechend der Diskretisierungsweite Δk weit auseinander. Für einen festen Ort χ_i können die diskreten Abtastwerte der Wigner-Funktion bezüglich der Wellenzahl k_j in einem Vektor $\mathbf{f}_{\lambda\lambda'}(\chi_i)$ zusammengefasst werden (blau umrandete Menge an Punkten). Der orangefarbene Bereich repräsentiert das i -te Subintervall (Teilgebiet), in welchem die benachbarten Vektoren, $\mathbf{f}_{\lambda\lambda'}(\chi_i)$ und $\mathbf{f}_{\lambda\lambda}(\chi_{i+1})$, über eine formale Lösung auf Basis eines Exponentialoperators miteinander verknüpft werden (vgl. Kapitel 8).

ordinate liegt die Wellenzahl k_j (6.3) bereits quantisiert vor. Insgesamt werden N_k quantisierte Werte einbezogen, wobei diese gemäß den Inflow-Randbedingungen (vgl. Abschnitt 5.1) symmetrisch um den Punkt $k = 0\text{nm}^{-1}$ verteilt werden sollen, ohne diesen Punkt selbst zu beinhalten [23, 124]. Die Anzahl N_k stellt also eine gerade, natürliche Zahl dar. Für die diskreten Werte k_j ergibt sich damit [S9]:

$$k_j = -\frac{2\pi}{L_\xi} \left\{ j - \frac{1}{2} (N_k + 1) \right\} \quad \text{mit } j \in 1, \dots, N_k. \quad (6.7)$$

Innerhalb der Integralkerne der WTG sind Funktionen in Abhängigkeit der Relativkoordinate ξ zu bestimmen. Da in der Regel kein geschlossener, analytischer Ausdruck für die Integralkerne vorliegt, sind diese mit numerischen Methoden zu approximieren. Hierzu wird das symmetrische Intervall \mathcal{I}_ξ , wie zuvor in Abbildung 5.1 gezeigt, mit N_ξ Abtastpunkten diskretisiert, was in einer Diskretisierungsweite $\Delta\xi$ zwischen den diskreten Abtastwerten ξ_l resultiert. Im Hinblick auf den Massenerhalt ist es entscheidend, den diskreten Punkt $\xi_l = 0$ einzubeziehen. Die Anzahl der Diskretisierungspunkte N_ξ ist daher ungerade [S9]. Infolge der Diskretisierung der Relativkoordinate mit N_ξ Abtastpunkten kann die Anzahl der quantisierten Wellenzahlen N_k nicht mehr frei gewählt werden, sondern unterliegt der Eindeutigkeitsbedingung⁴ $N_k \leq N_\xi$.

⁴Im Wesentlichen spiegelt dieser Zusammenhang die Eigenschaften der diskreten Fourier-Transformation wider.

Über den Zusammenhang $L_\xi = N_\xi \Delta \xi$ ergibt sich für den vorgestellten Ansatz die Proportionalität der Diskretisierungsweiten zu $\Delta k \propto \Delta \xi^{-1}$, wodurch die Diskretisierungsweiten Δk und $\Delta \chi$ im Gegensatz zu der in der Literatur vorherrschenden Diskretisierung [22–24, 61, 65, 68, 79, 83, 84, 93] unabhängig voneinander gewählt werden können. Für den Fall, dass die Diskretisierungsweite als $\Delta \xi \equiv 2\Delta \chi$ gewählt wird, stimmt der vorgestellte Ansatz mit dem herkömmlichen Ansatz überein [S9].

Im Vergleich zum herkömmlichen Ansatz hat dieses Vorgehen jedoch seinen Preis. Dies soll am Beispiel des Driftoperators entsprechend

$$V(z) - V(z') \rightarrow V\left(\chi + \frac{\xi}{2}\right) - V\left(\chi - \frac{\xi}{2}\right) \quad (6.8)$$

gezeigt werden. Für den Fall, dass für das Potenzial V ein analytischer Ausdruck vorliegt, kann der Driftoperator für jedes diskrete Wertepaar, χ_i und ξ_l , ermittelt werden. Unglücklicherweise führt die Einbindung von Funktionen, die im Ortsraum nur auf den Gitterpunkten z_m bekannt sind, zu Schwierigkeiten, wie z. B. beim Hartree-Potenzial. Da die diskreten Punkte $\chi_i \pm \frac{\xi_l}{2}$ nicht zwingend zur Menge der diskreten Abtastpunkte z_m im Ursprungssystem gehören müssen, können die Werte von $\chi_i \pm \frac{\xi_l}{2}$ auch zwischen zwei Punkten z_m und z_{m+1} liegen. Für die Ermittlung der Funktionswerte der Operatoren an diesen Zwischenstellen ist somit eine Interpolation zwischen den Werten z_m und z_{m+1} im Ursprungssystem notwendig [S9]. In dieser Arbeit wird hierzu eine lineare Interpolation verwendet.

Abschätzung der maximalen Wellenzahl und Gebietslänge: Da der Quantentransport innerhalb eines schmalen Energiefensters in der Nähe des Fermi-Niveaus stattfindet, ist es zweckmäßig eben nur diesen Bereich in die numerischen Berechnungen einzubeziehen. Innerhalb der anerkannten Methoden auf Grundlage der Schrödingergleichung, QTBM [7, 8] und des NEGF-Formalismus [9, 10], wird auf die Energie, ausgehend von der Bandkante, im einfachsten Fall eine konstante Energie addiert⁵, was zu E_{\max} führt.

Mithilfe der Bandstruktur (2.27) (vgl. Abschnitt 2.2) kann somit auch eine obere Grenze k_{\max} für die Wellenzahl bestimmt werden:

$$k_{\max} = \frac{\sqrt{2 \max_\lambda |m_\lambda| \cdot E_{\max}}}{\hbar}. \quad (6.9)$$

Die mit dieser maximalen Wellenzahl korrespondierende Länge L_ξ bezüglich der Relativkoordinate kann gemäß (6.7) als

$$L_\xi = \frac{\pi}{k_{\max}} (N_k - 1) \quad (6.10)$$

berechnet werden. Über diese Beziehungen ist ein Algorithmus entwickelt worden, der auf Basis des gesamten Potenzials die maximale Wellenzahl adaptiv berechnet. Die damit verbundene Neubesetzung der gesamten Systemmatrix, welche gesondert in Kapitel 8 betrachtet wird, ist jedoch mit derart hohem Rechenaufwand verbunden, dass der adaptive Ansatz sich in der Praxis nicht gegenüber einem größeren Rechengbiet mit gleicher Diskretisierungsweite Δk bewähren konnte (hierbei wird nach einmaliger Assemblierung der Systemmatrix nur der Driftoperator in jeden Rechenschritt aktualisiert).

⁵In der Regel liegt diese in der Größenordnung von weniger als 1eV.

6.1.2. Semidiskrete Operatoren

Die Wellenzahl k ist auf einem abgeschlossenen Gebiet auf natürliche Weise quantisiert, bzw. diskretisiert aus dem numerischen Blickwinkel. Für die N_k quantisierten Wellenzahlen k_j lässt sich die Wigner-Funktion auch als Vektor schreiben und die Operatoren innerhalb der WTG können auf dieser Grundlage auch als Matrix-Vektor-Produkte formuliert werden. Die Schwerpunktkoordinate χ und die Zeit t bleiben vorerst kontinuierlich.

Vor dem Hintergrund der mathematischen Struktur der WTG bietet sich zudem eine generalisierte Diskretisierung an, welche an die Einband-Darstellung in [S9] angelehnt ist. Zur Generalisierung wird hierbei der Integrkern $\tilde{G}_{\lambda\lambda'}$ als Repräsentant eingeführt. Die konzeptionelle Darstellung der Faltungsintegrale innerhalb der WTG resultiert somit in⁶:

$$\int \frac{dk'}{2\pi} \tilde{G}_{\lambda\lambda'}(\chi, k - k') \cdot (ik')^\alpha \cdot \left(\frac{\partial}{\partial\chi}\right)^\beta f_{\lambda\lambda'}(\chi, k', t) \Rightarrow \sum_{j'=1}^{N_k} \frac{\Delta k}{2\pi} \tilde{G}_{\lambda\lambda'}(\chi, k_j - k_{j'}) \cdot (ik_{j'})^\alpha \cdot \left(\frac{\partial}{\partial\chi}\right)^\beta f_{\lambda\lambda'}(\chi, k_{j'}, t). \quad (6.11)$$

Die Koeffizienten $\alpha, \beta \in \mathbb{N}$ modellieren die zusätzliche Abhängigkeit von der Wellenzahl und der Ableitung bezüglich der χ -Richtung.

Der Integrkern $\tilde{G}_{\lambda\lambda'}$ ist über die Fourier-Transformation mit der Funktion $G_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi)$ in Schwerpunkt und Relativkoordinaten verknüpft und wird mithilfe der Mittelpunktsregel approximiert:

$$\tilde{G}_{\lambda\lambda'}(\chi, k_j - k_{j'}) = \int d\xi \exp(-i(k_j - k_{j'})\xi) \cdot G_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi) \approx \sum_{l=1}^{N_\xi} \Delta\xi \exp(-i(k_j - k_{j'})\xi_l) \cdot G_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi_l). \quad (6.12)$$

Nun wird (6.11) für jedes k_j mit $j \in 1, \dots, N_k$ aufgestellt und in einem Matrix-Vektor-Produkt entsprechend

$$[\mathbf{A}_{\lambda\lambda'}(\chi)] \cdot \frac{\partial^\beta}{\partial\chi^\beta} \mathbf{f}_{\lambda\lambda'}(\chi, t) \quad (6.13)$$

zusammengefasst. Die N_k Elemente des Vektors

$$\mathbf{f}_{\lambda\lambda'}(\chi, t) = (f_{\lambda\lambda'}(\chi, k_1, t), f_{\lambda\lambda'}(\chi, k_2, t), \dots, f_{\lambda\lambda'}(\chi, k_{N_k}, t))^T \quad (6.14)$$

werden dabei für jeden Ort χ zum Zeitpunkt t durch die diskreten Werte der Wigner-Funktion $f_{\lambda\lambda'}(\chi, k_j, t)$ festgelegt (vgl. Abbildung 6.1). Die Matrixelemente $A_{\lambda\lambda'}^{j,j'}(\chi)$ der $N_k \times N_k$ großen Matrix $[\mathbf{A}_{\lambda\lambda'}(\chi)]$ stellen selbst Funktionen dar und sind über

$$A_{\lambda\lambda'}^{j,j'}(\chi) = \frac{\Delta k}{2\pi} \cdot \tilde{G}_{\lambda\lambda'}(\chi, k_j - k_{j'}) \cdot (jk_{j'})^\alpha \quad (6.15)$$

definiert. Falls der zu approximierende Ausdruck innerhalb der WTG kein Faltungsintegral beinhaltet, entspricht der generische Integrkern einer Dirac-Distribution $\tilde{G}_{\lambda\lambda'}(\chi, k_j - k_{j'}) \rightarrow$

⁶Der Zusammenhang ergibt sich unter Quantisierung der Wellenzahl infolge des abgeschlossenen Rechengebiets. Aus numerischer Sicht kann dieser jedoch auch als numerische Approximation des Kontinuums mit der Mittelpunktsregel interpretiert werden

$g(\chi)\delta(k_j - k'_j) \equiv g(\chi)\delta_{j,j'}$, sodass die resultierende Matrix $[\mathbf{A}_{\lambda\lambda'}(\chi)]$ diagonal bezüglich der Darstellung ist.

6.1.3. Semidiskrete Formulierung des Intradbandmodells

Mit der im vorherigen Abschnitt entwickelten Methodik erfolgt nun die Angabe der semidiskreten Transportgleichungen für das Intradbandmodell.

Annahme einer konstanten effektiven Masse: Durch formale Anwendung von (6.11)-(6.15) auf die WTG (3.14) ergibt sich die entsprechende semidiskrete Transportgleichung zu [28, S12]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{f}(\chi, t) = [\mathbf{D}_1] \cdot \frac{\partial}{\partial \chi} \mathbf{f}(\chi, t) + [\mathbf{D}_0(\chi)] \cdot \mathbf{f}(\chi, t). \quad (6.16)$$

Der Diffusionsoperator $[\mathbf{D}_1]$ wird durch eine Diagonalmatrix dargestellt, dessen Elemente $D_1^{j,j'}$ als

$$D_1^{j,j'} = -\frac{\hbar}{m} k_j \cdot \delta_{j,j'} \quad (6.17)$$

definiert sind. Die ortsabhängigen Elemente $D_0^{j,j'}(\chi)$ des semidiskreten Driftoperators $[\mathbf{D}_0(\chi)]$ beinhalten sowohl das physikalische Potenzial über den Integralkern \tilde{V} (3.15) als auch das komplex absorbierende Potenzial mit dem Integralkern \tilde{W} (5.31):

$$D_0^{j,j'}(\chi) = \frac{1}{i\hbar} \frac{\Delta k}{2\pi} \cdot \left\{ \tilde{V}(\chi, k_j - k'_j) - i\tilde{W}(k_j - k'_j) \right\}. \quad (6.18)$$

Zur numerischen Bestimmung der Integralkerne, \tilde{V} und $i\tilde{W}$, wird (6.12) ausgewertet⁷.

Ortsabhängige effektive Masse: Die deutlich komplexere mathematische Gestalt der WTG (3.27) unter Einbeziehung der örtlichen Variation der effektiven Masse resultiert nach Anwendung von (6.11)-(6.15) und Sortierung der Terme bezüglich ihrer Ableitung in dem übersichtlichen Ausdruck [S9]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{f}(\chi, t) = [\mathbf{D}_2(\chi)] \cdot \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} \mathbf{f}(\chi, t) + [\mathbf{D}_1(\chi)] \cdot \frac{\partial}{\partial \chi} \mathbf{f}(\chi, t) + [\mathbf{D}_0(\chi)] \cdot \mathbf{f}(\chi, t). \quad (6.19)$$

Die Matrixelemente $D_2^{j,j'}(\chi)$, $D_1^{j,j'}(\chi)$ und $D_0^{j,j'}(\chi)$ der korrespondierenden semidiskreten Operatoren $[\mathbf{D}_2(\chi)]$, $[\mathbf{D}_1(\chi)]$ und $[\mathbf{D}_0(\chi)]$ stellen dabei ortsabhängige Funktionen dar, welche durch

$$\begin{aligned} D_2^{j,j'}(\chi) &= \frac{i\hbar}{2} \frac{\Delta k}{2\pi} \frac{1}{4} \cdot \tilde{m}_-(\chi, k_j - k_{j'}) \\ D_1^{j,j'}(\chi) &= \frac{i\hbar}{2} \frac{\Delta k}{2\pi} \frac{1}{2} \cdot \frac{\partial}{\partial \chi} \tilde{m}_-(\chi, k_j - k_{j'}) + \frac{i\hbar}{2} \frac{\Delta k}{2\pi} \cdot \tilde{m}_+(\chi, k_j - k_{j'}) \cdot (ik_{j'}) \\ D_0^{j,j'}(\chi) &= \frac{i\hbar}{2} \frac{\Delta k}{2\pi} \cdot \frac{\partial}{\partial \chi} \tilde{m}_+(\chi, k_j - k_{j'}) \cdot (ik_{j'}) + \frac{i\hbar}{2} \frac{\Delta k}{2\pi} \cdot \tilde{m}_-(\chi, k_j - k_{j'}) \cdot (ik_{j'})^2 \\ &\quad + \frac{1}{i\hbar} \frac{\Delta k}{2\pi} \cdot \left\{ \tilde{V}(\chi, k_j - k_{j'}) - i\tilde{W}(k_j - k_{j'}) \right\} \end{aligned} \quad (6.20)$$

definiert werden [S9]. Zur Berechnung der Matrixelemente ist der generalisierten Diskretisierung (6.12) für die Integralkerne \tilde{V} (3.15), \tilde{W} (5.27) sowie \tilde{m}_{\pm} (3.28) zu folgen.

⁷Exemplarisch wird die generische Funktion $G(\chi, \xi)$ dann durch $B(\chi, \xi)$, bzw. $iW(\xi)$ ersetzt.

6.1.4. Semidiskrete Formulierung des Interbandmodells

Zur numerischen Analyse der Bandkopplungsmechanismen wird die reduzierte Transportgleichung (3.42), wie zuvor in Abschnitt 3.3 diskutiert, auf Basis der Näherungen in [73, 74] herangezogen. Mithilfe von (6.11)-(6.13) ergibt sich nach der Approximation von (3.42) die semidiskrete Transportgleichung zu [S1]:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{f}_{cc}(\chi, t) &= [\mathbf{T}_{cc}] \frac{\partial}{\partial \chi} \mathbf{f}_{cc}(\chi, t) + [\mathbf{Z}_{cc}(\chi)] \mathbf{f}_{cc}(\chi, t) + [\mathbf{O}_-(\chi)] \mathbf{f}_{cv}(\chi, t) + [\mathbf{O}_+(\chi)] \mathbf{f}_{vc}(\chi, t) \\
 \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{f}_{cv}(\chi, t) &= [\mathbf{D}_{cv}] \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} \mathbf{f}_{cv}(\chi, t) + [\mathbf{Z}_{cv}(\chi)] \mathbf{f}_{cv}(\chi, t) + [\mathbf{O}_-(\chi)] \mathbf{f}_{cc}(\chi, t) + [\mathbf{O}_+(\chi)] \mathbf{f}_{vv}(\chi, t) \\
 \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{f}_{vc}(\chi, t) &= [\mathbf{D}_{vc}] \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} \mathbf{f}_{vc}(\chi, t) + [\mathbf{Z}_{vc}(\chi)] \mathbf{f}_{vc}(\chi, t) + [\mathbf{O}_-(\chi)] \mathbf{f}_{vv}(\chi, t) + [\mathbf{O}_+(\chi)] \mathbf{f}_{cc}(\chi, t) \\
 \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{f}_{vv}(\chi, t) &= [\mathbf{T}_{vv}] \frac{\partial}{\partial \chi} \mathbf{f}_{vv}(\chi, t) + [\mathbf{Z}_{v,v}(\chi)] \mathbf{f}_{v,v}(\chi, t) + [\mathbf{O}_-(\chi)] \mathbf{f}_{vc}(\chi, t) + [\mathbf{O}_+(\chi)] \mathbf{f}_{cv}(\chi, t).
 \end{aligned} \tag{6.21}$$

Die Matricelemente der entsprechenden Operatoren lassen sich unter Verwendung der Mittelpunktsregel zur Auswertung der Integralkerne \tilde{E}^\pm (3.39), \tilde{U} (3.41) und \tilde{W} (5.27) als

$$\begin{aligned}
 T_{cc}^{j,j'} &= -T_{vv}^{j,j'} = -\frac{\hbar}{m} k_j \cdot \delta_{j,j'} \\
 D_{cv}^{j,j'} &= -D_{vc}^{j,j'} = \frac{i\hbar}{4m} \cdot \delta_{j,j'} \\
 O_{\pm}^{j,j'}(\chi) &= \pm \frac{i\hbar P}{m_0 E_g} \frac{\Delta k}{2\pi} \tilde{\mathcal{E}}^\pm(\chi, k_j - k_{j'}) \\
 Z_{cc}^{j,j}(\chi) &= Z_{vv}^{j,j}(\chi) = \frac{1}{i\hbar} \frac{\Delta k}{2\pi} \left\{ \tilde{U}(\chi, k_j - k_{j'}) - i\tilde{W}(k_j - k_{j'}) \right\} \\
 Z_{cv}^{j,j'}(\chi) &= \left\{ -\frac{i\hbar}{m} k_j^2 + \frac{E_g}{i\hbar} \right\} \delta_{j,j'} + \frac{1}{i\hbar} \frac{\Delta k}{2\pi} \left\{ \tilde{U}(\chi, k_j - k_{j'}) - i\tilde{W}(k_j - k_{j'}) \right\} \\
 Z_{vc}^{j,j'}(\chi) &= \left\{ +\frac{i\hbar}{m} k_j^2 - \frac{E_g}{i\hbar} \right\} \delta_{j,j'} + \frac{1}{i\hbar} \frac{\Delta k}{2\pi} \left\{ \tilde{U}(\chi, k_j - k_{j'}) - i\tilde{W}(k_j - k_{j'}) \right\}
 \end{aligned} \tag{6.22}$$

schreiben [S1]. Unter der Einführung des Supervektors $\mathbf{F}(\chi, t)$, welcher als Elemente die diskretisierten Komponenten der Wigner-Funktionen $\mathbf{f}_{\lambda\lambda'}(\chi, t)$

$$\mathbf{F}^T(\chi, t) = \left(\mathbf{f}_{cc}^T(\chi, t), \mathbf{f}_{cv}^T(\chi, t), \mathbf{f}_{vc}^T(\chi, t), \mathbf{f}_{vv}^T(\chi, t) \right) \tag{6.23}$$

beinhaltet, kann eine kompakte Darstellung der gekoppelten semidiskreten Transportgleichungen (6.21) der Form

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{F}(\chi, t) = [\mathbf{D}_2] \cdot \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} \mathbf{F}(\chi, t) + [\mathbf{D}_1] \cdot \frac{\partial}{\partial \chi} \mathbf{F}(\chi, t) + [\mathbf{D}_0(\chi)] \cdot \mathbf{F}(\chi, t) \tag{6.24}$$

erzielt werden [S1]. Die quadratischen Matrizen der Dimension $4N_k \times 4N_k$ sind dabei als $[\mathbf{D}_2]$, $[\mathbf{D}_1]$ und $[\mathbf{D}_0(\chi)]$ definiert und setzen sich aus den semidiskreten Operatoren (6.22) zusammen:

$$[\mathbf{D}_2] = \begin{pmatrix} [\mathbf{0}] & [\mathbf{0}] & [\mathbf{0}] & [\mathbf{0}] \\ [\mathbf{0}] & [\mathbf{D}_{cv}] & [\mathbf{0}] & [\mathbf{0}] \\ [\mathbf{0}] & [\mathbf{0}] & [\mathbf{D}_{vc}] & [\mathbf{0}] \\ [\mathbf{0}] & [\mathbf{0}] & [\mathbf{0}] & [\mathbf{0}] \end{pmatrix}, \quad [\mathbf{D}_1] = \begin{pmatrix} [\mathbf{T}_{cc}] & [\mathbf{0}] & [\mathbf{0}] & [\mathbf{0}] \\ [\mathbf{0}] & [\mathbf{0}] & [\mathbf{0}] & [\mathbf{0}] \\ [\mathbf{0}] & [\mathbf{0}] & [\mathbf{0}] & [\mathbf{0}] \\ [\mathbf{0}] & [\mathbf{0}] & [\mathbf{0}] & [\mathbf{T}_{vv}] \end{pmatrix} \tag{6.25}$$

und

$$[D_0(\chi)] = \begin{pmatrix} [Z_{cc}(\chi)] & [O_-(\chi)] & [O_+(\chi)] & [\mathbf{0}] \\ [O_-(\chi)] & [Z_{cv}(\chi)] & [\mathbf{0}] & [O_+(\chi)] \\ [O_+(\chi)] & [\mathbf{0}] & [Z_{vc}(\chi)] & [O_-(\chi)] \\ [\mathbf{0}] & [O_+(\chi)] & [O_-(\chi)] & [Z_{vv}(\chi)] \end{pmatrix}. \quad (6.26)$$

Zusammenfassung: In diesem Abschnitt ist ein alternativer Ansatz zur Diskretisierung des Phasenraums vorgestellt worden, welcher aufgrund der Betrachtung eines abgeschlossenen Gebiets bezüglich der Relativkoordinate eine natürliche Quantisierung des Wellenvektors bedingt. Die Formulierung erfolgt derart, dass die theoretisch unabhängigen Variablen des Phasenraums, χ und k , im Vergleich zu den herkömmlichen Ansätzen [22–24] auch nach der Diskretisierung entkoppelt sind [S9]. Darüber hinaus sind die Kenntnisse der analytischen Eigenschaften der Operatoren im Hinblick auf den Massenerhalt in die Diskretisierung eingeflossen, der im Vergleich zum herkömmlichen Ansatz den Massenerhalt für beliebige Hamiltonoperatoren garantiert.

Anschließend sind die semidiskreten Transportgleichungen erster und zweiter Ordnung bezüglich der Schwerpunktkoordinate formuliert worden, bei denen die Abhängigkeit bezüglich der quantisierten Wellenzahlen in Matrix-Vektor-Produkten zusammengefasst worden ist. In dieser Darstellung bilden diese Transportgleichungen die Basis für die weiteren Betrachtungen in den nachfolgenden Kapiteln.

6.2. Semidiskrete Liouville-von-Neumann-Gleichung

In diesem Abschnitt soll der neu entwickelte Formalismus zur numerischen Lösung der LVNG-RS in den Blick genommen werden. Dieser basiert auf der Finiten-Volumen-Methode, welche in Abschnitt 6.2.1 vorgestellt wird. Durch die Anwendung der Finiten-Volumen-Methode zur Approximation der Relativkoordinate wird eine semidiskrete Darstellung der Transportgleichung erzielt, die in Abschnitt 6.2.2 für die Intrabandmodelle und in Abschnitt 6.2.3 für die Interbandmodelle erarbeitet wird.

Die Beschreibung des Quantentransports in offenen Systemen erfolgt mit den Inflow-Randbedingungen, wie zuvor in Kapitel 5 diskutiert. Zur Implementierung der Inflow-Randbedingungen innerhalb des vorgestellten Formalismus wird eine Basistransformation in Abschnitt 6.2.4 eingeführt. Auf dieser Grundlage kann dann in Abschnitt 6.2.5 eine Verbindung zum Wigner-Formalismus hergestellt werden.

6.2.1. Finite-Volumen-Approximation

Das Rechengebiet wird bezüglich der Relativkoordinate in dem Intervall \mathcal{I}_ξ in N_ξ gleichgroße (Gitter-)Zellen der Weite $\Delta\xi$ unterteilt, wie schematisch in Abbildung 6.2 durch den rotbraun markierten Bereich dargestellt ist. Der Mittelpunkt der l -ten Zelle ist durch den Wert von ξ_l gegeben und die Ränder der Zelle liegen bei $\xi_{l+\frac{1}{2}}$.

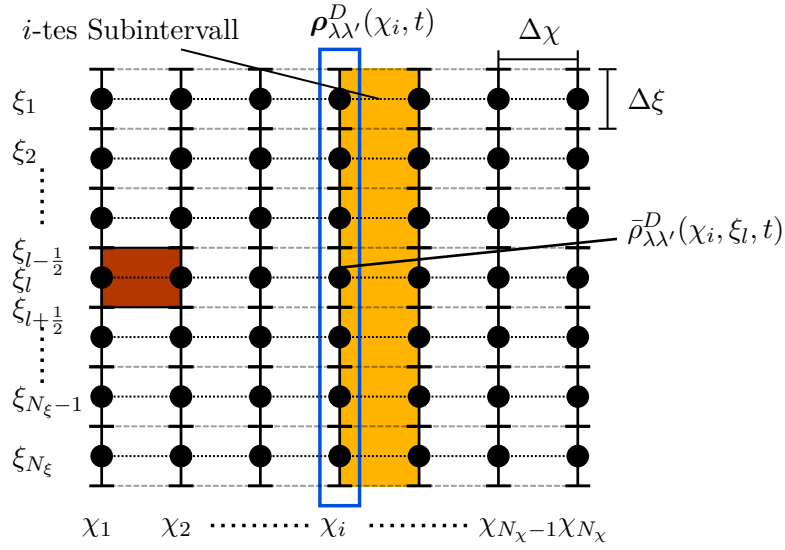


Abbildung 6.2. Schematische Darstellung der Diskretisierung des Rechengebiets in Schwerpunkt- und Relativkoordinaten unter Verwendung eines Finite-Volumen-Verfahrens. Die Schwerpunktkoordinate χ wird mit N_χ Punkten abgetastet, was zu den diskreten Punkten χ_i führt. Bezüglich der Relativkoordinate wird das Intervall \mathcal{I}_ξ in N_ξ (Gitter-)Zellen der Weite $\Delta\xi$ mit dem Mittelpunkt ξ_l unterteilt, welcher durch den schwarzen Punkt gekennzeichnet ist. Die l -te Zelle ist schematisch über den rotbraunen Bereich markiert. Die Ränder der Zelle sind $\xi_{l\pm\frac{1}{2}}$. Innerhalb der Zelle wird der Mittelwert der statistischen Dichtematrix $\bar{\rho}_{\lambda\lambda'}^D(\chi_i, \xi_l)$ berechnet. Für einen festen Ort χ_i können die Mittelwerte in einem Vektor zusammengefasst werden $\rho_{\lambda\lambda'}^D(\chi_i)$ (markiert durch den blau umrandeten Bereich). Der orangefarbene Bereich kennzeichnet das i -te Subintervall (Teilgebiet). In diesem Subintervall erfolgt die formale, analytische Lösung in Kapitel 8.

Innerhalb der Zelle werden die Werte der statistischen Dichtematrix $\bar{\rho}_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi, t)$ mit $\xi \in [\xi_{l-\frac{1}{2}}, \xi_{l+\frac{1}{2}}]$ durch die Mittelwerte $\bar{\rho}_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi_l, t)$ approximiert (Gebietskollokation) und gemäß ihrer zugehörigen Bewegungsgleichung bilanziert [S3, S5]. Diese Bilanzierung wird im Folgenden exemplarisch für die l -te Zelle beschrieben.

Approximation innerhalb einer Gitterzelle: Innerhalb der LVNG-RS können formal jeweils zwei generische Typen von Termen bei der Finite-Volumen-Approximation der Relativkoordinate unterschieden werden, welche anhand der Funktion $G_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi)$ untersucht werden sollen⁸:

1. Zum einen liegen Ausdrücke **mit mindestens einer Ableitung** bezüglich der Relativkoordinate vor:

$$G_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi) \cdot \frac{\partial^\beta}{\partial \chi^\beta} \frac{\partial^\alpha}{\partial \xi^\alpha} \rho_{\lambda\lambda'}^D(\chi, \xi, t) \quad \text{mit } \alpha \in \mathbb{N}^{\geq 1}, \beta \in \mathbb{N}. \quad (6.27)$$

Die Ausdrücke dieses Typs können einem physikalischen Fluss zugeordnet werden.

⁸Zum Beispiel repräsentiert die Funktion G die Ausdrücke $m_{\lambda\lambda'}^\pm(\chi, \xi)$ (3.33), $B_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi)$ (3.34), etc. der vorherigen Abschnitte

2. Zum anderen sind Ausdrücke **ohne Ableitung** bezüglich der Relativkoordinate

$$G_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi) \cdot \frac{\partial^\beta}{\partial \chi^\beta} \rho_{\lambda\lambda'}^D(\chi, \xi, t) \quad \text{mit } \beta \in \mathbb{N} \quad (6.28)$$

vorzufinden, welche aus der physikalischen Sicht einem Reaktionsterm entsprechen.

Betrachtung des ersten Falls mit mindestens einer Ableitung: Im Hinblick auf die Bilanzierung der physikalischen Flüsse über die Ränder der Zelle ist es sinnvoll, eine generische Flussfunktion \mathfrak{F} zu definieren:

$$G_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi) \cdot \frac{\partial^\beta}{\partial \chi^\beta} \frac{\partial^\alpha}{\partial \xi^\alpha} \rho_{\lambda\lambda'}^D(\chi, \xi, t) \equiv G_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi) \cdot \frac{\partial^\beta}{\partial \chi^\beta} \frac{\partial}{\partial \xi} \mathfrak{F} \left\{ \rho_{\lambda\lambda'}^D(\chi, \xi, t) \right\}. \quad (6.29)$$

Unter Ausnutzung dieser Definition (6.29) erfolgt nun die Integration über die Zelle, hier am Beispiel der l -ten Zelle gemäß:

$$\int_{\xi_{l-\frac{1}{2}}}^{\xi_{l+\frac{1}{2}}} d\xi G_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi) \cdot \frac{\partial^\beta}{\partial \chi^\beta} \frac{\partial}{\partial \xi} \mathfrak{F} \left\{ \rho_{\lambda\lambda'}^D(\chi, \xi, t) \right\} \approx \quad (6.30)$$

$$G_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi_l) \cdot \frac{\partial^\beta}{\partial \chi^\beta} \left(\mathfrak{F} \left\{ \rho_{\lambda\lambda'}^D(\chi, \xi_{l+\frac{1}{2}}, t) \right\} - \mathfrak{F} \left\{ \rho_{\lambda\lambda'}^D(\chi, \xi_{l-\frac{1}{2}}, t) \right\} \right).$$

Falls die Funktion $G_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi)$ auf der Gitterzelle konstant ist, ist die Integration exakt [125].

Jedoch sind die Werte der statistischen Dichtematrix auf dem Rand der Zelle nicht bekannt, sondern lediglich die Mittelwerte innerhalb der Zelle. Diesbezüglich wird eine numerische Flussfunktion $\hat{\mathfrak{F}}$ an Stelle der physikalischen \mathfrak{F} eingeführt [125], in welcher der physikalische Fluss an den Rändern der Zelle in Abhängigkeit der benachbarten Mittelwerte ausgedrückt wird:

$$\mathfrak{F} \left\{ \rho_{\lambda\lambda'}^D(\chi, \xi_{l+\frac{1}{2}}, t) \right\} \rightarrow \hat{\mathfrak{F}} \left\{ \bar{\rho}_{\lambda\lambda'}^D(\chi, \xi_l, t), \bar{\rho}_{\lambda\lambda'}^D(\chi, \xi_{l+1}, t) \right\}. \quad (6.31)$$

Die Berechnung der numerischen Flussfunktion stellt ein sogenanntes Riemann-Problem dar, für dessen Adressierung es innerhalb der Literatur eine beachtliche Anzahl von Ansätzen gibt [125]. Über die numerische Flussfunktion können lokale Übergangsbedingungen im Ortsraum zwischen den Gitterzellen adäquat in die Diskretisierung eingearbeitet werden. Zur angemessenen Beschreibung kohärenter Effekte wird im Folgenden eine zentrale, numerische Flussfunktion herangezogen [S3, S5].

In der LVNG-RS können zwei physikalische Flüsse unterschieden werden:

- Für den physikalischen Fluss, welcher proportional zur statistischen Dichtematrix selbst ist ($\mathfrak{F}\{\rho\} \propto \rho$), ergibt sich mit dem zentralen Fluss der Zusammenhang:

$$\hat{\mathcal{F}} \left[\bar{\rho}_{\lambda\lambda'}^D(\chi, \xi_l, t), \bar{\rho}_{\lambda\lambda'}^D(\chi, \xi_{l+1}, t) \right] = \frac{\bar{\rho}_{\lambda\lambda'}^D(\chi, \xi_l, t) + \bar{\rho}_{\lambda\lambda'}^D(\chi, \xi_{l+1}, t)}{2}. \quad (6.32)$$

- Für den physikalischen Fluss, der proportional zur Ableitung der statistischen Dichtematrix ist ($\mathfrak{F}\{\rho\} \propto \frac{\partial}{\partial \xi} \rho$), wird der Ausdruck

$$\hat{\mathfrak{F}} \left\{ \bar{\rho}_{\lambda\lambda'}^D(\chi, \xi_l, t), \bar{\rho}_{\lambda\lambda'}^D(\chi, \xi_{l+1}, t) \right\} = \frac{\bar{\rho}_{\lambda\lambda'}^D(\chi, \xi_{l+1}, t) - \bar{\rho}_{\lambda\lambda'}^D(\chi, \xi_l, t)}{\Delta \xi} \quad (6.33)$$

erzielt, wobei die Ableitung über einen Differenzenquotienten berücksichtigt wird.

Betrachtung des zweiten Falls ohne Ableitung: Die Auswertung der Ausdrücke ohne eine Ableitung bezüglich der Relativkoordinate gestaltet sich erheblich leichter. In dieser Arbeit werden zur Approximation die Mittelpunkts- und die Trapezregel herangezogen:

$$\int_{\xi_{i-\frac{1}{2}}}^{\xi_{i+\frac{1}{2}}} d\xi G_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi) \cdot \frac{\partial^\beta}{\partial \chi^\beta} \rho_{\lambda\lambda'}^D(\chi, \xi, t) \approx \left\{ \begin{array}{l} \Delta\xi \cdot G_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi_i, t) \cdot \frac{\partial^\beta}{\partial \chi^\beta} \bar{\rho}_{\lambda\lambda'}^D(\chi, \xi_i, t) \quad (\text{Mittelpunktsregel}) \\ \frac{\Delta\xi}{4} \left\{ G_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi_{i+\frac{1}{2}}) \cdot \frac{\partial^\beta}{\partial \chi^\beta} \bar{\rho}_{\lambda\lambda'}^D(\chi, \xi_{i+1}, t) \right. \\ \left. + \left(G_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi_{i+\frac{1}{2}}) + G_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi_{i-\frac{1}{2}}) \right) \cdot \frac{\partial^\beta}{\partial \chi^\beta} \bar{\rho}_{\lambda\lambda'}^D(\chi, \xi_i, t) \right. \\ \left. + G_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi_{i-\frac{1}{2}}) \cdot \frac{\partial^\beta}{\partial \chi^\beta} \bar{\rho}_{\lambda\lambda'}^D(\chi, \xi_{i-1}, t) \right\}. \quad (\text{Trapezregel}) \end{array} \right. \quad (6.34)$$

Die Werte der statistischen Dichtematrix auf den Rändern der Zelle, welche sich bei der Approximation mit der Trapezregel ergeben, sind dabei durch die benachbarten Mittelwerte ersetzt worden [S5].

Falls für die durch $G_{\lambda\lambda'}$ repräsentierten Funktionen kein analytischer Ausdruck vorliegt, wird zur Berechnung der jeweiligen Funktionswerte, $G_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi_{i\pm\frac{1}{2}})$ und $G_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi_i)$, eine lineare Interpolation herangezogen.

Semidiskrete Operatoren: Auf Grundlage der Beziehungen (6.30) - (6.34) erfolgt nun die Auswertung für jede Gitterzelle innerhalb des Rechengebiets $l \in 1, \dots, N_\xi$. Die Mittelwerte der statistischen Dichtematrix werden in einem Vektor

$$\boldsymbol{\rho}_{\lambda\lambda'}(\chi, t) = \left(\bar{\rho}_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi_1, t), \dots, \bar{\rho}_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi_l, t), \dots, \bar{\rho}_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi_{N_\xi}, t) \right)^T \quad (6.35)$$

zusammengefasst (vgl. die blau umrandeten Punkte innerhalb von Abbildung 6.2), sodass die einzelnen Gleichungen konzeptionell auch als Matrix-Vektor-Produkt geschrieben werden können:

$$[\mathbf{A}_{\lambda\lambda'}(\chi)] \cdot \frac{\partial^\beta}{\partial \chi^\beta} \boldsymbol{\rho}_{\lambda\lambda'}(\chi, t). \quad (6.36)$$

Die Matrixelemente $A_{\lambda\lambda'}^{l,l'}(\chi)$ der quadratischen Matrix $[\mathbf{A}_{\lambda\lambda'}(\chi)]$ der Dimension $N_\xi \times N_\xi$ sind für den Fall der Flussfunktion gemäß (6.32) ($\mathfrak{F}\{\rho\} \propto \rho$) als

$$A_{\lambda\lambda'}^{l,l'}(\chi) = G_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi_l) \cdot \left(\frac{\delta_{l,l'-1} - \delta_{l,l'+1}}{2} \right) \quad (6.37)$$

definiert, wohingegen sich für den Fall der Flussfunktion gemäß (6.33) ($\mathfrak{F}\{\rho\} \propto \frac{\partial}{\partial \xi} \rho$) die folgenden Matrixelemente ergeben:

$$A_{\lambda\lambda'}^{l,l'}(\chi) = G_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi_l) \cdot \left(\frac{\delta_{l,l'-1} - 2 \cdot \delta_{l,l'} + \delta_{l,l'+1}}{\Delta\xi} \right). \quad (6.38)$$

Im Hinblick auf die Terme (6.34), denen keine physikalische Flussfunktion zugeordnet werden kann, lassen sich die Matrixelemente als

$$A_{\lambda\lambda'}^{l,l'}(\chi) = \Delta\xi \cdot G_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi_l) \cdot \delta_{l,l'} \quad (6.39)$$

für die Mittelpunktsregel und

$$A_{\lambda\lambda'}^{l,l'}(\chi) = \frac{\Delta\xi}{4} \cdot \left\{ G_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi_{l+\frac{1}{2}}) \cdot \delta_{l,l'-1} + \left(G_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi_{l+\frac{1}{2}}) + G_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi_{l-\frac{1}{2}}) \right) \cdot \delta_{l,l'} + G_{\lambda\lambda'}(\chi, \xi_{l-\frac{1}{2}}) \cdot \delta_{l,l'+1} \right\} \quad (6.40)$$

für die Trapezregel an [S3, S5] schreiben. Die Matrix $[A_{\lambda,\lambda}(\chi)]$ stellt somit eine Diagonalmatrix für den Fall der Mittelpunktsregel und eine symmetrische Tridiagonalmatrix für den Fall der Trapezregel dar [S5].

6.2.2. Semidiskrete Formulierung des Intradbandmodells

Im Folgenden sollen die ermittelten Beziehungen der Finiten-Volumen-Approximation (6.30) - (6.40) zur Bestimmung der semidiskreten Transportgleichung für das Intradbandmodell herangezogen werden. Darüber hinaus wird auf die Eigenschaften der semidiskreten Operatoren eingegangen.

Annahme einer konstanten effektiven Masse: In Analogie zum gebräuchlichen Modell im Wigner-Formalismus, wird auch an dieser Stelle zuerst die LVNG-RS (3.11) unter der Annahme einer konstanten effektiven Masse betrachtet.

Nach der Anwendung der Finiten-Volumen-Methode resultiert diese in [S3, S5]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\chi, t) = [D_1] \cdot \frac{\partial}{\partial \chi} \rho(\chi, t) + [D_0(\chi)] \cdot \rho(\chi, t). \quad (6.41)$$

In diesem Rechenschritt ist die gesamte Gleichung zusätzlich durch die Weite der Zelle $\Delta\xi$ dividiert worden, sodass eine mathematisch identische Struktur zu der semidiskreten Transportgleichung des Wigner-Formalismus (6.16) vorliegt. Hiermit wird eine allgemeine, von der expliziten Darstellung unabhängige Analyse in den nachfolgenden Kapiteln ermöglicht.

Unter Berücksichtigung der Division ergeben sich die Matrixelemente $D_1^{l,l'}$ des semidiskreten Diffusionsoperators $[D_1]$ zu:

$$D_1^{l,l'} = \frac{i\hbar}{m} \cdot \left(\frac{\delta_{l,l'-1} - \delta_{l,l'+1}}{2\Delta\xi} \right). \quad (6.42)$$

Die Matrix $[D_1]$ ist somit hermitesch, weshalb ihr Eigenwertspektrum rein reell ist. Darüber hinaus repräsentiert die Matrix $[D_1]$ eine Triadiagonal-Toeplitz-Matrix [126]. Als Resultat können das Eigenwertspektrum und die korrespondierenden Eigenvektoren sogar analytisch bestimmt werden [126]. Im nachfolgenden Abschnitt 6.2.4 sollen die Eigenschaften des Spektrums der Matrix $[D_1]$ zur Implementierung der Inflow-Randbedingungen ausgenutzt werden.

Die Matrixelemente $D_0^{l,l'}(\chi)$ des semidiskreten Driftoperators $[D_0(\chi)]$ sind durch ortsabhängige Funktionen

$$D_0^{l,l'}(\chi) = \frac{1}{i\hbar} (B(\chi, \xi_l) - iW(\xi_l)) \delta_{l,l'} \quad (6.43a)$$

für den Fall der Mittelpunktsregel sowie

$$D_0^{l,l'}(\chi) = \frac{1}{i\hbar} \left\{ \frac{B(\chi, \xi_{l+\frac{1}{2}}) - iW(\xi_{l+\frac{1}{2}})}{4} \cdot \delta_{l,l'-1} + \frac{B(\chi, \xi_{l-\frac{1}{2}}) - iW(\xi_{l-\frac{1}{2}})}{4} \cdot \delta_{l,l'+1} \right. \\ \left. + \frac{B(\chi, \xi_{l+\frac{1}{2}}) - iW(\xi_{l+\frac{1}{2}}) + B(\chi, \xi_{l-\frac{1}{2}}) - iW(\xi_{l-\frac{1}{2}})}{4} \cdot \delta_{l,l'} \right\} \quad (6.43b)$$

für den Fall der Trapezregel bestimmt, wobei die absorbierende Schicht über das komplex absorbierende Potenzial iW berücksichtigt wird, wie es zuvor in Abschnitt 5.2 diskutiert worden ist.

Örtliche Variation der effektiven Masse: Die Erweiterung des Modells um die örtliche Variation der effektiven Masse resultiert nach der Anwendung der Finite-Volumen-Approximation auf (3.26) in der semidiskreten Transportgleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\chi, t) = [D_2(\chi)] \cdot \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} \rho(\chi, t) + [D_1(\chi)] \cdot \frac{\partial}{\partial \chi} \rho(\chi, t) + [D_0(\chi)] \cdot \rho(\chi, t). \quad (6.44)$$

In Analogie zum vorherigen Abschnitt ist die Bewegungsgleichung bereits durch die Weite der Zelle $\Delta\xi$ dividiert worden. Die Matrixelemente der korrespondierenden, semidiskreten Operatoren ergeben sich somit zu

$$D_2^{l,l'}(\chi) = \frac{i\hbar}{2} \frac{1}{4} m_-(\chi, \xi_l) \cdot \delta_{l,l'} \\ D_1^{l,l'}(\chi) = \frac{i\hbar}{2} \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} m_-(\chi, \xi_l) \cdot \delta_{l,l'} + \frac{i\hbar}{2} m_+(\chi, \xi_l) \cdot \left(\frac{\delta_{l,l'-1} - \delta_{l,l'+1}}{2\Delta\xi} \right) \\ D_0^{l,l'}(\chi) = \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} m_+(\chi, \xi_l) \left(\frac{\delta_{l,l'-1} - \delta_{l,l'+1}}{2\Delta\xi} \right) \\ + \frac{i\hbar}{2} m_+(\chi, \xi_l) \left(\frac{\delta_{l,l'-1} - 2\delta_{l,l'} + \delta_{l,l'+1}}{\Delta\xi^2} \right) + d_0^{l,l'}(\chi) \quad (6.45)$$

mit

$$d_0^{l,l'}(\chi) = \frac{1}{i\hbar} \left\{ \frac{B(\chi, \xi_{l+\frac{1}{2}}) - iW(\xi_{l+\frac{1}{2}})}{4} \cdot \delta_{l,l'-1} + \frac{B(\chi, \xi_{l-\frac{1}{2}}) - iW(\xi_{l-\frac{1}{2}})}{4} \cdot \delta_{l,l'+1} \right. \\ \left. + \frac{B(\chi, \xi_{l+\frac{1}{2}}) - iW(\xi_{l+\frac{1}{2}}) + B(\chi, \xi_{l-\frac{1}{2}}) - iW(\xi_{l-\frac{1}{2}})}{4} \cdot \delta_{l,l'} \right\}, \quad (6.46)$$

wobei die Matrixelemente des semidiskreten Driftoperators $d_0^{l,l'}(\chi)$ mit der Trapezregel approximiert werden.

6.2.3. Semidiskrete Formulierung des Interbandmodells

Zuletzt soll eine Erweiterung um Bandkopplungsmechanismen erfolgen. Hierzu wird gleichermaßen wie zuvor für den Wigner-Formalismus das reduzierte Transportmodell (3.43) auf Basis der Arbeiten⁹ [73, 74] herangezogen.

⁹Die entsprechenden Einschränkungen sind ausführlich in Abschnitt 3.3 diskutiert worden.

Die Approximation mithilfe der Finite-Volumen-Methode (6.30) - (6.40) führt schließlich zu den gekoppelten semidiskreten Transportgleichungen:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{\rho}_{cc}^D(\chi, t) &= [\mathbf{T}_{cc}] \frac{\partial}{\partial \chi} \boldsymbol{\rho}_{cc}^D(\chi, t) + [\mathbf{Z}_{cc}(\chi)] \boldsymbol{\rho}_{cc}^D(\chi, t) + [\mathbf{O}_-(\chi)] \boldsymbol{\rho}_{cv}^D(\chi, t) + [\mathbf{O}_+(\chi)] \boldsymbol{\rho}_{vc}^D(\chi, t) \\
 \frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{\rho}_{cv}^D(\chi, t) &= [\mathbf{D}_{cv}] \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} \boldsymbol{\rho}_{cv}^D(\chi, t) + [\mathbf{Z}_{cv}(\chi)] \boldsymbol{\rho}_{cv}^D(\chi, t) + [\mathbf{O}_-(\chi)] \boldsymbol{\rho}_{cc}^D(\chi, t) + [\mathbf{O}_+(\chi)] \boldsymbol{\rho}_{vv}^D(\chi, t) \\
 \frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{\rho}_{vc}^D(\chi, t) &= [\mathbf{D}_{vc}] \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} \boldsymbol{\rho}_{vc}^D(\chi, t) + [\mathbf{Z}_{vc}(\chi)] \boldsymbol{\rho}_{vc}^D(\chi, t) + [\mathbf{O}_-(\chi)] \boldsymbol{\rho}_{vv}^D(\chi, t) + [\mathbf{O}_+(\chi)] \boldsymbol{\rho}_{cc}^D(\chi, t) \\
 \frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{\rho}_{vv}^D(\chi, t) &= [\mathbf{T}_{vv}] \frac{\partial}{\partial \chi} \boldsymbol{\rho}_{vv}^D(\chi, t) + [\mathbf{Z}_{vv}(\chi)] \boldsymbol{\rho}_{vv}^D(\chi, t) + [\mathbf{O}_-(\chi)] \boldsymbol{\rho}_{vc}^D(\chi, t) + [\mathbf{O}_+(\chi)] \boldsymbol{\rho}_{cv}^D(\chi, t).
 \end{aligned} \tag{6.47}$$

Die semidiskreten Operatoren sind dabei durch die Elemente

$$\begin{aligned}
 T_{cc}^{j,j'} &= -T_{vv}^{j,j'} = \frac{i\hbar}{m} \left(\frac{\delta_{l,l'-1} - \delta_{l,l'+1}}{2\Delta\xi} \right) \\
 D_{cv}^{j,j'} &= -D_{vc}^{j,j'} = \frac{i\hbar}{4m} \cdot \delta_{l,l'} \\
 O_{\pm}^{j,j'}(\chi) &= \pm \frac{i\hbar P}{m_0 E_g} \mathcal{E} \left(\chi \pm \frac{\xi_l}{2} \right) \cdot \delta_{l,l'} \\
 Z_{cc}^{j,j}(\chi) &= Z_{v,v}^{j,j}(\chi) = C^{l,l'}(\chi) \\
 Z_{cv}^{j,j'}(\chi) &= \left\{ + \frac{i\hbar}{m} \left(\frac{\delta_{l,l'-1} - 2\delta_{l,l'} + \delta_{l,l'+1}}{\Delta\xi^2} \right) + \frac{E_g}{i\hbar} \cdot \delta_{l,l'} \right\} + C^{l,l'}(\chi) \\
 Z_{vc}^{j,j'}(\chi) &= \left\{ - \frac{i\hbar}{m} \left(\frac{\delta_{l,l'-1} - 2\delta_{l,l'} + \delta_{l,l'+1}}{\Delta\xi^2} \right) - \frac{E_g}{i\hbar} \cdot \delta_{l,l'} \right\} + C^{l,l'}(\chi)
 \end{aligned} \tag{6.48}$$

festgelegt. Die Matrixelemente des komplexen Driftoperators ergeben sich unter Anwendung der Trapezregel und sind als

$$\begin{aligned}
 C^{l,l'}(\chi) &= \frac{1}{i\hbar} \left\{ \frac{\hat{U}(\chi, \xi_{l+\frac{1}{2}}) - iW(\xi_{l+\frac{1}{2}})}{4} \cdot \delta_{l,l'-1} + \frac{\hat{U}(\chi, \xi_{l-\frac{1}{2}}) - iW(\xi_{l-\frac{1}{2}})}{4} \cdot \delta_{l,l'+1} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{\hat{U}(\chi, \xi_{l+\frac{1}{2}}) - iW(\xi_{l+\frac{1}{2}}) + \hat{U}(\chi, \xi_{l-\frac{1}{2}}) - iW(\xi_{l-\frac{1}{2}})}{4} \cdot \delta_{l,l'} \right\}
 \end{aligned} \tag{6.49}$$

definiert. Die semidiskreten Operatoren $[\mathbf{T}_{\lambda\lambda}]$ stellen hermitesche Triadiagonal-Toeplitz-Matrizen dar, was in nachfolgenden Abschnitten ausgenutzt wird. Unter der Einführung eines Vektors \mathbf{P} , der als Komponenten die Vektoren, bestehend aus den Mittelwerten, der statistischen Dichtematrizen gemäß

$$\mathbf{P}^T(\chi, t) = \left(\rho_{cc}^{DT}(\chi, t), \rho_{cv}^{DT}(\chi, t), \rho_{vc}^{DT}(\chi, t), \rho_{vv}^{DT}(\chi, t) \right) \tag{6.50}$$

beinhaltet, kann die semidiskrete LVNG-RS (6.47) für das Interbandmodell auch kompakt als

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{P}(\chi, t) = [\mathbf{D}_2] \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} \mathbf{P}(\chi, t) + [\mathbf{D}_1] \frac{\partial}{\partial \chi} \mathbf{P}(\chi, t) + [\mathbf{D}_0(\chi)] \mathbf{P}(\chi, t) \tag{6.51}$$

notiert werden. Die hier eingeführten Matrizen $[\mathbf{D}_2]$, $[\mathbf{D}_1]$ und $[\mathbf{D}_0(\chi)]$ sind über die Beziehungen (6.25) und (6.26) definiert, wobei die darin enthaltenen Matrizen gemäß (6.48) anzusetzen sind. Zusätzlich ist zu berücksichtigen, dass die Matrizen $[\mathbf{D}_2]$, $[\mathbf{D}_1]$ und $[\mathbf{D}_0(\chi)]$ dann jeweils eine Dimension von $4N_{\xi} \times 4N_{\xi}$ aufweisen.

