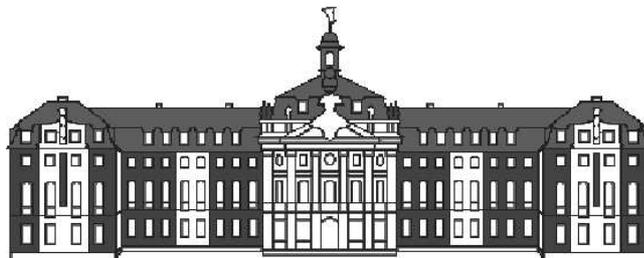


Thomas Peter Raker

Modellierung von  
Ladungsträgertransport und Strukturbildung  
in elektrolumineszierenden  
ZnS:Mn-Halbleiterbauelementen



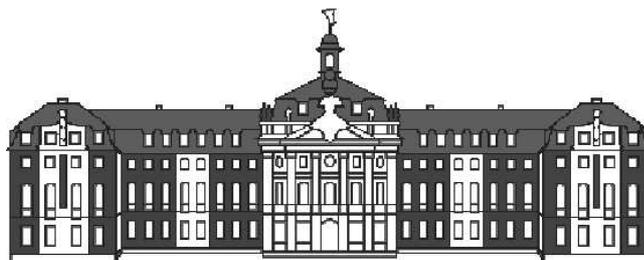
— 2004 —



# Theoretische Physik

## Modellierung von Ladungsträgertransport und Strukturbildung in elektrolumineszierenden ZnS:Mn-Halbleiterbauelementen

Inaugural-Dissertation  
zur Erlangung des Doktorgrades  
der Naturwissenschaften im Fachbereich Physik  
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät  
der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster



vorgelegt von

**Thomas Peter Raker**

aus Wilhelmshaven

— 2004 —

Dekan:	Prof. Dr. H. Zacharias
erster Gutachter:	Prof. Dr. T. Kuhn
zweiter Gutachter:	Priv. Doz. Dr. F.-J. Niedernostheide
Tag der mündlichen Prüfung:	06.12.2004
Tag der Promotion:	06.12.2004

**Für Sabine**



## Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei all denen bedanken, die mich in den letzten Jahren unterstützt haben.

Mein erster Dank gilt Prof. Dr. T. Kuhn, der diese Arbeit betreute und stets zu intensiven und oft langen Diskussionen bereit war. Seine vielfältigen Ideen haben wesentlich zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen. Mit seiner Hilfe hatte ich die Möglichkeit einige nationale und internationale Konferenzen zu besuchen, die oftmals neue Impulse für meine Arbeit gaben. So ergab sich im Jahr 2000 im Anschluss des WE-Heraeus-Seminars „High Field and Quantum Transport in Semiconductors“ in Rostock ein mehrwöchiger Aufenthalt in Phoenix (Arizona State University) und Corvallis (Oregon State University). Außerdem hatte ich die Möglichkeit meine Ergebnisse in Santa Fe (HCIS-12 (2001), New Mexico) und Flagstaff (ICPS-27 (2004), Arizona) zu präsentieren. Von den vielen im Ausland gemachten wissenschaftlichen und persönlichen Erfahrungen konnte ich sehr profitieren.

Großen Anteil an den hier präsentierten Ergebnissen haben Priv. Doz. Dr. Franz-Josef Niedernostheide (Infineon Technologies AG), Dipl. Phys. Sandra Zuccaro (Institut für Angewandte Physik, WWU-Münster) und Dipl. Phys. Karsten Meyer (Institut für Festkörpertheorie, WWU-Münster). Ich danke ihnen recht herzlich für die vielen Diskussionen über Strukturbildung und Transport in Halbleitern, die mir oft sehr behilflich bei meinen weiteren Arbeiten waren. Bei der Fertigstellung der Dissertation hat mir Dipl. Phys. Birgit Krummheuer sehr geholfen. Sie hat viele Rechtschreibfehler und „verdrehte“ Sätze berichtigt. Allen bisher nicht genannten Mitgliedern der Arbeitsgruppe Kuhn danke ich für die freundliche und kollegiale Atmosphäre während meiner Zeit am Institut für Festkörpertheorie. Außerdem möchte ich dem Graduiertenkolleg „Untersuchung nichtlinearer kontinuierlicher Systeme mit numerischen, qualitativen und experimentellen Methoden“ der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster für die gewährte finanzielle Unterstützung herzlich danken.

Für die ständige Unterstützung während meines gesamten Studiums in Münster möchte ich mich bei meinen Eltern sowie meinem Bruder recht herzlich bedanken. Ein besonderer Dank, der sich nicht in Worte fassen lässt, gilt meiner Freundin Sabine Barnofske. Sie hat mich über den gesamten Promotionszeitraum mit Rat und Tat unterstützt. Die Dissertation hat sehr viel Zeit in Anspruch genommen, die eigentlich Dir gehört hätte. Für die entgegengebrachte Geduld bin ich Dir sehr dankbar.



# Inhaltsverzeichnis

<b>I</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
1	Motivation	2
2	Gliederung der Arbeit	5
<b>II</b>	<b>Experimentelle Grundlagen zur Strukturbildung und Modellierung des Ladungsträgertransports</b>	<b>9</b>
<b>3</b>	<b>Elektrolumineszierende ZnS:Mn-MISIM-Bauelemente</b>	<b>10</b>
3.1	Geschichtlicher Hintergrund . . . . .	10
3.2	Phänomenologisches Verhalten . . . . .	11
3.3	Mechanismus der Elektrolumineszenz . . . . .	17
3.4	Strukturbildung in der ZnS:Mn-Elektrolumineszenz . . . . .	21
<b>4</b>	<b>Modellierung des Ladungstransports</b>	<b>24</b>
4.1	Klassische Transporttheorie . . . . .	27
4.1.1	Die Liouville-Gleichung . . . . .	27
4.1.2	Die BBGKY-Hierarchie . . . . .	28
4.2	Semiklassische Transporttheorie . . . . .	33
4.3	Bilanz-Gleichungen . . . . .	34
4.3.1	Herleitung aus der Boltzmann-Gleichung . . . . .	35
4.3.2	Bilanzgleichung für die Dichte . . . . .	37
4.3.3	Bilanzgleichung für die Impulsdichte . . . . .	37
4.3.4	Drift-Diffusions-Modell . . . . .	39
4.4	Drift-Diffusions-Modell für die ZnS:Mn-Struktur . . . . .	40
4.4.1	Vereinfachung des Drift-Diffusions-Modells . . . . .	43

<b>5</b>	<b>Numerische Lösung der Transportgleichungen</b>	<b>45</b>
5.1	Scharfetter-Gummel Diskretisierung . . . . .	46
5.1.1	Diskretisierung der Poisson-Gleichung . . . . .	47
5.1.2	Diskretisierung der Kontinuitätsgleichungen . . . . .	49
5.1.3	Diskretisierung der Zeit . . . . .	51
5.1.4	Höherdimensionale Diskretisierungen . . . . .	52
5.2	Numerische Lösung der diskretisierten Gleichungen . . . . .	52
<b>III</b>	<b>Diskussion der Simulationsergebnisse für ein-, zwei- und dreidimensionale Bauteilgeometrie</b>	<b>55</b>
<b>6</b>	<b>Longitudinaler Ladungsträgertransport</b>	<b>56</b>
6.1	Grundmechanismen des Ladungstransports . . . . .	56
6.1.1	Feldabschirmung . . . . .	57
6.1.2	Periodisch stationärer Zustand . . . . .	63
6.2	$Q_{1/2}U$ -Kennlinien . . . . .	70
6.2.1	Analyse der Hysterese . . . . .	71
6.2.2	Parameterabhängigkeiten der Hysterese . . . . .	77
6.2.2.1	Abhängigkeit der Hysterese vom Einfangkoeffizienten $\gamma$ . . . . .	77
6.2.2.2	Abhängigkeit der Hysterese von der Emissionsrate $\beta$ . . . . .	80
6.2.2.3	Abhängigkeit der Hysterese von der Frequenz $f$ . . . . .	82
<b>7</b>	<b>Numerische Ergebnisse für zwei Raumdimensionen</b>	<b>84</b>
7.1	Filamentstabilisation . . . . .	87
7.1.1	Filament durch bistabile Anfangsbedingung . . . . .	87
7.1.2	Stabilisierungsmechanismus . . . . .	92
7.1.3	Einfluss von Diffusion und Drift auf die Filamentform . . . . .	99
7.1.4	Einfluss der Oberflächenrekombination auf die Filamentform . . . . .	103
7.1.5	Filament durch Rauschen aus dem homogenen Zustand . . . . .	105
7.1.5.1	Zündung durch statisches Rauschen . . . . .	105
7.1.5.2	Zündung durch zeitliches Rauschen . . . . .	109
7.2	Wechselwirkung zwischen Filamenten . . . . .	112
7.2.1	Längenvariation der lateralen Bauteilbreite . . . . .	112
7.2.2	Vergleich mit rauschinduzierten Filamentstrukturen . . . . .	120
7.2.3	Einfluss einer Spannungserhöhung auf weitere Filamentzündungen . . . . .	123
7.2.4	Einfluss einer Spannungssenkung auf die Filamentierung . . . . .	124

<b>8</b>	<b>Numerische Ergebnisse für drei Raumdimensionen</b>	<b>126</b>
8.1	Filament durch bistabile Anfangsbedingung . . . . .	127
8.2	Multifilamente und Filamentwechselwirkung . . . . .	130
8.2.1	Filamentzündung durch Spannungserhöhung über die Schwelle . . .	130
8.2.2	Filamentzündung durch Rauschen . . . . .	133
<b>9</b>	<b>Vergleich zwischen Theorie und Experiment</b>	<b>135</b>
<b>IV</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>141</b>
<b>10</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>142</b>
<b>V</b>	<b>Anhang</b>	<b>151</b>
<b>A</b>	<b>Komplette Diskretisierung</b>	<b>152</b>
A.1	Bemerkungen und Definitionen . . . . .	152
A.2	1D Diskretisierung . . . . .	153
A.2.1	Poisson-Gleichung . . . . .	153
A.2.2	Kontinuitätsgleichung der Elektronen und der Löcher . . . . .	154
A.2.3	Kontinuitätsgleichung der eingefangenen Löcher . . . . .	155
A.2.4	Grenzflächenladungen . . . . .	155
A.2.5	Generations- und Rekombinationsraten . . . . .	155
A.3	2D Diskretisierung . . . . .	156
A.3.1	Poisson-Gleichung . . . . .	156
A.3.2	Kontinuitätsgleichung der Elektronen und der Löcher . . . . .	157
A.3.3	Kontinuitätsgleichung der eingefangene Löcher . . . . .	159
A.3.4	Grenzflächenladungen . . . . .	159
A.3.5	Generations- und Rekombinationsraten . . . . .	160
A.4	3D Diskretisierung . . . . .	161
A.4.1	Poisson-Gleichung . . . . .	161
A.4.2	Kontinuitätsgleichung der Elektronen und der Löcher . . . . .	163
A.4.3	Kontinuitätsgleichung der eingefangenen Löcher . . . . .	166
A.4.4	Grenzflächenladungen . . . . .	166
A.4.5	Generations- und Rekombinationsraten . . . . .	166
<b>B</b>	<b>Koeffizientenmatrizen in der 2D Simulation</b>	<b>167</b>

<b>C</b>	<b>Koeffizientenmatrizen in der 3D Simulation</b>
----------	---

169

## **Teil I**

# **Einleitung**

# Kapitel 1

## Motivation

Die Strukturbildung in Nichtgewichtssystemen gehört mit zu den interessantesten Phänomenen der modernen Naturwissenschaften. Aufgrund der extremen Vielzahl von Strukturbildungsprozessen in sehr verschiedenen Bereichen der belebten und unbelebten Natur hat sich in den letzten Jahrzehnten ein interdisziplinäres Forschungsgebiet entwickelt, das immer Aufmerksamkeit auf sich gezogen hat. Zu diesem Gebiet gehören die unterschiedlichsten Systeme aus dem Bereich der Biologie, der Chemie und der Physik. In allen hier aufgeführten Bereichen sind vielfältige entweder räumliche, zeitliche oder raumzeitliche Strukturbildungsprozesse zu beobachten, von denen einige hier exemplarisch kurz vorgestellt werden.

Allein schon im Bereich der Biologie sind sehr viele interessante und außergewöhnliche Strukturierungen zu beobachten. Sie zeigen sich dort auf ganz verschiedenen Beschreibungsebenen. Auf der globalen Beschreibungsebene finden wir eine enorme Vielfalt der Arten. Ihre Menge wird durch die Korrelation einzelner Arten untereinander bestimmt. So zeigen typische Räuter-Beute-Modelle zeitliche Oszillationen in der Populationsdynamik [MURRAY 1989]. Selbst eine einzelne Tierart zeigt auf der untersten Beschreibungsebene Strukturbildungsphänomene wie z.B. die Fellzeichnung beim Zebra oder beim Leoparden. [MEINHARDT 1982, MURRAY 1989]. Ein weiteres Beispiel aus dem Bereich der Biologie ist die Aggregation des Schleimpilzes (*Dictyostelium discoideum*) [HAKEN 1983, MURRAY 1989, NICOLIS und PRIGOGINE 1987]. In diesem System äußert sich die Strukturierung durch konzentrische Kreise und spiralenförmige Gebilde.

Auf dem Gebiet der Chemie gibt es viele Reaktionen, die räumliche, zeitliche oder raumzeitliche Strukturen auftreten [GLANSDORFF und PRIGOGINE 1971]. Ein klassisches Beispiel ist hier in diesem Zusammenhang die Belousov-Zhabotinsky-Reaktion [ZAIKIN und ZHABOTINSKY 1970, WINFREE 1972, WINFREE 1973, HAKEN 1983, NICOLIS und PRIGOGINE 1987]. Sie zeigt sehr komplexes Verhalten. Die chemotak-

tische Aktivität zeigt Zielscheibenmuster, Spiralwellen und sogar mehrarmige Spiralen. Abschließend betrachten wir die Physik. Auch sie hat genügend hoch interessante Systeme zu bieten, die eine Strukturbildung zeigen. Dazu gehören Beispiele aus der Metrologie (z.B. Wolkenstrassen, Streifenmuster [HAKEN 1983]), der Geophysik (Konvektionsrollen in Erdmantel [KIND et al. 2002, BREUER et al. 2004]), der Gasentladungsphysik (strukturierte Stromdichten: Hexagone, Spiralen, Streifen, Zielscheiben) [BRAUER 2000, BRAUER et al. 1999, MÜLLER et al. 1999, ASTROV und PURWINS 2001, STRÜMPEL et al. 2001, AMMELT et al. 1998] und der Halbleiterphysik (strukturierte Stromdichten: Filamente, Spiralen, Domänen, Fronten) [SCHÖLL 1987, SCHÖLL 2001, NIEDERNOSTHEIDE 1999].

Beim Vergleich der einzelnen raumzeitlichen Strukturen fällt auf, dass immer ähnliche Strukturbildungsphänomene wie z.B. das Spiralmuster auftreten. Deswegen spricht man von einer Universalität der Strukturbildung. Die Zustandsänderungen völlig verschiedener biologischer, chemischer oder physikalischer Systeme laufen nach den gleichen Gesetzmäßigkeiten ab, die oft auf wenige wesentliche Merkmale der beteiligten Stoffe zurückgeführt und in mathematische Modelle gefasst werden können. Die musterbildenden Systeme werden typischerweise durch nichtlineare partielle Differentialgleichungssysteme beschrieben, deren analytische Lösung nur in den seltensten Fällen möglich ist. Aufgrund der immer steigenden Leistungsfähigkeit der Rechner können sehr aufwändige numerische Simulationen durchgeführt werden, die einen immer tieferen Einblick in die spezifischen „Materialeigenschaften“ des betrachteten Systems gewähren. Somit können viele wichtige Fragestellungen wie z.B. die Analyse der Instabilitätsmechanismen oder die Auswahlkriterien bestimmter Muster in den unterschiedlichsten Systemen diskutiert werden. Mit Hilfe der Wissenschaft geben wir so vielen alltäglichen Dingen in unserer Umwelt ein festes Fundament, auf dem für die Entwicklung zukünftiger Nutzenanwendungen aufgebaut werden kann.

Die Untersuchungen der hier vorliegenden Arbeit richten sich auf die Modellierung des Ladungsträgertransports und der Strukturbildung in einem wechselladungsgetriebenen Halbleitersystem. Das betrachtete Halbleiterbauelement besteht dabei im Wesentlichen aus fünf verschiedenen dünnen Schichten. Das Kernstück ist dabei eine dünne Halbleiterschicht, die zwischen zwei Isolatorschichten eingebettet ist. Kontaktiert wird das Bauelement über Aluminiumkontakte und einer transparenten Indiumoxidschicht. Bei der Halbleiterschicht handelt es sich um mangan-dotiertes Zinksulfid, das elektrolumineszierende Eigenschaften besitzt [ONO 1995]. Da die Elektrolumineszenz in diesen Bauelementen eng mit der lokalen Stromdichte in der ZnS:Mn-Schicht verbunden ist, wird so die Strukturbildung in der Stromdichte durch

die transparente Indiumoxidschicht optisch sichtbar. Die Dotierung mit Mangan führt zum Auftreten einer Bistabilität, die sich durch eine hystereseartige Leuchtdichte-Spannungs-Kennlinie [INOBUCHI und MITO 1973, MACH und MÜLLER 1982, MACH und MÜLLER 2000] und eine Vielzahl von Strukturbildungsphänomenen [MARRELLO et al. 1977, MARRELLO und ONTON 1980, RÜHLE et al. 1979, H.RÜFER et al. 1980, SCHÖLL et al. 1998, ZUCCARO 1997, ZUCCARO et al. 2000, BELETSKII und VLASENKO 1993a, BELETSKII und VLASENKO 1993b, KUKUK et al. 1997, GOSSSEN et al. 1995, GOSSSEN 1994, STRYCH 1996, VLASENKO et al. 2004] in der Elektrolumineszenz bemerkbar macht. Die beobachteten Strukturen haben dabei sowohl einen statischen (Multifilamentverteilungen) als auch einen dynamischen Charakter (Autowellen, Domänen, Spiralen). Welche Strukturierung im Experiment angenommen wird, hängt empfindlich von den äußeren Parametern, wie z.B. die Treiberspannung (Amplitude und Frequenz) und die Dotierungskonzentration [ZUCCARO 1997], ab. Auch hier fasziniert wieder die Übereinstimmung der beobachteten Strukturen in der ZnS:Mn-Elektrolumineszenz mit denen aus der obigen Diskussion.

Das Ziel dieser Arbeit besteht zunächst darin, mit Hilfe von bereits bestehenden experimentellen Daten, die grundlegenden Eigenschaften des ZnS:Mn-Bauelements zu untersuchen. Dazu werden Ergebnisse sowohl zum longitudinalen Transport (in Feldrichtung) als auch zur lateralen Strukturbildung analysiert. Daraus folgen charakteristische Systemeigenschaften, die für das Auftreten der Elektrolumineszenz überhaupt, der hystereseartigen Leuchtdichte-Spannungs-Kennlinie und der Strukturbildung notwendig sind. Im nächsten Schritt werden dann mathematische Modellgleichungen für den Ladungsträgertransport in dem hier betrachteten ZnS:Mn-Bauelement aufgestellt. Dafür müssen zuerst die charakteristischen Systemeigenschaften auf allgemeingültige Prinzipien abstrahiert werden. Parallel dazu muss eine angemessene Beschreibungsebene des Ladungstransports gefunden werden, die auf der einen Seite eine leichte Integration der Systemeigenschaften ermöglicht und auf der anderen Seite einen Vergleich mit experimentell zugänglichen makroskopischen Größen, wie z.B. Teilchenströme, erlaubt. Diese Überlegung führt uns in dieser konkreten experimentellen Situation auf ein Drift-Diffusions-Modell [LUNDSTROM 2000, SNOWDEN 1986, SELBERHERR 1984, SCHENK 2001], das im Allgemeinen nicht analytisch lösbar ist und daher mit Hilfe der Numerik auf einem Rechner gelöst werden muß. Es zeigt sich dabei, dass das hier entwickelte Modell die wesentlichen experimentellen Ergebnisse zum longitudinalen Transport reproduziert und dass zusätzlich räumlich lokalisierte Hochstrombereiche stabilisiert werden können.

## Kapitel 2

# Gliederung der Arbeit

Im Anschluss an die Motivation wird hier die Gliederung der Arbeit vorgestellt. Die Dissertation besteht insgesamt aus fünf Teilen.

Nach der Einleitung folgt der **zweite Teil**, in dem die experimentellen Grundlagen, die Strukturbildungsphänomene sowie auf der theoretischen Seite die Modellierung des Ladungsträgertransports und die Numerik besprochen werden. Dazu beginnen wir mit einigen geschichtlichen Hintergrundinformationen. Der Prozess der Elektrolumineszenz (Lichtemission) im Zinksulfid wurde in den 30er Jahren aufgrund eines fehlerhaften Experiments zufällig entdeckt. Eine kontinuierliche Weiterentwicklung dieser Entdeckung führte auf die Entwicklung von Elektrolumineszenzfolien und farbiger Displays. Letztere haben sich aufgrund technischer Probleme noch nicht vollständig am Markt durchgesetzt. Ausgehend von experimentellen Untersuchungen wird der Mechanismus der Elektrolumineszenz genauer studiert. Dazu werden zunächst ein paar einfache experimentelle Ergebnisse besprochen. Dabei steht die starke Abhängigkeit der Lumineszenz von der angelegten Spannung besonders im Vordergrund. Wird eine für das Bauelement charakteristische Grenzspannung erreicht, so setzt die Lichtemission schlagartig ein. Dieser Effekt wird dann im Folgenden an weiteren Kennlinien und Zeitreihen intensiver untersucht. Es wird insbesondere der Frage nachgegangen, welche Bauteilparameter die Elektrolumineszenz entscheidend beeinflussen. Diese Frage ist für die praktische Anwendung von großer Wichtigkeit, da man z.B. im Hinblick auf die Entwicklung von Displays stets an einer optimalen Lichtausbeute interessiert ist. Mit Hilfe dieser Erkenntnisse und zusätzlicher Informationen über diese speziellen Bauelemente kann dann ein Ladungstransportschema für die Elektrolumineszenz diskutiert werden. Dieses Schema dient dann später als Grundlage für die Modellierung eines Transportmodells. Unter bestimmten experimentellen Gegebenheiten (Abkühlung des Bauelements, Änderung der äußeren Spannung) zeigen die ZnS:Mn-Bauelemente in der räumlichen und zeitlichen Elektrolumineszenzverteilung eine spontane Strukturbildung.

Diese oft als Muster bezeichneten Verteilungen sollen in diesem Abschnitt vorgestellt werden. Die Experimente zeigen dabei eine große Vielfalt unterschiedlicher Muster, die sowohl räumlich stationär als auch dynamisch sein können. Danach folgt die theoretische Modellierung des Ladungsträgertransports. Dazu wird ausgehend von der klassischen Liouville-Gleichung die bekannte BBGKY-Hierarchie für die Verteilungsfunktion abgeleitet. Aus ihr kann dann mit Hilfe einiger zusätzlicher Annahmen die Boltzmann-Gleichung aufgestellt werden, die in ihrer semiklassischen Darstellung die Grundlage vieler theoretischer Untersuchungen auf dem Gebiet des Transports in Festkörpern darstellt. Für die hier zu untersuchende Fragestellung würde die Lösung der semiklassischen Boltzmann-Gleichung viel zu detaillierte Informationen liefern, die einen direkten Vergleich mit dem Experiment erschweren. Um die Informationsdichte zu komprimieren werden in einem nächsten Schritt einfachere makroskopische Gleichungen aus der semiklassischen Boltzmann-Gleichung berechnet. Man sucht nach einfacheren Bilanz-Gleichungen, die im allgemeinen Fall analog zur BBGKY-Hierarchie wieder eine unendliche Hierarchie bilden. Diese Hierarchie wird auf der einfachsten Ebene abgebrochen und es folgt zusammen mit der Poisson-Gleichung ein Transportmodell, dessen Ströme durch Drift und Diffusion charakterisiert werden. Diese Drift-Diffusions-Modelle sind im Allgemeinen analytisch nicht lösbar. Ihre Lösung muss mit Hilfe eines Computerprogramms bestimmt werden. Die besondere Struktur der Bilanz-Gleichungen erfordert eine spezielle Diskretisierung des Transportproblems, die im letzten Abschnitt des zweiten Teils vorgestellt wird.

Im **dritten Teil** der vorliegenden Arbeit werden die Simulationsergebnisse diskutiert. Dabei wird zuerst der wechselladungsgetriebene longitudinale (1D) Transport untersucht. Die Rechnungen zeigen aufgrund stark nichtlinearer Transportprozesse wie z.B. Tunnelinjektion aus Grenzflächenzuständen und Band-Band-Stoßionisation sehr interessante Ergebnisse. Dabei wird neben der Feldabschirmung, die schon gut innerhalb der ersten Spannungsperioden untersucht werden kann, der periodisch stationäre Zustand studiert. Dieser Zustand ist durch eine pro Halbperiode konstante übertragende Ladung charakterisiert und stellt sich oft erst nach sehr vielen Spannungsperioden ein. Mit Hilfe der Lösung dieses Zustandes kann eine besondere Kennlinie berechnet werden. Dabei wird die pro Halbperiode übertragende Ladung gegen die angelegte Spannungsamplitude aufgetragen. Das besondere an dieser Kennlinie ist ihre Bistabilität, deren Form durch zwei unstetige Ladungssprünge bestimmt wird. Im weiteren Verlauf der Arbeit wird untersucht, welche Bauteilparameter wesentlich zum Aufbau der Hysterese (Bistabilität) beitragen. Diese hysteresartige Kennlinien, die auch experimentell beobachtet werden können, sind für die weiteren Untersuchungen der spontanen Strukturbildung sehr wichtig. So zeigen typische Experimente zur Strukturbildung nur dann räumlich inhomogene Lumineszenzverteilung-

en (Muster), falls die Spannung nahe genug der Schwelle für den Übergang von schwacher (übertragende Ladung klein, kleiner Strom) zu starker (übertragende Ladung groß, großer Strom) Lumineszenz gewählt wird. Motiviert durch die experimentellen Ergebnisse auf der einen und die theoretisch berechneten Kennlinien auf der anderen Seite werden zweidimensionale Simulationen durchgeführt. Das Ziel ist die Beantwortung der Frage, ob auch in einer zweidimensionalen Bauteilgeometrie lokalisierte Strominhomogenitäten existieren können. Um dies zu untersuchen werden Simulationen mit verschiedenen Anfangsbedingungen (z.B. künstliches Startfilament, homogene Anfangsbedingung plus Rauschen) durchgeführt. Die entsprechenden Rechnungen zeigen in der Tat einzelne lokalisierte Hochstrombereiche, dessen Stabilisierung anschließend intensiv untersucht wird. Infolge der Variation einiger Bauteilparameter können gezielt mehrere Hochstrombereiche im Simulationsgebiet erzeugt werden, die dann miteinander wechselwirken, falls ihr gegenseitiger Abstand zu gering ist. Diese Wechselwirkung wird dann genauer studiert und es stellt sich beispielsweise heraus, dass die einzelnen Hochstrombereiche einen optimalen gegenseitigen Abstand bevorzugen. Aufgrund der dreidimensionalen Anordnung des Experiments und der damit verbundenen zweidimensionalen Strukturierung der Elektrolumineszenz wird die bisherige zweidimensionale Simulation um die letzte noch übrig bleibende Raumdimension erweitert. Durch die Erweiterung kann untersucht werden, welche Form die lokalisierten Inhomogenitäten in der Ebene annehmen. Die ersten numerischen Ergebnisse bestätigen die in den Experimenten beobachtete kreisförmige Ausdehnung der Hochstrombereiche. Um auch in diesem Fall mehrere Hochstrombereiche zu erzeugen, haben wir wieder gezielt einzelne Bauteilparameter geändert. Dadurch können wir die Wechselwirkung zwischen den einzelnen Inhomogenitäten untersuchen. Schon an dieser Stelle sei angemerkt, dass die dreidimensionale Simulation numerisch sehr aufwändig ist, da mitunter infolge der gewählten Diskretisierung sehr große dünnbesetzte lineare Gleichungssysteme, die sehr viel Rechenzeit in Anspruch nehmen, gelöst werden. Zum Abschluss dieses Teils werden die numerischen Simulationsergebnisse mit experimentellen Ergebnissen verglichen.

Nach dem Ergebnisteil folgt der **vierten Teil**, in dem alle Ergebnisse noch einmal zusammengefasst werden. Zusätzlich wird ein Ausblick für weitere Arbeiten gegeben. Der letzte Teil (**fünfter Teil**) der Dissertation ist den Anhängen gewidmet. Hier kann die komplette Diskretisierung des Transportmodells nachgelesen werden.



## **Teil II**

# **Experimentelle Grundlagen zur Strukturbildung und Modellierung des Ladungsträgertransports**

## Kapitel 3

# Elektrolumineszierende ZnS:Mn-MISIM-Bauelemente

### 3.1 Geschichtlicher Hintergrund

Ausgangspunkt für die umfangreichen Untersuchungen auf dem Gebiet der ZnS-Elektrolumineszenz war im Jahr 1936 ein zufälliges Experiment von G. Destriau [DESTRIAU 1936]. Er arbeitete zu dieser Zeit im Labor der späteren Nobelpreisträgerin M. Curie in Paris und beschäftigte sich mit der Entwicklung einer neuen Metallegierung, deren Leitfähigkeit er untersuchen wollte. Schon bei der Herstellung dieser Legierung unterlief Destriau ein folgenschwerer Fehler. Eigentlich sollte die zu untersuchende Legierung nur aus Zinksulfid bestehen, aber er verunreinigte sie mit Kupfer. Trotz des Fehlers schloss er das Material an eine Stromquelle an und stellte überrascht fest, dass die Legierung bei hohen elektrischen Feldstärken Licht emittiert. Das Grundprinzip ist dabei ein typisches Halbleiterphänomen. Durch das elektrische Feld können die beschleunigten Elektronen die Kupferatome anregen. Dieser angeregte Zustand zerfällt dann unter Lichtemission im sichtbaren Bereich. Aber trotz umfangreicher Verfeinerungen waren die dünnen Schichten oft sehr unzuverlässig und die Lumineszenzausbeute war zu gering, so dass sich diese Beleuchtungstechnik nicht durchsetzen konnte. Dies lag vor allen Dingen in der Herstellung der dünnen transparenten und elektrisch leitenden Schichten begründet. So wurde beispielsweise das leitende und transparente Zinnoxid ( $\text{SnO}_2$ ) erst Jahre später entdeckt.

Aber dennoch legte Destriau mit seinen Arbeiten den Grundstein für die Entwicklung moderner dünner Elektrolumineszenzfolien (EL-Folien) und TFEL-Displays (Thin Film Electroluminescent Devices). Die heutigen modernen EL-Folien bestehen zum einen durch ihre Farbvielfalt infolge verschiedener Dotierungsstoffe und zum anderen durch weitere

interessante Eigenschaften, die herkömmliche Lichtquellen nicht besitzen. Sie sollen hier kurz aufgeführt werden.

Die heutigen EL-Folien sind sogenannte Lambertstrahler, d.h. die Leuchtdichte der von der Oberfläche emittierten Strahlung ist von jeder Seite gleich. Das emittierte Licht ist bei geeigneter Dotierung sehr schmalbandig, absolut gleichmäßig und weit sichtbar. Weitere Entwicklungen zeigten, dass derartige Folien äußerst robust gegen Vibrationen und mechanische Stöße sind. Zusätzlich sind sie flach, flexibel, leicht verformbar und unempfindlich gegen tiefe Temperaturen. Um die Sichtbarkeit in der Nacht noch weiter zu erhöhen, konnten spezielle Folien entwickelt werden, die ihr Emissionsmaximum zwischen 500 nm und 515 nm Wellenlänge haben, was dem Empfindlichkeitsmaximum des menschlichen Auges bei Nacht entspricht. Diese speziellen Eigenschaften machen diese Technologie sehr interessant für das Militär und die Luftfahrtindustrie, wo diese Folien z.B. für die Instrumenten- bzw. Tastaturbeleuchtung oder für die Tragflächenbefeuerung eingesetzt werden. Darüberhinaus wird die EL-Beleuchtungstechnik oft in der Gebäudetechnik sowie in der Werbeindustrie verwendet. EL-Displays konnten sich dagegen trotz ihres einfachen Schichtaufbaus bisher noch nicht am Markt durchsetzen, da die kontrastreiche Farbdarstellung immer noch Probleme bereitet.

Für weitere wichtige Eigenschaften und Anwendungsmöglichkeiten der EL-Technik wird auf die Übersichtsartikel [INOUCHI und MITO 1973, MACH und MÜLLER 1982, MACH und MÜLLER 2000] sowie das Buch [ONO 1995] verwiesen.

## 3.2 Phänomenologisches Verhalten

Heutige TFEL-Bauelemente haben einen relativ einfachen Aufbau (Abb. 3.1). In der Regel wird ein elektrolumineszierendes Halbleitermaterial zwischen zwei Isolatoren eingebettet. Dieses Schichtsystem wird dann auf einer transparenten und elektrisch leitenden ITO-Schicht positioniert, die wiederum auf einen Glassträger aufgedampft ist. Kontaktiert wird die TFEL-Struktur dann über Aluminiumelektroden. Auf weitere Details zur Herstellung dieser Bauelemente soll hier nicht weiter eingegangen werden. Näheres findet sich aber beispielsweise in [ZUCCARO 1997, GOSSEN 1994]. Diese Schichtstruktur wird oft in der Literatur aufgrund der Reihenfolge der Schichten als MISIM(Metal-Insulator-Semiconductor-Insulator-Metal) Bauelement bezeichnet. Legt man an eine solche MISIM-Struktur eine Wechselspannung, so emittiert die Halbleiterschicht ab einer Schwellenspannung  $U_{th}$  Licht, dessen Spektrum im Falle von mangandotiertem Zinksulfid (ZnS:Mn) im sichtbaren Bereich liegt (Abb. 3.2). Da man die Elektrolumineszenz mindestens durch einen der beiden Isolatoren betrachten möchte, muss einer der Isolatoren für den Spektral-

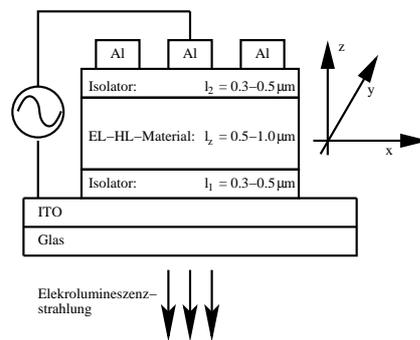


Abbildung 3.1: Schematischer Aufbau des wechsellspannungsgetriebenen TFEL-Bauteils. Typische Längenabmessungen des Glasträgers liegen zwischen 1 und 2 cm, so dass sich insgesamt eine Fläche von 1-4 cm<sup>2</sup> ergibt. Die Fläche der Aluminiumkontakte liegt im Bereich einiger Quadratmillimeter.

bereich des emittierten Lichts transparent sein. Außerdem sollten die Isolatoren eine hohe Dielektrizitätszahl sowie eine hohe Durchbruchspannung vorweisen, damit eine möglichst hohe Spannung an der Halbleiterschicht abfällt. Diese Auswahlkriterien führen auf zwei Klassen von Isolatormaterialien [MACH und MÜLLER 1982, HOWARD 1977, ONO 1995]:

1. Oxide und Oxinitride: z.B. Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, AlO<sub>x</sub>N<sub>y</sub>
2. Ferroelektrika: z.B. BaTiO<sub>3</sub>, SrTiO<sub>3</sub>.

Die Auswahl der elektrolumineszierenden Halbleitermaterialien (Halbleiter und Dotierungsmaterial) richtet sich natürlich nach dem gewünschten Spektrum des emittierten Lichts. Zusätzlich haben die Halbleiter- sowie die Dotierungsmaterialien folgende Auswahlkriterien zu erfüllen [MACH und MÜLLER 1982, MACH und MÜLLER 2000, ONO 1995, ONO 1997]:

- Halbleiter:
  - genügend große Bandlücke, damit das Licht von den Lumineszenzzentren ohne starke Absorption emittiert werden kann
  - „robust“ gegenüber großen Feldstärken (10<sup>6</sup> V/cm), d.h. Lichtemission soll in einem möglichst großen Spannungsintervall ( $U > U_{th}$ ) verfügbar sein, ohne dass die Halbleiterschicht zerstört wird
  - isolierende Eigenschaften für Spannungen unterhalb der Schwelle ( $U < U_{th}$ )
- Lumineszenzzentren:

- leicht in das jeweilige Gitter des Halbleiters zu dotieren
- gute Anregbarkeit (Wirkungsquerschnitt und Spektrum)
- „Stabilität“ der Dotierung gegenüber großen Feldstärken ( $10^6$  V/cm)

Besonders gut geeignet ist das oben schon erwähnte Zinksulfid (ZnS), welches mit einigen Molprozent Mangan (Mn) dotiert ist. Die Dotierungskonzentration ist bei den hier betrachteten Halbleitermaterialien deutlich höher als sonst üblich. Dabei ist weiterhin anzumerken, dass die Dotierungsmaterialien weder als Akzeptor noch als Donator fungieren, sondern im Wesentlichen nur als Lumineszenzzentrum wirken. Das emittierte Licht hat eine Wellenlänge vom 580 nm, was einem gelborangem Farbton (Abb. 3.2) entspricht. Neben dem ZnS erfüllen noch weitere II-VI Halbleiter wie Zinkselenid (ZnSe), Kalzium-

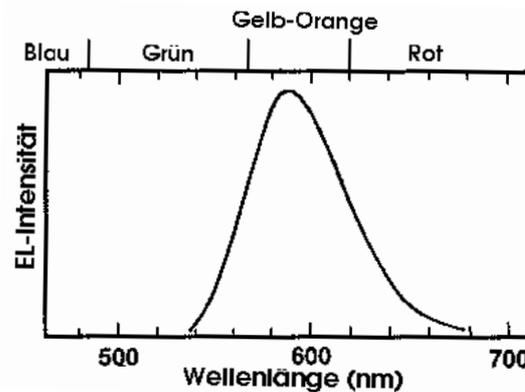


Abbildung 3.2: Spektrum des emittierten Lichts eines ZnS:Mn-Bauelements [ONO 1997].

sulfid (CaS), Strontiumsulfid (SrS) und Strontiumselenid (SrSe) die Anforderungen. Als geeignete Lumineszenzzentren haben sich Übergangsmetalle (z.B. Mangan) oder seltene Erden (Tb, Sm, Tm, Eu, Ce) erwiesen. Sie bestimmen jeweils die Farbe des emittierten Lichts, was für die Herstellung von Farbdisplays sehr wichtig ist. Insbesondere erfordert ihre Entwicklung die Farben (rot, blau und grün). Die Abbildung 3.3 zeigt dazu die Emissionsspektren einiger Materialkombinationen (CaS:Eu  $\rightarrow$  rot, ZnS:Sm,F  $\rightarrow$  grün, gelb, rot, ZnS:Tb,F  $\rightarrow$  grün, SrS:Ce  $\rightarrow$  blau).

