

Alexander Rack

Modellierung von bistabilen Quantenpunktstrukturen

Diplomarbeit

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek:

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek: Die Deutsche Bibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de/> abrufbar.

Dieses Werk sowie alle darin enthaltenen einzelnen Beiträge und Abbildungen sind urheberrechtlich geschützt. Jede Verwertung, die nicht ausdrücklich vom Urheberrechtsschutz zugelassen ist, bedarf der vorherigen Zustimmung des Verlags. Das gilt insbesondere für Vervielfältigungen, Bearbeitungen, Übersetzungen, Mikroverfilmungen, Auswertungen durch Datenbanken und für die Einspeicherung und Verarbeitung in elektronische Systeme. Alle Rechte, auch die des auszugsweisen Nachdrucks, der fotomechanischen Wiedergabe (einschließlich Mikrokopie) sowie der Auswertung durch Datenbanken oder ähnliche Einrichtungen, vorbehalten.

Copyright © 2002 Diplom.de
ISBN: 9783832455088

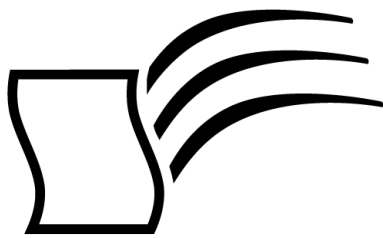
Alexander Rack

Modellierung von bistabilen Quantenpunktstrukturen

Alexander Rack

Modellierung von bistabilen Quantenpunktstrukturen

Diplomarbeit
an der Technischen Universität Berlin
1 Jahr Bearbeitungsdauer
April 2002 Abgabe



Diplom.de

Diplomica GmbH _____
Hermannstal 119k _____
22119 Hamburg _____

Fon: 040 / 655 99 20 _____
Fax: 040 / 655 99 222 _____

agentur@diplom.de _____
www.diplom.de _____

ID 5508

Rack, Alexander: Modellierung von bistabilen Quantenpunktstrukturen / Alexander Rack -
Hamburg: Diplomica GmbH, 2002

Zugl.: Berlin, Technische Universität, Diplomarbeit, 2002

Dieses Werk ist urheberrechtlich geschützt. Die dadurch begründeten Rechte, insbesondere die der Übersetzung, des Nachdrucks, des Vortrags, der Entnahme von Abbildungen und Tabellen, der Funksendung, der Mikroverfilmung oder der Vervielfältigung auf anderen Wegen und der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen, bleiben, auch bei nur auszugsweiser Verwertung, vorbehalten. Eine Vervielfältigung dieses Werkes oder von Teilen dieses Werkes ist auch im Einzelfall nur in den Grenzen der gesetzlichen Bestimmungen des Urheberrechtsgesetzes der Bundesrepublik Deutschland in der jeweils geltenden Fassung zulässig. Sie ist grundsätzlich vergütungspflichtig. Zuwiderhandlungen unterliegen den Strafbestimmungen des Urheberrechtes.

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in diesem Werk berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, dass solche Namen im Sinne der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

Die Informationen in diesem Werk wurden mit Sorgfalt erarbeitet. Dennoch können Fehler nicht vollständig ausgeschlossen werden, und die Diplomarbeiten Agentur, die Autoren oder Übersetzer übernehmen keine juristische Verantwortung oder irgendeine Haftung für evtl. verbliebene fehlerhafte Angaben und deren Folgen.

Diplomica GmbH
<http://www.diplom.de>, Hamburg 2002
Printed in Germany

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	iii
1 Grundlagen	1
1.1 Poisson-Gleichung	1
1.2 Strom-Gleichungen	3
1.3 Ladungsträgerdichte und Störstellenbesetzung	4
1.3.1 Freie Ladungsträger	5
1.3.2 Störstellenbesetzung	7
1.4 Schottky-Kontakt, Ohm'scher Kontakt	8
1.5 Selbstkonsistentes Lösungsverfahren	10
1.5.1 Lösung der Poisson-Gleichung	11
1.5.2 Lösung der Strom-Gleichungen	12
1.5.3 Diskretisierung	14
2 Kapazitäts-Spannungs-Spektroskopie	21
2.1 pn-Dioden und Schottky-Dioden	22
2.2 Dioden mit Quantenpunkten	25
2.3 Modellierung	27
2.3.1 Besetzung der Quantenpunkte	27
2.3.2 Algorithmus	28
2.4 Berechnung der Kapazität	30
2.5 Fitparameter, Fitmethode	32
2.6 Ergebnisse	33
2.6.1 InAs-Quantenpunkte in pnin-Diode	34
2.6.2 InAs-Quantenpunkte in pn-Diode	41
2.6.3 InAs-Quantenpunkte in Schottky-Diode (A)	45
2.6.4 InAs-Quantenpunkte in Schottky-Diode (B)	49
2.6.5 Ge-Quantenpunkte in Schottky-Diode	53
2.6.6 GaSb-Quantenpunkte in pipn-Diode	56
2.7 Diskussion	60