6.2.4. Einbindung der Inflow-Randbedingungen

Zur Beschreibung des Bauelements als offenes Quantensystem ist die Implementierung von Inflow-Randbedingungen erforderlich (vgl. Abschnitt 5.1). Da in dem vorherigen Abschnitt ein ortsraumbasierter Formalismus auf Basis der LVNG-RS erarbeitet worden ist, kann keine unmittelbare Kompatibilität zu den Inflow-Randbedingungen im Vergleich zu einer Phasenraumdarstellung hergestellt werden [S3, S5]. Dies liegt daran, dass die Inflow-Randbedingungen Informationen bezüglich der Ausbreitungsrichtung erfordern [23], die bisher über das Vorzeichen der Wellenzahl k eingeflossen ist, aber in der Ortsraumdarstellung nicht unmittelbar enthalten sind.

Ziel soll es hierbei zunächst sein, die Informationen zur Ausbreitungsrichtung über eine systematische Basistransformation in den vorgestellten Formalismus zu integrieren. Nach Anwendung der Basistransformation kann somit eine numerische Lösung der Transportgleichung im transformierten Raum erfolgen und anschließend über die Rücktransformation in die entsprechende Lösung für das Ausgangssystem im Ortsraum überführt werden [S3, S5, S7, S10].

Formulierung einer Basistransformation: Die statistische Dichtematrix soll in einer alternativen Basis dargestellt werden. Hierzu werden die Basisfunktionen $\mathcal{Q}_n(\xi)$ definiert, welche nach der Diskretisierung auf den diskreten Werten ξ_l als Basisvektoren \mathcal{Q}_n vorliegen.

In diese Basis wird die semidiskrete, statistische Dichtematrix (6.35) unter Einführung des Entwicklungskoeffizienten $c_{\lambda\lambda'}^n$

$$\rho_{\lambda\lambda'}^D(\chi, t) = \sum_{n=1}^N c_{\lambda\lambda'}^n(\chi, t) \cdot \mathcal{Q}_n \quad (6.52)$$

entwickelt, wobei insgesamt N Basisvektoren einbezogen werden. Die Basisvektoren sollen ein Orthonormalsystem bilden, sodass

$$c_{\lambda\lambda'}^m(\chi, t) = \mathcal{Q}_m^\dagger \cdot \rho_{\lambda\lambda'}^D(\chi, t) \quad (6.53)$$

gilt. Für weitere Betrachtungen ist es sinnvoll, eine Matrix-Vektor-Schreibweise einzuführen. Hierzu wird neben der Matrix $[\mathcal{Q}]$, welche als Spalten die Basisvektoren \mathcal{Q}_n beinhaltet, noch der Vektor $\mathbf{c}_{\lambda\lambda'}$, welcher sich aus den Entwicklungskoeffizienten $c_{\lambda\lambda'}^n$ zusammensetzt, definiert:

$$[\mathcal{Q}] = [\mathcal{Q}_1, \mathcal{Q}_2, \dots, \mathcal{Q}_j, \dots, \mathcal{Q}_{N-1}, \mathcal{Q}_N] \quad (6.54)$$

und

$$\mathbf{c}_{\lambda\lambda'}(\chi, t) = \left(c_{\lambda\lambda'}^1(\chi, t), c_{\lambda\lambda'}^2(\chi, t), \dots, c_{\lambda\lambda'}^j(\chi, t), \dots, c_{\lambda\lambda'}^{N-1}(\chi, t), c_{\lambda\lambda'}^N(\chi, t) \right)^T. \quad (6.55)$$

Mit diesen Definitionen, (6.54) und (6.55), kann die Entwicklung der statistischen Dichtematrix als

$$\rho_{\lambda\lambda'}^D(\chi, t) = [\mathcal{Q}] \cdot \mathbf{c}_{\lambda\lambda'}(\chi, t) \quad \text{sowie} \quad \mathbf{c}_{\lambda\lambda'}(\chi, t) = [\mathcal{Q}]^\dagger \cdot \rho_{\lambda\lambda'}^D(\chi, t) \quad (6.56)$$

geschrieben werden.

Eigenlösungen des semidiskreten Diffusionsoperators als Basisfunktionen: Nun soll die Wahl einer Basis konkretisiert werden. Hierzu wird der semidiskrete Diffusionsoperator $[\mathbf{D}_1]$ (6.41) des Intra-bandmodells unter Annahme einer konstanten effektiven Masse in den Blick genommen [S3, S5]. Ausgangspunkt für die Untersuchungen ist die Eigenwertzerlegung des Operators, wobei das Spektrum mit den Ausbreitungseigenschaften in Verbindung gebracht werden kann. Die folgenden Zusammenhänge gelten analog auch für die Matrizen $[\mathbf{T}_{\lambda\lambda}]$ innerhalb des Interbandmodells (6.47).

Da die (hermiteschen) Operatoren, $[\mathbf{D}_1]$ und $[\mathbf{T}_{\lambda\lambda}]$, die Struktur einer Tridiagonal-Toeplitz-Matrix aufweisen, kann die Diagonalisierung analytisch erfolgen. Die entsprechenden Eigenwerte λ_m und Eigenvektoren \mathcal{Q}_m , welche als Basisvektoren angesetzt werden, lassen sich als

$$\lambda_m = \pm \frac{\hbar}{m} \frac{1}{\Delta\xi} \cos\left(\frac{\pi m}{N_\xi + 1}\right) \quad (6.57)$$

und

$$\mathcal{Q}_m = \left(i \sin\left(\frac{\pi m}{N_\xi + 1}\right), i^2 \sin\left(\frac{2\pi m}{N_\xi + 1}\right), \dots, i^{N_\xi} \sin\left(\frac{N_\xi \pi m}{N_\xi + 1}\right) \right)^T \quad (6.58)$$

schreiben [126]. Mit dem \pm -Vorzeichen innerhalb der Eigenwerte λ_m ist sowohl der Elektronen(-), durch $[\mathbf{T}_{cc}]$, als auch der Löchertransport (+), durch $[\mathbf{T}_{vv}]$, berücksichtigt.

Die Eigenwerte λ_m sind reell und symmetrisch um den Wert Null herum angeordnet. Auf der physikalischen Ebene entsprechen die Eigenwerte λ_m einer Ausbreitungskonstante, wie aus (6.57) unmittelbar zu erkennen ist. Falls die Anzahl der Gitterzellen N_ξ ungerade ist [S5], ist der Eigenwert $\lambda = 0$ im Spektrum enthalten. Der zugehörige semidiskrete Diffusionsoperator ist dann singulär. Um die damit verbundenen numerischen Probleme zu vermeiden, wird der Eigenwert $\lambda = 0$ und sein korrespondierender Eigenvektor nicht in der Rechnungen berücksichtigt.

Anhand des Vorzeichens des Eigenwerts kann die Ausbreitungsrichtung zugeordnet werden [S3, S5]:

- Die $N_\xi/2$ Eigenvektoren mit positiven Eigenwerten ($\lambda_m > 0$) breiten sich in Richtung der Schwerpunktkoordinate χ aus.
- Die $N_\xi/2$ Eigenvektoren mit negativen Eigenwerten ($\lambda_m < 0$) breiten sich entgegen der Schwerpunktkoordinate χ aus.

Basisfunktionen auf der Grundlage ebener Wellen: Eine Alternative zur bisherigen Basiswahl stellt die Entwicklung nach ebenen Wellen dar, welche im engen Zusammenhang zum Wigner-Formalismus stehen. Hierbei werden die Basisvektoren durch diskretisierte ebene Wellen

$$\mathcal{Q}_m = \frac{\exp(ik_m \boldsymbol{\xi})}{\sqrt{N_\xi}} \quad \text{mit } m \in 1, \dots, N \quad (6.59)$$

repräsentiert [S7]. Der Vektor $\boldsymbol{\xi}$ enthält die diskreten Mittelpunkte ξ_l der Relativkoordinate und die Auswertung der Exponentialfunktion ist elementweise definiert. Die Zuordnung der Ausbreitungsrichtung, wie es für die Anwendung der Inflow-Randbedingungen (vgl. Abschnitt 5.1) erforderlich ist, erfolgt über das Vorzeichen¹⁰ des Arguments k_m . Damit die Basisvektoren

¹⁰Die positiven Werte von $k_m > 0$ werden dabei als in χ -Richtung laufend interpretiert, die negativen Werte von $k_m < 0$ hingegen als gegen die χ -Richtung laufenden Wellen.

eine Orthonormalbasis aufspannen, muss das Argument k_m der folgenden Bedingung gehorchen

$$k_m = -\frac{2\pi}{L_\xi} \left\{ m - \frac{1}{2} (N + 1) \right\} \quad \text{mit } m \in 1, \dots, N. \quad (6.60)$$

Ferner sind die Werte k_m symmetrisch um den Wert $k = 0$ verteilt, der aufgrund von mit ihm verbundenen Singularitätsproblemen nicht im Rechengebiet enthalten sein soll [124]. Zusätzlich gilt die Eindeutigkeitsbedingung¹¹ [S9]: $N \leq N_\xi$.

Implementierung der Inflow-Randbedingungen: Nun soll mithilfe der zuvor ermittelten Basistransformationen die eigentliche Implementierung der Inflow-Randbedingungen in den Blick genommen werden.

Hierzu werden die Inflow-Randbedingungen für das Multibandmodell¹² (5.9) - (5.12) für Systeme mit eindimensionaler sowie für das Multisubbandmodell (5.18) für Systeme mit zweidimensionaler Transportrichtung zunächst durch eine inverse Fourier-Transformation (2.55) in eine Darstellung im Ortsraum bezüglich der Relativkoordinate für jeden Kontakt gebracht [S3, S5]. Im Ergebnis liegen die diskretisierten Randbedingungen für die statistische Dichtematrix im Ortsraum vor: $\rho_{\lambda\lambda'}^{D,L}$ am linken Kontakt bei $\chi = 0$, bzw. $\rho_{\lambda\lambda'}^{D,R}$ am rechten bei $\chi = L_\chi$. Anschließend erfolgt die Transformation der Randbedingungen $\rho_{\lambda\lambda'}^{D,L/R}$ mithilfe der Orthonormalbasis $[\mathcal{Q}]$ (6.56):

$$\mathbf{c}_{\lambda\lambda'}^{L/R} = [\mathcal{Q}]^\dagger \cdot \rho_{\lambda\lambda'}^{D,L/R}. \quad (6.61)$$

In dieser transformierten Darstellung erlaubt $\mathbf{c}_{\lambda\lambda'}^L$ ($\mathbf{c}_{\lambda\lambda'}^R$) bei $\chi = 0$ ($\chi = L_\chi$) eine Zuordnung zur Ausbreitungsrichtung.

Für das Elektronensystem sind die ersten $N/2$ Entwicklungskoeffizienten innerhalb \mathbf{c}_{cc}^L mit den in positive χ -Richtung laufenden Wellen verknüpft. Für den linken Kontakt ergibt sich somit die Randbedingung $c_{cc}^m(\chi = 0, t) = c_{cc}^{m,L}$ für $1 \leq m \leq N/2$. Am rechten Kontakt treten die entgegen der χ -Richtung laufenden Wellen in das Bauelement ein. Diese sind durch die letzten $N/2$ -Werte von $c_{cc}^m(\chi = 0, t) = c_{cc}^{m,R}$ für $N/2 + 1 \leq m \leq N$ festgelegt.

In Analogie zum Wigner-Formalismus sind die Verhältnisse für das Löchersystem \mathbf{c}_{vv} vertauscht ($c_{vv}^m(\chi = 0, t) = c_{vv}^{m,L}$) für $N/2 + 1 \leq m \leq N$ und $c_{vv}^m(\chi = 0, t) = c_{vv}^{m,R}$ für $1 \leq m \leq N/2$) [S1]. Für die Komponenten $c_{\lambda\lambda'}^{L/R}$ gilt der Zusammenhang: $c_{\lambda\lambda'}^{L/R} = 0$ mit $\lambda \neq \lambda'$.

Weiterhin ergeben sich durch das lokale Fließgleichgewicht am Übergang zwischen Reservoir und Bauelement im Phasenraum (5.12) nach der inversen Fourier-Transformation (2.55) und anschließender Basistransformation (6.56) die folgenden Neumann-Randbedingungen an den Kontakten:

$$\left. \frac{\partial}{\partial \chi} \mathbf{c}_{\lambda\lambda'}(\chi, t) \right|_{\chi=0} = 0 \quad \text{und} \quad \left. \frac{\partial}{\partial \chi} \mathbf{c}_{\lambda\lambda'}(\chi, t) \right|_{\chi=L_\chi} = 0. \quad (6.62)$$

Reformulierung der Transportgleichungen: Im Folgenden sollen nun die Bewegungsgleichungen für den Entwicklungskoeffizienten $\mathbf{c}_{\lambda\lambda'}(\chi, t)$ aufgestellt werden, welche die Implementierung der zuvor beschriebenen Inflow-Randbedingungen ermöglicht.

¹¹Diese Bedingung wird im späteren Verlauf durch die numerische Dispersion verschärft.

¹²Das Einbandmodell ist hierin enthalten.

Hierzu wird die statistische Dichtematrix innerhalb der semidiskreten Transportgleichungen für die Intrabandmodelle ohne (6.41) und mit örtlicher Variation der effektiven Masse (6.44) sowie für das Interbandmodell (6.47) in die Basis $[\mathcal{Q}]$ entsprechend (6.56) entwickelt [S3, S5]. Weiterhin werden die semidiskreten Transportgleichungen von links mit der hermitesch-konjugierten Matrix $[\mathcal{Q}]^\dagger$ multipliziert. Zur einfachen Darstellung ist es sinnvoll, die folgenden Matrizen $[\tilde{\mathbf{A}}_{\lambda\lambda'}(\chi)]$ der Dimension $N \times N$ zu definieren

$$[\tilde{\mathbf{A}}_{\lambda\lambda'}(\chi)] = [\mathcal{Q}]^\dagger \cdot [\mathbf{A}_{\lambda,\lambda}(\chi)] \cdot [\mathcal{Q}], \quad (6.63)$$

die sich infolge der Transformation der generischen Matrix $[\mathbf{A}_{\lambda,\lambda}(\chi)]$ (6.15) innerhalb der Bewegungsgleichung ergeben.

Für das Intrabandmodell kann auf eine dezidierte Darstellung des Bandindex λ verzichtet werden. Konzeptionell ergibt sich unter Annahme einer konstanten effektiven Masse der Ausdruck

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{c}(\chi, t) = [\tilde{\mathbf{D}}_1] \frac{\partial}{\partial \chi} \mathbf{c}(\chi, t) + [\tilde{\mathbf{D}}_0(\chi)] \cdot \mathbf{c}(\chi, t), \quad (6.64)$$

wobei die semidiskreten Operatoren $[\mathbf{D}_1]$ und $[\mathbf{D}_0(\chi)]$ gemäß (6.42), beziehungsweise (6.43), anzusetzen sind.

Die Einbeziehung der örtlichen Variation der effektiven Masse (6.44) resultiert hingegen in:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{c}(\chi, t) = [\tilde{\mathbf{D}}_2(\chi)] \cdot \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} \mathbf{c}(\chi, t) + [\tilde{\mathbf{D}}_1(\chi)] \cdot \frac{\partial}{\partial \chi} \mathbf{c}(\chi, t) + [\tilde{\mathbf{D}}_0(\chi)] \cdot \mathbf{c}(\chi, t). \quad (6.65)$$

Die semidiskreten Operatoren werden dabei durch Transformation von (6.45) unter Ausnutzung von (6.63) bestimmt.

Die Berücksichtigung von Bandkopplungsmechanismen innerhalb der LVNG-RS (6.51) erfordert eine Anwendung der Basisentwicklung (6.63) auf jeden einzelnen semidiskreten Operator in (6.47), dessen Elemente durch (6.48) festgelegt sind.

Im Hinblick auf eine kompakte Notation werden die bandabhängigen Vektoren der Entwicklungskoeffizienten $\mathbf{c}_{\lambda\lambda'}$ innerhalb des Vektors $\mathbf{C}^T(\chi, t)$ der Dimension $4N \times 1$ zusammengefasst:

$$\mathbf{C}^T(\chi, t) = \left(\mathbf{c}_{cc}^T(\chi, t), \mathbf{c}_{cv}^T(\chi, t), \mathbf{c}_{vc}^T(\chi, t), \mathbf{c}_{vv}^T(\chi, t) \right). \quad (6.66)$$

Dementsprechend kann eine $4N \times 4N$ dimensionale Transformationmatrix als dyadisches Produkt mit der 4×4 Einheitsmatrix

$$[\mathcal{Q}] = [\text{Id}]_{4 \times 4} \otimes [\mathcal{Q}] \quad (6.67)$$

eingeführt werden. Hiermit werden nun die semidiskreten Operatoren $[\mathbf{D}_2]$, $[\mathbf{D}_1]$ (6.25) und $[\mathbf{D}_0(\chi)]$ (6.26) in die transformierten Operatoren $[\tilde{\mathbf{D}}_2]$, $[\tilde{\mathbf{D}}_1]$ und $[\tilde{\mathbf{D}}_0(\chi)]$ der Dimension $4N \times 4N$ überführt, wobei die Matrixelemente entsprechend (6.48) definiert sind. Schließlich ergibt sich die Bewegungsgleichung zu:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{C}(\chi, t) = [\tilde{\mathbf{D}}_2] \cdot \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} \mathbf{C}(\chi, t) + [\tilde{\mathbf{D}}_1] \frac{\partial}{\partial \chi} \mathbf{C}(\chi, t) + [\tilde{\mathbf{D}}_0(\chi)] \cdot \mathbf{C}(\chi, t). \quad (6.68)$$

Unterraum-Verfahren: Wie aus der Herleitung der Bewegungsgleichung für die Entwicklungskoeffizienten im vorherigen Abschnitt ersichtlich ist, reduziert sich die Dimensionalität der semidiskreten Operatoren nach der Basistransformation von N_ξ auf N .

Der Fall einer vollständigen Basis $N = N_\xi$ transformiert die ursprünglichen Matrizen auf Matrizen derselben Dimension, wie es beispielsweise in [S3, S5] vorgestellt wird.

Nach weiterer Diskretisierung der Schwerpunktkoordinate, welche in Kapitel 8 behandelt wird, liegen dünnbesetzte Systemmatrizen vor. Die Systemmatrizen enthalten als Elemente Blockmatrizen der Dimension $N_\xi \times N_\xi$, bzw. $N \times N$, wobei der benötigte Aufwand zur Lösung des Systems in einem direkten Zusammenhang zur Größe der Blockmatrizen steht. Der Ansatz birgt also ein erhebliches Potenzial zur Reduktion der Rechenzeit, indem eine reduzierte Basis $N \lll N_\xi$ angesetzt wird [S7]. Die Lösung erfolgt somit in einem Unterraum. Hierzu ist es notwendig, dass die relevanten Basisvektoren in die Rechnungen einbezogen werden. Diese weisen dabei Entwicklungskoeffizienten $c_{\lambda\lambda'}^m(\chi, t)$ auf, die sich deutlich von dem Wert Null unterscheiden. Mithilfe des Fermi-Niveaus sowie des gesamten Potentials kann diesbezüglich eine untere Grenze in Abhängigkeit der Ausbreitungsgeschwindigkeit [S7] angegeben werden (vgl. Abschnitt 6.1). Eine gesonderte Betrachtung dieses Aspekts erfolgt in Abschnitt 8.11.

6.2.5. Verbindung zum Wigner-Formalismus

Über die Basistransformation kann der vorgestellte Ansatz formal mit dem Wigner-Formalismus verknüpft werden. Hierdurch ergeben sich insbesondere Vorteile bei der Einbindung von Streumechanismen, denen eine natürliche Darstellung im Phasenraum zugrunde liegt [15, 23].

Ziel es ist daher, die Matrixelemente innerhalb der semidiskreten Operatoren für die Basis, bestehend aus ebenen Wellen, analytisch auszuwerten und mit denen des Wigner-Formalismus zu vergleichen. Die Betrachtungen sollen hierbei exemplarisch anhand des Intraband- und Interbandmodells unter Annahme einer konstanten effektiven Masse erfolgen.

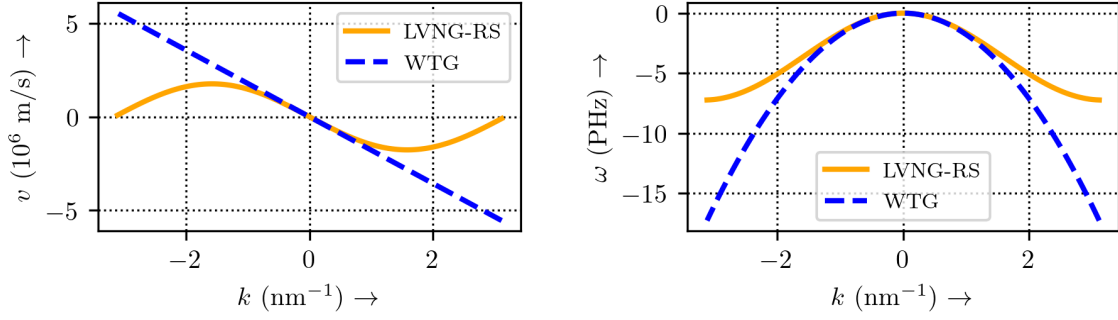
Die Matrixelemente des semidiskreten Diffusionsoperators $[D_1]$ (6.42) im Intrabandmodell, bzw. $[T_{\lambda\lambda}]$ im Interbandmodell (6.48), ergeben sich als [S7]:

$$\mathcal{Q}_j^\dagger [D_1] \mathcal{Q}_n = -\frac{\hbar}{m} \frac{\sin(k_j \Delta\xi)}{\Delta\xi} \cdot \delta_{j,n} + \frac{\hbar}{m} \cdot (-1)^{(j-n)} \cdot \frac{2 \sin(k \Delta\xi)}{L_\xi}. \quad (6.69)$$

Der erste Term in (6.69) beschreibt die numerische Dispersion des Verfahrens, wohingegen der zweite Ausdruck den Einfluss der Ränder aufgreift. Die Diagonalelemente beschreiben die Ausbreitungsgeschwindigkeit $v(k_n)$ der korrespondierenden Basisvektoren und sind in Abbildung 6.3a im Vergleich zu denen des Wigner-Formalismus (6.17) dargestellt. Für den Grenzfall $L_\xi \rightarrow \infty$ läuft der zweite Anteil gegen den Wert null und liefert somit keinen Beitrag. Der verbleibende Term wird dann in eine Taylorreihe entwickelt. Die Entwicklung bis zum linearen Glied liefert unter Annahme eines kleinen Produkts $k_n \Delta\xi$ die Näherung:

$$\lim_{L_\xi \rightarrow \infty} \mathcal{Q}_m^\dagger [D_1] \mathcal{Q}_j \approx -\frac{\hbar k_j}{m} \delta_{j,n}. \quad (6.70)$$

In dieser Näherung stimmen die Matrixelemente des vorgestellten Ansatzes mit denen des Wigner-Formalismus (6.17) überein.



(a) Numerische Ausbreitungsgeschwindigkeit v in Abhängigkeit der Wellenzahl k . (b) Numerische Kreisfrequenz ω in Abhängigkeit der Wellenzahl k .

Abbildung 6.3. Darstellung der Diagonalelemente der semidiskreten Diffusionsoperatoren für den Fall einer Basis aus ebenen Wellen im Vergleich. Die orangefarbene Linie zeigt die Diagonalelemente des vorgestellten Formalismus auf Grundlage der LVNG-RS, während die blau gestrichelte Linie die Diagonalelemente des Wigner-Formalismus darstellt.

Die Matrixelemente $[Z_{\lambda\lambda'}(\chi)]$ des Interbandmodells 6.48, bestimmen sich am Beispiel von $[Z_{cv}(\chi)]$ zu:

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}_j^\dagger [Z_{cv}(\chi)] \mathcal{Q}_n &= \frac{i\hbar}{m} \left\{ \frac{-2 + 2 \cos(k_j \Delta\xi)}{\Delta\xi^2} \delta_{j,n} + \frac{1}{\Delta\xi} (-1)^{(j-n)} \frac{2 \cos(k_j \Delta\xi)}{L_\xi} \right\} + \frac{E_g}{i\hbar} \delta_{j,n} \\ &+ \frac{1}{i\hbar} \frac{\Delta k}{2\pi} \sum_{l=1}^{N_\xi} \exp(i(k_n - k_j)\xi_l) (U(\chi, \xi_l) - iW(\xi_l)) \Delta\xi. \end{aligned} \quad (6.71)$$

Für den komplexen Driftoperator ist hierbei die Mittelpunktsregel zur Approximation verwendet worden, ebenso wird die Beziehung $\Delta k = \frac{2\pi}{L_\xi}$ ausgenutzt. Die letzten beiden Terme stimmen exakt mit denen des Wigner-Formalismus überein, wie aus dem Vergleich mit (6.22) zu erkennen ist. Der erste Term setzt sich aus zwei Anteilen zusammen, welche sowohl der numerischen Dispersion als auch einem Randterm zugeordnet werden können. Im Grenzwert $L_\xi \rightarrow \infty$ verschwindet der Randterm. Auf der physikalischen Ebene kann der numerischen Dispersion die Kreisfrequenz $\omega(k_n)$ zugeordnet werden. Die entsprechenden Diagonalelemente sind in Abbildung 6.3b im Vergleich zu denen des Wigner-Formalismus dargestellt.

Für hinreichend kleine Werte des Produkts $k_j \Delta\xi$, kann die numerische Dispersion in eine Taylorreihe bis zum quadratischen Glied entwickelt werden:

$$i \frac{\hbar}{m} \frac{-2 + 2 \cos(k_j \Delta\xi)}{\Delta\xi^2} \approx -i \frac{\hbar k_j^2}{m}. \quad (6.72)$$

Dieser Zusammenhang stimmt mit den Matrixelementen (6.22) überein. Unter der Voraussetzung, dass die verbleibenden semidiskreten Operatoren (6.48) mit der Mittelpunktsregel (6.34) approximiert werden, sind die transformierten Operatoren mit denen des Wigner-Formalismus

identisch. Beispielweise ergibt sich aus dem komplexen Driftoperator (6.43a)

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}_j^\dagger [D_0(\chi)] \mathcal{Q}_n &= \frac{\Delta\xi}{L_\xi} \sum_{l=1}^{N_\xi} \exp(i(k_n - k_j)\xi_l) (B(\chi, \xi_l, t) - iW(\xi_l)) \\ &= \frac{\Delta k}{2\pi} \sum_{l=1}^{N_\xi} \exp(i(k_n - k_j)\xi_l) (B(\chi, \xi_l, t) - iW(\xi_l)) \Delta\xi, \end{aligned} \quad (6.73)$$

der somit dem Ausdruck des Wigner-Formalismus (6.18) entspricht [S7].

Im Grundsatz bewahrt der vorgestellte Formalismus auf Basis einer Ortsraumdiskretisierung der LVNG-RS somit die formalen Eigenschaften des Wigner-Formalismus.

Diskussion der numerischen Dispersion: Neben der Anforderung an die Eindeutigkeit der Lösung ($N \leq N_\xi$) kommt es zu weiteren Einschränkungen durch die numerische Dispersion für den Fall der Basis aus ebenen Wellen. Damit eine eindeutige Zuordnung der Basisvektoren zu den Ausbreitungsgeschwindigkeiten (6.69) möglich ist, muss das Argument der Sinusfunktion der Bedingung

$$|k_{\max} \Delta\xi| \leq \frac{\pi}{2} \quad (6.74)$$

genügen (vgl. Abbildung 6.3a). Durch Einsetzen von (6.10) in (6.74) ergibt sich die zusätzliche Anforderung an die Abtastpunkte N_ξ in Relation zu der Anzahl der Basisfunktionen zu:

$$N - 1 \leq \frac{N_\xi}{2}. \quad (6.75)$$

Ein weiterer Zusammenhang kann aus (6.74) abgeleitet werden. Falls der Wellenvektor k nur Werte innerhalb der ersten Brillouin-Zone [33] annehmen soll, unterliegt $k_{\max} \leq \frac{\pi}{a}$, wobei a die Gitterkonstante des Materials repräsentiert. Hieraus folgt unmittelbar die Einschränkung:

$$\Delta\xi \geq \frac{a}{2}. \quad (6.76)$$

Zusammenfassung: In diesem Abschnitt ist ein Formalismus zur numerischen Lösung der LVNG-RS auf Grundlage eines Finite-Volumen-Verfahrens vorgestellt worden. Zur angemessenen Beschreibung kohärenter Effekte ist ein zentraler numerischer Fluss an den Übergängen zwischen benachbarten Gitterzellen ausgenutzt worden. Nach einer generischen Betrachtung der Approximation sind die einzelnen Bestimmungsgleichungen für die Gitterzellen in Matrix-Vektor-Schreibweise in semidiskreten Transportgleichungen zusammengefasst worden. Hierbei wurden Intra- und Interbandmodelle berücksichtigt.

Mithilfe einer Basistransformation ist die Einbindung der Inflow-Randbedingungen zur Beschreibung offener Quantensysteme ermöglicht worden, sowie auch die Implementierung eines Unterraum-Verfahrens. Zusätzlich sind die transformierten Transportgleichungen bestimmt und in eine mathematische Form gebracht worden, mit der eine von der expliziten Darstellung unabhängige Analyse in den nachfolgenden Kapiteln erfolgen kann. Insbesondere die Entwicklung in die Basis ebener Wellen erlaubt eine formale Verknüpfung mit dem Wigner-Formalismus, wodurch die Vereinigung der Vorteile einer Ortsraumdiskretisierung mit denen einer Phasenraumdarstellung gelingt.

7. Upwind-Verfahren zur Approximation der Wigner-Transportgleichung

In dem vorangegangenen Kapitel ist auf die Diskretisierung des Wellenvektors innerhalb der Wigner-Transportgleichung eingegangen worden. Nun soll das konventionelle Finite-Differenzen-Verfahren, das sogenannte Upwind-Verfahren, zur Diskretisierung der Schwerpunktkoordinate vorgestellt werden. Dabei soll der Fokus sowohl auf der mathematischen Formulierung als auch auf den damit verbundenen Problemen liegen, welche insbesondere die Entwicklung eines alternativen Verfahrens in Kapitel 8 motivieren. Außerdem sollen die Upwind-Verfahren in Kombination mit der in Abschnitt 5.2 entwickelten, absorbierenden Schicht untersucht werden.

Hierzu wird zunächst in Abschnitt 7.1 auf die Grundidee hinter dem Verfahren und die Diskretisierungsvorschrift innerhalb des Wigner-Formalismus eingegangen. Im Anschluss werden in Abschnitt 7.2 Kritikpunkte genannt, die in einem unmittelbaren Zusammenhang zum Upwind-Verfahren stehen. Zuletzt erfolgt in Abschnitt 7.3 eine numerische Untersuchung der Konvergenzeigenschaften anhand einer RTD. Insbesondere die bekannten unphysikalischen Ergebnisse und deren Ursprung werden dabei in den Blick genommen.

7.1. Mathematische Formulierung

Bei dem Upwind-Differenzen-Schema (UDS), kurz Upwind-Verfahren, handelt es sich um eine Klasse von Finiten-Differenzen-Approximationen, die ihren Ursprung in der numerischen Fluidodynamik haben [125, 127].

Die grundlegende Idee bei der Approximation der Differenzialoperatoren basiert dabei auf den sogenannten Charakteristiken [23, 125], entlang derer sich die Lösungen ausbreiten. Die Information der Charakteristiken fließt dann schließlich in den Differenzenquotienten zur Approximation des Differenzialoperators ein, indem für vorwärtslaufende Wellen ein Rückwärtsdifferenzenquotient angesetzt wird, bzw. ein Vorwärtsdifferenzenquotient für rückwärtslaufende Wellen [23].

In dem Wigner-Formalismus sind die positiven Anteile des Wellenvektors \mathbf{k} mit den vorwärtslaufenden Wellen verknüpft, wohingegen die negativen Anteile des Wellenvektors \mathbf{k} mit den rückwärtslaufenden Wellen identifiziert werden [23, 24]. Im Folgenden sollen die Differenzenquotienten für das in der Literatur übliche Intrabandmodell (6.16) unter Annahme einer konstanten effektiven Masse angegeben werden. Hierzu wird in Abschnitt 7.1.1 zuerst auf ein Verfahren erster Ordnung und anschließend in Abschnitt 7.1.2 auf ein Verfahren zweiter Ordnung eingegangen.

7.1.1. Upwind-Verfahren erster Ordnung

Die Approximation des Diffusionsoperators (3.14) erfolgt für die positiven Wellenzahlen mit einem Rückwärtsdifferenzenquotienten und für negative Wellenzahlen mit einem Vorwärtsdifferenzenquotienten erster Ordnung [23, 24]:

$$-\frac{\hbar k_j}{m} \frac{\partial}{\partial \chi} f(\chi, k_j, t) \approx -\frac{\hbar}{m} \left\{ \max(k_j, 0) \cdot \frac{f(\chi_i, k_j, t) - f(\chi_{i-1}, k_j, t)}{\Delta \chi} + \min(k_j, 0) \cdot \frac{f(\chi_{i+1}, k_j, t) - f(\chi_i, k_j, t)}{\Delta \chi} \right\}. \quad (7.1)$$

Der lokale Diskretisierungsfehler des Verfahrens ist $O(\Delta \chi)$. Mit dieser Beziehung lässt sich die semidiskrete Transportgleichung (6.16) entsprechend

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{f}(\chi_i, t) &= \min([\mathbf{D}_1], 0) \frac{\mathbf{f}(\chi_i, t) - \mathbf{f}(\chi_{i-1}, t)}{\Delta \chi} \\ &+ \max([\mathbf{D}_1], 0) \frac{\mathbf{f}(\chi_{i+1}, t) - \mathbf{f}(\chi_i, t)}{\Delta \chi} + [\mathbf{D}_0(\chi_i)] \mathbf{f}(\chi_i, t) \end{aligned} \quad (7.2)$$

approximieren, wobei die Minimums- $\min(\cdot)$ und Maximumsbildung $\max(\cdot)$ in diesem Kontext elementweise definiert sind.

Der Ausdruck $\min([\mathbf{D}_1], 0)$ beschreibt dann eine Diagonalmatrix, bei welcher nur die ersten $N_k/2$ Elemente ungleich Null sind. Für den Ausdruck $\max([\mathbf{D}_1], 0)$ sind hingegen nur die letzten $N_k/2$ Einträge auf der Diagonalen von Null verschieden.

7.1.2. Upwind-Verfahren zweiter Ordnung

Eine Steigerung der Genauigkeit wird mit dem Upwind-Verfahren zweiter Ordnung erzielt (UDS2), z. B. [80, 84, 102]. Dieses weist einen lokalen Diskretisierungsfehler von $O(\Delta \chi^2)$ auf. Die bessere Genauigkeit wird durch ein Approximationsschema erreicht, bei welchem drei Diskretisierungspunkte bezüglich der Schwerpunktkoordinate einbezogen werden:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{f}(\chi_i, t) &= \min([\mathbf{D}_1], 0) \frac{3\mathbf{f}(\chi_i, t) - 4\mathbf{f}(\chi_{i-1}, t) + \mathbf{f}(\chi_{i-2}, t)}{2\Delta \chi} \\ &+ \max([\mathbf{D}_1], 0) \frac{-\mathbf{f}(\chi_{i+2}, t) + 4\mathbf{f}(\chi_{i+1}, t) - 3\mathbf{f}(\chi_i, t)}{2\Delta \chi} + [\mathbf{D}_0(\chi_i)] \mathbf{f}(\chi_i, t). \end{aligned} \quad (7.3)$$

Ein Überblick über die Verfahren höherer Ordnung und deren Diskretisierungsvorschrift ist z. B. in [80] gegeben.

7.1.3. Formulierung der numerischen Stromdichte

Für die numerische Formulierung der Stromdichte kann nicht die naive Approximation des entsprechenden analytischen Ausdrucks (3.21) herangezogen werden, da diese nicht konsistent mit dem Upwind-Verfahren ist [28, 102].

Die Formulierung der numerischen Stromdichte erfordert die explizite Berücksichtigung des Upwind-Verfahrens bei der Herleitung der Kontinuitätsgleichung, insbesondere im Hinblick auf den Diffusionsoperator [23].

In Analogie zur analytischen Herleitung der Kontinuitätsgleichung in Abschnitt 3.2 sind die semidiskreten Transportgleichungen auf der numerischen Ebene auszuwerten [23].

Die numerische Berechnungsvorschrift für das Upwind-Verfahren erster Ordnung ergibt sich zu [23, 102]:

$$j(\chi_{i+\frac{1}{2}}, t) = -q \frac{\hbar \Delta k}{m 2\pi} \left\{ \sum_{k_j < 0} k_j \cdot f(\chi_{i+1}, k_j, t) + \sum_{k_j > 0} k_j \cdot f(\chi_i, k_j, t) \right\}. \quad (7.4)$$

Für das Upwind-Verfahren zweiter Ordnung lässt sich die numerische Berechnungsvorschrift für die Stromdichte hingegen als

$$j(\chi_{i+\frac{1}{2}}, t) = -q \frac{\hbar \Delta k 1}{m 2\pi 2} \left\{ \sum_{k_j < 0} k_j (-f(\chi_{i+2}, k_j, t) + 3f(\chi_{i+1}, k_j, t)) \right. \\ \left. + \sum_{k_j > 0} k_j (3f(\chi_i, k_j, t) - f(\chi_{i-1}, k_j, t)) \right\} \quad (7.5)$$

bestimmen [78, 102].

Aus den Berechnungsvorschriften für die Stromdichten, (7.4) und (7.5), ist unmittelbar ein nichtlokaler Charakter bezüglich der Schwerpunktkoordinate festzustellen [84], während die naive Approximation auf Basis des analytischen Ausdrucks (3.21) eine lokale Formulierung der Stromdichte liefert.

7.1.4. Implementierungsaspekte

Um die gesamte Systemmatrix aufzustellen, wird die semidiskrete WTG (7.2) für das UDS1, bzw. (7.3) für das UDS2, für jeden diskreten Punkt χ_i mit $i \in 1, \dots, N_\chi$ notiert und anschließend in eine Matrix-Vektor-Darstellung überführt.

Die Behandlung des semidiskreten Driftoperators $[\mathbf{D}_0(\chi)]$ (6.18) ist dabei unkritisch. Nach Diskretisierung der Schwerpunktkoordinate resultiert dieser unabhängig von der Ordnung des Upwind-Verfahrens in einer Blockdiagonalmatrix der Dimension $N_\chi N_k \times N_\chi N_k$, auch Driftmatrix genannt. Die Blöcke auf der Diagonalen enthalten dabei den Abtastwert des semidiskreten Driftoperators $[\mathbf{D}_0(\chi_i)]$ für jeden diskreten Ort χ_i mit $i \in 1, \dots, N_\chi$ innerhalb des Rechengebiets.

Für die Terme hinsichtlich des Diffusionsoperators $[\mathbf{D}_1]$ wird nach der Diskretisierung eine übersichtliche Darstellung erzielt, indem das dyadische Produkt ausgenutzt wird. Hierzu wird sowohl eine Matrix $[\mathbf{A}_F]$ definiert, welche die Vorwärtsdifferenzenquotienten enthält, als auch eine Matrix $[\mathbf{A}_R]$, welche die Rückwärtsdifferenzenquotienten über dem Rechengebiet enthält. Beide Matrizen enthalten die örtliche Abhängigkeit und weisen daher eine Dimension von $N_\chi \times N_\chi$ auf.

Hiermit lässt sich die sogenannte Diffusionsmatrix als

$$[\mathbf{A}_R] \otimes \min([\mathbf{D}_1], 0) + [\mathbf{A}_F] \otimes \max([\mathbf{D}_1], 0)$$

formulieren. Auch an dieser Stelle sind die minimums- bzw. maximumsbildenden Funktionale elementweise zu interpretieren. Die resultierende Matrix weist eine Dimension von $N_\chi N_k \times N_\chi N_k$ auf.

Konzeptionell resultiert dieses Vorgehen in einem gekoppelten System von gewöhnlichen Differenzialgleichungen erster Ordnung gemäß [23]

$$\frac{d}{dt} \mathbf{F}(t) = [\mathbf{C}] \cdot \mathbf{F}(t) + \mathbf{b}_{bc}, \quad (7.6)$$

wobei der Vektor $\mathbf{F}^T(t) = (\mathbf{f}^T(\chi_1, t), \mathbf{f}^T(\chi_2, t), \dots, \mathbf{f}^T(\chi_{N_\chi}, t))$ als Elemente die Vektoren $\mathbf{f}(\chi_i, t)$ (6.14) beinhaltet. Die Systemmatrix $[\mathbf{C}]$ besteht aus den vorher beschriebenen Diffusions- und Driftmatrizen. Der Vektor \mathbf{b}_{bc} enthält die Inflow-Randbedingungen (5.7), welche noch durch die entsprechenden Anteile des semidiskreten Diffusionoperators zu gewichten sind [23, 24, 102], die für $i = 1$ und $i = N_\chi$ innerhalb (7.2) für das UDS1, bzw. $i = 1, 2$ und $i = N_\chi - 1, N_\chi$ innerhalb (7.3) für das UDS2 außerhalb des Rechengebiets liegen.

7.2. Kritikpunkte

Die Anwendung des Upwind-Verfahrens im Wigner-Formalismus führt in der Literatur zu zahlreicher Kritik, die im Folgenden kurz erläutert wird:

- **Numerische Diffusion:** Der mit der Upwind-Diskretisierung verbundene Approximationsfehler schlägt sich in einer zusätzlichen numerischen Diffusion nieder [27, 127]. Physikalische Prozesse, welche den Diffusionseffekten zuzuordnen sind, werden somit im Vergleich überbewertet [28]. Um diesen Effekt abzumildern, kann dem Upwind-Verfahren ein Anteil mit zentralen Differenzen hinzugefügt werden. Dies ist unter dem Begriff Hybrid-Differenzen-Schema (HDS) bekannt [102]. Ein wesentlicher Anteil UDS ist jedoch immer notwendig, um eine ausreichende numerische Stabilität des Verfahrens zu gewährleisten [102].
- **Nichtlokale Randbedingungen:** Die Frage nach der Trennung zwischen Bauelement und Reservoir, in welchem die semiklassische Formulierung der Inflow-Randbedingungen ihre Gültigkeit besitzt, ist ein stark debattiertes Themengebiet [25, 26, 29]. Insbesondere im Zusammenhang mit dem UDS findet die Formulierung der Randbedingungen alleine über die Werte des Diffusionsoperators statt [23], welche außerhalb des Rechengebiets liegen. Der nichtlokale Driftoperator wird nicht in die Formulierung der Randbedingungen einbezogen [28, 29].
- **Kohärenz-Effekte:** Basierend auf einer analytischen Lösung der semidiskreten WTG (6.16) für das gängige Intrabandmodell unter Annahme einer konstanten effektiven Masse kann gezeigt werden, dass die mit dem Upwind-Verfahren verbundene Entkopplung der hin- und rücklaufenden Wellen im Phasenraum auf physikalischer Grundlage nicht

gerechtfertigt ist¹ [28]. Kohärente Effekte können somit im Grundsatz nicht erfasst werden. Dies spiegelt sich u. a. in der nichtlokalen numerischen Berechnungsvorschrift der Stromdichten, (7.4) und (7.5), wider.

- **Zusammenbruch unter Gitterverfeinerung:** Die Upwind-Verfahren sind äußerst sensitiv bezüglich der Diskretisierungsparameter [27, 81, 82]. In einem kürzlich veröffentlichten Beitrag [27] wird eine Untersuchung zu den Konvergenzeigenschaften anhand einer Simulation einer RTD durchgeführt. Bei sukzessiver Verkleinerung der Diskretisierungsweite $\Delta\chi$ konvergieren die Werte der I-V-Kennlinie gegen eine unphysikalische Lösung die keinen NDR mehr aufweist [27].

Alle Kritikpunkte eint der Zusammenhang, dass sie infolge von unphysikalischen Ergebnissen aus dem Wigner-Formalismus motiviert worden sind. Jedoch lag den Ansätzen keine absorbierende Schicht [S5, S8] zugrunde, wie sie zuvor systematisch in Abschnitt 5.2 entwickelt worden ist. Da die ersten drei Kritikpunkte auf mathematischen Fakten beruhen, ist eine Adressierung dieser durch die absorbierende Schicht nicht möglich. Der letzte Punkt soll jedoch im nächsten Abschnitt gesondert betrachtet und diskutiert werden.

7.3. Numerische Untersuchungen

Für die folgenden Untersuchungen wird die RTD mit den Struktur- und Materialparametern herangezogen, wie zuvor in Tabelle 5.1 dargestellt ist. Das Simulationsgebiet im Phasenraum $[0\text{nm}, 90\text{nm}] \times [-2.25\text{nm}^{-1}, 2.25\text{nm}^{-1}]$ wird bezüglich der Wellenzahl mit $N_k = 120$ Abtastpunkten diskretisiert.

Die Diskretisierungsweite der Schwerpunktkoordinate $\Delta\chi$ soll im Folgenden die Grundlage für die Untersuchungen der Konvergenzeigenschaften bilden. Hierzu wird auch eine absorbierende Schicht implementiert, die auf den Parametern $b_{\text{al}} = 4\text{eV}$, $w_{\text{al}} = 77\text{nm}$ sowie $n_{\text{al}} = 4$ basiert. Die Temperatur des Bauelements beträgt $T = 300\text{K}$.

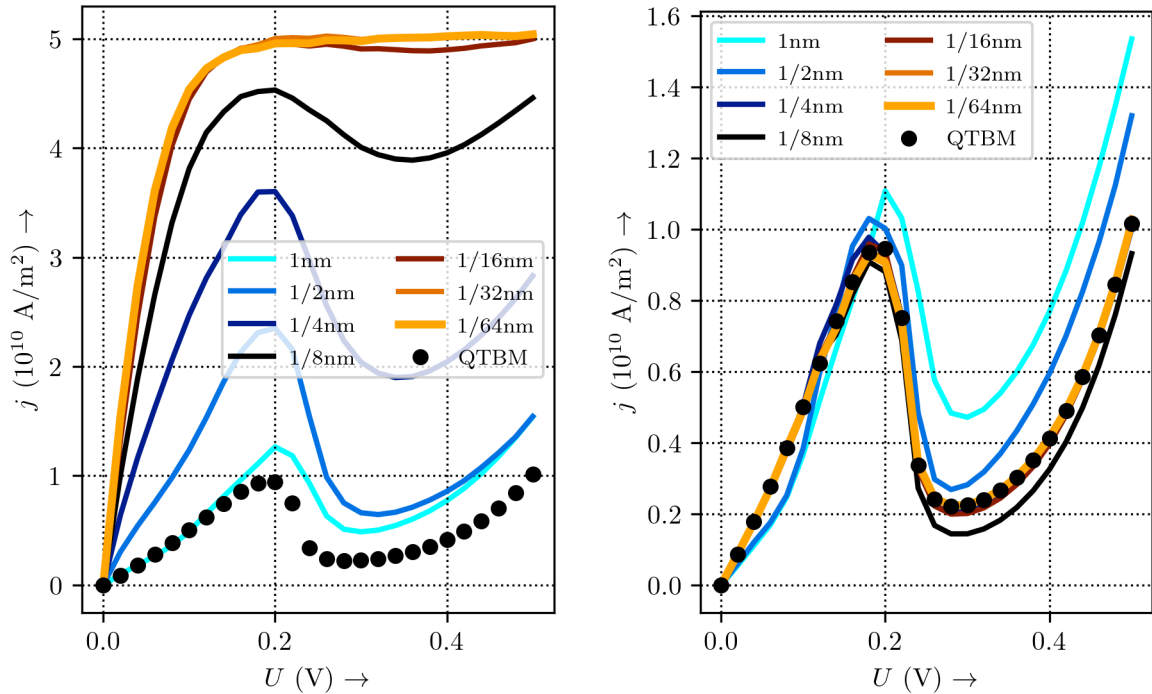
7.3.1. Evaluierung der I-V-Kennlinie

Zur Berechnung der I-V-Kennlinie wird die stationäre WTG (7.6) unter Anwendung des Upwind-Verfahrens zweiter Ordnung (7.3) für Spannungen zwischen $U = 0\text{V}$ und $U = 0,5\text{V}$ gelöst. Im Anschluss werden aus der numerisch ermittelten Wigner-Funktion die Stromdichten gemäß der Berechnungsvorschrift (7.5) bestimmt. Die Spannung wird dabei jeweils pro Rechenschritt um $0,025\text{V}$ erhöht und die Elektron-Elektron-Wechselwirkung wird vernachlässigt. Der Spannungsabfall wird hierzu als linear über der zweiten und sechsten Schicht der RTD angenommen (vgl. Tabelle 5.1).

Hinsichtlich der Konvergenzuntersuchungen wird die Diskretisierungsweite $\Delta\chi$ zwischen $\Delta\chi = 1\text{nm}$ und $\Delta\chi = 1/64\text{nm}$ variiert, wobei zwei aufeinander folgende Werte sich jeweils um einen Faktor zwei unterscheiden. Sowohl der bisherige Fall der Literatur soll in Betracht gezogen werden als auch die Erweiterung um den hier vorgestellten Formalismus des komplex absorbierenden Potentials [S8].

¹Siehe hierzu die Herleitung in Anhang D.

Die ermittelten I-V-Kennlinien des konventionellen Falls ohne die Implementierung einer absorbierenden Schicht sind in Abbildung 7.1a in Abhängigkeit der Diskretisierungsweite $\Delta\chi$ dargestellt. Zusätzlich sind die Werte der Referenzlösung, welche mithilfe der QTBM [7, 8] bestimmt



(a) Konventionelle Lösung ohne absorbierende Schicht. (b) Lösung mit implementierter absorbierender Schicht.

Abbildung 7.1. I-V-Kennlinien für das Upwind-Verfahren zweiter Ordnung in Abhängigkeit der Diskretisierungsweite $\Delta\chi$. Die schwarzen Punkte stellen die Werte der Referenzstromdichte aus der QTBM dar. Die farbigen Linien repräsentieren die Werte der Stromdichte für die verschiedenen Diskretisierungsweiten $\Delta\chi$. In (a) ist die konventionelle Lösung ohne die Implementierung einer absorbierenden Schicht dargestellt, während in (b) die Ergebnisse mit absorbierender Schicht gezeigt werden.

werden, als schwarze Punkte dargestellt. Mit abnehmender Diskretisierungsweite entfernen sich die Werte der Stromdichte j zunehmend von der Referenzlösung, wobei die Stärke des charakteristischen NDR abnimmt. Ab einer Diskretisierungsweite von $\Delta\chi = 1/32\text{nm}$ sind die Ergebnisse konvergiert. Die Kennlinie weist keinen NDR mehr auf und nimmt ungefähr fünffach so große Werte an wie der Maximalwert der Referenzlösung. Insgesamt konvergiert die Stromdichte somit gegen eine unphysikalische Lösung.

Nun soll die absorbierende Schicht bei der Berechnung der Wigner-Funktion Berücksichtigung finden. Die I-V-Kennlinien in Abhängigkeit der Diskretisierungsweite sind in Abbildung 7.1b im Vergleich zur Referenzlösung aus der QTBM (schwarze Punkte) dargestellt. Mit abnehmender Schrittweite nähern sich die Werte der Stromdichte denen der Referenzlösung an und stimmen in einem hohen Maße überein (der mittlere relative Fehler liegt in der Größenordnung 10^{-2}).

Zur besseren Veranschaulichung sind weiterhin die Werte der Stromdichte j in Abhängigkeit der Diskretisierungsweite $\Delta\chi$ in Abbildung 7.2a für eine angelegte Spannung von $U = 0,2\text{V}$

sowie in Abbildung 7.2b für eine angelegte Spannung von $U = 0,3\text{V}$ dargestellt. Wie aus diesen

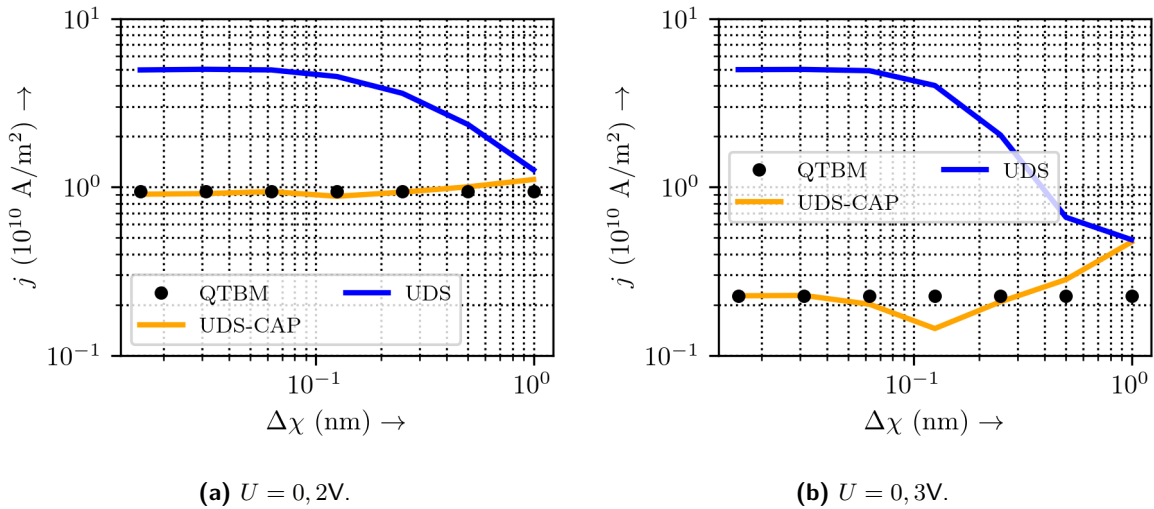


Abbildung 7.2. Stromdichte j in Abhängigkeit der Diskretisierungsweite $\Delta\chi$ in doppelt-logarithmischer Skala. In (a) beträgt die angelegte Spannung $U = 0,2\text{V}$, während sie in (b) $U = 0,3\text{V}$ beträgt. Die schwarzen Punkte stellen die Referenzwerte aus der QTBM dar. Bei der orangefarbenen Linie (UDS-CAP) ist die absorbierende Schicht eingebunden worden, wobei die blaue Linie die konventionelle Lösung ohne absorbierende Schicht kennzeichnet.