Bisher wurden ausschließlich Details zur Herstellung besprochen. Bisher haben wir erfahren, dass wechsellspannungsgetriebene und dotierte MISIM-Bauelemente Licht in verschiedenen Wellenlängenbereichen emittieren. Der genaue Ladungstransport und damit das Prinzip der Elektrolumineszenz wurde bis jetzt noch nicht diskutiert. Bevor wir damit beginnen, betrachten wir einige experimentell gemessene Kennlinien eines ZnS:Mn Bauelements unter dem Einfluss einer sinusförmigen Wechsellspannung. Betrachten wir zuerst

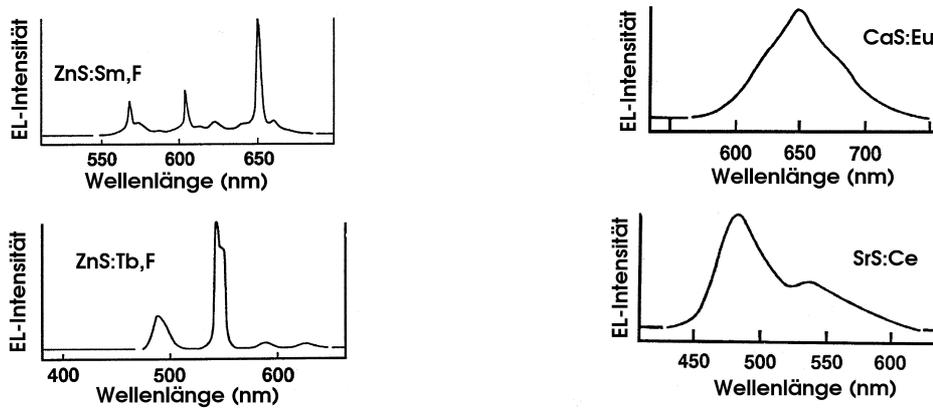


Abbildung 3.3: Beispiele für TFEL-Bauelemente mit unterschiedlichen Farben des emittierten Lichts [ONO 1997]. Dotierungsmaterialien: Eu: Europium, Ce: Cerium, Sm: Samarium, Tb: Terbrium, F: Fluor.

die Abbildung 3.4. Für Spannungen unterhalb einer kritischen Schwelle (hier  $U_{th} = 160$  V) bestimmt sich die Gesamtkapazität aus der Kennlinie aus einer Reihenschaltung der beiden Isolator- und der ZnS:Mn-Schicht. Hier verhält sich die dotierte Zinksulfidschicht also wie ein Kondensator. Dies ist am linearen Stromverlauf und dem konstanten Phasenwinkel zwischen Strom und Spannung von  $\Phi = 90^\circ$  zu erkennen. Ein Blick auf die Abbildung 3.5 verrät, dass in diesem Spannungsbereich auch kein Licht, d.h. die Lumineszenz  $L$  ist Null, emittiert wird. Übersteigt die angelegte Spannungsamplitude den Wert

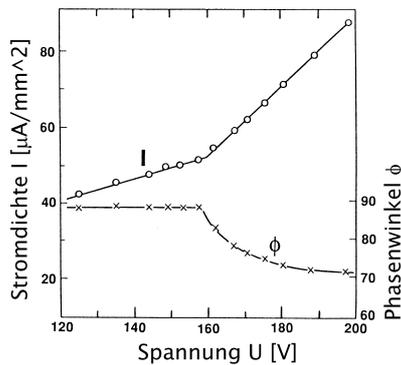


Abbildung 3.4:  $I$ -,  $\Phi$ - $U$ -Kennlinie (Sinusspannung 1 kHz) [ONO 1995].

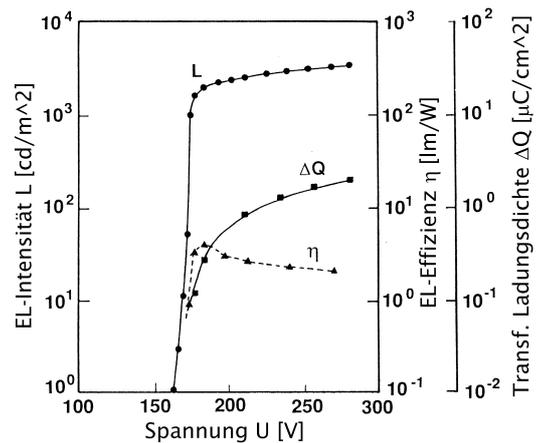
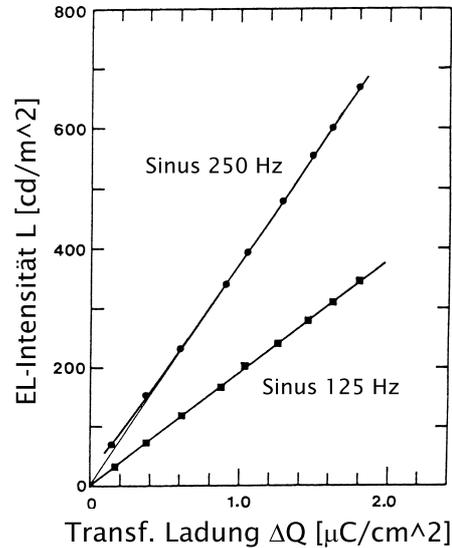


Abbildung 3.5:  $L$ -,  $\eta$ -,  $\Delta Q$ - $U$ -Kennlinie (Sinusspannung 1 kHz) [ONO 1995].

Abbildung 3.6:  $L$ - $\Delta Q$ -Kennlinie [ONO et al. 1987].

$U_{\text{th}}$ , so ist ein Stromknick sowie ein geänderter Phasenwinkel ( $\Phi \neq 90^\circ$ ) zu beobachten (Abb. 3.4). In dieser Situation ändert sich die Gesamtkapazität, da neben den beiden Isolator­kapazitäten ein induktiver Widerstand (Halbleiterschicht) zu berücksichtigen ist. Damit verliert das Bauelement und insbesondere die ZnS:Mn-Schicht seine Kondensator­eigenschaft und ein dissipativer Strom beginnt zu fließen. Gleichzeitig ist in Abbildung 3.5 ein sehr steiler Anstieg in der Lumineszenz  $L$ , in der Lumineszenzausbeute  $\eta$  und in der übertragenen Ladungsdichte  $\Delta Q$  zu beobachten. Die Größe  $\eta$  beschreibt dabei das Verhältnis zwischen Eingangsleistung pro Fläche und  $L$ . Nach dem Überschreiten von  $U_{\text{th}}$  verlaufen  $\Delta Q$  und  $L$  wieder linear, während die Lumineszenzausbeute  $\eta$  nach dem Durchschreiten ihres Maximums bei  $U_{\text{th}}$  wieder abnimmt. Der obige lineare Zusammenhang [ONO 1995, TÖRNQVIST 1982] konnte noch genauer untersucht werden (Abb. 3.6). Daraus ergibt sich, dass die Lumineszenz  $L$  proportional zum Produkt aus Frequenz  $f$  der anliegenden Spannung und übertragender Ladung  $\Delta Q$  verläuft. Möchte man also die Lichtintensität erhöhen, so muss man die übertragene Ladungsdichte im Bauelement steigern. Damit es aber überhaupt zur Lichtemission kommt, müssen aber zwei wesentliche Parameter bei der Herstellung des TFEL-Bauelements gesetzt werden (Abb. 3.7, 3.8) [SASAKURA et al. 1981b, SASAKURA et al. 1981a]. Damit die Lichtemission überhaupt zustande kommt, muss erstens die dotierte Zinksulfidschicht ausreichend dick sein (Abb. 3.7). Für die vorliegende Probe erreicht man erst ab Dicken von  $d = 30$  nm einen Lumineszenzanstieg, der dann mit zunehmender Dicke annähernd linear verläuft. Die Lumines-

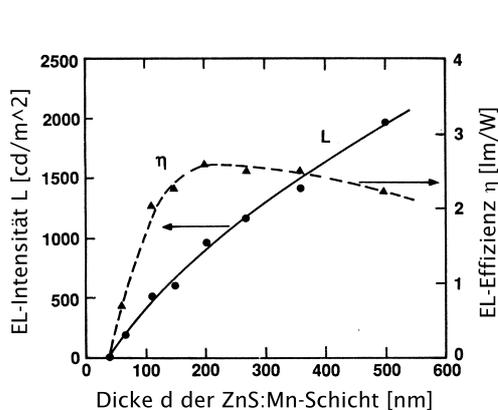


Abbildung 3.7: Abhängigkeit von  $L$  und  $\eta$  von der Dicke der ZnS:Mn-Schicht [TÖRNQVIST et al. 1983].

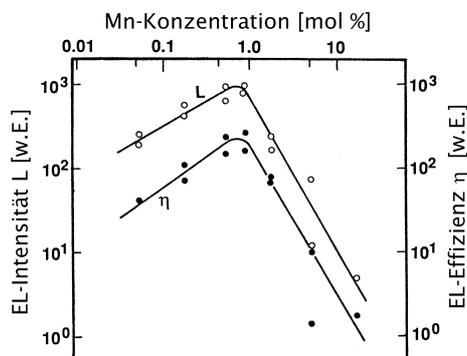


Abbildung 3.8: Abhängigkeit von  $L$  und  $\eta_{\max}$  von der Mangan-Dotierungskonzentration [SASAKURA et al. 1981b].

zenausbeute erreicht dagegen bei einer Schichtdicke von ca. 200 nm ihr Maximum und bleibt danach fast konstant. Zweitens muss die Dotierungskonzentration genügend groß gewählt werden. Die Abbildung 3.8 zeigt, dass es eine optimale Dotierungskonzentration für eine maximale Lumineszenzausbeute gibt. Die durchgeführten Experimente zeigen eine starke Abhängigkeit von  $L$  und  $\eta$  gegenüber der Dotierungskonzentration [ONO 1995].

Zum Schluss dieses Abschnitts diskutieren wir noch eine weitere sehr interessante Eigenschaft der Elektrolumineszenz der ZnS:Mn-Struktur. Zur Diskussion betrachten wir die Abbildung 3.9. Es ist zu erkennen, dass die Intensität des emittierten Lichts sehr stark von der Polarität der angelegten Spannung abhängt. Mit Spannungspulsen gleicher Polarität vermindert sich die Lichtintensität dramatisch. Wird dann ein Spannungspuls mit umgekehrter Polarität angelegt, so steigt die Intensität wieder sprunghaft an. Dieses Verhalten deutet auf einen Gedächtniseffekt hin [INOUCHI und MITO 1973, MACH und MÜLLER 1982]. Weitere Untersuchungen dieses experimentellen Ergebnisses führten auf die Intensitäts-Spannungshysterese (Abb. 3.10) [HOWARD 1981, MARRELLO et al. 1977]. Das Auftreten der Hysterese hängt dabei stark von der Dotierungskonzentration und der Dicke der Zinksulfidschicht ab [MARRELLO und ONTON 1980, SASAKURA et al. 1981b].

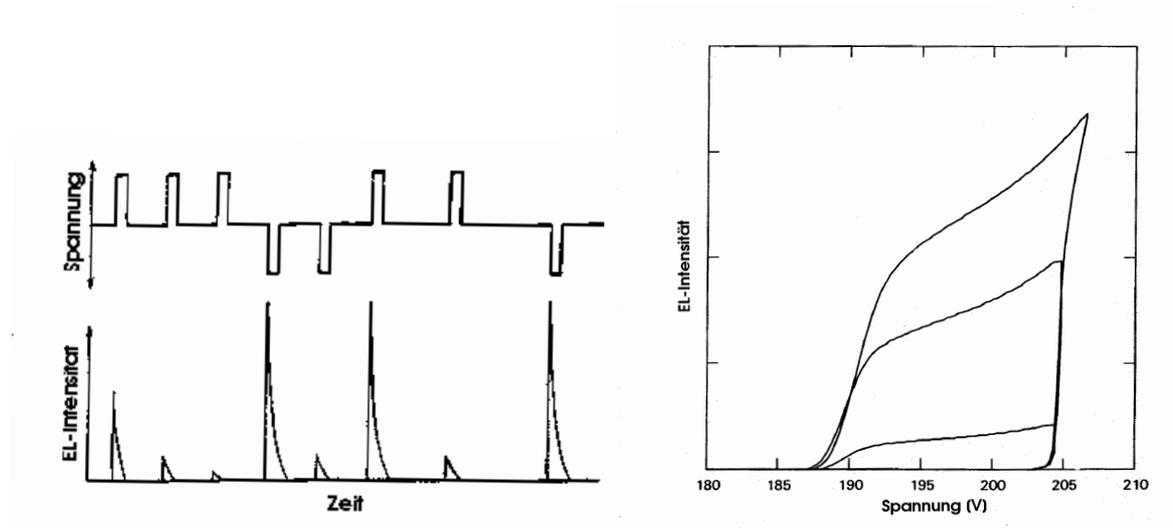


Abbildung 3.9: Schematische Abhängigkeit der Lumineszenz von der Polarität der Spannungspulse [INOUCHI und MITO 1973].

Abbildung 3.10: Experimentell gemessene Intensitäts-Spannungs-Hysterese eines ZnS:Mn-Bauelements [HOWARD 1981].

### 3.3 Mechanismus der Elektrolumineszenz

Im vorherigen Kapitel (Kap. 3.2) haben wir einige phänomenologische Eigenschaften des ZnS:Mn Bauelements mit Hilfe von experimentell gemessenen Kennlinien diskutiert. In diesem Kapitel soll der Grundmechanismus der Elektrolumineszenz genauer erläutert werden. Insbesondere wird dabei die Frage geklärt, woher die dissipative Stromkomponente (Abb. 3.4) und damit die Lumineszenzstrahlung (Abb. 3.5) kommt. Außerdem können wir aufgrund des Ladungstransports Überlegungen anstellen, die dem Gedächtniseffekt und die Hysterese (Abb. 3.9, 3.10) erklären.

Dazu betrachten wir im Folgenden die MISIM-Struktur unter Einfluss einer Wechselspannung (Abb. 3.11). Liegt die momentane Treiberspannung unterhalb der kritischen Schwellenspannung  $U_{th}$ , so verhält sich das komplette Bauelement, wie vorhin ausführlich beschrieben, wie ein idealer Kondensator. Erreicht die Spannungsamplitude nun aber den Wert  $U_{th}$ , so können Elektronen aus lokalisierten Zuständen in der Isolator-Halbleiterschicht (momentane Kathode) in das Leitungsband durch eine annähernd dreieckige Barriere tunneln (Prozess 1). Die gerade angesprochenen Zustände entstehen bei der Herstellung der polykristallinen Proben durch Fehlanpassungen in der Kristallstruktur und durch offene chemische Bindungen. Die Zustände liegen etwa 1 eV unterhalb der Lei-

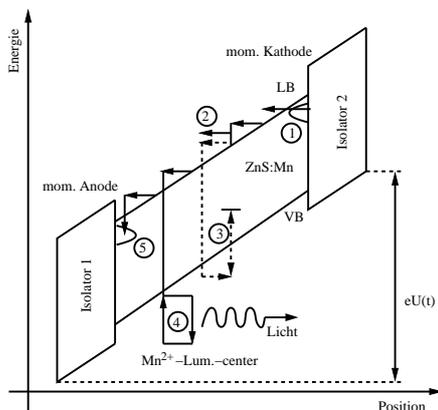


Abbildung 3.11: Energiebandschema für ZnS:Mn-Struktur unter Einfluss einer Spannung. Die eingekreisten Zahlen werden im Text erläutert.

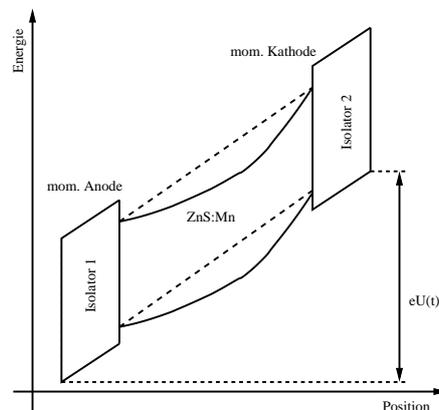


Abbildung 3.12: Energiebandschema für ZnS:Mn-Struktur unter Einfluss einer Spannung und einer positiven Raumladung.

tungsbandkante [BRINGUIER 1989, BRINGUIER 1997]. Die emittierten Elektronen werden in der ZnS-Schicht durch das anliegende elektrische Feld ( $\propto 10^6$  V/cm) stark beschleunigt. Auf dem Weg zur momentanen Anode können die Elektronen verschiedene Streuprozesse durchlaufen. Die erste Möglichkeit besteht darin, dass Elektronen mit den in das Zinksulfidgitter „eingebauten“ Manganatomen zusammenstoßen und so ihre kinetische Energie abgeben. Dadurch werden die Manganatome, wie im Kapitel 3.1 schon angedeutet, angeregt [MACH und MÜLLER 1982, MACH und MÜLLER 2000, BRINGUIER 1994, SMITH 1981, ONO 1995]. Dazu benötigen die Elektronen mindestens die Energie von 2.2 eV. Wenn die angeregten Lumineszenzzentren (Prozess 4) wieder in ihren Grundzustand relaxieren, wird Licht (Lumineszenzdauer ca. 1 ms) mit einer für das Dotierungsmaterial charakteristischen Wellenlänge emittiert [FURDYNA et al. 1996]. Es ist dabei zu bemerken, dass diese Relaxation auch strahlungsfrei über Phononenemission erfolgen kann [WAGER und KEIR 1997]. Selbstverständlich können die Elektronen mehrmals auf ihrem Weg zur Anode die Manganatome anregen, vorausgesetzt sie gewinnen infolge des elektrischen Feldes wieder ausreichend kinetische Energie. Mit Hilfe von numerisch berechneter Bandstrukturen und einer Monte-Carlo-Simulation für den Ladungstransport in einkristallinem ZnS kann man die mittlere Elektronenenergie für die Anregung bestimmen [BRENNAN 1988, BHATTACHARYYA et al. 1993, BRINGUIER 1991]. So konnten z.B. Bhattacharyya et al. angeben, dass bereits bei einer Feldstärke von 1 MV/cm 26% (2 MV/cm 65%) der Elektronen die nötige Energie besitzen, um die Manganatome anzuregen. Die

Elektronen, die infolge des Transports die momentane Anode erreichen, werden wieder von leeren Grenzflächenzuständen in der Isolator-Halbleiter-Schicht eingefangen (Prozess 5). Nach Ablauf einer halben Periode der Wechselspannung wird die Spannung umgepolt und der oben beschriebene Transportprozess beginnt von Neuem. Damit haben wir den wesentlichen Prozess zur Elektrolumineszenz beschrieben.

Neben der Anregung der Manganatome im ZnS:Mn sind aufgrund der großen Feldstärken und der großen Anzahl von Defektzuständen weitere Generations- und Rekombinationsprozesse denkbar [BHATTACHARYYA et al. 1993, BRINGUIER 1994, BRINGUIER 1997]. Diese Prozesse führen in der Regel auf eine positive Raumladung, die in der Literatur intensiv diskutiert wurde. Die Entstehung der Raumladung kann im Wesentlichen in drei Kategorien unterteilt werden:

1. Band-Band Stoßionisation mit anschließendem kontinuierlichem Löchereinfang (Prozess 2 und 3) [BRINGUIER 1992, HOWARD et al. 1982, JAREM und SINGH 1988, NEYTS 1991, GOLDENBLUM et al. 1994, NEYTS et al. 1994]: Übersteigt dabei die kinetische Energie der Elektronen ein Vielfaches der Bandlückenenergie  $E_{\text{Gap}} = 3.7$  eV (ZnS), so können Elektron-Loch-Paare über die Stoßionisation von Elektronen am Zinkgitter erzeugt werden. Dabei nimmt ein Elektron im Valenzband den Energieüberschuss des stoßenden Elektrons im Leitungsband auf und gelangt so in das Leitungsband, wo es in Richtung der momentanen Anode beschleunigt wird. Das im Valenzband entstandene Loch wird dementsprechend in die entgegengesetzte Richtung beschleunigt. Auch hier kann wieder mit einer vorher berechneten Bandstruktur und einer Monte-Carlo-Simulation das Hochfeldtransportproblem diskutiert werden. Die Rechnungen zeigen, dass schon bei Energien von  $1.5 \times E_{\text{Gap}}$  eine massive Stoßionisation einsetzt [REIGROTZKI et al. 2001]. Die Löcher können dann auf ihrem Weg zur momentanen Kathode von sogenannten Löcherfallen eingefangen werden. Mit Hilfe von Photodepolarisationsmessungen an ZnS:Mn Proben kann die energetische Lage der Löcherfallen bestimmt werden. Sie liegen ca. 0.2-0.4 eV oberhalb der Valenzbandkante [VLASENKO et al. 2000b, VLASENKO et al. 2000a].
2. Stoßionisation von eingefangenen Elektronen an tiefen Störstellen: Ein Elektron mit genügend großer Energie aus dem Leitungsband trifft auf ein eingefangenes Elektron, das daraufhin ins Leitungsband gelangt. [KEIR et al. 1995, YANG und OWEN 1983, RIGBY et al. 1988, THOMPSON und ALLEN 1990, SHIH et al. 1995].
3. Feldemission von Elektronen: Ein eingefangenes Elektron tunnelt aufgrund der hohen Feldstärke direkt in das Leitungsband [BRINGUIER 1994, KEIR et al. 1995, BRINGUIER 1992].

Die Gegenwart einer positiven Raumladung hat selbstverständlich ihre Auswirkungen auf das Energiebandschema. Sie führt zu einer inhomogenen Verteilung des elektrischen Feldes (Abb. 3.12), so dass das von der äußeren Spannung hervorgerufene Feld verstärkt oder abgeschirmt werden kann. Dieser Einfluss der positiven Raumladung wird in den später gezeigten Simulationsergebnissen von großer Bedeutung sein.

An dieser Stelle sei schon hier angemerkt, dass für die spätere Modellierung des Ladungstransports nur die Band-Band-Stoßionisation mit anschließendem Löchereinfang (erster Prozess in obiger Aufzählung) berücksichtigt wird. Aufgrund der energetischen Lage der Fallen soll zusätzlich eine thermisch aktivierte Löcheremission betrachtet werden. Daher sind die Prozesse der Kategorien 2 und 3 in der Abbildung 3.11 nicht dargestellt.

Mit dem vorgestellten Transportschema können wir die Kennlinien in Kapitel 3.2 leicht verstehen. Der Stromknick in der Abbildung 3.4 resultiert vom einsetzenden Tunnelstrom und eventuell auftretender Stoßionisation. Die starke Schwellenabhängigkeit des Stromes sowie der Lumineszenz (vgl. Abb.3.5) liegt, wie wir später noch genauer sehen werden, im exponentiell vom Feld abhängigen Tunnelstrom begründet. Außerdem spielt in diesem Zusammenhang die ebenfalls starke Feldabhängigkeit des Stoßionisationskoeffizienten eine wichtige Rolle. Das Feld an der momentanen Kathode muss so stark sein, damit die Tunnelbarriere (Prozess 1 in Abb. 3.11) genügend schmal wird. Dann setzt der Tunnelstrom schlagartig ein. Sobald Elektronen durch die ZnS:Mn-Schicht fließen, können die Lumineszentren angeregt werden. Somit ist klar, warum der Stromknick mit dem starken Lumineszenzanstieg  $L$  und der übertragenden Ladungsdichte  $\Delta Q$  in Abbildung 3.5 zusammenfällt. Durch eine zu hohe Mangankonzentration wird die mittlere freie Weglänge der Elektronen und damit die Anregungswahrscheinlichkeit der Manganatome stark reduziert. Zusätzlich nehmen nichtstrahlende Übergänge im Manganatom deutlich zu. Daher nimmt die Lumineszenzausbeute in Abbildung 3.8 ab einer Dotierungskonzentration von 1 mol% stark ab. Mit der Hilfe des Transportschemas 3.11 kann die Zeitreihe (Abb. 3.9) sowie die Kennlinie (Abb. 3.10) leicht interpretiert werden. Infolge des Ladungstransports bilden sich Flächenladungen an den beiden Halbleiter-Isolator-Grenzschichten aus. Darüberhinaus baut sich infolge des Löchereinfangs eine positive Raumladung in der ZnS:Mn-Schicht auf. Diese Ladungen können bei genügend hoher Konzentration das von der äußeren Spannung induzierte Feld entweder verstärken oder abschirmen. In Fall einer Pulsfolge mit gleicher Polarität (Abb. 3.9) schirmt das von den Grenzflächen erzeugte Feld das äußere ab. Dadurch fließt ein kleinerer Strom durch die ZnS:Mn-Schicht, da sowohl die Stoßionisation als auch die Tunnelinjektion stark feldabhängig sind. Somit ist die übertragende Ladung  $\Delta Q$  kleiner und folglich die Lumineszenzausbeute (Abb. 3.6) geringer. Im Fall wechselnder Spannungspolarität wird das äußere Feld vom Feld der

Grenzflächenladungen unterstützt, so dass mehr Manganatome angeregt werden und damit mehr Licht emittiert wird. Die Leuchtintensitäts-Spannungs-Hysterese kann der positiven Raumladung zugeschrieben werden. Dazu wird nochmal die Abbildung 3.10 betrachtet. Wird, ausgehend von einer starken Lumineszenz ( $U > 205$  V), die Spannungsamplitude der anliegenden Wechselspannung verringert, so rekombiniert die positive Raumladung nicht sofort. Vielmehr wird sie langsam abgebaut, so dass sie das äußere Feld auch bei kleineren Spannungsamplituden ( $195$  V  $< U < 205$  V) verstärken kann und dadurch eine höhere Lichtintensität zulässt.

### 3.4 Strukturbildung in der ZnS:Mn-Elektrolumineszenz

Alle bisherigen Lumineszenzerscheinungen wurden als räumlich und zeitlich homogen angenommen. Alles andere wäre speziell im Hinblick auf die Entwicklung farbiger Displays sehr hinderlich. Aber gegen Ende der 70er Jahre wurden erstmals räumlich inhomogene Leuchtdichteverteilungen, die sowohl stationär als auch dynamisch sein können, in wechsellspannungsgetriebenen ZnS:Mn Systemen entdeckt [MARRELLO et al. 1977, MARRELLO und ONTON 1980, RÜHLE et al. 1979, H.RÜFER et al. 1980]. Dabei treten die Strukturen nicht nur bei Wechselspannung auf. Beale konnte zu Beginn der 90er Jahre Strukturbildungsprozesse auch in gleichspannungsgetriebenen ZnS:Mn Bauelementen beobachten [BEALE 1993]. Im Laufe der Zeit wurden eine Vielzahl von weiteren Experimenten zur Strukturbildung in ZnS:Mn Bauelementen durchgeführt [SCHÖLL et al. 1998, ZUCCARO 1997, ZUCCARO et al. 2000, BELETSKII und VLASENKO 1993a, BELETSKII und VLASENKO 1993b, KUKUK et al. 1997, GOSSEN et al. 1995, GOSSEN 1994, STRYCH 1996, VLASENKO et al. 2004] mit dem Ziel, die vielfältigen Muster genau zu erfassen sowie ihre Entstehung zu analysieren. Wesentliche Parameter für die Art der Musterbildung sind die Frequenz und Amplitude der angelegten Wechselspannung. Zuccaro hat die Entstehung verschiedener Muster am Beispiel einer Probe in dem folgenden Bifukationsdiagramm dargestellt (Abb. 3.13, 3.14). Es fällt auf, dass verschiedene Muster nur in einem sehr schmalen Bereich (farbiger Keil) des Diagramms (Frequenz  $\geq 2$  kHz, Spannung: 125-128 V, Temperatur: 293 K) auftreten. Betrachten wir im Folgenden das untere Ende des Keils, also Wechselspannungen mit Frequenzen  $\geq 120$  kHz. Erhöhen wir nun langsam (quasi-stationär) die Amplitude, so ist folgendes Szenario zu beobachten (vgl. dazu Kennlinien in Kap. 3.2 und Transportschema in Kap. 3.3). Für kleine Spannungen ist die Probe komplett dunkel. Ab Spannungen von ca. 90 V ist eine schwache und räumlich homogene Elektrolumineszenz zu beobachten, deren Intensität mit steigender Amplitude stetig zunimmt. Bei Spannungen ab 125.5 V können dann laufende

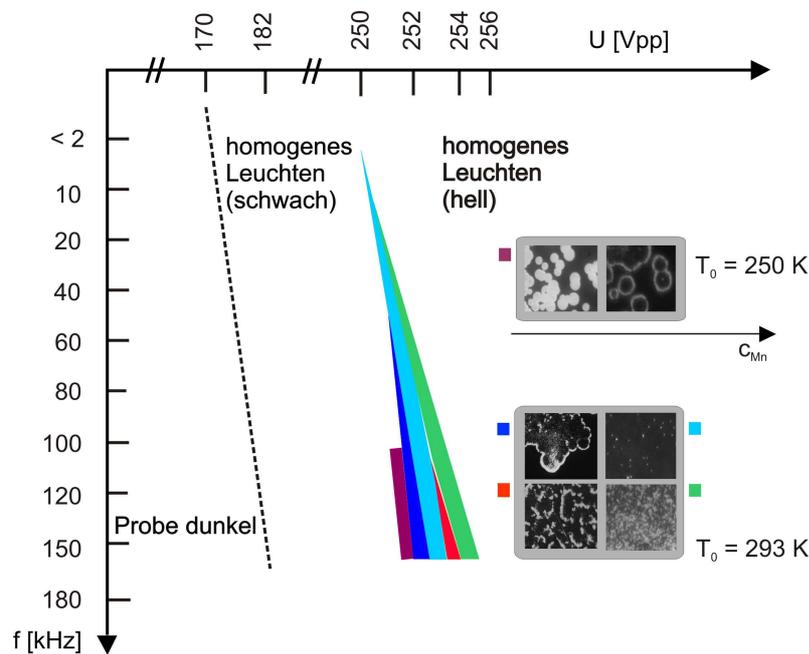


Abbildung 3.13: Bifurkationsdiagramm in Abhängigkeit der Frequenz und Amplitude der angelegten Wechselspannung für eine ZnS:Mn-Probe [ZUCCARO 1997]. Die gelbe Lumineszenzstrahlung ist hier weiß dargestellt.

Hochstrombereiche (dunkelblau) beobachtet werden. Dabei ist hier anzumerken, dass alle diskutierten Muster sich deutlich von der räumlich homogenen „Hintergrundelektrolumineszenz“ absetzen. Diese Muster werden als Zündfronten bezeichnet, da sie in der Regel nach ihrer Ausbreitung weitere Musterbildungsprozesse einleiten. Eine weitere Spannungserhöhung führt dann zur Bildung von stationären Filamenten (hellbau, Abb. 3.14: Bild 5), die dann später bei weiterer Amplitudenvergrößerung mit dynamischen Leuchtfäden (rot, Abb. 3.14: Bild 3) koexistieren. Kurz bevor die komplette Probe homogen leuchtet, zerfällt die vorher beobachtete Koexistenz von Filamenten und Leuchtfäden. Es bilden sich breite stationäre Filamente aus, die sich zu Clustern (grün) gruppieren. Bei kleineren Frequenzen werden nicht so viele verschiedene Muster beobachtet. So gehen am Anfang des Keils (Frequenzen  $\leq 50$  kHz) die stationären Filamente sofort in die Filamentcluster über.

Zusätzlich können einige Muster durch plötzliches Abkühlen (Temperatur: 250 K, Frequenz  $\geq 100$  kHz) der Probe gezündet werden. Es bilden sich je nach Dotierungsstärke kreisförmige Domänen (Abb. 3.14: Bild 4) oder Autowellen (Abb. 3.14: Bild 2) aus. Die beiden Muster sind in der Abbildung 3.13 mit violetter Farbe unterlegt. Als Domänen werden

Muster bezeichnet, deren Radius linear mit der Zeit wächst. Autowellen sind dagegen lumineszierende Ringe, die sich radial bei konstanter Ringbreite ausbreiten. Außerdem zeigt ihre gegenseitige Wechselwirkung eine sehr interessante Eigenschaft. Treffen zwei lumineszierende Ringe aufeinander, so ist keine Superposition der Lumineszenz zu beobachten, sondern es findet indes eine Annihilaion der Wellen statt. Dies steht im Gegensatz zu der Wechselwirkung, die bei den Domänen zu beobachten ist. Treffen z.B. zwei Domänen aufeinander, so verschmelzen beide bei gleichbleibender Lumineszenz. Nachdem sich die Temperatur der Probe an die Umgebungstemperatur angepasst hat, kann der gleiche oben dargestellte Musterzyklus beobachtet werden.

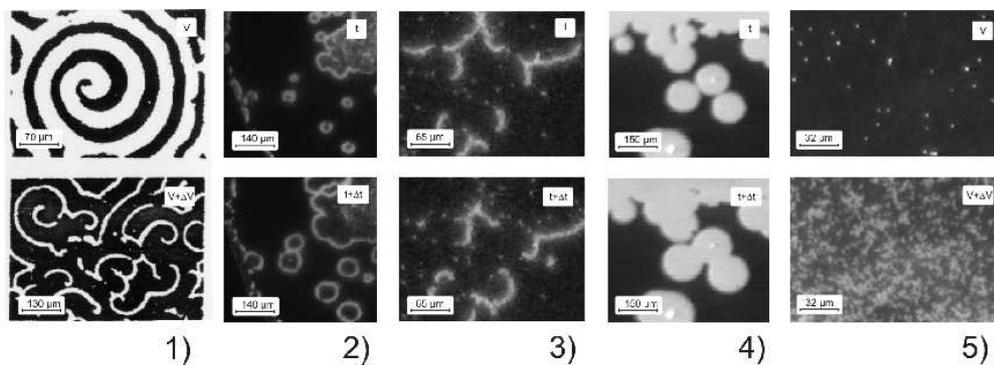


Abbildung 3.14: Verschiedene Muster in der ZnS:Mn Elektrolumineszenz. Die gelbe Lumineszenzstrahlung erscheint hier auch weiß. Dargestellt wird jeweils die Dynamik der Muster in Abhängigkeit von der Zeit (Spalten 2 bis 4) bzw. der Spannung (Spalten 1 und 5). Zeitschritt: Spalte 2:  $\Delta t = 140$  ms, Spalte 3:  $\Delta t = 120$  ms, Spalte 4:  $\Delta t = 150$  ms, Spannungsschritt: Spalte 1,5 :  $\Delta V = 2$  V [ZUCCARO 1997]. Alle Muster (außer Bild 1) werden im Text näher besprochen. Beim Muster 1 handelt es sich um sogenannte Spiralen, die bei einer Spannungserhöhung irregulär zerfallen.

## Kapitel 4

# Modellierung des Ladungstransports

Im Kapitel 3 wurde ausführlich die elektrolumineszierende mangandotierte Zinksulfid MISIM Struktur vorgestellt. Wir haben gesehen, dass diese wechsellspannungsgetriebenen Bauelemente eine Vielzahl von Leuchtdichtemustern zeigen. In diesem Kapitel soll dazu ein von mikroskopischen Prozessen ausgehendes Transportmodell entwickelt werden, mit dem die spontane Strukturbildung infolge des Ladungstransports beschrieben werden kann. Ein Großteil der Literatur über den Transport in diesen Bauelementen bezieht sich auf den eindimensionalen longitudinalen Transport. Große Bedeutung hat dabei das Modell von Howard, Sahni und Alt (HSA-Modell) [HOWARD et al. 1982]. Es war das erste numerisch einfach zu behandelnde Modell, das die experimentell beobachtete Lumineszenz-Spannungs-Hysterese mit Hilfe einer Ladungs-Spannungs Kennlinie beschreiben konnte. Es folgten weitere Transportmodelle [BRINGUIER 1989, BRINGUIER 1990, BRINGUIER 1997, JAREM und SINGH 1988, NEYTS 1991, GOLDENBLUM et al. 1994, NEYTS et al. 1994], die im Wesentlichen immer den longitudinalen Transport untersuchten. Dabei basieren viele dieser Modelle auf dem HSA-Modell, wobei einige Autoren noch weitere Näherungen eingeführt haben. Auf mikroskopischen Prozessen basierende Transportmodelle zur Untersuchung von lateralen Strukturbildungsphänomenen in ZnS:Mn-Strukturen sind dagegen zur Zeit nicht bekannt. Mit Hilfe von experimentellen Ergebnissen und theoretischen Überlegungen zum Ladungstransport hat Maier [MAIER 1998] ein physikalisch motiviertes phänomenologisches Modell aufgestellt, in dem die transferierte Ladung die Rolle des Aktivators und die Raumladung sowie die Temperatur die Rolle von zwei Inhibitoren spielen. Dieses Modell reproduziert einige der beobachteten Strukturen sehr gut. Mit diesem Modell sind aber einige Nach-

teile verknüpft. Es enthält nämlich eine große Zahl von Variablen, die aus dem gewählten Polynomansatz der Nichtlinearitäten hervorgehen. Diese können wiederum nicht direkt Materialeigenschaften zugeordnet werden.

Die Gleichungen bzw. Transportmodelle, die typische Transportphänomene beschreiben, lassen sich grob in drei verschiedene Kategorien einteilen. Als Ausgangspunkt betrachten wir ein klassisches Vielteilchensystem, bestehend aus  $N$  Teilchen. In der **ersten Kategorie** haben wir im  $6N$ -dimensionalen Raum (genannt  $\Gamma$ -Raum) die exakten Gleichungen der klassischen Mechanik. Aufgrund der typischen Teilchenzahlen ( $N \approx 10^{23}$ ) ist die direkte Integration dieses auftretenden Gleichungssystems nicht möglich. In diesem Zusammenhang spielt die Liouville-Gleichung [NOLTING 1996, FLIESSBACH 1995], auf die wir im nächsten Abschnitt genauer eingehen, eine wichtige Rolle. Sie beschreibt die zeitliche und räumliche Dynamik der  $6N$ -dimensionalen Verteilungsfunktion im  $\Gamma$ -Raum. Selbst wenn wir in der Lage wären, das obige  $N$ -Teilchenproblem exakt zu lösen, wären wir gezwungen die gewonnene Information in eine überschaubare Anzahl von Variablen und Größen zu komprimieren, um eine überprüfbare Beschreibung mit der Realität bzw. Experiment zu erhalten. Wir müssen also die hohe Phasenraumdimension reduzieren. Dazu betrachten wir die experimentelle Situation und wir fragen uns, welche Variablen wesentlich den Transportprozess charakterisieren. In der Regel sind dies Größen wie z.B. Teilchendichten oder Teilchenstromdichten. Bei allen vorhin genannten Größen handelt es sich um Einteilcheneigenschaften, d.h. um Größen, die additiv in den einzelnen Teilchen sind. Mathematisch führt diese Überlegung zum Übergang von der  $6N$ -dimensionalen Verteilungsfunktion zur 6-dimensionalen Verteilungsfunktion. Die Transportgleichungen in dieser **zweiten Kategorie** werden allgemein als die Gleichungen der kinetischen Theorie [HAUG 1996, JÄCKLE 1978, RIECKERS und STUMPF 1977] bezeichnet. Für viele praktische Anwendungen sind die Gleichungen der kinetische Theorie noch viel zu kompliziert. Sie enthalten noch zu viele Informationen über das zu untersuchende System, was einen direkten Vergleich mit den experimentell zugänglichen Daten schwierig macht. Wir suchen also nach einfachen makroskopischen Gleichungen, die Aussagen über messbare Größen im Ortsraum machen. Solche Gleichungen bzw. Transportmodelle der **dritten Kategorie** leiten wir aus den kinetischen Gleichungen durch Integration über den Geschwindigkeitsraum ab.

Allgemein können wir aus den kinetischen Gleichungen drei verschiedene (quantenmechanische, klassische und semiklassische) Modelltypen [MARKOWICH et al. 1990] entwickeln. Ausgangspunkt für die Beschreibung eines Teilchenensembles im klassischen Sinn ist, wie oben erläutert, das zweite Newtonsche Gesetz und eine statistische Beschreibung führt auf die klassische Liouville-Gleichung. Die quantenmechanischen Modelle be-

ruhen auf einem Vielteilchenhamiltonoperator und der Schrödingergleichung. Mit Hilfe der Wignertransformation und der Dichtematrix wird die quantenmechanische Liouville-Gleichung hergeleitet. Eine Zwischenstellung nehmen die semiklassischen Modelle ein. In diesen Modellen spielt das Quasiteilchenkonzept [MADELUNG 1972, MADELUNG 1970] eine entscheidene Rolle. Quantenmechanische Effekte werden dabei mit Hilfe des Energiebandschemas des betrachteten Halbleitermaterials berücksichtigt, so dass wir die semiklassische Liouville-Gleichung aus ihrem klassischen Gegenspieler und einer modifizierten Impulsbeziehung herleiten können. Für den Transport in Festkörpern werden ausschließlich Modelle semiklassischer oder quantenmechanischer Natur verwendet.

Aus einer Gleichungshierarchie der ersten Kategorie werden wir zwei wichtige Gleichungen betrachten. Zum einen leiten wir die Vlasov-Gleichung ab, in der alle Korrelationen zwischen den Teilchen vernachlässigt werden, und zum anderen leiten wir die Boltzmann-Gleichung her, die im Gegensatz zur Vlasov-Gleichung zusätzlich Zwei-Teilchen-Korrelationen berücksichtigt. Die Boltzmann-Gleichung, die ursprünglich den Transport in einem klassischen verdünnten Gas beschreiben sollte, spielt in der Festkörperphysik eine große Rolle und wurde auf vielen Gebieten, besonders beim Transport in Festkörpern, mit großen Erfolg angewendet. Die Lösung der Boltzmann-Gleichung ist ohne weitere Vereinfachungen nicht möglich. Diese Vereinfachungen ändern dabei den Charakter der Gleichung. Während die Transportgleichungen der ersten Kategorie invariant gegenüber der Zeitumkehr sind, genügen die Gleichungen der zweiten Kategorie dem Boltzmannschen  $H$ -Theorem [JÄCKLE 1978, RIECKERS und STUMPF 1977, RÖPKE 1986], was einer Entropiezunahme eines abgeschlossenen Systems entspricht.