3	Bistabile Quantenpunktstrukturen	63
3.1	Feldeffekttransistoren mit Quantenpunkten	64
3.2	Einfang und Emission von Elektronen	68
3.2.1	Auger-Prozeß	69
3.2.2	Phonon-assistierte Prozesse	72
3.2.3	Zeitliche Entwicklung	73
3.3	Modellierung	74
3.4	Bistabilität	76
3.5	Analyse der Dynamik	81
3.6	Diskussion	85
4	Zusammenfassung	87
A	Herleitung der Strom-Gleichungen	91
A.1	0. Moment der Boltzmann-Gleichung	92
A.2	1. Moment der Boltzmann-Gleichung	94
B	Evolutionsstrategien	97
C	Fermi-Dirac-Integral	99
D	Materialparameter	101
	Abbildungsverzeichnis	107
	Tabellenverzeichnis	109
	Literaturverzeichnis	109

Einleitung

Zu einer der wichtigsten Stützen der post-industriellen Gesellschaft hat sich die Hochtechnologie entwickelt. Neben Spezialanwendungen, wie dem Einsatz von Lasern in der Medizin oder satelliten-gesteuerten Navigationssystemen für PKWs, hat insbesondere der Computer in allen seinen Formen das Leben der Menschen durchdrungen. Der multimediale Einsatz von Rechnern in der modernen Informationsgesellschaft, forciert durch das Internet und (zukünftige) Mobilfunkgeräte, eröffnete in den letzten Jahren schier unendliche neue Anwendungsgebiete für diese Technologien.

Bedingt durch den Kostendruck sowie gesteigerte Erwartungen an Funktionalität und Flexibilität der Geräte, hat sich die Halbleitertechnologie im Laufe der letzten Jahrzehnte als die Grundlage zur Konstruktion neuer elektronischer Bauelemente durchgesetzt. Damit einhergehend setzte eine Miniaturisierung der verwendeten Strukturen ein. Im Rahmen dieser Miniaturisierung wurden sogenannte Quantenpunkte in den letzten Jahren intensiv untersucht.

Mittels moderner Wachstumsverfahren können Halbleiterschichten bis auf eine Atomlage genau erzeugt werden. Trägt man Materialien mit verschiedener Gitterkonstante übereinander auf, zum Beispiel InAs auf GaAs, so verspannt sich das Halbleitergitter an der Übergangsschicht. Diese Verspannungen aufgrund der unterschiedlichen Gitterkonstanten relaxieren durch Inselbildungen; so entstandene Strukturen können sehr klein sein (Abmessungen im Bereich von 10 nm bis 100 nm), mit einer sehr regelmäßigen Größe und Form. Solche Halbleiterstrukturen entstehen also selbstorganisiert, man spricht daher auch von selbstorganisierten Quantenpunkten, der Wachstumsmodus heißt Stranski-Krastanow [Bim99].

Quantenpunkte – auch „künstlichen Atome“ genannt – haben in allen drei Raumrichtungen sehr kleine Ausmaße. Ladungsträger in den Quantenpunkten können sich nicht mehr frei bewegen, was zu einer starken Lokalisierung von ersteren führt. Aufgrund dieser geringen Abmessungen spielen quantenmechanische Effekte bei der Beschreibung der Eigenschaften der Quantenpunkte eine sehr große Rolle, so kommt es zur Ausbildung von diskreten Energieniveaus der lokalisierten Ladungsträger [Bim99]. Bauteile mit Quantenpunkten – Quantenpunktstrukturen – versprechen Verbesserungen bei der Entwicklung von Lasern,

Detektoren und Speicherelementen [Bim99], [Sze99].

Aufgrund dieses enormen Potentials ist sowohl eine Charakterisierung als auch ein tiefergehendes Verständnis der Quantenpunkte von allgemeinem Interesse. Neben optischen Methoden erfolgt die Charakterisierung der Quantenpunkte mittels Kapazitäts-Spannungs-Spektroskopie. Kontrovers diskutiert wird, welche Prozesse beim Einfang und bei der Emission von Ladungsträgern in Quantenpunkten eine Rolle spielen.