Abbildungen ersichtlich ist, konvergieren die Werte der Stromdichte, welche unter Einbeziehung der absorbierenden Schicht innerhalb der WTG bestimmt werden, gegen die Werte der Referenzlösung (schwarze Punkte), wohingegen die konventionelle Lösung gegen einen anderen, in diesem Zusammenhang unphysikalischen Wert konvergiert.

Zusammen mit den Betrachtungen aus dem vorherigen Abschnitt 5.2 lässt sich das unphysikalische Verhalten der Stromdichte (vgl. Abbildung 7.1a) auf die inadäquate Vernachlässigung der Oberflächenterme infolge eines abgeschlossenen Rechengebiets zurückführen. Hierdurch kommt es in der Wigner-Funktion zu unphysikalischen Interferenztermen, die hier am Beispiel der RTD einen unphysikalischen Anstieg der Stromdichte unter Gitterverfeinerung bedingen.

Durch die Implementierung einer absorbierenden Schicht können diese unphysikalischen Interferenzterme gleichermaßen effektiv und einfach vermieden werden. Die Lösungen konvergieren nunmehr gegen die Referenzlösung der QTBM und zeigen ein physikalisches Verhalten. Der entwickelte Formalismus des komplex absorbierenden Potenzials führt somit im Umfeld der konventionellen Methoden zu einer erheblichen Verbesserung.

Zusammenfassung: In diesem Kapitel sind die konventionellen Upwind-Verfahren erster und zweiter Ordnung zur Wigner-Transportgleichung beleuchtet und die mit dem Verfahren verbundenen Kritikpunkte sind diskutiert worden. Es konnte gezeigt werden, dass insbesondere in der Literatur bekannte, unphysikalische Ergebnisse durch die Implementierung einer absorbierenden Schicht vermieden werden können. Der Formalismus des komplex absorbierenden Potenzials lässt sich somit erfolgreich in bereits bestehende Lösungsverfahren integrieren. Jedoch können auch mit der absorbierenden Schicht nicht die inhärenten Kritikpunkte wie die Berücksichtigung von nichtlokalen Randbedingungen und kohärenten Effekten adressiert werden, die im

Zusammenhang mit der nichtlokalen Bestimmung der numerischen Stromdichte stehen. Diese beiden offenen Punkte motivieren die Entwicklung alternativer Verfahren, welche im nächsten Kapitel vorgestellt werden sollen.

8. Neuartige numerische Approximationen der semidiskreten Transportgleichungen

Nachdem im vorherigen Kapitel die konventionellen Upwind-Verfahren zur Approximation der Wigner-Transportgleichung betrachtet worden sind, sollen in diesem Kapitel neuartige Methoden zur Approximation der semidiskreten Transportgleichungen hergeleitet, diskutiert und evaluiert werden. Diese sollen sowohl eine angemessene Beschreibung von kohärenten Effekten ermöglichen als auch die nichtlokalen Operatoren in die Formulierung der Randbedingungen einbeziehen. Die Grundlage für dieses Vorhaben bilden dabei die semidiskreten Transportgleichungen aus Kapitel 6, deren Lösung auf Teilgebieten analytisch bestimmt werden sollen.

Hierzu wird zunächst in Abschnitt 8.1 auf einige Vorüberlegungen zum Lösungsansatz eingegangen, sodass eine von der expliziten Wahl der Basis unabhängige Darstellung erfolgen kann. Im Anschluss erfolgt dann die Approximation der stationären Transportgleichungen in den Abschnitten 8.2 und 8.3. Die Untersuchung der numerischen Formulierung der Stromdichte innerhalb des Wigner-Formalismus erfolgt in Abschnitt 8.4. Anschließend werden in Abschnitt 8.5 die theoretischen Eigenschaften der vorgestellten Approximation mit denen des Upwind-Verfahrens verglichen. In Abschnitt 8.6 und 8.7 erfolgt eine numerische Evaluation anhand von Intra- und Interbandmodellen. Anschließend wird eine Einhüllende-Funktion und eine Transfermatrixmethode zur Lösung der semidiskreten Transportgleichung in Abschnitt 8.8, bzw. in Abschnitt 8.9, vorgestellt. Eine Erweiterung des entwickelten Formalismus im Hinblick auf die Analyse transientser Phänomene wird in Abschnitt 8.10 erarbeitet. Abschließend erfolgt in Abschnitt 8.11 eine Untersuchung der Genauigkeit der vorgestellten Verfahren.

8.1. Vorüberlegungen zum Lösungsansatz

In dem vorherigen Kapitel 6 sind die semidiskreten Transportgleichungen für die untersuchten Modelle innerhalb der WTG als auch der LVNG-RS in eine von der expliziten Basis unabhängige Darstellung gebracht worden. Diese ermöglicht nun eine allgemeingültige, systematische Entwicklung der Lösungsansätze für die Transportgleichung, welche anhand der generischen, semidiskreten Verteilungsfunktion $\Psi(\chi, t)$ der Dimension $N_\Psi \times 1$ erfolgen soll. Die korrespondierenden semidiskreten Operatoren weisen somit eine quadratische Dimension $N_\Psi \times N_\Psi$ auf.

Diesbezüglich wird die generische, semidiskrete Transportgleichung erster Ordnung eingeführt:

$$[\mathbf{D}_1] \frac{\partial}{\partial \chi} \Psi(\chi, t) + [\mathbf{D}_0(\chi)] \cdot \Psi(\chi, t) = \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\chi, t). \quad (8.1)$$

Ihr Gültigkeitsbereich liegt dabei in der konzeptionellen Modellierung des Intra-bandtransports unter Annahme einer konstanten effektiven Masse:

- Für die LVNG-RS ist (6.64) in der Darstellung des Entwicklungskoeffizienten (zur Implementierung von Inflow-Randbedingungen) anzusetzen.
- Die Beschreibung im Phasenraum auf Basis der WTG erfolgt mit (6.16).

Weiterhin wird eine generische, semidiskrete Transportgleichung zweiter Ordnung definiert:

$$[\mathbf{D}_2(\chi)] \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} \Psi(\chi) + [\mathbf{D}_1(\chi)] \frac{\partial}{\partial \chi} \Psi(\chi) + [\mathbf{D}_0(\chi)] \Psi(\chi) = \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\chi, t). \quad (8.2)$$

Ihr konzeptioneller Anwendungsbereich erstreckt sich über Intra-band- bis hin zu den Inter-bandmodellen:

- Unter Berücksichtigung von Bandkopplungsmechanismen ist (6.68) für die transformierte LVNG-RS und (6.24) für den Wigner-Formalismus einzusetzen.
- Für das Intra-bandmodell mit örtlich variierender effektiver Masse sind (6.65) für die transformierte LVNG-RS, bzw. (6.19) anzusetzen.

Zunächst soll der stationäre Lösungsprozess der beiden generischen Bewegungsgleichungen, (8.1) und (8.2), beleuchtet werden. Wie zuvor in Abbildung 6.1 für den Phasenraum, bzw. Abbildung 6.2 für den Ortsraum dargestellt ist, wird das Rechengebiet bezüglich der Schwerpunktkoordinate χ mit N_χ Abtastpunkten diskretisiert, was in $N_\chi - 1$ Subintervallen resultiert (vgl. orange-farbenen Bereich des i -ten Subintervalls in Abbildung 6.1). Innerhalb dieser Teilgebiete sollen die Transportgleichungen mit analytischen Methoden gelöst werden. Anschließend werden die Teillösungen geeignet approximiert und miteinander verknüpft. Die gewonnenen Kenntnisse der stationären Approximation sollen in die Entwicklung der transienten Approximation einfließen.

Die vorgestellten Methoden basieren auf den Arbeiten [28, S2, S3, S5–S7, S9, S10, S12] und stellen eine Generalisierung und Erweiterung dar.

8.2. Generische Transportgleichung erster Ordnung

Zuerst soll die generische, semidiskrete Transportgleichung erster Ordnung (8.1) im stationären Regime behandelt werden. Hierzu wird mithilfe einer formalen Integration die analytische Lösung auf einem Teilgebiet in Abschnitt 8.2.1 ermittelt. Im Anschluss werden die Teillösungen in Abschnitt 8.2.2 miteinander verknüpft und in einer Matrix-Vektor-Schreibweise zusammengefasst. Die Implementierung der Inflow-Randbedingungen erfolgt dann in Abschnitt 8.2.3, bevor in Abschnitt 8.2.4 ein formaler Zusammenhang zu Differenzenquotienten hergestellt wird.

8.2.1. Integration über Teilgebiete

Nun erfolgt die Integration der generischen, semidiskreten Transportgleichung (8.1) im stationären Regime ($\frac{\partial}{\partial t} = 0$) innerhalb des i -ten Teilgebiets $\chi \in [\chi_i, \chi_{i+1}]$. Die formale Lösung lässt

sich dabei mithilfe eines Exponentialoperators schreiben [S9]:

$$\Psi(\chi_i + \Delta\chi) = \exp \left(- \int_{\chi_i}^{\chi_i + \Delta\chi} d\chi [\mathbf{D}_1]^{-1} [\mathbf{D}_0(\chi)] \right) \cdot \Psi(\chi_i). \quad (8.3)$$

Die Auswertung des Integrals innerhalb des Exponentialoperators erfolgt mit numerischen Methoden, hier am Beispiel der Mittelpunktsregel als

$$\int_{\chi_i}^{\chi_{i+1}} d\chi [\mathbf{D}_1]^{-1} [\mathbf{D}_0(\chi)] \approx [\mathbf{D}_1]^{-1} [\mathbf{D}_0(\chi_{i+\frac{1}{2}})] \cdot \Delta\chi \equiv [\mathbf{\Gamma}(\chi_i)] \cdot \Delta\chi, \quad (8.4)$$

wobei für eine kompakte Darstellung zusätzlich die Matrix $[\mathbf{\Gamma}(\chi_i)]$ definiert wird. Der Term $[\mathbf{D}_0(\chi_{i+\frac{1}{2}})]$ inmitten des i -ten Teilgebiets wird mithilfe der bekannten Knotenwerte auf den Rändern als $\frac{[\mathbf{D}_0(\chi_i)] + [\mathbf{D}_0(\chi_{i+1})]}{2}$ ausgedrückt, wodurch das Verfahren der Anwendung der Trapezregel gleichzusetzen ist.

Es wird angenommen, dass die generische Verteilungsfunktion an den Übergängen zwischen den benachbarten Subintervallen stetig ist [28, S5, S9, S12], sodass der Zusammenhang $\Psi(\chi_i + \Delta\chi) = \Psi(\chi_{i+1})$ gilt. Hiermit ergibt sich aus der Beziehung (8.3) durch Einsetzen von (8.4) ein Propagationsalgorithmus [28, S9, S12]

$$\exp \left(+ [\mathbf{\Gamma}(\chi_i)] \frac{\Delta\chi}{2} \right) \Psi(\chi_{i+1}) = \exp \left(- [\mathbf{\Gamma}(\chi_i)] \frac{\Delta\chi}{2} \right) \Psi(\chi_i), \quad (8.5)$$

wobei der Ausdruck von links mit $\exp \left(+ [\mathbf{\Gamma}(\chi_i)] \frac{\Delta\chi}{2} \right)$ multipliziert worden ist.

Im Ergebnis wird nicht nur eine bessere numerische Kondition des Problems erzielt¹, sondern auch eine normerhaltende Formulierung. Insbesondere Letztere erlangt eine wichtige Bedeutung, da sie die physikalische Energieerhaltung repräsentiert.

Die exakte, analytische Evaluation des Exponentialoperators ist mit der Berechnung der Eigenwerte und Eigenvektoren verbunden. Der numerische Aufwand ist daher hoch. Um die Rechenzeit deutlich zu reduzieren, sind geeignete Entwicklungen für den Exponentialoperator anzusetzen. Für die Approximation bieten sich gängige Methoden [128] wie Chebyshev-, Padé- und Taylor-Polynomapproximationen an.

In dieser Arbeit wird die Taylor-Polynomapproximation verfolgt:

$$\exp \left(\pm [\mathbf{\Gamma}(\chi_i)] \frac{\Delta\chi}{2} \right) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left(\pm [\mathbf{\Gamma}(\chi_i)] \frac{\Delta\chi}{2} \right)^m. \quad (8.6)$$

Aufgrund der konservativen Formulierung (8.5) stimmt das Vorgehen in den niedrigen Ordnungen sogar mit der klassischen Padé-Approximation [128] überein. Damit die betragsmäßig kleinen Werte der höheren Ordnungen nicht durch Rundungsfehler der internen CPU-Genauigkeit² verloren gehen, wird ein Standardverfahren, die sogenannte Scaling-and-Squaring-Technik implementiert, wie in [128] beschrieben ist. Hierdurch wird in einem ersten Rechenschritt eine

¹Der Formalismus liefert jedoch auch noch numerisch stabile Ergebnisse, falls die Aufteilung nicht erfolgt.

²*double precision* Format.

wobei zusätzlich noch von links mit $[\mathbf{D}_1(\chi)]$ multipliziert wird. Durch Umstellen und Zusammenfassen der Terme bezüglich der Matrizen ergibt sich schließlich die Beziehung:

$$[\mathbf{D}_1] \frac{\Psi(\chi_{i+1}) - \Psi(\chi_i)}{\Delta\chi} + \frac{[\mathbf{D}_0(\chi_i)] + [\mathbf{D}_0(\chi_{i+1})]}{2} \frac{\Psi(\chi_{i+1}) + \Psi(\chi_i)}{2} = \mathbf{0}. \quad (8.13)$$

Aus dem Vergleich mit der generischen, semidiskreten Transportgleichung (8.1) können schließlich die formalen Zusammenhänge:

$$[\mathbf{D}_1] \left. \frac{\partial}{\partial\chi} \Psi(\chi) \right|_{\chi_{i+\frac{1}{2}}} \Rightarrow [\mathbf{D}_1] \frac{\Psi(\chi_{i+1}) - \Psi(\chi_i)}{\Delta\chi} \quad (8.14)$$

und

$$[\mathbf{D}_0(\chi)] \Psi(\chi) \Big|_{\chi_{i+\frac{1}{2}}} \Rightarrow \frac{[\mathbf{D}_0(\chi_{i+1})] + [\mathbf{D}_0(\chi_i)]}{2} \frac{\Psi(\chi_{i+1}) + \Psi(\chi_i)}{2} \quad (8.15)$$

gefunden werden. Die letzte Approximation (8.15) ist dabei vor dem Hintergrund der numerischen Integration des Ausdrucks (8.4) zu betrachten. Bei der Integration wird der Term $[\mathbf{D}_0(\chi_{i+1/2})] \rightarrow \frac{[\mathbf{D}_0(\chi_{i+1})] + [\mathbf{D}_0(\chi_i)]}{2}$ inmitten des Teilgebiets durch die benachbarten Randwerte genähert³.

8.3. Generische Transportgleichung zweiter Ordnung

Nun soll die stationäre Lösung ($\frac{\partial}{\partial t} = 0$) der generischen, semidiskreten Transportgleichung zweiter Ordnung (8.2) in den Blick genommen werden.

Hierzu ist es vorerst zweckmäßig, den Vektor

$$\mathbf{\Pi}(\chi) = \begin{pmatrix} \Psi(\chi) \\ \frac{\partial}{\partial\chi} \Psi(\chi) \end{pmatrix} \quad (8.16)$$

einzuführen, sodass sich die generische Transportgleichung (8.2) auch als

$$\frac{\partial}{\partial\chi} \mathbf{\Pi}(\chi) = \begin{pmatrix} [0] & [\text{Id}] \\ -[\mathbf{D}_2(\chi)]^{-1} [\mathbf{D}_0(\chi)] & -[\mathbf{D}_2(\chi)]^{-1} [\mathbf{D}_1(\chi)] \end{pmatrix} \cdot \mathbf{\Pi}(\chi) \quad (8.17)$$

schreiben lässt und sich die vorgestellten Konzepte des letzten Abschnitts teilweise auf das vorliegende System übertragen lassen. Ferner wird für eine kompakte Notation die Matrix $[\mathbf{\Lambda}(\chi)]$ definiert:

$$[\mathbf{\Lambda}(\chi)] = \begin{pmatrix} [0] & [\text{Id}] \\ -[\mathbf{D}_2(\chi)]^{-1} [\mathbf{D}_0(\chi)] & -[\mathbf{D}_2(\chi)]^{-1} [\mathbf{D}_1(\chi)] \end{pmatrix}. \quad (8.18)$$

Für die Entwicklung des Lösungsansatzes wird zunächst in Abschnitt 8.3.1 eine formale Lösung auf einem Teilgebiet durch Integration von (8.17) erlangt. In Abschnitt 8.3.2 wird die ermittelte,

³Der Ausdruck (8.15) entspricht somit konzeptionell der Näherung des Ausdrucks $[\mathbf{D}_0(\chi_{i+1/2})] \frac{\Psi(\chi_{i+1}) + \Psi(\chi_i)}{2}$ auf den diskreten Gitterpunkten.

analytische Teillösung durch Approximation mit einer Darstellung als Differenzenquotient verbunden. Anschließend werden die Teillösungen in Abschnitt 8.3.3 miteinander verknüpft und in einer Matrix-Vektor-Schreibweise zusammengefasst. Die Implementierung der Randbedingungen erfolgt in Abschnitt 8.3.4.

Die Darstellung stellt eine Erweiterung der Methoden in [S1, S9] dar.

8.3.1. Integration über Teilgebiete

Im Folgenden wird die modifizierte Transportgleichung (8.17) innerhalb des Teilgebiets, welches durch das Subintervall $\chi \in [\chi_i, \chi_{i+1}]$ beschrieben wird, integriert. Analog zum vorherigen Abschnitt ergibt sich die formale Lösung mithilfe eines EOs zu:

$$\mathbf{\Pi}(\chi_i + \Delta\chi) = \exp\left(\int_{\chi_i}^{\chi_i + \Delta\chi} d\chi [\mathbf{\Lambda}(\chi)]\right) \cdot \mathbf{\Pi}(\chi_i). \quad (8.19)$$

Das Integral wird dabei mit der Mittelpunktsregel approximiert. Weiterhin wird vorausgesetzt, dass die generische Verteilungsfunktion Ψ sowie deren Ableitung $\frac{\partial}{\partial\chi}\Psi$ am Übergang zwischen benachbarten Subintervallen stetig sind [28, S1, S5, S9]: $\mathbf{\Pi}(\chi_i + \Delta\chi) = \mathbf{\Pi}(\chi_{i+1})$.

Hiermit lässt sich (8.19) dann als

$$\exp\left(-[\mathbf{\Lambda}(\chi_{i+\frac{1}{2}})] \cdot \frac{\Delta\chi}{2}\right) \cdot \mathbf{\Pi}(\chi_{i+1}) = \exp\left(+[\mathbf{\Lambda}(\chi_{i+\frac{1}{2}})] \cdot \frac{\Delta\chi}{2}\right) \cdot \mathbf{\Pi}(\chi_i) \quad (8.20)$$

schreiben, wobei der Ausdruck von links mit $\exp\left(-[\mathbf{\Lambda}] \cdot \frac{\Delta\chi}{2}\right)$ multipliziert worden ist, sodass eine normerhaltende Formulierung erzielt wird [28, S9].

Für die betrachteten Quantenbauelemente ist eine Diskretisierungsweite $\Delta\chi$ im Bereich der Gitterkonstanten zur Strukturauflösung notwendig. Hierdurch nimmt das Produkt $[\mathbf{\Lambda}] \frac{\Delta\chi}{2}$ kleine Werte an, wodurch es ausreichend ist, den Exponentialoperator mithilfe der Taylorreihen-Approximation bis zum linearen Glied zu entwickeln [S9]:

$$\left\{[\text{Id}] - [\mathbf{\Lambda}(\chi_{i+\frac{1}{2}})]\right\} \cdot \mathbf{\Pi}(\chi_{i+1}) = \left\{[\text{Id}] + [\mathbf{\Lambda}(\chi_{i+\frac{1}{2}})]\right\} \cdot \mathbf{\Pi}(\chi_i). \quad (8.21)$$

Aus dem vorliegenden Propagationsalgorithmus (8.21) soll nun eine systematische Verbindung zu einer Approximation auf Basis von Differenzenquotienten erarbeitet werden, wie zuvor in Abschnitt 8.2.4.

8.3.2. Bezug zu Differenzenquotienten

Die Auswertung der ersten Zeile des Propagationsalgorithmus (8.21) liefert die Beziehung:

$$\frac{2}{\Delta\chi} (\Psi(\chi_{i+1}) - \Psi(\chi_i)) = \frac{\partial}{\partial\chi}\Psi(\chi_{i+1}) + \frac{\partial}{\partial\chi}\Psi(\chi_i). \quad (8.22)$$

Aus der zweiten Zeile folgt hingegen die Beziehung

$$\frac{\partial}{\partial \chi} \Psi(\chi_{i+1}) - \frac{\partial}{\partial \chi} \Psi(\chi_i) = -[\boldsymbol{\lambda}_1(\chi_i)] \frac{\Delta \chi}{2} \left(\frac{\partial}{\partial \chi} \Psi(\chi_{i+1}) + \frac{\partial}{\partial \chi} \Psi(\chi_i) \right) - [\boldsymbol{\lambda}_0(\chi_i)] \frac{\Delta \chi}{2} (\Psi(\chi_{i+1}) + \Psi(\chi_i)), \quad (8.23)$$

wobei vereinfachende Abkürzungen entsprechend

$$[\boldsymbol{\lambda}_1(\chi_i)] = [\mathbf{D}_2(\chi_{i+\frac{1}{2}})]^{-1} [\mathbf{D}_1(\chi_{i+\frac{1}{2}})] \quad (8.24)$$

und

$$[\boldsymbol{\lambda}_0(\chi_i)] = [\mathbf{D}_2(\chi_{i+\frac{1}{2}})]^{-1} [\mathbf{D}_0(\chi_{i+\frac{1}{2}})] \quad (8.25)$$

definiert werden.

Ziel ist es nun, alle in dieser Gleichung befindlichen Ableitungen bezüglich der generischen Verteilungsfunktion ($\frac{\partial}{\partial \chi} \Psi$) konsistent durch Terme ohne Ableitung (Ψ) zu ersetzen, die nur noch auf den Gitterpunkten definiert sind.

Hierzu wird zunächst die Beziehung (8.22) ausgenutzt. Mit dieser kann der erste Term auf der rechten Seite von (8.23) substituiert werden:

$$\frac{\partial}{\partial \chi} \Psi(\chi_{i+1}) - \frac{\partial}{\partial \chi} \Psi(\chi_i) = -[\boldsymbol{\lambda}_1(\chi_i)] (\Psi(\chi_{i+1}) - \Psi(\chi_i)) - [\boldsymbol{\lambda}_0(\chi_i)] \frac{\Delta \chi}{2} (\Psi(\chi_{i+1}) + \Psi(\chi_i)). \quad (8.26)$$

Für die Substitution des ersten Terms auf der linken Seite von (8.26) ist eine längere Rechnung auf Grundlage des Exponentialoperators notwendig, wie sie im Anhang D vorgestellt wird. Das Ergebnis entspricht einer Approximation der verbleibenden Ableitungen mit einem zentralen Differenzenquotient zweiter Ordnung [S9]:

$$\frac{\partial}{\partial \chi} \Psi(\chi_{i+1}) - \frac{\partial}{\partial \chi} \Psi(\chi_i) \approx \frac{\Psi(\chi_{i+2}) - \Psi(\chi_{i+1}) - \Psi(\chi_i) + \Psi(\chi_{i-1})}{2\Delta \chi}. \quad (8.27)$$

Durch Multiplikation von links mit $[\mathbf{D}_2(\chi_{i+\frac{1}{2}})]$ lässt sich der Ausdruck (8.26) unter Ausnutzung der Definitionen, (8.24) und (8.25), sowie der Beziehung (8.27) schließlich zu:

$$\begin{aligned} & [\mathbf{D}_2(\chi_{i+\frac{1}{2}})] \frac{\Psi(\chi_{i+2}) - \Psi(\chi_{i+1}) - \Psi(\chi_i) + \Psi(\chi_{i-1})}{2\Delta \chi^2} \\ & + [\mathbf{D}_1(\chi_{i+\frac{1}{2}})] \frac{\Psi(\chi_{i+1}) - \Psi(\chi_i)}{\Delta \chi} + [\mathbf{D}_0(\chi_{i+\frac{1}{2}})] \frac{\Psi(\chi_{i+1}) + \Psi(\chi_i)}{2} = \mathbf{0} \end{aligned} \quad (8.28)$$

bestimmen. Durch den Vergleich mit der generischen, semidiskreten Transportgleichung (8.2) ergeben sich somit die folgenden Beziehungen:

$$\begin{aligned} & [\mathbf{D}_2(\chi)] \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} \Psi(\chi) \Big|_{\chi_{i+\frac{1}{2}}} \Rightarrow [\mathbf{D}_2(\chi_{i+\frac{1}{2}})] \frac{\Psi(\chi_{i+2}) - \Psi(\chi_{i+1}) - \Psi(\chi_i) + \Psi(\chi_{i-1})}{2\Delta \chi^2} \\ & [\mathbf{D}_1(\chi)] \frac{\partial}{\partial \chi} \Psi(\chi) \Big|_{\chi_{i+\frac{1}{2}}} \Rightarrow [\mathbf{D}_1(\chi_{i+\frac{1}{2}})] \frac{\Psi(\chi_{i+1}) - \Psi(\chi_i)}{\Delta \chi} \\ & [\mathbf{D}_0(\chi)] \Psi(\chi) \Big|_{\chi_{i+\frac{1}{2}}} \Rightarrow [\mathbf{D}_0(\chi_{i+\frac{1}{2}})] \frac{\Psi(\chi_{i+1}) + \Psi(\chi_i)}{2}. \end{aligned} \quad (8.29)$$

Implementierungsaspekte Bezüglich der Evaluation der semidiskreten Operatoren $[D_2]$, $[D_1]$ und $[D_0]$ an den Abtastpunkten $\chi_{i+\frac{1}{2}}$ (Zwischengitter) sind zwei Fälle zu unterscheiden:

- Falls die Matrixelemente innerhalb der semidiskreten Operatoren keine Ableitung bezüglich der Schwerpunktkoordinate aufweisen, werden sie mithilfe bekannter Gitterpunkte ausgedrückt:

$$g(\chi) \Big|_{\chi_{i+\frac{1}{2}}} = \frac{g(\chi_{i+1}) + g(\chi_i)}{2}. \quad (8.30)$$

Formal entspricht das Ergebnis somit der Anwendung der Trapezregel bei der numerischen Integration.

- Falls die Matrixelemente der semidiskreten Operatoren jedoch eine Abhängigkeit bezüglich der Schwerpunktkoordinate aufweisen, müssen sie entsprechend

$$\frac{\partial}{\partial \chi} g(\chi) \Big|_{\chi_{i+\frac{1}{2}}} = \frac{g(\chi_{i+1}) - g(\chi_i)}{\Delta \chi} \quad (8.31)$$

über benachbarte Randwerte ausgedrückt werden. Andernfalls kann es zu folgenschweren, numerischen Artefakten kommen, die sich beispielsweise in starken Diskontinuitäten der Stromdichte an den Heteroübergängen widerspiegeln.

Zum Beispiel ist im Wigner-Formalismus für den Fall einer örtlich variierenden effektiven Masse (6.20) das Matrixelement $\frac{\partial}{\partial \chi} \tilde{m}_-(\chi, k_j - k_{j'})$ innerhalb des semidiskreten Operators $[D_1]$ auszuwerten. Mit der Vorschrift (8.31) ergibt sich die Approximation zu:

$$\frac{\partial}{\partial \chi} \tilde{m}_-(\chi, k_j - k_{j'}) \Big|_{\chi_{i+\frac{1}{2}}} = \frac{\tilde{m}_-(\chi_{i+1}, k_j - k_{j'}) - \tilde{m}_-(\chi_i, k_j - k_{j'})}{\Delta \chi}. \quad (8.32)$$

8.3.3. Assemblierung der Systemmatrix mit Neumann-Randbedingungen

Nun sollen die Teillösungen der generischen Transportgleichung zweiter Ordnung, welche durch (8.28) beschrieben werden, für die Teilgebiete ($i = 1, \dots, N_\chi - 1$) miteinander verknüpft werden und in eine Matrix-Vektor-Schreibweise überführt werden. Da an den Rändern der Teilgebiete für $i = 1, N_\chi - 1$ auf Werte außerhalb des Rechengebiets zugegriffen wird, soll die Einbindung dieser über die Neumann-Randbedingungen zunächst beleuchtet werden. Hierzu werden die folgenden Definitionen eingeführt:

$$\begin{aligned} [\alpha]_i &= \frac{[D_2(\chi_{i+\frac{1}{2}})]}{2\Delta\chi^2} \\ [\beta]_i &= -\frac{[D_2(\chi_{i+\frac{1}{2}})]}{2\Delta\chi^2} + \frac{[D_1(\chi_{i+\frac{1}{2}})]}{\Delta\chi} + \frac{[D_0(\chi_{i+\frac{1}{2}})]}{2} \\ [\gamma]_i &= -\frac{[D_2(\chi_{i+\frac{1}{2}})]}{2\Delta\chi^2} - \frac{[D_1(\chi_{i+\frac{1}{2}})]}{\Delta\chi} + \frac{[D_0(\chi_{i+\frac{1}{2}})]}{2}. \end{aligned} \quad (8.33)$$

Die generische, approximierte Transportgleichung (8.28) lässt sich damit auch als

$$[\alpha]_i \cdot \Psi(\chi_{i+2}) + [\beta]_i \cdot \Psi(\chi_{i+1}) + [\gamma]_i \cdot \Psi(\chi_i) + [\alpha]_i \cdot \Psi(\chi_{i-1}) = \mathbf{0} \quad (8.34)$$

schreiben.

Einbindung der Neumann-Randbedingungen: Bei der Analyse des ersten ($i = 1$) und des letzten ($i = N_\chi - 1$) Teilgebiets liegt jeweils ein Punkt der generischen, semidiskreten Verteilungsfunktion außerhalb des Rechengebiets.

Diese werden mithilfe der Neumann-Randbedingungen, welche in Abschnitt 5.1 definiert sind, in die Systemmatrix eingearbeitet. Für das erste Teilgebiet liegt der Vektor $\Psi(\chi_0)$ in

$$[\alpha]_1 \cdot \Psi(\chi_3) + [\beta]_1 \cdot \Psi(\chi_2) + [\gamma]_1 \cdot \Psi(\chi_1) + [\alpha]_1 \cdot \Psi(\chi_0) = \mathbf{0} \quad (8.35)$$

außerhalb des Rechengebiets. Mit der Neumann-Randbedingung gilt jedoch die Beziehung

$$\left. \frac{\partial}{\partial \chi} \Psi(\chi) \right|_{\chi_1} = 0 \Leftrightarrow \Psi(\chi_1) = \Psi(\chi_0), \quad (8.36)$$

wodurch ein Zusammenfassen der letzten beiden Terme in (8.35) möglich ist. Mit der Einführung der Matrix

$$[\Sigma]_1 = [\gamma]_1 + [\alpha]_1 \quad (8.37)$$

ergibt sich dann schließlich die Gleichung für das erste Teilgebiet zu:

$$[\alpha]_1 \cdot \Psi(\chi_3) + [\beta]_1 \cdot \Psi(\chi_2) + [\Sigma]_1 \cdot \Psi(\chi_1) = \mathbf{0}. \quad (8.38)$$

In analoger Weise wird für das letzte Teilgebiet vorgegangen. Über die Neumann-Randbedingung ist eine Verknüpfung des außerhalb des Rechengebiets liegenden Vektors $\Psi(\chi_{N_\chi+1})$ mit dem innerhalb $\Psi(\chi_{N_\chi})$ gegeben:

$$\left. \frac{\partial}{\partial \chi} \Psi(\chi) \right|_{\chi_{N_\chi}} = 0 \Leftrightarrow \Psi(\chi_{N_\chi}) = \Psi(\chi_{N_\chi+1}). \quad (8.39)$$

Im Ergebnis kann die Bestimmungsgleichung für das letzte Subintervall als

$$[\alpha]_{N_\chi-1} \cdot \Psi(\chi_{N_\chi-2}) + [\gamma]_{N_\chi-1} \cdot \Psi(\chi_{N_\chi-1}) + [\Sigma]_{N_\chi-1} \cdot \Psi(\chi_{N_\chi}) = \mathbf{0} \quad (8.40)$$

geschrieben werden, wobei die Matrix $[\Sigma]_{N_\chi-1}$ gemäß

$$[\Sigma]_{N_\chi-1} = [\beta]_{N_\chi-1} + [\alpha]_{N_\chi-1} \quad (8.41)$$

definiert ist. Bei der Auswertung der verbleibenden, inneren Teilgebiete ist keine weitere Berücksichtigung der Neumann-Randbedingungen mehr notwendig. Die Gesamtzahl von Gleichungen

für die Teilgebiete kann in einer Matrix-Vektor-Form entsprechend

$$\begin{pmatrix}
 [\Sigma]_1 & [\beta]_1 & [\alpha]_1 & & & & & & \\
 [\alpha]_2 & [\gamma]_2 & [\beta]_2 & [\alpha]_2 & & & & & \\
 & [\alpha]_3 & [\gamma]_3 & [\beta]_3 & [\alpha]_3 & & & & \\
 & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\
 & & & [\alpha]_i & [\gamma]_i & [\beta]_i & [\alpha]_i & & \\
 & & & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & & & & [\alpha]_{N_x-2} & [\gamma]_{N_x-2} & [\beta]_{N_x-2} & [\alpha]_{N_x-2} \\
 & & & & & [\alpha]_{N_x-1} & [\gamma]_{N_x-1} & [\Sigma]_{N_x-1} &
 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix}
 \Psi(\chi_1) \\
 \Psi(\chi_2) \\
 \Psi(\chi_3) \\
 \Psi(\chi_4) \\
 \Psi(\chi_5) \\
 \vdots \\
 \Psi(\chi_{i-1}) \\
 \Psi(\chi_i) \\
 \Psi(\chi_{i+1}) \\
 \Psi(\chi_{i+2}) \\
 \vdots \\
 \Psi(\chi_{N_x-3}) \\
 \Psi(\chi_{N_x-2}) \\
 \Psi(\chi_{N_x-1}) \\
 \Psi(\chi_{N_x})
 \end{pmatrix} = \mathbf{0} \quad (8.42)$$

zusammengefasst werden [S9]. Die Systemmatrix weist dabei eine nicht-quadratische Dimension von $N_\Psi(N_x - 1) \times N_\Psi N_x$ auf. Damit eine eindeutige Lösung erzielt werden kann, ist die Einbindung der Inflow-Randbedingungen notwendig.

8.3.4. Einbindung der Inflow-Randbedingungen

Die Implementierung der Inflow-Randbedingungen wird in Analogie zum vorherigen Abschnitt 8.2.3 durch die Einbettung der Blockmatrizen, [IL] und [IR], in die Systemmatrix realisiert:

$$\begin{pmatrix}
 [\text{IL}] & & & & & & & & \\
 [\Sigma]_1 & [\beta]_1 & [\alpha]_1 & & & & & & \\
 [\alpha]_2 & [\gamma]_2 & [\beta]_2 & [\alpha]_2 & & & & & \\
 & [\alpha]_3 & [\gamma]_3 & [\beta]_3 & [\alpha]_3 & & & & \\
 & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\
 & & & [\alpha]_i & [\gamma]_i & [\beta]_i & [\alpha]_i & & \\
 & & & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & & & & [\alpha]_{N_x-2} & [\gamma]_{N_x-2} & [\beta]_{N_x-2} & [\alpha]_{N_x-2} \\
 & & & & & [\alpha]_{N_x-1} & [\gamma]_{N_x-1} & [\Sigma]_{N_x-1} &
 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix}
 \Psi(\chi_1) \\
 \Psi(\chi_2) \\
 \Psi(\chi_3) \\
 \Psi(\chi_4) \\
 \Psi(\chi_5) \\
 \vdots \\
 \Psi(\chi_{i-1}) \\
 \Psi(\chi_i) \\
 \Psi(\chi_{i+1}) \\
 \Psi(\chi_{i+2}) \\
 \vdots \\
 \Psi(\chi_{N_x-3}) \\
 \Psi(\chi_{N_x-2}) \\
 \Psi(\chi_{N_x-1}) \\
 \Psi(\chi_{N_x})
 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix}
 \Psi_{\text{BC}}^{\text{L}} \\
 0 \\
 0 \\
 0 \\
 0 \\
 \vdots \\
 0 \\
 0 \\
 0 \\
 0 \\
 \vdots \\
 0 \\
 0 \\
 0 \\
 \Psi_{\text{BC}}^{\text{R}}
 \end{pmatrix} \quad (8.43)$$

Dieses Gleichungssystem wird abkürzend als $[\mathbf{S}] \hat{\Psi} = \mathbf{b}_{\text{stationär}}$ geschrieben.

Die explizite Gestalt der Blockmatrizen, $[\mathbf{IL}]$ und $[\mathbf{IR}]$ der Dimension $N_{\Psi}/2 \times N_{\Psi}$, variiert dabei je nach Anwendungsfall:

- Die Blockmatrix $[\mathbf{IL}]$ ergibt sich dabei am linken Rand für den separaten Elektronentransport zu $[\mathbf{IL}] = [[\mathbf{Id}], [0]]$, bzw. für den separaten Löchertransport zu $[\mathbf{IL}] = [[0], [\mathbf{Id}]]$. Am rechten Rand setzt sich die Blockmatrix $[\mathbf{IR}]$ für das separate Elektronen- aus $[\mathbf{IR}] = [[0], [\mathbf{Id}]]$ und für das separate Löchersystem aus $[\mathbf{IR}] = [[\mathbf{Id}], [0]]$ zusammen. Die Einheitsmatrix $[\mathbf{Id}]$ und Matrix aus Nullen $[0]$ weisen hierbei eine Dimension von $N_{\Psi}/2 \times N_{\Psi}/2$ auf.
- Unter Berücksichtigung von Bandkopplungsmechanismen im hier untersuchten Zweibandmodell ergibt sich die Blockmatrix⁴ $[\mathbf{IL}]$ am linken Rand entsprechend:

$$[\mathbf{IL}] = \begin{pmatrix} \Psi_{cc}^+ & \Psi_{cc}^- & \Psi_{cv}^+ & \Psi_{cv}^- & \Psi_{vc}^+ & \Psi_{vc}^- & \Psi_{vv}^+ & \Psi_{vv}^- \\ [\mathbf{Id}] & [0] & [0] & [0] & [0] & [0] & [0] & [0] \\ [0] & [0] & [\mathbf{Id}] & [0] & [0] & [0] & [0] & [0] \\ [0] & [0] & [0] & [0] & [\mathbf{Id}] & [0] & [0] & [0] \\ [0] & [0] & [0] & [0] & [0] & [0] & [0] & [\mathbf{Id}] \end{pmatrix}. \quad (8.44)$$

Zur besseren Übersicht und Nachvollziehbarkeit ist in der entsprechenden Zeile zusätzlich die Zuordnung hinsichtlich der Komponente der Verteilungsfunktion und deren korrespondierende Ausbreitungsrichtung angegeben.

Für den rechten Kontakt ergibt sich die Blockmatrix $[\mathbf{IR}]$ zu:

$$[\mathbf{IR}] = \begin{pmatrix} \Psi_{cc}^+ & \Psi_{cc}^- & \Psi_{cv}^+ & \Psi_{cv}^- & \Psi_{vc}^+ & \Psi_{vc}^- & \Psi_{vv}^+ & \Psi_{vv}^- \\ [0] & [\mathbf{Id}] & [0] & [0] & [0] & [0] & [0] & [0] \\ [0] & [0] & [0] & [\mathbf{Id}] & [0] & [0] & [0] & [0] \\ [0] & [0] & [0] & [0] & [0] & [\mathbf{Id}] & [0] & [0] \\ [0] & [0] & [0] & [0] & [0] & [0] & [\mathbf{Id}] & [0] \end{pmatrix}. \quad (8.45)$$

Die Einheitsmatrix $[\mathbf{Id}]$ sowie die Matrix aus Nullen $[0]$ haben eine Dimension von $N_{\Psi}/8 \times N_{\Psi}/8$ ($N_{\Psi}/2$ erfasst die eintretenden Wellen für jeweils vier Komponenten).

Unter Annahme einer konstanten effektiven Masse oder vernachlässigbaren Bandkopplungsmechanismen reduziert sich das System zu (8.11) [S9]. Diesbezüglich bereitet der konventionelle Ansatz auf Basis der Upwind-Differenzen Schwierigkeiten, da die Nebendiagonalelemente des Diffusionsoperators nicht verschwinden [22, 84].

⁴Die Anteile $\Psi_{\lambda\lambda}^{\pm}$ kennzeichnen jeweils die in χ -Richtung (+) und die entgegen (-) der χ -Richtung laufenden Wellen.

8.4. Formulierung der numerischen Stromdichte für den Wigner-Formalismus

Ausgehend von den generischen, semidiskreten Transportgleichungen erster (8.1) und zweiter Ordnung (8.2) muss ein Ausdruck für Kontinuitätsgleichung innerhalb der numerischen Ebene ermittelt werden. Hierzu wird zunächst in Analogie zum kontinuierlichen Fall (vgl. Abschnitt 3.2) über die quantisierten Wellenzahlen k_j summiert (Auswertung des kontinuierlichen Integrals). Anschließend werden die Eigenschaften der Operatoren am Punkt $\xi = 0$ ausgenutzt, sodass sich der folgende Ausdruck aus dem Vergleich mit der diskreten Kontinuitätsgleichung ergibt:

$$j_\lambda(\chi_i) = \frac{q\hbar}{m_\lambda(\chi_i)} \frac{\Delta k}{2\pi} \sum_{j=1}^{N_k} k_j \cdot f_{\lambda\lambda}(\chi_i, k_j). \quad (8.46)$$

Im Unterschied zum Upwind-Verfahren (vgl. Abschnitt 7.1.3) ergibt sich eine lokale Formulierung der Stromdichte j_λ bezüglich der Schwerpunktkoordinate. Ferner müssen für den Fall der ortsabhängigen effektiven Masse [84] keine Faltungsintegrale bezüglich der Massenterme einbezogen werden.

8.5. Vergleich zum Upwind-Verfahren

Im Vergleich zum Upwind-Verfahren zur stationären Lösung der generischen, semidiskreten Transportgleichung können wesentliche Unterschiede festgestellt werden:

- Bei der **Formulierung der Randbedingungen** werden nicht nur lokale Operatoren, sondern auch die **nichtlokalen Operatoren einbezogen**, wodurch die generische Verteilungsfunktion implizit über ihren Einfluss auf das Potenzial berücksichtigt wird. Zum Beispiel wird innerhalb des Intradbandmodells mit konstanter effektiver Masse beim Upwind-Verfahren alleine der lokale Diffusionsoperator ($[D_1]$) bei der Formulierung der Randbedingungen einbezogen, wohingegen der vorgestellte Ansatz auch den nichtlokalen Driftoperator ($[D_0(\chi)]$) berücksichtigt. Dies repräsentiert zwar noch nicht die Formulierung nichtlokaler Randbedingungen, die eine explizite Berücksichtigung erfordert, stellt aber dennoch eine physikalisch sinnvolle Erweiterung dar.
- Die Approximation beruht auf einer analytisch exakten Lösung. Die hin- und rücklaufenden Anteile der generischen Verteilungsfunktion sind inhärent miteinander verbunden, was eine adäquate **Einbindung wichtiger kohärenter Effekte** ermöglicht. Die mit dem Upwind-Verfahren verbundene Approximation ist aus physikalischer Sicht nicht gerechtfertigt [28], wie in Anhang D gezeigt wird.
- Die Berechnung der **numerischen Stromdichte** erfolgt **lokal**, was den physikalischen Gesetzmäßigkeiten entspricht.

8.6. Numerische Evaluation des Intradbandmodells

Im Folgenden sollen die vorgestellten Approximationen des vorherigen Abschnitts im Hinblick auf das Intradbandmodell beurteilt werden. Die örtliche Variation der effektiven Masse soll bei diesen Betrachtungen berücksichtigt werden. Dieser Aspekt ist insofern kritisch, als bestehende Modelle innerhalb des Wigner-Formalismus [22, 84] einerseits nicht mit der Referenzlösung aus der Schrödinger-Gleichung übereinstimmen [22], andererseits die physikalischen Effekte infolge der ortsabhängigen Variation der effektiven Masse nicht korrekt wiedergeben (z. B. Anstieg der Stromdichte im resonanten Zustand, obwohl diese deutlich absinken müsste [22]).

Hierzu wird eine RTD im AlGaAs/GaAs-Materialsystem herangezogen, wie zuvor in Abbildung 5.7 dargestellt. Die Untersuchungen sollen hierbei anhand mehrerer Punkte erfolgen:

- Für die $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ Potenzialbarrieren werden zwei unterschiedliche Legierungsanteile $x=0,2$ und $x=0,3$ herangezogen. Diese verursachen zwei unterschiedlich ausgeprägte Diskontinuitäten an den Heteroübergängen, sowohl im Potenzial als auch bei der effektiven Masse, wobei sie mit zunehmendem Legierungsanteil x ansteigen [129]. Die Struktur- und Materialparameter der zu untersuchenden Tunneldioden sind in Tabelle 8.1 gezeigt.
- Es werden sowohl der Flachbandfall als auch der selbstkonsistente Fall in den Blick genommen.
- Die Ergebnisse werden für den ortsraumbasierten Ansatz auf Grundlage der LVNG-RS als auch für den Wigner-Formalismus beleuchtet und mit einer Referenzlösung verglichen, die mithilfe der QTBM [7, 8] bestimmt wird.

Schichtnummer	1	2	3	4	5	6	7
Weite in nm	30	10	3	4	3	10	30
Dotierung in 10^{18}cm^{-3}	2	0	0	0	0	0	2
Parameter für den Legierungsanteil $x=0,2$:							
Potenzial in eV	1,424	1,424	1,6034	1,424	1,6034	1,424	1,424
Effektive Masse in m_0	0,063	0,063	0,0796	0,063	0,0796	0,063	0,063
Relative Permittivität ε_r in ε_0	12,9	12,9	12,33	12,9	12,33	12,9	12,9
Parameter für den Legierungsanteil $x=0,3$:							
Potenzial in eV	1,424	1,424	1,7013	1,424	1,7013	1,424	1,424
Effektive Masse in m_0	0,063	0,063	0,088	0,063	0,088	0,063	0,063
Relative Permittivität ε_r in ε_0	12,9	12,9	12,05	12,9	12,05	12,9	12,9

Tabelle 8.1. Struktur- und Materialparameter der $\text{Al}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As}$ -GaAs-RTD (orangefarben hinterlegte Parameter) sowie der $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ -GaAs-RTD (blau hinterlegte Parameter).

Die Schwerpunktkoordinate wird für die nachfolgenden Untersuchungen mit $N_\chi = 360$ äquidistanten Abtastpunkten bei einer Diskretisierungsweite von $\Delta\chi = 0,25\text{nm}$ diskretisiert (vgl. Abbildung 6.1). Hinsichtlich der selbstkonsistenten Lösung des Quantentransports wird die Poisson-Gleichung mit dem Newton-Raphson-Verfahren gelöst. Dabei wird das selbstkonsistente Abbruchkriterium zu $\|\delta\mathbf{U}^s\| \leq 5 \cdot 10^{-2}$ definiert, wie in zuvor Abschnitt 4.3 beschrieben.

Kleinere implementierte Werte haben dabei nur unwesentliche Auswirkungen auf die Ergebnisse, verursachen jedoch einen enormen Anstieg der Rechenzeit. Die Temperatur des Bauelements beträgt $T = 300\text{K}$ und die Parameter der absorbierenden Schicht nehmen die folgenden Werte an: Amplitude $b_{\text{al}} = 4\text{eV}$, Monomgrad $n_{\text{al}} = 4$ und Weite $w_{\text{al}} = 0,35 \cdot L_{\xi}$, wobei Letztere bei den Simulationsparametern der jeweiligen Untersuchung definiert wird.

Bei den Untersuchungen soll zunächst in Abschnitt 8.6.1 auf den ortsraumbasierten Formalismus auf Grundlage der LVNG-RS eingegangen werden. Anschließend erfolgt die Betrachtung des Wigner-Formalismus in Abschnitt 8.6.2.

8.6.1. Analyse auf Basis des Dichtematrix-Formalismus

Das Simulationsgebiet wird innerhalb des Intervalls $[-75\text{nm}, 75\text{nm}]$ bezüglich der Relativkoordinate in $N_{\xi} = 401$ Gitterzellen unterteilt und in eine Basis, bestehend aus $N = 80$ ebenen Wellen, entwickelt, sodass die Inflow-Randbedingungen implementiert werden können (vgl. Abschnitt 6.2). Im Folgenden wird zuerst auf die Evaluation der Elektronendichte n eingegangen und im Anschluss auf die Stromdichte j .

Vergleich der Elektronendichten für die $\text{Al}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As}$ -Barrieren: Die selbstkonsistenten Elektronendichten n innerhalb der RTD mit einem Legierungsanteil von $x=0,2$ sind in Abhängigkeit der Schwerpunktkoordinate χ für verschiedene angelegte Spannungen U in Abbildung 8.1 dargestellt. Die Ladungsträgerdichten, die sich im thermodynamischen Gleichgewicht einstellen, sind dabei in Abbildung 8.1a dargestellt. Wie aus dieser Abbildung zu erkennen ist, wird eine hervorragende Übereinstimmung der Elektronendichte aus der LVNG-RS (orangefarbene Linie) mit der Referenz-Elektronendichte aus der QTBM (schwarze Punkte) erzielt. Das gesamte Potenzial V der Struktur ist zusätzlich als schwarze Linie eingezeichnet. Für den nächsten zu untersuchenden Fall wird eine Spannung von $U = 0,3\text{V}$ an der RTD angelegt. Diese Bauelementoperation entspricht dem resonanten Zustand der RTD, wie bei den nachfolgenden Untersuchungen zur I-V-Kennlinie noch gezeigt wird. Die korrespondierenden Elektronendichten aus der LVNG-RS und der QTBM werden in Abbildung 8.1b gezeigt und können qualitativ nicht voneinander unterschieden werden. Aufgrund des resonanten Zustands nimmt die Elektronendichte große Werte innerhalb der Doppelbarrierenstruktur an. Nun soll der antiresonante Zustand der RTD beleuchtet werden. Dieser stellt sich bei einer angelegten Spannung von $U = 0,4\text{V}$ ein, wie nachfolgend bei der Auswertung der I-V-Kennlinie gezeigt wird. Die Elektronendichten aus der LVNG-RS stimmen mit denen aus der QTBM überein, wie aus der Abbildung 8.1c zu erkennen ist. Auch bei einer weiteren Erhöhung der angelegten Spannung, bis auf den Wert von $U = 0,8\text{V}$, kann keine qualitative Abweichung der Elektronendichte aus der LVNG-RS von der aus der QTBM festgestellt werden, welche gemeinsam in Abbildung 8.1d gezeigt werden.