Wir erhalten dann, unter Berücksichtigung der ersten beiden Momente der Verteilungsfunktion und semiklassischer Betrachtung schließlich ein Transportmodell, in dem der Transport der Teilchen (Ladungsträger) durch Drift infolge elektrischer Felder und Diffusion infolge Dichtegradienten beschrieben wird. Dieses Drift-Diffusions Modell (DD-Modell) bildet zusammen mit der Poisson-Gleichung das grundlegende Gleichungssystem dieser Arbeit. In der Literatur taucht dieses Differentialgleichungssystem oft unter dem Namen „Basic Semiconductor Equations“ [SNOWDEN 1986, MARKOWICH et al. 1990, SELBERHERR 1984] auf. Heute bilden DD-Modelle zusammen mit hydrodynamischen Erweiterungen die Grundlage vieler Simulationen von Halbleiterbauelementen. Ein Grund hierfür ist sicherlich die relativ einfache numerische Behandlung dieser Gleichungen, die eine schnelle und stabile Analyse des zu untersuchenden Bauelementes ermöglicht. Die kinetischen Gleichungen sind dagegen, wie oben erläutert, aufgrund ihrer hohen Phasenraumdimension nur sehr schwer zu lösen. Aber trotzdem gibt es Situationen, in denen semiklassische Modelle an ihre physikalische Grenzen stoßen, d.h. ihre Anwendbarkeit ist

aufgrund der speziellen Bauart des Bauelements nicht gegeben. So sind z.B. für viele VLSI (very large scale integration) Bauelemente die Annahmen des semiklassischen DD-Modells nicht erfüllt, so dass die kinetischen Gleichungen oder quantenmechanische Transportmodelle gelöst werden müssen [FERRY und JACOBONI 1992].

## 4.1 Klassische Transporttheorie

### 4.1.1 Die Liouville-Gleichung

Für die Ableitung der Liouville-Gleichung betrachten wir ein System, bestehend aus  $N$  Teilchen mit Masse  $m_\alpha$ , im äußeren Potential  $\Phi_{\text{extern}}(\vec{r}_\alpha)$  inklusive einer Zweiteilchenwechselwirkung mit dem Potential  $\Phi_{\alpha\beta} = \Phi_{\alpha\beta}(|\vec{r}_\alpha - \vec{r}_\beta|)$ . Die Vektoren  $\vec{r}_\alpha$  und  $\vec{v}_\alpha$  mit  $\alpha = 1, \dots, N$  bezeichnen die Orte bzw. die Geschwindigkeiten des  $N$  Teilchensystems. Die klassische Hamiltonfunktion lautet dann:

$$H(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, \vec{v}_1, \dots, \vec{v}_N) \equiv H(\{\vec{r}_\alpha\}, \{\vec{v}_\alpha\}, t) = \sum_{\alpha=1}^N \frac{1}{2} m_\alpha \vec{v}_\alpha^2 + \Phi_{\text{extern}}(\vec{r}_\alpha) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\alpha, \beta=1 \\ \alpha \neq \beta}}^N \Phi_{\text{intern}}^{\alpha\beta}. \quad (4.1)$$

Als nächstes definieren wir einen 6-dimensionalen Positionsvektor eines Teilchens  $\vec{X}_\alpha = \{\vec{r}_\alpha, \vec{v}_\alpha\}$  im Einteilchenphasenraum. Damit können wir die Position des Gesamtsystems im  $6N$ -dimensionalen Phasenraum ( $\Gamma$ -Raum) durch  $\vec{\Gamma} = \{\vec{X}_\alpha\}$  angeben, wobei hier wieder  $\alpha = 1, \dots, N$  gilt. Ein solcher Punkt im  $\Gamma$ -Raum steht dann für einen möglichen Mikrozustand des Systems. Die Zeitentwicklung des Gesamtsystems im  $\Gamma$ -Raum wird bestimmt durch Hamilton-Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \vec{r}_\alpha &= \frac{1}{m_\alpha} \frac{\partial}{\partial \vec{v}_\alpha} H(\{\vec{r}_\alpha\}, \{\vec{v}_\alpha\}, t) \\ \frac{d}{dt} \vec{v}_\alpha &= -\frac{1}{m_\alpha} \frac{\partial}{\partial \vec{r}_\alpha} H(\{\vec{r}_\alpha\}, \{\vec{v}_\alpha\}, t). \end{aligned} \quad (4.2)$$

Für praktische Zwecke ist dieser Zugang ungeeignet, da es prinzipiell unmöglich ist, die Orte und Geschwindigkeiten aller Teilchen exakt zu bestimmen und so z.B. einen Mikrozustand des Systems zu präparieren und anschließend mit Hilfe der Gleichungen (4.2) seine Zeitentwicklung zu beschreiben. Selbst wenn es möglich wäre, würden wir viel zu detaillierte mikroskopische Systeminformationen bekommen, mit denen ein experimenteller Vergleich schwer fallen würde. Wir sind eher (vgl. Kap. 4) an makroskopischen Eigenschaften des Systems interessiert, also Eigenschaften die das System im Mittel besitzt. Dies führt uns dahin, eine statistische Beschreibung einzuführen. Die Definition dieses Mittels geschieht über die Betrachtung von Ensembles von allen Mikrozuständen, die zu denselben

makroskopischen Eigenschaften des Systems führen. Die Mikrozustände eines Ensembles stellen jeweils einen Punkt im  $\Gamma$ -Raum dar. Ein Ensemble ist charakterisiert durch die Verteilung der Punkte seiner Mikrozustände und die makroskopische Zeitentwicklung des Systems ist charakterisiert durch die Zeitentwicklung dieser Verteilung im  $\Gamma$ -Raum. Die Wahrscheinlichkeit, einen Punkt im  $\Gamma$ -Raum (also einen Mikrozustand) zur Zeit  $t$  im Phasenraumvolumenelement  $d\Gamma = d^6\vec{X}_1 \dots, d^6\vec{X}_N$  zur Zeit  $t$  anzutreffen, ist durch  $F(\vec{X}_1, \dots, \vec{X}_N, t)$  gegeben. Die Funktion  $F$  ist dabei eine auf eins normierte  $N$ -Teilchenverteilungsfunktion. Für konservative Systeme genügt sie einer Kontinuitätsgleichung im  $\Gamma$ -Raum, der sogenannten Liouville-Gleichung

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_{\alpha=1}^N \left( \frac{\partial F}{\partial \vec{r}_\alpha} \frac{\partial \vec{r}_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial \vec{v}_\alpha} \frac{\partial \vec{v}_\alpha}{\partial t} \right) = 0 \quad (4.3)$$

oder mit Hilfe der Poisson-Klammer

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \{F, H\} = 0. \quad (4.4)$$

Das totale Zeitdifferential der Verteilungsfunktion verschwindet und es gilt demnach für alle Zeiten  $F(\{\vec{r}_\alpha\}, \{\vec{v}_\alpha\}, t) = F(\{\vec{r}_\alpha(t=0)\}, \{\vec{v}_\alpha(t=0)\}, t=0) = F_0$ . Anschaulich ist die Gleichung (4.3) einfach zu interpretieren: Ein mit der Ensembleströmung mitbewegter Beobachter sieht in seiner Umgebung immer dieselbe zeitlich konstante Dichte von Phasenpunkten. Oft spricht man von einer „Ensemble-Flüssigkeit“, die sich im Phasenraum wie ein inkompressible Flüssigkeit bewegt. Die Gleichung (4.3) bzw. (4.4) ist exakt und der statistische Charakter dieser Gleichung geht nur über die Anfangswahrscheinlichkeit  $F_0$  ein.

#### 4.1.2 Die BBGKY-Hierarchie

Die Liouville-Gleichung ist aus zweierlei Sicht für die praktische Anwendung ungeeignet. Zum einen ist der  $6N$ -dimensionale Phasenraum riesig ( $N \approx 10^{23}$ ), was die numerische Lösung sehr kompliziert macht, und zum anderen enthält die Lösung  $F$  der Liouville-Gleichung die volle statistische Information über alle dynamischen und mikroskopischen Details des Systems. Um diese große Informationshäufung weiter zu reduzieren, stellen wir folgende Überlegungen an. Wir gehen dabei von der Vermutung aus, dass bei geringer Teilchendichte und kurzreichweitigen Kräften die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen mit den Koordinaten  $\vec{X}_1$  zu finden, im Allgemeinen nur von wenigen Nachbarpartikeln mit Koordinaten  $(\vec{X}_2, \dots, \vec{X}_k)$  wesentlich beeinflusst wird. Die restlichen  $(N - k)$  Teilchen bilden nur einen uniformen Hintergrund und können daher in ihrer direkten Korrelation zum betrachteten Teilchen vernachlässigt werden. Diese Überlegung führt mathematisch, wie

wir in diesem Abschnitt sehen werden, auf eine Korrelationshierarchie für die Verteilungsfunktion  $f$ , die nach den Wissenschaftlern Bogoljubov, Born, Green, Kirkwood und Yvon BBGKY-Hierarchie [MARKOWICH et al. 1990, CERCIGNANI 1988] genannt wird. Um sie abzuleiten, starten wir mit der Definition einer reduzierten Verteilungsfunktion

$$f^{(k)}(\vec{X}_1, \dots, \vec{X}_k, t) = \int F(\vec{X}_1, \dots, \vec{X}_N, t) d^6 \vec{X}_{k+1} \dots d^6 \vec{X}_N. \quad (4.5)$$

Mit ihr kann man die obengenannte Hierarchie von Gleichungen angeben, die äquivalent zur Liouville-Gleichung ist, wobei wir sehen werden, dass in der jeweiligen Bewegungsgleichung für die  $k$ -te Ordnung von  $f$  die reduzierte Verteilungsfunktion der Ordnung  $k+1$  einget. Im nächsten Schritt wollen wir eine Bewegungsgleichung für  $f^{(k)}$  ableiten. Dazu integrieren wir die Liouville-Gleichung (4.3) über  $d^6 \vec{X}_{k+1} \dots d^6 \vec{X}_N$  und nehmen zusätzlich an, dass die Funktion  $F$  genügend schnell für  $|r_\alpha| \rightarrow 0$  und  $|v_\alpha| \rightarrow 0$  gegen Null geht. Die Integration liefert

$$\frac{\partial f^{(k)}}{\partial t} = - \underbrace{\int \sum_{\alpha=1}^N \frac{\partial F}{\partial \vec{r}_\alpha} \frac{\partial \vec{r}_\alpha}{\partial t} d^6 \vec{X}_{k+1} \dots d^6 \vec{X}_N}_{(a)} - \underbrace{\int \sum_{\alpha=1}^N \frac{\partial F}{\partial \vec{v}_\alpha} \frac{\partial \vec{v}_\alpha}{\partial t} d^6 \vec{X}_{k+1} \dots d^6 \vec{X}_N}_{(b)}. \quad (4.6)$$

Zur Berechnung der rechten Seite der Gleichung (4.6) spaltet man die beiden Summen (a) und (b) jeweils in eine Summe über Variablen, über die nicht integriert wird, und Variablen, über die integriert wird, auf. Die Summe (a) lässt sich somit schreiben als

$$(a) = - \sum_{\alpha=1}^k \vec{v}_\alpha \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}_\alpha} \int F d^6 \vec{X}_{k+1} \dots d^6 \vec{X}_N - \int \sum_{\alpha=k+1}^N \vec{v}_\alpha \frac{\partial F}{\partial \vec{r}_\alpha} d^6 \vec{X}_{k+1} \dots d^6 \vec{X}_N. \quad (4.7)$$

Das zweite Integral der Gleichung (4.7) liefert nach partieller Integration keinen Beitrag, da die Verteilungsfunktion  $F$  im Unendlichen verschwindet und weil die Geschwindigkeit und der Ort unabhängige Variablen sind. Die Aufspaltung der Summe (b) ergibt

$$(b) = - \int \sum_{\alpha=1}^k \frac{\partial F}{\partial \vec{v}_\alpha} \frac{\partial \vec{v}_\alpha}{\partial t} d^6 \vec{X}_{k+1} \dots d^6 \vec{X}_N - \int \sum_{\alpha=k+1}^N \frac{\partial F}{\partial \vec{v}_\alpha} \frac{\partial \vec{v}_\alpha}{\partial t} d^6 \vec{X}_{k+1} \dots d^6 \vec{X}_N. \quad (4.8)$$

Partielle Integration des zweiten Terms liefert wiederum keinen Beitrag, da zum einen wieder nur Randterme von  $F$ , die im Unendlichen verschwinden, auftauchen und zum anderen die Kraft (vgl. Gl. (4.1)) nur vom Abstand zweier Teilchen abhängt. Zusammengefasst ergibt sich also für die Bewegungsgleichung für  $f^{(k)}$

$$\frac{\partial f^{(k)}}{\partial t} = - \sum_{\alpha=1}^k \vec{v}_\alpha \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}_\alpha} \int F d^6 \vec{X}_{k+1} \dots d^6 \vec{X}_N - \int \sum_{\alpha=1}^k \frac{\partial F}{\partial \vec{v}_\alpha} \frac{\partial \vec{v}_\alpha}{\partial t} d^6 \vec{X}_{k+1} \dots d^6 \vec{X}_N. \quad (4.9)$$

Um die Gleichung (4.9) weiter vereinfachen zu können, betrachten wir nun die Kraft auf das Teilchen  $\alpha$  etwas genauer. Für sie gilt (vgl. Gl. (4.1))

$$\begin{aligned}\frac{\partial \vec{v}_\alpha}{\partial t} &= -\frac{1}{m_\alpha} \frac{\partial}{\partial \vec{r}_\alpha} \left( \Phi_{\text{extern}}(\vec{r}_\alpha) + \frac{1}{2} \sum_{\beta, \gamma=1}^N \Phi_{\text{intern}}^{\beta\gamma} \right) \\ &= -\frac{1}{m_\alpha} \frac{\partial}{\partial \vec{r}_\alpha} \Phi_{\text{extern}}(\vec{r}_\alpha) + \sum_{\substack{\beta=1 \\ \alpha \neq \beta}}^N \frac{\partial}{\partial \vec{r}_\alpha} \Phi_{\text{intern}}^{\alpha\beta}.\end{aligned}\quad (4.10)$$

Die obige Gleichung (4.10) und Gleichung (4.5) setzen wir in die Gleichung (4.9) ein. Dabei wird der Einfachheit halber gleiche Masse  $m$  angenommen. Es folgt

$$\begin{aligned}\frac{\partial f^{(k)}}{\partial t} &= -\sum_{\alpha=1}^k \vec{v}_\alpha \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}_\alpha} f^{(k)} + \frac{1}{m} \sum_{\alpha=1}^k \frac{\partial}{\partial \vec{r}_\alpha} \Phi_{\text{extern}}(\vec{r}_\alpha) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{v}_\alpha} f^{(k)} \\ &\quad + \underbrace{\frac{1}{m} \int \sum_{\alpha=1}^k \sum_{\substack{\beta=1 \\ \alpha \neq \beta}}^N \left( \frac{\partial}{\partial \vec{r}_\alpha} \Phi_{\text{intern}}^{\alpha\beta} \right) \cdot \frac{\partial F}{\partial \vec{v}_\alpha} d^6 \vec{X}_{k+1} \dots d^6 \vec{X}_N}_{(c)}.\end{aligned}\quad (4.11)$$

Der Term (c) der Gleichung (4.11) kann noch weiter vereinfacht werden, indem wir die Summe über  $\beta$  zerlegen in  $\sum_{\beta=1}^N = \sum_{\beta=1}^k + \sum_{\beta=k+1}^N$ . Die dann auftretende Summe  $\sum_{\beta=k+1}^N$  liefert  $(N-k)$  identische Integrale, da wir eine bezüglich der Orte und Geschwindigkeiten permutationsinvariante Verteilungsfunktion  $F$  annehmen. Dies ist natürlich nur dann sinnvoll, wenn  $N$  ununterscheidbare Teilchen vorliegen. Damit ergibt sich für die raumzeitliche Dynamik der reduzierten Verteilungsfunktion  $f^{(k)}$  die BBGKY-Hierarchie

$$\begin{aligned}\frac{\partial f^{(k)}}{\partial t} &= -\sum_{\alpha=1}^k \vec{v}_\alpha \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}_\alpha} f^{(k)} + \frac{1}{m} \sum_{\alpha=1}^k \frac{\partial}{\partial \vec{r}_\alpha} \Phi_{\text{extern}}(\vec{r}_\alpha) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{v}_\alpha} f^{(k)} \\ &\quad + \frac{1}{m} \sum_{\alpha=1}^k \sum_{\substack{\beta=1 \\ \alpha \neq \beta}}^k \left( \frac{\partial}{\partial \vec{r}_\alpha} \Phi_{\text{intern}}^{\alpha\beta} \right) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{v}_\alpha} f^{(k)} \\ &\quad + \frac{N-k}{m} \int \sum_{\alpha=1}^k \frac{\partial}{\partial \vec{r}_\alpha} \Phi_{\text{intern}}^{\alpha k+1} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{v}_\alpha} f^{(k+1)} d^6 \vec{X}_{k+1}.\end{aligned}\quad (4.12)$$

Aus der Herleitung der Hierarchie geht hervor, dass aus der Gültigkeit der Liouville-Gleichung (4.3) für  $F$  die Gültigkeit des Gleichungssystems (4.12) für die reduzierten Verteilungsfunktionen  $f^{(k)}$  für alle  $k$  mit  $1 \leq k \leq N$  folgt. Da aber  $f^{(N)} = F$  gilt, kann man aus der Gleichung (4.12) die Gleichung (4.3) zurückgewinnen. Die beiden Gleichungssysteme sind also zueinander äquivalent. Da die Gleichung für  $f^{(k)}$  die Funktion  $f^{(k+1)}$

enthält, muss die Hierarchie zur konkreten Berechnung bei einem Index  $k$  abbrechen. Hierzu benötigen wir entweder einen Beweis, dass die restlichen Terme vernachlässigbar sind, oder eine physikalisch begründete, möglichst einfache Abschlussrelation, aus der sich  $f^{(k)}$  ohne Kenntnis von  $f^{(k+1)}$  angeben läßt.

Die einfachste Näherung besteht darin, alle Korrelationen (Stöße) zu vernachlässigen (Vlasov-Näherung). Damit zerfällt  $f^{(2)} = f^{(2)}(\vec{X}_1, \vec{X}_2, t)$  in ein Produkt von Einteilchenverteilungen  $f^{(1)}(\vec{X}_1, t)f^{(1)}(\vec{X}_2, t)$ . Es bleibt dann lediglich eine Gleichung für die Einteilchenverteilungsfunktion  $f$ , die anstatt auf 1 nun auf  $N$  normiert ist, d.h.  $f \equiv Nf^{(1)}$ , zu lösen. Mit der zusätzlichen Näherung  $\frac{(N-1)}{N} \approx 1$  folgt somit die Vlasov-Gleichung

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(\vec{r}, \vec{v}, t)}{\partial t} = & -\vec{v} \cdot \frac{\partial f(\vec{r}, \vec{v}, t)}{\partial \vec{r}} \\ & + \frac{1}{m} \frac{\partial f(\vec{r}, \vec{v}, t)}{\partial \vec{v}} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \underbrace{\left[ \Phi_{\text{extern}}(\vec{r}) + \int \Phi_{\text{intern}}^{12}(|\vec{r} - \vec{r}'|) f(\vec{r}', \vec{v}', t) d^3 \vec{r}' d^3 \vec{v}' \right]}_{=\Phi_{\text{effektiv}}}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Charakteristisch für die Vlasov-Näherung ist die Tatsache, dass die Wechselwirkung eines Teilchens mit den restlichen Teilchen durch ein mittleres Feld  $\Phi_{\text{effektiv}}$ , was ihre Nichtlinearität ausmacht, beschrieben wird. Für den Fall, dass es sich bei den Teilchen um Elektronen mit der Ladung  $-q$  handelt und sie der Coulomb-Wechselwirkung unterliegen, erfüllt das effektive Potential  $\Phi_{\text{effektiv}}$  die Poisson-Gleichung [MARKOWICH et al. 1990, NOLTING 1993],

$$\begin{aligned} \Delta \Phi_{\text{effektiv}} = & -\frac{q}{\varepsilon_0 \varepsilon} \left( C - \int f(\vec{r}, \vec{v}, t) d^3 \vec{v} \right) \\ = & -\frac{q}{\varepsilon_0 \varepsilon} (C - n) \end{aligned} \quad (4.14)$$

wobei wir annehmen, dass das externe Potential von einer positiven Hintergrundladung der Dichte  $C$  erzeugt wird. Die Variable  $\varepsilon$  gibt hier in der Gleichung (4.14) die Dielektrizitätszahl des betrachteten Materials an. Wenn wir die Vlasov-Gleichung über den Geschwindigkeitsraum integrieren, erhalten wir eine makroskopische Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial n}{\partial t} - \frac{1}{q} \nabla \cdot \vec{j} = 0, \quad (4.15)$$

die das Ziel alle bisherigen Herleitungen war. Wir sollten darauf hinweisen, dass die makroskopische Kontinuitätsgleichung (4.15) zusammen mit der Poisson-Gleichung (4.14) noch kein geschlossenes partielles Differentialgleichungssystem für den Teilchentransport darstellt. Dazu fehlt uns noch eine Gleichung, die den Elektronenstrom  $\vec{j}$  beschreibt. Diese Gleichung wird in einem nachfolgenden Kapitel abgeleitet. Eine genauere Beschreibung des

Teilchentransports erhalten wir, indem wir in der BBGKY-Hierarchie auch Zweiteilchenkorrelationen zulassen und dabei alle folgenden höheren Korrelationen vernachlässigen. Dazu wählt man einen Ansatz gemäß

$$f^{(2)}(\vec{X}_1, \vec{X}_2, t) = f^{(1)}(\vec{X}_1, t)f^{(1)}(\vec{X}_2, t) + g(\vec{X}_1, \vec{X}_2, t). \quad (4.16)$$

Dabei kommt die Zweiteilchenkorrelation in der Funktion  $g$  zum Ausdruck. Um aber eine selbstkonsistente Gleichung (Boltzmann-Gleichung) für die Einteilchenverteilungsfunktion aufzustellen, sind noch zusätzliche Annahmen nötig [RÖPKE 1986, ADAM und HITTMAIR 1988, RIECKERS und STUMPF 1977]. Es werden nur Zweierstöße berücksichtigt. Ferner wird angenommen, dass vor dem Stoß ein molekulares Chaos vorliegt und damit die Geschwindigkeitsverteilungen der zum Stoß zusammenlaufenden Teilchen statistisch unkorreliert sind. Abschließend geht man davon aus, dass die lokale Stoßdynamik nicht von den auf das System einwirkenden Kräften beeinflusst werden. Insgesamt folgt mit der Definition von  $\Phi_{\text{effektiv}}$  (Gl. (4.13)) für die Boltzmann-Gleichung

$$\begin{aligned} & \left[ \frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} - \frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \Phi_{\text{effektiv}} \frac{\partial}{\partial \vec{v}} \right] f(\vec{r}, \vec{v}, t) \\ &= \int S(\vec{v}, \vec{v}'; \vec{v} + \vec{q}, \vec{v}' - \vec{q}) f(\vec{r}, \vec{v} + \vec{q}, t) f(\vec{r}, \vec{v}' - \vec{q}, t) \\ & \quad - S(\vec{v} + \vec{q}, \vec{v}' - \vec{q}; \vec{v}, \vec{v}') f(\vec{r}, \vec{v}, t) f(\vec{r}, \vec{v}', t) d^3 \vec{r} d^3 \vec{v} \end{aligned} \quad (4.17)$$

Die Funktion  $S(\vec{v}, \vec{v}'; \vec{v} + \vec{q}, \vec{v}' - \vec{q})$  bezeichnet in der Gleichung (4.17) eine Übergangsrate pro Volumen für ein Teilchenpaar, das vor dem Stoß die Geschwindigkeiten  $\vec{v}$  und  $\vec{v}'$  besaß und nach dem Stoß die Geschwindigkeiten  $\vec{v} + \vec{q}$  und  $\vec{v}' - \vec{q}$  besitzt. Die linke Seite der Gleichung (4.17) berücksichtigt die Veränderung der Verteilungsfunktion  $f$  infolge der Teilchenbewegung im effektiven Potential  $\Phi_{\text{effektiv}}$ , während die rechte Seite die Veränderung von  $f$  aufgrund von Stößen zwischen jeweils zwei Teilchen beschreibt. Ähnlich wie die Vlasov-Gleichung ist die Boltzmann-Gleichung nichtlinear. Die Nichtlinearität kommt nun aber an zwei Stellen zum Ausdruck, nämlich im selbstkonsistenten Feld und im Stoßintegral (rechte Seite der Gl. (4.17)). Diese Nichtlinearität sorgt im Allgemeinen für die sehr komplizierte Form der Integro-Differential-Gleichung (4.17). An dieser Stelle sei nochmal ausdrücklich darauf hingewiesen, dass infolge der Annahmen die Gleichung (4.17) einen irreversiblen Prozess beschreibt. Dies kann mit Hilfe der  $H$ -Theorems von Boltzmann gezeigt werden. Weitere Eigenschaften der Boltzmann-Gleichung finden sich unter [RÖPKE 1986, ADAM und HITTMAIR 1988, RIECKERS und STUMPF 1977].

## 4.2 Semiklassische Transporttheorie

Bis zu diesem Zeitpunkt haben wir sämtliche Gleichungen im Kapitel 4.1 für klassische Teilchen hergeleitet. Das gilt natürlich auch für die in der Vlasov-Gleichung (Gl. (4.13),(4.14)) betrachteten geladenen Teilchen (Elektronen) mit Coulomb-Wechselwirkung. Sie wurden als klassische Teilchen im Sinne der Newtonschen Mechanik interpretiert und bewegen sich praktisch ohne Wechselwirkung (außer Coulomb-Wechselwirkung) mit ihrer Umgebung (d.h. im Vakuum) durch den Raum.

Im Kapitel 4 wurde kurz angedeutet, dass mit Hilfe der kinetischen Theorie und dabei im Besonderen mit Hilfe der Boltzmann-Gleichung (4.17)) viele erfolgreiche Untersuchungen an Halbleiterbauelementen durchgeführt wurden. Auf den ersten Blick erscheint die Anwendbarkeit der Boltzmann-Gleichung nicht gegeben, da sie ursprünglich für verdünnte klassische Systeme abgeleitet wurde. In Halbleitern jedoch bewegen sich die Ladungsträger näherungsweise in einem gitterperiodischen Potential, welches selbstverständlich die Bewegung der Ladungsträger einschränkt. Da die Periodizitätslänge im Allgemeinen sehr klein ( $\approx 10^{-8}$  cm) ist, müssen wir eine quantenmechanische Beschreibung für den Einfluss des Potentials auf die Elektronen finden. Wir müssen also Abstand von der Vorstellung einer freien Bewegung zwischen den Stößen nehmen und müssen diese durch eine korrelierte Bewegung eines Elektrons in der Umgebung anderer Elektronen und des Kristallgitters ersetzen. Wir werden sehen, dass das Konzept der Quasiteilchen eine modifizierte Impulsbeziehung für das Kristallelektron liefert, in der die quantenmechanischen Effekte des periodischen Gitters eingehen [SEEGER 1996, SZE 1969, SAPOVAL und HERMANN 1993, KITTEL 1996, MADELUNG 1972, CZYCHOLL 2000].

Grundlage hierfür ist die Lösung der Einelektronen-Schrödinger-Gleichung

$$H\Psi(\vec{r}) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}) \right\} \Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}). \quad (4.18)$$

Das Potential  $V(\vec{r})$  soll hier den gemittelten Wechselwirkungsterm der Hartree-Fock-Näherung, also neben dem periodischen Potential ( $V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R})$ ) der Gitterionen bereits Anteile der Elektron-Elektron Wechselwirkung, enthalten. Die Lösung der Schrödinger-Gleichung (4.18) mit Hilfe des Blochschen Theorems zeigt, dass sich die Energieeigenwerte in verschiedenen Energiebändern mit einer Dispersionsrelation  $E_n(\vec{k})$  ( $n$  Bandindex) anordnen. Innerhalb eines Bandes können wir die Kristallelektronen als quasi-freie Teilchen mit Kristallimpuls  $\hbar\vec{k}$  und modifizierter Elektronenmasse  $m^*$ , der effektive Masse, die im allgemeinen durch einen Tensor ausgedrückt wird, betrachten. In der Literatur werden diese Kristallelektronen oft als Quasiteilchen bezeichnet, da die Wechselwirkung mit dem statischen Kristallgitter in seine Eigenschaften schon integriert ist.

Demnach verhält sich ein solches Quasiteilchen anders wie ein freies Elektron. Es spürt so nur noch die „äußeren“ Kräfte, wie z.B. ein äußeres elektrisches oder magnetisches Feld oder Gitterschwingungen. Im Fall der Wechselwirkung mit einem äußeren elektrischen Feld lässt sich analog zum klassischen Fall ein Beschleunigungstheorem  $\vec{F} = -q\vec{E} = \hbar\dot{\vec{k}}$  ( $\vec{k}$  Kristallimpuls) ableiten. Daraus und mit der Beziehung  $\vec{F} = m^*\dot{\vec{v}}$  lässt sich eine Beziehung zwischen Gruppengeschwindigkeit und Impuls des Quasielektrons

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} E_n(\vec{k}) = \frac{\hbar\vec{k}}{m^*} \quad (4.19)$$

angeben. Beim Übergang zu einer semiklassischen Beschreibung charakterisieren wir nun die Teilchen (Elektronen oder Löcher) auch weiterhin mit einer klassischen Verteilungsfunktion, die jetzt von den Variablen  $\vec{r}$  (Ort),  $\vec{k}$  (Impuls) und  $t$  (Zeit) abhängt, also  $f = f(\vec{r}, \vec{k}, t)$ , während die Zustände und Streumechanismen quantenmechanisch beschrieben werden. Mit der Verteilungsfunktion  $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$  und der Gleichung (4.19) können wir so die semiklassische Boltzmann-Gleichung mit

$$\begin{aligned} & \left[ \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \vec{k}} E_n(\vec{k}) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} - \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \Phi_{\text{effektiv}} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{k}} \right] f(\vec{r}, \vec{k}, t) \\ & = \sum_{\vec{k}'} \left[ W(\vec{k}', \vec{k}) f(\vec{r}, \vec{k}', t) - W(\vec{k}, \vec{k}') f(\vec{r}, \vec{k}, t) \right] \end{aligned} \quad (4.20)$$

angeben, wobei die Variable  $W(\vec{k}, \vec{k}')$  ein Übergangsmatrixelement darstellt, das die Streuung eines Elektrons bzw. Lochs vom Zustand  $\vec{k}$  in den Zustand  $\vec{k}'$  beschreibt. Zum Schluss müssen wir darauf hinweisen, dass die semiklassische Theorie versagt, falls typische quantenmechanische Effekte wie z.B. Tunneleffekt auftreten. Die Unschärferelation sorgt dafür, dass eine gleichzeitige Messung von Ort und Impuls nicht möglich ist. Die Verteilungsfunktion ist dann keine wohldefinierte Größe mehr. Sie ist nur dann wohldefiniert, wenn die typischen Längenskalen im Orts- bzw. im Impulsraum ausreichend groß sind.

### 4.3 Bilanz-Gleichungen

Da die Boltzmann-Gleichung nur sehr schwer zu lösen ist, suchen wir nach einfacheren makroskopischen Gleichungen, die den Ladungsträgertransport in Halbleitern beschreiben. Wir suchen in diesem Abschnitt nach Transportgleichungen in Form von Bilanzgleichungen, [LUNDSTROM 2000, SCHENK 2001], also nach Gleichungen vom Typ (z.B. die Elektronenkontinuitätsgleichung)

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{F}_n + G_n - R_n. \quad (4.21)$$

Dieser Gleichungstyp hat dabei eine sehr anschauliche Interpretation: Die Änderung der lokalen Elektronendichte  $n(\vec{r}, t)$  in einem Volumenelement  $d\Omega$  setzt sich additiv aus drei verschiedenen Anteilen zusammen:

1. Rate (bzw. Fluss)  $-\nabla \cdot \vec{F}_n$ , mit der Elektronen in das Volumenelement  $d\Omega$  fließen,
2. Generationsrate  $G_n$ , mit der Elektronen in  $d\Omega$  erzeugt werden
3. Rekombinationsrate  $R_n$ , mit der Elektronen in  $d\Omega$  vernichtet werden

### 4.3.1 Herleitung aus der Boltzmann-Gleichung

In dem nun folgenden Abschnitt werden wir solche Bilanzgleichungen ganz allgemein für die Dichte, den Impuls und die Energiedichte mit Hilfe der semiklassischen Boltzmann-Gleichung (4.20) berechnen. Dabei wird zu dem Stoßterm eine weitere Funktion  $s(\vec{r}, \vec{k}, t) = g(\vec{r}, \vec{k}, t) - r(\vec{r}, \vec{k}, t)$  addiert. Dieser Term soll die Generations- und Rekombinationsprozesse berücksichtigen. Der Einfachheit halber nehmen wir zusätzlich parabolische Bänder, kleine Dichten und keine Elektronenwechselwirkung, d.h.  $\Phi_{\text{intern}} = 0$ , an. Die Gleichung (4.20) lautet nun

$$\left[ \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \vec{k}} E_n(\vec{k}) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} + \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} (-q) \vec{E} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{k}} \right] f(\vec{r}, \vec{k}, t) = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right) \Big|_{\text{Stoß}} + s(\vec{r}, \vec{k}, t) \quad (4.22)$$

mit

$$\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right) \Big|_{\text{Stoß}} = \sum_{\vec{k}'} W(\vec{k}', \vec{k}) f(\vec{r}, \vec{k}', t) - W(\vec{k}, \vec{k}') f(\vec{r}, \vec{k}, t). \quad (4.23)$$

Nun müssen wir noch die Momente der Verteilungsfunktion  $f$  definieren. Das allgemeine Moment einer Variable  $\Phi(\vec{k})$  wird durch die gewichtete Summe

$$n_{\Phi}(\vec{r}, t) \equiv \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}} \Phi(\vec{k}) f(\vec{r}, \vec{k}, t) \quad (4.24)$$

definiert. Wie oben beschrieben, suchen wir nun nach einer Gleichung vom Typ (4.21) für die Variable  $n_{\Phi}$ . Dazu multiplizieren wir die Gleichung (4.22) mit  $\Phi(\vec{k})/\Omega$  und summieren über alle Zustände  $\vec{k}$  in der ersten Brillouinzone. Es ergibt sich

$$\underbrace{\frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}} \Phi(\vec{k}) \frac{\partial f}{\partial t}}_{=(a)} = \underbrace{-\frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}} \Phi(\vec{k}) \frac{\hbar \vec{k}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}}}_{=(b)} - \underbrace{\frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}} \Phi(\vec{k}) (-q) \vec{E} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{k}}}_{=(c)} + \underbrace{\frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}} \Phi(\vec{k}) s(\vec{r}, \vec{k}, t)}_{=(d)} + \underbrace{\frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}} \Phi(\vec{k}) \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right) \Big|_{\text{Stoß}}}_{=(e)}. \quad (4.25)$$

Da die Variable  $\Phi(\vec{k})$  unabhängig von der Zeit  $t$  ist, können wir für den ersten Term

$$(a) = \frac{\partial n_\phi(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (4.26)$$

schreiben. Im Term (b) kann man ebenfalls den Ortsgradienten vor die Summe ziehen, da die Variable  $\Phi(\vec{k})$  unabhängig vom Ort  $\vec{r}$  ist. Es gilt

$$(b) = -\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \cdot \frac{1}{\Omega} \frac{\hbar}{m} \sum_{\vec{k}} \Phi(\vec{k}) \vec{k} f \equiv -\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \cdot \vec{F}_\Phi. \quad (4.27)$$

Die Größe  $\vec{F}_\Phi$  beschreibt dabei einen Strom, wobei die Variable  $\Phi$  bestimmt, welche Variable transportiert wird. Der dritte Ausdruck auf der linken Seite der Gleichung (4.25) kann mit Hilfe der Produktregel und der Annahme, dass  $f$  für genügend große  $\vec{k}$  gegen Null geht, umgeformt werden zu

$$(c) = -q\vec{E} \cdot \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}} f \frac{\partial \Phi(\vec{k})}{\partial \vec{k}} \equiv B_\Phi. \quad (4.28)$$

Die Rate  $B_\Phi$  beschreibt dabei den Einfluss einer Beschleunigung in Richtung des anliegenden Feldes auf die Variable  $n_\phi$ . Der Term (d) beschreibt Generations- und Rekombinationsprozesse, die entweder die Dichte erhöhen oder verkleinern können. Wir kürzen ihn im Folgenden mit  $S$  ab. Es folgt mit  $s = g - r$

$$(d) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}} \Phi(\vec{k}) s(\vec{r}, \vec{k}, t) = G_\Phi(\vec{r}, t) - R_\Phi(\vec{r}, t) = S_\Phi(\vec{r}, t) \quad (4.29)$$

Der letzte Ausdruck (e) beschreibt einen Relaxationsprozess, da Kollisionen die Größe  $n_\phi(\vec{r}, t)$  mit der Zeit verändern. Für die zeitliche Änderung von  $n_\phi(\vec{r}, t)$  infolge der Kollisionen wählt man den Ansatz, dass sie proportional zur Abweichung von der Gleichgewichtsdichte  $n_\phi^0$  ist. Es gilt also

$$(e) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}} \Phi(\vec{k}) \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right) \Big|_{\text{Stoß}} = -\langle \langle \frac{1}{\tau_\Phi} \rangle \rangle [n_\phi(\vec{r}, t) - n_\phi^0(\vec{r}, t)] \equiv A_\Phi, \quad (4.30)$$

wobei  $\langle \langle \frac{1}{\tau_\Phi} \rangle \rangle$  eine Ensemblerelaxationszeit symbolisiert. Die Gleichung (4.30) ist nicht mit der Relaxationszeitnäherung zu verwechseln. Sie definiert lediglich die Größe  $\langle \langle \frac{1}{\tau_\Phi} \rangle \rangle$ . Mit Hilfe der Gleichung (4.23) können wir  $\langle \langle \frac{1}{\tau_\Phi} \rangle \rangle$  bestimmen zu

$$\langle \langle \frac{1}{\tau_\Phi} \rangle \rangle \equiv \frac{\frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}} f(\vec{r}, \vec{k}, t) \Phi(\vec{k}) / \tau(\vec{k})}{[n_\phi(\vec{r}, t) - n_\phi^0(\vec{r}, t)]} \quad \text{mit} \quad \frac{1}{\tau(\vec{k})} = \sum_{\vec{k}'} \left( 1 - \frac{\Phi(\vec{k}')}{\Phi(\vec{k})} \right) W(\vec{k}, \vec{k}'). \quad (4.31)$$

Insgesamt haben wir somit eine Bilanz-Gleichung für die allgemeine Dichte  $n_\Phi$  hergeleitet. Mit den Gleichungen (4.26), (4.27), (4.28), (4.29) und (4.30) folgt

$$\frac{\partial n_\Phi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \cdot \vec{F}_\Phi + B_\Phi + A_\Phi + G_\Phi - R_\Phi \quad (4.32)$$

Mit dieser Gleichung können wir bei geeigneter Wahl von  $\Phi(\vec{k})$  sofort die entsprechende Bilanzgleichung berechnen. Für die Aufstellung eines Drift-Diffusions-Modells benötigt man die ersten beiden Momente, d.h.  $\Phi(\vec{k}) = 1$  und  $\Phi(\vec{k}) = \vec{k}$ . Im Folgenden sollen nun die entsprechenden Bilanzgleichungen am Beispiel der Elektronen berechnet werden.