In dieser Arbeit sollen anhand eines eindimensionalen Modells Quantenpunktstrukturen untersucht werden. Die Grundlagen hierfür sind in Kapitel 1 dargestellt. Die semiklassischen Drift-Diffusionsgleichungen zusammen mit der Poisson-Gleichung beschreiben eine klassische Halbleiterstruktur weitestgehend. Selbstkonsistentes Lösen dieser Gleichungen liefert die Potentialverteilung, die Ladungsträger- und die Stromdichte im Bauteil. Die Rechnungen werden mit dem Computer durchgeführt, die dazu notwendige Diskretisierung wird vorgestellt.

Ausgehend von Halbleiterstrukturen ohne Quantenpunkte wird in Kapitel 2 die Kapazitäts-Spannungs-Spektroskopie erläutert. Gegenstand der Untersuchungen sind einfache Bauteile, wie z.B. die *pn*-Diode, die mit Quantenpunkten versehen wurden. In das klassische Modell wird deren elektronische Struktur als quantisierte Zustände implementiert. Vorliegende Messungen mittels Kapazitäts-Spannungs-Spektroskopie an verschiedenen Dioden mit unterschiedlichen Typen von Quantenpunkten werden nachgerechnet. Ein Fit der Rechnung an das jeweilige Experiment liefert die Lage der Energiezustände in den Quantenpunkten. Einflüsse durch das Wachstum als auch die Wechselwirkung der Quantenpunkte mit ihrer Umgebung werden anhand der Fitergebnisse untersucht.

Um ein Speicherelement zu realisieren, muß geeignet zwischen zwei Zuständen in einem Bauteil unterschieden werden können. Mit diesen zwei Zuständen kann man die „0“ und die „1“ definieren und hat damit das binäre Zahlensystem zur Verfügung, also die Grundlage für einen Rechner. Im Falle eines Halbleiterbauelements sind diese beiden Zustände grob mit „leitend“ und „nicht-leitend“ beschreibbar. G. Yusa und H. Sakaki haben 1997 eine Struktur zur Realisierung eines Quantenpunkt-Speicherelements vorgeschlagen [Yus97].

In diesem neuartigen Feldeffekttransistor mit Quantenpunkten werden durch Anlegen einer Spannung diese ge- beziehungsweise durch Beleuchten mit einem Laser wieder entladen. Der Besetzungsgrad der Quantenpunkte steuert dabei die Leitfähigkeit eines benachbarten Elektronenkanals. In der Leitfähigkeits-Gatespannungs-Kennlinie weist die Struktur zwei stabile Zweige auf, eine Hysterese. Mit den Erkenntnissen des ersten Teils dieser Arbeit wird in Kapitel 3 dieses bistabile Bauteil untersucht. Die Entstehung der Hysterese kann dabei mit Hilfe des Modells nachvollzogen werden. Durch einen Vergleich zwischen Rechnung und Experiment sind Rückschlüsse auf die dynamischen Vorgänge im Bauteil möglich,

die die Entstehung der Hysterese verursachen. Wie sich zeigt, spielt der Auger-Prozess bei Einfang und Emission von Elektronen in InAs-Quantenpunkten eine wichtige Rolle. Dies wird im Rahmen einer Analyse der dynamischen Vorgänge durch Vergleich mit anderen Einfangs- und Emissions-Mechanismen eingehend diskutiert.

Kapitel 1

Grundlagen

Im Rahmen dieser Arbeit sollen Quantenpunktbauelemente modelliert werden. Grundlage hierfür sind die im folgenden Kapitel dargestellte Poisson-Gleichung und die Strom-Gleichungen. Für einen klassischen Halbleiter, dotiert oder undotiert, sind die Ladungsträgerdichten mittels der Bandstruktur und der Quasi-Fermi-Niveaus berechenbar. Selbstkonsistentes Lösen der eingangs genannten Differentialgleichungen liefert letztere und den Potentialverlauf im Bauteil, der zusammen mit Materialparametern den Bandkantenverlauf festlegt. Damit sind die Ladungsträgerdichten bestimmt.

Die Lösung der Gleichungen erfolgt mit Hilfe des Computers. Die für die Numerik nötige Diskretisierung wird im folgenden erläutert, speziell werden die Randbedingungen und die Lösungsverfahren berücksichtigt.