Vergleich der Elektronendichte für die $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ -Barrieren: Da der vorgestellte Formalismus maßgeblich von der Diskontinuität der effektiven Masse am Heteroübergang abhängt, wird im Folgenden ein höherer Legierungsanteil innerhalb der Barrieren analysiert. Der größere Legierungsanteil führt sowohl zu einem größeren Kontrast innerhalb des Leitungsbandpotenzials als auch innerhalb der effektiven Masse [129]. Es ist bekannt, dass die Lösung der Transportglei-

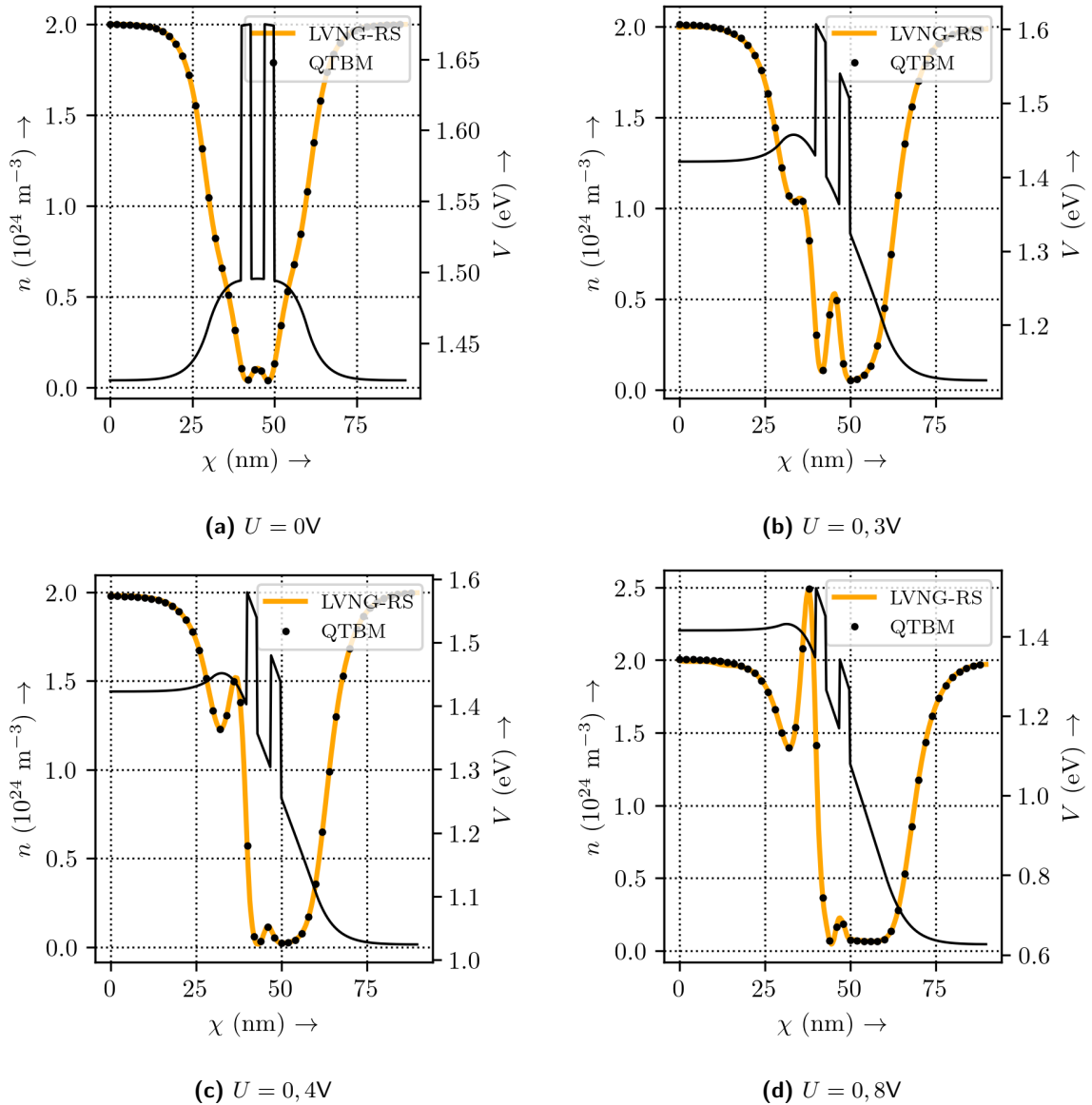


Abbildung 8.1. Selbstkonsistente Elektronendichte n aus der LVNG-RS (orangefarbene Linie) in Abhängigkeit der Schwerpunktkoordinate χ für verschiedene Spannungen im Vergleich zur QTBM (schwarze Punkte). Die schwarze Linie zeigt das gesamte Potenzial V der $\text{Al}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As}$ -RTD. In (a) beträgt die angelegte Spannung $U = 0\text{V}$, in (b) $U = 0,3\text{V}$, in (c) $U = 0,4\text{V}$ und in (d) $U = 0,8\text{V}$.

chungen bereits im Fall der konstanten effektiven Masse äußerst sensitiv bezüglich der Größe der Leitungsbanddiskontinuität ist⁵.

Im hier betrachteten Umfeld muss zusätzlich noch der Anteil berücksichtigt werden, welcher durch die örtliche Variation der effektiven Masse hervorgerufen wird. Exemplarisch wird die

⁵In der numerischen Mathematik dient als Maß für quantitative Aussage zur Sensitivität eines Problems die sogenannte Kondition.

Kondition κ für die beiden Systemmatrizen aus

$$\kappa([\mathbf{A}]) = \|\mathbf{A}\| \cdot \|\mathbf{A}^{-1}\| \quad (8.47)$$

bestimmt. Die Berechnungen erfolgen dabei für den Flachbandfall im thermodynamischen Gleichgewicht. Für den Legierungsanteil von $x=0,2$ ergibt sich $\kappa = 7,819 \cdot 10^9$, beziehungsweise $\kappa = 8,2327 \cdot 10^9$ für den von $x=0,3$. Die größere Kondition für den Legierungsanteil von $x=0,3$ lässt den Rückschluss zu, dass das System mit steigendem Legierungsanteil und daher mit steigender Diskontinuität sensitiver bezüglich der numerischen Lösung wird.

Die selbstkonsistente Elektronendichte n ist innerhalb der Abbildung 8.2 in Abhängigkeit der Schwerpunktkoordinate χ für verschiedene Spannungen U dargestellt. Darüber hinaus wird das gesamte Potenzial V als schwarze Linie gezeigt. Für das thermodynamische Gleichgewicht ist die Elektronendichte in Abbildung 8.2a dargestellt. Hierbei stimmen die Elektronendichte aus der LVNG-RS (orangefarbene Linie) und der QTBM (schwarze Punkte) überein. Nun soll der resonante Zustand der Bauelementoperation untersucht werden. Dieser stellt sich bei einer angelegten Spannung von $U = 0,34\text{V}$ ein, wie im nachfolgenden Abschnitt erläutert wird. Die zugehörigen Elektronendichten sind in Abbildung 8.2b eingezeichnet und die beiden Lösungen aus LVNG-RS und QTBM stimmen überein. Infolge des resonanten Zustands kommt es zu einer starken Akkumulation von Elektronen innerhalb der Doppelbarrierenstruktur. Dabei entspricht die stärkere Besetzung im Vergleich zum Fall mit $x=0,2$ einem niedrigeren Stromfluss, da die höheren Werte des Potenzials sowie der höheren effektiven Masse innerhalb der Barrieren eine stärkere Einsperrung der Elektronen verursachen, wie nachfolgend gezeigt wird. Der nächste interessante Spannungspunkt stellt sich in der antiresonanten Bauelementoperation ein. Hierzu wird eine Spannung von $U = 0,42\text{V}$ an die RTD angelegt. Referenzlösung und die Ergebnisse, die aus dem vorgestellten Ansatz bestimmt werden, können qualitativ nicht unterschieden werden, wie in Abbildung 8.2c zu sehen ist. Die Elektronendichte ist entsprechend dem Arbeitspunkt gering innerhalb der Doppelbarrierenstruktur. Mit steigender Spannung bis hin zum Wert $U = 0,8\text{V}$ ist die Elektronendichte äußerst gering im Bereich der Doppelbarrierenstruktur und wird drainseitig zunehmend ausgeräumt ($\chi \geq 50\text{nm}$), wie in Abbildung 8.2d zu erkennen ist. Die Elektronendichte stimmt dabei mit der Referenzlösung aus der QTBM in einem hohen Maße überein.

Vergleich der I-V-Kennlinien: Im Folgenden sollen nun die I-V-Kennlinien für die beiden verschiedenen Strukturen untersucht werden.

Hierzu wird zunächst der Flachbandfall in den Blick genommen. Bei dieser Simulation werden die Bandverbiegungen aufgrund der Ladungsträgerwechselwirkungsmechanismen vernachlässigt. Der Spannungsabfall erfolgt hierbei linear zwischen Schicht 2 und 6, also im Bereich von 30nm bis 60nm (vgl. Tabelle 8.1). Die entsprechenden Stromdichten j sind in Abhängigkeit der angelegten Spannung U in Abbildung 8.3a gezeigt. Wie aus dieser Abbildung ersichtlich ist, stimmen die Werte der Stromdichte j aus der LVNG-RS prinzipiell mit denen aus der QTBM überein. Für den höheren Legierungsanteil $x=0,3$ können geringe Abweichungen im ohmschen Anstiegsbereiches zwischen $U = 0,15 - 0,18\text{V}$ festgestellt werden. Weiterhin kommt es bei beiden Legierungsanteilen zu zunehmenden, aber geringen Abweichungen bei steigenden Spannungen ab ungefähr $U = 0,4\text{V}$. Bei dem kleineren Legierungsanteil ($x=0,2$) kommt es infolge der kleineren effektiven Masse sowie geringerer Diskontinuität des Potenzials zu einem größeren

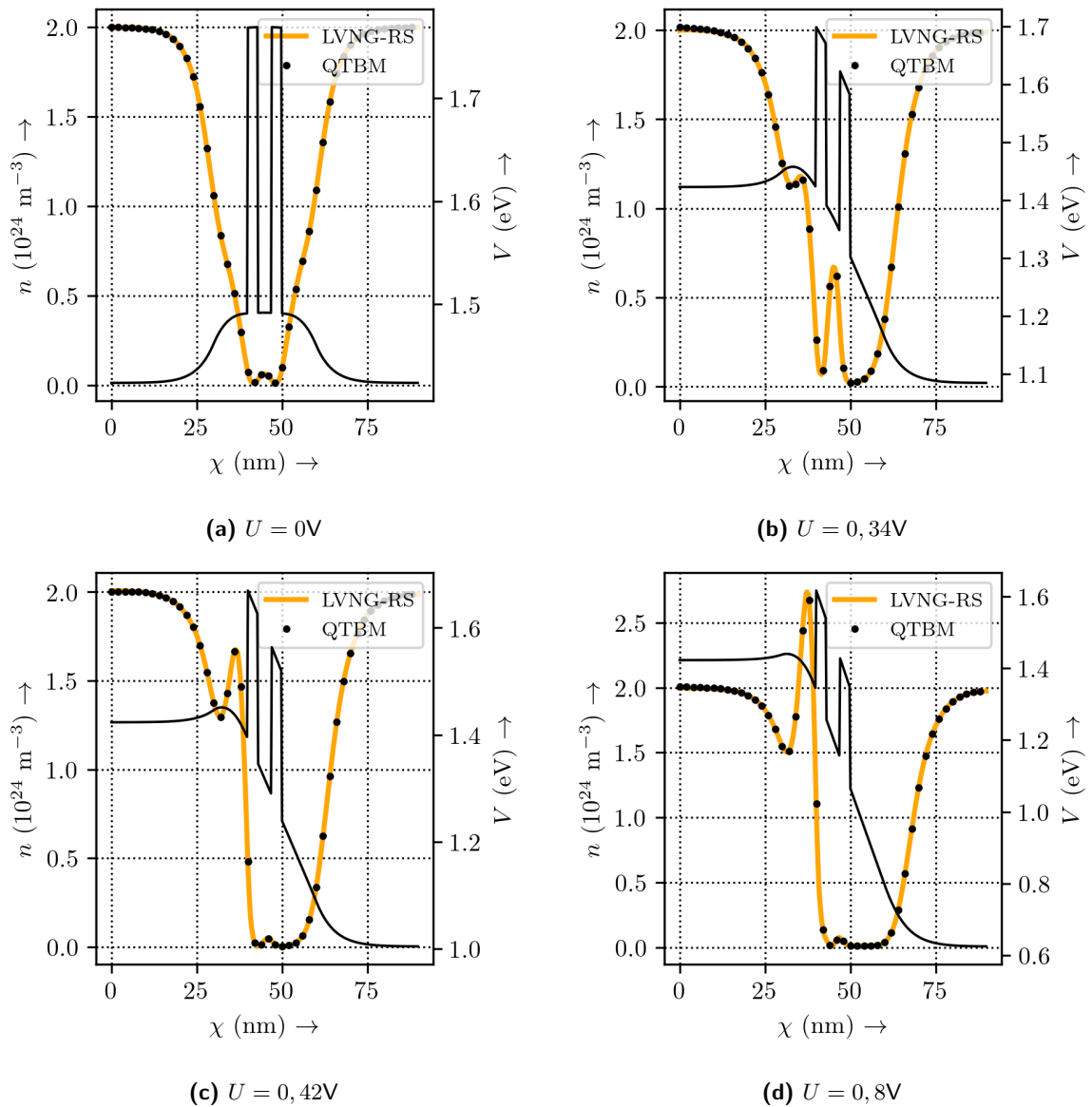


Abbildung 8.2. Selbstkonsistente Elektronendichte n aus der LVNG-RS (orangefarbene Linie) in Abhängigkeit der Schwerpunktkoordinate χ für verschiedene Spannungen im Vergleich zur QTBM (schwarze Punkte). Die schwarze Linie zeigt das gesamte Potenzial V der $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ -RTD. In (a) beträgt die angelegte Spannung $U = 0\text{V}$, in (b) $U = 0,34\text{V}$, in (c) $U = 0,42\text{V}$ und in (d) $U = 0,8\text{V}$.

Stromfluss. Zusätzlich ist in Abbildung 8.3a die I-V-Kennlinie unter Annahme einer konstanten effektiven Masse in der Struktur dargestellt (gestrichelten Linien: LVNG-RS (blau) und QTBM (schwarz) stimmen hervorragend überein). Einerseits ist im Vergleich zu den bekannten Modellen [22, 84] festzuhalten, dass die Stromdichte j bei zunehmender effektiver Masse in der resonanten Bauelementoperation ab- und nicht fälschlicherweise zunimmt, wie in [22]. Andererseits zeigt sich aus den hier erzielten Ergebnissen auch, dass die in der Literatur vorliegenden Untersuchungen und getroffenen Aussagen zu Bauelementen auf Basis von Heterostrukturen

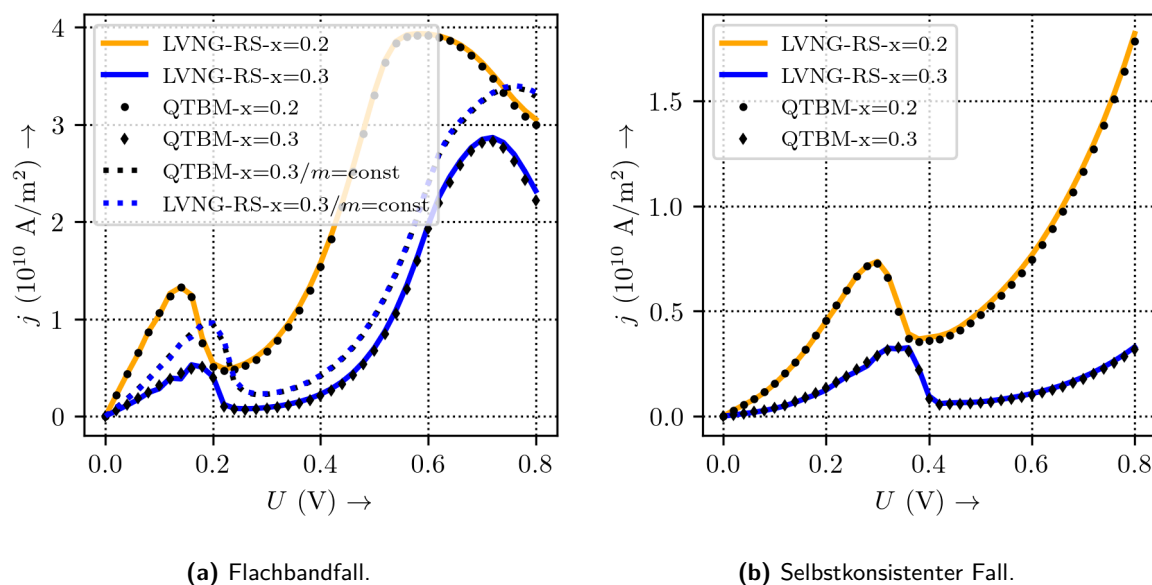


Abbildung 8.3. I-V-Kennlinien im Vergleich. Die orangefarbene Linie zeigt die Werte der Stromdichte j aus dem vorgestellten Verfahren auf Basis der LVNG-RS für einen Legierungsanteil von $x=0,2$ und die blaue Linie die für $x=0,3$. Die Referenzwerte aus der QTBM sind als schwarze Punkte für $x=0,2$ und als schwarze Rauten für $x=0,3$ dargestellt. In (a) ist der Flachbandfall zu sehen. Zusätzlich sind die Lösungen als gestrichelte Linien eingezeichnet, die sich unter Annahme einer konstanten effektiven Masse einstellen (schwarz entspricht der QTBM und blau der LVNG-RS). In (b) sind Stromdichten j in Abhängigkeit der Spannung U für den selbstkonsistenten Fall dargestellt.

unter der dort getroffenen Annahme einer konstanten effektiven Masse, z. B. [83, 130], sehr starken Einschränkungen unterliegen können, da die Kennlinien sich sehr stark infolge der Berücksichtigung der örtlichen Variation der effektiven Masse unterscheiden. Dies betrifft sowohl die Lage der Spannung der resonanten als auch antiresonanten Bauelementoperation sowie die maximale Stromdichte vor dem NDR, die hier ungefähr doppelt so groß ist, wenn die effektive Masse als örtlich konstant angenommen wird [S9].

Nun soll der selbstkonsistente Fall in Blick genommen werden. Die korrespondierenden I-V-Kennlinien sind in Abbildung 8.3b dargestellt. Wie aus dieser Abbildung zu erkennen ist, wird eine gute Übereinstimmung mit den Werten aus der QTBM für beide Legierungsanteile erzielt. Nach der resonanten Bauelementoperation liegen die Werte des vorgestellten Ansatzes jedoch minimal unterhalb denen der Referenzlösung. Im Vergleich zum Flachbandfall aus Abbildung 8.3a werden die Spannungen der resonanten Bauelementoperation zu deutlich höheren Spannungen verschoben. Dies liegt daran, dass sich durch die Ladungsträgerwechselwirkungsmechanismen zusammen mit dem Dotierungsprofil eine Diffusionsbarriere (vgl. Bandverbiegung in Abbildung 8.2a) im Bereich der Doppelbarrierenstruktur ausbildet, welche die Energie des resonanten Niveaus der Struktur verschiebt. Hierdurch liegt der Bereich des zweiten negativen differentiellen Widerstands, der in Abbildung 8.3a festgestellt werden kann, im selbstkonsistenten Fall außerhalb des betrachteten Spannungsbereichs.

Fazit: Insgesamt werden mit dem vorgestellten Ansatz zur Lösung der LVNG-RS hervorragende Ergebnisse unter Einbindung der örtlichen Variation der effektiven Masse erzielt, die nur in einem sehr geringen Maße von der Referenzlösung auf Grundlage der QTBM abweichen. Die genannten Probleme der etablierten Ansätze [22, 84] werden vermieden, wie z. B. der unphysikalische Anstieg der Stromdichte j sowie die schlechte Übereinstimmung mit Referenzlösungen. Der vorgestellte Ansatz eignet sich daher für eine allgemeine Untersuchung von Heterostrukturen und ist prädestiniert für einen nun gerechtfertigten Einsatz im transienten Regime.

8.6.2. Analyse auf Basis des Wigner-Formalismus

Das Rechengebiet wird bezüglich der Wellenzahl k in einem Intervall von $[-3\text{nm}^{-1}, 3\text{nm}^{-1}]$ mit $N_k = 300$ Punkten quantisiert. Der betrachtete Ausschnitt entspricht hierbei einer Länge von ca. $L_\xi \approx 313\text{nm}$ bezüglich der Relativkoordinate ξ . Das Verfahren wird für den Wigner-Formalismus in [S9] präsentiert, analysiert und anhand der Simulation einer RTD für verschiedene Legierungsanteile demonstriert und durch Vergleich mit dem NEGF-Formalismus validiert. Der Vergleich mit den Referenzverfahren beschränkt sich dabei jedoch im Wesentlichen auf den Flachbandfall. Dementsprechend soll im Folgenden der Fokus auf die selbstkonsistenten Untersuchungen gelegt werden. Zusätzlich erfolgt die Evaluation der Ladungsträgerdichten nur für den bereits herausgearbeiteten anspruchsvolleren Legierungsanteil $x=0,3$.

Vergleich der Elektronendichten für die $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ -Barrieren: Die selbstkonsistenten Elektronendichten n (orangefarbene Linien) sind in Abhängigkeit der Schwerpunktkoordinate χ für verschiedene angelegte Spannungen in Abbildung 8.4 zusammen mit der entsprechenden Referenzlösung aus der QTBM (schwarze Punkte) und dem Potenzial V (schwarze Linie) dargestellt. In Abbildung 8.4a sind die Ladungsträgerdichten für den Fall des thermodynamischen Gleichgewichts gezeigt. Es ist zu erkennen, dass die Lösung aus der WTG im Bereich der Doppelbarrierenstruktur Werte leicht oberhalb der Referenzlösung aus der QTBM annimmt. Für die resonante Bauelementoperation bei einer angelegten Spannung von $U = 0,34\text{V}$ stimmen die Elektronendichten aus WTG sowie QTBM qualitativ überein, wie aus Abbildung 8.4b zu erkennen ist. Kleine Abweichungen liegen im drainseitigen Bereich vor ($\chi \approx 50\text{nm}$). Die Werte aus der WTG liegen leicht über denen der QTBM. Im antiresonanten Zustand, welcher in Abbildung 8.4c dargestellt ist, kommt es hingegen zu Abweichungen der beiden Lösungen innerhalb der Doppelbarrierenstruktur. Hier liegen die Werte aus der WTG unter denen der QTBM. In Abbildung 8.4d werden die Elektronendichten aus der WTG mit der Elektronendichte aus der QTBM für eine Spannung von $U = 0,8\text{V}$ gemeinsam dargestellt. Qualitativ können die beiden Elektronendichten nicht voneinander unterschieden werden. Eine Diskussion dieser Abweichungen erfolgt zusammen mit der Diskussion der I-V-Kennlinien im nächsten Abschnitt.

Vergleich der I-V-Kennlinien: Die aus der WTG und QTBM berechneten Stromdichten j sind in Abhängigkeit der angelegten Spannung U in den Abbildungen 8.5a für den Flachbandfall und in 8.5b für den selbstkonsistenten Fall dargestellt. Hierbei werden beide Legierungsanteile, $x=0,2$ und $x=0,3$, einbezogen. Für angelegte Spannungen bis ca. $0,5\text{V}$ wird eine Übereinstimmung für den Legierungsanteil von $x=0,2$ erzielt. Jedoch liegt der Wert der Peakstromdichte aus dem Wigner-Formalismus leicht oberhalb des Werts aus der QTBM. Für angelegte Spannungen, die größer sind als $0,5\text{V}$, passt der Kurvenverlauf im Bereich des zweiten negativen

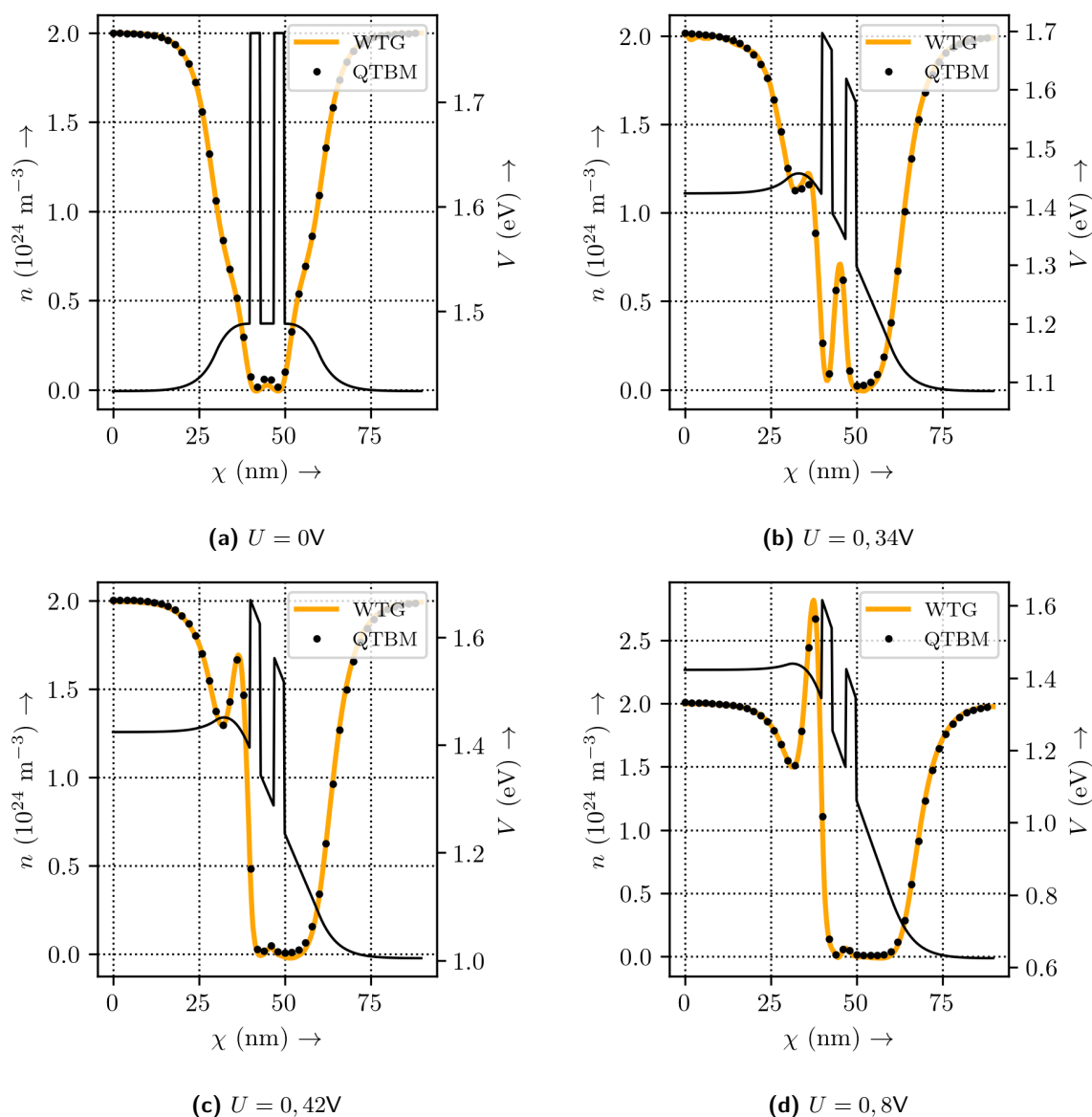


Abbildung 8.4. Selbstkonsistente Elektronendichte n aus der WTG (orangefarbene Linie) in Abhängigkeit der Schwerpunktkoordinate χ für verschiedene Spannungen im Vergleich zur QTBM (schwarze Punkte). Die schwarze Linie zeigt das gesamte Potenzial V der $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ -RTD. In (a) beträgt die angelegte Spannung $U = 0V$, in (b) $U = 0,34V$, in (c) $U = 0,42V$ und in (d) $U = 0,8V$.

differentiellen Widerstands zwar noch qualitativ, quantitativ weicht dieser jedoch sichtlich von der Referenzlösung ab. Bei einem Legierungsanteil von $x=0,3$ kann keine Übereinstimmung mehr ab ca. $0,65V$ im Bereich des zweiten negativen differentiellen Widerstands aus Abbildung 8.5a festgestellt werden.

Für die I-V-Kennlinien aus der selbstkonsistenten Lösung der Transportgleichung, welche in Abbildung 8.5b gezeigt sind, schneidet der numerisch weniger fordernde Fall des kleineren Legierungsanteils von $x=0,2$ wesentlich besser ab. Während für Letzteren noch eine Übereinstim-

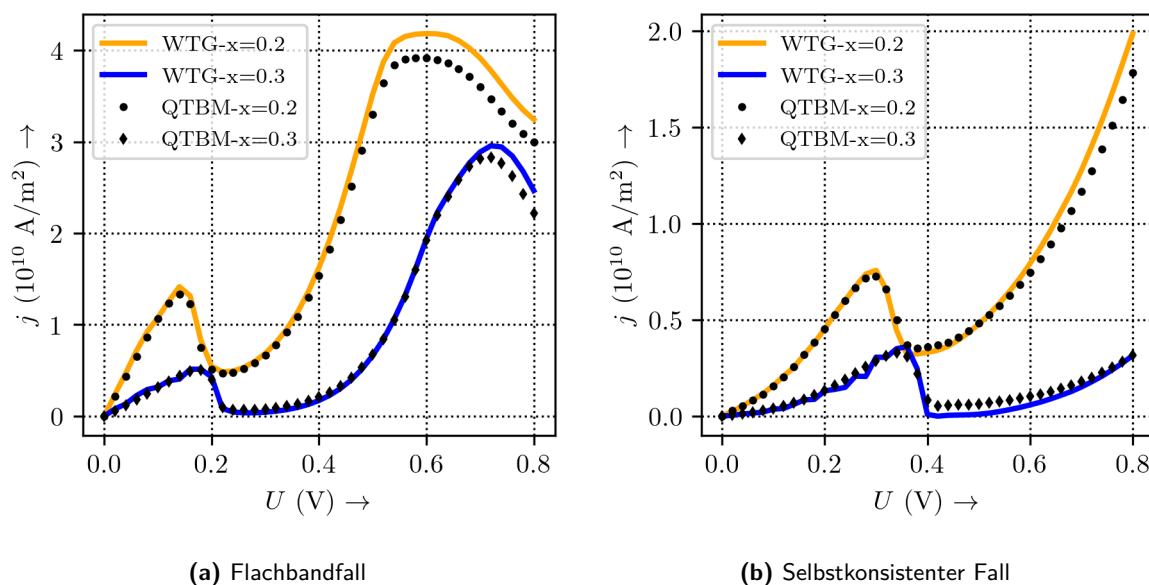


Abbildung 8.5. I-V-Kennlinien im Vergleich. Die orangefarbene Linie stellt die Werte der Stromdichte j aus der WTG für einen Legierungsanteil von $x=0,2$ und die blaue Linie für $x=0,3$ dar. Die Referenzwerte aus der QTBM sind als schwarze Punkte für $x=0,2$, bzw. schwarze Rauten für $x=0,3$ eingezeichnet. In (a) ist der Flachbandfall dargestellt und in (b) der selbstkonsistente Fall.

mung bis ca. $0,65\text{V}$ erzielt wird, weicht die Stromdichte für einen Legierungsanteil von $x=0,3$ aus der WTG bereits im ohmschen Bereich vor dem NDR-Bereich von der Referenzlösung aus der QTBM ab. Darüber hinaus wird für $x=0,3$ eine wesentlich kleinere Stromdichte j im antiresonanten Zustand berechnet als für Referenzlösung aus der QTBM.

Diskussion und Fazit: Bei den Untersuchungen zum Wigner-Formalismus sind Abweichungen zur Referenzlösung im Bereich kleiner Spannungen für die Elektronendichte n (vgl. Abbildung 8.4) und im Bereich höherer Spannungen für die Stromdichte j (vgl. Abbildung 8.5) festzustellen. Zur Diskussion dieser Ergebnisse soll die Wigner-Funktion für die resonanten Zustände bei der Bauelementoperation herangezogen werden, wobei den Berechnungen ein Legierungsanteil von $x=0,2$ im Flachband zugrunde liegt. Der erste resonante Zustand der RTD wird bei einer Spannung von $U = 0,14\text{V}$ erreicht und ist in Abbildung 8.6a dargestellt, während der zweite bei $U = 0,6\text{V}$ vorliegt und in Abbildung 8.6b zu sehen ist. Insbesondere für den Letzteren kommt es neben dem hoch oszillierenden Anteil im Gebiet $[40\text{nm}, 60\text{nm}] \times [0,3\text{nm}^{-1}, 0,6\text{nm}^{-1}]$, welcher dem quantenmechanischen Tunnelprozess zuzuordnen ist, zu einem gewichtigen Anteil bei $k = 1\text{nm}^{-1}$ für $(\chi \geq 65\text{nm})$ innerhalb der Wigner-Funktion. Dieser entspricht dem Feldstrom infolge des starken Nichtgleichgewichts durch die angelegte Spannung von $U = 0,6\text{V}$. Da die Stromdichte j als Moment erster Ordnung der Wigner-Funktion sensitiver gegenüber Anteilen bei größeren Wellenzahlen ist und diese vor allem im Nichtgleichgewicht vorzufinden sind, können größere Spannungen zu größeren Approximationsfehlern führen. Auch der hoch oszillierende Anteil erlangt dabei eine Bedeutung. Für die Ladungsträgerdichte, welche als Moment nullter Ordnung aus der Wigner-Funktion berechnet wird, sind die hoch oszillierenden Anteile weniger gewichtig und das Verhalten entsprechend dem Feldstrom überwiegt bei der Berechnung, wo-

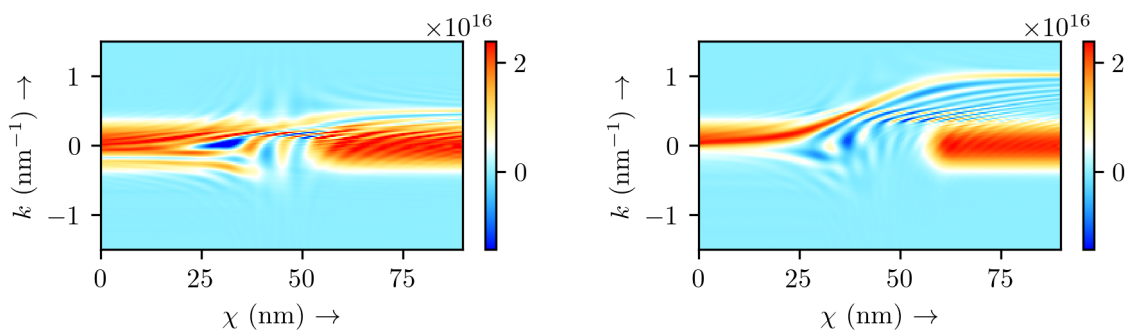
(a) Erster resonanter Zustand $U = 0,14\text{V}$.(b) Zweiter resonanter Zustand $U = 0,6\text{V}$.

Abbildung 8.6. Wigner-Funktionen $f(\chi, k)$ für den Flachbandfall für zwei Spannungen im Vergleich. In (a) ist die Wigner-Funktion des ersten resonanten Zustands der Bauelementoperation für $U = 0,14\text{V}$ dargestellt. In (b) wird die Wigner-Funktion des zweiten resonanten Zustands der Bauelementoperation gezeigt.

durch es insgesamt zu geringen Abweichungen kommt. Für den ersten resonanten Zustand der RTD kommt es innerhalb der Wigner-Funktion im Gebiet $[40\text{nm}, 60\text{nm}] \times [0.1\text{nm}^{-1}, 0.25\text{nm}^{-1}]$ zu einem hoch oszillierenden Anteil mit hoher Amplitude infolge des Tunnelprozesses. Aufgrund der hohen Amplitude ist die Ladungsträgerdichte sehr sensitiv gegenüber der Approximation dieses Gebiets. Für die Stromdichte nimmt ihre Wichtigkeit wegen der zusätzlichen Gewichtungen der kleinen Wellenzahlen, bei denen der Transport stattfindet, ab.

Trotz dieser Abweichungen ist der vorgestellte Ansatz auch erfolgreich im Hinblick auf den Wigner-Formalismus anzuwenden, insbesondere vor dem Hintergrund der zuvor genannten Probleme etablierter Ansätze [22, 84].

Bei einer feineren Diskretisierung der Wellenzahl bis hin zu $N_k = 800$ Punkten, konnte eine Verringerung der Abweichung erzielt werden. Die damit verbundenen Rechenzeiten sind jedoch für realistische Anwendungen nicht praktikabel. Im Vergleich zum präsentierten Ansatz auf Grundlage der LVNG-RS konnten mit $N = 80$ Basisfunktionen insgesamt akkurate Ergebnisse erzielt werden, die im Wigner-Formalismus selbst nicht mit einer Anzahl von $N_k = 800$ erreicht werden. Da die Algorithmen im Grundsatz, bis auf die Besetzung weniger Teilmatrizen, gleich ablaufen, kommt es für den Ansatz auf Grundlage der LVNG-RS somit aufgrund der geringeren Anzahl an benötigten Basisfunktionen zu erheblichen Vorteilen im Hinblick auf die Rechenzeit. Mit der Lösung im Unterraum wird somit für den hier betrachteten Fall keine Genauigkeit im Ortsraum eingebüßt. Für die präsentierten Ergebnisse ($N = 80$ und $N_k = 300$) ist die gesamte Rechenzeit ungefähr einen Faktor drei kleiner als für den Wigner-Formalismus.

8.7. Numerische Evaluation der Bandkopplungsmechanismen

Nun sollen mit dem entwickelten Formalismus Bandkopplungsmechanismen in Blick genommen werden. Hierzu wird der Wigner-Formalismus untersucht, für den in der Literatur zwar schon einige Untersuchungen vorliegen, z. B. Klein-Tunneleffekt (in Graphen) [75] oder Zener-Tunneleffekt [72, 73], aber entweder eine Näherung der numerisch anspruchsvollen Driftope-

ratoren durch Entwicklung bis zum linearen Term in \hbar vorgenommen wird [73, 75] oder aber die elektrischen Eigenschaften nicht betrachtet werden. Ergebnisse in Form einer I-V-Kennlinie für eine RITD auf Grundlage des Wigner-Formalismus lagen in der Literatur nicht vor und sind erstmals in den eigenen Arbeiten [S1] untersucht worden. Diese sollen im Folgenden kurz diskutiert werden.

Für die Simulation orientieren sich die Struktur- und Materialparameter an den bereits untersuchten Modellen aus [50, 72, 73] und sind in Tabelle 8.2 dargestellt. Diese Parameter sind bereits für die Untersuchung in [S1] herangezogen worden.

Schichtnummer	1	2	3	4	5	6	7
Weite in nm	30	15	3	5	3	15	30
Dotierung in 10^{18}cm^{-3}	1,2	0	0	0	0	0	1,2
Leitungsbandpotenzial in eV	0,2	0,2	0,31	0,71	0,31	0,2	0,2
Valenzbandpotenzial in eV	0	0	0,11	0,51	0,11	0	0
Effektive Masse in m_0	0,027	0,027	0,027	0,027	0,027	0,027	0,027

Tabelle 8.2. Struktur- und Materialparameter der RITD [S1].

Im Phasenraum wird ein Rechengebiet $[0\text{nm}, 101\text{nm}] \times [-1, 5\text{nm}^{-1}, 1, 5\text{nm}^{-1}]$ für die numerischen Untersuchungen vorausgesetzt. In dem Gebiet werden $N_k = 100$ quantisierte Wellenzahlen betrachtet und die Diskretisierungsweite der Schwerpunktkoordinate wird zu $\Delta\chi = 0, 25\text{nm}$ gesetzt. Die Parameter für die absorbierende Schicht⁶ sind entsprechend $b_{\text{al}} = 4\text{eV}$, $n_{\text{al}} = 4$ und $w_{\text{al}} = 0, 35 \cdot L_\xi$ definiert. Die Umgebungstemperatur wird zu $T = 300\text{K}$ gesetzt. Die WTG wird entsprechend (6.24) mit der vorgestellten Methode aus Abschnitt 8.3 gelöst.

8.7.1. Vorüberlegungen

Das entsprechende Leitungs- V_c und Valenzbandpotenzial V_v der RITD im thermodynamischen Gleichgewicht sind in Abhängigkeit der Schichtrichtung χ in Abbildung 8.7 dargestellt. Zusätzlich ist in dieser Abbildung der gebundene Zustand $\phi_b(\chi)$ des Valenzbands als orangefarbene Linie schematisch eingezeichnet. Dieser wird aus dem Eigenwertproblem der Schrödingergleichung ermittelt und der korrespondierende Energieeigenwert beträgt $E_b = 0, 34\text{eV}$. Innerhalb der RITD fungiert dieser gebundene Zustand des Valenzbands als resonanter Zustand, welcher den Zener-Tunnelprozess durch die Barrierenstruktur bei einer angelegten Spannung ermöglicht [73]. Aufgrund der Lage des Energieeigenwerts kann angenommen werden, dass der Zener-Tunnelprozess für eine angelegte Spannung im Bereich von ungefähr $U = 0, 13\text{V}$ sein Maximum annimmt. Dies soll im Folgenden überprüft werden.

8.7.2. Evaluierung der Ladungsträger- und Stromdichten

In Abbildung 8.8a sind die Stromdichten j der RITD für den Fall mit $P = 5\text{nm}^{-1}$ und ohne Bandkopplungsmechanismen $P = 0\text{nm}^{-1}$ in Abhängigkeit der angelegten Spannung U darge-

⁶Auch im Multiband-Regime ergeben sich ansonsten unphysikalische Interferenzterme infolge der Vernachlässigung der Oberflächenterme, wie zuvor in Abschnitt 5.2 erläutert.

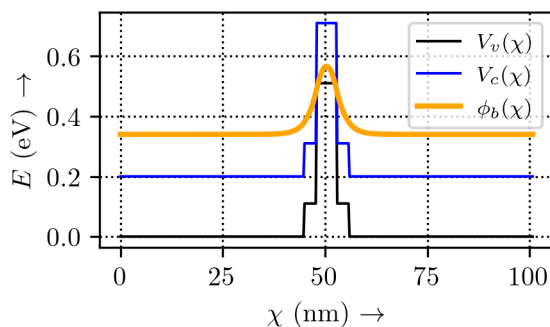


Abbildung 8.7. Darstellung des Banddiagramms. Das Valenzbandpotenzial V_v ist dabei als schwarze Linie und das Leitungsbandpotenzial V_c als blaue Linie dargestellt. Zusätzlich ist der gebundene Zustand des Valenzbands ϕ_b (orangefarbene Linie) eingezeichnet. Dieser nimmt die Funktion des resonanten Zustands für den Zener-Tunnelprozess ein.

stellt.

Ohne die Berücksichtigung der Bandkopplungsmechanismen (schwarze Linie) ist ein langsamer Anstieg der Stromdichte j mit zunehmender, angelegter Spannung U zu beobachten, welcher dem Verlauf einer Stromdichte durch eine Barriere gleicht. Bei Berücksichtigung der Bandkopplungsmechanismen (orangefarbene Linie) kann hingegen ein N-förmiger Verlauf der Stromdichte mit NDR-Bereich festgestellt werden. Dieser ist auf die vom Zener-Prozess assistierte Tunnelstromkomponente zurückzuführen [S1]. Der resonante Zustand der Bauelementoperation liegt dabei innerhalb der Größenordnung von ca. 0,14V, wie aus den Vorüberlegungen mithilfe des gebundenen Zustands des Valenzbands bereits vermutet wurde.

Die Ladungsträgerdichten für das Leitungs- $n_c(\chi)$ sowie das Valenzband $n_v(\chi)$, also Elektronen- und Löcherdichte, sind in Abbildung 8.8b für den resonanten bei $U = 0,13V$ und in 8.8c für den antiresonanten Zustand bei $U = 0,3V$ in Abhängigkeit der Transportrichtung χ dargestellt. In Abbildung 8.8b ist zu sehen, dass es infolge des Zener-Tunneleffekts zu einer starken realen Besetzung des Valenzbands kommt, was dann insgesamt einen großen Stromfluss ermöglicht. Im antiresonanten Zustand, wie in Abbildung 8.8c gezeigt ist, werden die Elektronen im Wesentlichen an der Barrierenstruktur reflektiert. Die Löcherdichte im Valenzband ist dementsprechend wie der Stromfluss gering. Unter dem numerischen Gesichtspunkt ergeben sich durch die Diskontinuitäten des Potenzials an den Heteroübergängen bei der Implementierung Schwierigkeiten, wie auch in [73] dargestellt ist. Hier ergeben sich dadurch numerische Artefakte, welche sich im resonanten Zustand in leichten Oszillationen innerhalb der Elektronendichte ausgehend von den Heteroübergängen niederschlagen, wie aus Abbildung 8.8b ersichtlich ist. Das Verfahren bleibt jedoch stabil. In der numerischen Fluidodynamik sind solche Probleme bei großen Gradienten bekannt und können durch geeignete Diskretisierung vermieden werden [125], dieser Aspekt ist jedoch nicht Bestandteil der Untersuchungen.

8.7.3. Komponenten der Wigner-Funktion

Die Komponenten der Wigner-Funktion $f_{\lambda\lambda'}(\chi, k)$ sind in Abbildung 8.9 für den Fall des resonanten Zustands bei einer angelegten Spannung von $U = 0,13V$ und in Abbildung 8.10 für

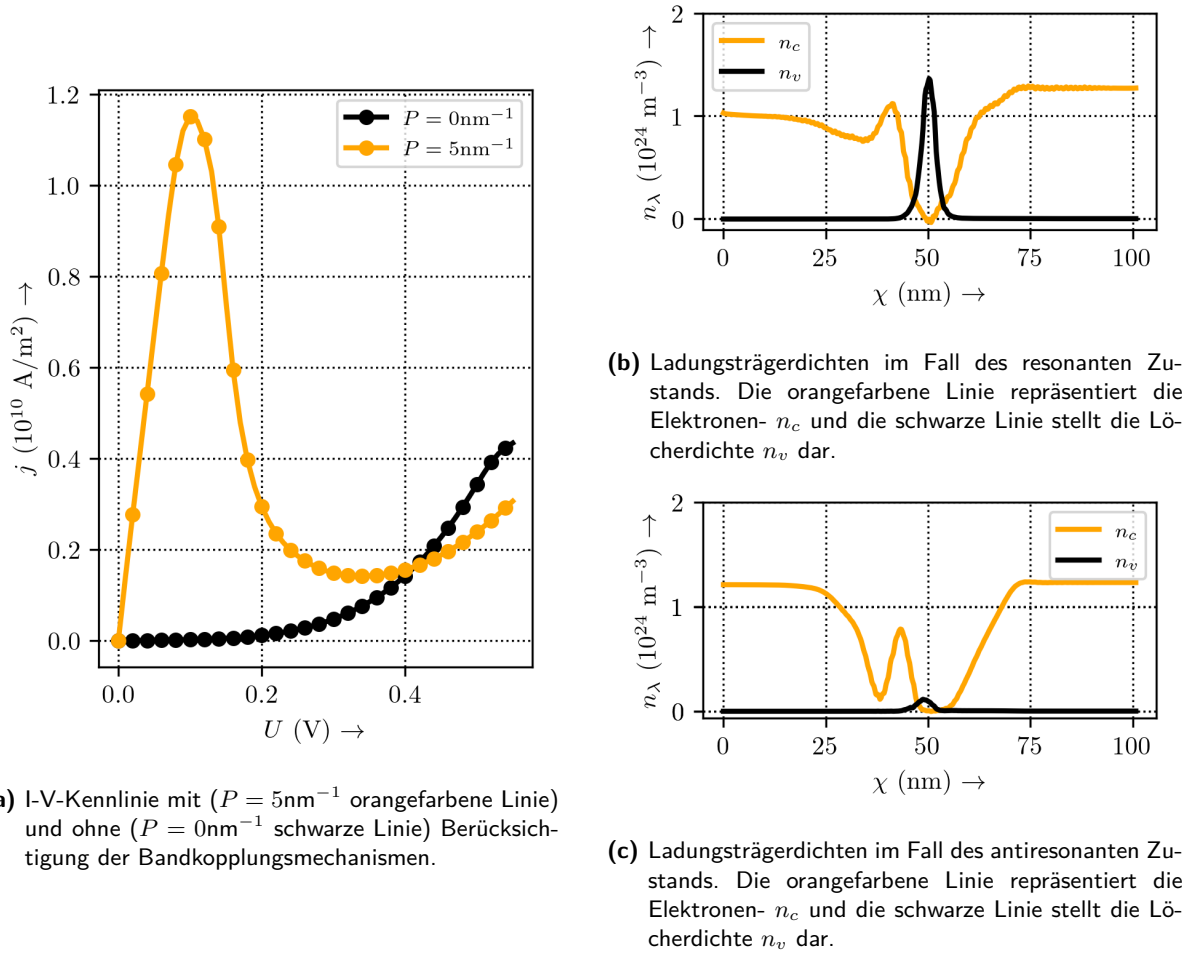


Abbildung 8.8. Ergebnisse für die RITD. In (a) ist die I-V-Kennlinie dargestellt. In (b) und (c) die Ladungsträgerdichten für den resonanten, bzw. antiresonanten Zustand der Bauelementoperation [S1]. Eine genauere Beschreibung erfolgt in den direkten Bildunterschriften.

den antiresonanten Zustand bei $U = 0,3\text{V}$ zeigt. Da die Komponenten die analytische Beziehung $f_{cv}(\chi, k) = f_{vc}^\dagger(\chi, k)$ auch innerhalb der numerischen Ebene erfüllen, sind in den beiden Abbildungen nur der Real- und Imaginärteil der Komponente $f_{cv}(\chi, k)$ dargestellt. Während in der reellen Wigner-Funktion des Leitungsbands $f_{cc}(\chi, k)$ für resonanten Zustand im Gebiet $[40\text{nm}, 60\text{nm}] \times [0\text{nm}^{-1}, 0.1\text{nm}^{-1}]$ ein hoch oszillierender Anteil zu erkennen ist (vgl. Abbildung 8.9a), welcher dem Zener-Tunnelprozess zuzuordnen ist, liegt für den antiresonanten Zustand im Wesentlichen eine Reflexion an der Potenzialbarrierenstruktur vor, wie aus dem orangefarbenen Bereich ersichtlich ist, der sich um den blauen Bereich in Abbildung 8.10a schließt. Infolge des Zener-Tunnelprozesses ist die Amplitude der Wigner-Funktion des Valenzbands $f_{vv}(\chi, k)$ im resonanten Zustand, welche in Abbildung 8.9b dargestellt ist, ungefähr eine Zehnerpotenz größer als die im antiresonanten Zustand, welche in Abbildung 8.10b gezeigt ist.

Fazit: Der vorgestellte Ansatz erlaubt eine angemessene Berücksichtigung von Bandkopplungsmechanismen. Auch ohne die semiklassische Näherung (Entwicklung der numerisch sensi-

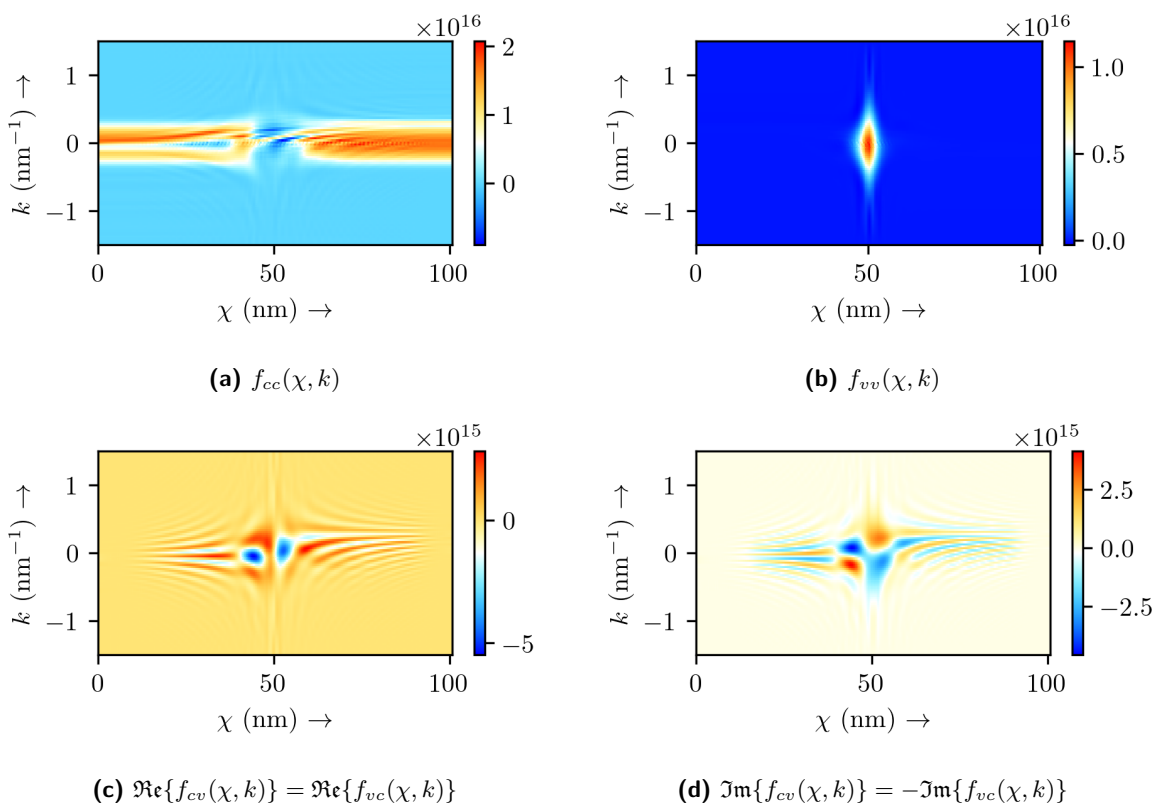


Abbildung 8.9. Komponenten der Wigner-Funktion $f_{\lambda\lambda'}(\chi, k)$ für den resonanten Zustand bei einer angelegten Spannung von $U = 0,13\text{V}$.

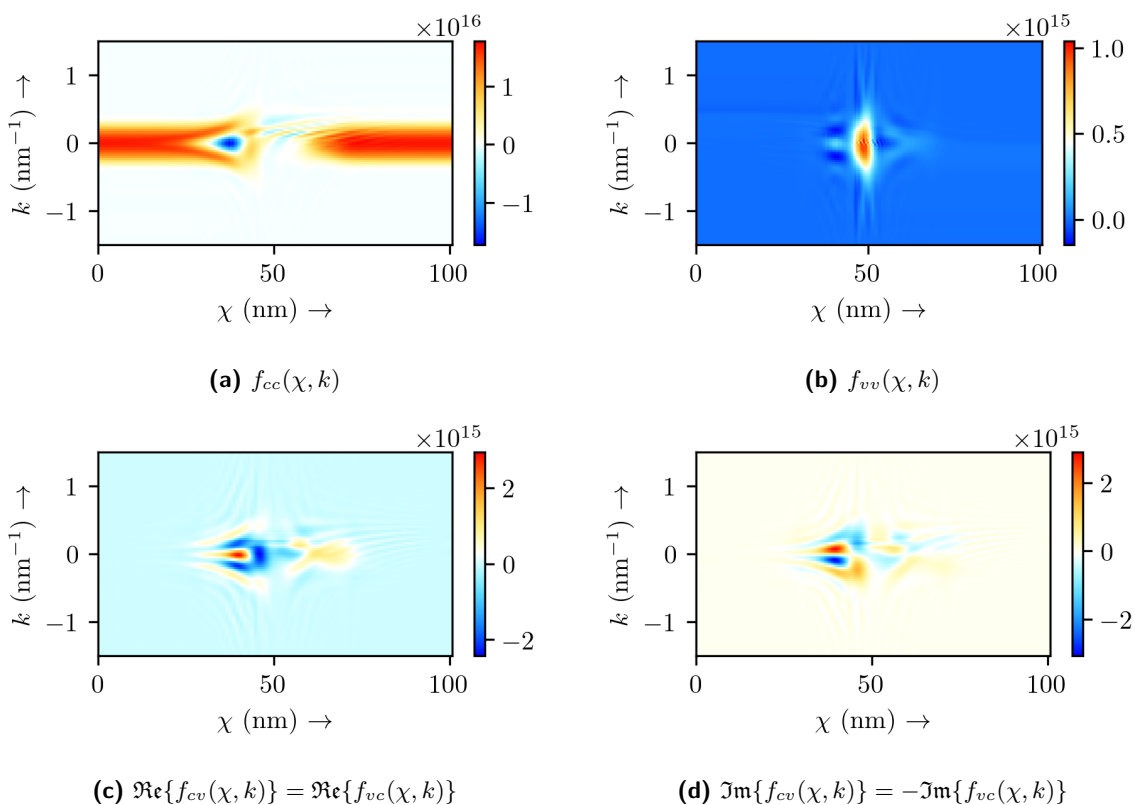


Abbildung 8.10. Komponenten der Wigner-Funktion $f_{\lambda\lambda'}(\chi, k)$ für den antiresonanten Zustand bei einer angelegten Spannung von $U = 0,3\text{V}$.

tiven Driftoperatoren bis zum linearen Glied in \hbar [73]) werden im Nichtgleichgewicht plausible und numerisch stabile Ergebnisse für die herangezogene RITD erzielt. Die I-V-Kennlinie einer RITD konnte vorhergesagt werden. Der Ansatz bietet somit schon jetzt die Möglichkeit der physikalischen Beschreibung einer weiten Klasse von Bauelementen und bildet eine solide Grundlage, auf der zukünftig aufgebaut werden kann.