### 4.3.2 Bilanzgleichung für die Dichte

Für  $\Phi(\vec{k}) = 1$  folgt die Elektronendichte  $n_\Phi(\vec{r}, t) = n(\vec{r}, t)$  und der entsprechende Elektronenstrom berechnet sich zu (Gl. (4.27))

$$\vec{F}_\Phi = n\vec{v}_d = \frac{\vec{j}_n}{-q}. \quad (4.33)$$

Dabei bezeichnet  $\vec{v}_d$  die mittlere Driftgeschwindigkeit der Elektronen. Die Raten  $A_\Phi$  und  $B_\Phi$  verschwinden aufgrund der Gleichungen (4.28) und (4.30). Man erhält somit die Kontinuitätsgleichung für die Elektronen (vgl. Gl. (4.15) u. Gl. (4.32))

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \cdot \vec{j}_n + S_n = \frac{1}{q} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \cdot \vec{j}_n + G_n - R_n \quad (4.34)$$

### 4.3.3 Bilanzgleichung für die Impulsdichte

In diesem Fall müssen wir  $\Phi(\vec{k}) = \vec{k}$  setzen. Die Raten (Gln. (4.26), (4.28), (4.30)) berechnen sich sehr einfach. Es gilt:

$$n_\Phi = \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}} \vec{k} f = \vec{P} = nm^* \vec{v}_d \quad \text{und} \quad B_\Phi = (-q)\vec{E} \cdot \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}} f \frac{\partial \vec{k}}{\partial \vec{k}} = (-q)n\vec{E}, \quad (4.35)$$

wobei  $\vec{P}$  die Impulsdichte darstellt. Die Rate  $S_\Phi$  (Gl. (4.29)) berechnet sich zu Null, da wir annehmen, dass die Elektronenimpulse infolge des Generationsprozesses zufällig verteilt sind. Bei der Berechnung der Rate für den Strom (Gl. (4.27)) ist zu beachten, dass das Produkt zwischen der Geschwindigkeit (vgl. (4.19)) und des Impulses mit der kinetischen Energie zusammenhängt. Demnach erhalten wir für den Ortsgradienten des Stroms  $\vec{F}_\Phi$

$$\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \cdot \vec{F}_\Phi = \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \cdot \vec{W}. \quad (4.36)$$

$\overleftrightarrow{W}$  ist dabei der Tensor der Impulsstromdichte, dessen Komponenten durch  $W_{ij} = \frac{\hbar}{2m\Omega} \sum_{\vec{k}} k_i k_j f$  gegeben sind und dessen Spur ( $\sum_i W_{ii}$ ) die mittlere kinetische Energiedichte ergibt. Aus der Gleichung (4.32) folgt dann die Bilanzgleichung der Impulsdichte  $\vec{P}$

$$\frac{\partial \vec{P}}{\partial t} = -2 \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \cdot \overleftrightarrow{W} + n(-q)\vec{E} - \langle \langle \frac{1}{\tau_i} \rangle \rangle \vec{P}. \quad (4.37)$$

Da wir zu Beginn parabolische Energiebänder angenommen haben, können wir den Strom gemäß  $\vec{j}_n = (-q)n\vec{v}_d = (-q)\frac{\vec{P}}{m^*}$  (vgl. Gln. (4.33) u. (4.35)) definieren und somit ergibt sich für die Stromdichte die Bilanzgleichung

$$\frac{\partial \vec{j}_n}{\partial t} = -\frac{2(-q)}{m^*} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \cdot \overleftrightarrow{W} + \frac{nq^2 \vec{E}}{m^*} - \langle \langle \frac{1}{\tau_i} \rangle \rangle \vec{j}_n. \quad (4.38)$$

Beim Vergleich der beiden Gleichungen (4.34) und (4.38) stoßen wir wieder auf das Problem, dass wir zusammen mit der Poisson-Gleichung kein geschlossenes Differentialgleichungssystem erhalten (vgl. Kap. (4.1.2)). Es fehlt eine Bilanzgleichung für die Energiedichte  $W$ . Man erhält also wieder eine Hierarchie von Bilanzgleichungen. Um das Gleichungssystem zu schließen, müssen weitere Vereinfachungen, die im Fall des Drift-Diffusions-Modell den Tensor  $\overleftrightarrow{W}$  betreffen, vereinbart werden. Dazu nimmt man an, dass sich die Ladungsträgergeschwindigkeit aus zwei Beiträgen additiv zusammensetzt. Der erste Beitrag, die Driftgeschwindigkeit  $\vec{v}_d$ , wird durch das Feld hervorgerufen, während der zweite zufällig verteilte Betrag  $\vec{c}$  ( $\langle \vec{c} \rangle = 0$ ) infolge der thermischen Bewegung zustande kommt. Dabei nimmt man an, dass die Elektronen im Halbleiter annähernd ein ideales Gas bilden. Für die Spur von  $\overleftrightarrow{W}$  gilt somit

$$\begin{aligned} W_{ii} &= \frac{1}{\Omega} \sum_i \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2}{2m^*} k_i k_i f = \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2 f = n \frac{\hbar^2}{2m^*} \langle k^2 \rangle \\ &= \frac{nm^*}{2} \langle v^2 \rangle \\ &= \frac{1}{2} nm^* v_d^2 + \frac{1}{2} nm^* \langle c^2 \rangle = W_{\text{drift}} + W_{\text{therm}}. \end{aligned} \quad (4.39)$$

Mit Hilfe der mittleren kinetischen Energiedichte  $W_{\text{therm}} = \frac{3}{2} nk_B T$  eines idealen Gases kann man den Elektronen eine Temperatur  $T_n$  zuordnen. Damit kann man die Komponenten des Temperaturtensors angeben mit

$$\frac{1}{2} nk_B T_{ij}^n \equiv \frac{1}{2} nm^* \langle c_i c_j \rangle. \quad (4.40)$$

Dadurch ist unser Halbleitersystem durch zwei Temperaturen  $T_{\text{Gitter}}$  und  $T_n$  charakterisiert, die versucht sind, einander gegenseitig auszugleichen. Dieses Ergebnis verwendet

man nun in der Gleichung (4.38). Mit der Definition der Mobilität  $\mu_n \equiv q/(m^* \langle \frac{1}{\tau_i} \rangle)$  und der Annahme, dass sich der Strom während der Zeit  $1/\langle \frac{1}{\tau_i} \rangle$  nicht verändert, folgt

$$\vec{j}_n = qn\mu_n\vec{E} + 2\mu_n \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \cdot \overleftrightarrow{W}. \quad (4.41)$$

Im nächsten Schritt nehmen wir einen diagonalen Temperaturtensor  $W_{ij} = \frac{1}{2}nk_B T_{ij}^n \delta_{ij}$  an und vernachlässigen dabei die Driftenergie  $W_{\text{drift}}$ . Mit der Diffusionskonstanten  $D_n \equiv \frac{k_B T_n}{q} \mu_n$  und der Soretkonstanten  $S_n \equiv n\mu_n \frac{k_B}{q}$  folgt

$$\vec{j}_n = qn\mu_n\vec{E} + qD_n \frac{\partial}{\partial \vec{r}} n + qS_n \frac{\partial}{\partial \vec{r}} T_n. \quad (4.42)$$

Zum Abschluss vernachlässigen wir sämtliche Temperaturgradienten in  $T_n$  und erhalten eine Stromgleichung,

$$\vec{j}_n = qn\mu_n\vec{E} + qD_n \frac{\partial}{\partial \vec{r}} n, \quad (4.43)$$

die aus einem Drift- und einem Diffusionsanteil besteht.

#### 4.3.4 Drift-Diffusions-Modell

Mit obigen Bilanzgleichungen können wir das Drift-Diffusions-Modell für den Transport von Elektronen und Löcher angeben. Für die Berechnung der entsprechenden Löchergleichungen muss die Ladung  $+q$  und die Generations- bzw. Rekombinationsrate  $S_p$  berücksichtigt werden.

##### Elektronen

$$\vec{j}_n = -qn\mu_n \nabla V + qD_n \nabla n \quad (4.44)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \nabla \cdot \vec{j}_n + S_n \quad (4.45)$$

##### Löcher

$$\vec{j}_p = -qp\mu_p \nabla V - qD_p \nabla p \quad (4.46)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \nabla \cdot \vec{j}_p + S_p \quad (4.47)$$

##### Poisson-Gleichung

$$\Delta V = \frac{q}{\varepsilon_0 \varepsilon} (n - p) \quad (4.48)$$

In den Kontinuitätsgleichungen wird das elektrische Feld über die Beziehung  $\vec{E} = -\nabla V$  berechnet, wobei die Variable  $V$  das elektrische Potential symbolisiert. Dieses partielle Differentialgleichungssystem ist an dieser Stelle noch ganz allgemein gehalten. Unser konkretes Transportmodell in Drift-Diffusions-Näherung wird im nächsten Kapitel aufgestellt. Im Anschluss daran erfolgt eine kurze Diskussion des Modells.

#### 4.4 Drift-Diffusions-Modell für die ZnS:Mn-Struktur

In diesem Kapitel wird das endgültige Drift-Diffusions-Modell für die Ladungsträger in der mangandotierten Zinksulfidschicht inklusive aller nötigen Raten und Randbedingungen vorgestellt [RAKER 2000, MEYER 2003]. Dazu rufen wir uns noch einmal das Kapitel 3.3 mit der Abbildung 3.11 ins Gedächtnis. Der Ladungstransport wird in der ZnS:Mn-Schicht durch drei verschiedene Dichten bestimmt. Als erstes ist die Elektronendichte  $n$  zu berücksichtigen. Die Elektronen stammen, wie vorher diskutiert, aus lokalisierten Grenzflächenzuständen in der Isolator-Halbleiter Grenzschicht, die in das Leitungsband infolge eines Tunnelprozesses injiziert werden. Infolge der sehr großen elektrischen Felder kommt es zu Stoßionisationsprozessen. Die daher zu berücksichtigende freie Löcherdichte bezeichnen wir mit  $p$ . Die freien Löcher können wiederum von Löcherfallen eingefangen werden und bilden somit die positive Raumladung, die mit  $p_{\text{trapped}}$  bezeichnet wird. Nach der Bezeichnung der drei verschiedenen Dichten, müssen nun die entsprechenden Raten eingeführt werden. Die Generationsrate infolge der Band-Band-Stoßionisation bezeichnen wir mit  $G_1 = \alpha(E)j_n$ , die sich als Produkt des Elektronenstromes  $j_n$  und eines feldabhängigen Stoßionisationskoeffizienten  $\alpha(E)$  (Abb. 4.1) schreiben lässt. Sie tritt sowohl in der Elek-

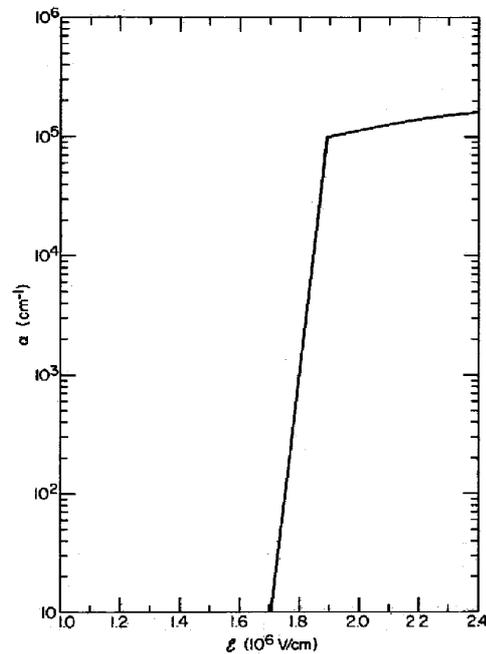


Abbildung 4.1: Angenommener Verlauf des Stoßionisationskoeffizienten  $\alpha(E)$  im polykristallinen ZnS:Mn von Howard et al. [HOWARD et al. 1982].

tronenkontinuitätsgleichung als auch in der Löcherkontinuitätsgleichung als Gewinnterm auf. Die erzeugten Löcher werden gemäß der Rate  $T = \gamma p(p_{\max}^t - p_{\text{trapped}})$  eingefangen. Die Größe  $\gamma$  gibt hier den Einfangkoeffizienten und  $p_{\max}^t$  kennzeichnet die Konzentration der vorhandenen Löcherfallen. Für den Fall, dass alle Löcherfallen besetzt sind, ist die Rate  $T$  identisch Null und alle Löcher tragen zum Gesamtstrom bei. Die Rate  $T$  ist ein Gewinnterm in der Kontinuitätsgleichung der eingefangenen Löcher und ein Verlustterm in der Kontinuitätsgleichung der freien Löcher. Die über  $T$  generierte positive Raumladung  $p_{\text{trapped}}$  kann in unserem Modell auf zwei unterschiedliche Arten reduziert werden. Die Dichte der eingefangenen Löcher kann mit Elektronen aus dem Leitungsband rekombinieren. Die entsprechende Rekombinationsrate  $R$  setzt sich aus dem Produkt zwischen den beteiligten Dichten ( $n, p_{\text{trapped}}$ ), der thermischen Geschwindigkeit  $v_{\text{therm}}$  und einem Wirkungsquerschnitt  $\sigma$ , also  $R = v_{\text{therm}}\sigma n p_{\text{trapped}}$ , zusammen. Aufgrund der energetischen Lage der Löcherfallen nahe der Valenzbandkante ist eine thermische Emission von Löchern aus den Löcherfallen möglich. Diese Löchergenerationsrate bezeichnen wir mit  $G_2 = \beta p_{\text{trapped}}$ . Sie setzt sich also aus dem Produkt einer konstanten Emissionsrate  $\beta$  und der Dichte der eingefangenen Löcher  $p_{\text{trapped}}$  zusammen.  $G_2$  hat in der Kontinuitätsgleichung der Löcher ein positives Vorzeichen (Gewinnterm) und in der Kontinuitätsgleichung der eingefangenen Löcher ein negatives Vorzeichen (Verlustterm). Für die Elektrolumineszenz der ZnS:Mn-Schicht infolge der Anregung der Manganatome wird keine weitere Gleichung modelliert. Ferner wird davon ausgegangen, dass die Lumineszenzstrahlung proportional zur Stromdichte ist (vgl. Abb. 3.6). Daher können wir später lokalisierte Hochstrombereiche als Muster identifizieren. Mit den obigen Überlegungen können wir die drei Transportgleichungen inklusive aller Raten aufstellen (vgl. Kap. 4.3.4).

### Kontinuitätsgleichungen

$$\textbf{Elektronen:} \quad \frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j}_n = G_1 - R \quad \vec{j}_n = -D_n \nabla n + n \mu_n \nabla V \quad (4.49)$$

$$\textbf{Löcher:} \quad \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j}_p = G_1 + G_2 - T \quad \vec{j}_p = -D_p \nabla p - p \mu_p \nabla V \quad (4.50)$$

$$\textbf{eingef. Löcher:} \quad \frac{\partial p_{\text{trapped}}}{\partial t} = T - G_2 - R \quad \vec{j}_{p_{\text{trapped}}} = 0 \quad (4.51)$$

### Generations- und Rekombinationsraten

$$\textbf{Stoßionisation:} \quad G_1 = \alpha(E) j_n \quad (4.52)$$

$$\textbf{Löcheremission:} \quad G_2 = \beta p_{\text{trapped}} \quad (4.53)$$

$$\textbf{Rekombination:} \quad R = v_{\text{therm}} \sigma n p_{\text{trapped}} \quad (4.54)$$

$$\textbf{Löchereinfang:} \quad T = \gamma p(p_{\max}^t - p_{\text{trapped}}) \quad (4.55)$$

Als nächstes muss die Poisson-Gleichung neu aufgestellt werden. Dabei werden nun die Ladungs- und die Grenzflächenladungsdichten berücksichtigt. Letztere resultieren dabei aus dem Ladungsträgereinfang bzw. -emission an den Isolator-Halbleiter Grenzschichten. Für die Poisson-Gleichung gilt:

### Poisson-Gleichung

$$\Delta V = \frac{q}{\varepsilon_0 \varepsilon} \{n - p - p_{\text{trapped}} + \delta(z - z_{n_l})\rho_{n_l} + \delta(z - z_{n_l+n_m})\rho_{n_l+n_m}\} \quad (4.56)$$

Die Indizes  $n_l$  und  $n_l + n_m$  bezeichnen die räumliche Position der beiden Grenzflächen in z-Richtung (vgl. Abb. 5.3).

Zum Abschluss der Modellierung unseres Transportmodells müssen wir die Randbedingungen genau diskutieren. Wir betrachten sie zuerst für den Fall des longitudinalen Transports (z-Richtung, Abb. 3.1). Neben der Tunnelinjektion der Elektronen können Ladungsträger, die infolge des Transports in der Nähe dieser Grenzschichten kommen, wieder in lokalisierte Zustände eingefangen werden. Damit setzt sich der jeweilige Strom aus einem Tunnelstrom (nur bei Elektronen) und zwei Oberflächenrekombinationsströmen (Elektronen / Löcher) zusammen, die über ein Produkt  $s_x x$  ( $x = n, p$ ) modelliert werden. Dabei hat die Variable  $s_x$  die Dimension einer Geschwindigkeit und wird deswegen Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit genannt. Es gelten demnach für die z-Komponenten der Ströme an den Grenzschichten die Gleichungen

$$\textbf{Elektronen:} \quad j_{n_l}^z = -s_n n_{n_l} + j_{n_l}^{\text{tunnel}} \quad j_{n_l+n_m}^z = s_n n_{n_l+n_m} - j_{n_l+n_m}^{\text{tunnel}} \quad (4.57)$$

$$\textbf{Löcher:} \quad j_{n_l}^z = -s_p p_{n_l} \quad j_{n_l+n_m}^z = s_p p_{n_l+n_m}. \quad (4.58)$$

Für die Poisson-Gleichung (4.56) benötigen wir noch eine Gleichung für die zeitliche Entwicklung der Grenzflächenladungsdichten  $\rho_i$  ( $i = n_l, n_l + n_m$ ). Sie sind natürlich nicht konstant, da sich infolge der Tunnelinjektion und der Oberflächenrekombination deren Ladungen fortwährend ändern. Mit Hilfe der Gleichungen (4.57) und (4.58) sind wir in der Lage, gewöhnliche Differentialgleichungen für die zeitliche Änderung der Grenzflächenladungen anzugeben. Sie bestimmen sich zu:

### Isol.-Halbl. Grenzschichten

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} = (-s_n n_i + |j_i^{\text{tunnel}}| + s_p p_i)q \quad \text{mit } i = n_l, n_l + n_m. \quad (4.59)$$

Jetzt fehlt nur noch ein Ausdruck für den Tunnelstrom. Dieser kann für den Fall einer kontinuierlichen Verteilung von Grenzflächenzuständen, die bei einem Energiebetrag von

$\epsilon_0$  unterhalb der Leitungsbandkante beginnen, in der WKB-Näherung berechnet werden zu [NEYTS und VISSCHERE 1990, BRINGUIER 1989, SMITH 1981]

$$j_{\text{tunnel}} = n_{ss} \frac{2}{3} \frac{BE_i}{\sqrt{2\epsilon_0}} \phi(E) \exp \left\{ -\frac{1}{BE_i} \left( \epsilon_0 + \frac{\rho_i}{qn_{ss}} \right) \right\} \quad \text{mit } i = n_l, n_l + n_m. \quad (4.60)$$

Dabei bezeichnet  $n_{ss}$  die Zustandsdichte der Grenzflächenzustände und  $E_i$  den Betrag der elektrischen Feldstärke an der momentanen Kathode. In der Variablen  $B$  werden einige Konstanten zusammengefasst:

$$B = \frac{3q\hbar}{4\sqrt{2m^*}}. \quad (4.61)$$

Prinzipiell ist dabei die Variable  $\Phi$  in der Gleichung (4.60) eine feldabhängige Funktion. Aber ihre Feldabhängigkeit ist für die hier betrachteten Felder nur von schwacher Natur und wird daher vernachlässigt, indem man eine konstante Feldstärke ( $E = 1 \text{ MV/cm}$ ) in die entsprechende Funktion  $\Phi$  einsetzt. Die Tunnelinjektion zeigt insgesamt ein sehr stark nichtlineares Verhalten, da sowohl das elektrische Feld als auch die Grenzflächenladung an der momentanen Kathode im Exponenten der Gleichung (4.60) eingehen.

Für die später behandelten räumlich höherdimensionalen Simulationen benötigen wir dann noch Randbedingungen für den lateralen Transport. Wir werden für alle auftretenden Transportgrößen stets periodische Randbedingungen vereinbaren. Dies bedeutet anschaulich, dass wir uns das komplette Simulationsgebiet aus einer unendlichen Anzahl periodisch fortgesetzter identischer Einzelgebiete, auf denen wir die Lösung berechnen, vorstellen müssen.

Zum Abschluss dieses Kapitels betrachten wir noch einmal das komplette partielle Differentialgleichungssystem. Wenn man nun die Stromgleichungen (rechte Seite in Gln. (4.49) und (4.50)) in die entsprechenden Kontinuitätsgleichungen (linke Seite in Gln. (4.49) und (4.50)) einsetzt, erhält man ein nichtlineares Transportproblem, das zusätzlich an die Poisson-Gleichung (4.56) gekoppelt ist. Es liegt somit insgesamt ein gekoppeltes nichtlineares partielles Differentialgleichungssystem vor, das im Allgemeinen analytisch nicht lösbar ist. Daher wird die Lösung numerisch mit Hilfe des Computer bestimmt. Die dazu infolge der Nichtlinearität nötige besondere Diskretisierung des Gleichungssystems sowie deren teilweise aufwändige numerische Lösung wird im Kapitel 5 erläutert.

#### 4.4.1 Vereinfachung des Drift-Diffusions-Modells

Seit der Beobachtung der Lumineszenz-Spannungs-Hysterese in mangan-dotierten Zinksulfidschichten wurden viele Anstrengungen unternommen, ein mathematisches Modell für den longitudinalen Transport zu entwickeln, das die experimentell gefundene Hysterese mit Hilfe einer Strom-Spannungs-Kennlinie verifizieren kann. Zu Beginn der 80er Jahre

entwickelten Howard et al. [HOWARD et al. 1982, HOWARD 1981] dazu ein einfaches Modell für den Ladungstransport in diesen Bauelementen. Ihr Modell lässt sich mit einigen starken Vereinfachungen aus unserem Modell ableiten. Die erste Vereinfachung betrifft die Elektronen. Eine negative Raumladung, also  $n$ , wird komplett vernachlässigt unter der Annahme, dass die ins Leitungsband injizierten Elektronen instantan zur momentanen Anode gelangen. Dadurch werden die Elektronen nicht mehr durch ihre Dichte und Geschwindigkeit beschrieben, sondern sie werden nur durch ihre Stromdichte charakterisiert. Die zweite Vereinfachung besteht in der Vernachlässigung der freien Löcherdichte  $p$ , da alle über die Stoßionisation erzeugten Löcher instantan eingefangen werden. Es gibt somit keinen Löcherstrom  $j_p$ . Aufgrund der Vernachlässigung von  $p$  ist die Modellierung der Löcheremission (Rate  $G_2$ ) nicht ohne Weiteres möglich, da die freigesetzten Löcher nicht behandelt werden. Aus dem partiellen Differentialgleichungssystem zweiter Ordnung (Gln. (4.49)-(4.51)) des Drift-Diffusions-Modells resultieren dann zwei gewöhnliche Differentialgleichungen für den Elektronenstrom und die Dichte der eingefangenen Löcher:

$$\begin{aligned} \frac{\partial j_n}{\partial z} &= G_1 - R \\ \frac{\partial p_{\text{trapped}}}{\partial t} &= G_1 - R. \end{aligned} \tag{4.62}$$

Die Einfangrate  $T$  kann in der Gleichung für die eingefangenen Löcher unter der Annahme vernachlässigt werden, dass die Wahrscheinlichkeit des Löchereinfangs sehr viel größer als die Rekombinationswahrscheinlichkeit ist. Damit können wir  $T$  durch die Generationsrate  $G_1$  ausdrücken. Infolge der reduzierten Beschreibung des Ladungstransports muss die Rekombinationsrate  $R$  über ein Produkt von  $\sigma j_n p_{\text{trapped}}$  modelliert werden, da die Elektronendichte fehlt. Somit sind nur zwei gewöhnliche Differentialgleichungen und die Poisson-Gleichung zu lösen, was die numerische Behandlung sehr stark vereinfacht. Trotz der numerischen Vorteile dieses Systems sind die Näherungen nicht ganz unproblematisch. Dies betrifft im besonderen Maße die Vernachlässigung der freien Löcher. Für eine konsistente Behandlung des Löchereinfangs müssen die freien Löcher mit berücksichtigt werden, da die Einfangrate sicherlich nicht abrupt von Unendlich auf Null abfällt. Auch die Vernachlässigung einer negativen Raumladung ist neben der unrealistischen Modellierung von  $R$  insbesondere beim Spannungsnulldurchgang sehr fragwürdig. Zum Schluss sei der wohl gravierendste Nachteil des HSA-Modells erwähnt. Er betrifft die Erweiterbarkeit auf zusätzliche Raumdimensionen. Diese Erweiterbarkeit ist im HSA-Modell (Gl. (4.62)) nicht gegeben, da im Modell kein Prozess für den lateralen Transport enthalten ist.

## Kapitel 5

# Numerische Lösung der Transportgleichungen

In diesem Kapitel wird der Algorithmus für die numerische Lösung des vorhin diskutierten Differentialgleichungssystems (Gln. (4.49) bis (4.60)) vorgestellt. Dabei haben sich zwei Methoden in der Vergangenheit besonders etabliert. Auf der einen Seite sind es Methoden der finiten Elemente und auf der anderen Seite finite Differenzmethoden [SELBERHERR 1984, GROSSMANN und ROOS 1993, KNABER und ANGERMANN 2000]. Beide Techniken beruhen auf einer der räumlichen Geometrie des zu untersuchenden Bauelements angepassten Diskretisierung der Transportgleichungen. In der vorliegenden Arbeit werden ausschließlich finite Differenzmethoden verwendet. Sie wurden in der Vergangenheit intensiv untersucht, so dass es gute Erfahrungen bezüglich der Anwendbarkeit, der Stabilität und der Konvergenz dieser Diskretisierungsschemata gibt [REISER 1972, SLOOTBOM 1972, SLOOTBOM 1969, DE MARI 1968b, DE MARI 1968a, GUMMEL 1964].

Damit wir das Differentialgleichungssystem mit Hilfe der Methode der finiten Differenzen numerisch lösen können, müssen wir das zu untersuchende Gebiet geeignet diskretisieren. Dazu legt man im Allgemeinen diskrete Punkte in das Simulationsgebiet (z.B. 2D Gebiet, Abb. 5.1). Für diese Punkte wird dann später die Lösung berechnet. Die Diskretisierungspunkte bilden dann das Diskretisierungsgitter. Für die hier betrachtete rechteckige Fläche liegen die einzelnen Gitterlinien parallel zu den kartesischen Koordinatenachsen, die wiederum parallel zu den Seitenlinien des Rechtecks ausgerichtet sind. In der Regel verwendet man dabei nicht äquidistante Gitter. Dabei wählt man das Gitter in den Regionen feiner, in denen „viel passiert“, also in Bereichen mit starken Gradienten und gröber in Regionen mit kleinen Gradienten (vgl. Abb. 5.1 und 5.2). An dieser Stelle tritt ein wesentlicher Nachteil der finiten Differenzmethode gegenüber der finiten Elementmethode zum Vor-

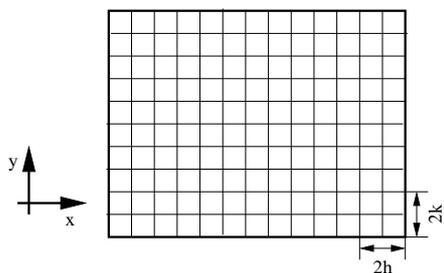


Abbildung 5.1: Äquidistantes Gitter.

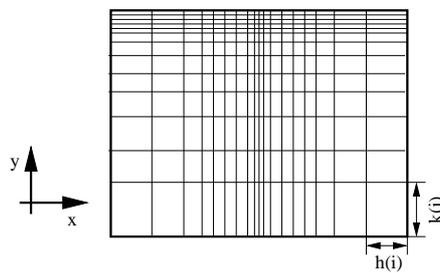


Abbildung 5.2: Nicht-äquidistantes Gitter.

schein. Neben dem Bereich feiner Gitterlinien (Abb. 5.2 Mitte oben) gibt es noch einen weiteren Bereich mit feiner Diskretisierung (Abb. 5.2 Bauteilmitte unterer Bereich). Der zweite untere Bereich ist häufig nicht gewollt, so dass oft zusätzlich Rechenzeit erforderlich ist. Bei finiten Elementmethoden tritt dieser unerwünschte Nebeneffekt im allgemeinen nicht auf [SELBERHERR 1984, GROSSMANN und ROOS 1993, KNABER und ANGERMANN 2000]. Damit können Computerressourcen gespart werden.

## 5.1 Scharfetter-Gummel Diskretisierung

Während die Poisson-Gleichung relativ einfach numerisch zu lösen ist, bereitet die numerische Behandlung der Kontinuitätsgleichungen größere Schwierigkeiten, da sie wegen der auftretenden Ströme nichtlinear sind. In der Literatur findet sich eine Vielzahl von Diskretisierungsarten für die Kontinuitätsgleichungen [SLOOTBOM 1972, GUMMEL 1964, SCHARFETTER und GUMMEL 1969, REISER 1973]. Prinzipiell unterscheidet man dabei zwischen zwei Zugängen. Während die erste Methode darauf beruht, die Ströme explizit auf den Stützpunkten zu berechnen und sie dann anschließend in die Kontinuitätsgleichung einzusetzen, setzt die zweite Methode darauf, die Ströme aus den Kontinuitätsgleichungen direkt zu eliminieren. Die erstgenannte Methode erweist sich aufgrund starker Stabilitätskriterien (explizites Verfahren) und/oder Lösung komplizierter nichtlinearer Gleichungssysteme (voll implizites Verfahren) als ungünstig [PRESS et al. 1992, SNOWDEN 1986, SELBERHERR 1984]. Scharfetter und Gummel [SCHARFETTER und GUMMEL 1969] haben Ende der 60er Jahre eine Diskretisierung entwickelt, die auch bei großen Orts- und Zeitintervallen stabil ist. Bei dieser speziellen Diskretisierung wird die räumliche Änderung der Dichte zwischen zwei Stützpunkten infolge des elektrischen Potentials über eine im Allgemeinen nichtlineare Funktion gesteuert, welche im Wesentlichen für die Stabilität der Simulation verantwortlich ist. Diese

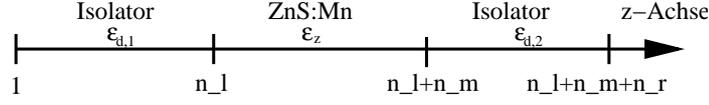


Abbildung 5.3: 1D Diskretisierung des ZnS:Mn-Bauelements. Die Variablen  $\varepsilon_z$ ,  $\varepsilon_{d,1}$  und  $\varepsilon_{d,2}$  bezeichnen die Dielektrizitätskonstanten des jeweiligen Materials. Die einzelnen Stützpunkte  $i$  werden mit  $i = 1, \dots, n_l, \dots, n_l + n_m, \dots, n_l + n_m + n_r$  bezeichnet.

Scharfetter-Gummel Diskretisierung soll nun kurz exemplarisch vorgestellt werden. Dazu wird die Poisson-Gleichung und eine Kontinuitätsgleichung diskretisiert. Damit die Transportgleichungen diskretisiert werden können, müssen wir ein geeignetes Raster einführen. Für den eindimensionalen Transport diskretisieren wir das ZnS-Bauelement gemäß der Abbildung 5.3. Dabei unterteilen wir die Richtung des longitudinalen Transports ( $z$ -Achse) in insgesamt  $N_z - 1 = n_l + n_m + n_r - 1$  Intervalle. Die Kennzeichnung der  $N_z$  Stützstellen wird mit Hilfe der Abbildung 5.4 vorgenommen.

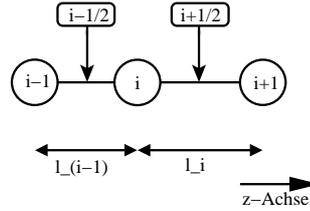


Abbildung 5.4: Diskretisierungsstern und Nomenklatur für die Stützpunkte und Intervallmitten für den 1D Transport. Die Stützpunkte werden durch Kreise und die Intervallmitten durch Rechtecke symbolisiert.

### 5.1.1 Diskretisierung der Poisson-Gleichung

Für die diskrete Version der Poisson-Gleichung (4.48) innerhalb der ZnS:Mn-Schicht ( $n_l + 1 \leq i \leq n_l + n_m - 1$ ) ersetzen wir die zweite partielle Ableitung des elektrischen Potentials durch einen entsprechenden Differenzausdruck, der mit Hilfe einer Taylorreihe abgeleitet wird. Dazu entwickelt man das Potential  $V_{i\pm 1/2}$  an der Position  $i$  bis zur dritten Ordnung und bildet dann die Differenz  $V_{i+1/2} - V_{i-1/2}$ :

$$\left. \frac{\partial V}{\partial z} \right|_i = \frac{V_{i+1/2} - V_{i-1/2}}{\frac{l_i + l_{i-1}}{2}} + \frac{1}{4}(l_i + l_{i-1}) \left. \frac{\partial^2 V}{\partial z^2} \right|_i + \mathcal{O}\left(\frac{l_i^3 + l_{i-1}^3}{l_i + l_{i-1}}\right). \quad (5.1)$$

Die so gewonnene Beziehung (Gl. (5.1)) wird dann dazu benutzt, die zweite Ableitung in der Poisson-Gleichung durch eine erste Ableitung (elektrisches Feld), die an der Intervallmitte ausgewertet werden muss, zu ersetzen. Vom Feld nimmt man nun zusätzlich an,

dass es sich innerhalb eines Ortsintervalls nicht ändert. Damit können wir diese Ableitung durch die zentrale Differenz  $\partial_z V|_{i+1/2} = (V_{i+1} - V_i)/l_i + \mathcal{O}(l_i^2) \cdot \partial_z^3 V|_{i+1/2}$  ersetzen, die wieder aus einer Differenz zweier Taylorreihen ( $V_{i+1}$  und  $V_i$  an der Stelle  $i+1/2$ ) berechnet werden kann. Damit folgt die Diskretisierung der Poisson-Gleichung

$$\frac{V_{i-1}^t}{l_{i-1}} - V_i^t \left( \frac{1}{l_i} + \frac{1}{l_{i-1}} \right) + \frac{V_{i+1}^t}{l_i} = -\frac{q}{\varepsilon_0 \varepsilon_z} \frac{l_i + l_{i-1}}{2} (-n_i^t + p_i^t + p_i^{\text{trapped},t}). \quad (5.2)$$

Für die Diskretisierung der beiden Isolatoren ( $2 \leq i \leq n_l - 1$ ,  $n_l + n_m + 1 \leq i \leq N_z - 1$ ) sind natürlich die Elektronen- und die Löcherdichten auf Null zu setzen, da in den Isolatoren keine Ladungen vorhanden sind. Die äußeren Punkte ( $i = 1$ ,  $i = N_z$ ) werden nicht berechnet, da die Treiberspannung  $U(t)$  an diesen Punkten fest vorgegeben wird. Also setzt man  $V_1 = U(t)$  und  $V_{N_z} = 0$ .

Besondere Aufmerksamkeit benötigen die beiden Halbleiter-Isolator Grenzflächen ( $i = n_l$ ,  $i = n_l + n_m$ ). Mit dem sogenannten Gaußschen Kästchen kann man das Feldverhalten an einer Grenzfläche zwischen zwei Materialien A und B mit Ladung  $\rho$  untersuchen. Es gilt für die dielektrische Verschiebung  $\vec{D}$  [NOLTING 1993]:

$$\vec{n}_{AB} \cdot (\vec{D}_B - \vec{D}_A) = \rho, \quad (5.3)$$

wobei  $\vec{n}_{AB}$  die Flächennormale bezeichnet, die vom Gebiet des Materials A ins Gebiet des Materials B zeigt. Aus der Gleichung folgt, dass die Normalkomponente des Feldes unstetig für  $\rho \neq 0$  ist. Um die obige Gleichung für die Grenzflächen zu diskretisieren, entwickelt man z.B. für die linke Grenzfläche ( $i = n_l$ ) die erste Ableitung von  $V$  an der Stelle  $i$  um die Punkte  $i + 1/2$  und  $i - 1/2$ . Man erhält:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial V}{\partial z} \right|_{\text{ZnS},i} &= \frac{V_{i+1} - V_i}{l_i} + \frac{l_i}{2} \cdot \left. \frac{\partial^2 V}{\partial z^2} \right|_{\text{ZnS},i+1/2} + \mathcal{O}(l_i^2) \\ \left. \frac{\partial V}{\partial z} \right|_{\text{Isol},i} &= \frac{V_i - V_{i-1}}{l_{i-1}} + \frac{l_{i-1}}{2} \cdot \left. \frac{\partial^2 V}{\partial z^2} \right|_{\text{Isol},i-1/2} + \mathcal{O}(l_{i-1}^2) \end{aligned} \quad (5.4)$$

Die beiden Taylorreihen (Gl. (5.4)) sowie die Poisson-Gleichung werden dann die Gleichung (5.3) eingesetzt. Es folgt somit die Diskretisierung der linken Grenzfläche ( $i = n_l$ )

$$\begin{aligned} &V_i^t \left( -\frac{2\varepsilon_z}{z_i(\varepsilon_{d,1}z_{i-1} + \varepsilon_z z_i)} - \frac{2\varepsilon_{d,1}}{z_{i-1}(\varepsilon_{d,1}z_{i-1} + x\varepsilon_z z_i)} \right) + \\ &V_{i-1}^t \frac{2\varepsilon_{d,1}}{z_{i-1}(\varepsilon_{d,1}z_{i-1} + x\varepsilon_z z_i)} + V_{i+1}^t \frac{2\varepsilon_z}{z_i(\varepsilon_{d,1}z_{i-1} + \varepsilon_z z_i)} \\ &= \frac{q\varepsilon_z l_i}{\varepsilon_0 \varepsilon_z (\varepsilon_{d,1} l_{i-1} + \varepsilon_z l_i)} \left( n_i^t - p_i^t - p_i^{\text{trapped},t} \right) - \frac{2\rho_i^{\text{links},t}}{\varepsilon_0 (\varepsilon_{d,1} l_{i-1} + \varepsilon_z l_i)}. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Natürlich hätten auch schon die Gleichungen (5.4) zur Diskretisierung gereicht. Die Randbedingung hätte aber dann einen Diskretisierungsfehler der Ordnung  $\mathcal{O}(l)$  (für äquidistantes Gitter). Durch die Substitution der zweiten Ableitung in den Gleichungen (5.4) haben wir die Fehlerordnung auf  $\mathcal{O}(l^2)$  verringert. Somit ist die Fehlerordnung für alle Stützpunkte konsistent. Die komplette Diskretisierung der Poisson-Gleichung findet sich im Anhang A.2.1.