1.1 Poisson-Gleichung

Ausgangspunkt für die Beschreibung von Ladungsträgerverteilungen und den damit verbundenen physikalischen Effekten sind die Maxwell-Gleichungen. In der Elektrostatik lauten diese Gleichungen für ein Feld $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ in Materie [Jac75]

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0 \quad (1.1)$$

$$\nabla \mathbf{D}(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}) \quad (1.2)$$

zusammen mit der Materialgleichung

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}) = \epsilon_0 \mathbf{E}(\mathbf{r}) + \mathbf{P}(\mathbf{r}) \quad (1.3)$$

Es gelten die Bezeichnungen: für die elektrische Feldkonstante ϵ_0 , die Ladungsträgerdichte $\rho(\mathbf{r})$, die dielektrische Verschiebung $\mathbf{D}(\mathbf{r})$ und die Polarisation $\mathbf{P}(\mathbf{r})$.

Mit der ortsabhängigen, relativen Dielektrizitätskonstante $\epsilon(\mathbf{r})$ schreibt sich die dielektrische Verschiebung $\mathbf{D}(\mathbf{r})$ als

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}) = \epsilon(\mathbf{r})\epsilon_0 \mathbf{E}(\mathbf{r}) \quad (1.4)$$

Aus (1.1) folgt die Existenz eines skalaren Potentials $\phi(\mathbf{r})$ [Wüs95, Satz 18.10 und Satz 18.12]

$$-\nabla\phi(\mathbf{r}) = \mathbf{E}(\mathbf{r}) \quad . \quad (1.5)$$

Dieses eingesetzt in (1.4) zusammen mit (1.2) ergibt die Poisson-Gleichung der klassischen Elektrodynamik mit einer ortsabhängigen, relativen Dielektrizitätskonstante $\epsilon(\mathbf{r})$

$$\boxed{\epsilon_0 \nabla[\epsilon(\mathbf{r}) \nabla\phi(\mathbf{r})] = -\rho(\mathbf{r})} \quad . \quad (1.6)$$

Die Ladungsdichte (pro cm^{-3}) $\rho(\mathbf{r})$ in einem Halbleiterbauelement setzt sich zusammen aus der Ladungsträgerdichte der freien Elektronen $n^{3d}(\mathbf{r})$, schweren Löchern $p_{hh}^{3d}(\mathbf{r})$ und leichten Löchern $p_{lh}^{3d}(\mathbf{r})$, sowie den Dichten der ionisierten Akzeptoren $N_A^-(\mathbf{r})$ und Donatoren $N_D^+(\mathbf{r})$. Es gilt

$$\rho(\mathbf{r}) = e[p^{3d}(\mathbf{r}) - n^{3d}(\mathbf{r}) - N_A^-(\mathbf{r}) + N_D^+(\mathbf{r})] \quad (1.7)$$

mit der Elementarladung $e > 0$ und $p^{3d}(\mathbf{r}) = p_{hh}^{3d}(\mathbf{r}) + p_{lh}^{3d}(\mathbf{r})$.

Bei Gleichung (1.6) handelt es sich um eine Differentialgleichung zweiter Ordnung, für eine eindeutige Lösung werden Randbedingungen auf der Oberfläche ∂V des Bauelements benötigt [Wüs95, Satz 24.7]. Diese lassen sich als Dirichlet-Randbedingung ($\phi(\mathbf{r})$ auf ∂V gegeben)

$$\phi(\mathbf{r})|_{\mathbf{r} \in \partial V} = C_\phi \quad (1.8)$$

oder als Neumann-Randbedingung (Normalen-Ableitung von $\phi(\mathbf{r})$ auf ∂V gegeben)

$$-\epsilon_0 \epsilon(\mathbf{r}) \nabla\phi(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{r})|_{\mathbf{r} \in \partial V} = e \sigma(\mathbf{r})|_{\mathbf{r} \in \partial V} \quad (1.9)$$

formulieren. C_ϕ ist eine Konstante, $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ der Normalenvektor auf der Oberfläche des Bauteils, $\sigma(\mathbf{r})$ die Oberflächenladungsdichte (Einheit: cm^{-2}). Die Dirichlet-Randbedingung liefert ein eindeutiges Potential, bei ausschließlicher Verwendung der Neumann-Randbedingung bestimmt man das Potential bis auf eine Konstante. Letztere ist unbedeutend, da sie zum Beispiel bei Gradientenbildung zur eigentlich interessierenden Feldstärke $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ wegfällt. Eine physikalisch eindeutige Lösung ist also durch beide Typen von Randbedingungen festgelegt [Nol97].

Die zu untersuchenden Halbleiterstrukturen mit Quantenpunkten werden schichtweise gewachsen [Bim99], das heißt in Wachstumsrichtung (negative z-Achse) variieren Struktureigenschaften wie verwendeter Materialtyp oder Dotierungskonzentration, lateral sind die Struktureigenschaften konstant. Bei der