8.8. Ansatz einer langsam veränderlichen Einhüllenden-Funktion

Im Folgenden soll ein Ansatz auf Grundlage einer langsam veränderlichen Einhüllenden erarbeitet werden, der eine Approximation der generischen, semidiskreten Transportgleichung zweiter Ordnung (8.2) als eine effektive generische Transportgleichung erster Ordnung ermöglicht. Dieser bietet somit potenziell die Möglichkeit einer Reduktion des Speicherbedarfs um einen Faktor von ungefähr zwei sowie die Reduktion der Rechenzeit, da die Systemmatrix eine schmalere Bandbreite aufweist.

Hierzu wird zunächst in Abschnitt 8.8.1 die Grundidee der Einhüllenden-Funktion beleuchtet. Im Anschluss wird die effektive Transportgleichung für die Einhüllende-Funktion in Abschnitt 8.8.2 aufgestellt. Schließlich folgt in Abschnitt 8.8.3 eine numerische Evaluation des Ansatzes.

Der vorgestellte Ansatz beruht auf den Arbeiten zum Wigner-Formalismus im thermodynamischen Gleichgewicht aus [S12]. Hier wird der Ansatz nun aufgegriffen und erweitert. Zum einen erfolgt eine generische Betrachtung. Zum anderen wird die absorbierende Schicht implementiert und das Nichtgleichgewicht wird betrachtet.

8.8.1. Definition der Einhüllenden-Funktion

Im Folgenden soll ein Teilgebiet, exemplarisch das i -te Subintervall mit $\chi \in [\chi_i, \chi_{i+1}]$, bezüglich der Schwerpunktkoordinate betrachtet werden. Die generischen Transportgleichungen zweiter Ordnung zerfallen bei Vernachlässigung bestimmter Eigenschaften in eine Transportgleichung erster Ordnung, z. B. bei Vernachlässigung der örtlichen Abhängigkeit der effektiven Masse oder den Bandkopplungsmechanismen.

Formal wird angenommen, dass die Lösung der entsprechenden Transportgleichung erster Ordnung (8.1) innerhalb der Teilgebiete bekannt ist:

$$\Psi(\chi) = \exp(-[\mathbf{\Gamma}]\chi) \cdot \Psi_0. \quad (8.48)$$

Die Matrix $[\mathbf{\Gamma}]$ wird dabei als stückweise konstant auf den Teilgebieten definiert. Der Vektor Ψ_0 stellt hierbei den Anfangsvektor an einem Rand des Teilgebiets dar. Es wird angenommen, dass sich die Lösung der generischen Transportgleichung zweiter nur durch einen ortsabhängigen Faktor, auch langsam veränderliche Einhüllende-Funktion Φ genannt [S12], von derer erster Ordnung unterscheiden soll. Der Exponentialoperator der Transportgleichung erster Ordnung dient somit als Träger entsprechend:

$$\Psi(\chi) = \exp(-[\mathbf{\Gamma}] \cdot \chi) \cdot \Phi(\chi). \quad (8.49)$$

8.8.2. Semidiskrete Transportgleichung für die Einhüllenden-Funktion

Der Lösungsansatz (8.49) wird nun in die generische, semidiskrete Transportgleichung zweiter Ordnung (8.2) eingesetzt. Anschließend werden die Ableitungen mit der Produktregel ausgewertet. Hierbei ergibt sich aus der Auswertung der ersten Ableitung der Zusammenhang:

$$\exp(-[\Gamma]\chi) \cdot \frac{\partial}{\partial \chi} \Phi(\chi) = \frac{\partial}{\partial \chi} \Psi(\chi) + [\Gamma] \Psi(\chi). \quad (8.50)$$

Da die Einhüllenden-Funktion eine langsam veränderliche Funktion darstellt, kann die zweite Ableitung vernachlässigt werden:

$$\frac{\partial^2}{\partial \chi^2} \Phi(\chi) \approx 0. \quad (8.51)$$

Hiermit ergibt sich die effektive Transportgleichung erster Ordnung schließlich zu:

$$\left(-2 \left[\mathbf{D}_2(\chi_{i+\frac{1}{2}}) \right] [\Gamma] + \left[\mathbf{D}_1(\chi_{i+\frac{1}{2}}) \right] \right) \frac{\partial}{\partial \chi} \Psi(\chi) + \left(- \left[\mathbf{D}_2(\chi_{i+\frac{1}{2}}) \right] [\Gamma]^2 + \left[\mathbf{D}_0(\chi_{i+\frac{1}{2}}) \right] \right) \Psi(\chi) = 0. \quad (8.52)$$

Anschließend sind die einzelnen Teilgebiete miteinander zu verknüpfen, wie zuvor in Abschnitt 8.2.2 beschrieben worden ist.

8.8.3. Numerische Evaluation

Nun soll das Konzept anhand eines exemplarischen Beispiels evaluiert werden. Hierzu wird die bereits untersuchte RTD, entsprechend der Struktur- und Materialparameter in Tabelle 8.1 für einen Legierungsanteil von $x=0,2$, herangezogen. Hierbei wird die örtliche Variation der effektiven Masse durch die effektive Transportgleichung erster Ordnung (8.52) anstatt zweiter Ordnung beschrieben. Die effektive Transportgleichung soll im Folgenden im Nichtgleichgewicht untersucht werden, sowohl im Flachbandfall als auch im selbstkonsistenten Fall.

Für die numerische Lösung wird der ortsraumbasierte Ansatz auf Grundlage der LVNG-RS verwendet. Der Simulation liegt dabei das Gebiet $[0\text{nm}, 90\text{nm}] \times [-75\text{nm}, 75\text{nm}]$ zugrunde, wobei $\xi \in [-75\text{nm}, 75\text{nm}]$ in $N_\xi = 401$ Gitterzellen unterteilt wird. Die Schwerpunktkoordinate ($\chi \in [0\text{nm}, 90\text{nm}]$) wird mit einer Diskretisierungsweite von $\Delta\chi = 0,25\text{nm}$ diskretisiert ($N_\chi = 360$). Die Temperatur beträgt $T = 300\text{K}$. Die Parameter der absorbierenden Schicht werden zu $w_{\text{al}} = 26,25\text{nm}$, $b_{\text{al}} = 4\text{eV}$ und $n_{\text{al}} = 4$ definiert. Die statistische Dichtematrix wird in eine Basis aus $N = 80$ ebene Wellen entwickelt. Bezüglich der selbstkonsistenten Iteration mit der Poisson-Gleichung wird das Newton-Raphson-Verfahren zur Lösung mit einem Abbruchkriterium von $\|\delta\mathbf{U}^s\| \leq 5 \cdot 10^{-2}$ verwendet. Kleinere Schranken beeinflussen die folgenden Ergebnisse nicht.

Elektronendichten im Vergleich: Zuerst sollen die Elektronendichten n untersucht werden. Diese sind in Abbildung 8.11 in Abhängigkeit der Schwerpunktkoordinate χ als orangefarbene Linien für verschiedene Spannungen im Flachbandfall sowie selbstkonsistenten Fall dargestellt. Zusätzlich sind das gesamte Potenzial V der RTD als schwarze Linie sowie die Referenzlösung aus der QTBM, unter Berücksichtigung der örtlich variierenden effektiven Masse, als schwarze

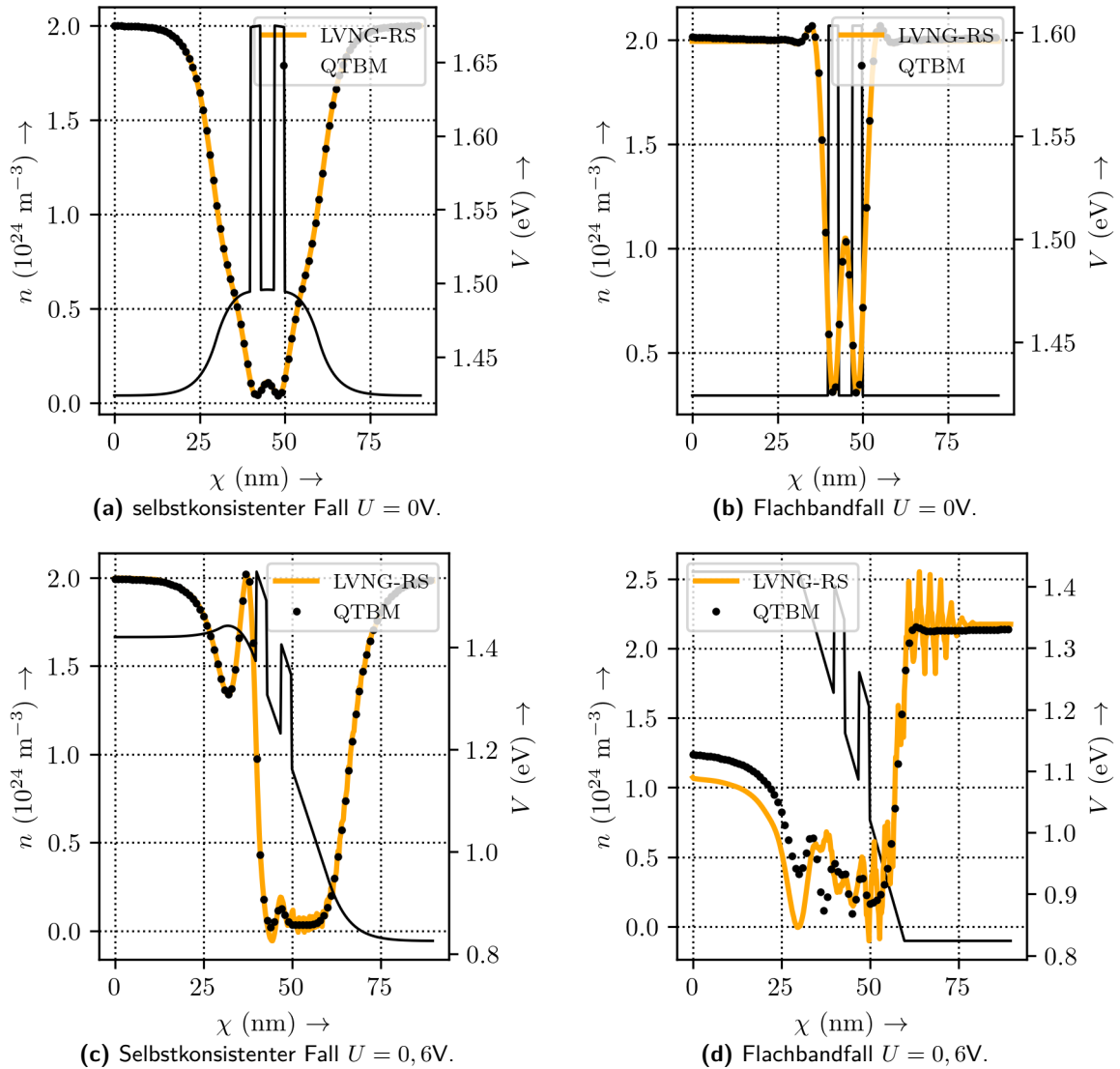


Abbildung 8.11. Selbstkonsistente und Flachband-Elektronendichten aus dem Ansatz der langsam veränderlichen Einhüllenden-Funktion (orangefarbene Linie) für verschiedene Spannungen U im Vergleich zur Referenzlösung aus der QTBM (schwarze Punkte). Die durchgezogene schwarze Linie stellt das gesamte Potenzial V der RTD dar.

Linien und Punkte eingezeichnet. Im thermodynamischen Gleichgewicht stimmen die Elektronendichten n sowohl im Flachbandfall als auch im selbstkonsistenten Fall mit der Referenzlösung aus der QTBM überein, wie aus den Abbildungen 8.11a, bzw. 8.11b zu erkennen ist. Für den Flachbandfall nehmen die Werte der Ladungsträgerdichte in Richtung der Kontaktbereiche leicht zu. Nun soll das Nichtgleichgewicht für eine angelegte Spannung von $U = 0,6V$ untersucht werden. Die Elektronendichte für den selbstkonsistenten Fall ist dabei in Abbildung 8.11c dargestellt und stimmt qualitativ mit den Referenzwerten aus der QTBM überein. Jedoch stellt die Elektronendichte im Bereich der Doppelbarrierenstruktur eine unphysikalische, hoch oszillierende Funktion mit sichtbar negativen Werten dar. Bezüglich des Flachbandfalls, welcher in Abbildung 8.11d gezeigt ist, stellt die Elektronendichte im Vergleich zur Referenzlösung

eine Funktion mit unphysikalischen hochfrequenten Oszillationen dar. Bevor die Ergebnisse diskutiert werden, soll zuerst noch die Stromdichte untersucht werden.

Vergleich der I-V-Kennlinien: Die Stromdichten j sind in Abhängigkeit der angelegten Spannung U in Abbildung 8.12 dargestellt. In Analogie zu den zuvor erzielten Ergebnissen der

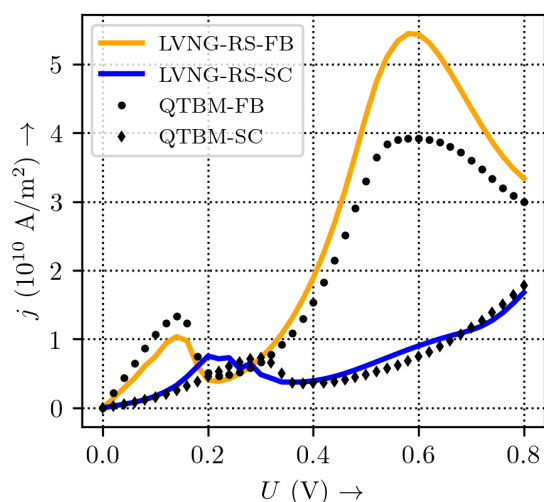


Abbildung 8.12. I-V-Kennlinien für den Ansatz einer langsam veränderlichen Einhüllenden-Funktion im Vergleich. Die Stromdichte j des vorgestellten Ansatzes ist als orangefarbene Linie für den Flachbandfall dargestellt. Die zugehörigen Werte der Referenzlösung aus der QTBM sind als schwarze Punkte eingezeichnet. Die blaue Linie kennzeichnet die Stromdichte j des vorgestellten Ansatzes für den selbstkonsistenten Fall und ist mit den Referenzwerten zu vergleichen, welche durch die schwarzen Rauten markiert werden.

Elektronendichten ist auch für die Stromdichte eine zunehmende Abweichung zur Referenzlösung mit steigender angelegter Spannung aus dieser Abbildung zu erkennen. Während im Flachbandfall (orangefarbene Linie (FB=Flachband)) noch die Spannung der resonanten Zustände mit denen der Referenzlösung übereinstimmt, weist die selbstkonsistente Stromdichte (SC=self-consistent (engl.)) bis auf den qualitativen NDR-Bereich sowie den ohmschen Anlaufbereich keine Übereinstimmung mit der Referenzlösung auf.

Diskussion und Fazit: In diesem Abschnitt ist eine Einhüllenden-Funktion zur Modellierung des Transportverhaltens vorgestellt worden. Für kleine Vorspannungen konnten am Beispiel einer RTD gute Ergebnisse erzielt werden, die mit der Referenzlösung aus der QTBM übereinstimmen. Insbesondere im thermodynamischen Gleichgewicht wird eine sehr gute Übereinstimmung erzielt. Bei größeren Spannungen ergeben sich jedoch unphysikalische, hoch oszillierende Anteile in der Lösung. Diese folgen unmittelbar aus der Definition der Einhüllenden-Funktion, die nur eine Abhängigkeit von der Schwerpunktkoordinate aufweist. Komponenten in der Wellenzahl k für den Wigner-Formalismus oder der Relativkoordinate ξ im Dichtematrix-Formalismus werden somit gleichstark gewichtet, was mit zunehmendem Nichtgleichgewicht nicht gerechtfertigt ist.

8.9. Transfermatrixmethode

Im Folgenden soll ein Ansatz zur Lösung der generischen, semidiskreten Transportgleichungen, (8.1) und (8.17), in den Blick genommen werden, mit dem die bisherige Lösung des Quantentransports über lineare Gleichungssysteme ((8.11) und (8.43)) vermieden werden kann. Hierzu wird eine Transfermatrixmethode (TMM) herangezogen, die eine numerisch effiziente Berechnung der generischen Verteilungsfunktion auf Basis von Matrix-Vektor-Produkten ermöglicht.

In Abschnitt 8.9.1 wird zunächst auf die Theorie eingegangen. Anschließend werden in Abschnitt 8.9.2 auf die Rechenzeiten sowie der Speicherbedarf der Algorithmen auf Basis der Lösung des linearen Gleichungssystems mit der TMM verglichen. Abschließend erfolgt eine Diskussion in Abschnitt 8.9.3.

8.9.1. Theorie

Der Ausgangspunkt für die Formulierung der TMM ist die Lösung innerhalb des Teilgebiets für die generischen, semidiskreten Transportgleichungen, hier am Beispiel der Transportgleichung erster Ordnung (8.1):

$$\Psi(\chi_{i+1}) = \exp(-[\Gamma(\chi_i)] \Delta\chi) \cdot \Psi(\chi_i). \quad (8.53)$$

In den bisherigen Betrachtungen in Abschnitt 8.2.2 sind die Teillösungen über eine Matrix-Vektor-Schreibweise für das gesamte Rechengebiet miteinander verknüpft worden. Nun sollen die Teillösungen des Propagationsalgorithmus (8.53) durch gegenseitiges Einsetzen miteinander verbunden werden:

$$\Psi(\chi_{N_\chi}) = \left(\prod_{i=1}^{N_\chi-1} \exp(-[\Gamma(\chi_i)] \Delta\chi) \right) \Psi(\chi_1) = \exp\left(-\sum_{i=1}^{N_\chi-1} [\Gamma(\chi_i)] \Delta\chi\right) \Psi(\chi_1) \equiv [\mathbf{T}] \Psi(\chi_1). \quad (8.54)$$

Die Matrix $[\mathbf{T}]$ stellt dabei die Transfermatrix dar und verknüpft die Randwerte der generischen Verteilungsfunktion Ψ des ersten Teilgebiets mit denen des letzten. Mit der Unterteilung der Anteile im Hinblick auf die Ausbreitungsrichtung kann (8.54) gemäß

$$\begin{pmatrix} \Psi^+(\chi_{N_\chi}) \\ \Psi^-(\chi_{N_\chi}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} [\mathbf{T}_{11}] & [\mathbf{T}_{12}] \\ [\mathbf{T}_{21}] & [\mathbf{T}_{22}] \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \Psi^+(\chi_1) \\ \Psi^-(\chi_1) \end{pmatrix} \quad (8.55)$$

reformuliert werden. Das weitere Vorgehen wird exemplarisch am Elektronensystem aufgezeigt. Für das Löchersystem ist mit vertauschten Rollen analog vorzugehen.

Die Inflow-Randbedingungen legen die Werte der generischen Verteilungsfunktion $\Psi^-(\chi_{N_\chi})$ sowie $\Psi^+(\chi_1)$ fest. Mithilfe der Transfermatrix gelingt es nun, die vollständigen Werte der generischen Verteilungsfunktion auf einer Seite zu berechnen. Die unbekanntenen Werte auf der rechten Seite ergeben sich damit zu:

$$\Psi^-(\chi_1) = [\mathbf{T}_{22}]^{-1} \left(\Psi^-(\chi_{N_\chi}) - [\mathbf{T}_{21}] \Psi^+(\chi_1) \right). \quad (8.56)$$

Hiermit lassen sich die Werte auf der linken Seite durch die Beziehung

$$\Psi^+(\chi_{N_\chi}) = [\mathbf{T}_{11}] \Psi^+(\chi_1) + [\mathbf{T}_{12}] [\mathbf{T}_{22}]^{-1} \left(\Psi^-(\chi_{N_\chi}) - [\mathbf{T}_{21}] \Psi^+(\chi_1) \right) \quad (8.57)$$

bestimmen. Sobald die Werte auf einer Seite vollständig bekannt sind, kann die generische Verteilungsfunktion unter Anwendung von (8.53) durch eine Rückwärtspropagation bestimmt werden.

8.9.2. Numerischen Eigenschaften

Nun soll die Rechenzeit der TMM mit der konventionellen Lösung auf Basis von linearen Gleichungssystemen verglichen werden. Hierzu ist es zunächst sinnvoll, einige theoretische Vorüberlegungen durchzuführen.

Für die Lösung unter Verwendung von linearen Gleichungssystemen sind ungefähr $2N_{\Psi}^2 N_{\chi}$ Matrixelemente ungleich Null innerhalb der Systemmatrix abzuspeichern, während sich für die TMM ein Speicherbedarf von N_{Ψ}^2 ergibt. Zur Illustration soll ein praxisnahes Beispiel anhand des Wigner-Formalismus mit $N_{\chi} = 400$ und $N_{\Psi} = 300$ dienen. Da die Matrixelemente alle reell sind, ergibt sich für die Elemente der Systemmatrix ein Speicherbedarf⁷ von ungefähr 4,6GB. Für die TMM hingegen liegt eine Anforderung von nur 5,76MB vor. Aufgrund der Formulierung der TMM auf Grundlage von Matrix-Vektor-Produkten sowie dem geringen Speicherbedarf bieten sich insbesondere Rechnungen auf GPUs an.

Zum Vergleich der beiden Methoden wird exemplarisch die RTD, wie zuvor in Abbildung 5.7 dargestellt, untersucht (Struktur- und Materialparameter: Tabelle 5.1). Hierzu wird die WTG für das Interbandmodell unter Annahme einer örtlich konstanten effektiven Masse (6.19) herangezogen. Bei den Untersuchungen werden $N_k = 200$ quantisierte Wellenzahlen innerhalb des Intervalls $k \in [-2, 25\text{nm}^{-1}, 2, 25\text{nm}^{-1}]$ einbezogen. Für einen fairen Vergleich wird der Exponentialoperator in beiden Algorithmen bis zum quadratischen Glied entwickelt. Für die numerische Lösung des Gleichungssystems wird ein sparse LU-Löser [131] verwendet und die Berechnungen sind auf einer Linux-Workstation mit einem i7-Prozessor⁸ und 16GB RAM durchgeführt worden.

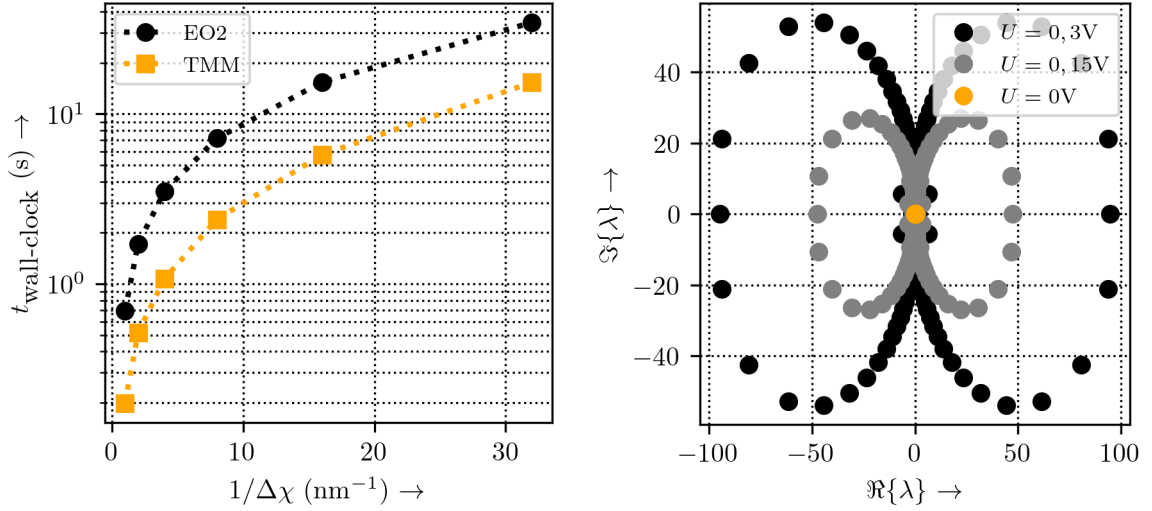
Die Rechenzeiten sind in Abhängigkeit der Diskretisierungsweite $\Delta\chi$ in Abbildung 8.13a gezeigt. Den Betrachtungen liegt der Flachbandfall im thermodynamischen Gleichgewicht zugrunde, wobei die Rechenzeit jeweils aus 15 aufeinander folgenden Rechnungen gemittelt wird. Wie aus der Abbildung 8.13a zu erkennen ist, ist die Rechenzeit für die TMM ungefähr einen Faktor drei kleiner als die Lösung des Gleichungssystems. Zum Beispiel ergibt sich für die Diskretisierungsweite $\Delta\chi = 0,25\text{nm}$ für die Lösung des Gleichungssystems eine Rechenzeit von ungefähr 3,5s, während die TMM nur knapp 1,06s benötigt (bei gleicher Genauigkeit der Ergebnisse).

8.9.3. Grenzen der Transfermatrixmethode

Unglücklicherweise ist die TMM mit Problemen behaftet, sodass sie in ihrer Anwendbarkeit deutlich eingeschränkt wird. Neben der inhärenten Limitierung auf das stationäre Regime ist die TMM nur im thermodynamischen Gleichgewicht numerisch stabil. Im Nichtgleichgewicht

⁷double-precision Format wird vorausgesetzt.

⁸Deaktivierte Turbo-Boost Technologie.



(a) Vergleich der Wall-Clock Zeiten $t_{\text{wall-clock}}$ der Transfermatrixmethode (TMM) mit der Lösung des Gleichungssystems (EO2) in Abhängigkeit der Diskretisierungsweite $\Delta\chi$. Die Laufzeiten für die TMM sind als orangefarbene Linie dargestellt, während die Ergebnisse der direkten Lösung des Gleichungssystems als schwarze Linie gezeigt sind.

(b) Eigenwertspektrum der Matrix $[\mathfrak{F}]$ für verschiedene angelegte Spannungen $U=0\text{V}$, $U=0,15\text{V}$ und $U=0,3\text{V}$.

Abbildung 8.13. Ergebnisse für die Transfermatrixmethode. In (a) ist der Vergleich der Wall-Clock Zeiten dargestellt, während in (b) das Eigenwertspektrum des Arguments der Matrix-Exponentialfunktion dargestellt ist.

kommt es bei der numerischen Integration des Terms

$$[\mathfrak{F}] \equiv \sum_{i=1}^{N_\chi-1} [\mathbf{F}(\chi_i)] \Delta\chi \quad (8.58)$$

durch die angelegte Spannung zu betragsmäßig großen Werten mit unterschiedlichen Vorzeichen. Diese Werte führen dann als Argument des Exponentialoperators zu einem numerisch aufklingenden und somit instabilen Verhalten. Gleichermaßen führt eine Implementierung der absorbierenden Schicht zu einem instabilen Verhalten.

Hierzu ist in Abbildung 8.13b das Eigenwertspektrum von $[\mathfrak{F}]$ für verschiedene angelegte Spannungen $U = 0\text{V}$, $U = 0,15\text{V}$ und $U = 0,3\text{V}$ dargestellt. Für den Fall des thermodynamischen Gleichgewichts liegen alle Eigenwerte bei dem Wert Null. Die Transfermatrix stellt daher eine Einheitsmatrix dar. Wird jedoch eine Spannung angelegt, wandern die Eigenwerte zu gleichen Anteilen in die rechte und linke komplexe Halbebene, wie aus Abbildung 8.13b zu erkennen ist. Der Spektralradius nimmt dabei mit steigender, angelegter Spannung zu. Die Eigenwertwerte innerhalb der rechten Halbebene verursachen schließlich das instabile Systemverhalten.

8.10. Transiente Formulierung des Exponentialoperator-Ansatzes

Die bisherige stationäre Betrachtung des Quantentransports unter Verwendung des Exponentialoperator-Ansatzes soll nun auf den transienten Fall erweitert werden, sodass auf dessen Grundlage Analysen des dynamischen Quantentransports ermöglicht werden.

Da der Exponentialoperator selbst nur eine stationäre Lösung des Systems erlaubt, wird auf die ermittelten Differenzenquotienten (8.29) zurückgegriffen, welche aus dem Exponentialoperator abgeleitet werden. Wird diesen Ausdrücken gefolgt, so werden die Terme im Mittelpunkt der Teilgebiete bei $\chi_{i+\frac{1}{2}}$ berechnet. Dementsprechend ergibt sich für den transienten Anteil innerhalb der generischen, semidiskreten Transportgleichungen, (8.1) und (8.2), die Beziehung:

$$\left. \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\chi) \right|_{\chi_{i+\frac{1}{2}}} = \frac{\partial}{\partial t} \frac{\Psi(\chi_{i+1}) + \Psi(\chi_i)}{2}. \quad (8.59)$$

Diese Teillösungen können nun miteinander verknüpft werden und in einer Matrix-Vektor-Schreibweise zusammengefasst werden. Mit der Implementierung der Randbedingungen durch die Blockmatrizen, [IL] und [IR], ergibt sich schließlich:

$$\begin{pmatrix} [\text{IL}] \\ \frac{1}{2} [\text{Id}] & \frac{1}{2} [\text{Id}] \\ & \frac{1}{2} [\text{Id}] & \frac{1}{2} [\text{Id}] \\ & & \ddots & \ddots \\ & & & \frac{1}{2} [\text{Id}] & \frac{1}{2} [\text{Id}] \\ & & & & \ddots & \ddots \\ & & & & & \frac{1}{2} [\text{Id}] & \frac{1}{2} [\text{Id}] \\ & & & & & & [\text{IR}] \end{pmatrix} \cdot \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \Psi(\chi_1) \\ \Psi(\chi_2) \\ \vdots \\ \Psi(\chi_i) \\ \Psi(\chi_{i+1}) \\ \vdots \\ \Psi(\chi_{N_x-1}) \\ \Psi(\chi_{N_x}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{d}{dt} \Psi_{\text{BC}}^L \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \frac{d}{dt} \Psi_{\text{BC}}^R \end{pmatrix}. \quad (8.60)$$

Dies wird kurz auch als $[\mathbf{T}] \frac{d}{dt} \hat{\Psi} = \mathbf{b}_{\text{transient}}$ geschrieben. Die Matrizen zur Einarbeitung der Randbedingungen, [IL] am linken und [IR] am rechten Kontakt, sind dabei durch die Beziehungen aus Abschnitt 8.2.3 und Abschnitt 8.3.4 bestimmt. Die Funktionen $\frac{d}{dt} \Psi_{\text{BC}}^L$ und $\frac{d}{dt} \Psi_{\text{BC}}^R$ erfassen das transiente Verhalten der generischen Verteilungsfunktion an den Kontakten. Im Vergleich zum konventionellen Upwind-Verfahren bietet sich hier die Möglichkeit, eine Rückwirkung des Systems auf die Randbedingungen zu implementieren. Die Untersuchung der sich durch die Rückwirkung eröffneten Möglichkeiten verbleibt jedoch ein Thema für zukünftige Arbeiten, kann aber insbesondere für Systeme mit einem Gedächtnis interessant sein, z. B. könnten zeitabhängige Selbsterwärmungsprozesse untersucht werden.

In dieser Arbeit wird angenommen, dass die Verteilungsfunktion am Rand zeitlich konstant ist, sodass die Ableitungen, $\frac{d}{dt} \Psi_{\text{BC}}^L$ und $\frac{d}{dt} \Psi_{\text{BC}}^R$, den Wert Null annehmen. Zusammen mit den Systemen, (8.11) und (8.43), ergibt sich das den transienten Quantentransport beschreibende System konzeptionell zu

$$[\mathbf{T}] \cdot \frac{d}{dt} \hat{\Psi}(t) = [\mathbf{S}(t)] \cdot \hat{\Psi}(t) \quad (8.61)$$

oder nach Invertierung der Matrix [T] zu:

$$\frac{d}{dt} \hat{\Psi}(t) = [\mathbf{U}(t)] \cdot \hat{\Psi}(t). \quad (8.62)$$

Hierbei wird der zeitabhängige Spannungsverlauf innerhalb des Driftoperators durch die zusätzliche Abhängigkeit von t in der Systemmatrix $[\mathbf{S}(t)]$ berücksichtigt. Die numerischen Verfahren zur Zeitintegration von (8.62) werden in Anhang E erläutert.

Trotz der modellierungsmäßigen Vorteile auf Grundlage des vorgestellten Formalismus ergibt sich im Vergleich zum Upwind-Verfahren durch die Matrix an dem instationären Term ein Nachteil, da die Matrix $[\mathbf{T}]$ für die transiente Berechnung oftmals invertiert werden muss. Die Gestalt der Matrix ist zwar gutartig, sodass die Invertierung nur eine geringe Rechenzeit erfordert. Jedoch ist die sich ergebende Gesamtmatrix nicht mehr dünnbesetzt, wodurch die Anforderungen an den Speicherbedarf ansteigen. Zusätzlich steigt aufgrund der vielen hinzugekommenen Elemente die benötigte Rechenzeit zur Auswertung der Matrix-Operationen.

8.11. Untersuchungen zur Genauigkeit der Verfahren

In den vorangegangenen Abschnitten sind die Formalismen zur numerischen Lösung der Transportgleichungen auf Grundlage der LVNG-RS vorgestellt und anhand qualitativer Untersuchungen mit einer Referenzlösung aus der QTBM evaluiert worden. Nun soll eine quantitative Untersuchung im Hinblick auf praxisnahe Anwendungsbeispiele erfolgen.

Hierzu wird in Abschnitt 8.11.1 zunächst die Genauigkeit der stationären Verfahren in den Blick genommen. Im Anschluss wird in Abschnitt 8.11.2 die numerische Lösung der LVNG-RS in einem Unterraum beleuchtet. Abschließend erfolgt in Abschnitt 8.11.3 eine Untersuchung der transienten Lösungsverfahren.

8.11.1. Stationäre Lösungsverfahren

Zur Untersuchung der Genauigkeit der vorgestellten stationären Verfahren soll im Folgenden eine RTD als Simulationsbeispiel betrachtet werden, wobei ihre Struktur- und Materialparameter bereits für vorherige Analysen herangezogen worden und in Tabelle 5.1 dargestellt sind.

Der Phasenraum wird für die numerische Lösung der WTG mit $N_k = 120$ quantisierten Wellenzahlen in dem Intervall von $[-2.25\text{nm}^{-1}, 2.25\text{nm}^{-1}]$ betrachtet. Die Parameter zur Lösung der LVNG-RS werden derart gewählt, dass der reale Rechenaufwand in derselben Größenordnung liegt wie der des Wigner-Formalismus. Hierzu wird die Relativkoordinate innerhalb des Intervalls $[-75\text{nm}, 75\text{nm}]$ in $N_\xi = 801$ Zellen unterteilt. Die Lösung erfolgt im Unterraum mit $N = 120$ Basisfunktionen, bestehend aus ebenen Wellen. Die Systemmatrix des Wigner-Formalismus und des ortsraumbasierten Formalismus weisen somit dieselbe Dimension und eine ähnliche Struktur auf. Die Parameter der absorbierenden Schicht werden für beide Verfahren identisch gewählt: $w_{\text{al}} = 0,35 \cdot L_\xi$, $b_{\text{al}} = 4\text{eV}$ und $n_{\text{al}} = 4$. Die Temperatur des Bauelements beträgt $T = 300\text{K}$.

Neben den neuartigen Verfahren auf Basis eines Exponentialoperators werden zur numerischen Lösung der WTG auch die konventionellen Upwind-Verfahren herangezogen. Zur numerischen Lösung der Transportgleichung auf Basis der im Ortsraum diskretisierten LVNG-RS wird hingegen nur der Exponentialoperator verwendet.

Da die semidiskreten Differenzialgleichungen nur noch von der Schwerpunktkoordinate abhängen, wird bei der Beurteilung der Genauigkeit die Diskretisierungsweite $\Delta\chi$ herangezogen. Eine Analyse des relativen Fehlers bezüglich der Anzahl der Abtastpunkte N_k ist im Wigner-Formalismus in der Arbeit [S9] durchgeführt worden. Als Maß zur Beurteilung der Genauigkeit der in dieser Arbeit vorgestellten Methoden wird der relative Fehler herangezogen. Dieser wird mithilfe einer Referenzlösung bestimmt, welche aus der QTBM [7, 8] stammt. Da sich die Verteilungsfunktionen aus der WTG sowie LVNG-RS und der QTBM um mindestens eine Koordinatentransformation unterscheiden, ist der Vergleich interner Größen zweckmäßig. Hierzu wird der relative Fehler auf Grundlage der Elektronendichten n definiert:

$$e_{\text{rel}} = \frac{\|n(\chi) - n_{\text{ref}}(\chi)\|}{\|n_{\text{ref}}(\chi)\|}. \quad (8.63)$$

Die Funktion $n_{\text{ref}}(\chi)$ repräsentiert hierbei die Referenz-Elektronendichte.

In Abbildung 8.14 werden die relativen Fehler in Abhängigkeit der Diskretisierungsweite $\Delta\chi$ für die vorgestellten Methoden gezeigt. Die in der Legende nachgestellte Zahl kennzeichnet

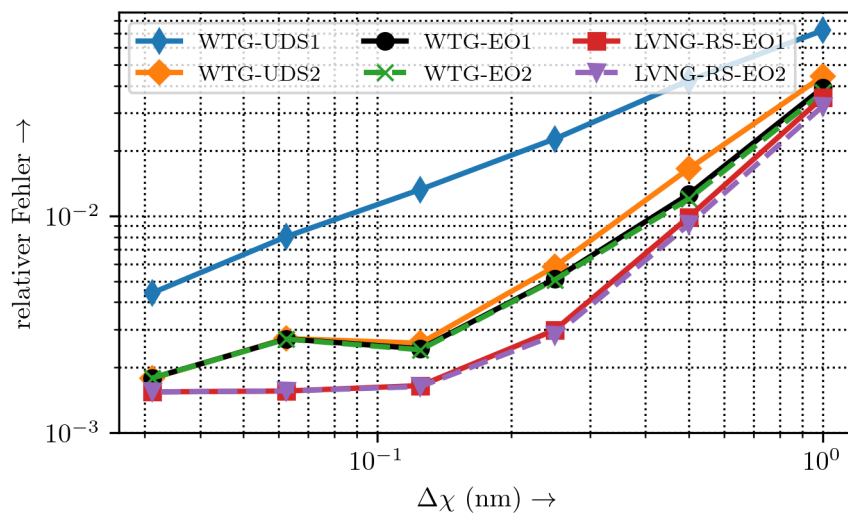


Abbildung 8.14. Relativer Fehler in doppelt-logarithmischer Skala in Abhängigkeit der Diskretisierungsweite $\Delta\chi$ für die verschiedenen Verfahren im Vergleich.

dabei die Ordnung des numerischen Lösungsverfahrens. So bedeutet die Abkürzung WTG-UDS2 beispielsweise eine numerische Lösung der WTG mit einem Upwind-Verfahren zweiter Ordnung.

Wie aus Abbildung 8.14 ersichtlich ist, nimmt der Wert des relativen Fehlers für alle Methoden mit sinkender Schrittweite ab und liegt innerhalb der Größenordnung von ca. 10^{-1} bis 10^{-3} . Merkbare Unterschiede innerhalb der Größenordnung liegen zwischen dem UDS1-Verfahren und den übrigen Verfahren vor. Im Maximum ist der Fehler ungefähr eine Größenordnung höher. Für das UDS2-Verfahren sowie die EO-Verfahren werden wesentlich kleinere relative Fehler erzielt. Bezüglich der Lösung der WTG sind Unterschiede zwischen dem UDS2-Verfahren und den EO-Verfahren marginal. Ebenso sind die Abweichungen zwischen dem EO-Verfahren

erster Ordnung (EO1) und dem zweiter Ordnung (EO2) sehr gering. Ferner wird mit dem EO-Verfahren in Kombination mit der LVNG-RS der kleinste relative Fehler erzielt. Außerdem ist der Einsatz des deutlich rechenintensiveren EO-Verfahrens zweiter Ordnung⁹ für praxisrelevante Bauelementmodellierung nicht lohnenswert, da keine wesentliche Verringerung des relativen Fehlers im Vergleich zum Verfahren erster Ordnung ermöglicht wird, wie aus Abbildung 8.14 zu erkennen ist. Weiterhin stellt sich für kleine Diskretisierungsweiten $\Delta\chi \leq 0,1\text{nm}$ ein konstantes Fehlerniveau für die Verfahren auf Grundlage der LVNG-RS ein. Diese Zusammenhänge können auch für die Untersuchung des Nichtgleichgewichts festgestellt werden. Da die Ergebnisse jedoch keinen weiteren Erkenntnisgewinn liefern, wird auf eine dezidierte Darstellung an dieser Stelle verzichtet.

Ohne die Implementierung einer absorbierenden Schicht, was insbesondere bei den Upwind-Verfahren das bisher gebräuchliche, numerische Lösungsverfahren darstellt, ist bei keinem der Methoden außerhalb des thermodynamischen Gleichgewichts ein relativer Fehler kleiner als Eins festzustellen. Wie bereits in Kapitel 5 diskutiert, liegen infolge unphysikalischer Reflexionen sehr große Abweichungen zur Referenzlösung vor.

Zusätzlich ist festzuhalten, dass durch den Vergleich der vorgestellten Methoden mit der QTBM immer eine Restfehlerquelle vorhanden ist, welche auf die verschiedenen Diskretisierungen der unterschiedlichen Differenzialgleichungen, WTG, LVNG-RS und der Schrödingergleichung, unter der Verwendung von unterschiedlichen Randbedingungen in unterschiedlichen Koordinatensystemen zurückzuführen ist [30, S9, 77, S12].

8.11.2. Unterraum-Lösungsverfahren

Nun soll das Unterraum-Verfahren zur Lösung des ortsraumbasierten Formalismus auf Grundlage der LVNG-RS beleuchtet werden. Die präsentierten Ergebnisse stellen dabei Erweiterungen aus [S7] dar.

Die Genauigkeit soll dabei wie im vorangegangenen Abschnitt auf Basis des relativen Fehlers untersucht werden. Die Referenzlösung wird mithilfe einer Implementierung auf Basis der QTBM generiert. Der relative Fehler wird dabei sowohl in Abhängigkeit der Diskretisierungsweite $\Delta\chi$ als auch der Dimension N des Unterraums evaluiert. Als exemplarisches Bauelement dient eine RTD, bei welcher die effektive Masse einmal konstant und einmal als örtlich variierend angenommen wird. Hiermit kann die Beurteilung im Hinblick auf die semidiskrete Transportgleichung erster Ordnung (konstante effektive Masse) als auch die semidiskrete Transportgleichung zweiter Ordnung (örtlich variierende effektive Masse) erfolgen. Die Diskretisierungsparameter des vorherigen Abschnitts werden bis auf die Anzahl der Zellen, die hier zu $N_\xi = 401$ gesetzt wird, übernommen. Auf Basis der Kenntnisse des vorherigen Abschnitts wird nur das Exponentialoperator-Verfahren der ersten Ordnung betrachtet.

Der relative Fehler für die numerische Lösung der semidiskreten Transportgleichung ist in Abhängigkeit der Diskretisierungsweite $\Delta\chi$ sowie der Dimension des Unterraums N in Abbildung 8.15a dargestellt. Für die numerische Lösung der semidiskreten Transportgleichung zweiter Ordnung ist der relative Fehler in Abbildung 8.15b gezeigt. Den Berechnungen liegt das thermodynamische Gleichgewicht zugrunde. Im Allgemeinen führt eine sinkende Diskretisierungsweite

⁹Im einfachsten Fall ohne Scaling-and-Squaring: Aufwand des EO1 plus eine weitere Matrixmultiplikation sowie zwei Matrixadditionen

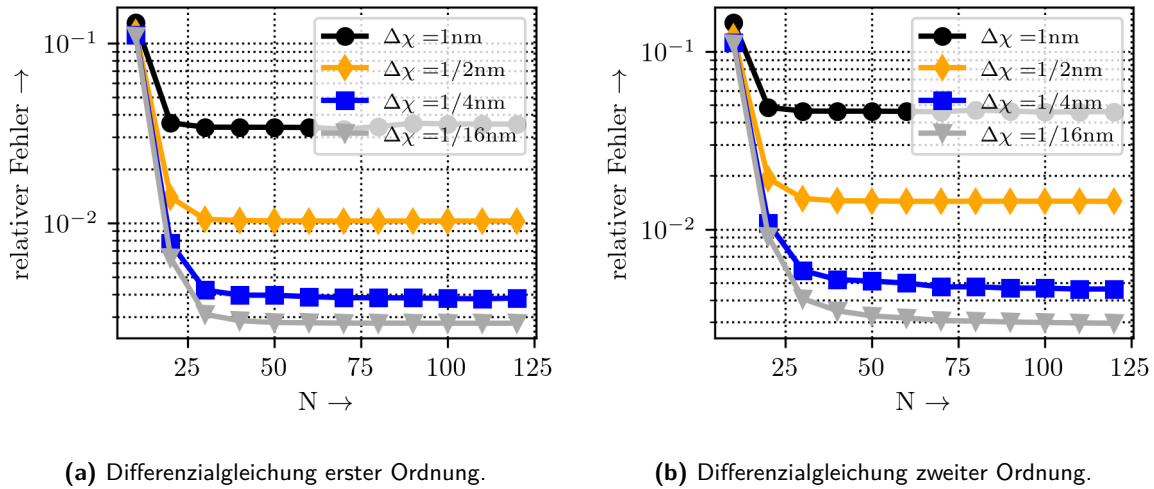


Abbildung 8.15. Relativer Fehler in Abhängigkeit der Diskretisierungsweite $\Delta\chi$ und der Dimension N des Unterraums. In (a) ist der relative Fehler für die numerische Lösung der Transportgleichung erster Ordnung dargestellt, während in (b) der relative Fehler für die Lösung der Transportgleichung zweiter Ordnung gezeigt wird.

$\Delta\chi$ zu einem sinkenden relativen Fehler, der sich innerhalb der Größenordnung von ca. 10^{-1} bis ca. 10^{-3} erstreckt. Weiterhin ist aus den Abbildungen, 8.15a und 8.15b, ein Sättigungsverhalten bezüglich der Anzahl der Basisfunktionen N festzustellen [S7]. Diese Sättigung erfolgt mit steigender Anzahl an Basisfunktionen superlinear. Ferner verschiebt sich der Grenzpunkt, an welchem die Sättigung eintritt, mit sinkender Diskretisierungsweite zu einer größeren Anzahl an Basisfunktionen. Für die hier betrachteten Modelle wird die Sättigung bei einer moderaten Anzahl von ungefähr $N = 50$ Basisfunktionen erreicht. Dieser Zusammenhang gilt analog auch im Nichtgleichgewicht. Da die Fehlerkurven sich jedoch unwesentlich von den bereits dargestellten unterscheiden, wird auf eine weitere Darstellung dieser im Folgenden verzichtet.

Im Vergleich zum klassischen Wigner-Formalismus birgt die vorgestellte Methode auf Basis der Formulierung eines Unterraum-Verfahrens erhebliches Optimierungspotenzial [S7]. Bis auf die zur Transformation benötigten Matrix-Vektor-Produkte kann eine hoch aufgelöste numerische Lösung bei gleichbleibendem numerischen Aufwand durch Projektion auf den Unterraum ($N/N_\xi \ll 1$) erzielt werden. Hierdurch kann eine wesentliche Steigerung der Genauigkeit erfolgen, da die Erwartungswerte nach der Rücktransformation im Ortsraum von den Schrittweiten $\Delta\chi$ sowie $\Delta\xi (= L_\xi/N_\xi)$ abhängen.

8.11.3. Transiente Lösungsverfahren

Nun sollen die transienten Lösungsverfahren zur numerischen Lösung des gekoppelten Differenzialgleichungssystems (8.62) untersucht werden. Diese sind in Anhang E dargestellt.

Zur Beurteilung der transienten Lösungsverfahren wird exemplarisch die WTG für eine RTD mit den Struktur- und Materialparametern gelöst, welche in Tabelle 8.3 dargestellt sind. Das Gebiet $[0\text{nm}, 40\text{nm}] \times [-0.9\text{nm}^{-1}, 0.9\text{nm}^{-1}]$ im Phasenraum wird dabei mit $N_k = 40$ Wellenzahlen quantisiert und bezüglich der Schwerpunktkoordinate mit $N_\chi = 40$ Punkten abgetastet. Für

Schichtnummer	1	2	3	4	5	6	7
Weite in nm	15	0	3	4	3	0	15
Dotierung in 10^{18}cm^{-3}	2	0	0	0	0	0	2
Potenzial in eV	1,424	1,424	1,7013	1,424	1,7013	1,424	1,424
Effektive Masse in m_0	0,063	0,063	0,063	0,063	0,063	0,063	0,063
Relative Permittivität ε_r in ε_0	12,9	12,9	12,05	12,9	12,05	12,9	12,9

Tabelle 8.3. Struktur- und Materialparameter der $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ -GaAs-RTD.

die absorbierende Schicht werden die Parameter des vorangegangenen Abschnitts angenommen.

Zum Zeitpunkt $t = 0\text{fs}$ befindet sich die RTD im thermodynamischen Gleichgewicht. Anschließend wird ein abrupter Spannungssprung von $0,1\text{V}$ zum Zeitpunkt $t > 0\text{fs}$ angelegt. Dabei wird die zeitliche Entwicklung der Wigner-Funktion im Flachbandfall über einen Zeitraum von 20fs für verschiedene Zeitintegrationen und Zeitschrittweiten Δt aufgezeichnet und mit einer Referenzlösung verglichen. Die Referenzlösung $\hat{\Psi}_{\text{ref}}$ wird dabei aus der formalen analytischen Lösung (E.1) durch Diagonalisierung entsprechend

$$\exp([U]\Delta t) = [V] \exp([\lambda]\Delta t)[V]^{-1} \quad (8.64)$$

bestimmt, wobei die Diagonalmatrix $[\lambda]$ sich aus den Eigenwerten von $[U]$ zusammensetzt. Die Matrix $[V]$ enthält als Spalten die Eigenvektoren der Matrix $[U]$. Mit dieser Referenzlösung lässt sich der relative Fehler des betrachteten numerischen Zeitintegrationsverfahrens definieren:

$$\epsilon_{\text{rel}} = \frac{\|\hat{\Psi}(t = 20\text{fs}) - \hat{\Psi}_{\text{ref}}(t = 20\text{fs})\|}{\|\hat{\Psi}_{\text{ref}}(t = 20\text{fs})\|}. \quad (8.65)$$

Der Vektor $\hat{\Psi}$ repräsentiert dabei die Wigner-Funktion des entsprechenden numerischen Zeitintegrationsverfahrens. Zur numerischen Zeitintegration werden neben den herkömmlichen, in der Literatur bereits eingesetzte Verfahren, auch moderne Ansätze untersucht, welche in dem Kontext des transienten Quantentransports bisher keine Anwendung gefunden haben. Zu den herkömmlichen Ansätzen zählen das explizite Euler-Verfahren (EE) [23, 24], das Crank-Nicolson-Verfahren (CN) [S9, 101, 111, 113] und das Runge-Kutta-Verfahren vierter Ordnung [21, 112]. Die modernen Zeitintegrationen umfassen Low-Storage-Runge-Kutta-Verfahren (LSRK) [132] sowie Krylov-Unterraum-Verfahren zur Approximation der Matrix-Exponentialfunktion (EXK) [118, 119] (vgl. Anhang E).

Der relative Fehler ist für die verschiedenen Methoden in Abhängigkeit der Zeitschrittweite Δt in Abbildung 8.16 dargestellt. Bezüglich des expliziten Euler-Verfahrens (EE) ist der kleinste Stabilitätsbereich sowie die niedrigste Genauigkeit mit relativen Fehlern zwischen 10^{-1} und 10^{-4} festzustellen. Die maximal erlaubte Zeitschrittweite unterliegt der sogenannten Courant-Zahl, welche an den betragsmäßig größten Eigenwert geknüpft ist [125]. Die daran gekoppelten kleinen Zeitschrittweiten von ca. $< 0,04\text{fs}$ sind in der Praxis oftmals unpraktisch, da eine Vielzahl von Iterationen notwendig ist, um Zeitbereichsanalysen durchzuführen. Größere Zeitschrittweiten erlauben die Runge-Kutta-Methoden. Hierzu zählen sowohl das klassische (RK4) als auch die Speicherplatz optimierte Variante (LSRK). Der relative Fehler dieser Verfahren liegt zwischen 10^{-9} und 10^{-12} . Beide Verfahren sind an eine Stabilitätsbedingung gebunden, wie aus

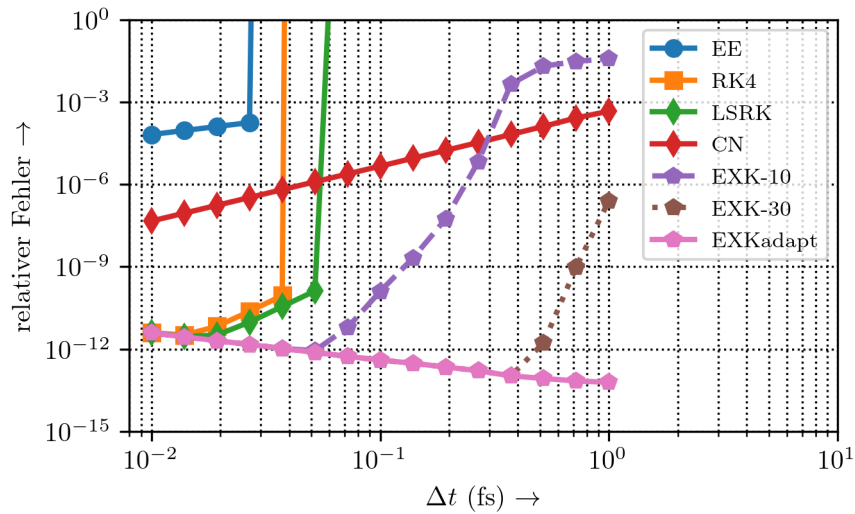


Abbildung 8.16. Relativer Fehler in doppelt-logarithmischer Darstellung in Abhängigkeit der Zeitschrittweite Δt für die verschiedenen numerischen Zeitintegrationsverfahren im Vergleich.