### 5.1.2 Diskretisierung der Kontinuitätsgleichungen

Die Diskretisierung der Kontinuitätsgleichung gestaltet sich ein wenig aufwändiger. Dabei werden Stromdichtegleichungen für  $j_n$  und  $j_p$  ( $j(z \in [z_i, z_{i+1}]) = j|_{i+1/2} + \mathcal{O}(l_i)$ ) als Differentialgleichungen, die von den jeweiligen Dichten abhängen, für einen beliebigen Punkt auf dem Intervall  $[z_i, z_{i+1}]$  analytisch gelöst. Bei der Lösung nehmen wir ein auf dem Ortsintervall konstantes elektrisches Feld und die Gültigkeit der Einstein-Beziehung  $D = \frac{k_B T}{q} \mu$  an. Mit den Anfangsbedingungen, hier am Beispiel der Elektronenkontinuitätsgleichung,  $n(z_i) = n_i$  und  $n(z_{i+1}) = n_{i+1}$  ergibt sich für die Lösung der Differentialgleichung erster Ordnung

$$n(z \in [z_i, z_{i+1}]) = [1 - g_i(z, V)] n_i + g_i(z, V) n_{i+1}, \quad (5.6)$$

wobei für die Funktion  $g_i$

$$g_i(z, V) = 1 - \frac{\exp\left(\frac{V_{i+1} - V_i}{k_B T/q} \frac{z - z_i}{l_i}\right)}{1 - \exp\left(\frac{V_{i+1} - V_i}{k_B T/q}\right)} \quad (5.7)$$

gilt. Sie beschreibt im Wesentlichen das Verhalten der Dichte auf einem Diskretisierungsintervall in Abhängigkeit vom anliegenden Potentialgefälle und ist in der Abbildung 5.5 dargestellt. Man erkennt, dass nur im Fall  $U = 0$  die Funktion einen linearen Verlauf zeigt. Die Beziehung (5.6) ist das Kernstück der Scharfetter-Gummel Diskretisierung. Der „richtige“ exponentielle Abhängigkeit der Dichte vom Potential innerhalb eines Ortsintervalls ist von Anfang an in die Diskretisierung integriert. Mit der analytischen Lösung (5.6) kann der Strom  $j_n = j$  mit

$$j_{i+1/2} = \frac{D}{l_i} \left\{ B \left[ \frac{V_i - V_{i+1}}{k_B T/q} \right] n_i - B \left[ \frac{V_{i+1} - V_i}{k_B T/q} \right] n_{i+1} \right\} \quad (5.8)$$

und der Bernoulli-Funktion  $B(x) \equiv \frac{x}{\exp(x) - 1}$

angeben werden. Der Ausdruck für den Strom (Gl. (5.8)) wird nun abschließend in die diskrete Version der Kontinuitätsgleichung ( $\Theta$  Abk. für die Raten, vgl. Gl. (5.1))

$$\frac{(-j_{i+1/2}) - (-j_{i-1/2})}{\frac{l_i + l_{i-1}}{2}} = \Theta_i. \quad (5.9)$$

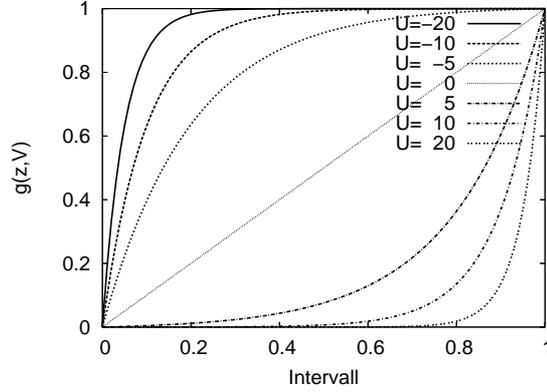


Abbildung 5.5: Die Funktion  $g(z, V)$  innerhalb eines Diskretisierungsintervalls für verschiedene Werte  $U = \frac{V_{i+1} - V_i}{k_B T / q}$ .

eingesetzt. Daraus folgt die endgültige diskrete Version der Kontinuitätsgleichung

$$\begin{aligned}
 & n_i^{t+\Delta t} \left( -D \frac{1}{z_i} B \left[ \frac{V_i^t - V_{i+1}^t}{k_B T / q} \right] - D \frac{1}{z_{i-1}} B \left[ \frac{V_i^t - V_{i-1}^t}{k_B T / q} \right] - \frac{1}{\Delta t} \frac{l_i + l_{i-1}}{2} \right) + \\
 & n_{i-1}^{t+\Delta t} D \frac{1}{z_{i-1}} B \left[ \frac{V_{i-1}^t - V_i^t}{k_B T / q} \right] + \\
 & n_{i+1}^{t+\Delta t} D \frac{1}{z_i} B \left[ \frac{V_{i+1}^t - V_i^t}{k_B T / q} \right] \\
 & = \left( \Theta_i^t - \frac{1}{\Delta t} n_i^t \right) \frac{l_i + l_{i-1}}{2},
 \end{aligned} \tag{5.10}$$

in der die Zeitableitung mit Hilfe des Euler-Verfahrens ( $\partial_t n = \frac{n_i^{t+\Delta t} - n_i^t}{\Delta t}$ ) diskretisiert wurde. Die Details zu den Zeitindizes auf der rechten Seite der Gleichung (5.10) werden in Kapitel 5.1.3 erläutert.

Wie im Fall der Poisson-Gleichung gestaltet sich die Diskretisierung an den Randpunkten  $i = n_l, n_l + n_m$  der ZnS:Mn-Schicht ein wenig komplizierter. Gemäß des Transportmodells setzt sich der Elektronenstrom an einer Grenzfläche, z.B. bei  $i = n_l$ , aus zwei Komponenten zusammen, nämlich aus dem Oberflächenrekombinationsstrom  $s_n n_{n_l}$  und dem Tunnelstrom  $j_{n_l}^{\text{tunnel}}$ . Wie aus der Gleichung (5.9) zu sehen ist, benötigt man zur Diskretisierung die Ströme auf den Intervallmitten  $i \pm 1/2$ . Da dies bei der Diskretisierung der Grenzfläche nicht möglich ist, versucht man nun den Strom an der Stelle  $i - 1/2$  gemäß

$$\frac{j_{n_l-1/2} l_{n_l} + j_{n_l+1/2} l_{n_l-1}}{l_{n_l-1} + l_{n_l}} = -s_n n_{n_l} + j_{n_l}^{\text{tunnel}} \tag{5.11}$$

linear zu interpolieren. Diese Gleichung lösen wir dann nach  $j_{n_l-1/2}$  auf und setzen den

resultierenden Ausdruck in die Gleichung (5.9) ein. Es folgt die diskrete Elektronenkontinuitätsgleichung am Ort  $i = n_l$

$$\begin{aligned} & n_i^{t+\Delta t} \left( -D_{n,z} \frac{2}{z_i^2} B \left[ \frac{V_i^t - V_{i+1}^t}{k_B T/q} \right] - \frac{1}{\Delta t} - \frac{2}{l_i} s_n \right) + \\ & n_{i+1}^{t+\Delta t} D_{n,z} \frac{2}{z_i^2} B \left[ \frac{V_{i+1}^t - V_i^t}{k_B T/q} \right] \\ & = \Theta_i^t - \frac{1}{\Delta t} n_i^t - \frac{2}{l_i} J_i^{\text{tunnel},t}, \end{aligned} \quad (5.12)$$

in der die Oberflächenrekombinationsrate  $s_n n$  aus Stabilitätsgründen voll implizit behandelt wird. Die komplette Diskretisierung der Kontinuitätsgleichungen (Elektronen, Löcher) sowie der Gleichung für die eingefangenen Löcher ist im Anhang A.2 nachzulesen.

### 5.1.3 Diskretisierung der Zeit

Auch die besondere Anordnung der Zeitindizes  $t$  und  $t + \Delta t$  auf der rechten Seite der Gleichungen (5.10) und (5.12) sowie der Gleichungen (5.2) und (5.5) soll jetzt kurz diskutiert werden. Zur Diskussion betrachten wir ein System, dass nur aus Elektronen besteht, und kürzen die Transportgleichungen mit  $F_1(V, n) = 0$  (Poisson-Gleichung) bzw.  $\partial_t n = F_2(V, n)$  (Kontinuitätsgleichung) ab. Ein voll explizites Verfahren,

$$\frac{n_i^{t+\Delta t} - n_i^t}{\Delta t} - F_2(V^t, n^t) = 0 \quad (5.13)$$

wäre die einfachste Methode. Sie scheidet aber aufgrund eines starken Stabilitätskriteriums [PRESS et al. 1992, GROSSMANN und ROOS 1993] aus. Eine voll implizite Betrachtung des Problems,

$$\frac{n_i^{t+\Delta t} - n_i^t}{\Delta t} - F_2(V^{t+\Delta t}, n^{t+\Delta t}) = 0 \quad (5.14)$$

führt auf ein kompliziertes gekoppeltes nichtlineares Gleichungssystem, das in der Regel nur schwer und unter hohem numerischen Aufwand zu lösen ist. Wir benutzen dagegen ein semiimplizites Verfahren,

$$\frac{n_i^{t+\Delta t} - n_i^t}{\Delta t} - F_2(V^t, n^{t+\Delta t}) = 0 \quad (5.15)$$

das einen Kompromiss zwischen beiden vorherigen Modellen darstellt. Dieses Schema hat zur Folge, dass das vorher nichtlineare Gleichungssystem entkoppelt und so jeweils nur zwei lineare Gleichungssysteme in jedem Zeitschritt numerisch gelöst werden müssen. Zum Schluss sei hier angemerkt, dass in der Poisson-Gleichung alle Variablen stets zum Zeitpunkt  $t$ , also  $F_1(V^t, n^t) = 0$ , eingehen.

### 5.1.4 Höherdimensionale Diskretisierungen

Im Abschnitten 5.1.1 und 5.1.2 wurde das Transportmodell für den longitudinalen Transport diskretisiert. Um die Musterbildungsprozesse genau studieren zu können, sind höherdimensionale (2D bzw. 3D) Simulationen notwendig. Die Diskretisierung der hinzukommenden transversalen Dimensionen verläuft mathematisch vollkommen analog zum eindimensionalen Fall. Die diskreten 2D bzw. 3D Bauelemente sind in den Abbildungen

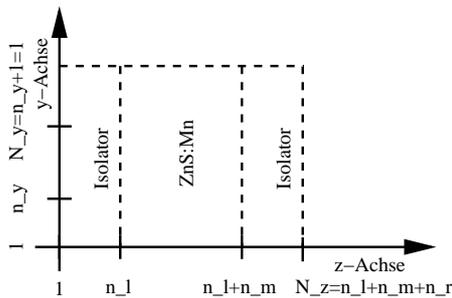


Abbildung 5.6: Diskretes 2D Bauteil mit periodischen Randbedingungen.

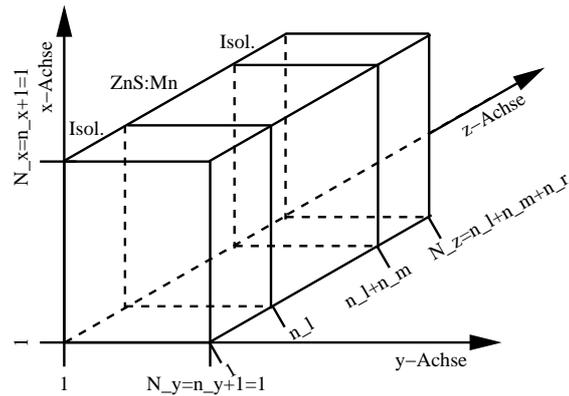


Abbildung 5.7: Diskretes 3D Bauteil mit periodischen Randbedingungen.

5.6 und 5.7 dargestellt. Dabei ist anzumerken, dass wir stets in  $x$ - und  $y$ -Richtung periodische Randbedingungen vereinbart haben. Daher werden die Indizes der Punkte  $N_x$  und  $N_y$  gleich 1 gesetzt. In den höherdimensionalen Simulationen wird aufgrund dieser periodischen Randbedingungen immer eine unendliche Anzahl von identischen aneinander liegenden Bauelementen gelöst. Dieser Punkt wird in späteren Kapiteln noch von großer Wichtigkeit sein. Selbstverständlich sehen nun die Diskretisierungssterne (vgl. Abb. 5.8, 5.9) viel komplizierter aus. So müssen bei einer zweidimensionalen Simulation bis zu 5 (genau 5 f.  $1 < i < N_z$  und  $j$  bel.) und bei einer dreidimensionalen Simulation bis zu 7 (genau 7 f.  $1 < i < N_z$ ,  $j$  und  $m$  bel.) Stützpunkte berücksichtigt werden. Die kompletten diskretisierten Gleichungen in 2 bzw. 3 Dimensionen finden sich im Anhang A.3 und A.4.

## 5.2 Numerische Lösung der diskretisierten Gleichungen

Infolge der in den vorherigen Kapiteln beschriebenen semiimpliziten Diskretisierung müssen in jedem Zeitschritt drei lineare Gleichungssysteme, also für die Dichten  $(n, p)$  und das Potential  $V$ , sowie eine gewöhnliche Differentialgleichung für die Dichte der eingefangenen Löcher  $p_{\text{trapped}}$  gelöst werden. Unabhängig von der Anzahl der betrachteten Raum-

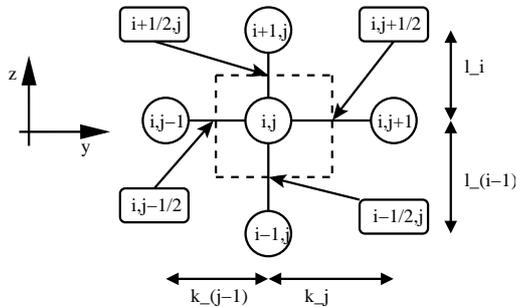


Abbildung 5.8: Diskretisierungsstern für 2D Simulation: Stützpunkte  $\rightarrow$  Kreise, Intervallmitten  $\rightarrow$  Rechtecke.

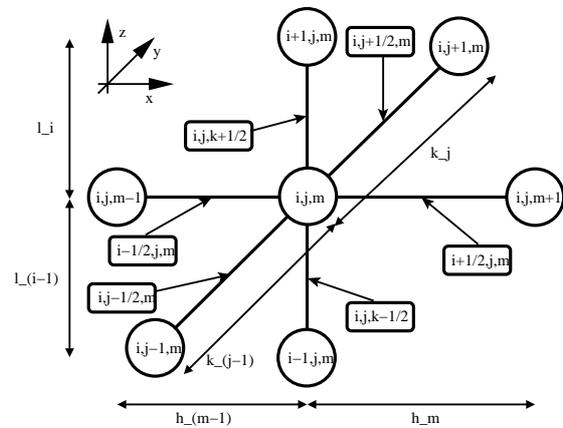


Abbildung 5.9: Diskretisierungsstern für 3D Simulation: Stützpunkte  $\rightarrow$  Kreise, Intervallmitten  $\rightarrow$  Rechtecke.

dimensionen nimmt die Lösung der Transportgleichung für  $p_{\text{trapped}}$  immer die geringste Rechenzeit ein, was im Wesentlichen auf ihre einfache Gestalt zurückzuführen ist. Deutlich rechenintensiver sind natürlich die Lösungsverfahren für die linearen Gleichungssysteme. Dies gilt im besonderen Maße für die Elektronen- und Löcherkontinuitätsgleichung, da ihre Matrixelemente in jedem Zeitschritt neu berechnet werden müssen. Die Poisson-Gleichung ist dagegen einfacher zu behandeln, da dort die Matrixelemente konstant sind. Die Rechenzeit ist zusätzlich stark abhängig von der Anzahl der Raumdimensionen.

Im eindimensionalen Fall ist die Lösung der Gleichungssysteme aufgrund des Diskretisierungssterns (Abb. 5.4) sehr einfach, da die auftretenden Matrizen alle tridiagonal sind, d.h. alle Matrixelemente  $a_{i,j} = 0$  für  $|i - j| > 1$ . In diesem Fall kann man mit Hilfe direkter Verfahren (Gauß-Algorithmus, LR-Zerlegung) [STOER 1994, ANDERSON et al. 1995] die Lösung schnell berechnen. Bei der Berücksichtigung weiterer Raumdimensionen nimmt natürlich die Dimension der Matrizen stark zu. Bei den resultierenden Matrizen handelt es sich um sogenannte Bandmatrizen mit einer Breite  $l$ , d.h.  $a_{i,j} = 0$  für  $i - j > l$  und  $j - i > l$ . Die entsprechenden Matrizen für die 2D bzw. 3D Simulation sind schematisch im Anhang B und C abgebildet. Schon hier bei den abgebildeten Matrizen fällt auf, dass infolge der Diskretisierungssterne (Abb. 5.8, 5.9) nur wenige Matrixelemente von Null verschieden sind. Daher werden solche Matrizen als dünn besetzt bezeichnet [PRESS et al. 1992]. Diese mitunter „riesigen“ Gleichungssysteme werden dann in der Regel nicht mehr direkt sondern iterativ gelöst, da iterative Methoden fast immer schneller sind und weniger Speicherbedarf haben [PRESS et al. 1992, HACKBUSCH 1994, BERRETT et al. 1994]. Zur Lösung der Gleichungssysteme im zwei- bzw. dreidimensionalen Fall verwenden wir hochoptimierte

iterative Methoden, die im Wesentlichen auf der Methode der konjugierten Gradienten beruhen [COMPAQ COMPUTER CORPORATION 2001].

## Teil III

# Diskussion der Simulationsergebnisse für ein-, zwei- und dreidimensionale Bauteilgeometrie

# Kapitel 6

## Longitudinaler Ladungsträgertransport

### 6.1 Grundmechanismen des Ladungstransports

Zu Beginn des Ergebnisteils der vorliegenden Arbeit sollen einige grundlegende Transporteigenschaften diskutiert werden. Dazu betrachten wir die Ladungsträgerdynamik nur in z-Richtung (vgl. Abb. 3.1). Die restlichen Raumdimensionen (x- und y-Richtung) werden als homogen angenommen, d.h. sie werden hier noch nicht berücksichtigt. Umfangreiche numerische Untersuchungen zum 1D Transport sind von [RAKER 2000, RAKER et al. 2002, ZUCCARO et al. 2003, MEYER 2003] durchgeführt worden. Die wichtigsten Transportmechanismen sollen hier zusammengefasst werden, da diese für die Erklärung der später präsentierten Muster von großer Wichtigkeit sind. Besonders intensiv behandeln wir in diesem Zusammenhang den Grenzfall vieler Spannungsperioden, der mit Hilfe einer besonderen Kennlinie dargestellt wird. Wir werden sehen, dass diese Kennlinie für bestimmte Parameter eine Bistabilität aufweist. Zunächst lösen wir unser Drift-Diffusions-Modell in der HSA-Konfiguration, damit wir beide Modelle miteinander vergleichen können. Dies bedeutet im Folgenden:

- Rekombination zwischen Elektronen und eingefangenen Löchern über  $R = \sigma j_n p_t$
- keine Löcheremission, d.h.  $\beta = 0$ .

Um ein Gefühl für den Transport zu bekommen, reicht es zu Beginn das Transportproblem für die erste Periode einer Sinusspannung zu analysieren. Die Simulationsparameter sind in der folgenden Tabelle 6.1 zusammengefasst.

Spannung:	Wechselspannung: $f = 1$ kHz
Bauteilabmessungen:	Isolatoren: $l_{\text{is}} = 300$ nm ZnS:Mn: $l_{\text{s}} = 500$ nm
Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit:	$s_n = 300 \times 10^6$ cm/s $s_p = 10 \times 10^6$ cm/s
Einfangkoeffizient:	$\gamma = 1 \times 10^{-4}$ cm <sup>3</sup> /s
Rekombinationswirkungsquerschnitt:	$\sigma = 1 \times 10^{-14}$ cm <sup>2</sup>
Grenzflächenzustandsdichte:	$n_{\text{ss}} = 5 \times 10^{13}$ cm <sup>-2</sup> eV <sup>-1</sup>
Löcherfallendichte:	$p_{\text{max}}^t = 5 \times 10^{16}$ 1/cm <sup>3</sup>
Löcheremissionsrate:	$\beta = 0$ 1/s
Dielektrizitätskonstanten:	Isolator: $\epsilon_{\text{is}} = 14$ ZnS:Mn: $\epsilon_{\text{s}} = 8$
Mobilitätskonstanten:	$\mu_n = 165$ cm <sup>2</sup> /Vs $\mu_p = 5$ cm <sup>2</sup> /Vs
Teilchentemperaturen:	$T_n = 300$ K $T_p = 300$ K
Pos. d. Grenzfl.-zustände (unter LB-Kante):	$\epsilon_0 = 0.9$ eV

Tabelle 6.1: Simulationsparameter für den longitudinalen Ladungsträgertransport.

### 6.1.1 Feldabschirmung

Zu Beginn diskutieren wir das Transportregime in Drift-Diffusions-Näherung für verschiedene Spannungsamplituden ( $U = 130, 150, 200$  V). Diese Auswahl wurde bewusst so getroffen, da so verschiedene Abschirmmechanismen gut herausgearbeitet werden können. Wir beginnen die Diskussion mit der Abbildung 6.1, die die zeitliche Dynamik des elektrischen Feldes an Anode und Kathode, der Grenzflächenladungen und der Tunnelinjektion darstellt. Im Fall der kleinsten Spannungsamplitude ( $U = 130$  V) ergibt sich folgendes Transportszenario. Parallel zur Spannungsamplitude steigt auch das elektrische Feld an. Sobald die Feldstärke an der momentanen Kathode Werte über 1 MV/cm erreicht hat, ist die Bandverbiegung (Abb. 3.11) so groß, dass Elektronen aus den lokalisierten Grenzflächenzuständen in das Leitungsband tunneln können. Mit fortschreitender Simulationszeit nimmt der Tunnelstrom parallel zum Feld weiter zu, bis das Feld infolge der äußeren Spannung sein erstes Maximum durchläuft. Danach nimmt die Injektion aus den Grenzflächen durch das abfallende Feld wieder ab, durchläuft zusammen mit dem Feld die Nulllinie und nimmt später infolge des Feldanstiegs wieder zu. Wir erkennen, dass der zeitliche

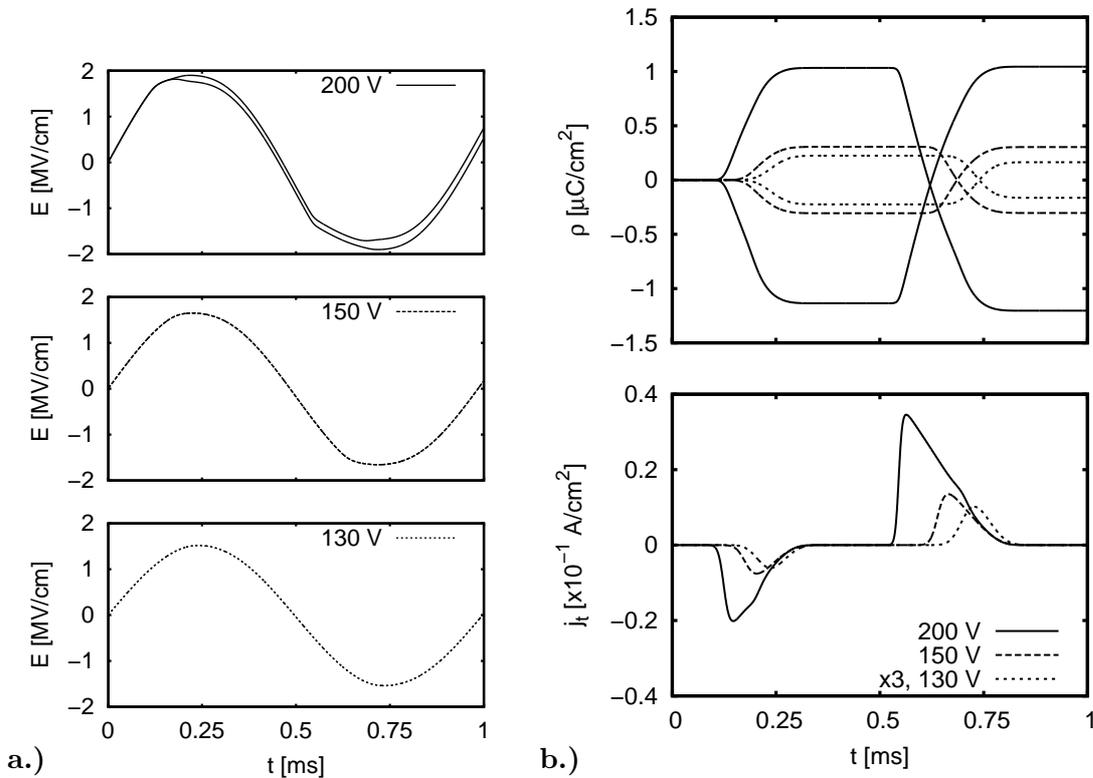


Abbildung 6.1: Elektrisches Feld  $E$  an Anode und Kathode (a.), Tunnelinjektion  $j_t$  und Grenzflächenladungen  $\rho$  (b.) für drei Spannungsamplituden. Dargestellt wird die zeitliche Dynamik innerhalb der ersten Spannungsperiode. Im Fall der Spannungsamplitude von 200 V ist das Feld der Kathode während der ersten Halbwelle durch die am höchsten liegende Kurve bestimmt. In der zweiten Halbwelle wird das Feld der Kathode durch die am tiefsten liegende Kurve repräsentiert.

Verlauf von  $E$  und  $j_t$  fest an den Spannungsverlauf gekoppelt ist, was besonders gut am sinusförmigen Feldverlauf zu erkennen ist. Neben diesem hochsymmetrischen Feldverlauf treten bei dieser Spannung noch zwei weitere interessante Transportmerkmale zum Vorschein. In den drei Bildern für das elektrische Feld sind jeweils die Feldverläufe von Anode und Kathode eingezeichnet. Im 130 V Fall liegen die beiden Feldkurven exakt aufeinander, so dass wir von einem homogenen Feld sprechen können. Die zweite Auffälligkeit betrifft das zweite Tunnelstrommaximum. Es ist ungefähr doppelt so groß wie das erste. Um beide Merkmale zu verstehen, müssen wir eventuell entstehende Raumladungen in der ZnS:Mn-Schicht sowie die Grenzflächenladungen an den Isolator-Halbleiter-Grenzschichten genauer betrachten.

Eine positive Raumladung infolge der Stoßionisation ist dabei auszuschließen, da die

Feldstärken unterhalb der kritischen Schwelle von 1.9 MV/cm liegen (Abb. 4.1). Es werden somit praktisch keine Löcher erzeugt. Dadurch ist keine Raumladung in der ZnS:Mn-Schicht vorhanden, die das elektrische Feld abschirmen kann. Daher ist es räumlich homogen. Im Kapitel 3.3 wurde diskutiert, dass die vorher injizierten Elektronen an der momentanen Anode wieder von Grenzflächenzuständen aufgenommen werden können. Dieser Prozess wird durch die Stärke der Oberflächenrekombination bestimmt. Die Elektronen, die nicht eingefangen werden, halten sich infolge des starken Feldes in ihrer unmittelbaren Nähe auf. Durch den Elektroneneinfang ändert sich natürlich die Ladung auf der entsprechenden Grenzfläche und so ist es sinnvoll, diese Grenzflächendynamik zu analysieren (Abb. 6.1b.) oben). Wir erkennen, dass sich die Grenzflächenladungen immer dann ändern, wenn ein Strom durch die ZnS:Mn-Schicht fließt. Durch den Tunnelstrom bekommt die kathodenseitige Grenzfläche eine positive Ladung (Elektronen fließen heraus) und die anodenseitige erhält infolge des Elektroneneinfangs eine negative Ladung. Dadurch induzieren die Ladungen an den beiden Grenzflächen ein elektrisches Feld, das dem durch die äußere Spannung hervorgerufenem Feld entgegen gerichtet ist. Dadurch kann bei hinreichend großen Ladungen in den Grenzflächen das äußere elektrische Feld abgeschirmt werden. Dies ist aber im 130 V Fall nicht zu erkennen, da die Grenzflächenladungen zu schwach ausgeprägt sind. Somit fallen die Spannungsmaxima immer mit den Feldmaxima zusammen.

An dieser Stelle sei angemerkt, dass das Vorhandensein einer positiven Raumladung auch mit Hilfe der Grenzflächenladungen zu überprüfen ist. Da das gesamte Bauelement neutral sein muss, ergibt die Addition der beiden Grenzflächenladungen an Kathode und Anode den Betrag der positiven Ladung im Bauelement. Man erkennt Ladungsverläufe, die sich spiegelsymmetrisch zur Nulllinie anordnen. Dies deutet darauf hin, dass keine positive Raumladung in der ZnS:Mn-Schicht vorhanden ist.

Mit Hilfe der Grenzflächenladungen ist auch das doppelt so große, zweite Tunnelstrommaximum zu erklären. Nachdem die erste Halbwelle der Spannung simuliert ist, haben sich Ladungen gemäß der obigen Beschreibung angeordnet. Zum Zeitpunkt  $t = T/2$  wird das Feld durch die von außen vorgegebene Spannung umgepolt und die vorherige Anode wird zur Kathode. Damit ergibt sich das Gesamtfeld aus der Superposition des äußeren und des durch die Grenzflächenladungen induzierten Feldes. Somit wird das Feld an der Kathode leicht verstärkt und zusätzlich stehen mehr Elektronen zum Tunneln bereit. Dadurch erhöht sich deutlich die Grenzflächeninjektion, da die Variablen  $E$  und  $\rho$  exponentiell in die Gleichung für den Tunnelstrom eingehen (vgl. Gl. 4.60). Offenbar merkt sich das System, aus welcher Grenzfläche zuerst Elektronen ins Leitungsband injiziert werden. Natürlich stellt sich hier sofort die Frage, wie sich der Tunnelstrom weiter entwickelt und ob es sogar

einen stationären Zustand gibt. Dieser Frage gehen wir im nächsten Abschnitt nach.

Zunächst betrachten wir eine Simulation mit höherer Spannungsamplitude (150 V), um dort eventuelle Abschirmeffekte zu studieren. Es fällt sofort auf, dass die Absolutbeträge für das Feld sowie für den Tunnelstrom deutlich größer sind, was natürlich an der um 20 V vergrößerten Amplitude liegt. An der Feld- und Tunnelstromdynamik ist weiter zu erkennen, dass der eben noch diskutierte symmetrische Verlauf verloren geht. Dagegen bleibt das elektrische Feld auch in diesem Fall weiter räumlich homogen. Die Maxima des Tunnelstroms und des Feldes fallen nun nicht mehr mit den Spannungsmaxima zusammen. Sie sind nach links, also zu früheren Zeiten, verschoben. Ursache hierfür sind die nun stärker anwachsenden Grenzflächenladungen. Ihre feldabschirmende Eigenschaft tritt nun deutlicher zum Vorschein. Die räumliche Homogenität des Feldes liegt in der immer noch zu schwachen Stoßionisation begründet. Zwar existiert eine positive Ladung in der Zinksulfidschicht, aber insgesamt ist sie immer noch zu schwach ausgeprägt, um das Feld abschirmen zu können. Neben der Verschiebung des Tunnelstrommaximums ist noch ein weiterer Effekt, der besonders gut beim zweiten Maximum zu erkennen ist, infolge der Abschirmung sichtbar. Er betrifft die beiden Flanken der Kurve. Die erste aufsteigende Flanke ist viel steiler als die zweite abfallende. Der flachere Verlauf der zweiten Flanke ergibt sich aus der Tatsache, dass sich kurz nach dem Durchlaufen des Tunnelstrommaximums annähernd ein konstantes Feld an der momentanen Kathode einstellt. Dies liegt an der Kompensation zweier Felder. Das Feld der anwachsenden Grenzflächenladungen kompensiert dabei die Feldzunahme infolge der äußeren Spannungszunahme. In diesem Fall wird die Abnahme des Tunnelstroms allein durch die Entleerung der Grenzflächenzustände bestimmt. Dieses Feldplateau hat nur eine begrenzte Lebensdauer, da die Spannung bei  $t = 3T/4$  wieder abnimmt und die Grenzflächenladungen dagegen immer größer werden, so dass das Feld wieder stark abgeschirmt wird. Somit fließt bei maximaler äußerer Spannung kein Tunnelstrom mehr, da das Feld an der Kathode nun sehr effektiv abgeschirmt wird. Insgesamt fließt auch hier während der zweiten Halbwelle mehr Strom durch die ZnS:Mn-Schicht wie bei der ersten Halbwelle. Die Argumentation hierfür ist analog zum 130 V Fall.

Bis jetzt spielte die positive Raumladung nur eine untergeordnete Rolle, da infolge der zu kleinen Feldstärken die Stoßionisation sehr klein war. Dies ändert sich natürlich dramatisch, wenn wir die Spannungsamplitude weiter vergrößern (200 V). Durch die höheren Feldstärken setzt der Tunnelstrom und damit die Änderung der Grenzflächenladungen noch früher ein, so dass die Tunnelstrommaxima wesentlich weiter zu früheren Zeiten verschoben werden. Besondere Aufmerksamkeit muss nun dem Feld geschenkt werden. Obwohl die Feldabschirmung aufgrund der großen Grenzflächenladungen recht stark ist,

kann das Feld weiter ansteigen und so eine massive Stoßionisation auslösen. Es resultiert eine inhomogene Feldverteilung, die von der positiven Raumladung ausgelöst wird. Die massiv einsetzende Löchergeneration und der damit verbundene Löchereinfang bauen das positive Raumladungsprofil auf, das dann das elektrische Feld inhomogen abschirmt. Dabei werden die meisten Löcher in der Nähe der Kathode eingefangen. Nur wenige Löcher gelangen in den Bereich der Anode. So wird das Feld im Bereich der momentanen Kathode verstärkt und das Feld im Bereich der Anode geschwächt. Diese Feldverstärkung an der Kathode spiegelt sich natürlich auch im Tunnelstrom wieder. Sobald sie einsetzt, ist ein leichter Knick auf der abfallenden Flanke zu erkennen. Das erhöhte Feld erzwingt, obwohl das Maximum von  $j_t$  schon durchlaufen ist, eine höhere Tunnelinjektion. Sie ist jeweils nur von sehr kurzer Dauer, da die Entleerung der Grenzflächenzustände und das massive Gegenfeld der Grenzflächenladungen den Tunnelstrom wieder stark reduziert.

Um den Einfluss der Stoßionisation noch besser verstehen zu können, sei auf die Abbildung 6.2 hingewiesen. In dieser Abbildung sind die Dichten in Abhängigkeit von der Zeit

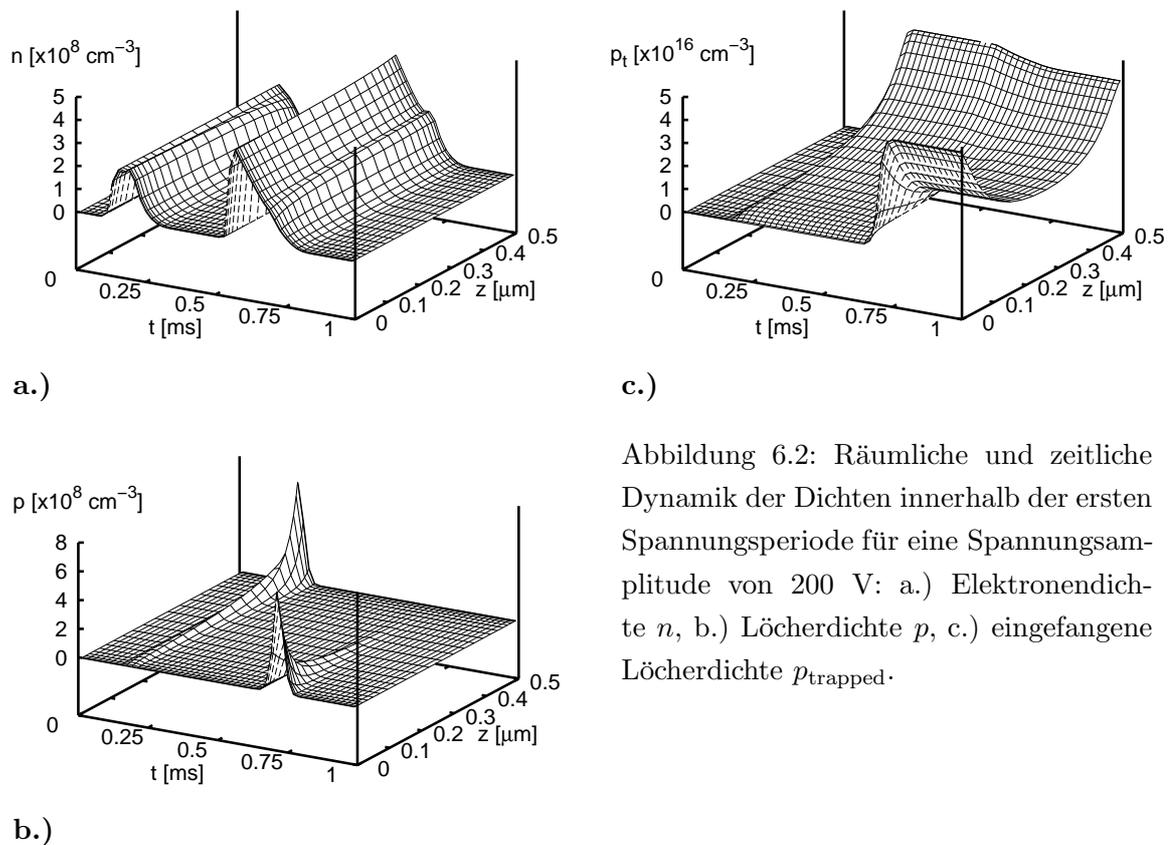


Abbildung 6.2: Räumliche und zeitliche Dynamik der Dichten innerhalb der ersten Spannungsperiode für eine Spannungsamplitude von 200 V: a.) Elektronendichte  $n$ , b.) Löcherdichte  $p$ , c.) eingefangene Löcherdichte  $p_{\text{trapped}}$ .

$t$  und der Position  $z$  dargestellt. Betrachten wir zuerst die Elektronendichte (Abb. 6.2a.)). Sobald Elektronen ins Leitungsband emittiert werden, bildet sich eine räumliche Elektronenverteilung aus. Ihre Maxima sind analog zum Tunnelstromverlauf ebenfalls aufgrund der homogenen Abschirmung durch die Grenzflächenladungen zu früheren Zeiten hin verschoben. Die infolge der hohen Feldstärken einsetzende Stoßionisation ist jeweils auf der abfallenden Flanke der Dichte durch eine markante Stufe zu erkennen. Sie präsentiert sich umso ausgeprägter, je näher man der momentanen Anode kommt (1. Halbwelle bei  $z = 0 \mu\text{m}$ , 2. Halbwelle bei  $z = 0.5 \mu\text{m}$ ). Es ist also eine räumlich inhomogene Dichte zu beobachten. Dies liegt an der Tatsache, dass die Elektronen auf dem Weg zur momentanen Anode immer wieder weitere Elektron-Loch Paare erzeugen und so die Elektronendichte zur Anode hin immer weiter erhöhen. Die erzeugten Löcher (Abb. 6.2b.)) wandern natürlich zur jeweiligen Kathode. Dort ist die Dichte am größten, während im Bereich der Anode fast keine freien Löcher zu finden sind. Die freien Löcher können von den Löcherfallen eingefangen werden und bilden so die positive Raumladung (Abb. 6.2c.)). Man erkennt sofort, dass für die hier verwendeten Einfangkoeffizienten die eingefangene Löcherdichte um ein Vielfaches höher ist, als die anderen beiden Dichten. Dies ist generell bei allen noch folgenden Simulationen der Fall. Aufgrund der Verteilung der freien Löcher wird im Bereich der momentanen Kathode am effektivsten eingefangen. Es baut sich somit ein wannenförmiges Profil für die eingefangene Löcherdichte aus. Bei genauer Betrachtung kann man die Auswirkungen der Rekombination zwischen Elektronen und eingefangenen Löchern beobachten. Dazu betrachtet man  $p_{\text{trapped}}$  während der zweiten Halbwelle der Spannung. Wie vorhin besprochen, nimmt infolge des Einfangs die Dichte im Bereich der Kathode stark zu. Im Anodenbereich nimmt die Dichte dagegen leicht ab (leichte Vertiefung in der Wannenstruktur), da hier die Rekombination den wesentlichen Prozess darstellt. Der Löchereinfang ist hier unbedeutend aufgrund der Tatsache, dass in diesem Bereich kaum freie Löcher gelangen.

Damit alle Variablen des DD-Modells wenigstens einmal komplett dargestellt werden, betrachten wir zum Schluss kurz die beiden Stromdichten für die drei Spannungen (Abb. 6.3). Aufgrund der großen Absolutwerte werden die Ströme logarithmisch dargestellt. An ihnen können alle in diesem Abschnitt besprochenen Transportphänomene, wie räumlich homogene (über Grenzflächenladungen) und inhomogene (über positive Raumladung) Feldabschirmung sowie die Stoßionisation identifiziert werden. Die homogene Abschirmung verschiebt auch hier wie im Fall des Tunnelstroms die jeweiligen Strommaxima von  $j_n$  (Abb. 6.3a.)) und  $j_p$  (Abb. 6.3b.)) zu früheren Zeiten. Die Stoßionisation sorgt dagegen für räumlich inhomogene Stromdichteverteilungen. Auch hier kann der vorhin beschriebene Stromknick im Elektronenstrom beobachtet werden. Unmittelbar nach sei-

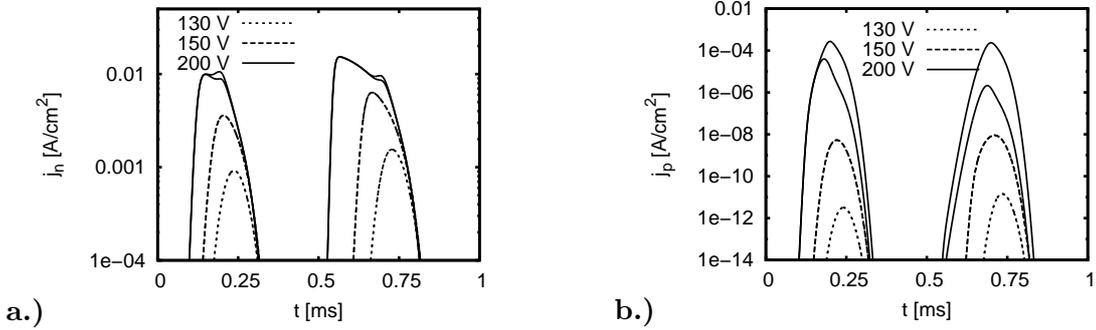


Abbildung 6.3: Zeitliche Dynamik der Stromdichten  $j_n$  (a.) und  $j_p$  (b.) an zwei symmetrisch zur Bauteilmitte liegenden Positionen ( $z = \frac{l_z}{8}, \frac{7l_z}{8}$ ) und für drei verschiedene Spannungen. Für die Spannungsamplituden  $U = 130, 150$  V stellen sich in beiden Abbildungen a.) und b.) räumlich homogene (symmetrische) Stromprofile ein.

nem Auftreten sind aufgrund der massiven Stoßionisation inhomogene Löcherströme zu beobachten.

### 6.1.2 Periodisch stationärer Zustand

Bisher wurde stets die Ladungsdynamik innerhalb einer Spannungsperiode untersucht. Jetzt soll die Ladungsdynamik für viele Spannungsperioden untersucht werden. Dadurch kann geklärt werden, ob die Lösung des Transportproblems stationär wird. Die durchgeführten Rechnungen zeigen in der Tat, dass das System einen periodisch stationären Zustand einnimmt. Dabei ist anzumerken, dass für die hier verwendeten Simulationsparameter oft sehr viele Spannungsperioden nötig sind. Daraus resultieren Simulationszeiten, die im Bereich von einigen Milli- bis Zehntelsekunden liegen. Besonders „lange“ Simulationszeiten treten immer dann auf, wenn die Einfangrate  $T$  minimal größer als die Summe der Rekombinationsraten  $G_2$  und  $R$  ist und zusätzlich die Dichte der eingefangenen Löcher  $p_{\text{trapped}}$  deutlich kleiner als die Löcherfallenkonzentration  $p_{\text{max}}^t$  ist. In diesen Fällen wird innerhalb eines langen Zeitraums kontinuierlich eine geringe Konzentration von freien Löchern eingefangen. Dadurch wird das positive Raumladungsprofil von Periode zu Periode immer leicht modifiziert, so dass aufgrund der feldabschirmenden Wirkung der Raumladung die Lösung des Transportmodells nicht periodisch stationär wird. Erst wenn die Rate  $T$  infolge ihres Sättigungsterms ( $p_{\text{max}}^t - p_{\text{trapped}}$ ) wieder abnimmt, kommen die Raten ins Gleichgewicht und die Lösung wird stationär. Die hier beobachteten Simulationszeiten liegen innerhalb der im Experiment festgestellten Zeitskalen. Sie erstrecken sich typischerweise über einen Zeitraum von einigen Millisekunden bis zu einigen Sekunden.

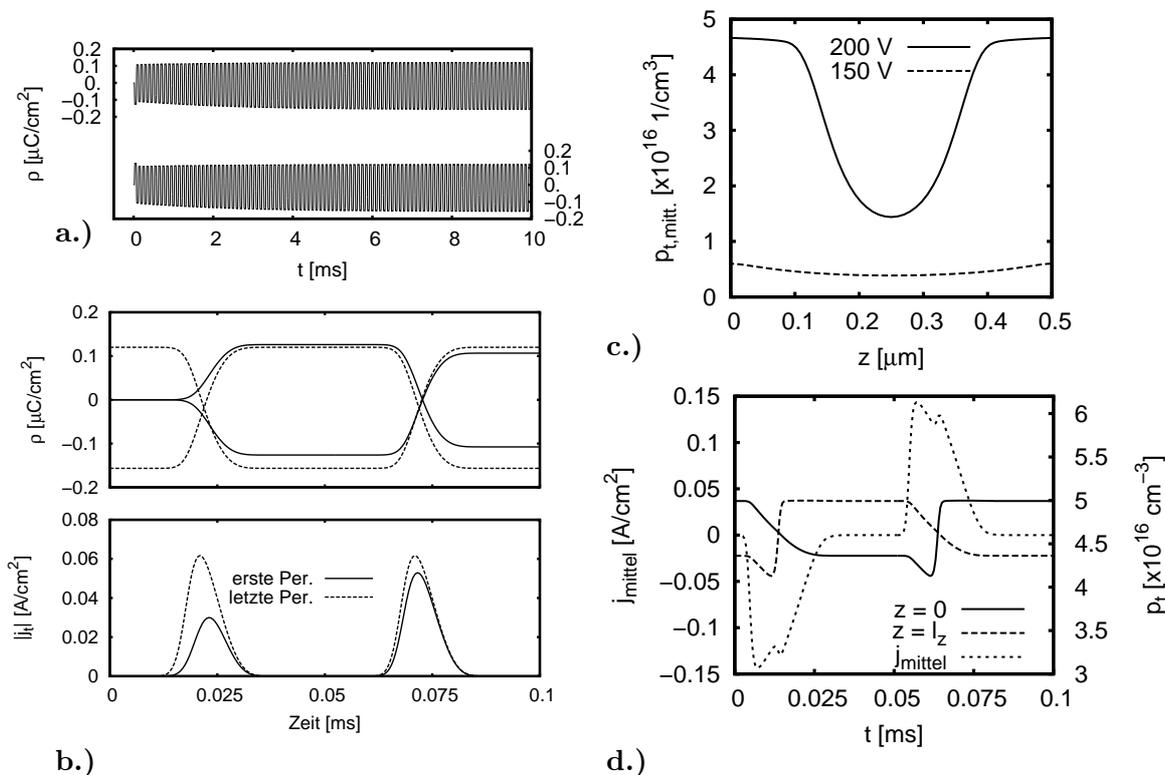


Abbildung 6.4: a.) Komplette zeitliche Entwicklung der beiden Grenzflächenladungen für eine Spannungsamplitude von 150 V. b.) Zeitliche Dynamik für die Tunnelinjektion und die Grenzflächenladungen für eine Amplitude von 150 V. Dargestellt ist die erste (Abk. e.) und letzte (Abk. l.) Periode c.) Über eine Periode zeitlich gemittelte positive Raumladungsprofile für zwei Spannungsamplituden. d.) Einfluss der Rekombination auf das positive Raumladungsprofil bei einer Amplitude von 200 V.

Dabei ist anzumerken, dass Simulationszeiten im Sekundenbereich hier nicht auftreten. Dieser Zeitbereich tritt erst bei räumlich höherdimensionalen Simulationen auf, da z.B. die Filamentwechselwirkung sehr langsam abläuft. Die Simulationsparameter sind mit denen aus der Tabelle 6.1 bis auf die Frequenz der Spannung identisch. Die gewählte Simulationsfrequenz ist hier um den Faktor 10 größer gewählt. Dies ist eher ein formales Detail, da sich so der periodisch stationäre Zustand langsamer einstellt und daher dessen Entstehung besser diskutiert werden kann. Die prinzipiellen Transporteigenschaften bleiben durch diese Frequenzerhöhung erhalten.

Wir gehen nun insbesondere der Frage nach, wie sich z.B. die Variablen  $\rho$  und  $j_t$  im Grenzfall vieler Perioden zeitlich entwickeln. Diese Frage wurde schon im vorhergehenden Kapitel 6.1.1 kurz angesprochen, da innerhalb der ersten Spannungsperiode die Höhe der

Tunnelstrommaxima recht unterschiedlich ausfiel (vgl. Abb. 6.1b). Zunächst betrachten wir die Bilder a.) und b.) der Abbildung 6.4, in denen das Langzeitverhalten des Tunnelstroms und der beiden Grenzflächenladungen des Bauelements gezeigt wird. Im Bild für die Variable  $\rho$  (Abb. 6.4a.) erkennt man ein Einschwingverhalten. Diese Einschwingphase dauert ca. 5 ms. Danach ändern sich die jeweiligen Einhüllenden offenbar nicht mehr. Das System hat dann seinen periodisch stationären Zustand erreicht. Dieser Zustand ist periodisch, da infolge der anliegenden äußeren Wechselspannung die Grenzflächenzustände periodisch geleert bzw. gefüllt werden. Zusätzlich sind noch zwei weitere Details im Verlauf der Grenzflächenladungen zu erkennen. Das erste Detail betrifft den Simulationsbeginn. Das System merkt sich für den restlichen Verlauf der Simulation die Grenzfläche, aus der zuerst ein Tunnelstrom geflossen ist. Im vorliegenden Fall stellt die untere Kurve genau diese Grenzfläche dar. Das zweite Detail ist eine direkte Folge der ortsfesten positiven Raumladung. Sie verschiebt jeweils die beiden Kurven für die Grenzflächenladungen nach unten, da nun mehr Ladung durch die ZnS:Mn-Schicht transferiert wird. Durch einen Vergleich der Dynamik für  $\rho$  und  $j_t$  zwischen der ersten und der letzten Simulationsperiode können die Eigenschaften des periodisch stationären Zustandes noch besser veranschaulicht werden (Abb. 6.4b.). Für  $\rho$  ergibt sich analog zum Bild a.) die folgende Situation. Während in der ersten Periode die Ladung einer Grenzfläche bei  $t = \frac{T}{2}, T$  recht unterschiedlich ist, wird im periodisch stationären Zustand immer die gleiche Ladung hin und her transferiert. In diesem Fall sind die jeweiligen Ladungen zu den Zeitpunkten  $t = 0, \frac{T}{2}, T$  identisch. Die Ladungen resultieren aus der Oberflächenrekombination und dem Tunnelstrom, der im periodisch stationären Zustand immer gleich groß ist und zwar unabhängig davon, aus welcher Grenzfläche getunnelt wird (Abb. 6.4b).

Die Erklärung für diesen periodisch stationären Zustand ist recht einfach. Aufgrund der räumlichen Symmetrie des Bauelements versucht das System räumlich symmetrische Ladungsverteilungen zu erreichen. In den ersten Perioden ist die Ladungsträgerdynamik im Wesentlichen von der Oberflächenrekombination und dem Tunnelstrom dominiert, da die positive Raumladung noch zu schwach ausgeprägt ist. Dies ist daran zu erkennen, dass sich die Kurven für die beiden Grenzflächenladungen bei der Ladung Null schneiden. In diesem Zeitraum werden die aufgrund der Anfangsbedingung für Grenzflächenladungen unsymmetrischen Tunnelstrompulse symmetrisiert. Daraus resultiert eine zunächst symmetrische Grenzflächenladung. An dieser Stelle könnte man denken, dass der periodisch stationäre Zustand schon erreicht ist. Dies ist aber noch nicht der Fall, da die Löcherdynamik noch nicht stationär ist. Es werden fortwährend Löcher generiert und eingefangen, die so die ortsfeste positive Raumladung bilden. Ihr Aufbau ist in der Abbildung 6.4a.) gut zu erkennen, da aufgrund ihrer feldverstärkenden Wirkung mehr Ladung (größere Amplitu-

de für  $\rho$ ) innerhalb der ZnS:Mn-Schicht übertragen wird. Nach vielen Perioden hat sich ein räumlich symmetrisches Raumladungsprofil eingestellt. In diesem Zustand hat sich ein Gleichgewicht zwischen Löchergeneration und Löcherrekombination eingestellt. Dieses räumlich symmetrische Profil für die Dichte der eingefangenen Löcher  $p_{\text{trapped}}$  wird in der Abbildung 6.4c.) dargestellt. Aus Gründen der Übersichtlichkeit wird die über eine Periode zeitlich gemittelte Ladungsdichte gezeichnet, da die Variable  $p_{\text{trapped}}$  auch ein oszillatorisches Verhalten zeigt. Obwohl die Dichte der eingefangenen Löcher im Vergleich zur Löcherfallenkonzentration  $p_{\text{max}}^t$  relativ klein ist, hat sie interessanterweise doch Auswirkungen auf die Ladungsträgerdynamik. An dieser Stelle sei ausdrücklich darauf hingewiesen, dass sobald dieser Zustand erreicht ist, selbstverständlich alle anderen Variablen wie die Dichten, das Potential und die Ströme auch periodisch stationär verlaufen.

Bei größeren Spannungsamplituden (z.B. 200 V) ändert sich die Form des Profils sehr deutlich (Abbildung 6.4c.)), da infolge der größeren Felder die Tunnelemission sehr stark anwächst und zusätzlich sehr viele Elektron-Loch-Paare durch die Stoßionisation erzeugt werden. In der Nähe der beiden Halbleiter-Isolator-Grenzschichten ist im periodisch stationären Zustand eine Sättigung zu erkennen. In diesem Raumbereich sind dann alle Löcherfallen im zeitlichen Mittel besetzt. Dabei ist zu sagen, dass die maximale Dichte  $p_{\text{max}}$  nicht erreicht wird, was in der Mittelung begründet ist. Hier wird deutlicher, was sich schon in der Abbildung 6.2c.) und im 150 V Fall (Abb. 6.4c.)) angedeutet hat. Ein Großteil der freien Löcher wird immer in der Nähe der Grenzschichten (momentane Kathode) eingefangen. Aufgrund des massiven Einfangs gelangen kaum freie Löcher in die Mitte der ZnS:Mn-Schicht, was sich natürlich ändert, wenn wir zusätzlich die thermisch aktivierte Löcheremission berücksichtigen. Dadurch ist die Konzentration von eingefangenen Löchern in der Mitte immer am geringsten. Betrachten wir nun den Sättigungsbereich einmal genauer (Abb. 6.4d.)). Dazu wurde  $p_{\text{trapped}}$  an den Orten  $z = 0$  und  $z = l_z$  gegen die Zeit geplottet. Zusätzlich wurde der räumlich gemittelte Elektronenstrom eingezeichnet. Mit diesem Bild kann der Sättigungsprozess gut diskutiert werden. Sobald der Elektronenstrom einsetzt ( $j_n$  fließt von  $z = l_z$  nach  $z = 0$ ), rekombiniert die positive Raumladung, da zunächst noch keine neuen Löcher generiert werden. Sobald die Stoßionisation einsetzt (Knick bei  $t \approx 0.013$  ms in  $j_{\text{mittel}}$ ), werden Elektron-Loch-Paare erzeugt, wobei die freien Löcher eingefangen werden können. Der Einfang geschieht dabei nur im unmittelbaren Bereich von  $z = l_z$  (momentane Kathode). Hier dominiert der Löchereinfang die Rekombination, während bei  $z = 0$  (momentane Anode) die Rekombination aufgrund der fehlenden Löcher der dominierende Prozess ist. Erreicht  $p_{\text{trapped}}$  die maximale Konzentration von  $p_{\text{max}}^t$ , so geht die Einfangrate gegen Null und die freien Löcher tragen so zum Gesamtstrom bei. Wird dann die äußere Spannung umgepolt, setzt dann der umgekehrte

Prozess ein, mit dem Ergebnis, dass bei  $z = l_z$  ein Teil der Raumladung rekombiniert, während sie bei  $z = 0$  wieder anwächst. Die Stärke des Löchereinfangs wird in unserem DD-Modell hauptsächlich durch den Parameter  $\gamma$  bestimmt. Dabei wird sofort klar, dass  $p_{\text{trapped}}$  schnell in die Sättigung geht, falls eine massive Stoßionisation und ein genügend hoher Einfangkoeffizient vorliegt. Somit bietet sich ein interessanter Vergleich zwischen unserem „detaillierteren“ Transportmodell und dem HSA-Modell an, in dem alle freien Löcher instantan eingefangen werden. Wir berechnen dazu für beide Modelle die stationäre Lösung und betrachten dann wieder das Profil der zeitlich gemittelten eingefangenen Löcherdichte. Die Simulationsparameter sind dabei wieder der Tabelle 6.1 zu entnehmen, wobei hier wieder die Frequenz um den Faktor 10 vergrößert worden ist.

Aufgrund des unendlich starken Löchereinfangs im HSA-Modell wird sicher an einigen  $z$  Positionen die maximale Konzentration  $p_{\text{max}}^t$  erreicht. Folglich sind dann alle Fallen besetzt und wir müssten eigentlich die freie Löcherdichte betrachten. Da wir keine entsprechende Transportgleichung haben, bedienen wir uns folgendem Trick. Sobald  $p_{\text{max}}^t$  an einer  $z$  Position überschritten wird, setzen wir die Rate  $G$  an dieser Position in der Differentialgleichung für  $p_{\text{trapped}}$  auf Null. Natürlich werden am Ort  $z$  dann weitere Elektron-Loch-Paare erzeugt, wobei die Löcher nicht eingefangen werden können. Damit ist die Neutralitätsbedingung durch den Überschuss an negativer Ladung verletzt. Um sie wieder künstlich herzustellen, berechnen wir die fehlende positive Ladung und addieren sie zur Ladung der momentanen Kathode hinzu. Damit haben wir die freien Löcher implizit mitberücksichtigt, wobei hier eine verschwindende Löchertransitzeit eingeht.

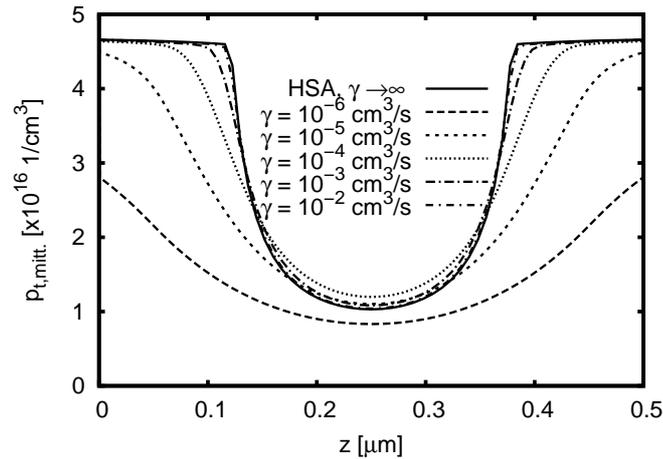


Abbildung 6.5: Vergleich zwischen HSA- und DD-Modell für verschiedene Einfangkoeffizienten  $\gamma$ . Dargestellt werden die über eine Periode zeitlich gemittelten Dichten  $p_{\text{trapped}}$ .

Aus der Abbildung 6.5 geht hervor, dass das wannenförmige Profil immer stärker ausgeprägt ist, umso größer der Einfangkoeffizient  $\gamma$  ist. Bei einem Einfangkoeffizienten von  $\gamma = 10^{-2} \text{ cm}^3/\text{s}$  schmiegt sich das Profil fast perfekt an das HSA-Profil an. In diesem Fall gibt es keine freien Löcher in der Schicht. Somit haben wir gezeigt, dass das DD-Modell im Fall großer Einfangkoeffizienten gegen das HSA-Modell konvergiert.

In den bisher durchgeführten Simulationen wurde die Löcheremission nicht berücksichtigt. Für alle folgenden Simulationsergebnisse soll sie nun berücksichtigt werden. Da die entsprechende Rate  $G_2$  proportional zu der Dichte der eingefangenen Löcher ist, spielt diese Rate nur dann eine Rolle, falls eine genügend große Dichte  $p_{\text{trapped}}$  vorhanden ist. Um ihre Auswirkungen auf den Ladungstransport zu untersuchen, betrachten wir die räumliche Entwicklung der Dichte der eingefangenen Löcher im periodisch stationären Zustand. Die äußere Spannung wird dabei so groß gewählt, dass genügend Löcher zum Einfang bereit stehen. Wir betrachten wie oben wieder die zeitlich gemittelte Raumladungsprofile für verschiedene Löcheremissionsraten  $\beta$  (Abb. 6.6). Das Profil für eine Rate

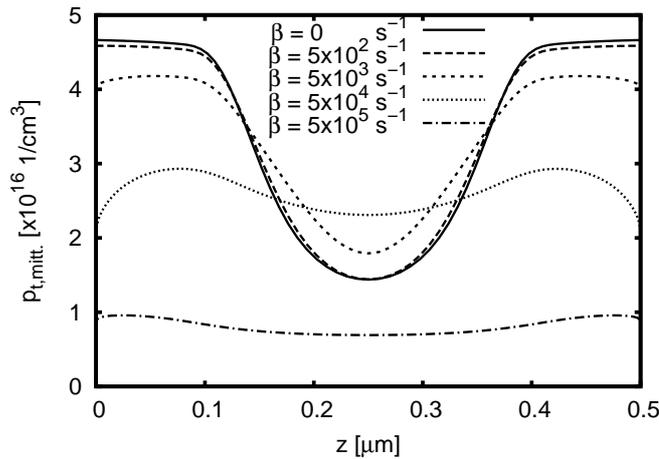


Abbildung 6.6: Einfluss der Löcheremissionsrate  $\beta$  auf das positive Raumladungsprofil. Dargestellt werden die über eine Periode zeitlich gemittelten Dichten  $p_{\text{trapped}}$ .

von  $\beta = 0$  ist identisch mit dem 200 V Profil aus der Abbildung 6.4c.) Insgesamt nimmt die Stärke der positiven Raumladung umso so deutlicher ab, je größer die Löcheremission ist. Die größte Reduzierung findet jeweils im Bereich der Grenzflächen statt, während in der Bauteilmitte zunächst (bis  $\beta \leq 5 \times 10^4 \text{ 1/s}$ ) die Raumladung anwächst. Für  $\beta > 5 \times 10^4 \text{ 1/s}$  bricht das komplette Profil zusammen. Dieses Verhalten kann recht einfach erklärt werden. Sobald Löcher eingefangen worden sind, kann der Emissionsprozess beginnen. Die bisherigen Simulationen zeigten, dass an den Rändern der ZnS:Mn-Schicht die meisten

Löcher eingefangen werden. Dies ist natürlich bei eingeschalteter Löcheremission auch so. Dementsprechend werden im diesem Ortsbereich die meisten Löcher freigesetzt. Im Gegensatz zu den Simulationen mit  $\beta = 0$  sind nun im Bereich der beiden Grenzschichten freie Löcher verfügbar, die in Richtung des anliegenden Feldes driften können. Auf ihrem Weg zur momentanen Kathode können die befreiten Löcher wieder eingefangen werden. Dies macht sich in der Abbildung dadurch bemerkbar, dass zum einen die positive Raumladung in der Bauteilmitte zunimmt und zum anderen, dass im Bereich kurz vor den Rändern des Bauteils mehr Raumladung akkumuliert wird als an den Rändern selbst. Der besonders an den Rändern effektive Löchereinfang kann den Verlust der positiven Raumladung nicht kompensieren, da das Feld über den Tunnelstrom und die Stoßionisation nicht ausreichend neue Löcher generiert. Dies liegt daran, dass erstens die Feldverstärkung aufgrund des fehlenden wannenförmigen Profils zu klein ist und zweitens wegen des Löcherdrifts weniger Elektronen in den Grenzflächenzuständen verfügbar sind und somit die Tunnelinjektion geringer ausfällt. Dies wird besonders deutlich im Fall von  $\beta = 5 \times 10^4$  1/s. Selbstverständlich kann man den Löcherdrift unterbinden, indem man den Einfangkoeffizienten  $\gamma$  wieder vergrößert. Dadurch werden die Löcher unmittelbar nach ihrer Befreiung wieder eingefangen und können daher kaum eine nennenswerte Wegstrecke zurücklegen. Im Fall einer sehr starken Löcheremission ( $\beta = 5 \times 10^5$  1/s) kann sich fast überhaupt keine ortsfeste positive Ladung ansammeln. Es entsteht eine fast räumlich homogene Raumladung mit geringer Konzentration.

Zum Abschluss soll noch erwähnt werden, dass mit der Einführung der Löcheremission die wesentlichen Transporteigenschaften (vgl. Kap. 6.1.1) wie die Abschirmung durch die Grenzflächenladungen und/oder die Abschirmung durch die ortsfeste positive Raumladung (falls vorhanden) auch weiterhin zu beobachten sind. Durch die Berücksichtigung der Löcheremission werden die positiven Raumladungsprofile geschwächt (vgl. Abb. 6.6). Da nun in dieser Situation permanent Löcher ins Valenzband emittiert werden, fällt die freie Löcherdichte  $p$  nach dem Strompuls nicht mehr auf Null ab, sondern es existiert permanent eine freie Löcherdichte  $p$  in der ZnS:Mn-Schicht, vorausgesetzt die Dichte  $p_{\text{trapped}}$  ist genügend groß. Dieser Mechanismus führt insgesamt dazu, dass die Feldverstärkung an der momentanen Kathode verringert wird und damit weniger Elektronen in das Leitungsband injiziert werden. Dadurch sind die Grenzflächenladungen im periodisch stationären Zustand nicht so stark ausgeprägt und folglich sind ihre abschirmenden Eigenschaften reduziert.

## 6.2 $Q_{1/2}U$ -Kennlinien

Nachdem die Grundmechanismen des Ladungstransports ausgiebig besprochen wurden, wenden wir uns im folgenden Abschnitt der experimentell gefundenen LU-Kennlinie zu (Kap. 3.2). Sie wurde sowohl auf experimenteller [STRYCH 1996, MARRELLO und ONTON 1980, HOWARD 1981, NEYTS 1991, NEYTS et al. 1994, SASAKURA et al. 1981b, HOWARD et al. 1982, INOUCHI und MITO 1973, YANG und OWEN 1983] als auch auf theoretischer Seite [HOWARD 1981, NEYTS und VISSCHERE 1990, NEYTS et al. 1994, SMITH 1981, HOWARD et al. 1982, JAREM und SINGH 1988] oft und intensiv untersucht. Die theoretischen Ansätze zur Beschreibung der Kennlinie haben alle denselben Ausgangspunkt. Motiviert durch die Abbildung 3.6 nimmt man an, dass die Lumineszenz der Manganatome lediglich ein Indikator für die lokale Stromdichte ist, da die Anzahl der angeregten Lumineszenzzentren proportional zum Elektronenstrom ist. Daher wird in den Modellen zum Ladungstransport die gemittelte Elektronenstromdichte bzw. die pro Halbperiode übertragende Ladung  $Q_{1/2}$  anstatt der Lichtemission betrachtet. Man verifiziert dann die beobachtete LU-Hysterese mit der  $Q_{1/2}U$ -Kennlinie. Die Hystereseeigenschaft der ZnS:Mn-Bauelemente ist für die Strukturbildungsphänomene besonders wichtig, da die Muster in der Regel nur bei Proben auftreten, deren  $Q_{1/2}U$ -Kennlinie eine Hysterese aufweist [GOSSEN 1994, VLASENKO et al. 2000b, ZUCCARO 1997]. Wie schon im Kapitel 4 kurz angedeutet, stellt das HSA-Modell (Kap. 4.4.1) den Durchbruch auf dem Gebiet der Untersuchung der LU-Kennlinie dar. Es war das erste theoretische Modell, das die experimentell gefundene Hysterese theoretisch bestätigen konnte. In diesem Abschnitt werden mit Hilfe des DD-Modells  $Q_{1/2}U$ -Kennlinien berechnet. Wir werden sehen, dass das DD-Modell ebenfalls die besprochene Hysterese reproduzieren kann. Insbesondere soll dabei untersucht werden, welche Parameter wesentlich für den Aufbau der Bistabilität sind. Die Simulationsparameter sind wie üblich in einer Tabelle (Tab. 6.2) zusammengefasst. Im Vergleich zur Tabelle 6.1 wurden einige Parameter geändert. Dies betrifft insbesondere die Frequenz  $f$  der angelegten Spannung, der Einfangkoeffizient  $\gamma$ , die Löcherfallendichte  $p_{\max}^t$  und die Löcheremissionsrate  $\beta$ . Diese Änderungen sind nötig, damit die Simulationen eine hystereseartige  $Q_{1/2}U$ -Kennlinie liefern. Im Verlauf der Kennlinie treten dann zwei unstetige Ladungssprünge auf, die die Breite der Hysterese bestimmen. Würde man die Simulationsparameter aus der Tabelle 6.1 nehmen, so bleiben die für die Hysterese charakteristischen Ladungssprünge aus und daher ist keine Hysterese zu beobachten.

Spannung:	Wechselspannung: $f = 100$ kHz
Bauteilabmessungen:	Isolatoren: $l_{\text{is}} = 300$ nm ZnS:Mn: $l_{\text{s}} = 500$ nm
Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit:	$s_n = 10 \times 10^6$ cm/s $s_p = 10 \times 10^6$ cm/s
Einfangkoeffizient:	$\gamma = 1 \times 10^{-6}$ cm <sup>3</sup> /s
Rekombinationswirkungsquerschnitt:	$\sigma = 1 \times 10^{-14}$ cm <sup>2</sup>
Grenzflächenzustandsdichte:	$n_{\text{ss}} = 5 \times 10^{13}$ cm <sup>-2</sup> eV <sup>-1</sup>
Löcherfallendichte:	$p_{\text{max}}^t = 1 \times 10^{18}$ 1/cm <sup>3</sup>
Löcheremissionsrate:	$\beta = 5 \times 10^4$ 1/s
Dielektrizitätskonstanten:	Isolator: $\epsilon_{\text{is}} = 14$ ZnS:Mn: $\epsilon_{\text{s}} = 8$
Mobilitätskonstanten:	$\mu_n = 165$ cm <sup>2</sup> /Vs $\mu_p = 5$ cm <sup>2</sup> /Vs
Teilchentemperaturen:	$T_n = 300$ K $T_p = 300$ K
Pos. d. Grenzfl.-zustände (unter LB-Kante):	$\epsilon_0 = 0.9$ eV

Tabelle 6.2: Basissatz für die Parameter der Hysteresesimulationen. Die Rekombination zwischen Elektronen und eingefangenen Löchern wird jetzt über das Produkt  $np_{\text{trapped}}$  modelliert. Zur Untersuchung der Hysterese werden einzelne Parameter gezielt verändert. Diese Änderungen werden dann im Text gesondert angegeben.

### 6.2.1 Analyse der Hysterese

Zur Berechnung einer  $Q_{1/2}$ U-Kennlinie (z.B. Abb. 6.7) geht man wie folgt vor. Ausgehend von einer Startspannung (hier: 150 V, Richtung:  $\Delta U > 0$ ) werden so viele Perioden simuliert, bis der periodisch stationäre Zustand erreicht ist. Dabei wird während der Simulation fortwährend die pro Halbperiode übertragende Ladung  $Q_{1/2}$  berechnet. Der stationäre Zustand ist erreicht, wenn sich die Variable  $Q_{1/2}$  innerhalb eines vorgegebenen relativen Fehlers nicht mehr ändert. Wird dieses Stationaritätskriterium erfüllt, so erhöht man leicht die Spannungsamplitude ( $\Delta U = 0.1$  V) und wieder wird solange gerechnet, bis der neue stationäre Zustand für die Amplitude von 150.1 V erreicht ist. Diese Prozedur wird so oft wiederholt, bis die vorgegebene Endspannung (hier 152 V) erreicht ist. Für die Richtung  $\Delta U < 0$  geht man dann analog vor. Ausgehend von der Endspannung wird dann sukzessive die Spannung um  $\Delta U = 0.1$  V reduziert, wobei natürlich immer solange

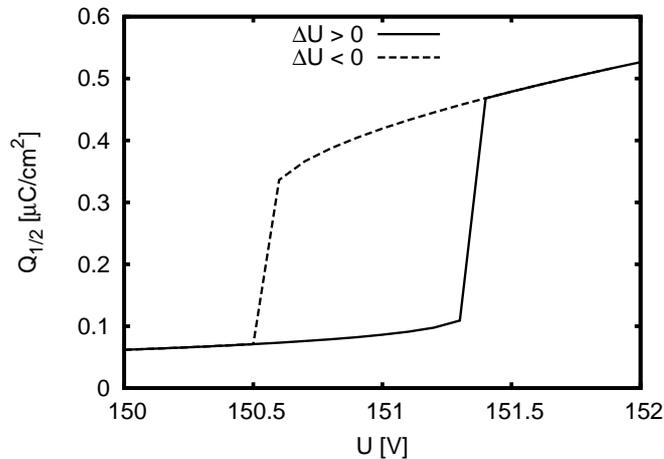


Abbildung 6.7:  $Q_{1/2}U$ -Kennlinie. Sie zeigt zwei unetwige Sprünge bei den Spannungsamplituden 151.3 V (auf den oberen Zweig) und 150.5 V (auf den unteren Zweig). Die beiden annähernd senkrechten Geraden stellen die Ladungssprünge dar. Sie verbinden jeweils zwei Ladungsdichten. Dazwischen wurden keine weiteren Werte berechnet.

gerechnet wird, bis der stationäre Zustand erreicht ist. Damit Computerressourcen gespart werden, kann man jeden Spannungspunkt der Kennlinie für  $\Delta U > 0$  getrennt voneinander berechnen. Für die Richtung  $\Delta U < 0$  funktioniert dies selbstverständlich auch, aber man muss immer die stationäre Lösung des Endpunktes als Anfangsbedingung für eine neue Simulation wählen.

Die  $Q_{1/2}U$ -Kennlinie (Abb. 6.7) soll jetzt genauer untersucht werden. Der gewählte Parametersatz liefert offenbar das gewünschte Ergebnis. Die Kennlinie zeigt ein bistabiles Verhalten (Hysterese). Die Breite der Hysterese beträgt hier ca. 0.8 V. Besonders auffällig ist dabei die Form der Hystereseschleife, die zwei unetwige Sprünge aufweist. Ausgehend von der Startspannung (150 V) ändert sich die pro Halbperiode übertragende Ladung nur sehr wenig. Es zeigt sich dabei ein fast linearer Verlauf für  $Q_{1/2}$ . Dies ändert sich schlagartig bei einer Schwellenspannung von 151.3 V. Bei dieser Spannung wird plötzlich ungefähr fünfmal mehr Ladung durch die Zinksulfidschicht transportiert und die Kennlinie zeigt einen unetwigen Sprung. Bei weiterer Spannungserhöhung zeigt sich dann wieder annähernd ein lineares Verhalten. Wird dann die Spannungsamplitude reduziert, so folgt  $Q_{1/2}$  dem oberen Zweig bis zu einer Spannung von 150.5 V. Dann springt  $Q_{1/2}$  unetwigt wieder auf den unteren Zweig zurück. Dabei sei ausdrücklich erwähnt, dass dieses Schwellenverhalten auch dann in Erscheinung tritt, wenn das Spannungsraster  $\Delta U$  der Simulation stark verfeinert wird. Um diese unetwigen Sprünge zu erklären, müssen die in den Kapiteln 6.1.1 und 6.1.2 diskutierten Transportmechanismen konsequent auf die vorliegende

Kennlinie angewendet werden. Dabei kommt nun der ortsfesten positiven Raumladung eine besondere Bedeutung zu, da mit ihrer Hilfe das elektrische Feld an der momentanen Kathode verstärkt wird. Dies führt dann zu einer verstärkten Tunnelinjektion und somit zu einer Steigerung der übertragenen Ladung. Eine ähnliche Situation muss auch jetzt vorliegen, da sonst die Ladungssprünge nicht erklärt werden können. Dazu betrachten wir wieder die über eine Periode zeitlich gemittelte Dichte der eingefangenen Löcher im stationären Zustand. In der Abbildung 6.8 sind die entsprechenden Raumladungsprofile in Abhängigkeit von der jeweiligen Spannungsamplitude dargestellt. Aus den beiden Abbil-

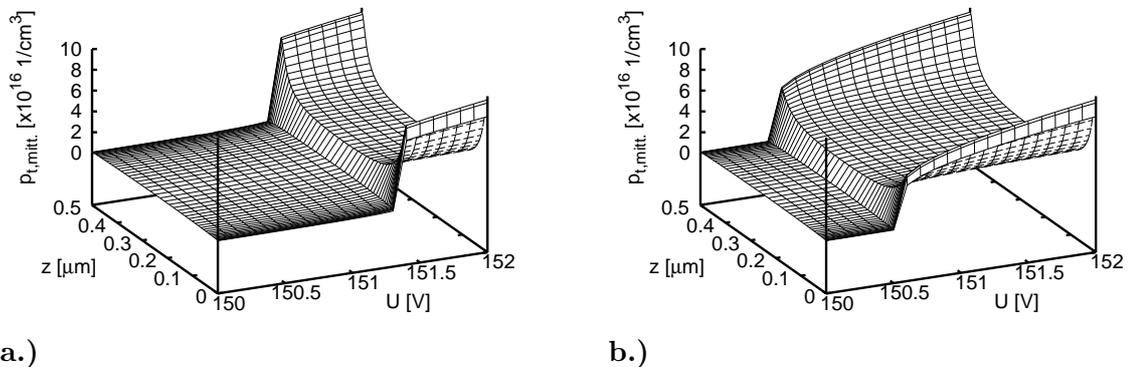


Abbildung 6.8: Zeitlich gemittelte Raumladungsprofile für ansteigende (a.)) und für abfallende (b.)) Spannungsamplituden.

dungen erkennt man den Zusammenhang zwischen der Ausbildung des wannenförmigen Profils und dem unstetigen Sprung in der  $Q_{1/2}U$ -Kennlinie. Die Sprünge in der Kennlinie finden immer genau dann statt, wenn sich ein markantes wannenförmiges Raumladungsprofil entweder auf- oder abbaut. Dabei wird auch hier der unstetige Charakter sehr deutlich. Bei Spannungsamplituden mit kleinen übertragenden Ladungen (unterer Zweig) tritt die Raumladung nur mit sehr geringer Konzentration in Erscheinung, während sich dagegen im Bereich großer Ladungen (oberer Zweig) die Konzentration der eingefangenen Löcher um ein Vielfaches erhöht hat. Nur solange das wannenförmige Profil besteht, kann viel Ladung infolge der Feldverstärkung transferiert werden. Dies ist sehr gut in der Abbildung 6.8b.) zu erkennen. Sobald die Überhöhung in der Nähe der Grenzflächen abgebaut ist, bricht die pro Halbperiode übertragende Ladung  $Q_{1/2}$  zusammen. Damit sind die Sprünge in der Kennlinie stark mit der zeitlichen und räumlichen Dynamik der ortsfesten positiven Raumladung verknüpft. Es tritt also genau die Situation ein, die oben schon vermutet wurde. Nun muss noch geklärt werden, warum die Raumladung auch bei kleineren Spannungen bestehen bleibt und somit für die Hysterese sorgt. Dazu betrachten

wir die Abbildung 6.9.