Abbildung 8.16 zu erkennen ist. Im Vergleich zum RK4 erlaubt die LSRK-Variante eine größere maximale Zeitschrittweite Δt . Mit dem Crank-Nicolson-Verfahren (CN) werden in Abhängigkeit der Zeitschrittweite relative Fehler zwischen 10^{-3} und 10^{-8} erzielt. Das CN-Verfahren ist unbedingt stabil, dafür jedoch implizit. Die Lösung mithilfe eines Matrix-Exponentials im Krylov-Unterraum (EXK) ist für verschiedene Anzahlen an Krylov-Unterraum-Basisvektoren, 10 (EXK-10) und 30 (EXK-30) in Abbildung 8.16 dargestellt. Ferner ist auch eine adaptive Formulierung (EXKadapt) auf Grundlage eines Residuums eingezeichnet. Mit steigender Anzahl an Basisvektoren, welche den Krylov-Unterraum aufspannen, nimmt der relative Fehler ab. Ebenso sinkt der relative Fehler mit sinkender Zeitschrittweite Δt . Je größer die Anzahl der Basisfunktionen ist, desto schneller wird der Sättigungswert des relativen Fehlers mit fallender Zeitschrittweite erreicht. Selbst für große Zeitschrittweiten erlaubt das adaptive Verfahren (EXKadapt) sehr kleine relative Fehler in der Größenordnung $\approx 10^{-13}$. Der Anstieg des relativen Fehlers im Sättigungsbereich ist auf die kumulativen Rundungsfehler in diesem praxisorientierten Beispiel zurückzuführen.

Diskussion und Fazit: In diesem Abschnitt sind die Formalismen zur numerischen Lösung der semidiskreten Transportgleichung im Hinblick auf ihre Genauigkeit untersucht worden. Bei der stationären Lösung erwies sich der ortsbasierte Formalismus auf Grundlage der LVNG-RS nicht nur als genaueste Methode, sondern erlaubt auch die numerisch effiziente Lösung in einem N -dimensionalen Unterraum. Es konnte für die hier untersuchte Struktur gezeigt werden, dass in der Regel eine Dimension von $N = 50$ ausreichend ist, um das System zu vollständig zu beschreiben. Die erzielten relativen Fehler liegen dabei in der ungefähren Größenordnung, welche sich auch als Restfehler durch die Implementierung der absorbierenden Schicht ergeben. Insbesondere vor dem Hintergrund, dass bisherige Verfahren auf Grundlage von Upwind-Differenzen wesentlich größere Abweichungen zur Referenzlösung aufweisen, können die hier erzielten Ergebnisse als akkurat eingestuft werden.

Unter den transienten Lösungsverfahren stellte sich die Krylov-Unterraum-Lösung als genaueste Zeitintegration heraus, mit welcher auch beliebig große Zeitschrittweiten bei expliziter Formulierung realisiert werden können. Neben der Krylov-Unterraum-Lösung bietet auch das Crank-Nicolson-Verfahren die Möglichkeit zur Implementierung großer Zeitschrittweiten. Jedoch ist die Formulierung implizit. Unter Ausnutzung der Matrixstruktur des vorliegenden Transportproblems ist eine numerisch effiziente Umsetzung für das Crank-Nicolson-Verfahren in Anhang E beschrieben. Die übrigen untersuchten Verfahren unterliegen aufgrund ihrer expliziten Formulierung Einschränkungen in der Wahl der Zeitschrittweite. In der Praxis müssen diese oftmals so klein gewählt werden, dass eine Vielzahl von Iterationen notwendig ist, um Untersuchungen durchzuführen. Sehr große Zeitschrittweiten von über $\Delta t = 10\text{fs}$ erwiesen sich zur Beschreibung von Quantenstrukturen jedoch wegen des nichtlinearen Selbstkonsistenzproblems oftmals als schwierig. Weiterhin muss klar sein, dass der hier gezeigte Zeitfehler in der Realität durch den Restfehler bei der Implementierung der absorbierenden Schicht maskiert wird.

9. Anwendungsbeispiele

In den vorherigen Kapiteln ist ein Formalismus auf Grundlage der LVNG-RS für verschiedene Transportmodelle erarbeitet und anhand vorwiegend stationärer Rechnungen untersucht und durch den Vergleich mit der QTBM evaluiert worden. Bereits im stationären Regime kann der vorgestellte Formalismus für eine Vielzahl von technisch relevanten Bauelementen mit verschiedenen Materialsystemen und Transportmechanismen herangezogen werden. Ein besonderer Vorteil der Methode liegt jedoch in seiner einfachen Beschreibung von instationären Prozessen im Vergleich zur QTBM oder zum NEGF-Formalismus.

Im Folgenden soll daher die Aufmerksamkeit auf einige technisch relevante Einsatzgebiete gerichtet werden. Hierzu wird in Abschnitt 9.1 zunächst eine Tunnelodiode im AlGaAs/GaAs-Materialsystem im inkohärenten Regime sowohl stationär als auch im Zeitbereich untersucht. Die Struktur- und Materialparameter sind dabei derart gewählt, dass es zu Hysterese-Effekten kommt. Hierdurch wird ein Einsatz als THz-Quelle ermöglicht. Anschließend wird eine horizontale Realisierung eines DGFETs, auch FinFET genannt, im Materialsystem Si in Abschnitt 9.2 als auch GaInAs in Abschnitt 9.3 untersucht. Für Letzteren werden die Hochfrequenzeigenschaften durch Einsatz als Verstärker im C-Betrieb untersucht.

9.1. Simulation einer AlGaAs/GaAs-Intraband-Tunnelodiode

Neben den bereits betrachteten Fällen der RTD in den letzten Kapiteln, welche zur Beurteilung der entwickelten Methoden herangezogen wurden, erlaubt dieses Bauelement eine Vielzahl interessanter Anwendungen [90].

Untersucht werden nun die Hysterese-Effekte in der I-V-Kennlinie [110, 111] und das damit verbundene grenzstabile Systemverhalten im Bauelement. Mithilfe dieser Grenzstabilität kann die RTD schließlich als Quelle im technisch bedeutsamen THz-Bereich operieren [130, 133]. Hierzu ist es notwendig, die bisherige AlGaAs/GaAs-RTD mit den Struktur- und Materialparametern aus Tabelle 8.1 zu modifizieren. Wie in nachfolgenden Abschnitten noch im Detail diskutiert

Schichtnummer	1	2	3	4	5	6	7
Weite in nm	30	3	3	4	3	3	30
Dotierung in 10^{18}cm^{-3}	2	0	0	0	0	0	2
Potenzial in eV	1,424	1,424	1,7013	1,424	1,7013	1,424	1,424
Effektive Masse in m_0	0,063	0,063	0,088	0,063	0,088	0,063	0,063
Relative Permittivität ϵ_r in ϵ_0	12,9	12,9	12,05	12,9	12,05	12,9	12,9

Tabelle 9.1. Struktur- und Materialparameter der $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ -GaAs-RTD.

wird, ist eine Verkürzung der Spacer-Länge¹ notwendig, sodass es zu einer Quantisierung der Zustände des Emitters kommt [110]. Die Länge des Spacers soll 3nm betragen. Die vollständigen Material- und Strukturparameter der RTD sind in Tabelle 9.1 eingetragen.

Konfiguration des Rechengebiets: Der Simulation liegt dabei das Gebiet $[0\text{nm}, 76\text{nm}] \times [-75\text{nm}, 75\text{nm}]$ zugrunde. Hierbei wird die Relativkoordinate $\xi \in [-75\text{nm}, 75\text{nm}]$ in $N_\xi = 201$ Gitterzellen unterteilt. Die Schwerpunktkoordinate $\chi \in [0\text{nm}, 76\text{nm}]$ wird mit $N_\chi = 153$ Abtastpunkten diskretisiert, woraus eine Diskretisierungsweite von $\Delta\chi = 0,5\text{nm}$ resultiert. Die statistische Dichtematrix wird im Unterraum mit $N = 80$ Basisfunktion aus ebenen Wellen bestimmt. Die Temperatur des Bauelements ist $T = 77\text{K}$. Für die selbstkonsistente Modellierung wird ein Abbruchkriterium von $\|\delta\mathbf{U}^s\| \leq 10^{-4}$ definiert. Zum Erreichen der geforderten Genauigkeit sind zum Teil über 400 Iterationen bei einem Spannungswert notwendig. Die Parameter für die absorbierende Schicht betragen $b_{\text{al}} = 4\text{eV}$, $w_{\text{al}} = 26,254\text{nm}$ sowie $n_{\text{al}} = 4$.

9.1.1. Hysterese-Verhalten

Zur Analyse des Hysterese-Verhaltens wird die I-V-Kennlinie zuerst in einem Vorwärts-Spannungsdurchlauf für die Spannungen von 0V bis 0,5V in Schritten von 1mV aufgezeichnet und anschließend in einem Rückwärts-Spannungsdurchlauf erneut gemessen, wodurch die Hysterese-Effekte zum Tragen kommen. Die Elektron-Phonon-Wechselwirkung wird dabei über den Kollisionsoperator (3.63) berücksichtigt und für verschiedene Zeitkonstanten τ im Folgenden untersucht.

τ -Abhängigkeit der I-V-Kennlinie: Zur Modellierung der Elektron-Phonon-Wechselwirkung innerhalb des AlGaAs/GaAs-Materialsystems unter Verwendung der Relaxationszeitnäherung kann die effektive Relaxationszeitkonstante $\tau = 525\text{fs}$ als konstant angenommen werden [134]. Um den physikalischen Einfluss des Kollisionsoperators hinsichtlich des Bauelementverhaltens zu evaluieren, werden darüber hinaus noch die Zeitkonstanten $\tau = 55\text{fs}$, $\tau = 255\text{fs}$ sowie $\tau = 1050\text{fs}$ betrachtet. Die entsprechenden I-V-Kennlinien sind für die verschiedenen Zeitkonstanten τ in Abbildung 9.1 dargestellt. Die I-V-Kennlinie für die physikalisch realistische Zeitkonstante von $\tau = 525\text{fs}$ [134] für das AlGaAs/GaAs-Materialsystem ist in Abbildung 9.1c gezeigt. In dieser ist zu erkennen, dass die Werte der Stromdichte j innerhalb des Spannungsfensters von 0,31V bis 0,36V für den Vorwärts- (vorw.) deutlich von denen im Rückwärts- (rückw.) Spannungsdurchlauf abweichen. Im Ergebnis ist ein deutliches Hysterese-Verhalten zu sehen, wie dieses auch aus Experimenten innerhalb des Materialsystems bekannt ist [135]. Insbesondere im Vorwärts-Spannungsdurchlauf ergeben sich zwei sogenannte Plateaus sowohl zwischen den Spannungsbereichen 0,31V-0,32V als auch 0,34V-0,36V, welche in Abbildung 9.1c grau hinterlegt sind. Innerhalb dieser Plateaus operiert die RTD als Oszillator im technisch relevanten THz-Frequenzbereich [130, 133], wie nachfolgend noch gesondert untersucht wird. Wird der Einfluss von Streumechanismen künstlich erhöht, indem die Zeitkonstante auf den Wert $\tau = 255\text{fs}$ verringert wird, existiert nur noch ein einziges schmales Plateau. Die Hysterese bleibt jedoch weiterhin erhalten, wie in Abbildung 9.1b dargestellt ist. Für eine Zeitkonstan-

¹Schichtnummer 2 und 6 aus Tabelle 9.1.

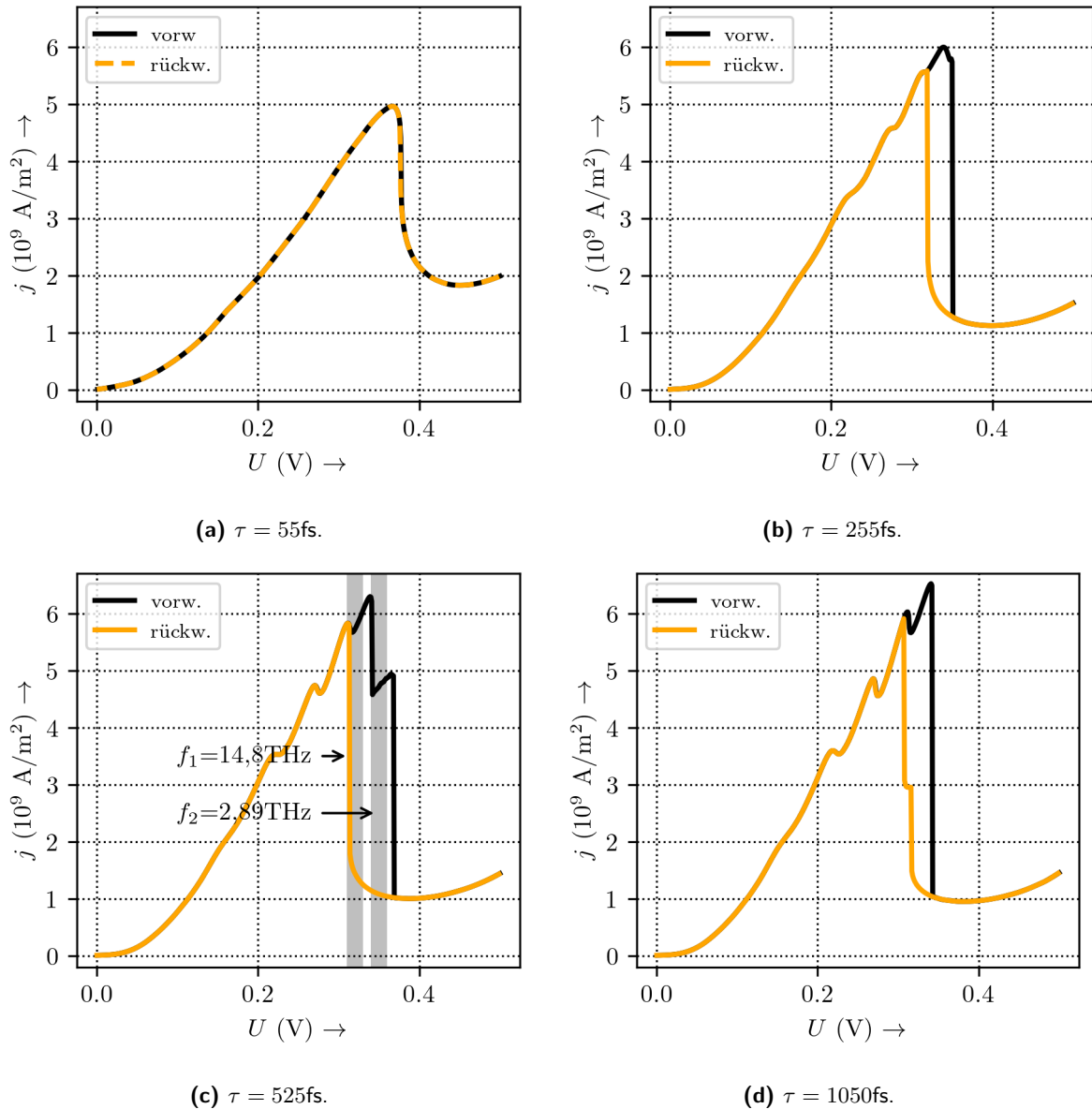


Abbildung 9.1. Stromdichte j in Abhängigkeit der angelegten Spannung U für verschiedene Relaxationszeitkonstanten τ für den Vorwärts- (vorw.) Spannungsdurchlauf (schwarze Linie) als auch Rückwärts- (rückw.) Spannungsdurchlauf (orangefarbene Linie). In (a) beträgt die Zeitkonstante $\tau = 55\text{fs}$ und entspricht einer starken Elektron-Phonon-Wechselwirkung. In (b) beträgt die Zeitkonstante $\tau = 255\text{fs}$. In (c) ist die für das Materialsystem GaAs anzunehmende Zeitkonstante $\tau = 525\text{fs}$ bei $T = 77\text{K}$ gezeigt. Zwei Plateaus ergeben sich für diesen Fall, welche durch die grauen Bereiche markiert werden. Die Zeitkonstante von $\tau = 1050\text{fs}$ in (d) entspricht der Verringerung des Einflusses der Elektron-Phonon-Wechselwirkung.

te von $\tau = 55\text{fs}$ nimmt die Elektron-Phonon-Kopplung noch stärker zu². Wie in Abbildung 9.1a gezeigt ist, weist die I-V-Kennlinie keine Hysterese mehr auf. Im Vergleich zu den übr-

²Eine kleiner werdende Zeitkonstante entspricht im Verhalten in etwa einer größeren Temperatur bei gleicher Zeitkonstante.

gen Kennlinien sind weiterhin eine Abnahme der Stromdichte im resonanten von ca. $6\text{GA}/\text{m}^{-2}$ auf ca. $5\text{GA}/\text{m}^{-2}$ als auch eine Zunahme im antiresonanten Zustand von ca. $1\text{GA}/\text{m}^{-2}$ auf ca. $2\text{GA}/\text{m}^{-2}$ festzustellen. Der andere Grenzfall ist die künstliche Verringerung des Einflusses der Elektron-Phonon-Wechselwirkung. Hierzu wird die I-V-Kennlinie für eine Zeitkonstante von $\tau = 1050\text{fs}$ untersucht, welche in Abbildung 9.1d dargestellt ist. In diesem Fall existiert neben dem Plateau im Vorwärts-Spannungsdurchlauf bei ungefähr $0,31\text{V}$ ein weiteres schmales Plateau im Rückwärts-Spannungsdurchlauf bei ungefähr $0,3\text{V}$.

Insgesamt ist aus Abbildung 9.1 zu erkennen, dass eine abnehmende Zeitkonstante τ zu einer Verringerung der "Welligkeit" in der Stromdichte zu führt. Dieses Systemverhalten ist auf die zunehmende Elektron-Phonon-Kopplung zurückzuführen, welche die scharfen energetischen Übergänge zunehmend verschmiert.

Quantisierung des Emitters - Ursprung der Hysterese: Um den Ursprung des Hysterese-Verhaltens zu erörtern, wird die RTD innerhalb des zweiten bistabilen Plateaus bei einer angelegten Spannung von $U = 0,342\text{V}$ sowohl im Vorwärts- als auch im Rückwärts-Spannungsdurchlauf analysiert. Für den Kollisionsoperator wird dabei die für das AlGaAs/GaAs-Materialsystem effektive Zeitkonstante von $\tau = 525\text{fs}$ [134] vorausgesetzt. Die Elektronendichte und das kor-

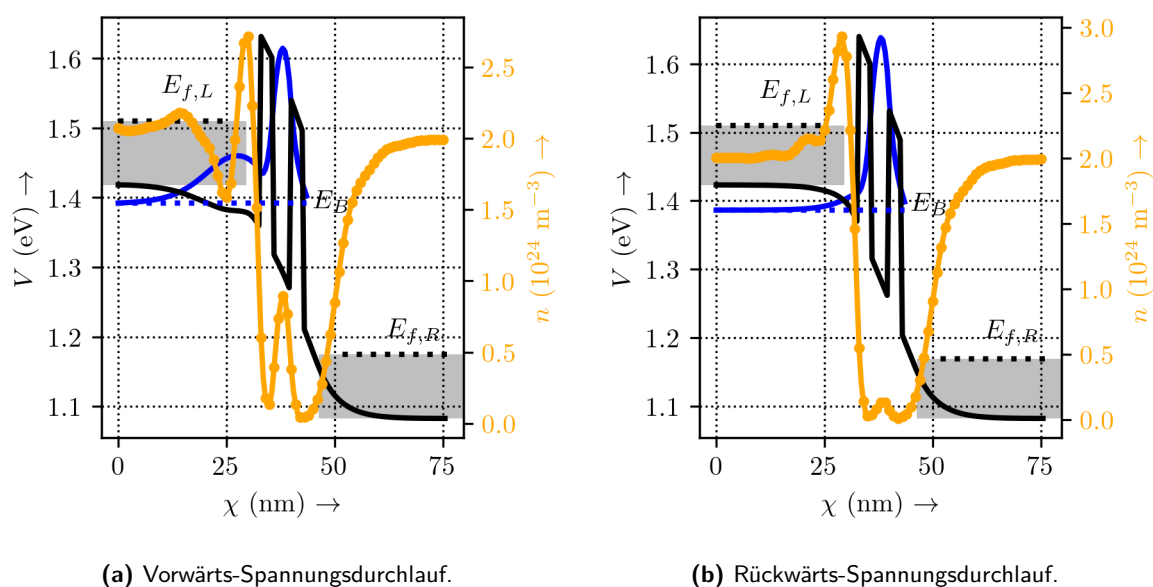
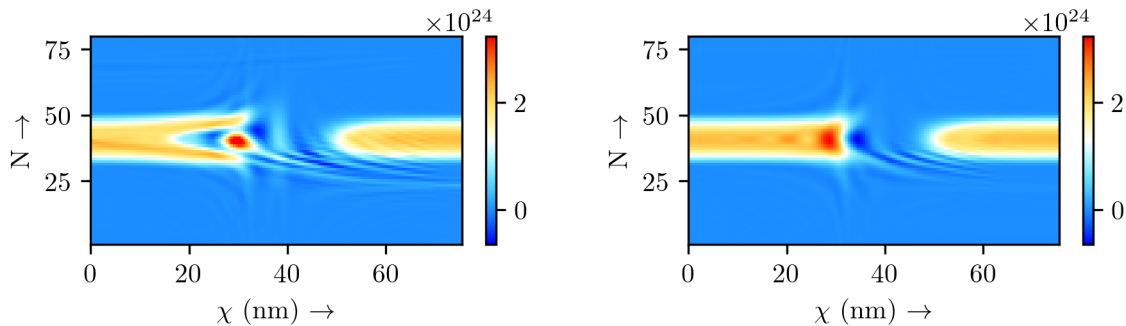


Abbildung 9.2. Elektronendichten (orangefarbene Linien) für das zweite bistabile Plateau bei einer angelegten Spannung von $U = 0,342\text{V}$ in Abhängigkeit der Transportrichtung χ im Vergleich. Zusätzlich sind die resonanten Zustände der Struktur als blaue Linien sowie deren Eigenenergien als blau gestrichelte Linien schematisch eingezeichnet. Die schwarzen Linien stellen das Potenzial der RTD dar. Die grau hinterlegten Bereiche illustrieren die energetischen Bereiche unterhalb der Fermi-Niveaus E_f (schwarze gestrichelte Linien), bei denen Teilchen in das Bauelement eintreten. In (a) ist dabei der Fall für den Vorwärts- und in (b) der Fall für den Rückwärts-Spannungsdurchlauf dargestellt.

respondierende Potenzial sind für den Vorwärts-Spannungsdurchlauf in Abbildung 9.2a darge-

stellt. Zusätzlich ist die Wellenfunktion des resonanten Zustands³ (blaue Linie) gemeinsam mit der korrespondierenden Eigenenergie in dieser Abbildung gezeigt. Wie aus Abbildung 9.1c zu erkennen ist, kommt es für diesen Fall zu einem großen Stromfluss. Dieser ist darauf zurückzuführen, dass sich beim Vorwärts-Spannungsdurchlauf auf der Seite des Emitters (um 25nm) eine Potenzialmulde bildet, in welcher Quantisierungs-Effekte in Erscheinung treten. Über die Streumechanismen ist es dann möglich, Zustände der Potenzialmulde zu besetzen. Diese wechselwirken dann mit dem gebundenen Zustand der Doppelbarrierenstruktur, wodurch schließlich ein Durchtunneln der Struktur in Richtung des Kollektors ermöglicht wird [133]. Der resonante Zustand innerhalb Abbildung 9.2a kann als Überlagerung des Grundzustands des quantisierten Emitters mit dem resonanten Zustand der Doppelbarrierenstruktur interpretiert werden. Bei der Betrachtung des Rückwärts-Spannungsdurchlaufs, wie in Abbildung 9.2b für dieselbe angelegte Spannung von $U = 0,342V$ gezeigt ist, kann hingegen keine Quantisierung des Emitters im Bereich von $\chi < 36nm$ festgestellt werden. Der gebundene Eigenzustand (blaue Linie) kann im Wesentlichen mit dem resonanten Zustand der Struktur identifiziert werden. Die Energie der einfallenden Teilchen ist nicht in Übereinstimmung mit der Eigenenergie des resonanten Zustands der Struktur, wodurch die Teilchen im Wesentlichen an der Doppelbarrierenstruktur reflektiert werden. In dieser Anti-Resonanz fließt somit nur ein geringer Strom⁴.

Dieser Zusammenhang spiegelt sich auch in den zugehörigen Entwicklungskoeffizienten $c_j(\chi)$ wider, welche in Abbildung 9.3a für den Vorwärts- und in Abbildung 9.3b für den Rückwärts-Spannungsdurchlauf dargestellt sind. Aufgrund der angesetzten Basis aus ebenen Wellen können



(a) Entwicklungskoeffizienten $c_j(\chi)$ im Vorwärts-Spannungsdurchlauf. (b) Entwicklungskoeffizienten $c_j(\chi)$ im Rückwärts-Spannungsdurchlauf.

Abbildung 9.3. Darstellung der Entwicklungskoeffizienten $c_j(\chi)$ innerhalb des zweiten bistabilen Plateaus bei einer angelegten Spannung von $U = 0,342V$ im Vorwärts- (a) als auch Rückwärts-Spannungsdurchlauf (b). Aufgrund der angesetzten Basis aus ebenen Wellen zur Lösung der LVNG-RS kann der Entwicklungskoeffizient formal mit der Wigner-Funktion identifiziert werden. In (a) kann eine hohe Besetzungsdichte innerhalb des quantisierten Emitters, ersichtlich am dunkelorange-farbenen Bereich, festgestellt werden. In (b) hingegen existieren keine quantisierten Zustände im Emitter und die eintretenden Elektronen werden hauptsächlich an der Barriere reflektiert.

diese unmittelbar mit der Wigner-Funktion und somit mit einer Phasenraumdarstellung iden-

³Dieser ist aus dem Eigenwertproblem der diskretisierten Schrödingergleichung berechnet worden, wobei der kollektorseitige Anteil der Wellenfunktion nicht von Bedeutung ist und daher nicht in die Berechnung einbezogen wird.

⁴Vergleiche hierzu die I-V-Kennlinie 9.1c.

tifiziert werden. Für den Fall des Vorwärts-Spannungsdurchlaufs kann bei $\chi \approx 30\text{nm}$ für N zwischen 35 und 45 (in der Phasenraumdarstellung also bei $k = 0$ (gebundene Zustände)) eine hohe Amplitude festgestellt werden (dunkelorange-farbener, punktförmiger Bereich in Abbildung 9.3a). Dies entspricht einer hohen Besetzungsdichte des quantisierten Emitterzustands, die sich infolge der Streumechanismen einstellt. Der punktförmige Bereich weist weiterhin einen schlauchartigen, hoch oszillierenden Ausläufer in Richtung des rechten Kontakts auf. Dieser Ausläufer veranschaulicht den Tunnelprozess innerhalb des Phasenraums, der wegen der Wechselwirkung zwischen Emitterzustand und resonantem Zustand der Doppelbarrierenstruktur stark angeregt wird. Hierdurch kommt es auch zu einer sichtbaren Amplitude innerhalb der Doppelbarrierenstruktur, welche die hohe Elektronendichte zwischen den Barrieren verursacht. Für den Fall des Rückwärts-Spannungsdurchlaufs sind die Entwicklungskoeffizienten $c_j(\chi)$ in Abbildung 9.3b dargestellt. Aus den vorherigen Untersuchungen ist bereits bekannt, dass kein quantisierter Zustand im Emitter vorliegt. Die in die RTD von linkem Kontakt eintretenden Elektronen werden im Wesentlichen an der Doppelbarrierenstruktur im Bereich bei $\chi \approx 30\text{nm}$ reflektiert. Ein schlauchartiger Ausläufer ist im Vergleich nur schwach ausgeprägt und die Verteilungsfunktion nimmt geringe Amplituden innerhalb der Doppelbarrierenstruktur bei $\chi \approx 38\text{nm}$ an.

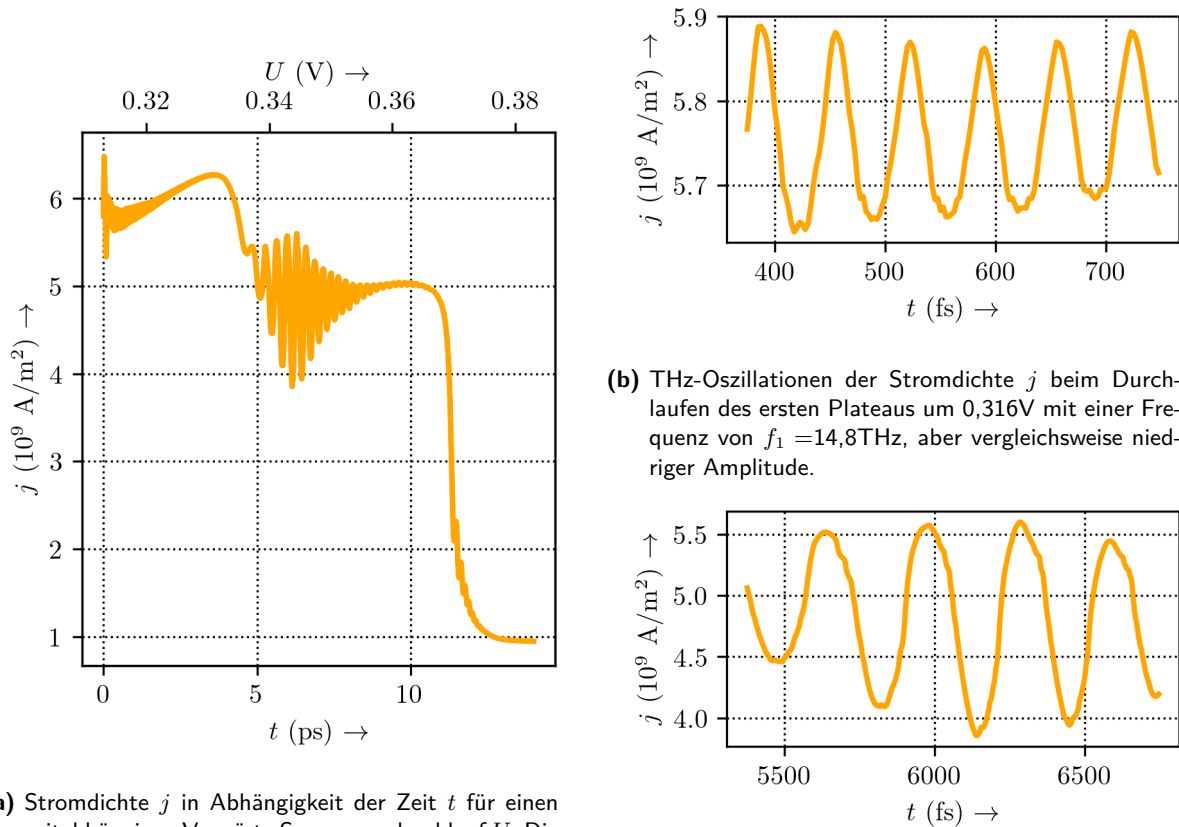
9.1.2. Einsatz als THz-Oszillator

Nun soll eine Untersuchung des zeitlichen Verhaltens des Bauelements innerhalb der Plateaus der I-V-Kennlinie erfolgen, in welchen ein Einsatz als THz-Oszillator möglich ist.

Vorliegende numerische Modelle haben diesen Aspekt zwar bereits beleuchtet [130, 133], basieren jedoch einerseits auf dem Upwind-Verfahren. Andererseits liegt keine absorbierende Schicht vor, sodass die verwendeten Methoden letztendlich den zuvor genannten, wesentlichen Nachteilen unterliegen.

Zeitabhängiger Spannungsdurchlauf zur Erzeugung von THz-Oszillationen: Zur Erzeugung der THz-Oszillationen wird die RTD ausgehend von einer Spannung $U = 0,313\text{V}$ vor dem Hysterese-Bereich mit einer flachen Spannungssteigung von 5V/ns über den Zeitraum von 14ps angeregt. Für die Zeitpropagation wird das Crank-Nicolson-Verfahren mit einer Zeitschrittweite von $\Delta t = 2,5\text{fs}$ verwendet und der Mittelwert der Stromdichte j wird aufgezeichnet. Dieser ist in Abbildung 9.4a sowohl über der Zeit als auch der entsprechenden angelegten Spannung zu dem jeweiligen Zeitpunkt dargestellt.

Wie aus Abbildung 9.4a zu sehen ist, liegen sowohl im ersten Plateau zwischen $0,31\text{V}$ - $0,32\text{V}$ als auch im zweiten Plateau zwischen $0,34\text{V}$ - $0,36\text{V}$ persistente, selbsterregte Oszillationen der Stromdichte vor. Diese sind charakteristisch für das grenzstabile Systemverhalten der RTD [130]. Im ersten Plateau oszilliert die Stromdichte mit einer Frequenz von $f_1 = 14,8\text{THz}$. Hierbei weist diese eine relativ schwache Amplitude von ca. $0,1\text{GA/m}^2$ um den Gleichanteil von $5,775\text{GA/m}^2$ auf, wie aus Abbildung 9.4b zu erkennen ist. In dem zweiten Plateau ist die Oszillation der Stromdichte mit einer Amplitude von $0,75\text{GA/m}^2$ bei Frequenz von $f_2 = 2,89\text{THz}$ um den Mittelwert von ca. $4,75\text{GA/m}^2$ vergleichsweise stark ausgeprägt, welche in Abbildung 9.4c gezeigt ist.



(a) Stromdichte j in Abhängigkeit der Zeit t für einen zeitabhängigen Vorwärts-Spannungsdurchlauf U . Die korrespondierenden Werte der Spannung zum Zeitpunkt t werden zur besseren Einordnung auf der oberen, horizontalen Achse gezeigt.

(b) THz-Oszillationen der Stromdichte j beim Durchlaufen des ersten Plateaus um 0,316V mit einer Frequenz von $f_1 = 14,8\text{THz}$, aber vergleichsweise niedriger Amplitude.

(c) THz-Oszillationen der Stromdichte j beim Durchlaufen des zweiten Plateaus um 0,342V mit einer Frequenz von $f_2 = 2,89\text{THz}$ und ausgeprägter Amplitude.

Abbildung 9.4. Darstellung der Stromdichte j in Abhängigkeit der Zeit t für einen zeitabhängigen Vorwärts-Spannungsdurchlauf U mit einer Steigung von 5GV/s von 0,31V bis 0,38V. In (a) ist der gesamte Zeitausschnitt des Spannungsdurchlaufs dargestellt. In (b) ist der zeitliche Ausschnitt beim Durchlaufen des ersten Plateaus gezeigt, der selbsterregte THz-Oszillation bei einer Frequenz von $f_1 = 14,8\text{THz}$ aufweist. In (c) ist der zeitliche Durchlauf des zweiten Plateaus dargestellt. In diesem weist die RTD THz-Oszillationen im Bereich von $f_2 = 2,89\text{THz}$ auf.

9.2. Simulation eines Si-Double-Gate-Feldeffekttransistors

In diesem Abschnitt soll der in Kapitel 3 beschriebene Ansatz auf Basis der Mode-Space-Approximation verwendet werden, um einen DGFET, bzw. FinFET, im Materialsystem Silizium mit numerischen Methoden zu analysieren. Der strukturelle und materielle Aufbau der zu untersuchenden Multigate-Transistoren ist in Abbildung 9.5 inklusive der Beschreibung der räumlichen Bereiche in verschiedenen Farben dargestellt. Multigate-Transistoren sind dabei technisch besonders interessant, da sie im Vergleich zur herkömmlichen Planartechnologie eine bessere Kanalsteuerung ermöglichen [3].

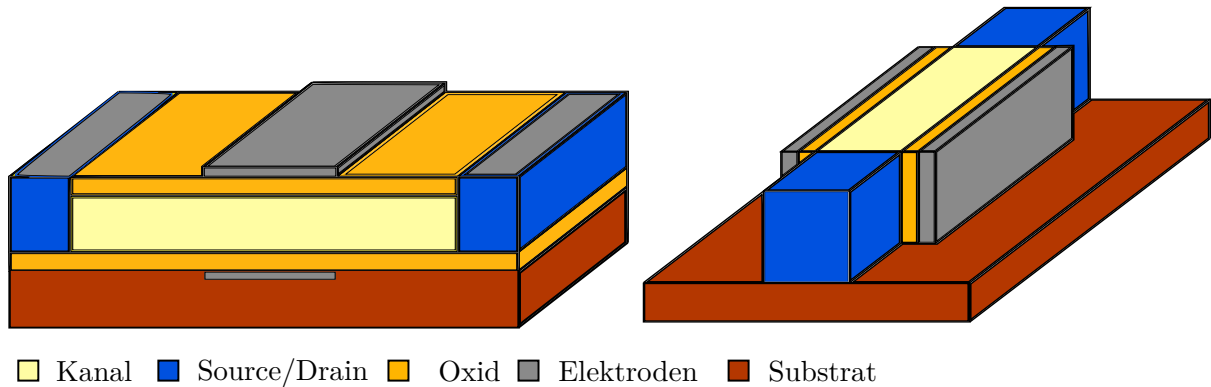


Abbildung 9.5. Schematische Darstellung von möglichen Realisierungen eines DGFETs. In der linken Abbildung ist der planare Aufbau eines DGFETs dargestellt, während in der rechten die horizontale Realisierung, welche auch FinFET genannt wird, zu sehen ist. Die unterschiedlichen Farben repräsentieren die verschiedenen Materialien entsprechend der Legende.

Struktur- und Materialparameter: Die Strukturparameter des DGFETs, welche innerhalb Abbildung 3.4 zugeordnet werden, orientieren sich an denen aus [93] und sind wie folgt festgelegt. Der Kanal weist eine Länge von $L_{ch} = 10\text{nm}$ auf und besteht aus Si. Der ebenfalls aus Si bestehende Source-, beziehungsweise Drain-Kontaktbereich, weist hingegen eine Länge von $L_s = L_d = 15\text{nm}$ auf. Diese sind entsprechend $N_s = N_d = 10^{20}\text{cm}^{-3}$ hoch dotiert. Die Weite des Kanals ist $w_{ch} = 3\text{nm}$. Das Oxidmaterial ist SiO_2 und ist 1nm dick. Die Gate-Elektrode deckt den Kanal ab $L_g = 10\text{nm}$. Der effektive Masse-Tensor von Si setzt sich aus der transversalen Komponente $m_{\text{eff,tran}} = 0,19 \cdot m_0$ sowie der longitudinalen Komponente $m_{\text{eff,long}} = 0,98 \cdot m_0$ zusammen. Die effektive Masse von SiO_2 wird hingegen als isotrop angenommen $m_{\text{eff,SiO}_2} = 0,5 \cdot m_0$. Die Bandlückenenergie des Kanalmaterials Si beträgt $E_{g,\text{Si}} = 1,12\text{eV}$. Die Bandlückenenergie des isolierenden Oxidmaterials ist durch $E_{g,\text{SiO}_2} = 8,8\text{eV}$ bestimmt. An dem Heteroübergang entspricht die Diskontinuität, die sich im Leitungsband niederschlägt, 40% der Differenz der Bandlückenenergie. Die Elektronenaffinität des Si-Kanals beträgt $q\chi = 4,05\text{eV}$ und die Austrittsarbeit der Aluminium Gate-Elektrode ist $q\phi_m = 4,1\text{eV}$. Die Permittivität des Kanals ist $\epsilon_{\text{Si}} = 11,9$, bzw. $\epsilon_{\text{SiO}_2} = 3,9$ für das Oxidmaterial und das Bauelement operiert bei Raumtemperatur $T = 300\text{K}$.

Konfiguration des Rechengebiets: Für die numerische Analyse werden die modalen Transportgleichungen (3.53) durch den ortsraumbasierten Ansatz auf Grundlage der LVNG-RS (vgl. Kapitel 6 und 8) herangezogen.

Die Transportrichtung wird dabei in äquidistante Teilgebiete der Schrittweite $\Delta z = \Delta \chi = 0,25\text{nm}$ unterteilt. Bezüglich der lateralen Richtung wird eine Diskretisierungsweite von $\Delta y = 0,2\text{nm}$ angesetzt. In die Berechnungen werden zwei Moden $N_{\text{modes}} = 2$ einbezogen. Bezüglich der Relativkoordinate wird das Gebiet $[-75\text{nm}, 75\text{nm}]$ in $N_\xi = 401$ Zellen unterteilt. Die Lösung der modalen Transportgleichungen erfolgt im Unterraum, wobei die semidiskrete, statistische Dichtematrix mit $N = 80$ ebenen Wellen entwickelt wird. Die Parameter der absorbierenden Schicht sind gemäß $b_{\text{al}} = 4\text{eV}$, $n_{\text{al}} = 4$ und $w_{\text{al}} = 26,254\text{nm}$ definiert. Als Abbruchkriterium für die selbstkonsistente Iteration wird der Wert $\|\delta U^s\| \leq 10^{-5}$ definiert.

9.2.1. Ausgangskennlinienfeld und Vergleich zum NEGF-Formalismus

Das Ausgangskennlinienfeld ist für verschiedene angelegte Gate-Spannungen in Abbildung 9.6 dargestellt. Zusätzlich ist die Referenzlösung aus dem NEGF-Ansatz zur Evaluation des vorgestellten Ansatzes in dieser Abbildung eingezeichnet. Wie aus der Abbildung 9.6 zu erkennen ist,

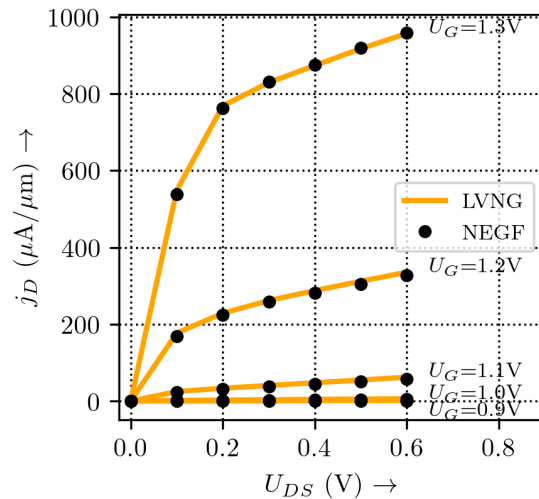


Abbildung 9.6. Ausgangskennlinienfeld für den Si-DGFET im Vergleich: Drainseitige Stromdichte j_D über der angelegten Drain-Source-Spannung U_{DS} für verschiedene Gate-Spannungen U_G . Die schwarzen Punkte stellen die Werte der Referenzlösung aus dem NEGF-Formalismus dar, wohingegen die orangefarbenen Linien die Werte der Stromdichten aus dem vorgestellten Ansatz auf Basis der LVNG-RS repräsentieren.

stimmt die Stromdichte aus der LVNG-RS qualitativ für alle Gate-Spannungen U_G und Drain-Source-Spannungen U_{DS} mit den Werten der Referenzlösung aus dem NEGF-Formalismus überein. Mit zunehmender Spannung geht der DGFET nicht in Sättigung, sondern verzeichnet einen weiteren Anstieg. Dieser Kurzkanaleffekt ist unter dem Begriff Drain-Induced-Barrier-Lowering (DIBL) bekannt. Hierbei wird die effektive Potenzialbarriere des Kanals durch eine hohe Spannung zwischen Source und Drain vermindert, wodurch die Wahrscheinlichkeit der Transmission ansteigt. Dies resultiert in einem weiteren Anstieg der Stromdichte, wie in Abbildung 9.6 dargestellt ist.

Die Elektronendichte $n(z, x)$ und das Hartree-Potenzial $U(z, x)$ sind für eine Gate-Spannung von $U_G = 1,3\text{V}$ sowie eine Drain-Source-Spannung von $U_{DS} = 0,6\text{V}$ in Abhängigkeit der lateralen x sowie Transportrichtung z in Abbildung 9.7b, beziehungsweise 9.7a dargestellt. Aus Abbildung 9.7a ist der Vorteil der Multigate-Struktur unmittelbar ersichtlich, da die Potenzialbarriere, mit welcher die Leitfähigkeit des Kanals gesteuert wird, im Bereich $z \approx 20\text{nm}$ über den gesamten Bereich der lateralen Richtung x ausgedehnt ist. Die Elektronendichte n wird für den untersuchten Arbeitspunkt drainseitig im Bereich von $z \approx 25\text{nm}$ und $x \approx 2,5\text{nm}$ abgeschnürt, wie aus Abbildung 9.7b zu erkennen ist.

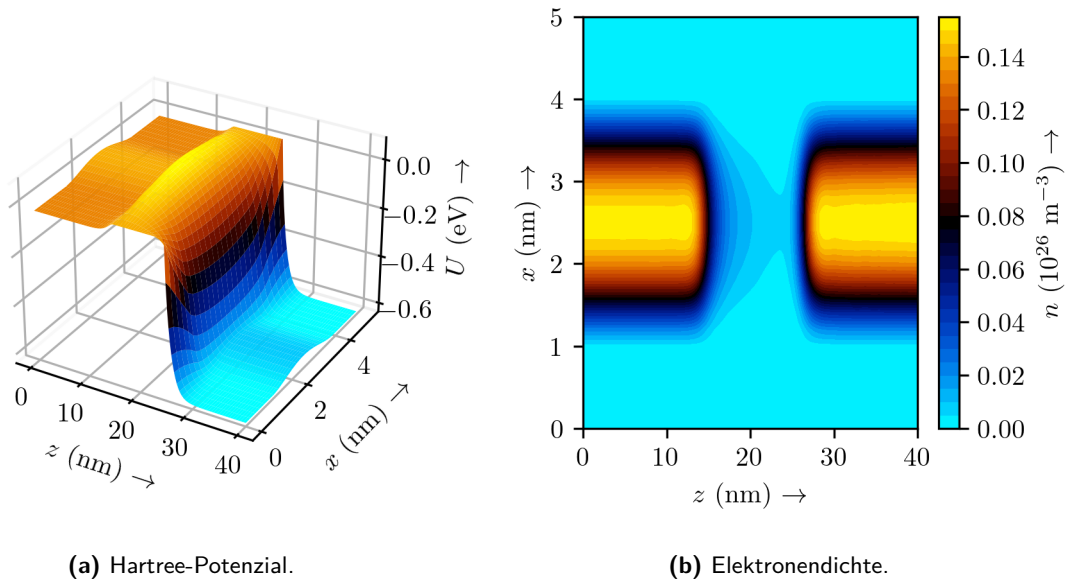


Abbildung 9.7. Interne Größen des DGFETs für eine Drain-Source-Spannung von $U_{DS} = 0,6\text{V}$ und eine Gate-Spannung von $U_G = 1,3\text{V}$. In (a) ist das Hartree-Potenzial $U(z, x)$ infolge der Berücksichtigung von Ladungsträgerwechselwirkungsmechanismen dargestellt. In (b) ist die korrespondierende Elektronendichte $n(z, x)$ gezeigt.

9.3. Simulation eines GaInAs-Double-Gate-Feldeffekttransistors

Für Anwendungen der Hoch- und Höchstfrequenztechnik unterliegt das Element Silizium starken physikalischen Grenzen, die im Wesentlichen auf die Beweglichkeit der Ladungsträger zurückzuführen sind.

Daher soll in den folgenden Untersuchungen das Kanalmaterial durch den ternären Halbleiter GaInAs ersetzt werden. Dieser Halbleiter zeichnet sich durch seine hohe Elektronenbeweglichkeit für Anwendungen in der Hochfrequenztechnik aus. Darüber hinaus ist das Material als direkter Halbleiter mit der Bandlückenenergie im nahen Infrarotbereich für elektrooptische Anwendungen prädestiniert.

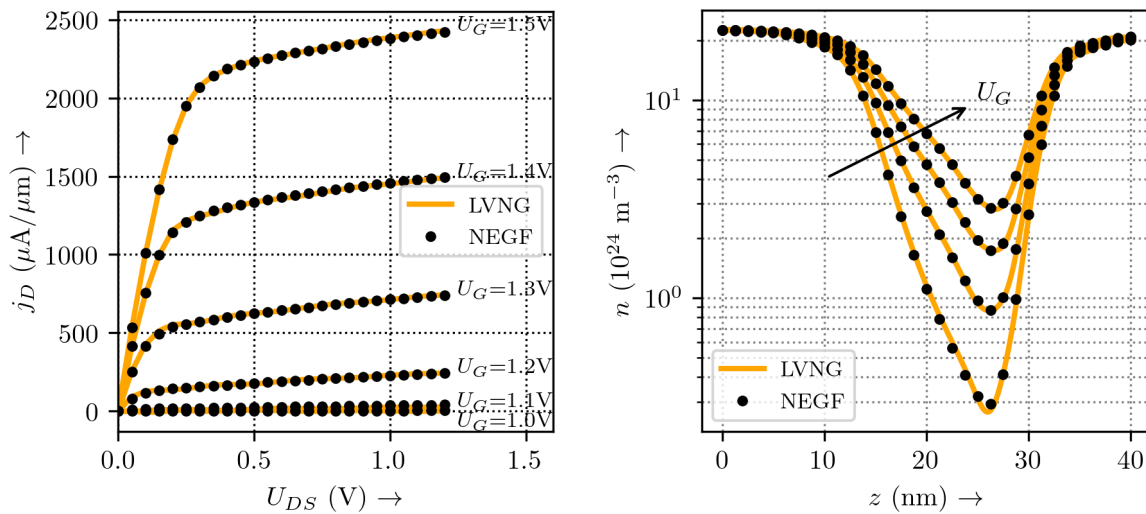
Struktur- und Materialparameter: Der strukturelle Aufbau gleicht dem des Si-DGFETs. Lediglich das Kanalmaterial als auch das Material der Gate-Elektrode und die Dotierungskonzentration werden ausgetauscht. Die Materialparameter sind [129] entnommen.

Die Bandlückenenergie des ternären Halbleiters $\text{Ga}_{0,47}\text{In}_{0,53}\text{As}$ beträgt $E_{g,\text{GaInAs}} = 0,74\text{eV}$. Die isotrope effektive Masse nimmt den Wert $m_{\text{eff}} = 0,041 \cdot m_0$ an. Source- und Drain-Bereich werden mit einer Donatordichte von $N_s = N_d = 2 \cdot 10^{19}\text{cm}^{-3}$ dotiert. Die Permittivität ist $\varepsilon_{\text{GaInAs}} = 13,9$ und die Elektronenaffinität ist $q\chi_{\text{GaInAs}} = 4,5\text{eV}$. Die Gate-Elektrode besteht aus Silber mit einer Austrittsarbeit von $q\phi_m = 4,74\text{eV}$. Ein relativer Anteil von 40% der Bandlückenenergie schlägt sich am Heteroübergang im Leitungsband nieder.

Konfiguration des Rechengebiets: Bis auf die Anzahl der in die Simulation einbezogenen Moden, die hier zu $N_{\text{modes}} = 1$ gesetzt wird, werden dieselben Diskretisierungsparameter verwendet, wie bereits beim vorherigen Beispiel des Si-DGFETs.

9.3.1. Analyse des stationären Verhaltens und Vergleich zum NEGF-Formalismus

Das Ausgangskennlinienfeld des DGFETs ist in Abbildung 9.8a sowohl für die vorgestellte Methode der LVNG-RS als auch für die Referenzlösung aus dem NEGF-Ansatz dargestellt. Zusätzlich werden die Elektronendichten n im Querschnitt bei $x = 2,5\text{nm}$ in Abhängigkeit der



- (a) Ausgangskennlinienfeld für die verschiedenen Methoden im Vergleich: Drainseitige Stromdichten j_D in Abhängigkeit der angelegten Drain-Source-Spannung U_{DS} für verschiedene Gate-Spannungen U_G . Die schwarzen Punkte stellen die Werte der Referenzlösung aus dem NEGF-Formalismus dar. Die orangefarbenen Linien kennzeichnen die berechneten Stromdichten aus dem vorgestellten Ansatz auf Basis der LVNG-RS.
- (b) Ladungsträgerdichten im Querschnitt bei $x = 2,5\text{nm}$ in Abhängigkeit der Transportrichtung z für eine angelegte Drain-Source-Spannung $U_{DS} = 1,0\text{V}$ für verschiedene Gate-Spannungen U_G von 1,1V bis 1,5V im Vergleich. Die orangefarbene Linie repräsentiert die Werte aus der vorgestellten Methode auf Basis der LVNG-RS, wohingegen die schwarzen Punkte die Werte der Referenzlösung aus dem NEGF-Formalismus darstellen. In die Richtung des schwarzen Pfeils wird die angelegte Gate-Spannung U_G erhöht.

Abbildung 9.8. Ladungsträger- n und Stromdichten j_D für die verschiedenen Methoden im Vergleich. In (a) sind die Ladungsträgerdichten dargestellt, während in (b) die Stromdichten dargestellt sind. Eine genauere Beschreibung erfolgt unter der direkten Bildunterschrift.