Analysieren wir zuerst die Situation des unteren Zweiges ( $\Delta U > 0$ , Abbn. 6.9a.) u. 6.9c.). Die Gesamtladung  $Q_{p\text{trapped}}$  (Abb. 6.9a.) der eingefangenen Löcher ist für Spannungen vor der Schwelle von  $U_{\text{Schwelle}} = 151.3 \text{ V}$  relativ klein. Sie wächst zu Beginn der Simulation leicht an und geht dann später im stationären Zustand in die Sättigung über. Dabei müssen, um den stationären Zustand zu erreichen, immer mehr Perioden simuliert werden, je näher die Amplitude der kritischen Spannung  $U_{\text{Schwelle}}$  kommt. Die Situation ändert sich dramatisch für Spannungsamplituden oberhalb von  $U_{\text{Schwelle}}$ . Zu Beginn zeigen die entsprechenden Kurven einen ähnlichen Verlauf wie die Kurven mit  $U < U_{\text{Schwelle}}$ . Dann

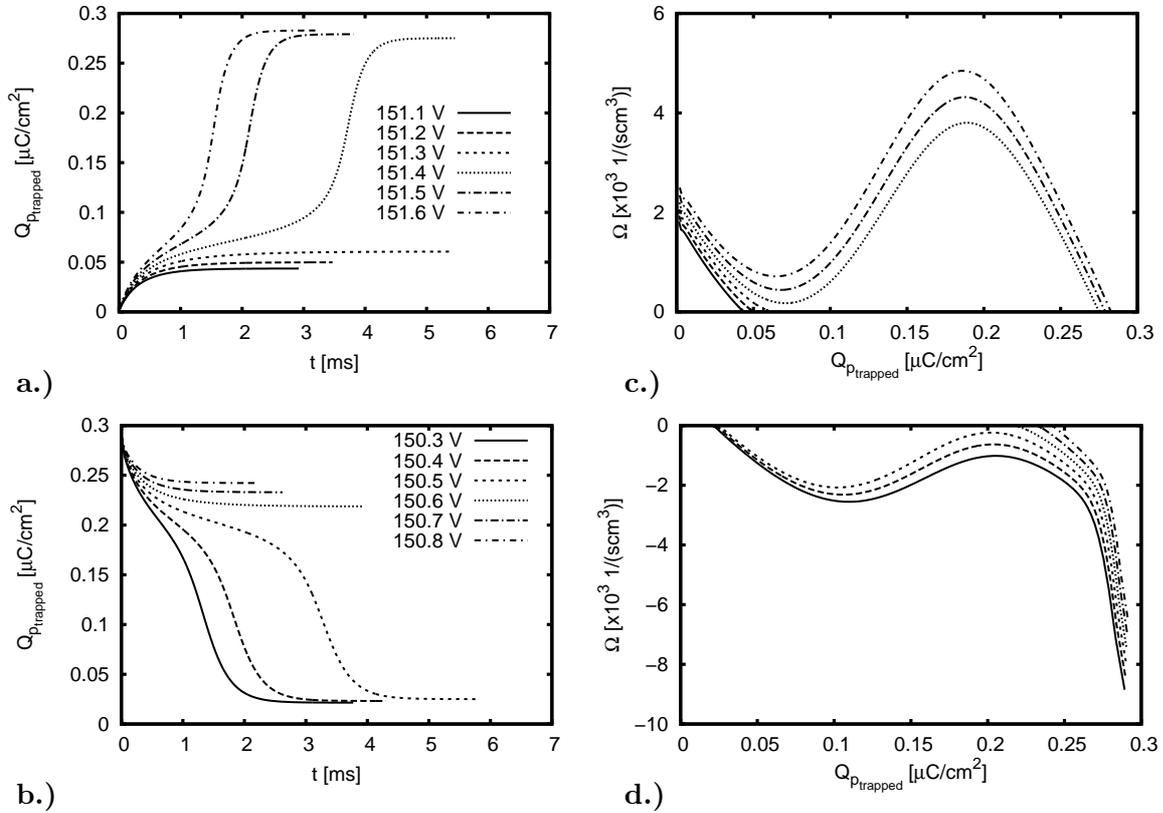


Abbildung 6.9: Die Bilder a.) und b.) geben die zeitliche Dynamik der Gesamtladung  $Q_{p\text{trapped}}$  in Abhängigkeit von der Spannungsamplitude wieder. Die Amplitudenintervalle sind jeweils so gewählt, dass die unstetigen Sprünge aus der Abbildung 6.7 im betrachteten Intervall liegen. Dabei gibt das Bild a.) das Szenario für  $\Delta U > 0$  an, während das Bild b.) den Fall  $\Delta U < 0$  darstellt. Die Bilder c.) und d.) geben die Dynamik der zeitlich und räumlich gemittelten Nettogenerationsrate  $\Omega = T - G_2 - R$  für  $\Delta U > 0$  (c.) und  $\Delta U < 0$  (d.) als Funktion der Gesamtladung der eingefangenen Löcher  $Q_{p\text{trapped}}$  an.

aber zeigt sich ein gänzlich anderer Verlauf. Zwar ist kurz ein Ansatz einer Sättigungsphase zu erkennen, aber diese Phase kann sich nicht durchsetzen und wird von einer Generationsphase abgelöst. Somit steigt die Ladung kontinuierlich an, bis dann später im stationären Zustand die Ladung auf einem viel höheren Niveau zur Sättigung gelangt. Dabei wird jetzt immer weniger Simulationszeit in Anspruch genommen, je weiter wir uns von der Spannung  $U_{\text{Schwelle}}$  wegbewegen.

Die Prozesse des Anwachsens und der Sättigung sind natürlich mit den Raten in der Differentialgleichung für die eingefangenen Löcher (Gl. (4.51)) verbunden. Um den Aufbau der ortsfesten Raumladung bzw. die zeitliche Dynamik von  $Q_{p_{\text{trapped}}}$  besser untersuchen zu können, wird die gemittelte Nettogenerationsrate  $\Omega$  (Abb. 6.9c.) berechnet. An ihrem Verlauf kann man erkennen, welcher Prozess (Generation oder Rekombination) gerade dominierend ist. Für den Fall, dass die Funktion  $\Omega(p_{\text{trapped}})$  eine negative Steigung aufweist, dominiert die Raumladungsvernichtung ( $n$ - $p_{\text{trapped}}$  Rekombination und Löcheremission). Es werden zwar freie Löcher eingefangen, aber der Einfangprozess verläuft uneffektiver, da mit zunehmender Dichte  $p_{\text{trapped}}$  die Rekombinationsraten immer größer werden. Bei einer positiven Steigung überwiegt die Generation infolge des Löchereinfangs. Bei der Betrachtung des obigen Spannungsintervalls ( $U < 151.3$  V) sehen wir, dass  $\Omega$  stetig abnimmt bis der stationäre Zustand erreicht ist. In diesem Zustand nähert sich  $\Omega$  asymptotisch der Null. Das bedeutet, dass die Generationsrate (Löchereinfang) und die Rekombinationsrate (Löcheremission,  $n$ - $p_{\text{trapped}}$ -Rekombination) gleich groß sind. Es werden zwar Löcher erfolgreich eingefangen, aber die Rekombination verhindert eine große Ladungsakkumulation von ortsfesten Löchern. Damit kann sich das wannenförmige Profil nicht aufbauen und die Feldverstärkung bleibt aus. Somit konvergiert das System gegen einen Zustand, der durch eine kleine positive Raumladung und eine niedrige pro Halbperiode transferierte Ladung charakterisiert ist. Dabei verschiebt sich die Konvergenzdichte immer weiter zu größeren Dichten. Bei der Spannung  $U_{\text{Schwelle}} = 151.3$  V ergibt sich, wie oben an Hand der zeitlichen Dynamik von  $Q_{p_{\text{trapped}}}$  besprochen, ein qualitativ anderer Verlauf. Zunächst nimmt, wie im  $U < 151.3$  V Fall, die Nettogenerationsrate  $Q_{p_{\text{trapped}}}$  kontinuierlich ab. Zunächst hat man wieder den Eindruck, als ob die Rekombination ein starkes Anwachsen der positiven Raumladung verhindern kann. Dem ist aber nicht so. Bei einer Ladungsdichte von ca.  $0.07 \mu\text{C}/\text{cm}^2$  ändert die Rate  $Q_{p_{\text{trapped}}}$  ihr Vorzeichen und somit gewinnt der Löchereinfang die Oberhand und lässt die positive Ladung wieder stark anwachsen. Die anschauliche Interpretation hierfür ist wie folgt. Mit fortschreitender Simulationsdauer werden ständig Elektron-Loch-Paare über die feldabhängige Stoßionisation erzeugt. Auch wenn die entsprechende Rate zu Beginn klein ist, wird kontinuierlich ein räumlich symmetrisches Raumladungsprofil aufgebaut. Bis zu einer Simulationsdauer von  $t < 3$  ms (Abb.

6.9a.)) kann die Rekombination ein starkes Anwachsen des Raumladungprofil noch verhindern. Dann aber kann sich die feldverstärkende Wirkung von  $p_{\text{trapped}}$  durchsetzen. Somit steigen aufgrund der exponentiellen Feldabhängigkeit des Stoßionisationskoeffizienten und des Tunnelstroms die Raumladung und damit die transferierte Ladung sprunghaft an. Der steile Anstieg geht dann schließlich auch wieder in die Sättigung über (Abb. 6.9a.)). Das hat zweierlei Gründe (Abb. 6.9c.)). Zum einen wachsen die Rekombinationsraten  $R$  und  $G_2$  linear mit der Dichte  $p_{\text{trapped}}$  und zum anderen nimmt die Einfangrate  $T$  aufgrund ihres Sättigungstermes  $(p_{\text{max}}^t - p_{\text{trapped}})$  ab (vgl. Gln. (4.53), (4.54) und (4.55)). Somit verhindern die Rekombinationsprozesse (negative Steigung in  $Q_{p_{\text{trapped}}}$ ) ein weiteres Ansteigen der ortsfesten positiven Ladung und das System konvergiert gegen einen Zustand mit einer Löcherdichte  $p_{\text{trapped}}$ , die nun viel größer ist, als die für den Fall  $U < 151.3$  V. Nach dem un stetigen Sprung ist ein ähnliches Verhalten wie für  $U < 151.3$  V zu beobachten. Auch hier wird aufgrund der höheren Spannungen und der dadurch bedingten erhöhten Stoßionisation der Gleichgewichtszustand immer weiter zu größeren Dichten  $Q_{p_{\text{trapped}}}$  verschoben. Dabei werden weitere un stetige Sprünge nicht mehr beobachtet.

Abschließend wird der obere Zweig ( $\Delta U < 0$ ) genauer untersucht. Dazu sollen die Abbildungen 6.9b.) und 6.9d.) betrachtet werden. Wird ausgehend vom oberen Zweig die Spannung erniedrigt, so fällt auf, dass die Raumladung nicht sofort zusammenbricht. Vielmehr bleibt ihr Profil über einen gewissen Spannungsbereich erhalten, bevor sie verschwindet und der obere Zweig mit dem unteren zusammenfällt. Die zeitliche Dynamik für die Ladung  $Q_{p_{\text{trapped}}}$  (Abb. 6.9b.)) zeigt einen sehr ähnlichen Verlauf wie die entsprechende Abbildung für  $\Delta U > 0$  (Abb. 6.9a.)). Alle Kurven starten nun nicht bei der Ladung  $Q_{p_{\text{trapped}}} = 0$ , sondern bei der Gleichgewichtsladung  $Q_{p_{\text{trapped}}} \approx 0.275 \mu\text{C}/\text{cm}^2$ , die für  $U = 152$  V für  $\Delta U > 0$  erreicht wurde. Für Spannungen  $U > U_{\text{Schwelle}} = 150.5$  V konvergiert das System recht zügig gegen den stationären Zustand. Dabei rekombiniert ein Teil der feldverstärkenden Raumladung, aber ihr Wannenprofil bleibt erhalten, da die Stoßionisation immer noch ausreichend Löcher zum Einfang bereitstellt, obwohl das Feld nun leicht abnimmt. Je weiter die Spannungsamplitude abgesenkt wird, umso mehr Ladung rekombiniert natürlich. Dies ist deutlich in dem Verhalten der Nettogenerationsrate zu erkennen. Spannend wird es wieder in der Nähe der Schwelle von  $U = 150.5$  V. Zunächst nimmt in diesem Fall  $Q_{p_{\text{trapped}}}$  deutlich ab, was auch der Verlauf von  $\Omega(p_{\text{trapped}})$  zeigt. Bei einer Ladung von  $Q_{p_{\text{trapped}}} \approx 0.2 \mu\text{C}/\text{cm}^2$  ist dann ein besonderer Effekt zu beobachten. Erst scheint es so, als sättige die Ladung  $Q_{p_{\text{trapped}}}$  wieder, da sich die Rate  $T$  infolge Rekombination über den Term  $(p_{\text{max}} - p_{\text{trapped}})$  wieder vergrößert während  $G_2$  weiter reduziert wird. Aber diese Phase ist nur von kurzer Dauer, da die Rekombination diesen Effekt überkompensiert und dadurch insgesamt das System gegen einen Zustand konvergiert, der

durch eine geringe Konzentration von  $p_{\text{trapped}}$  charakterisiert ist.

Aus der obigen Analyse können nun Kriterien abgeleitet werden, die erfüllt sein müssen, damit eine Hysterese in Erscheinung tritt. Die un stetigen Sprünge in der  $Q_{1/2}$ U-Kennlinie sind immer mit dem sprunghaften Aufbau bzw. Abbau eines wannenförmigen positiven Raumladungsprofils verknüpft, dessen Entwicklung mit Hilfe der Nettogenerationsrate  $\Omega$  studiert werden kann. Die Schwellenspannung für den jeweiligen Sprung ist dabei erreicht, wenn im Verlauf von  $\Omega(p_{\text{trapped}})$  sowohl ein lokales Minimum als auch ein lokales Maximum zu erkennen ist.

### 6.2.2 Parameterabhängigkeiten der Hysterese

Der Schlüssel zum Verständnis der Hystereseschleife ist die ortsfeste positive Raumladung. Ihr räumliches Profil bestimmt die Breite der Hysterese. Um dies genauer zu untersuchen, wurden Simulationen mit verschiedenen Parametersätzen, die im Wesentlichen den Aufbau der Raumladung bestimmen, durchgeführt. Die Dynamik der Raumladung wird durch die Raten  $T$ ,  $G_2$  und  $R$  bestimmt. Der Einfluss der Rate  $R$ , die die Rekombination zwischen  $n$  und  $p_{\text{trapped}}$  beschreibt, ist dabei eher gering, da die thermisch aktivierte Löcheremissionsrate aufgrund der energetischen Lage der Löcherfallen größer ist. Auch die Frequenz der angelegten Spannung spielt beim Aufbau des Raumladungsprofils eine wichtige Rolle. Es werden jetzt beispielhaft gezielt drei Parameter, nämlich die Einfangrate  $\gamma$ , die Löcheremissionsrate  $\beta$  und die Treiberfrequenz  $f$ , variiert. An dieser Stelle sei erwähnt, dass die Parametervariation von  $p_{\text{max}}^t$  nicht in dieser Arbeit explizit untersucht wird. Entsprechende Simulationen wurden zwar durchgeführt, zeigten aber im Wesentlichen ähnliche Ergebnisse wie bei der hier untersuchten Änderung des Einfangkoeffizienten  $\gamma$ .

#### 6.2.2.1 Abhängigkeit der Hysterese vom Einfangkoeffizienten $\gamma$

Je größer der Parameter  $\gamma$  eingestellt wird, umso effektiver werden die Löcher eingefangen. Das betrifft natürlich auch die über die Löcheremission wieder freigesetzten Löcher. Die Löcherdrift ist bei einem großen Einfangkoeffizienten stark reduziert. Aus der Abbildung 6.10 ist zu erkennen, dass die komplette  $Q_{1/2}$ U-Kennlinie zu kleineren Spannungsamplituden verschoben wird, falls der Einfang genügend groß ist. Parallel zu dieser Verschiebung nimmt die Breite der Hysterese stark zu. Zusätzlich ist eine starke Variation der Sprunghöhe zu beobachten. Sie steigt umso höher, je effektiver die Löcher eingefangen werden, da dadurch der feldverstärkende Effekt immer stärker wird. Die  $Q_{1/2}$ U-Kennlinie zeigt, dass es offenbar einen minimalen Einfangkoeffizienten gibt, bei der sich die Bistabilität gerade noch aufbaut. Die Form der Kennlinie ist mit dem bisher dargestellten

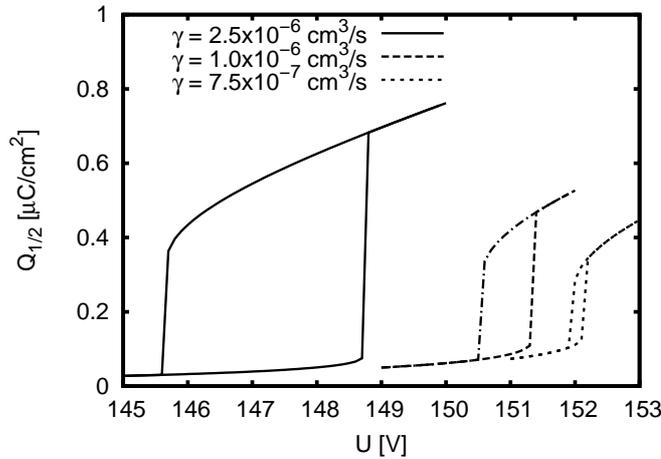


Abbildung 6.10: Hysterese in den  $Q_{1/2}$ - $U$ -Kennlinien infolge verschiedener Einfangkoeffizienten.

Transportmechanismen gut zu erklären.

Dazu betrachten wir die Nettogenerationsrate  $\Omega$  (Abb. 6.11) und die zeitlich gemittelten Raumladungsprofile (Abb. 6.12). Bei einem sehr effektiven Löchereinfang kann sich das wannenförmige Raumladungsprofil (unterer Ast:  $\Delta U > 0$ ) auch schon bei kleineren Spannungsamplituden aufbauen. Durch die kleineren elektrischen Felder werden zunächst relativ wenig Löcher über die Stoßionisation erzeugt, die dann aber sofort eingefangen werden. Somit beginnt der Profilaufbau kontinuierlich, wenn er auch aufgrund des feldabhängigen Stoßionisationskoeffizienten und des geringen Elektronenstroms sehr langsam vorankommt. Genau dieses Verhalten impliziert auch der Verlauf der Nettogenerationsrate (oberer Halbraum ( $\Omega > 0$ )).  $\Omega$  nimmt mit wachsender eingefangener Löcherdichte nur sehr langsam ab, was natürlich am effektiven Einfang liegt. Die Rekombination kann das System nur sehr schwer bei kleinen Raumladungsdichten stabilisieren. Die Raumladungsansammlung erreicht bei einer Ladungsdichte von ca.  $0.07 \mu\text{C}/\text{cm}^2$  eine kritische Dichte. Bei dieser Konzentration setzen die Feldverstärkung und die damit verbundene Stoßionisation ein. Daher durchläuft  $\Omega$  ein Minimum und steigt danach stark an, bis ab ca.  $0.25 \mu\text{C}/\text{cm}^2$  die Rekombination wieder dominiert und somit  $Q_{p\text{trapped}}$  sein Vorzeichen wechselt. Dadurch wird die Nettogenerationsrate wieder ins Gleichgewicht getrieben. Daraus resultiert der Sprung auf den oberen Ast der Kennlinie. Die Sprünge bei reduziertem Einfangkoeffizienten verlaufen natürlich ähnlich, wobei nach dem Durchfahren der Minima deutlich weniger Löcher eingefangen werden, obwohl viel mehr zur Verfügung stehen. Die damit verbundene schwächere Feldverstärkung sorgt dann einen kleineren Ladungstransferanstieg und somit für eine kleinere Sprunghöhe. Diesen Sachverhalt erkennt man in der

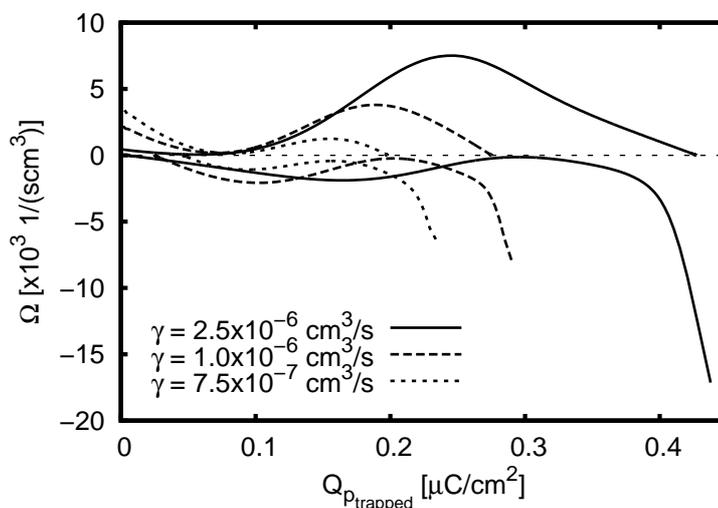


Abbildung 6.11: Zeitlich und räumlich gemittelte Nettogenerationsrate  $\Omega = T - G_2 - R$  in Abhängigkeit von der Ladungsdichte  $Q_{p, \text{trapped}}$ . Dargestellt werden jeweils nur die Spannungsamplituden  $U_{\text{Schwelle}}$ , bei denen das System erstmals auf den oberen ( $\Omega > 0$ ) bzw. unteren Zweig ( $\Omega < 0$ ) springt.

unteren Zeile der Abbildung 6.12. Es zeigt sich, dass sich im Fall von  $\gamma = 2.5 \times 10^{-6} \text{ cm}^3/\text{s}$  ein scharfes Profil mit hoher Konzentration ausbildet. Bei kleineren Werten von  $\gamma$  nimmt die Konzentration ab und der Bereich hoher Konzentration verbreitert sich infolge des effektiveren Löcherdrifts. Zum Abschluss der Diskussion des unteren Zweiges sei noch ein interessantes Detail der Nettogenerationsrate  $\Omega$  erwähnt. Die Lage des Minimums ist in allen drei Kurven fast identisch. Demnach kann dem System eine minimale Konzentration von eingefangenen Löchern zugeschrieben werden, die nötig ist, damit es zum Sprung auf den oberen Zweig ansetzt. Etwaige Abweichungen bezüglich der absoluten Position können durch das noch zu grobe Spannungsraster ( $\Delta U = 0.1 \text{ V}$ ) bei der Kennliniensimulation begründet sein. Die Breite der Hysterese nimmt, wie oben schon erwähnt, stark zu im Fall eines sehr effektiven Einfangs. Der Grund hierfür ist einfach. Die Rekombination kann sich nicht entscheidend gegenüber der Generation durchsetzen (Abb. 6.11), da nur wenige der emittierten Löcher infolge der Drift zur momentanen Kathode kommen und dort mit den Grenzflächenzuständen rekombinieren. Ein Großteil der generierten Löcher bleibt so immer innerhalb der ZnS:Mn-Schicht. Erst wenn die Stoßionisation infolge einer stark reduzierten Spannungsamplitude deutlich schwächer wird, dominiert die Rekombination und das System kann die massiv vorhandene Raumladung abbauen. Somit nimmt die übertragene Ladung wieder stark ab und das System springt wieder auf den unteren Zweig zurück. Der

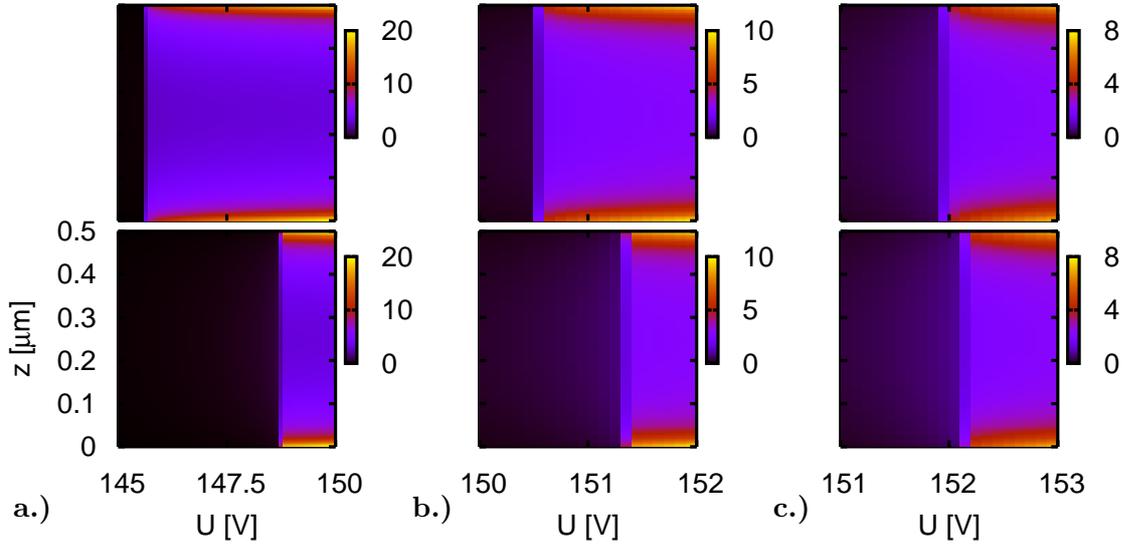


Abbildung 6.12: Zeitlich gemittelte Raumladungsdichten für drei verschiedene Einfangkoeffizienten: a.)  $\gamma = 2.5 \times 10^{-6} \text{ cm}^3/\text{s}$ , b.)  $\gamma = 1.0 \times 10^{-6} \text{ cm}^3/\text{s}$ , c.)  $\gamma = 7.5 \times 10^{-7} \text{ cm}^3/\text{s}$ . Die unteren Bilder repräsentieren den unteren Zweig und die oberen den oberen Zweig der jeweiligen Hystereseschleife. Die angezeigte Dichte hat dabei die Dimension  $[\times 10^{16} \text{ 1/cm}^3]$ .

Abbau der positiven Raumladung ist in der oberen Zeile der Abbildung 6.12 dokumentiert. Man sieht recht deutlich, dass der Bereich hoher Konzentration im Fall von  $\gamma = 2.5 \times 10^{-6} \text{ cm}^3/\text{s}$  über ein langes Spannungsintervall bestehen bleibt, obwohl der Bereich räumlich sehr schmal ist. Im Gegensatz dazu ist das entsprechende Profil für  $\gamma = 7.5 \times 10^{-7} \text{ cm}^3/\text{s}$  sehr schnell abgebaut, da die Löcher über die Oberflächenrekombination abfließen können und nicht ausreichend über die Stoßionisation zum Einfang bereitgestellt werden.

### 6.2.2.2 Abhängigkeit der Hysterese von der Emissionsrate $\beta$

Da die Löcheremission den wirksamsten Rekombinationsprozess für die positive Raumladung darstellt, soll ihr Einfluss auf die Ausbildung der Bistabilität untersucht werden. Die Emissionsrate  $\beta$  ergibt sich aus der energetischen Position der Löcherfallen in der Energielücke des Zinksulfids. In den bisherigen Simulationen wurde sie mit  $5 \times 10^4 \text{ 1/s}$  abgeschätzt. In den folgenden Simulationen wird dieser Wert variiert. Diese Parametervariation ist durchaus sinnvoll, da es mehrere verschiedene Akzeptorniveaus in der Nähe der Valenzbandkante gibt [VLASENKO et al. 2000a, VLASENKO et al. 2000b, NEYTS et al. 1994]. Dabei ist ein sehr interessantes Ergebnis zu beobachten. Wir betrachten dazu die Abbil-

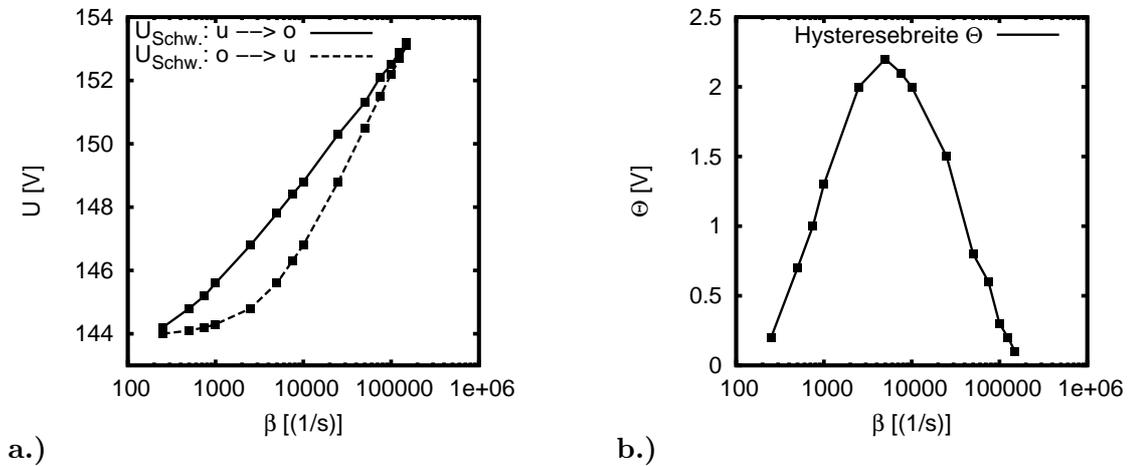


Abbildung 6.13: Hysterese in den  $Q_{1/2}$ U-Kennlinien infolge verschiedener Löcheremissionsraten. Das Bild a.) zeigt die Position der unstetigen Sprünge der Kennlinien. Dargestellt sind nur die „Sprungspannungen“ vom (u)nteren auf den (o)beren bzw. vom (o)beren auf den (u)nteren Zweig. Die jeweilige Breite (b.) der Hysterese ergibt sich aus der Differenz der „Sprungspannungen“.

Abbildung 6.13. Die Graphen a.) und b.) zeigen, dass die Breite  $\Theta$  der Hystereseschleife deutlich von der Emissionsrate abhängt. Für sehr große und sehr kleine Raten verschwindet die Hysterese komplett. Die entsprechenden Kennlinien zeigen zwar noch einen unstetigen Verlauf, aber beim Zurückfahren der Spannungsamplitude fällt das System, sobald es die Schwellenspannung für ( $\Delta U > 0$ ) erreicht hat, wieder auf den unteren Zweig zurück. Es gibt offenbar eine optimale Wahl für  $\beta$ , falls eine maximale Hysteresebreite  $\Theta$  erwünscht ist. Diesen optimalen Wert  $\beta_{\text{opt}}$  kann man der Abbildung b.) entnehmen. Zusätzlich ist ein weiteres Detail gut zu erkennen (Abb. a.). Die einzelnen Hysteresekurven werden nämlich umso weiter zu kleineren Spannungsamplituden hin verschoben, je kleiner die Emissionsrate  $\beta$  ist.

Die Breite der Hysterese sowie deren Verschiebung können mit den bereits diskutierten Transportbild gut erklärt werden. Zunächst ist einleuchtend, dass das System das Raumladungprofil ( $\Delta U > 0$ ) umso schneller und effektiver aufbauen kann, je kleiner die Rate  $\beta$  ( $\beta = 2.5 \times 10^2$ ) ist. Daher reichen schon kleine Spannungsamplituden aus, damit sich das wannenförmige Profil ausbildet. Für die Nettogenerationsrate  $\Omega$  bedeutet dies, dass schon bei kleinen Amplituden die Generation überwiegt. Somit können beide Rekombinationsraten die Konvergenz bei großen Ladungsdichten  $Q_{p_{\text{trapped}}}$  nicht verhindern. Wird dann die Spannung, ausgehend von diesem Zustand, erniedrigt, so wird keine bzw. eine sehr schmale Hysterese beobachtet. Diese Situation tritt ein, weil nur im unmittelbaren Bereich der

Schwellenspannung  $U_{\text{Schwelle}}$  für den Sprung auf den oberen Ast die Feldstärken in Bereiche vorstoßen, in denen eine massive Stoßionisation einsetzt, damit das Raumladungsprofil aufrechterhalten werden kann. Die Raumladung und damit die übertragende Ladung brechen sofort nach dem Unterschreiten der Schwelle komplett zusammen. In diesem Fall wird  $\Omega$  von der Rekombination dominiert und konvergiert für Spannungen  $U < U_{\text{Schwelle}}$  gegen kleine Ladungsdichten.

Kommen wir nun zum Fall einer sehr großen Rate ( $\beta = 15 \times 10^4$ ). In dieser Situation erfordert die Bildung des Raumladungsprofils ( $\Delta U > 0$ ) eine große Konzentration von freien Löchern, da anderenfalls die Löcheremission die Nettogeneration stets dominiert. Eine große Konzentration von freien Löchern kann nur bei ausreichend großer äußerer Spannung erreicht werden. Dies begründet die Verschiebung der Kennlinie zu höheren Spannungen. Obwohl nun sehr viele Löcher zur Verfügung stehen, kommt es bei der Spannungserniedrigung auch nicht zu einer Hysterese, da die Löcheremission sehr effektiv ist. Wird  $U_{\text{Schwelle}}$  unterschritten, kann das Profil nicht aufrechterhalten werden, da zu viele freie Löcher mit den Grenzflächenzuständen rekombinieren. Der Wert  $\beta_{\text{opt}} \approx 5 \times 10^3$  1/s für eine maximale Hystereseschleife garantiert ein optimales Verhältnis zwischen Löchererfang (Generation) und Löcheremission (Rekombination). Der untere Zweig muss dabei mit Hilfe der Löcheremission möglichst lange bei geringen Ladungsdichten  $Q_{p_{\text{trapped}}}$  stabil gehalten werden, so dass beim Zurückfahren der Spannungsamplitude ein größtmögliches Spannungsintervall  $\Delta U_{\text{opt}}$  (mit  $U \in \Delta U_{\text{opt}} < U_{\text{Schwelle}}$ ) vorliegt, indem ausreichend viele über die Stoßionisation erzeugte Löcher zum Einfang bereit stehen. Diese Situation zögert die vollständige Rekombination der ortsfesten Raumladung möglichst lange heraus und sorgt so für eine maximale Breite  $\Theta$ .

### 6.2.2.3 Abhängigkeit der Hysterese von der Frequenz $f$

Die numerischen Simulationen zeigen, dass die Breite der Hysterese stark von der Frequenz der angelegten Spannung abhängt (Abb. 6.14). Dabei nimmt die Breite umso mehr ab, je kleiner die Frequenz ist. Für sehr kleine Frequenzen bricht die Hysterese sogar komplett zusammen.

Die Dynamik der Nettogenerationsrate [MEYER 2003] zeigt, dass für kleinere Frequenzen der untere Zweig der Hysterese ( $\Delta U > 0$ ) auch für größere Dichten von  $p_{\text{trapped}}$  und folglich größeren übertragenden Ladungen stabil gehalten werden kann. Die größere Ladungsdichte ergibt sich dabei aus der Amplitudenform. Infolge der kleineren Frequenzen gibt es nun größere Zeitintervalle mit hohen Spannungen, so dass durch die starke Feldabhängigkeit des Tunnelstroms mehr Elektronen in das Leitungsband injiziert werden. Dadurch steigt die Stoßionisationsrate und somit steht eine größere Konzentration

an freien Löchern zum Einfang zur Verfügung. Daher wächst die Dichte der eingefangenen Löcher  $p_{\text{trapped}}$ , wobei anzumerken ist, dass es keinen linearen Zusammenhang zwischen dem Anstieg von  $p_{\text{trapped}}$  und der Verkleinerung der Frequenz gibt. Dieser Zusammenhang ist nicht gegeben, da die Feldabschirmung infolge der nun schnelleren Änderung der Grenzflächenladungen zu berücksichtigen ist, was wiederum zu einer Reduzierung der Stoßionisationsrate führt. Somit kann nur ein geringer Teil des oben angesprochenen Zeitintervalls hoher Spannung für den Raumladaufbau genutzt werden. Obwohl die Konzentration der positiven Raumladaung in der ZnS:Mn-Schicht anwächst, ist kein Sprung in der übertragenden Ladung zu beobachten. Dies liegt nun wiederum in der feldunabhängigen Löcheremission begründet. Bei kleineren Frequenzen wechseln sich kurze Zeitintervalle mit Tunnelinjektion mit längeren Zeitintervallen ab, in denen nur die Löcheremission wirkt. Sie begrenzt den Anstieg der positiven Raumladaung, so dass der untere Zweig stabil bleibt. Zusammenfassend kann gesagt werden, dass sowohl die Raumladungsgenerationsrate ( $T$ ) als auch die Raumladungsrekombinationsrate ( $G_2$ ,  $R$ ) ansteigen, wobei letztere stärker anwächst. Für  $\Delta U < 0$  und kleine Frequenzen der Spannung fällt die Breite der Hysterese aufgrund des oben diskutierten geänderten Verhältnisses zwischen Raumladungsgeneration und Raumladungsrekombination immer geringer aus.

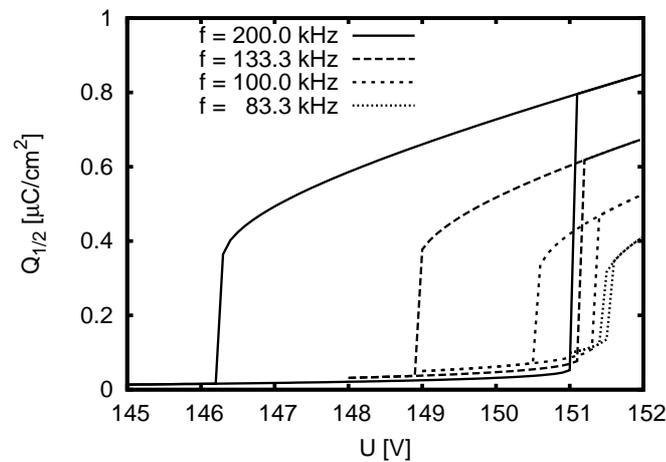


Abbildung 6.14: Frequenzabhängigkeit der Hysterese in einer  $Q_{1/2}U$ -Kennlinie.

## Kapitel 7

# Numerische Ergebnisse für zwei Raumdimensionen

Die bisherigen eindimensionalen Rechnungen reichen natürlich nicht aus, um Strukturbildungsphänomene zu untersuchen. Um dies zu ermöglichen, erweitern wir unsere numerische Simulation um eine laterale Raumrichtung (y-Achse). Die verbleibende dritte Raumdimension (x-Achse) soll weiterhin als homogen angenommen werden. Bevor die Simulationsergebnisse diskutiert werden, muss zunächst geklärt werden, an welcher Variable die eventuell auftretende Strukturbildung besonders gut beobachtet werden kann. In Kapitel 3.4 wurden verschiedene experimentell beobachtete Muster beschrieben. Dabei handelt es sich im Allgemeinen um räumlich lokalisierte Hochstrombereiche, da die Lumineszenzausbeute eng mit dem durch die ZnS:Mn-Schicht fließenden Strom verknüpft ist (Kap. 3.2). Um zu überprüfen ob das hier abgeleitete Transportmodell auch eine spontane Musterbildung zeigt, muss in den Simulationen nach räumlichen Inhomogenitäten im Strom gesucht werden. In den folgenden Untersuchungen wird oft nicht direkt die Stromdynamik betrachtet, sondern stattdessen betrachten wir die Ladungsdynamik der Grenzflächen, da sich ein hoher lokalisierter Strom auch durch eine entsprechende lokalisierte Ladung auf der Grenzfläche zu erkennen gibt. Die zweidimensionalen Simulationsergebnisse mit räumlich homogenen Anfangsbedingungen zeigten jedoch keine räumlich lokalisierten Hochstrombereiche. Die Lösung des Transportmodells blieb lateral komplett homogen. Vielmehr zeigte sich eine exakte Übereinstimmung mit den jeweiligen eindimensionalen Simulationsergebnissen. Die zweidimensionale Rechnung liefert also in der Notation von Abbildung 5.6  $N_y$ -mal das entsprechende 1D Ergebnis. Dies gilt insbesondere auch für eine bistabile  $Q_{1/2}U$ -Kennlinie. Beim numerischen „Durchfahren“ der Hysteresekurve lieferte die 2D Simulation immer wieder das korrespondierende 1D Ergebnis. Selbst in der

Nähe der unstetigen Sprünge in der  $Q_{1/2}$ -Kennlinie, wo im Experiment die Musterbildung auftritt, bleibt das 2D System komplett räumlich homogen. Dieses Ergebnis lässt nur eine Interpretation zu. Offensichtlich werden eventuelle räumliche Inhomogenitäten, wie z.B. Ungenauigkeiten in den iterativen Lösungen der linearen Gleichungssysteme oder Rundungsfehler, vom System sofort gedämpft und somit bleibt der räumlich homogene Zustand stabil.

In einem nächsten Schritt wurden die bisher homogenen Anfangsbedingungen gezielt geändert. Motiviert durch eine komplett ähnliche Lösung wie im 1D Fall und durch die Bistabilität in den jeweiligen Kennlinien, haben wir ein künstliches Startfilament als inhomogene Anfangsbedingung gewählt. Die einzelnen Werte für die Grenzflächenladungen, die Dichten sowie die Spannung richteten sich dabei streng an die jeweilige bistabile Kennlinie. Für die praktische Durchführung unterteilen wir das Bauelement in  $y$ -Richtung in drei Bereiche. Im mittleren Bereich wird die 1D Lösung vom oberen Zweig und in den restlichen Bereichen die Lösung des unteren Zweigs als Anfangsbedingung gesetzt. Selbstverständlich gehören beide eingesetzten Lösungen zur selben Spannungsamplitude, die sich in unmittelbarer Nähe der Schwellenspannung für den Sprung vom unteren auf den oberen Zweig befindet. Diese Art der inhomogenen Anfangsbedingung soll im Folgenden als bistabile Anfangsbedingung bezeichnet werden. Das Ziel dieser besonderen Wahl der Anfangsbedingung ist die genaue Untersuchung der zeitlichen und räumlichen Entwicklung dieser speziellen Anfangsinhomogenität. Dabei stellte sich heraus, dass bei geeigneter Wahl der Simulationsparameter räumlich lokalisierte Stromfilamente stabilisiert werden können.