Transportrichtung z für eine angelegte Drain-Source-Spannung von $U_{DS} = 1,0\text{V}$ für verschiedene Gate-Spannungen U_G von 1,1V bis 1,5V in Abbildung 9.8b gezeigt. Wie aus den Abbildungen 9.8a und 9.8b ersichtlich ist, wird eine qualitative Übereinstimmung der Ergebnisse der vorgestellten Methode mit den Ergebnissen der Referenzmethode für alle angelegten Spannungen an Gate- sowie Source- und Drain-Kontakten erzielt.

Im Vergleich zum NEGF-Ansatz erlaubt die vorgestellte Methode der LVNG-RS jedoch eine deutlich zielgerichtete Formulierung des transienten Quantentransports [9, 16]. Zusätzlich ge-

staltet sich die Einbindung von Wechselwirkungsmechanismen unter Verwendung der LVNG-RS wesentlich leichter [15, 16].

Darum soll jetzt der zeitabhängige Quantentransport innerhalb des DGFETs untersucht werden. Die dargestellten Ergebnisse folgen dabei den eigenen Arbeiten aus [S10, S13].

Zur Einstellung des Arbeitspunkts soll zuvor noch die statische Steuerkennlinie bei einer konstanten Drain-Source-Spannung $U_{DS} = 1,0V$ untersucht werden. Diese ist in Abbildung 9.9 dargestellt. Wie aus dieser Abbildung zu erkennen ist, leitet der Kanal des DGFETs ab einer

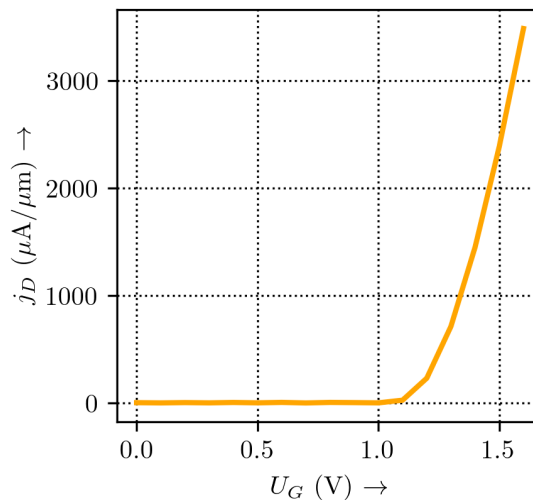


Abbildung 9.9. Steuerkennlinie: Drainseitige Stromdichte j_D in Abhängigkeit der der Gate-Spannung U_G für eine konstante Drain-Source-Spannung von $U_{DS} = 1,0V$.

Gate-Spannung von ca. $U_G = 1,1V$ bei einer Source-Drain-Spannung von $U_{DS} = 1,0V$.

9.3.2. Analyse des Schaltverhaltens im C-Betrieb

Die Modellierung der zeitabhängigen Spannung am Gate-Kontakt kann in vielerlei Hinsicht technisch relevante Einsatzmöglichkeiten repräsentieren. Auf der einen Seite ist ein Einsatz als einfacher Verstärker möglich. Auf der anderen Seite ist eine Anwendung als Mischer denkbar. Während Nichtlinearitäten für den ersten Anwendungsfall oftmals störend sein können, erlauben diese gerade erst den zweiten Anwendungsfall als Mischer.

Im Folgenden soll der dynamische Einsatz als Verstärker untersucht werden. Hierzu wird eine zeitabhängige Steuerspannung an den Gate-Kontakten

$$U_G(t) = 1,0V + 0,4V \cdot (\sin(2\pi f_1 t) + \sin(2\pi f_2 t)) \quad (9.1)$$

angelegt. Der Arbeitspunkt von $1,0V$ entspricht dabei dem C-Betrieb⁵. Die Aussteuerung um den Arbeitspunkt erfolgt mit harmonischen Trägersignalen der Frequenzen $f_1 = 180GHz$ und

⁵Der Arbeitspunkt im C-Betrieb lässt dabei maximal die positive Halbwelle eines sinusförmigen Eingangssignals durch.

$f_2 = 220\text{GHz}$. Die Source-Drain-Spannung wird mit einem Wert von $U_{DS} = 1,0\text{V}$ als zeitlich konstant angenommen. Die Zeitintegration erfolgt mithilfe des Crank-Nicolson-Verfahrens, wobei eine diskrete Zeitschrittweite von $\Delta t = 5\text{fs}$ verwendet wird.

Ausgangssignal am Verstärker: Die zeitabhängige, drainseitige Stromdichte j_D , welche sich unter den gewählten Betriebsparametern einstellt, ist als Ausgangssignal des DGFETs in Abbildung 9.10a dargestellt (orangefarbene Linie). Zusätzlich ist in dieser die Steuerspannung am Gate $U_G(t)$ als blau gestrichelte Linie eingezeichnet. Gemäß dem C-Betrieb wird nur ein Teil der positiven Halbwelle oberhalb des eingestellten Arbeitspunktes von $1,0\text{V}$ der Steuerspannung durchgelassen, wie aus Abbildung 9.10a und dem vergrößerten Zeitausschnitt in Abbildung 9.10b zu erkennen ist.

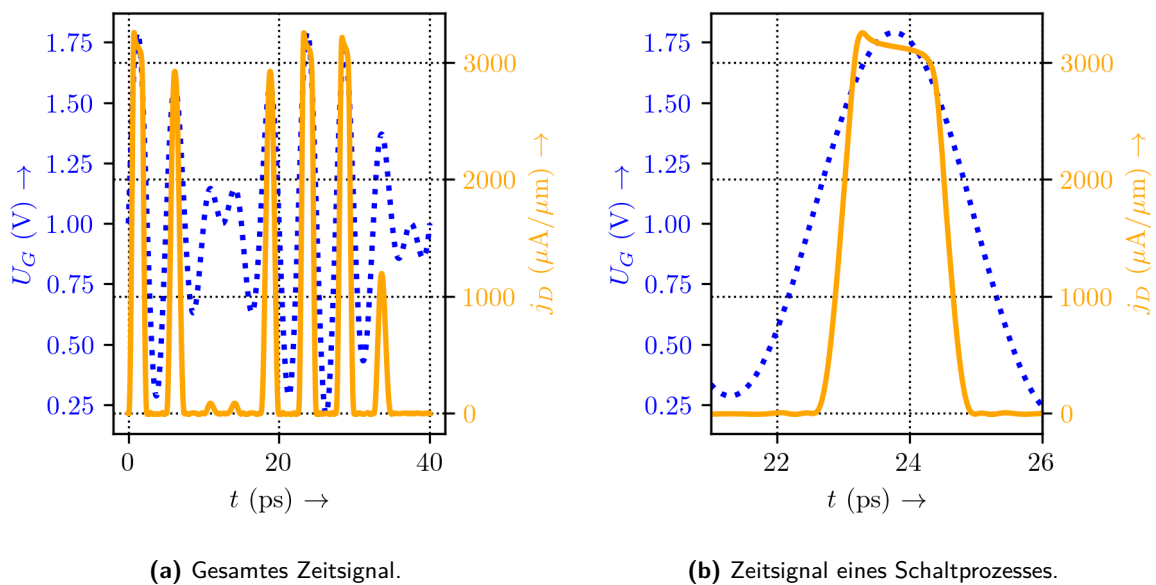


Abbildung 9.10. Stromdichte $j_D(t)$ in Abhängigkeit der Zeit t am Ausgang des DGFET (orangefarbene Linie) für eine zeitabhängige Spannung am Gate $U_G(t)$ (blau gestrichelte Linie). Die Drain-Source-Spannung U_{DS} ist dabei mit einem Wert von $U_{DS} = 1,0\text{V}$ zeitlich konstant. In (a) ist dabei das gesamte Zeitsignal dargestellt und in (b) wird exemplarisch ein einzelner Schaltprozess gezeigt.

Mischfrequenzen und Intermodulations-Effekte: Mit dem vorliegenden Arbeitspunkt innerhalb des C-Betriebs ist das Systemverhalten des DGFETs hochgradig nichtlinear. Durch diese Nichtlinearität ergeben sich für das zeitabhängige Eingangssignal am Gate-Kontakt Intermodulationsprodukte im Ausgangssignal bei den Frequenzen der Form:

$$f_{\text{IMD}} = a \cdot f_1 + b \cdot f_2 \quad \text{mit} \quad a, b \in \mathbb{Z}. \quad (9.2)$$

Diese Intermodulationsprodukte können auf der technischen Seite für additive Mischer genutzt

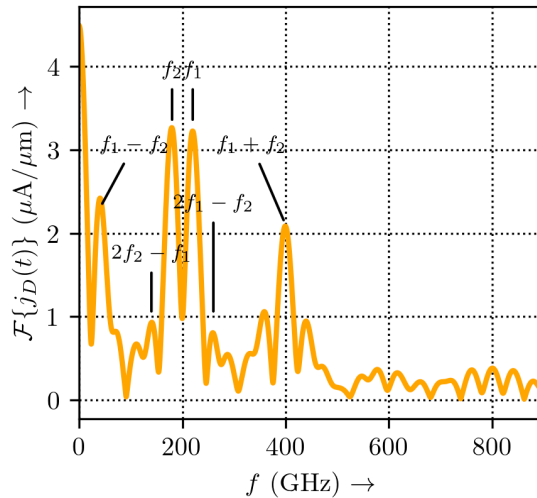


Abbildung 9.11. Spektrum der Stromdichte j_D am Ausgang des DGFETs für eine zeitabhängige Aussteuerung der Spannung am Gate $U_G(t)$ für eine konstante Drain-Source-Spannung von $U_{DS} = 1,0V$.

werden. In Abbildung 9.11 ist das Spektrum des Ausgangssignals⁶ dargestellt. Neben den für additive Mischer relevanten Intermodulationsprodukten zur Frequenzumsetzung auf $f_1 + f_2 = 400\text{GHz}$, existieren für den Verstärkungsprozess potenziell störende Intermodulationsprodukte bei den Frequenzen $2f_{1,2} - f_{2,1}$, also 140GHz und 260GHz .

Transientes Verhalten der Elektronendichte: Das zeitabhängige Verhalten der Elektronendichte $n(x, z, t)$ ist für verschiedene Zeitpunkte von $t = 0\text{ps}$ bis $t = 2,5\text{ps}$ in $0,5\text{ps}$ Abständen in Abbildung 9.12 dargestellt. Dieser Zeitverlauf repräsentiert dabei den ersten Schaltvorgang des DGFETs entsprechend der Darstellung in Abbildung 9.10a. Es werden Dirichlet-Randbedingungen an den Kontakten innerhalb der Poisson-Gleichung für die Zeitbereichssimulation implementiert, wie in Kapitel 4 beschrieben ist. Zu Beginn der Simulation bei $t = 0\text{ps}$ befindet sich das Bauelement in einem stationären Fließgleichgewicht und der DGFET ist gesperrt, wie aus der kleinen Elektronendichte im Bereich um $z \approx 25\text{nm}$ in Abbildung 9.12a zu erkennen ist. Zum Zeitpunkt $t = 0,5\text{ps}$ schaltet der DGFET durch. Infolge des transienten Nichtgleichgewichts kommt es zu einer starken Injektion von Source-Kontakt bei $z = 0\text{nm}$, welche sich in Richtung des Kanals ausbreitet. Anschließend nimmt die Elektronenkonzentration im Kanalbereich um $z \approx 25\text{nm}$ zu den Zeitpunkten $t = 1\text{ps}$ (Abbildung 9.12b) und $t = 1,5\text{ps}$ (Abbildung 9.12c) deutlich zu, während der Bereich am Source-Kontakt durch die angelegte transiente Spannung stark verarmt. In dem instationären Prozess ist somit eine kurzzeitige Verletzung der Ladungsträgerneutralität erlaubt, wie z. B. am Source-Kontakt um $z \approx 0\text{nm}$ deutlich zu erkennen ist. Insgesamt ist der DGFET in einem leitfähigen Zustand. Noch bevor er wieder ein stationäres Fließgleichgewicht erreicht, wird der DGFET zurückgeschaltet und durchläuft die eben diskutierten Punkte zum Zeitpunkt $t = 2\text{ps}$ (Abbildung 9.12d) bis $t = 2,5\text{ps}$ (Abbildung 9.12e) rückwärts. Zum Zeitpunkt $t = 2,5\text{ps}$ sperrt der DGFET wieder, wie an der kleinen Elektronendichte im Kanalbereich zu erkennen ist (vgl. Abbildung 9.12f).

⁶Der zeitliche Verlauf des Ausgangssignals ist innerhalb Abbildung 9.10a gezeigt.

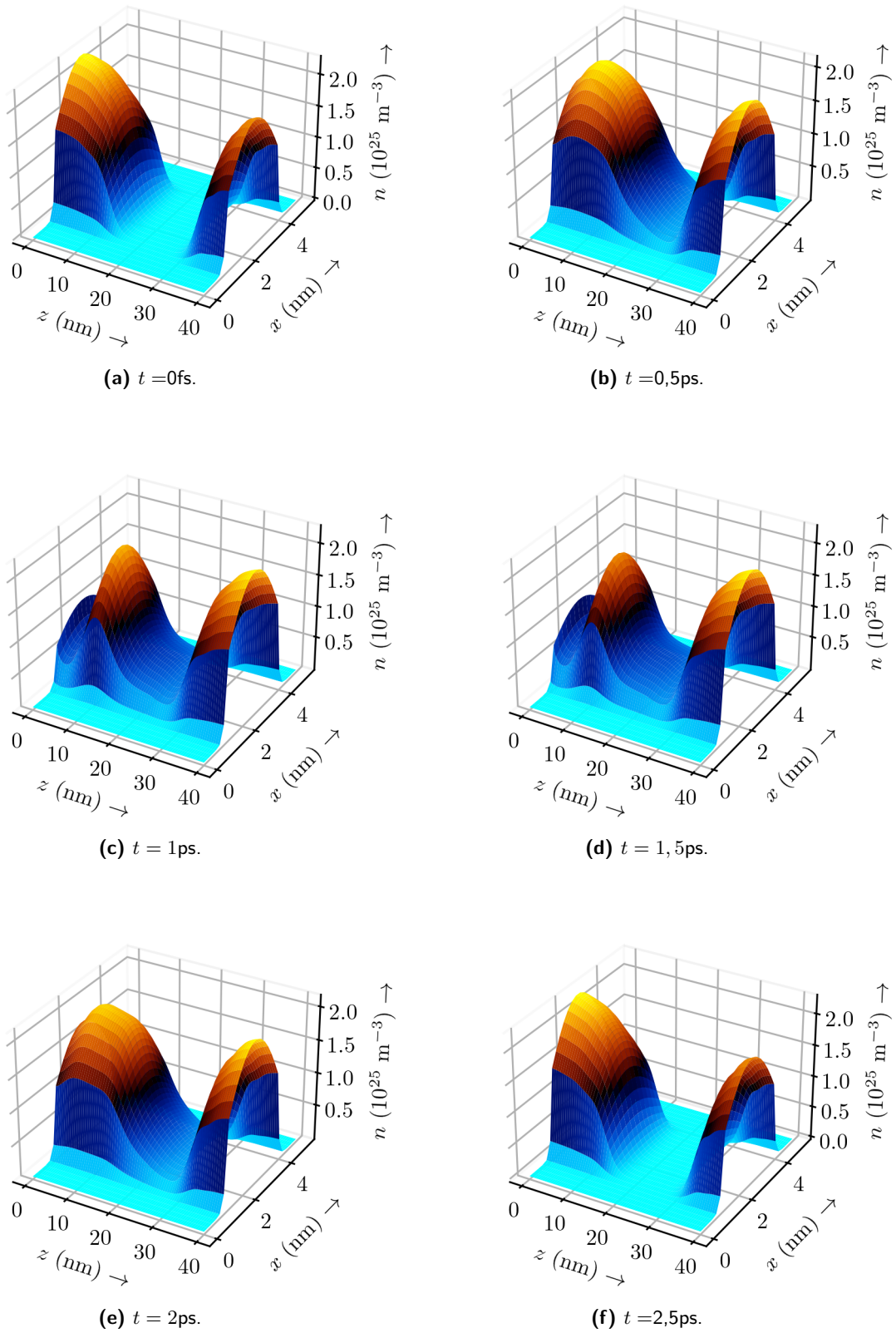


Abbildung 9.12. Instationäre Elektronendichte $n(z, x, t)$ in Abhängigkeit der lateralen Richtung x und Transportrichtung z zu verschiedenen Zeitpunkten t : (a) $t = 0\text{ps}$, (b) $t = 0,5\text{ps}$, (c) $t = 1\text{ps}$, (d) $t = 1,5\text{ps}$, (e) $t = 2\text{ps}$, (f) $t = 2,5\text{ps}$.

10. Zusammenfassung und Fazit

Die Analyse und Modellierung des Transportverhaltens innerhalb von Quantenbauelementen der Nanoelektronik, Hochfrequenztechnik und Terahertz-Technik wird im Rahmen dieser Arbeit auf Basis der Liouville-von-Neumann-Gleichung untersucht.

In Kapitel 2 werden zunächst die quantentheoretischen Grundlagen zur Beschreibung des Festkörpers vermittelt. Näherungen, deren Verständnis Grundvoraussetzung für eine adäquate Modellierung ist, werden von der Born-Oppenheimer-Approximation über die Mean-Field-Theorie bis hin zur effektiven-Masse-Näherung erarbeitet. Wichtige Konzepte der Quantenstatistik, wie der Dichtematrix-Formalismus und der Wigner-Formalismus, werden vorgestellt. Anschließend wird in Kapitel 3 auf die Herleitung der quantenkinetischen Transportgleichungen eingegangen. Neben den in der Literatur überwiegend eingesetzten Intrabandmodellen unter Annahme einer örtlich konstanten effektiven Masse werden die Modelle im Hinblick auf die Einbindung einer örtlich variierenden effektiven Masse sowie Interband- und Multisubbandmodellen formuliert. Insbesondere die Kombination mit Multisubbandmodellen auf Grundlage der ungekoppelten MSA für die Modellierung von mehrdimensionalen Komponenten wird hinsichtlich der dynamischen Anwendung erweitert und untersucht. Neben der bekannten Anforderung eines schwach veränderlichen örtlichen Modenprofils in Transportrichtung ergibt sich hierdurch zusätzlich eine Anforderung eines zeitlich nur schwach variierenden Modenprofils. Bei der Formulierung der Transportgleichungen werden hierbei Oberflächenterme infolge eines für numerische Betrachtungen abgeschlossenen Rechengebiets bereits bei der analytischen Herleitung adressiert. Die Kenntnis dieser Oberflächenterme ist für die spätere Formulierung neuartiger Formalismen zur Betrachtung der Ränder des Rechengebiets Grundvoraussetzung. Bezüglich der Selbstkonsistenz werden in Kapitel 4 die Poisson-Gleichung und deren numerische Lösung vorgestellt. Randbedingungen und Lösungsmethoden werden hinsichtlich der Anwendung im stationären und transienten Regime erarbeitet. Erweiterungen für die Modellierung von zeitabhängigen Phänomenen in mehrdimensionalen Multigate-Bauelementen auf Grundlage der MSA werden untersucht. Hierbei erweist sich die Modellierung der Kontakte unter Verwendung von Dirichlet-Randbedingungen als sinnvoll. Im Vergleich zu den vorwiegend bei stationärer Modellierung eingesetzten Neumann-Randbedingungen an Source- und Drain-Kontakt erlauben diese nicht nur eine notwendige Abweichung von der Ladungsträgerneutralität im zeitlichen Nichtgleichgewicht, sondern führen auch zu einem numerisch stabilen Algorithmus.

In Kapitel 5 werden die Randbedingungen für die Transportgleichungen untersucht. Augenmerk wird dabei nicht nur auf die anerkannten Inflow-Randbedingungen und ihre Problematik aufgrund des semiklassischen Charakters, sondern auch auf die wichtige Adressierung der Oberflächenterme infolge eines abgeschlossenen Rechengebiets gerichtet, welche bisher keine Beachtung innerhalb der Literatur gefunden hat. Die Oberflächenterme im Phasenraum korrespondieren dabei mit der Formulierung von Dirichlet-Randbedingungen im Ortsraum bezüglich der Relativkoordinate und wirken daher reflektierend. Hierdurch liegen inhärent unphysikalische Interferenzterme in der Lösung vor. Die in der Literatur vorzufindende Vernachlässigung ist so-

mit ungerechtfertigt und mit wesentlichen, konzeptionellen Fehlern verbunden. Zur Vermeidung dieser Fehler werden offene Randbedingungen formuliert. Hierzu wird sich bewährter Methoden, wie den transparenten Randbedingungen, Perfectly Matched Layers sowie einer künstlich absorbierenden Schicht, welche auf einem komplexen Potenzial fundiert, bedient. Von diesen Methoden zeichnet sich insbesondere die absorbierende Schicht aus: Aus numerischer Sicht ist die absorbierende Schicht für sämtliche Anwendungsfälle stabil. Im Vergleich zum Perfectly Matched Layer muss keine Hilfsdifferentialgleichung eingebunden werden. Die Einbindung in neue und bestehende Algorithmen ist somit unkompliziert und mit vernachlässigbar kleinem numerischen Mehraufwand verbunden. Zusätzlich kann die absorbierende Schicht sowohl für stationäre Simulationen als auch Zeitbereichssimulation effizient eingesetzt werden. Der Perfectly Matched Layer sowie die transparenten Randbedingungen sind auf Zeitbereichssimulationen oder Auswertungen bei einer festen Frequenz beschränkt. Gerade für stationäre Simulationen ist die absorbierende Schicht daher alternativlos. Aus physikalischer Sicht ergibt sich ein weiterer Vorteil, da die grundlegenden, analytischen Eigenschaften der Verteilungsfunktion von der absorbierenden Schicht unberührt bleiben. Zur Validierung der künstlich absorbierenden Schicht wird das vorwiegend eingesetzte Intrabandmodell unter Annahme einer konstanten effektiven Masse bezüglich einer exemplarischen Simulation einer Tunnelodiode herangezogen und mit den Ergebnissen ohne absorbierende Schicht sowie den Referenzlösungen auf Grundlage der anerkannten QTBM verglichen. Die Antizipation der mit dieser Rechtfertigung verbundenen numerischen Verfahren ist an dieser Stelle sinnvoll, um nicht für jedes Transportmodell eine eigene Untersuchung durchführen zu müssen. Im Vergleich können mit absorbierender Schicht unphysikalische Ergebnisse vermieden werden und es wird eine hervorragende Übereinstimmung zur QTBM erzielt.

Anschließend werden die quantenkinetischen Transportgleichungen in Kapitel 6 in eine semidiscrete Form überführt, in welcher sie nur noch von der Schwerpunktkoordinate als auch der Zeit abhängig sind und somit eine von der expliziten Wahl der Basis unabhängige Analyse ermöglichen. Die vorgestellte Finite-Volumen-Methode zur Approximation der LVNG-RS erlaubt dabei eine systematische Einbindung örtlich lokaler Effekte und Übergangsbedingungen. Im Hinblick auf die Implementierung der Inflow-Randbedingungen in den Formalismus wird eine Basistransformation benötigt. Hierzu werden verschiedene Basen auf Grundlage der Eigenvektoren der Diffusionsmatrix als auch komplexen Exponentialfunktionen untersucht. Mit der letzteren Basis kann eine formale Verbindung zum Wigner-Formalismus hergestellt werden. Im Ergebnis gelingt hiermit eine Vereinigung der Vorteile einer ortsraum-basierten Diskretisierung mit denen einer Phasenraumdarstellung. Über die Reduktion der Anzahl der Basisfunktionen kann weiterhin ein Unterraum-Verfahren etabliert werden, wobei die einzubeziehenden Basisfunktionen in Analogie zum Energiebereich bei dem NEGF-Formalismus mithilfe der Informationen des Fermi-Niveaus bestimmt werden können.

Auf Grundlage der Kenntnisse der analytischen Eigenschaften der Operatoren wird in diesem Kapitel auch eine alternative Diskretisierung eingeführt. Hiermit werden zwei Ziele verfolgt. Auf der einen Seite ermöglicht dieses Vorgehen eine Entkopplung der unabhängigen Variablen im Phasenraum, wodurch eine flexiblere Diskretisierung mit besseren Konvergenzeigenschaften erzielt wird. Im Vergleich zum herkömmlichen Ansatz im Phasenraum resultiert dieses Vorgehen jedoch in einem numerischen Mehraufwand, da die diskreten Abtastpunkte der Schwerpunkt- und Relativkoordinate sich nicht mehr dieselben Gitterpunkte im ursprünglichen Ortsraum teilen müssen. Dies führt insbesondere bei der Einbindung von nur numerisch bekannten Grö-

ßen, wie beispielsweise dem Hartree-Potenzial, zu Schwierigkeiten. In dieser Arbeit wird dieser Aspekt durch eine lineare Interpolation adressiert. Auf der anderen Seite fließen die gewonnenen Kenntnisse aus der ortsraumbasierten Darstellung vorteilhaft in die Diskretisierung des Rechengebiets ein. Hier konnte gezeigt werden, dass die Kontinuitätsgleichungen für die Relativkoordinate an dem Punkt $\xi = 0$ zu formulieren sind. Dementsprechend ist eine Berücksichtigung dieses Punktes $\xi = 0$ im Rechengebiet notwendig, sodass Erhaltungsgrößen angemessen einbezogen werden. Im Vergleich zum konventionellen Ansatz, bei welchem eine Zwangsbedingung hinsichtlich der Anzahl der Diskretisierungspunkte vorliegt und für den Intrabandtransport unter Annahme einer konstanten effektiven Masse aufgestellt wird, gilt dieser für beliebige Transportmodelle.

In Kapitel 7 wird die semidiskrete WTG unter Anwendung der konventionellen, örtlichen Upwind-Diskretisierung vorgestellt und untersucht. Anhand von Simulationen werden die Probleme der konventionellen Ansätze herausgearbeitet, welche unter Gitterverfeinerung gegen unphysikalische Ergebnisse konvergieren. Bei einer Kombination mit der absorbierenden Schicht konvergieren die Ergebnisse hingegen gegen die exakte Lösung der QTBM. Trotz dieser hervorragenden Ergebnisse ist das Upwind-Verfahren im Grundsatz nicht in der Lage, kohärente Effekte und nichtlokale Randbedingungen zu erfassen.

Daher wird in Kapitel 8 ein Formalismus auf Basis der analytischen Lösung der semidiskreten Transportgleichung unter Verwendung eines Exponentialoperators entwickelt. Hiermit gelingt sowohl die Einbeziehung kohärenter Effekte als auch die Formulierung der Randbedingungen unter Berücksichtigung der nichtlokalen Operatoren. Die allgemeine, von der Basis unabhängige Formulierung erlaubt dabei die Einbindung beliebiger Transportmodelle. Insbesondere werden technisch relevante Modelle über den in der Literatur überwiegend eingesetzten Fall des Intrabandmodells unter Annahme einer konstanten effektiven Masse hinaus erweitert und untersucht. Zum einen wird die für Heterostrukturen relevante örtliche Variation der effektiven Masse einbezogen. Am Beispiel einer stationären Simulation einer resonanten Tunnelodiode werden die verschiedenen Ansätze auf Basis der WTG und der LVNG-RS mit der QTBM verglichen. Vom Flachbandfall bis zum selbstkonsistenten Nichtgleichgewicht wird eine hervorragende Übereinstimmung für den Ansatz auf Basis der LVNG-RS erzielt. Für den Wigner-Formalismus kommt es hingegen zu leichten Abweichungen innerhalb der I-V-Kennlinie. Zum anderen werden Bandkopplungsmechanismen zur Beschreibung von Komponenten auf Grundlage des Zener-Tunneleffekts durch Interbandmodelle eingebunden. Als Simulationsbeispiel wird eine resonante Interband-Tunnelodiode herangezogen und im Phasenraum im stationären Nichtgleichgewicht analysiert. Für den Fall, dass Bandkopplungsmechanismen berücksichtigt werden, kann auf Grundlage dieses Formalismus erstmals eine Kennlinie mit negativen differentiellen Widerstand berechnet werden. Die Spannung im resonanten Zustand stimmt mit dem gebundenen Valenzbandzustand, der den Zener-Tunnelprozess assistiert, überein. Für den Fall ohne Kopplungsmechanismen entspricht die Kennlinie im Wesentlichen der I-V-Kennlinie einer Barriere. Aus den Kenntnissen der mathematischen Struktur des Exponentialoperators wird eine langsam veränderliche Einhüllende-Funktion und eine Transfermatrixmethode konstruiert, die jedoch in ihrer Anwendbarkeit im Nichtgleichgewicht limitiert sind, wie anhand von Simulationsbeispielen aufgezeigt wird.

Neben dem Einsatz im stationären Regime wird der Formalismus mit Blick auf das transiente Regime erweitert. Im Vergleich zum konventionellen Ansatz ermöglicht der entwickelte Formalismus eine nichtlokale Zeitrückwirkung der Verteilungsfunktion im Rechengebiet auf die Rand-

bedingungen. Sowohl klassische Verfahren, wie das explizite Euler-Verfahren und das Crank-Nicolson-Verfahren, als auch moderne explizite Ansätze auf Basis von Krylov-Unterraum-Verfahren sowie Low-Storage-Runge-Kutta-Verfahren werden zur numerischen Zeitintegration herangezogen. Zum Abschluss des Kapitels erfolgt eine Fehlerbetrachtung für die stationären und transienten Verfahren anhand von praxisorientierten Beispielen. Weiterhin wird die Lösung der LVNG-RS im Unterraum evaluiert. Wesentliche Erkenntnis ist, dass der Formalismus auf Basis der LVNG-RS bereits für kleine Unterraumdimensionen akkurate Ergebnisse liefert.

In Kapitel 9 werden Anwendungsbeispiele anhand des entwickelten Formalismus auf Basis der LVNG-RS in Kombination mit einem Unterraum-Verfahren simuliert. Hierzu wird das stationäre Hysterese-Verhalten einer Intraband-Tunneldiode unter Berücksichtigung der Elektron-Phonon-Wechselwirkung analysiert. Im Zeitbereich weist die Tunneldiode im Bereich der Hysterese ein grenzstabiles Systemverhalten auf. Beim zeitabhängigen Durchlaufen dieser Bereiche ergeben sich persistente, selbsterregte Oszillationen der Stromdichte. Hierdurch wird ein Einsatz der Tunneldiode als Oszillator im technisch relevanten Terahertz-Bereich ermöglicht. Zusätzlich werden FinFETs auf Basis der MSA in zwei Materialsystemen, Silizium und Galliumindiumarsenid, untersucht. Die statischen Ergebnisse werden dabei mit denen aus dem NEGF-Ansatz verglichen. Es wird eine hervorragende Übereinstimmung erzielt. Bezüglich des FinFETs im Materialsystem Galliumindiumarsenid wird der dynamische Einsatz als Hochfrequenzverstärker im C-Betrieb analysiert.

Während die konventionellen Verfahren zur Approximation der WTG noch mit zahlreichen Problemen behaftet sind und bereits für einfache Modelle im stationären Regime nicht mit den Referenzergebnissen auf Grundlage der Schrödingergleichung übereinstimmen, führen die vorgestellten Formalismen zu einer hervorragenden Übereinstimmung und somit zu einer erheblichen Verbesserung der numerischen Lösung der quantenkinetischen Transportgleichungen basierend auf der LVNG-RS. Insgesamt hat sich der Formalismus somit nicht nur als eine Alternative bezüglich des weit anerkannten stationären Quantentransports auf Grundlage der Greenschen-Funktionen, bzw. QTBM, etabliert, sondern ist im Vergleich für eine zielgerichtete Erfassung des transienten Verhaltens sowie der detaillierten Einbindung von Wechselwirkungsmechanismen prädestiniert. Neben diesen Vorteilen birgt insbesondere der ortsraumbasierte Formalismus mithilfe der semidiskreten LVNG-RS in Kombination mit dem Unterraum-Verfahren weiteres Potenzial für zukünftige Arbeiten. Auf dieser Basis können beispielsweise numerisch flexible, diskontinuierliche Galerkin-Verfahren zur Diskretisierung herangezogen werden, zu denen bereits vielversprechende Vorarbeiten durchgeführt worden sind. Hinsichtlich der Modellierung können aufgrund der ortsraumbasierten Darstellung ebenso TBM-Methoden eingebunden werden, die eine atomistische Simulation ermöglichen und somit ein weites zukunftsträchtiges Anwendungsfeld in Richtung der zeitabhängigen Molekularelektronik und Spintronik eröffnen, um nur einige Beispiele zu nennen. Bereits implementierte Algorithmen auf Grundlage der MSA können im Hinblick auf die Einbindung von Kopplungsmechanismen und geometrischer Dimensionalität erweitert werden. Auch die einzigartige, nichtlokale transiente Rückwirkung der Verteilungsfunktion auf die Randbedingungen kann genauer untersucht werden.

Liste der Publikationen

- [S1] L. Schulz und D. Schulz. “Multiband Phase Space Operator for Narrow Bandgap Semiconductor Devices”. In: *2020 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD)*. 2020, S. 383–386. DOI: 10.23919/SISPAD49475.2020.9241595.
- [S2] D. Schulz, K. Khalid und L. Schulz. “Self-Energy Approach for Solving the Wigner Transport Equation”. In: *2nd International Wigner Workshop* (2017).
- [S3] K. S. Khalid, L. Schulz und D. Schulz. “Self-Energy Concept for the Numerical Solution of the Liouville-von Neumann Equation”. In: *IEEE Trans Nanotechnol* 16.6 (Nov. 2017), S. 1053–1061. ISSN: 1941-0085. DOI: 10.1109/TNANO.2017.2747622.
- [S4] L. Schulz und 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)*. Sep. 2018, S. 75–78. DOI: 10.1109/SISPAD.2018.8551736.
- [S5] L. Schulz und D. Schulz. “Numerical Analysis of the Transient Behavior of the Non-Equilibrium Quantum Liouville Equation”. In: *IEEE Trans Nanotechnol* 17.6 (Nov. 2018), S. 1197–1205. ISSN: 1941-0085. DOI: 10.1109/TNANO.2018.2868972.
- [S6] L. Schulz und D. Schulz. “Formulation of a Complex Absorbing Potential for the transient numerical solution of the Wigner Transport Equation”. In: *International Wigner Workshop* (2019).
- [S7] L. Schulz und D. Schulz. “Subdomain Algorithm for the numerical solution of the Liouville-von-Neumann Equation”. In: *International Workshop on Computational Nanotechnology* (2019).
- [S8] L. Schulz und D. Schulz. “Complex Absorbing Potential Formalism Accounting for Open Boundary Conditions Within the Wigner Transport Equation”. In: *IEEE Trans Nanotechnol* 18 (2019), S. 830–838. ISSN: 1941-0085. DOI: 10.1109/TNANO.2019.2933307.
- [S9] L. Schulz und D. Schulz. “Formulation of a phase space exponential operator for the Wigner transport equation accounting for the spatial variation of the effective mass”. In: *J. Comput. Electron* (Juli 2020). ISSN: 1572-8137. DOI: 10.1007/s10825-020-01551-0. URL: <https://doi.org/10.1007/s10825-020-01551-0>.
- [S10] L. Schulz und 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)*. 2020, S. 331–334. DOI: 10.23919/SISPAD49475.2020.9241644.
- [S11] L. Schulz und D. Schulz. “Approximation of Multiband Hamiltonians for the Wigner Equation”. In: *International Wigner Workshop* (2021).

- [S12] L. Schulz und D. Schulz. “Application of a Slowly Varying Envelope Function Onto the Analysis of the Wigner Transport Equation”. In: *IEEE Trans Nanotechnol* 15.5 (Sep. 2016), S. 801–809. ISSN: 1941-0085. DOI: 10.1109/TNANO.2016.2581880.
- [S13] L. Schulz, M. Pech und D. Schulz. “Dynamic Modelling of Quantum Transport within MGFETs”. In: *International Workshop on Computational Nanotechnology* (2021).

Literaturverzeichnis

- [1] I. M. Ross. “The invention of the transistor”. In: *Proceedings of the IEEE* 86.1 (1998), S. 7–28. DOI: 10.1109/5.658752.
- [2] MP Mikhailova, KD Moiseev und Yu P Yakovlev. “Discovery of III–V semiconductors: physical properties and application”. In: *semiconductors* 53.3 (2019), S. 273–290.
- [3] “The International Roadmap for Devices an Systems: 2020”. In: *IEEE* (2020). URL: https://irds.ieee.org/images/files/pdf/2020/2020IRDS_MM.pdf.
- [4] W. Van Roosbroeck. “Theory of the flow of electrons and holes in germanium and other semiconductors”. In: *Bell Labs Tech. J.* 29.4 (1950), S. 560–607. DOI: 10.1002/j.1538-7305.1950.tb03653.x.
- [5] H. K. Gummel. “A self-consistent iterative scheme for one-dimensional steady state transistor calculations”. In: *IEEE Trans. Electron Devices* 11.10 (1964), S. 455–465. DOI: 10.1109/T-ED.1964.15364.
- [6] O. Madelung. *Festkörpertheorie I*. Springer Berlin Heidelberg, 1972. DOI: 10.1007/978-3-642-80673-5.
- [7] C.S. Lent und D.J. Kirkner. “The quantum transmitting boundary method”. In: *J. Appl. Phys.* 67.10 (1990), S. 6353–6359. DOI: 10.1063/1.345156.
- [8] W. R. Frensley. “Numerical evaluation of resonant states”. In: *SUPERLATTICE MICROST* 11.3 (1992), S. 347–350. ISSN: 0749-6036. DOI: [https://doi.org/10.1016/0749-6036\(92\)90396-M](https://doi.org/10.1016/0749-6036(92)90396-M).
- [9] P Vogl und T Kubis. “The non-equilibrium Green’s function method: an introduction”. In: *J. Comput. Electron* 9.3-4 (2010), S. 237–242.
- [10] R. Lake und S. Datta. “Nonequilibrium Green’s-function method applied to double-barrier resonant-tunneling diodes”. In: *Phys. Rev. B* 45.12 (1992), S. 6670.
- [11] E. Wigner. “On the Quantum Correction For Thermodynamic Equilibrium”. In: *Phys. Rev.* 40 (5 Juni 1932), S. 749–759. DOI: 10.1103/PhysRev.40.749.
- [12] J. Weinbub und D. K. Ferry. “Recent advances in Wigner function approaches”. In: *Appl. Phys. Rev.* 5.4 (2018), S. 041104. DOI: 10.1063/1.5046663.
- [13] S. Steiger u. a. “NEMO5: A Parallel Multiscale Nanoelectronics Modeling Tool”. In: *IEEE Trans. Nanotechnol.* 10.6 (2011), S. 1464–1474. DOI: 10.1109/TNANO.2011.2166164.
- [14] S. Berrada u. a. “Nano-electronic Simulation Software (NESS): a flexible nano-device simulation platform”. In: *J. Comput. Electron.* 19 (2020), S. 1031–1046.
- [15] D. K. Ferry u. a. “Complex Systems in Phase Space”. In: *Entropy* 22.10 (2020), S. 1103.

- [16] P. B. Vyas, M. L. Van de Put und M. V. Fischetti. “Master-Equation Study of Quantum Transport in Realistic Semiconductor Devices Including Electron-Phonon and Surface-Roughness Scattering”. In: *Phys. Rev. Applied* 13 (1 Jan. 2020), S. 014067.
- [17] “Numerical simulations of time-resolved quantum electronics”. In: *Phys. Rep.* 534.1 (2014). Numerical simulations of time-resolved quantum electronics, S. 1–37. ISSN: 0370-1573. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2013.09.001>.
- [18] C. Jacoboni und P. Bordone. “The Wigner-function approach to non-equilibrium electron transport”. In: *Rep. Prog. Phys.* 67.7 (Juni 2004), S. 1033–1071. DOI: 10.1088/0034-4885/67/7/r01.
- [19] D. Querlioz u. a. “A Study of Quantum Transport in End-of-Roadmap DG-MOSFETs Using a Fully Self-Consistent Wigner Monte Carlo Approach”. In: *IEEE Trans Nano-technol* 5.6 (2006), S. 737–744.
- [20] A. Dorda und F. Schürer. “A WENO-solver combined with adaptive momentum discretization for the Wigner transport equation and its application to resonant tunneling diodes”. In: *J. Comput. Phys.* 284 (2015), S. 95–116. ISSN: 0021-9991. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2014.12.026>.
- [21] S. Shao, T. Lu und W. Cai. “Adaptive conservative cell average spectral element methods for transient Wigner equation in quantum transport”. In: *Comput. Phys. Commun.* 9.3 (2011), S. 711–739.
- [22] H. Tsuchiya, M. Ogawa und T. Miyoshi. “Simulation of quantum transport in quantum devices with spatially varying effective mass”. In: *IEEE Trans. Electron Devices* 38.6 (1991), S. 1246–1252.
- [23] W. R. Frensley. “Boundary conditions for open quantum systems driven far from equilibrium”. In: *Rev. Mod. Phys.* 62.3 (Juli 1990), S. 745–792. DOI: 10.1103/RevModPhys.62.745.
- [24] W. R. Frensley. “Wigner-function model of a resonant-tunneling semiconductor device”. In: *Phys. Rev. B* 36 (3 Juli 1987), S. 1570–1580. DOI: 10.1103/PhysRevB.36.1570.
- [25] R. Proietti Zaccaria und F. Rossi. “On the problem of generalizing the semiconductor Bloch equation from a closed to an open system”. In: *Phys. Rev. B* 67 (11 März 2003), S. 113311. DOI: 10.1103/PhysRevB.67.113311.
- [26] D. Taj, L. Genovese und F. Rossi. “Quantum-transport simulations with the Wigner-function formalism: Failure of conventional boundary-condition schemes”. In: *EPL* 74.6 (Juni 2006), S. 1060–1066. DOI: 10.1209/epl/i2006-10047-3.
- [27] R. Kosik u. a. “A Revised Wigner Function Approach for Stationary Quantum Transport”. In: *International Conference on Large-Scale Scientific Computing*. Springer, 2019, S. 403–410.
- [28] D. Schulz und A. Mahmood. “Approximation of a Phase Space Operator for the Numerical Solution of the Wigner Equation”. In: *IEEE J. Quantum Electron.* 52.2 (2016), S. 1–9. DOI: 10.1109/JQE.2015.2504086.
- [29] R. Rosati u. a. “Wigner-function formalism applied to semiconductor quantum devices: Failure of the conventional boundary condition scheme”. In: *Phys. Rev. B* 88 (3 Juli 2013), S. 035401. DOI: 10.1103/PhysRevB.88.035401.

-
- [30] H. Jiang, T. Lu und W. Cai. “A device adaptive inflow boundary condition for Wigner equations of quantum transport”. In: *J. Comput. Phys.* 258 (2014), S. 773–786. ISSN: 0021-9991. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2013.11.007>.
- [31] R. Iotti, F. Dolcini und F. Rossi. “Wigner-function formalism applied to semiconductor quantum devices: Need for nonlocal scattering models”. In: *Phys. Rev. B* 96.11 (2017), S. 115420.
- [32] O. Madelung. *Festkörpertheorie II: Wechselwirkungen*. Bd. 109. Springer-Verlag, 2013.
- [33] N. Ashcroft und N. Mermin. *Solid state physics*. 1976.
- [34] E. O. Kane. “Band structure of indium antimonide”. In: *J. Phys. Chem. Solids* 1.4 (1957), S. 249–261. ISSN: 0022-3697. DOI: [https://doi.org/10.1016/0022-3697\(57\)90013-6](https://doi.org/10.1016/0022-3697(57)90013-6).
- [35] J. M. Luttinger und W. Kohn. “Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields”. In: *Phys. Rev.* 97 (4 Feb. 1955), S. 869–883. DOI: 10.1103/PhysRev.97.869.
- [36] L. C. Voon und M. Willatzen. *The kp method: electronic properties of semiconductors*. Springer Science & Business Media, 2009.
- [37] D. Ahn und S. Park. *Engineering quantum mechanics*. John Wiley & Sons, 2011.
- [38] H. Weyl. “The Theory of Groups and Quantum Mechanics Dover Publications”. In: *Inc. c 1951* (1931).
- [39] W. Case. “Wigner functions and Weyl transforms for pedestrians”. In: *Am. J. Phys.* 76.10 (2008), S. 937–946. DOI: 10.1119/1.2957889.
- [40] G. Czycholl. *Theoretische Festkörperphysik Band 1*. Springer, 2016.
- [41] P. Hohenberg und W. Kohn. “Inhomogeneous electron gas”. In: *Phys. Rev.* 136.3B (1964), B864.
- [42] J. C. Slater und G. F. Koster. “Simplified LCAO Method for the Periodic Potential Problem”. In: *Phys. Rev.* 94 (6 Juni 1954), S. 1498–1524. DOI: 10.1103/PhysRev.94.1498.
- [43] M. L. Cohen und T. K. Bergstresser. “Band Structures and Pseudopotential Form Factors for Fourteen Semiconductors of the Diamond and Zinc-blende Structures”. In: *Phys. Rev.* 141 (2 Jan. 1966), S. 789–796. DOI: 10.1103/PhysRev.141.789.
- [44] G. L. Bir und G. E. Pikus. *Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors*. 1975.
- [45] S. L. Chuang. *Physics of optoelectronic devices*. wiley New York, 1995.
- [46] G. Dresselhaus, A. F. Kip und C. Kittel. “Cyclotron Resonance of Electrons and Holes in Silicon and Germanium Crystals”. In: *Phys. Rev.* 98 (2 Apr. 1955), S. 368–384. DOI: 10.1103/PhysRev.98.368.
- [47] M. Cardona und F. H. Pollak. “Energy-Band Structure of Germanium and Silicon: The kp Method”. In: *Phys. Rev.* 142 (2 Feb. 1966), S. 530–543. DOI: 10.1103/PhysRev.142.530.
- [48] D. Verreck und G. Groeseneken. “Self-consistent 30-band simulation approach for (non-)uniformly strained confined heterostructure tunnel field-effect transistors”. In: (2017), S. 29–32.

- [49] R. Neffati, I. Saidi und K. Boujdaria. “Full-zone k.p model for the electronic structure of unstrained GaAs_{1-x}P_x and strained Al_xIn_{1-x}As alloys”. In: *J. Appl. Phys.* 112.5 (2012), S. 053716. DOI: 10.1063/1.4751353.
- [50] O. Morandi und M. Modugno. “Multiband envelope function model for quantum transport in a tunneling diode”. In: *Phys. Rev. B* 71 (23 Juni 2005), S. 235331. DOI: 10.1103/PhysRevB.71.235331.
- [51] H. Mizuta und C.J. Goodings. “Transient quantum transport simulation based on the statistical density matrix”. In: *J. Phys. Condens. Matter* 3.21 (1991), S. 3739.
- [52] H.J. Groenewold. “On the principles of elementary quantum mechanics”. In: *Physica* 12.7 (1946), S. 405–460. ISSN: 0031-8914. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0031-8914\(46\)80059-4](https://doi.org/10.1016/S0031-8914(46)80059-4).
- [53] J. E. Moyal. “Quantum mechanics as a statistical theory”. In: *Math. Proc. Camb. Philos. Soc.* 45.1 (1949), S. 99–124. DOI: 10.1017/S0305004100000487.
- [54] C. Jacoboni und P. Bordone. “The Wigner-function approach to non-equilibrium electron transport”. In: *Rep. Prog. Phys.* 67.7 (Juni 2004), S. 1033–1071. DOI: 10.1088/0034-4885/67/7/r01.
- [55] D. K. Ferry. “Phase-space functions: can they give a different view of quantum mechanics?” In: *J. Comput. Electron* 14.4 (Dez. 2015), S. 864–868. ISSN: 1572-8137. DOI: 10.1007/s10825-015-0731-z.
- [56] L. Mandel und E. Wolf. “Coherence Properties of Optical Fields”. In: *Rev. Mod. Phys.* 37 (2 Apr. 1965), S. 231–287. DOI: 10.1103/RevModPhys.37.231.
- [57] G.J. Iafrate, H.L. Grubin und D.K. Ferry. “The Wigner distribution function”. In: *Phys. Lett. A* 87.4 (1982), S. 145–148. ISSN: 0375-9601. DOI: [https://doi.org/10.1016/0375-9601\(82\)90097-4](https://doi.org/10.1016/0375-9601(82)90097-4).
- [58] J.R. Barker und S. Murray. “A quasi-classical formulation of the Wigner function approach to quantum ballistic transport”. In: *Phys. Lett. A* 93.6 (1983), S. 271–274. ISSN: 0375-9601. DOI: [https://doi.org/10.1016/0375-9601\(83\)90786-7](https://doi.org/10.1016/0375-9601(83)90786-7).
- [59] K. L. Jensen und F. A. Buot. “Numerical simulation of intrinsic bistability and high-frequency current oscillations in resonant tunneling structures”. In: *Phys. Rev. Lett.* 66 (8 Feb. 1991), S. 1078–1081. DOI: 10.1103/PhysRevLett.66.1078.
- [60] U. Ravaioli u. a. “Investigation of ballistic transport through resonant-tunnelling quantum wells using wigner function approach”. In: *Physica B+C* 134.1 (1985), S. 36–40. ISSN: 0378-4363. DOI: [https://doi.org/10.1016/0378-4363\(85\)90317-1](https://doi.org/10.1016/0378-4363(85)90317-1).
- [61] N. C. Kluksdahl u. a. “Self-consistent study of the resonant-tunneling diode”. In: *Phys. Rev. B* 39 (11 Apr. 1989), S. 7720–7735. DOI: 10.1103/PhysRevB.39.7720.
- [62] T. Claasen und W. Mecklenbrauker. “The Wigner Distribution - A tool for the time-frequency signal analysis”. In: 1980.
- [63] A. Montoya-Castillo und D. R. Reichman. “Path integral approach to the Wigner representation of canonical density operators for discrete systems coupled to harmonic baths”. In: *Int. J. Chem. Phys.* 146.2 (2017), S. 024107. DOI: 10.1063/1.4973646.
- [64] T. Hele u. a. “Boltzmann-conserving classical dynamics in quantum time-correlation functions: “Matsubara dynamics””. In: *Int. J. Chem. Phys.* 142.13 (2015), S. 134103. DOI: 10.1063/1.4916311.

-
- [65] S. Barraud. “Dissipative quantum transport in silicon nanowires based on Wigner transport equation”. In: *J. Appl. Phys.* 110.9 (2011), S. 093710. DOI: 10.1063/1.3654143.
- [66] R. Horodecki u. a. “Quantum entanglement”. In: *Rev. Mod. Phys.* 81 (2 Juni 2009), S. 865–942. DOI: 10.1103/RevModPhys.81.865.
- [67] S. Deeglise u. a. “Reconstruction of non-classical cavity field states with snapshots of their decoherence”. In: *Nature* 455.7212 (2008), S. 510–514.
- [68] B. A. Biegel und J. D. Plummer. “Comparison of self-consistency iteration options for the Wigner function method of quantum device simulation”. In: *Phys. Rev. B* 54 (11 Sep. 1996), S. 8070–8082. DOI: 10.1103/PhysRevB.54.8070.
- [69] J Garcia-Garcia u. a. “Comparison between the relaxation time approximation and the Boltzmann collision operator for simulation of dissipative electron transport in resonant tunnelling diodes”. In: *Solid State Electron.* 39.12 (1996), S. 1795–1804.
- [70] B. Biegel und J. Plummer. “Comparison of self-consistency iteration options for the Wigner function method of quantum device simulation”. In: *Phys. Rev. B* 54.11 (1996), S. 8070.
- [71] D. K. Ferry und M. Nedjalkov. *The Wigner Function in Science and Technology*. 2053-2563. IOP Publishing, 2018. ISBN: 978-0-7503-1671-2. DOI: 10.1088/978-0-7503-1671-2.
- [72] G. Borgioli, G. Frosali und P. Zweifel. “Wigner approach to the two-band Kane model for a tunneling diode”. In: *TRANSPORT THEOR STAT* 32.3-4 (2003), S. 347–366.
- [73] O. Morandi. “Multiband Wigner-function formalism applied to the Zener band transition in a semiconductor”. In: *Phys. Rev. B* 80 (2 Juli 2009), S. 024301. DOI: 10.1103/PhysRevB.80.024301.
- [74] O. Morandi. “A quantum kinetic approach for modeling a two-band resonant tunneling diode”. In: *Transport Theor. Stat.* 36 (2007), S. 159–177.
- [75] O Morandi und F Schürerer. “Wigner model for quantum transport in graphene”. In: *J. Phys. A* 44.26 (Mai 2011), S. 265301.
- [76] L. Demeio, P. Bordone und C. Jacoboni. “Numerical and analytical applications of multiband transport in semiconductors”. In: *AIP Conference Proceedings*. Bd. 663. 1. American Institute of Physics. 2003, S. 92–99.
- [77] H. Jiang, W. Cai und R. Tsu. “Accuracy of the Frensey inflow boundary condition for Wigner equations in simulating resonant tunneling diodes”. In: *J. Comput. Phys.* 230.5 (2011), S. 2031–2044. ISSN: 0021-9991. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2010.12.002>.
- [78] K. L. Jensen und F. A. Buot. “Numerical aspects on the simulation of I-V characteristics and switching times of resonant tunneling diodes”. In: *J. Appl. Phys.* 67.4 (1990), S. 2153–2155. DOI: 10.1063/1.345551.
- [79] Y. Yamada, H. Tsuchiya und M. Ogawa. “Quantum Transport Simulation of Silicon-Nanowire Transistors Based on Direct Solution Approach of the Wigner Transport Equation”. In: *IEEE Trans. Electron Devices* 56.7 (2009), S. 1396–1401.
- [80] K. Kim und B. Lee. “On the high order numerical calculation schemes for the Wigner transport equation”. In: *Solid State Electron.* 43.12 (1999), S. 2243–2245. ISSN: 0038-1101. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0038-1101\(99\)00168-9](https://doi.org/10.1016/S0038-1101(99)00168-9).

- [81] K. Kim, S. Kim und T. Tang. “Accuracy balancing for the finite-difference-based solution of the discrete Wigner transport equation”. In: *J. Comput. Electron* 16.1 (2017), S. 148–154.
- [82] K. Kim, T. Tang und S. Kim. “Accuracy balancing for the simulation of gate-all-around junctionless nanowire transistors using discrete Wigner transport equation”. In: *AIP Advances* 8.11 (2018), S. 115105. DOI: 10.1063/1.5055686.
- [83] J. Lee u. a. “Wigner Transport Simulation of Resonant Tunneling Diodes with Auxiliary Quantum Wells”. In: *J. Korean Phys. Soc.* 72.5 (2018), S. 622–627.
- [84] K. Kyoung-Youm und L. Byoungho. “Simulation of quantum transport by applying second-order differencing scheme to Wigner function model including spatially varying effective mass”. In: *Solid State Electron.* 43.1 (1999), S. 81–86. ISSN: 0038-1101. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0038-1101\(98\)00201-9](https://doi.org/10.1016/S0038-1101(98)00201-9).
- [85] K. Kim und B. Lee. “Wigner-function formulation in anisotropic semiconductor quantum wells”. In: *Phys. Rev. B* 64 (11 Aug. 2001), S. 115304. DOI: 10.1103/PhysRevB.64.115304.
- [86] J. Lee, M. Shin und J. Seo. “Performance limitations of nanowire resonant-tunneling transistors with steep switching analyzed by Wigner transport simulation”. In: *J. Appl. Phys.* 125.17 (2019), S. 174502. DOI: 10.1063/1.5085569.
- [87] J. Lee und M. Shin. “Quantum Transport Simulation of Nanowire Resonant Tunneling Diodes Based on a Wigner Function Model With Spatially Dependent Effective Masses”. In: *IEEE Trans Nanotechnol* 16.6 (2017), S. 1028–1036.
- [88] C. Zener. “A theory of the electrical breakdown of solid dielectrics”. In: *Proc. R. Soc. Lond.* 145.855 (1934), S. 523–529.
- [89] E.O. Kane. “Zener tunneling in semiconductors”. In: *J. Phys. Chem. Solids* 12.2 (1960), S. 181–188. ISSN: 0022-3697. DOI: [https://doi.org/10.1016/0022-3697\(60\)90035-4](https://doi.org/10.1016/0022-3697(60)90035-4).
- [90] J. P. Sun u. a. “Resonant tunneling diodes: Models and properties”. In: *Proceedings of the IEEE* 86.4 (1998), S. 641–660.
- [91] G. Ali, G. Frosali und C. Manzini. “On the drift-diffusion model for a two-band quantum fluid at zero-temperature”. In: *Ukrainian Math. J* 57.6 (2005), S. 723–730.
- [92] A. Gehring und H. Kosina. “Wigner function-based simulation of quantum transport in scaled DG-MOSFETs using a Monte Carlo method”. In: *J. Comput. Electron* 4.1-2 (2005), S. 67–70.
- [93] H. Jiang und W. Cai. “Effect of boundary treatments on quantum transport current in the Green’s function and Wigner distribution methods for a nano-scale DG-MOSFET”. In: *J. Comput. Phys.* 229.12 (2010), S. 4461–4475. ISSN: 0021-9991. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2010.02.008>.
- [94] R. Venugopal u. a. “Simulating quantum transport in nanoscale transistors: Real versus mode-space approaches”. In: *J. Appl. Phys.* 92.7 (2002), S. 3730–3739. DOI: 10.1063/1.1503165.
- [95] Z. Ren u. a. “nanoMOS 2.5: A two-dimensional simulator for quantum transport in double-gate MOSFETs”. In: *IEEE Trans. Electron Devices* 50.9 (2003), S. 1914–1925.

-
- [96] Y. Liu u. a. “Device Physics and Performance Potential of III-V Field-Effect Transistors”. In: *Fundamentals of III-V Semiconductor MOSFETs*. Boston, MA: Springer US, 2010, S. 31–50. DOI: 10.1007/978-1-4419-1547-4_3.
- [97] S. Barraud. “Phase-coherent quantum transport in silicon nanowires based on Wigner transport equation: Comparison with the nonequilibrium-Green-function formalism”. In: *J. Appl. Phys.* 106.6 (2009), S. 063714. DOI: 10.1063/1.3226856.
- [98] V. Sverdlov u. a. “Quantum transport in ultra-scaled double-gate MOSFETs: A Wigner function-based Monte Carlo approach”. In: *Solid State Electron.* 49.9 (2005). Special Issue: Papers Selected from the EUROSIOI Workshop Granada, 19-21 January 2005, S. 1510–1515. ISSN: 0038-1101. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.sse.2005.07.013>.
- [99] M. Luisier, A. Schenk und W. Fichtner. “Quantum transport in two- and three-dimensional nanoscale transistors: Coupled mode effects in the nonequilibrium Green’s function formalism”. In: *J. Appl. Phys.* 100.4 (2006), S. 043713. DOI: 10.1063/1.2244522.
- [100] J. Schilp, T. Kuhn und G. Mahler. “Electron-phonon quantum kinetics in pulse-excited semiconductors: Memory and renormalization effects”. In: *Phys. Rev. B* 50 (8 Aug. 1994), S. 5435–5447. DOI: 10.1103/PhysRevB.50.5435.
- [101] F. A. Buot und K. L. Jensen. “Lattice Weyl-Wigner formulation of exact many-body quantum-transport theory and applications to novel solid-state quantum-based devices”. In: *Phys. Rev. B* 42 (15 Nov. 1990), S. 9429–9457. DOI: 10.1103/PhysRevB.42.9429.
- [102] B. Biegel. “Quantum electronic device simulation”. In: (1997).
- [103] J. Fonseca u. a. “Efficient and realistic device modeling from atomic detail to the nanoscale”. In: *J. Comput. Electron* 12.4 (2013), S. 592–600.
- [104] S. Datta. *Quantum transport: atom to transistor*. Cambridge university press, 2005.
- [105] S. Datta. *Lessons from nanoelectronics: a new perspective on transport*. Bd. 1. World Scientific publishing company, 2012.
- [106] S. Datta. “The non-equilibrium Green’s function (NEGF) formalism: An elementary introduction”. In: *Digest. International Electron Devices Meeting, IEEE*. 2002, S. 703–706.
- [107] A. Savio und A. Poncet. “Study of the Wigner function at the device boundaries in one-dimensional single- and double-barrier structures”. In: *J. Appl. Phys.* 109.3 (2011), S. 033713. DOI: 10.1063/1.3526969.
- [108] I. Baldea und H. Koepfel. “A physical limitation of the Wigner “distribution” function in molecular transport”. In: *Phys. Lett. A* 376.19 (2012), S. 1645–1646. ISSN: 0375-9601. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2012.03.054>.
- [109] Z. Sun, W. Yao und T. Lu. “Optimization Modeling and Simulating of the Stationary Wigner Inflow Boundary Value Problem”. In: *J. Sci. Comput.* 85.1 (2020), S. 1–19.
- [110] P. Zhao u. a. “Simulation of resonant tunneling structures: Origin of the I–V hysteresis and plateau-like structure”. In: *J. Appl. Phys.* 87.3 (2000), S. 1337–1349. DOI: 10.1063/1.372019.
- [111] P. Zhao, H. L. Cui und D. L. Woolard. “Dynamical instabilities and $I–V$ characteristics in resonant tunneling through double-barrier quantum well systems”. In: *Phys. Rev. B* 63 (7 Jan. 2001), S. 075302. DOI: 10.1103/PhysRevB.63.075302.

- [112] M. L. Van de Put, B. Soree und W. Magnus. “Efficient solution of the Wigner–Liouville equation using a spectral decomposition of the force field”. In: *J. Comput. Phys.* 350 (2017), S. 314–325. ISSN: 0021-9991. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2017.08.059>.
- [113] J. J. Garcia-Garcia u. a. “Effects of spacer layers on the Wigner function simulation of resonant tunneling diodes”. In: *J. Appl. Phys.* 83.12 (1998), S. 8057–8061. DOI: 10.1063/1.367899.
- [114] C. Jacoboni und P. Bordone. “Wigner transport equation with finite coherence length”. In: *J. Comput. Electron* 13.1 (2014), S. 257–263.
- [115] R. Kosloff und D. Kosloff. “Absorbing boundaries for wave propagation problems”. In: *J. Comput. Phys.* 63.2 (1986), S. 363–376.
- [116] U. V. Riss und H. D. Meyer. “Calculation of resonance energies and widths using the complex absorbing potential method”. In: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 26.23 (Dez. 1993), S. 4503–4535. DOI: 10.1088/0953-4075/26/23/021.
- [117] X. Antoine u. a. “A review of transparent and artificial boundary conditions techniques for linear and nonlinear Schrödinger equations”. In: (2008).
- [118] Y. Saad. *Numerical Methods for Large Eigenvalue Problems: Revised Edition*. Bd. 66. SIAM, 2011.
- [119] M. A. Botchev, V. Grimm und M. Hochbruck. “Residual, Restarting, and Richardson Iteration for the Matrix Exponential”. In: *SIAM J. Sci. Comput.* 35.3 (2013), A1376–A1397. DOI: 10.1137/110820191.
- [120] R. Kosik, J. Cervenka und H. Kosina. “Numerical Solution of the Constrained Wigner Equation”. In: *2020 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD)*. 2020, S. 189–191. DOI: 10.23919/SISPAD49475.2020.9241624.
- [121] S. D. Gedney. “An anisotropic perfectly matched layer-absorbing medium for the truncation of FDTD lattices”. In: *IEEE Transactions on Antennas and Propagation* 44.12 (1996), S. 1630–1639. DOI: 10.1109/8.546249.
- [122] G. Ronald Hadley. “Transparent boundary condition for beam propagation”. In: *Opt. Lett.* 16.9 (Mai 1991), S. 624–626. DOI: 10.1364/OL.16.000624.
- [123] P. Ellinghaus, M. Nedjalkov und S. Selberherr. “Implications of the coherence length on the discrete Wigner potential”. In: *Proceedings 2014 International Workshop on Computational Electronics (IWCE)*. 2014, S. 1–3. DOI: 10.1109/IWCE.2014.6865852.
- [124] A. Arnold, H. Lange und P. Zweifel. “A discrete-velocity, stationary Wigner equation”. In: *J Math Phys* 41.11 (2000), S. 7167–7180. DOI: 10.1063/1.1318732.
- [125] R.J. LeVeque. *Numerical methods for conservation laws*. Bd. 3. Springer, 1992.
- [126] S. Noschese, L. Pasquini und L. Reichel. “Tridiagonal Toeplitz matrices: properties and novel applications”. In: *NUMER LINEAR ALGEBR* 20.2 (2013), S. 302–326.
- [127] R. Courant, E. Isaacson und M. Rees. “On the solution of nonlinear hyperbolic differential equations by finite differences”. In: *Commun. Pure Appl. Math.* 5.3 (1952), S. 243–255. DOI: <https://doi.org/10.1002/cpa.3160050303>.

-
- [128] C. Moler und C. Van Loan. “Nineteen Dubious Ways to Compute the Exponential of a Matrix, Twenty-Five Years Later”. In: *SIAM Rev Soc Ind Appl Math* 45.1 (2003), S. 3–49. DOI: 10.1137/S00361445024180.
- [129] I. Vurgaftman, J. R. Meyer und L. R. Ram-Mohan. “Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys”. In: *J. Appl. Phys.* 89.11 (2001), S. 5815–5875. DOI: 10.1063/1.1368156.
- [130] A. Sakurai und Y. Tanimura. “Self-excited current oscillations in a resonant tunneling diode described by a model based on the Caldeira–Leggett Hamiltonian”. In: *New J. Phys.* 16.1 (Jan. 2014), S. 015002. DOI: 10.1088/1367-2630/16/1/015002.
- [131] R. Barrett u. a. *Templates for the solution of linear systems: building blocks for iterative methods*. SIAM, 1994.
- [132] J.H. Williamson. “Low-storage Runge-Kutta schemes”. In: *J. Comput. Phys.* 35.1 (1980), S. 48–56. ISSN: 0021-9991. DOI: [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(80\)90033-9](https://doi.org/10.1016/0021-9991(80)90033-9).
- [133] Bryan A Biegel. “Wigner function simulation of intrinsic oscillations, hysteresis, and bistability in resonant tunneling structures”. In: *Ultrafast Phenomena in Semiconductors II*. Bd. 3277. SPIE. 1998, S. 159–169.
- [134] K. L. Jensen und F. A. Buot. “The effects of scattering on current-voltage characteristics, transient response, and particle trajectories in the numerical simulation of resonant tunneling diodes”. In: *J. Appl. Phys.* 67.12 (1990), S. 7602–7607. DOI: 10.1063/1.345828.
- [135] E. R. Brown u. a. “Oscillations up to 420 GHz in GaAs/AlAs resonant tunneling diodes”. In: *Appl. Phys. Lett.* 55.17 (1989), S. 1777–1779. DOI: 10.1063/1.102190.
- [136] H. A. van der Vorst. “Bi-CGSTAB: A Fast and Smoothly Converging Variant of Bi-CG for the Solution of Nonsymmetric Linear Systems”. In: *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing* 13.2 (1992), S. 631–644. DOI: 10.1137/0913035.
- [137] J. A. Meijerink und H. A. van der Vorst. “An Iterative Solution Method for Linear Systems of Which the Coefficient Matrix is a Symmetric M -Matrix”. In: *Mathematics of Computation* 31.137 (1977), S. 148–162. ISSN: 00255718, 10886842.
- [138] M.H. Carpenter und C.A. Kennedy. “Fourth-order 2N-storage Runge-Kutta schemes. 1994”. In: *NASA Technical Memorandum* 109112 (1994).

A. Schwerpunkt- und Relativkoordinaten

Eine zentrale Abbildung innerhalb der Weyl-Quantisierung ist durch die Transformation in Schwerpunkt- und Relativkoordinaten gegeben. Diese Abbildung entspricht einer Drehung des Ausgangskordinatensystems um $\frac{\pi}{4}$. Die Ortskoordinaten des nicht rotierten Systems seien durch die Variablen z und z' bestimmt. Hieraus ergeben sich die Schwerpunktkoordinate χ und die Relativkoordinate ξ zu:

$$\chi = \frac{z + z'}{2} \quad \xi = z - z'. \quad (\text{A.1})$$

Die Umkehrabbildung ist durch

$$z = \chi + \frac{1}{2}\xi \quad z' = \chi - \frac{1}{2}\xi \quad (\text{A.2})$$

gegeben. Unter Verwendung der mehrdimensionalen Kettenregel lassen sich die Ableitungen innerhalb des nicht rotierten Systems in die der Schwerpunkt- und Relativkoordinaten überführen:

$$\nabla_z = \frac{1}{2}\nabla_\chi + \nabla_\xi \quad \nabla_{z'} = \frac{1}{2}\nabla_\chi - \nabla_\xi. \quad (\text{A.3})$$

Unter der Einführung der Einheitsvektoren e_i ist der Ableitungsoperator ∇_z entsprechend $\sum_i \frac{\partial}{\partial z_i} e_i$ definiert. Hieraus lassen sich nun direkt die zweiten Ableitungen bestimmen:

$$\nabla_z^2 = \frac{1}{4}\nabla_\chi^2 + \nabla_\chi \nabla_\xi + \nabla_\xi^2 \quad \nabla_{z'}^2 = \frac{1}{4}\nabla_\chi^2 - \nabla_\chi \nabla_\xi + \nabla_\xi^2. \quad (\text{A.4})$$

Die in dieser Arbeit untersuchten Systeme lassen sich aufgrund der Translationsinvarianz lateral zur Transportrichtung auf ein örtlich eindimensionales Transportverhalten reduzieren. Für diesen Fall lauten die Ableitungen:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} &= \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} + \frac{\partial}{\partial \xi} & \frac{\partial^2}{\partial z^2} &= \frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} + \frac{\partial}{\partial \chi} \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \\ \frac{\partial}{\partial z'} &= \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \chi} - \frac{\partial}{\partial \xi} & \frac{\partial^2}{\partial z'^2} &= \frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial \chi^2} - \frac{\partial}{\partial \chi} \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial^2}{\partial \xi^2}. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

B. Algorithmus zur Assemblierung des diskreten Poisson-Operators

Algorithmus 1 Konstruktion der Poisson-Matrix $[M]$ im COO-Format

```

data := []                                     {Array zum Speichern der Daten}
ii := []                                       {Array zum Speichern des Zeilenindex}
jj := []                                       {Array zum Speichern des Spaltenindex}
numOfElem := 0                                {Integer Anzahl der Elemente}
for i = 1, ..., Nz do
  for j = 1, ..., Nz do
    if Knotentyp[i, j] = Dirichlet then
      numOfElem := numOfElem + 1
      ii[numOfElem] := Knotennummer[i, j]
      jj[numOfElem] := Knotennummer[i, j]
      data[numOfElem] := 1
    else
      valCenter := 0                            {Wert für  $\alpha_{i,j}$  mit Neumann-Randbedingung}
      if Knotentyp[i + 1, j] then
        numOfElem := numOfElem + 1
        ii[numOfElem] := Knotennummer[i, j]
        jj[numOfElem] := Knotennummer[i + 1, j]
        data[numOfElem] :=  $\alpha_{i+1,j}$ 
        valCenter := valCenter +  $\alpha_{i+1,j}$ 
      end if
      if Knotentyp[i - 1, j] then
        numOfElem := numOfElem + 1
        ii[numOfElem] := Knotennummer[i, j]
        jj[numOfElem] := Knotennummer[i - 1, j]
        data[numOfElem] :=  $\alpha_{i-1,j}$ 
        valCenter := valCenter +  $\alpha_{i-1,j}$ 
      end if
      if Knotentyp[i, j - 1] then
        numOfElem := numOfElem + 1
        ii[numOfElem] := Knotennummer[i, j]
        jj[numOfElem] := Knotennummer[i, j + 1]
        data[numOfElem] :=  $\alpha_{i,j-1}$ 
        valCenter := valCenter +  $\alpha_{i,j-1}$ 
      end if
      if Knotentyp[i, j + 1] then
        numOfElem := numOfElem + 1
        ii[numOfElem] := Knotennummer[i, j]
        jj[numOfElem] := Knotennummer[i, j + 1]
        data[numOfElem] :=  $\alpha_{i,j+1}$ 
        valCenter := valCenter +  $\alpha_{i,j+1}$ 
      end if
      numOfElem := numOfElem + 1
      ii[numOfElem] := Knotennummer[i, j]
      jj[numOfElem] := Knotennummer[i, j]
      data[numOfElem] := valCenter
    end if
  end for
end for
end for

```

C. Nebenrechnung zum komplex absorbierenden Potenzial

Die Einbindung einer lokal absorbierenden Schicht erfolgt innerhalb der Schrödingergleichung über ein komplex absorbierendes Potenzial $i\gamma$ [115, 116]. Das komplex absorbierende Potenzial $i\gamma$ nimmt hier dieselbe dämpfende Funktion wie bereits zuvor ein. Exponentiell abklingende Wellenlösungen werden in den absorbierenden Schichten angeregt. Für das Multibandmodell (3.6) lassen sich die Diagonalelemente des Hamiltonoperators unter Einbeziehung des komplex absorbierenden Potenzials als

$$\mathcal{H}_{\lambda\lambda}(z) = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m_\lambda} \frac{\partial}{\partial z} + E_\lambda(z) + U(z) - i\gamma(z) \quad (\text{C.1})$$

schreiben. Hiermit ergeben sich beim Aufstellen der LVNG (3.7) die zusätzlichen Terme durch das komplex absorbierende Potenzial in Schwerpunkt- und Relativkoordinaten entsprechend:

$$\mathcal{H}_{\lambda\lambda}(z) - \mathcal{H}_{\lambda'\lambda'}^\dagger(z) \propto -i \{ \gamma(z) + \gamma(z') \} \rightarrow -i \left\{ \gamma \left(\chi + \frac{\xi}{2} \right) + \gamma \left(\chi - \frac{\xi}{2} \right) \right\}. \quad (\text{C.2})$$

Aus diesem Ergebnis (C.2) folgt unmittelbar die geforderte gerade Parität des komplex absorbierenden Potenzials bezüglich der Relativkoordinate ξ . Diese ergibt sich erst durch die Adjungierung der Operatoren (3.7).

Eine direkte Übernahme der erzielten Ergebnisse für die Anwendung innerhalb der Transportmodellierung auf Basis der LVNG-RS wäre jedoch nicht zweckmäßig. Insbesondere, da eine Abhängigkeit des Ausdrucks des komplex absorbierenden Potenzials bezüglich der Schwerpunktkoordinate vorliegt. Hierdurch würden in derselben Weise die eintretenden Teilchen gedämpft werden [S8], welche durch die Inflow-Randbedingungen beschrieben werden.

D. Nebenrechnungen zum Exponentialoperator

Im Folgenden sind einige Nebenrechnungen bezüglich des Exponentialoperator-Ansatzes dargestellt.

D.1. Verknüpfung der Differenzenquotienten

Das Ziel dieses Abschnitts ist eine aus dem Exponentialoperator geschlossene Herleitung für den Ausdruck

$$\frac{\partial}{\partial \chi} \Psi(\chi_{i+1}) - \frac{\partial}{\partial \chi} \Psi(\chi_i) \quad (\text{D.1})$$

auf der linken Seite von (8.26) zu finden. Die Ableitungen sind dabei in einfache Differenz- und Summenterme bezüglich der Funktion Ψ auf den Gitterpunkten zu überführen. Die Auswertung des linken benachbarten $i + 1$ -ten Teilgebiets liefert aus (8.22):

$$\frac{2}{\Delta \chi} (\Psi(\chi_{i+2}) - \Psi(\chi_{i+1})) = \frac{\partial}{\partial \chi} \Psi(\chi_{i+2}) + \frac{\partial}{\partial \chi} \Psi(\chi_{i+1}). \quad (\text{D.2})$$

Für das rechte angrenzende Teilgebiet für den Wert $i - 1$ ergibt sich analog:

$$\frac{2}{\Delta \chi} (\Psi(\chi_i) - \Psi(\chi_{i-1})) = \frac{\partial}{\partial \chi} \Psi(\chi_i) + \frac{\partial}{\partial \chi} \Psi(\chi_{i-1}). \quad (\text{D.3})$$

Das Bilden der Differenz dieser beiden Beziehungen, (D.2) und (D.3), resultiert in:

$$\frac{\partial}{\partial \chi} \Psi(\chi_{i+1}) - \frac{\partial}{\partial \chi} \Psi(\chi_i) = \frac{2}{\Delta \chi} (\Psi(\chi_{i+2}) - \Psi(\chi_{i+1}) - \Psi(\chi_i) + \Psi(\chi_{i-1})) - \frac{\partial}{\partial \chi} \Psi(\chi_{i+2}) + \frac{\partial}{\partial \chi} \Psi(\chi_{i-1}). \quad (\text{D.4})$$

Die letzten beiden Terme in dieser Gleichung sind noch störend. Im Folgenden werden diese mithilfe der Anwendung des Exponentialoperators in Ausdrücke der Funktion Ψ auf den Gitterpunkten umformuliert. Durch die zweimalige Anwendung des Differenzialoperators wird das i -te mit dem $i + 2$ -te Teilgebiet verknüpft. Die Auswertung der ersten Zeile der Blockmatrix liefert den Zusammenhang:

$$\frac{1}{\Delta \chi} (\Psi(\chi_{i+2}) - \Psi(\chi_i)) = \frac{\partial}{\partial \chi} \Psi(\chi_{i+2}) + \frac{\partial}{\partial \chi} \Psi(\chi_i). \quad (\text{D.5})$$

Analog ergibt sich aus der Verknüpfung des $i - 1$ -ten mit dem $i + 1$ -ten Teilgebiet der Ausdruck:

$$\frac{1}{\Delta \chi} (\Psi(\chi_{i+1}) - \Psi(\chi_{i-1})) = \frac{\partial}{\partial \chi} \Psi(\chi_{i+1}) + \frac{\partial}{\partial \chi} \Psi(\chi_{i-1}). \quad (\text{D.6})$$

Die Differenz dieser beiden Relationen, (D.5) und (D.6), liefert den gewünschten Term entsprechend:

$$-\frac{\partial}{\partial\chi}\Psi(\chi_{i+2}) + \frac{\partial}{\partial\chi}\Psi(\chi_{i-1}) = -\left(\frac{\partial}{\partial\chi}\Psi(\chi_{i+1}) - \frac{\partial}{\partial\chi}\Psi(\chi_i)\right) - \frac{1}{\Delta\chi}(\Psi(\chi_{i+2}) - \Psi(\chi_{i+1}) - \Psi(\chi_i) + \Psi(\chi_{i-1})). \quad (\text{D.7})$$

Das Einsetzen dieses Ausdrucks in (D.4) liefert dann schließlich den geschlossenen Zusammenhang:

$$\frac{\partial}{\partial\chi}\Psi(\chi_{i+1}) - \frac{\partial}{\partial\chi}\Psi(\chi_i) = \frac{\Psi(\chi_{i+2}) - \Psi(\chi_{i+1}) - \Psi(\chi_i) + \Psi(\chi_{i-1})}{2\Delta\chi}. \quad (\text{D.8})$$

D.2. Über die physikalischen Ausbreitungseigenschaften

Für die Untersuchung der generischen, semidiskreten Transportgleichung (8.1) wird exemplarisch ein Teilgebiet $\chi \in [\chi_i, \chi_{i+1}]$ mit stückweise konstanten Eigenschaften betrachtet:

$$\frac{\partial}{\partial\chi}\Psi(\chi) + [\mathbf{\Gamma}]\Psi(\chi) = \mathbf{0}. \quad (\text{D.9})$$

Eine detaillierte Herleitung für den Wigner-Formalismus ist in [28] zu finden. Die Matrix $[\mathbf{\Gamma}]$ ist dabei als $[\mathbf{\Gamma}] = [\mathbf{D}_1]^{-1} [\mathbf{D}_0(\chi_{i+\frac{1}{2}})]$ definiert. Der Vektor Ψ weist insgesamt eine Dimension von $N_\Psi \times 1$ auf, von denen die ersten $N_\Psi/2$ Punkte der Ausbreitung in χ -Richtung zugeordnet werden können. Diese werden durch den Vektor Ψ^+ adressiert. Die verbleibenden $N_\Psi/2$ Werte beschreiben die Ausbreitung entgegen der χ -Richtung und werden in dem Vektor Ψ^- zusammengefasst. In Analoger Weise kann auch die Matrix $[\mathbf{\Gamma}]$ in vier Untermatrizen $[\mathbf{\Gamma}_{11}]$, $[\mathbf{\Gamma}_{12}]$, $[\mathbf{\Gamma}_{21}]$ und $[\mathbf{\Gamma}_{22}]$ unterteilt werden. Hiermit kann (D.9) als

$$\frac{\partial}{\partial\chi} \begin{pmatrix} \Psi^+(\chi) \\ \Psi^-(\chi) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} [\mathbf{\Gamma}_{11}] & [\mathbf{\Gamma}_{12}] \\ [\mathbf{\Gamma}_{21}] & [\mathbf{\Gamma}_{22}] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi^+(\chi) \\ \Psi^-(\chi) \end{pmatrix} \quad (\text{D.10})$$

geschrieben werden. Für weitere Betrachtungen ist es zweckmäßig, eine Transformation in die Funktionen Φ^+ und Φ^- entsprechend

$$\begin{pmatrix} \Psi^+(\chi) \\ \Psi^-(\chi) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \exp([\mathbf{\Gamma}_{11}]\chi) & 0 \\ 0 & \exp([\mathbf{\Gamma}_{22}]\chi) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi^+(\chi) \\ \Phi^-(\chi) \end{pmatrix} \quad (\text{D.11})$$

vorzunehmen. Die Funktionen Φ^\pm sind dabei in derselben Weise mit der Ausbreitungsrichtung verknüpft wie die Ausgangsfunktionen Ψ^\pm . Die Anwendung der Transformation (D.11) auf (D.10) führt unter Ausnutzung der Produktregel zu dem System gekoppelter Differenzialgleichungen:

$$\frac{\partial}{\partial\chi} \begin{pmatrix} \Phi^+(\chi) \\ \Phi^-(\chi) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \exp(-[\mathbf{\Gamma}_{11}]\chi) [\mathbf{\Gamma}_{12}] \exp([\mathbf{\Gamma}_{22}]\chi) \\ \exp(-[\mathbf{\Gamma}_{22}]\chi) [\mathbf{\Gamma}_{21}] \exp([\mathbf{\Gamma}_{11}]\chi) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi^+(\chi) \\ \Phi^-(\chi) \end{pmatrix}. \quad (\text{D.12})$$

In dieser Form können wesentliche Aussagen über das Systemverhalten gemacht werden. Diese erlauben dann Rückschlüsse auf numerische Approximationen. Die Wellen in einer Richtung

sind mit denen der entgegengesetzten Richtung inhärent gekoppelt. Die Auswertung der ersten Zeile liefert beispielsweise den Zusammenhang, dass die Änderungen der hinlaufenden Wellen proportional zu den rücklaufenden Wellen sind. Über die Beziehung (D.11) gilt diese Aussage auch für Ψ^\pm . Eine Separation der beiden die Ausbreitungsrichtung beschreibenden Komponenten Ψ^\pm ist somit vom physikalischen Betrachtungspunkt nicht sinnvoll. Unglücklicherweise ist dies jedoch gerade die Annahme für die Anwendung der Upwind-Verfahren (Kapitel 7). Hiermit wird die Aussage bestätigt, dass die Upwind-Verfahren vom physikalischen Standpunkt aus ungerechtfertigt sind.

Für den Fall, dass der Driftoperator Null ist, verschwinden die Blocknebendiagonalen $[\mathbf{\Gamma}_{21}]$ und $[\mathbf{\Gamma}_{12}]$. Das System (D.12) ist dann entkoppelt und das Upwind-Verfahren somit gültig und physikalisch sinnvoll. Eine ähnliche Aussage folgt für ein konstantes Potential, für welches jedoch eine andere Transformationsmatrix anzusetzen ist.

E. Verfahren zur numerischen Zeitintegration

Zur quantenkinetischen Beschreibung des Systems werden ebenfalls numerische Methoden benötigt. Die numerische Mathematik stellt hierzu eine Vielzahl an Zeitintegrationsverfahren zur Verfügung, welche die formale Lösung des Systems (8.62) mithilfe einer Matrix-Exponentialfunktion entsprechend

$$\hat{\Psi}(t_i + \Delta t) = \exp([\mathbf{U}(t_i)] \Delta t) \cdot \hat{\Psi}(t_i) \quad (\text{E.1})$$

approximieren. Diese sollen im Folgenden beleuchtet werden.

E.1. Euler-Verfahren

Das Euler-Verfahren [23, 24] stellt das wohl einfachste Verfahren zur Zeitintegration dar. Es kann sowohl explizit als

$$\hat{\Psi}(t_i + \Delta t) = [[\text{Id}] + [\mathbf{U}(t_i)] \Delta t] \cdot \hat{\Psi}(t_i) \quad (\text{E.2})$$

als auch implizit gemäß

$$\hat{\Psi}(t_i + \Delta t) = [[\text{Id}] - [\mathbf{U}(t_i)] \Delta t]^{-1} \cdot \hat{\Psi}(t_i) \quad (\text{E.3})$$

formuliert werden. Die beiden Verfahren ergeben sich aus der formalen Lösung (E.1) durch Anwendung der Taylor-Reihenentwicklung bis zum linearen Glied. Bei der expliziten Variante wird die Matrix-Exponentialfunktion auf der rechten Seite entwickelt. Bei der impliziten Variante wird sie hingegen zuerst auf die linke Seite gebracht und anschließend entwickelt. Die Ermittlung der Verteilungsfunktion zum nächsten Zeitschritt ist dann mit der Lösung eines Gleichungssystems verbunden. Hierdurch ist die Lösungsfindung zwar deutlich aufwendiger, aber im Vergleich zum expliziten Euler-Verfahren liegt auch ein größerer Stabilitätsbereich vor, der die Wahl größerer Zeitschrittweiten Δt begünstigt [24].

E.2. Crank-Nicolson-Verfahren

Das Crank-Nicolson-Verfahren [S9, 101, 111, 113] zählt zu den impliziten Verfahren. Im Zusammenhang mit dem Wigner-Formalismus wird auch von der Cayley-Form gesprochen [101]. Die Diskretisierungsgleichung ergibt sich aus der Anwendung der Padé-Approximation auf die

Matrix-Exponentialfunktion in (E.1). Zähler- und Nennerpolynom werden dabei bis zum linearen Term berücksichtigt:

$$\hat{\Psi}(t_i + \Delta t) = \left[[\text{Id}] - [\mathbf{U}(t_i)] \frac{\Delta t}{2} \right]^{-1} \left[[\text{Id}] + [\mathbf{U}(t_i)] \frac{\Delta t}{2} \right] \cdot \hat{\Psi}(t_i). \quad (\text{E.4})$$

Im Vergleich zum Euler-Verfahren ist das Crank-Nicolson-Verfahren normerhaltend [101]. Da die Matrix $[\mathbf{U}]$ in der Regel nicht dünnbesetzt ist, wird von links mit der Matrix $[\mathbf{T}]$ multipliziert. Im Ergebnis wird eine Darstellung mit den dünnbesetzten Matrizen $[\mathbf{T}]$ und $[\mathbf{S}(t_i)]$ erzielt:

$$\left[[\mathbf{T}] - [\mathbf{S}(t_i)] \cdot \frac{\Delta t}{2} \right] \hat{\Psi}(t_i + \Delta t) = \left[[\mathbf{T}] + [\mathbf{S}(t_i)] \cdot \frac{\Delta t}{2} \right] \cdot \hat{\Psi}(t_i). \quad (\text{E.5})$$

Implementierungsaspekte: Für die numerisch effiziente Umsetzung des Crank-Nicolson-Verfahrens wird (E.5) in iterativer Weise mithilfe eines konjugierten-Gradienten-Verfahrens [136] gelöst [S9]. Um eine wesentliche Reduktion der Rechenzeit zu erhalten, wird ein Prädiktionierer aus der linken Seite der Matrix $\left[[\mathbf{T}] - [\mathbf{S}(t_i)] \cdot \frac{\Delta t}{2} \right]$ durch eine unvollständige LU-Zerlegung [137] berechnet.

E.3. Runge-Kutta-Verfahren

Das klassische Runge-Kutta-Verfahren vierter Ordnung [21, 112] ist ein explizites Einschritt-Verfahren mit hoher Genauigkeit ($O(\Delta t^4)$). Für die Berechnung der Verteilungsfunktion zum nächsten Zeitschritt werden Hilfwerte in verschiedenen Stufen berechnet. Für eine kompakte Notation ist es hilfreich, den Ausdruck (8.62) als

$$\frac{d}{dt} \hat{\Psi}(t) = f(t, \hat{\Psi}(t)) \quad (\text{E.6})$$

umzuschreiben. Mit dieser Notation sind die Steigungen $\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4$ zu den Stufen eins bis vier durch die Ausdrücke

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_1 &= f\left(t_i, \hat{\Psi}(t_i)\right) \\ \mathbf{k}_2 &= f\left(t_i + \frac{1}{2}\Delta t, \hat{\Psi}(t_i) + \frac{1}{2}\Delta t \mathbf{k}_1\right) \\ \mathbf{k}_3 &= f\left(t_i + \frac{1}{2}\Delta t, \hat{\Psi}(t_i) + \frac{1}{2}\Delta t \mathbf{k}_2\right) \\ \mathbf{k}_4 &= f\left(t_i + \Delta t, \hat{\Psi}(t_i) + \Delta t \mathbf{k}_3\right) \end{aligned} \quad (\text{E.7})$$

definiert [21], wobei der Wert der nächst höheren Stufe von den Werten der vorherigen Stufe abhängt. Hiermit ergibt sich die Verteilungsfunktion zum nächsten Zeitschritt als gewichtete Akkumulation der Steigungen:

$$\hat{\Psi}(t_i + \Delta t) = \hat{\Psi}(t_i) + \frac{\Delta t}{6} (\mathbf{k}_1 + 2\mathbf{k}_2 + 2\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4). \quad (\text{E.8})$$

Für sehr große Systeme kann die zusätzliche Speicherung der vier Steigungen hinderlich sein. Um diesen Aspekt zu adressieren sind die LSRK entwickelt worden [132], welche als spezielle Runge-Kutta-Verfahren auf geringen Speicherbedarf optimiert sind. Hierbei werden die Steigungen \mathbf{k}_j sowie die Hilfwerte $\tilde{\Psi}_j$ über die Rekursionsvorschrift

$$\begin{aligned}\mathbf{k}_j &:= A_j \cdot \mathbf{k}_{j-1} + \Delta t \cdot f(t_j + c_j \Delta t, \tilde{\Psi}_{j-1}) \\ \tilde{\Psi}_j &:= \tilde{\Psi}_{j-1} + B_j \cdot \mathbf{k}_j\end{aligned}\tag{E.9}$$

bestimmt [132]. Der Index j durchläuft dabei die Anzahl der Stufen s . Die Startwerte sind über $\mathbf{k}_0 = 0$ und $\tilde{\Psi}_0 = \hat{\Psi}(t_i)$ definiert. Der Hilfwert der letzten Stufe s wird der Verteilungsfunktion zum nächsten Zeitschritt

$$\hat{\Psi}(t_i + \Delta t) = \tilde{\Psi}_s\tag{E.10}$$

zugeordnet. Die Koeffizienten der jeweiligen Stufen sind für ein LSRK-Verfahren der vierten Ordnung in Tabelle E.1 aufgelistet [138]. Im Vergleich zum klassischen Runge-Kutta-Verfahren

i	A_i	B_i	c_i
1	0	$\frac{1432997174477}{9575080441755}$	0
2	$-\frac{567301805773}{1357537059087}$	$\frac{5161836677717}{13612068292357}$	$\frac{1432997174477}{9575080441755}$
3	$-\frac{2404267990393}{2016746695238}$	$\frac{1720146321549}{2090206949498}$	$\frac{2526269341429}{6820363962896}$
4	$-\frac{3550918686646}{2091501179385}$	$\frac{3134564353537}{4481467310338}$	$\frac{2006345519317}{3224310063776}$
5	$-\frac{1275806237668}{842570457699}$	$\frac{2277821191437}{14882151754819}$	$\frac{2802321613138}{2924317926251}$

Tabelle E.1. Koeffizienten für das LSRK-Schema 4. Ordnung [138].

vierten Ordnung sind für das LSRK-Verfahren fünf Stufen anstatt vier nötig, um dieselbe Genauigkeit zu erzielen. Neben dem Vorteil der geringeren Speicheranforderung des LSRK-Verfahrens weist das LSRK-Verfahren darüber hinaus einen wesentlich größeren Stabilitätsbereich auf [132]. Im Vergleich zum impliziten Verfahren sind die Zeitschrittweiten für beide Runge-Kutta-Verfahren als klein zu bewerten.

E.4. Krylov-Unterraum-Verfahren

Die grundlegende Idee hinter jedem Krylov-Unterraum-Verfahren ist die Projektion einer großen, dünnbesetzten Matrix auf einen geeigneten deutlich kleineren Unterraum in der Hoffnung, dass dieser das ursprüngliche Problem hinreichend gut approximiert [118, 119, 128]. Dementsprechend wird die numerisch aufwendige Berechnung einer Matrix-Exponentialfunktion aus (E.1) auf ein deutlich einfacher zu lösendes Problem auf dem Unterraum projiziert, dort gelöst und anschließend zurück in den Originalraum transformiert.

Zur besseren Übersicht wird auf die Zeitvariable t_i innerhalb der Systemmatrix $[U(t_i)]$ verzichtet und die Abkürzung $\tilde{\Psi} := \hat{\Psi}(t_i)$ wird eingeführt. Der Krylov-Unterraum der Dimension m wird dann durch

$$\mathcal{K}_m([U], \tilde{\Psi}) = \text{span} \left\{ \tilde{\Psi}, [U] \tilde{\Psi}, [U]^2 \tilde{\Psi}, \dots, [U]^{m-1} \tilde{\Psi} \right\}\tag{E.11}$$

aufgespannt [118]. Unglücklicherweise konvergiert der Ausdruck $[\mathbf{U}]^{m-1} \tilde{\Psi}$ gegen den Eigenvektor zum betragsmäßig größten Eigenwert. Die Vektoren des Krylov-Unterraums werden dann linear abhängig und sind besonders sensitiv gegenüber der internen Rechengenauigkeit. In der Praxis wird daher nicht der Unterraum \mathcal{K}_m für numerische Berechnungen verwendet, sondern eine orthonormale Basis $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_m\}$ des Unterraums. Die orthonormalen Basisvektoren werden mithilfe des Arnoldi-Prozesses (modifiziertes Gram-Schmidt-Verfahren) bestimmt [118] und in der Matrix $[\mathbf{V}_m]$ gespeichert. Eine explizite Berechnung von \mathcal{K}_m entfällt. Der Startvektor für den Arnoldi-Prozess ist dabei durch $\mathbf{v}_1 = \frac{\tilde{\Psi}}{\|\tilde{\Psi}\|_2}$ definiert. Ferner wird durch den Arnoldi-Prozess die $m \times m$ große, obere Hessenbergmatrix $[\mathbf{H}]$ konstruiert. Per Definition erfüllt diese die Relation [118]:

$$[\mathbf{U}] [\mathbf{V}_m] = [\mathbf{V}_m] [\mathbf{H}] + h_{m+1,m} \mathbf{v}_{m+1} \otimes \mathbf{e}_m. \quad (\text{E.12})$$

Das Matrixelement $h_{m+1,m}$ der Hessenbergmatrix wird dabei als Abbruchkriterium für die Anzahl der Elemente des Unterraums herangezogen [118]. Falls $h_{m+1,m}$ kleiner ist als eine gewisse Toleranz, sind der letzte Basisvektor des Krylov-Unterraums \mathbf{v}_m und der darauf folgende quasi linear abhängig. Eine weitere Berücksichtigung des Vektors \mathbf{v}_{m+1} ist somit nicht notwendig. Der Vektor \mathbf{e}_m stellt den m -ten Einheitsvektor aus $\mathbb{R}^{m \times m}$ dar.

Die Zeitpropagation (E.1) kann mithilfe des Krylov-Unterraums über

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}(t_i + \Delta t) &= \exp(\Delta t [\mathbf{U}]) \cdot \tilde{\Psi} = \exp(\Delta t [\mathbf{U}]) \cdot [\mathbf{V}_m] \|\tilde{\Psi}\|_2 \cdot \mathbf{e}_1 \\ &\approx [\mathbf{V}_m] \exp(\Delta t [\mathbf{H}]) \cdot \|\tilde{\Psi}\|_2 \cdot \mathbf{e}_1 \end{aligned} \quad (\text{E.13})$$

genähert werden, wobei der lokale Restfehler des Verfahrens $O(\Delta t^m)$ beträgt. Für praktische Implementierungen bietet sich ein adaptives Vorgehen über das Residuum \mathbf{r}_m an [119]:

$$\|\mathbf{r}_m\|_2 = \|h_{m+1,m} \mathbf{e}_m^T \cdot \exp(\Delta t [\mathbf{H}]) \cdot \|\tilde{\Psi}\|_2 \cdot \mathbf{e}_1\|_2. \quad (\text{E.14})$$

Für jeden Zeitschritt wird der Krylov-Unterraum in Abhängigkeit der Dimension m iterativ aufgebaut. Für jede Dimension m wird das Residuum (E.14) ermittelt und hinsichtlich der Unterschreitung einer gegebenen Toleranz getestet. Falls die Toleranz unterschritten wird, wird das Ergebnis ausgegeben und mit dem nächsten Zeitschritt fortgefahren. Falls die Toleranz nicht unterschritten wird, wird der Krylov-Unterraum um einen weiteren Basisvektor erweitert.

Für die Berechnung der Matrix-Exponentialfunktion im Krylov-Unterraum kann eine Diagonalisierung und somit exakte Berechnung vorgenommen werden oder es werden andere Verfahren, wie beispielsweise die Padé-Approximation herangezogen. Für weitere Informationen zur Berechnung von Matrix-Exponentialfunktionen wird auf [128] und die Referenzen darin verwiesen.

F. Referenzmethoden zur Bestimmung des Quantentransports

Dieser Anhang skizziert die Grundideen hinter den Referenzmethoden auf Basis der Schrödingergleichung. Hierzu zählen die QTBM sowie der NEGF-Formalismus.

F.1. QTBM - Quantum Transmitting Boundary Method

Innerhalb einer diskreten Basis kann die Schrödingergleichung entsprechend

$$E\phi = [H]\phi + [\Sigma]\phi + \mathbf{s} \quad (\text{F.1})$$

geschrieben werden [104]. Die diskrete Basis kann dabei aus der örtlichen Diskretisierung oder aber auch aus einer Entwicklung nach lokalen Orbitalfunktionen, z. B. bei der TBM [104, 105], resultieren. Bei der Matrix $[H]$ handelt es sich um den Hamiltonoperator in der entsprechenden Basisdarstellung. Die hier verfolgte Darstellung durch örtliche Diskretisierung entspricht der Formulierung der TBM mit einem $|1s\rangle$ -Orbital. Die Matrix $[\Sigma]$ und der Vektor \mathbf{s} entstehen durch die Formulierung offener Randbedingungen, wie in Standardwerken [104] ausführlich beschrieben ist. Die sogenannte (Kontakt-)Selbstenergie $[\Sigma]$ beschreibt die Wechselwirkung des Kontakts mit dem Bauelement, während der Vektor \mathbf{s} als Quellterm die Injektion erfasst.

Bezüglich einer eindimensionalen Modellierung des Transportverhaltens mit dem Hamiltonoperator

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d}{dz} \frac{1}{m_{\text{eff}}(z)} \frac{d}{dz} + V(z) \quad (\text{F.2})$$

ergeben sich die Matrixelemente unter Verwendung eines klassischen Finite-Differenzen-Schemas zu

$$\begin{aligned} H_{ii-1} &= -t_0 \frac{2}{m_{\text{eff},i} + m_{\text{eff},i-1}} \\ H_{ii+1} &= -t_0 \frac{2}{m_{\text{eff},i} + m_{\text{eff},i+1}} \\ H_{ii} &= -(H_{ii+1} + H_{ii-1}) + V_i, \end{aligned} \quad (\text{F.3})$$

wobei die Konstante als $t_0 = \frac{\hbar^2}{2m_0\Delta z^2}$ definiert ist. Für eine übersichtliche Darstellung wird die effektive Masse m in zwei Anteile entsprechend $m = m_0 \cdot m_{\text{eff}}(z)$ zerlegt.

Sowohl die (Kontakt-)Selbstenergie $[\Sigma]$ als auch der Quellterm \mathbf{s} lassen sich für dieses Szenario in analytischer Weise bestimmen [105]. Der linksseitige Ausfluss aus dem durch $[H]$ beschriebenen

Bauelement wird durch das Matrixelement

$$\Sigma_{11} = -\frac{t_0}{m_{\text{eff},1}} \exp(ik_1 \Delta z) \quad (\text{F.4})$$

bestimmt und der rechtsseitige Ausfluss durch:

$$\Sigma_{NN} = -\frac{t_0}{m_{\text{eff},N}} \exp(ik_N \Delta z). \quad (\text{F.5})$$

Der Parameter N stellt die Anzahl der Diskretisierungspunkte bezüglich der z -Richtung dar. Die Wellenzahl ergibt sich aus der numerischen Dispersion, bzw. der Bandenergie des $|1s\rangle$ -Orbitals, zu:

$$k_{1/N} \Delta z = \arccos \left(1 - \frac{E - V_{1/N}}{2 \frac{t_0}{m_{\text{eff},1/N}}} \right). \quad (\text{F.6})$$

Bei einer Injektion vom linken Kontakt ergibt sich das einzige Element, welches einen Wert ungleich Null innerhalb des Quellterms annimmt, zu

$$s_1 = 2i \frac{t_0}{m_{\text{eff},1}} \sin(k_1 \Delta z), \quad (\text{F.7})$$

beziehungsweise zu

$$s_N = 2i \frac{t_0}{m_{\text{eff},N}} \sin(k_N \Delta z) \quad (\text{F.8})$$

bei einer Injektion vom rechten Kontakt.

Zur Berechnung der statistischen Dichtematrix $[\rho]$ ist das lineare Gleichungssystem (F.1) für jede relevante Energie E sowie für eine separate Injektion je Kontakt zu lösen [7, 8]. Im Ergebnis liegt dann der entsprechende Streuzustand $\phi_c(E)$ vor, wobei c die Injektion vom Kontakt c aus kennzeichnet. Mit den Streuzuständen lässt sich die statistische Dichtematrix schließlich entsprechend

$$[\rho] = \sum_c \int \frac{dE}{2\pi} \left| \frac{dE(k_c)}{dk_c} \right|^{-1} \cdot \phi_c(E) \cdot f_{2D}(E - \mu_c) \cdot \phi_c^\dagger(E) \quad (\text{F.9})$$

bestimmen.

Anmerkung Zur Vermeidung von Singularitätsproblemen bei Energien in der Nähe resonanter und gebundener Zustände wird in der Regel ein sehr kleiner $\eta \approx 10^{-12}$ Imaginärteil zur Energie $E \rightarrow E + i\eta$ addiert.

F.2. NEGF - Nichtgleichgewichts-Greensche-Funktionen

Die retardierte Greensche-Funktion kann als die Impulsantwort des Systems, welches durch (F.1) beschrieben wird, definiert werden:

$$[G^R] = [E - [H] - [\Sigma^R]]^{-1}. \quad (\text{F.10})$$

Die retardierte Selbstenergie $[\Sigma^R]$ erfasst an dieser Stelle die Bauelement-Kontakt-Wechselwirkung über $[\Sigma_1]$ für den linken und $[\Sigma_N]$ für den rechten Kontakt. Dieser Ansatz auf Grundlage der retardierten Selbstenergie bietet jedoch auch die Möglichkeit zur Einbindung von sämtlichen Streumechanismen, wie beispielsweise die Elektron-Phonon-Wechselwirkung [104]. Dies ist der wesentliche Vorteil vom NEGF-Ansatz gegenüber der QTBM. Im ballistischen Fall sind QTBM und der NEGF-Ansatz äquivalent.

Für jeden Kontakt kann eine sogenannte "Broadening" Matrix als anti-hermitescher Anteil der Kontakt-Selbstenergien definiert werden:

$$[\Gamma_1] = i([\Sigma_1] - [\Sigma_1]^\dagger) \quad \text{und} \quad [\Gamma_N] = i([\Sigma_N] - [\Sigma_N]^\dagger). \quad (\text{F.11})$$

Diese beschreibt die Aufweitung der diskreten Energielevel im Bauelement durch die Wechselwirkung mit den Kontakten. Ferner ist diese Größe antiproportional zur mittleren Ladungsträgerlebensdauer innerhalb des Bauelements [104]. Mit diesen Matrizen kann die "in-scattering" Selbstenergie als inkohärente Überlagerung aller von Kontakt c beschriebenen Quellen

$$[-i\Sigma^<] = \sum_c [\Gamma_c] f_{2D}(E - \mu_c) \quad (\text{F.12})$$

erfasst werden. Schließlich ergibt sich die sogenannte Matrix-Elektronendichte zu

$$[-iG^<] = [G^R] [-i\Sigma^<] [G^R]^\dagger, \quad (\text{F.13})$$

aus welcher die statistische Dichtematrix über

$$[\rho] = \int \frac{dE}{2\pi} [-iG^<(E)] \quad (\text{F.14})$$

berechnet wird. Für eine weitaus detailliertere Darstellung der NEGF-Methode wird auf die Standardwerke [104, 105] verwiesen.

Generelle Anmerkungen Obwohl eine geschlossene Bestimmung der Stromdichte ohne die Berechnung der statistischen Dichtematrix möglich ist (z. B. über den Landauer-Büttiker-Formalismus), wird an dieser Stelle für einen fairen Vergleich eben diese herangezogen. Dies liegt in der Tatsache begründet, dass Ladungsträger- und Stromdichten für die vorgestellten Verfahren aus Kapitel 8 aus den Verteilungsfunktionen berechnet werden. Hierdurch liegt zu mindestens dieser Approximationsfehler in ähnlichen Größenordnungen.

G. Abkürzungsverzeichnis

AlGaAs	Aluminium-Galliumarsenid
BCS	Baarden-Cooper-Schrieffer
BTG	Boltzmann-Transportgleichung
CMOS	Complementary Metal-Oxid-Semiconductor
COO	Coordinate list (Speicherformat für Sparse-Matrizen)
DGFET	Double-Gate-Feldeffekttransistor
DFT	Dichtefunktionaltheorie
DIBL	Drain-Induced-Barrier-Lowering
EO	Exponentialoperator
GaAs	Galliumarsenid
GaInAs	Galliumindiumarsenid
GPU	Graphics Processing Unit
HDS	Hybrid-Differenzen-Schema
HEMT	High Electron Mobility Transistor
IoT	Internet of Things
LSRK	Low-Storage-Runge-Kutta
LVNG	Liouville-von-Neumann-Gleichung
LVNG-RS	Liouville-von-Neumann-Gleichung in Schwerpunkt- und Relativkoordinaten
MOSFET	Metal Oxid Semiconductor Field Effect Transistor
MSA	Mode-Space-Approximation
NEMO	NanoElectronic MOdeling
NESS	Nano-Electronic Simulation Software
NDR	Negativer Differentieller Widerstand (engl. negative differential resistance)
NEGF	Nichtgleichgewichts-Greensche-Funktionen (engl. nonequilibrium Green's function)
PML	Perfectly Matched Layer
QTBM	Quantum Transmitting Boundary Method
RAM	Random Access Memory
RTD	Resonante Tunneldiode
RITD	Resonante Interband-Tunneldiode
Si	Silizium
TBM	Tight-Binding-Methode
TFET	Tunnel-Feldeffekttransistor
TMM	Transfermatrixmethode
UDS	Upwind-Differenzen-Schema
WTG	Wigner-Transportgleichung