Um aber trotzdem räumliche Inhomogenitäten aus einem homogenen Anfangszustand beobachten zu können, muss der räumlich homogene Zustand stärker gestört werden, damit er instabil wird. Diese Störung wird oft bei ähnlichen Fragestellungen mit Hilfe eines Rauschterms herbeigeführt. Dabei wird folgendes Ziel verfolgt. Der künstliche Rauschterm mit sehr kleiner Amplitude soll dafür sorgen, dass das hier betrachtete System in der Nähe der Schwellenspannung lokal instabil wird und sich so auch in diesem Fall Stromfilamente ausbilden können. Die physikalische Motivation des Rauschterms ist relativ einfach. In den bisherigen Simulationen ging man immer infolge der homogenen Anfangsbedingungen von einem „perfekten“ Bauelement aus. Diese Situation liegt natürlich bei einem realen Experiment nicht vor. Schon beim Herstellungsprozess der polykristallinen Schichten kann diese räumliche Homogenität nicht vollständig gewährleistet werden. Dies betrifft neben den einzelnen Schichtdicken im besonderen Maße die energetische Lage der Grenzflächenzustände (Variable  $\epsilon_0$  in Gl. (4.60)) an der Halbleiter-Isolator-Grenzschicht, die in der zweidimensionalen Simulation logischerweise ortsabhängig ( $y$ -Richtung) wird. Ihre Position unterhalb

Spannung:	Wechselspannung: $f = 100$ kHz
Bauteilabmessungen:	Isolatoren: $0.3 \times 2 \mu\text{m}^2$ ZnS:Mn: $0.5 \times 2 \mu\text{m}^2$
Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit:	$s_n = 10 \times 10^6$ cm/s $s_p = 10 \times 10^6$ cm/s
Einfangkoeffizient:	$\gamma = 1 \times 10^{-6}$ cm <sup>3</sup> /s
Rekombinationswirkungsquerschnitt:	$\sigma = 1 \times 10^{-14}$ cm <sup>2</sup>
Grenzflächenzustandsdichte:	$n_{\text{ss}} = 5 \times 10^{13}$ cm <sup>-2</sup> eV <sup>-1</sup>
Löcherfallendichte:	$p_{\text{max}}^t = 1 \times 10^{18}$ 1/cm <sup>3</sup>
Löcheremissionsrate:	$\beta = 5 \times 10^4$ 1/s
Dielektrizitätskonstanten:	Isolator: $\epsilon_{\text{is}} = 14$ ZnS:Mn: $\epsilon_{\text{s}} = 8$
Mobilitätskonstanten:	$\mu_{n,z,y} = 165$ cm <sup>2</sup> /Vs $\mu_{p,z,y} = 5$ cm <sup>2</sup> /Vs
Teilchentemperaturen:	$T_{n,z,y} = 300$ K $T_{p,z,y} = 300$ K
Pos. d. Grenzfl.-zustände (unter LB-Kante):	$\epsilon_0 = 0.9$ eV

Tabelle 7.1: Basissatz für die Parameter der 2D Simulationen. Änderungen der Parameter für die Untersuchung spezieller Effekte werden dann im nachfolgenden Text gesondert angegeben.

der Leitungsbandkante ist gewissen statistischen Fluktuationen ausgesetzt. Die Lage ist für die Ladungsträgerdynamik sehr wichtig, da sie die Breite der Tunnelbarriere und somit die Anzahl der in das Leitungsband injizierten Elektronen bestimmt. Um diesen Effekt auch in der numerischen Simulation zu erhalten, wird zu der Variablen  $\epsilon_0(y)$  ein Rauschterm zugefügt. Dabei kommen zwei unterschiedliche Methoden zum Einsatz. Die erste Methode besteht darin, der Energie  $\epsilon_0(y)$  ein statisches gaußverteiltes Rauschen mit sehr kleiner Amplitude hinzuzufügen. Den Grenzflächen wird also zu Beginn der Simulation dauerhaft eine verrauschte Verteilung für  $\epsilon_0(y)$  fest zugewiesen. In der zweiten Methode wird dagegen zusätzlich in jedem Zeitschritt der Simulation der Rauschterm für  $\epsilon_0(y)$  neu bestimmt. Es stellt sich heraus, dass beide Methoden lokalisierte Stromfilamente liefern, die sehr ähnlich zu denen sind, die man mit Hilfe der bistabilen Anfangsbedingung stabilisieren kann.

In diesem Kapitel sollen nun die zuvor erwähnten Stromfilamente vorgestellt werden. Insbesondere wird der Frage nachgegangen, welche Prozesse für die Stabilisierung verantwortlich sind. Zusätzlich werden Simulationsergebnisse gezeigt, bei denen die laterale

Bauteillänge stark vergrößert ist. Dabei zünden mehrere Stromfilamente und man kann so die Wechselwirkung zwischen den einzelnen Filamenten studieren. Folgende Parameter werden für die Simulationen verwendet (Tab. 7). Sie sind bis auf die Größenangaben des Bauteils identisch zu denen, die in der Tabelle 6.2 gezeigt werden. Dabei wird vereinbart, dass die Mobilitätskonstanten der Ladungsträger sowie die Ladungsträgertemperaturen in beiden Raumrichtungen gleich sind.

## 7.1 Filamentstabilisation

### 7.1.1 Filament durch bistabile Anfangsbedingung

Zuerst soll die räumliche und zeitliche Entwicklung einer inhomogenen Anfangsbedingung untersucht werden. Dazu wird, wie im Kapitel 7 beschrieben, eine bistabile Anfangsbedingung vorgegeben. Die Simulationsspannung richtet sich dabei an die  $Q_{1/2}U$ -Kennlinie (Abb. 7.1b), die mit der Kennlinie (Abb. 6.7) prinzipiell identisch ist. Das interessanteste Ergebnis der Simulation ist in der Abbildung 7.1a.) dargestellt. Sie zeigt den räumlichen Verlauf der beiden Grenzflächenladungen zum Ende einer Periode im periodisch stationären Zustand. Zum besseren Vergleich ist zusätzlich die Anfangsbedingung aufgetragen worden. Die anfängliche Inhomogenität wird offenbar nicht komplett abgebaut, sondern es bildet sich an der momentanen Anode eine zapfenförmige Struktur heraus. Die Strukturierung der Ladungsdichte auf der momentanen Kathode fällt dagegen auf den ersten Blick deutlich geringer aus. Dem ist aber nicht so. Die Form ist, wie wir später sehen werden, vielmehr das Resultat des lokalisierten inhomogenen Tunnelstroms aus dieser Grenzfläche, der im Filamentzentrum deutlich größer ist als in den übrigen Raumbereichen. Interessant ist die Form des Filaments auf den Grenzflächen. Auf der momentanen Anode liegt die Spitze des Zapfens, also das Filamentzentrum  $y = 1 \mu\text{m}$ , deutlich tiefer als die dazugehörige Anfangsbedingung. Zusätzlich treten zwei Maxima auf den abfallenden Flanken (Positionen  $y = 0.75 \mu\text{m}$  und  $y = 1.25 \mu\text{m}$ ) des Filaments auf, die deutlich oberhalb der Anfangsbedingung liegen. Diese Maxima klingen dann langsam ab und erreichen dann bei  $y = 0 \mu\text{m}$  bzw.  $y = 2 \mu\text{m}$  asymptotisch wieder die Werte für die Anfangsbedingung. Eine andere Situation ergibt sich für die momentane Kathode. Die Form der Inhomogenität unterscheidet sich deutlich von der vorhin besprochenen Gestalt. Bei  $y = 1 \mu\text{m}$  zeigt die Ladungsverteilung ein Maximum, das von zwei Nebenmaxima, deren Positionen mit dem Maxima der Ladungsverteilung an der momentanen Anode zusammenfallen, umgeben ist. Insgesamt ist das Maximum an der Kathode sehr viel schwächer ausgeprägt als das korrespondierende Minimum an der Anode. Der gesamte strukturierte Bereich liegt mit seinen Ladungsdichten eher auf dem Niveau der asymptotischen Ausläufer und damit deutlich

unter den Ladungsdichten für die Anfangsbedingung.

Bevor der Verlauf der Grenzflächenladungen noch detaillierter diskutiert wird, betrachten wir zunächst die Entwicklung von  $\rho$  an den Zeitpunkten  $n/f$  ( $n$  Anzahl der simulierten Perioden) und die zeitlich gemittelte Dichte  $\rho_{\text{trapped}}$  im periodisch stationären Zustand (Abb. 7.2). Die inhomogene Anfangsbedingung verändert sich zu Beginn der Simulation sehr stark. Nach etwa 4 ms hat das System seinen stationären Zustand erreicht. Die Strukturierung an beiden Grenzflächen ist dann abgeschlossen und ändert sich, bezogen auf einen festen Zeitpunkt innerhalb einer Periode, dann im weiteren Verlauf der Simulation nicht mehr. Besonders gut kann man die wellenförmige Struktur und die asymptotischen Ausläufer in der Abbildung für die momentane Kathode (Abb. a.) erkennen, da die Ladungsdichten nicht so stark variieren wie an der Anode und so die Konturen besser zu erkennen sind. Die vorhandenen asymptotischen Ausläufer auf der Anode sind aus diesem Grund weniger gut zu beobachten. Der eigentliche Grund für die Ausbildung eines Stromfilaments liegt natürlich in dem Vorhandensein einer ortsfesten positiven Raumladung (Abb. 7.2b.)). Wie schon oft erläutert, hat sie eine feldverstärkende Wirkung und kann somit eine höhere Tunnelinjektion und eventuell eine starke Stoßionisation auslösen. Im stationären Zustand ist das auch hier so. So sind die scharfen Kanten im Anfangsprofil der positiven

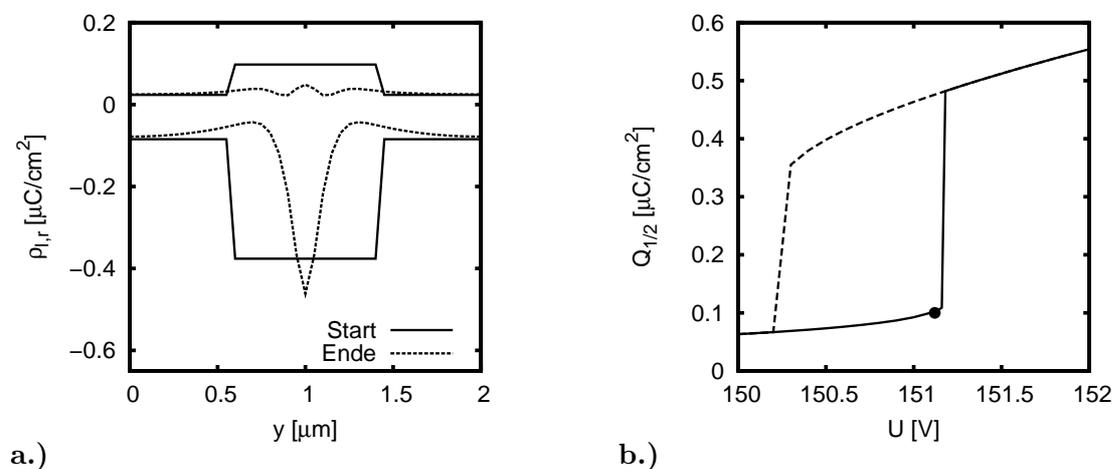


Abbildung 7.1: a.) Strukturierte Grenzflächenladungsdichten infolge eines Stromfilaments in der ZnS:Mn-Schicht. Die beiden oberen Kurven geben dabei die Ladungsdichten auf der momentanen Kathode wieder. Die entsprechenden Dichten auf der momentanen Anode ergeben sich aus dem Verlauf der unteren beiden Kurven. Dargestellt ist ein Vergleich zwischen der inhomogenen Anfangsbedingung und der Lösung im periodisch stationären Zustand. b.) Korrespondierende  $Q_{1/2}U$ -Kennlinie mit eingezeichneter Simulationsspannung kurz vor der Schwelle ( $U = 151.14$  V).

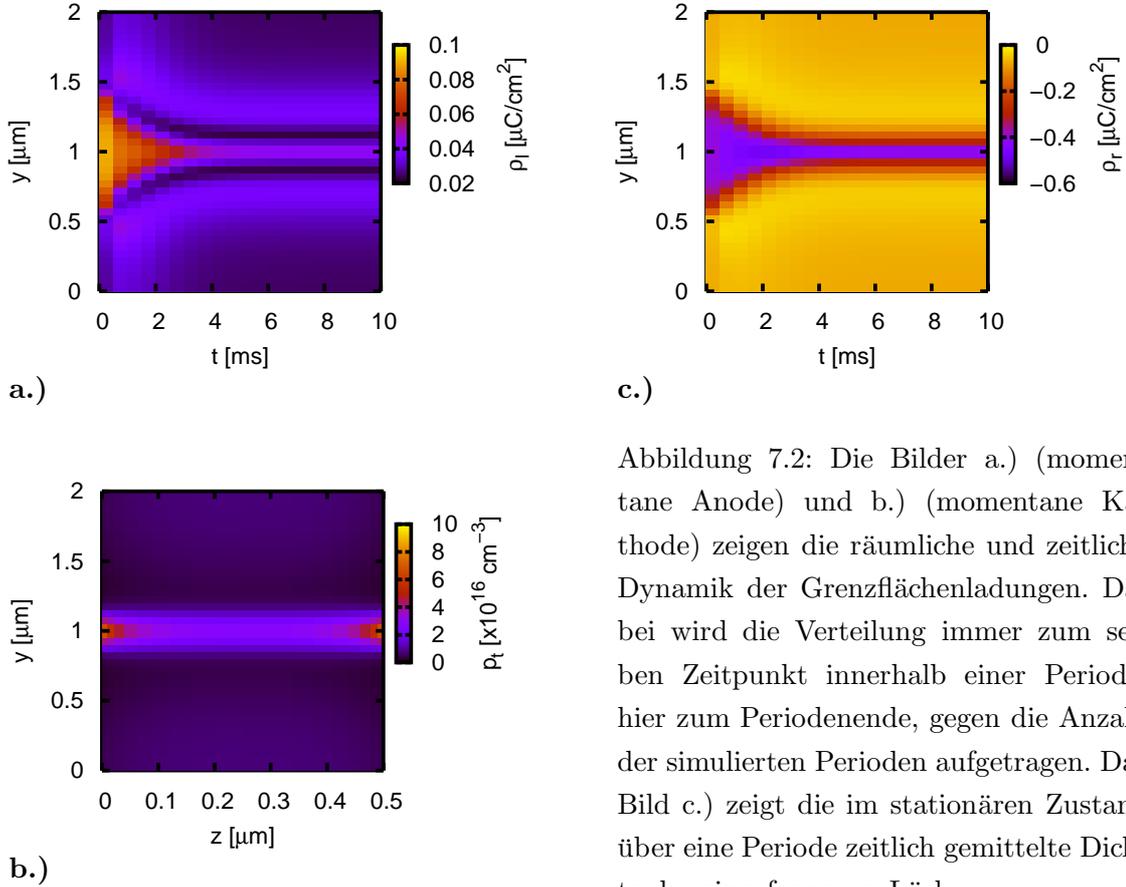


Abbildung 7.2: Die Bilder a.) (momentane Anode) und b.) (momentane Kathode) zeigen die räumliche und zeitliche Dynamik der Grenzflächenladungen. Dabei wird die Verteilung immer zum selben Zeitpunkt innerhalb einer Periode, hier zum Periodenende, gegen die Anzahl der simulierten Perioden aufgetragen. Das Bild c.) zeigt die im stationären Zustand über eine Periode zeitlich gemittelte Dichte der eingefangenen Löcher.

Raumladung geglättet und es bildet sich wie im 1D Fall ein wannenförmiges Profil aus, dessen Scheitel entlang der  $z$ -Richtung bei  $y = 0$ , also im Filamentzentrum, verläuft. Dabei ist die von der Anfangsbedingung vorgegebene Raumladungsbreite deutlich reduziert.

Um sich endgültig davon zu überzeugen, dass auch wirklich ein räumlich lokalisierter Hochstrombereich für die Ladungsfilamente auf den Grenzflächen verantwortlich ist betrachten wir die Abbildung 7.3. Dort wird die räumliche und zeitliche Dynamik des Fermi-Niveaus und des Tunnelstroms im periodisch stationären Zustand dargestellt. Dass hier nicht direkt  $\rho_{n_l, n_l + n_m}$  sondern des Fermi-Niveau  $F = \epsilon_0 + \frac{\rho_{n_l, n_l + n_m}}{q n_{ss}}$  gezeigt wird, hat einen besonderen Grund, der später im Zusammenhang mit dem Rauschterm klarer wird. Die Diskussion beginnt mit dem Bild 7.3a.), das die Situation unmittelbar nach dem Beginn einer neuen Halbwelle der angelegten Spannung darstellt. Zu sehen sind die beiden Fermi-Niveaus der Grenzflächenzustände, die sich durch den bisherigen Transport strukturiert haben. Die beiden Kurven haben ihr Maximum bzw. Minimum im Filamentzentrum, weil

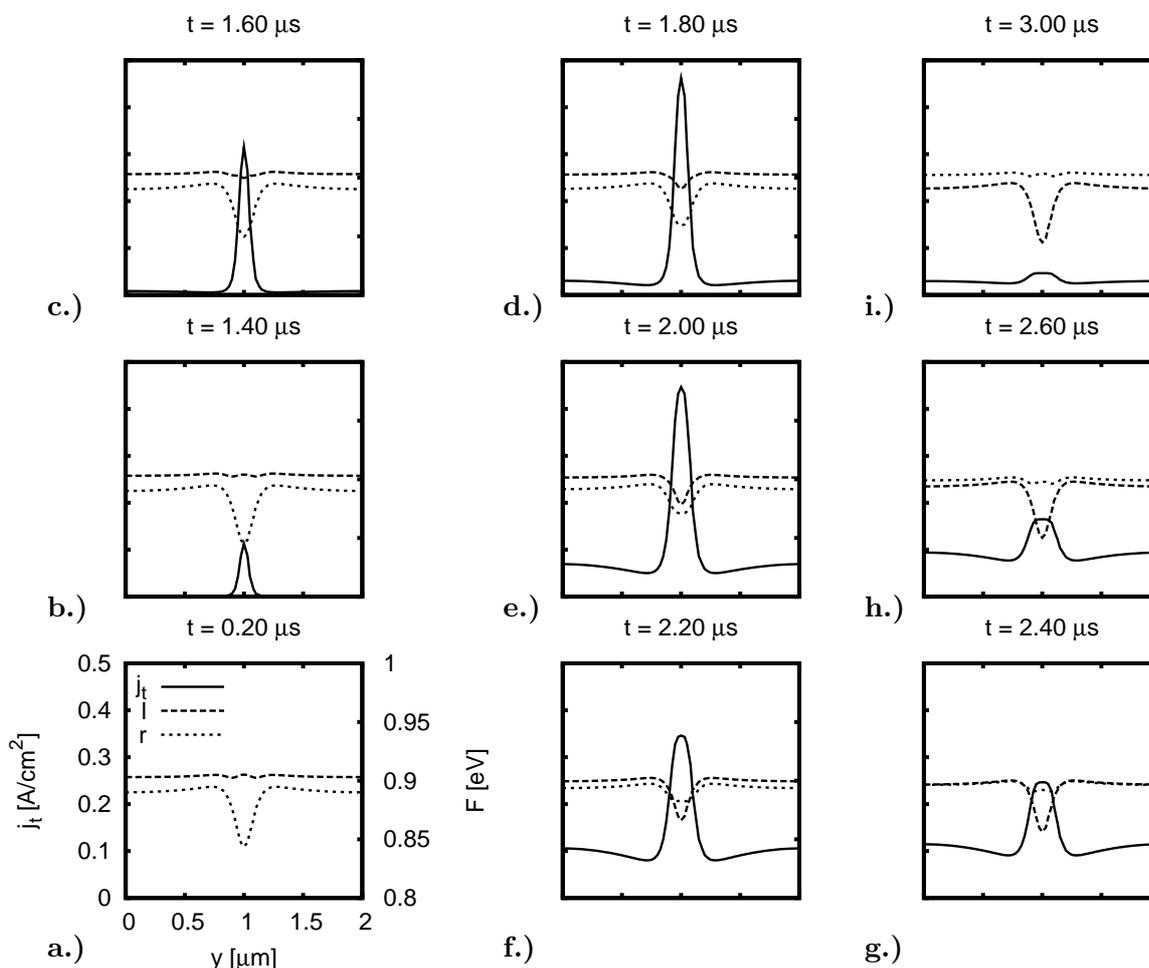


Abbildung 7.3: Räumliche und zeitliche Dynamik der Tunnelinjektion und des Fermi-Niveaus  $F = \varepsilon_0 + \frac{\rho_{n_l, n_l+n_m}}{qn_{ss}}$  (vgl. Gl.(4.60)) während einer halben Periode im stationären Zustand. Die Positionen  $n_l$  und  $n_l+n_m$  (vgl. Abb. 5.3) werden hier mit (l)inks bzw.(r)echts abgekürzt. Dabei ist zu beachten, dass der energetische Abstand von der Leitungsbandkante zum Fermi-Niveau positiv gezählt wird.

dort der größte Strom fließt. Für den kommenden Spannungspuls übernimmt die rechte Grenzfläche die Rolle der momentanen Kathode, was zum einen an dem hier nicht explizit gezeigten Feldverlauf und zum anderen an dem höher zur Leitungsbandkante liegenden Fermi-Niveau der Elektronenzustände zu erkennen ist. Diese Verteilung ist im Wesentlichen das Resultat der Oberflächenrekombination innerhalb der vorherigen Halbwelle. Die linke Grenzfläche ist folglich die momentane Anode, deren Verteilung nur schwach inhomogen ist. Die Spannungsamplitude steigt stetig an bis das Feld an der Kathode in

Bereiche vorstößt, in denen Elektronen aus den lokalisierten Zuständen heraustunneln können. Sobald ein Strom in Richtung der Anode zu fließen beginnt, ändern sich infolge des Ladungstransports die Fermi-Niveaus. Während das Niveau an der Anode durch Oberflächenrekombination ansteigt ( $\Delta F < 0$ ), fällt ( $\Delta F > 0$ ) das Niveau an der Kathode aufgrund der Entleerung der Grenzflächenzustände ab. Durch die Feldverstärkung der positiven Raumladung ist die Änderung des Fermi-Niveaus zuerst im Bereich des Scheitels bei  $y = 1 \mu\text{m}$  möglich (Abb. 7.3b.). Mit laufender Simulationszeit dehnt sich dieser Bereich lateral aus, wobei zusätzlich die Stärke des Tunnelstroms insgesamt zunimmt (Abbn. 7.3c.-d.). Zur Zeit  $t = 1.80 \mu\text{s}$  hat  $j_{\text{tunnel}}$  im Bereich von  $y = 1 \mu\text{m}$  sein Maximum erreicht (Abb. 7.3d.). Der Tunnelstrom wird für  $t > 1.80 \mu\text{s}$  nur im Scheitelbereich des Raumladungsprofils reduziert, da dort die Abschirmung über die Grenzflächenladungen keine stärkere Tunnelinjektion mehr zulässt. Parallel dazu nimmt  $j_{\text{tunnel}}$  im restlichen Raumbereich zu, da dort die eben genannte Abschirmung noch nicht effektiv genug wirkt (Abbn. 7.3e.-g.). Diese Zunahme erfolgt interessanterweise aber nicht räumlich homogen. So zeichnen sich deutlich zwei Nebenminima an den Positionen  $y = 0.75 \mu\text{m}$  und  $y = 1.25 \mu\text{m}$  ab, die nicht unmittelbar mit der räumlichen Begrenzung der positiven Raumladung zusammenfallen (vgl. Abb. 7.2c)). Diese Stromminima sind auf die geringe Anzahl von verfügbaren Elektronen an den oben genannten Positionen auf der momentanen Kathode zurückzuführen. So wird an diesen beiden Orten die geringste Ladungsmenge in das Leitungsband injiziert. Für  $t > 2.20 \mu\text{s}$  wirkt auch hier die Grenzflächenabschirmung und der Tunnelstrom nimmt dann zügig ab (Abbn. 7.3h.-i.), wobei sich ein sehr schmales Plateau um das Filamentzentrum bildet. Die Nebenminima an der momentanen Kathode resultieren aus diesem Tunnelstromplateau, das sich in den Bildern 7.3g.-i.) im Bereich des Filamentzentrum deutlich macht. Dadurch fließt zum Ende der Stromflussphase in einem sehr schmalen Bereich um das Zentrum ein fast räumlich homogener Tunnelstrom, während dieser außerhalb dieser Zone stark abfällt.

Insgesamt haben wir mit Hilfe der obigen Diskussion der Tunnelstrom- und Oberflächenrekombinationsdynamik eine Erklärung für die Form der Strukturierung der Grenzflächenladungen im stationären Zustand gefunden. Als nächstes muss die Stabilität des Stromfilaments untersucht werden. Dabei ist der Frage nachzugehen, warum sich diese speziellen Ladungsstrukturen auf den beiden Grenzflächen ausbilden. Die Vermutung liegt nahe, dass die Tunnelstromminima wesentlich zur Stabilisierung des gesamten Filamentes beitragen. Dadurch wird in der unmittelbaren Nähe des Filamentes ein hoher Strom unterdrückt. Somit wird die Stoßionisation und damit der Aufbau der positiven Raumladung entscheidend verhindert.

Abschließend sind noch einige weitere wichtige Bemerkungen zu machen. Selbst-

verständlich wurden Simulationen mit unterschiedlichen Inhomogenitätsbreiten  $l_{y_{inhom}}$ , bezogen auf die Lösung des oberen Zweigs, durchgeführt. Die Breiten der Lösung des oberen Zweiges lagen dabei im Intervall  $0.1 \leq l_{y_{inhom}} \leq 1.9 \mu\text{m}$ , so dass in den beiden Extremsituationen ( $l_{y_{inhom}} = 0.1, 1.9 \mu\text{m}$ ) nur sehr wenige Rasterpunkte mit Werten der Lösung des unteren Zweigs besetzt waren. Die Simulationen konvergierten stets gegen den gleichen hier diskutierten stationären Zustand. Dabei nimmt die Anzahl der dazu nötigen Simulationsperioden umso mehr zu, je größer  $l_{y_{inhom}}$  gewählt wird. Die entsprechenden Abbildungen für die Transportgrößen sind alle vollkommen identisch mit dem hier vorliegenden Ergebnis. Außerdem wurde die Amplitude der angelegten Spannung geändert. Dadurch ändert sich, wie oben geschildert, die inhomogene Anfangsbedingung. Dabei zeigte das Stromfilament ein sehr starkes Schwellenverhalten. Das Filament kann sich nur ausbilden, falls die gewählte Spannung der Schwellenspannung relativ nahe kommt (Punkt in Abb. 7.1b.)), bei der die Kennlinie vom unteren auf den oberen Zweig der Hysterese springt. Die Form des Filamentes ist immer gleich, wobei die absoluten Werte der Ladungsdichten auf den beiden Grenzflächen infolge der reduzierten pro Halbperiode übertragenen Ladung umso kleiner werden, je kleiner die Spannungsamplitude gewählt wird.

### 7.1.2 Stabilisierungsmechanismus

Für eine detaillierte Analyse der Filamentstabilisierung sollen nun zusätzlich neben den Grenzflächenladungen bzw. Fermi-niveaus (Abb. 7.3) die elektrischen Feldkomponenten (Abb. 7.4) an beiden Grenzflächen sowie die Elektronendichte und die  $y$ -Komponente des Elektronenstroms (Abb. 7.5) an der momentanen Anode betrachtet werden. Dabei sei darauf hingewiesen, dass in allen drei Bildsequenzen (Abbn. 7.3, 7.4 u. 7.5) immer die gleichen Zeitpunkte innerhalb einer halben Spannungsperiode im periodisch stationären Zustand dargestellt werden.

Zuerst diskutieren wir die beiden Komponenten des elektrischen Feldes an den beiden Grenzflächen. Unmittelbar nach Beginn der Halbwelle sind die longitudinalen Feldkomponenten an der Kathode und der Anode sehr klein. Deshalb fließt noch kein Tunnelstrom (Abbn. 7.4a.) u. 7.3a.)). Dabei ist der feldverstärkende Einfluss der ortsfesten positiven Raumladung am inhomogenen Feldverlauf deutlich zu erkennen. Während die longitudinale Feldkomponente an der Kathode verstärkt wird, wird die longitudinale Feldkomponente an der gegenüberliegenden Anode abgeschirmt. Die positive Raumladung und beide Grenzflächenladungen beeinflussen aber ebenfalls die lateralen Feldkomponenten. So sind an der momentanen Kathode unmittelbar vor dem Beginn einer nennenswerten Tunnelemission die lateralen Feldkomponenten zum Filamentzentrum gerichtet. Dafür ist die große negative Grenzflächenladungsdichte verantwortlich, die sich dort infolge der vorherigen

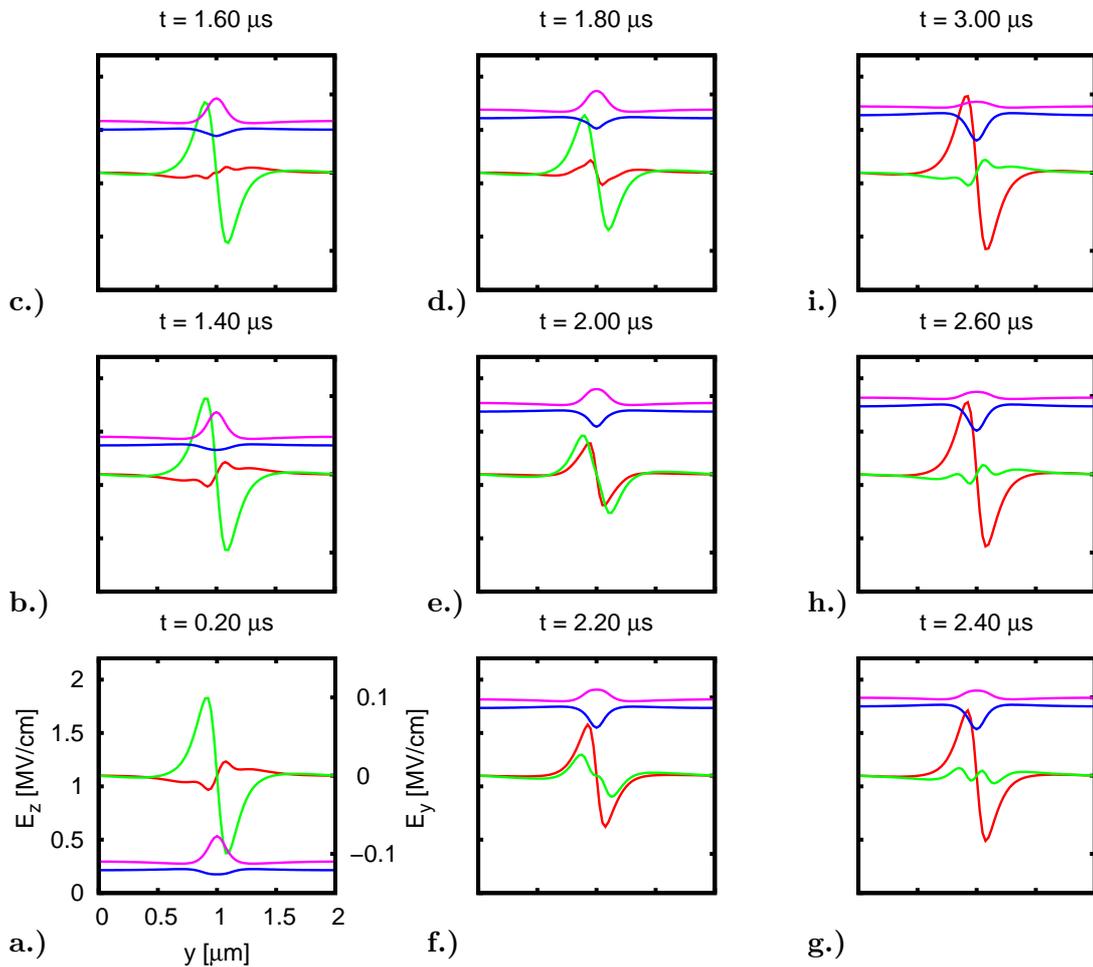


Abbildung 7.4: Räumliche und zeitliche Darstellung der elektrischen Feldkomponenten an der (K)athode und (A)node. Zuordnung der Farben:  $E_{A,x}$ : blau,  $E_{A,y}$ : rot,  $E_{K,x}$ : violett,  $E_{K,y}$ : grün. Die Zeitpunkte der Auswertung sind identisch zu denen in Abbildung 7.3.

Halbwelle akkumuliert hat. An der momentanen Anode ist genau die gegenteilige Situation anzutreffen. Dort dominieren die positiven Raumladungsdichten (Grenzflächenladung und Raumladung) und sorgen dafür, dass die entsprechenden Feldkomponenten nach außen, also vom Filamentzentrum weg, zeigen. Mit zunehmender Simulationszeit nehmen die longitudinalen Feldkomponenten infolge des Spannungsanstiegs zu und es beginnt ein Strom im Bereich des Scheitels des Raumladungsprofils in Richtung der Anode zu fließen (Abbn. 7.4b.)-c.) u. 7.3b.)-c.). Infolge des Stromes ändern sich natürlich auch die lateralen Felder, da sich die Grenzflächenladungen neu anordnen. Durch den Elektroneneinfang an der Anode wird die dort vorhandene positive Ladung langsam abgebaut, so dass die

y-Feldkomponenten an der Anode langsam abnehmen. Dies gilt natürlich auch für die Kathode, da durch den Tunnelstrom die negative Ladung auf der Grenzfläche abgebaut wird (Abb. 7.3c.)). Zur Zeit der maximalen Tunnelinjektion ( $t = 1.80 \mu\text{s}$ ) hat sich die Orientierung der lateralen Feldkomponenten an der Anode geändert. Durch den Elektroneneinfang an der Grenzfläche wird die dortige positive Ladung überkompensiert, so dass die sich aufbauende negative Ladung eine Richtungsumkehrung der lateralen Feldkomponenten bewirkt. Die Stärke der y-Komponenten nimmt dann mit zunehmender Zeit stetig zu (Abb. 7.4e.)-i.)). An der Kathode ändern sich die y-Komponenten aufgrund der großen negativen Ladungsdichte noch nicht so früh. Die Feldumkehrung ist dort erst zum Ende der Stromflussphase zu beobachten (Abbn. 7.4 u. 7.3 Bilder g.) u. h.)). Nach Abschluss der Halbwelle haben sich also die Feldverhältnisse gerade umgekehrt. Für die transversalen Felder im mittleren Bereich des Bauelements ergibt sich während der Halbwelle folgende Situation. Aufgrund der deutlich ausgeprägten positiven Raumladung zeigen die transversalen Feldkomponenten dort stets in die Richtung des Bauteilrands.

Die Orientierung der y-Feldkomponenten hat natürlich große Auswirkungen auf den Ladungsträgertransport und somit auf die Form und Stabilität der Stromfilamente im stationären Zustand. Mit ihrer Hilfe können die Ladungsträger in die Richtung des Filamentzentrums entweder fokussiert oder defokussiert werden, was wesentlich zur Stabilisierung des Filamentes beiträgt.

Dabei wird im Folgenden zuerst die Elektronendynamik an der momentanen Anode betrachtet (Abb. 7.5), da sich dort aufgrund des starken elektrischen Feldes die meisten Elektronen ansammeln. Sobald Elektronen im Bereich der starken positiven Raumladung in die Zinksulfidschicht injiziert werden, werden sie zunächst aufgrund der Feldverteilung an der momentanen Kathode in diesem Ortsbereich defokussiert. Wenn die zuvor emittierten Elektronen dann den mittleren Bereich der ZnS:Mn-Schicht erreichen, setzt eine Elektronenfokussierung in die Richtung des Ladungsscheitels der positiven Raumladung ein. Diese Fokussierung setzt sich unmittelbar nach Beginn der Halbwelle auch direkt an der momentanen Anode fort (Abbn. 7.5b.)-c.) u. 7.4b.)-c.)). In diesem Zeitintervall überwiegt die Drift die Diffusion. Diese Fokussierung ist dort nicht so gross, weil sich die lateralen Feldkomponenten aufgrund der geringen positiven Grenzflächenladung auf der momentanen Anode schnell umkehren und weil zusätzlich die Elektronendichten im Bereich der Anode aufgrund des noch kleinen Tunnelstroms gering sind. Um aber trotzdem die Fokussierung zu zeigen, wurde die y-Komponente des Stromes in den Bildern b.) und c.) der Abbildung 7.5 mit einem Faktor multipliziert. Wie oben erwähnt, setzt der Tunnelstrom immer zuerst im Bereich hoher  $p_{\text{trapped}}$ -Konzentration ein. In den restlichen äußeren Bereichen des Bauteils setzt die Elektroneninjektion erst später ein. Die dort emittierten

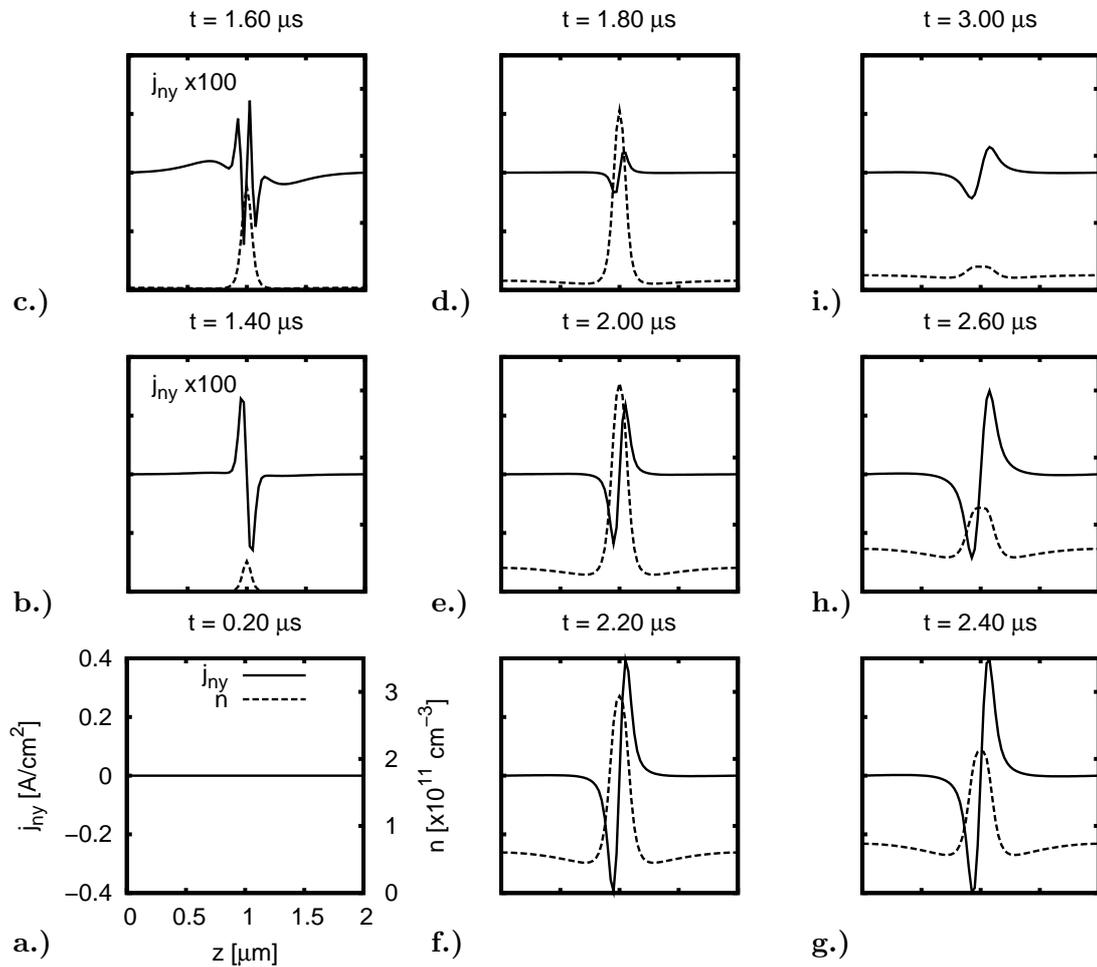


Abbildung 7.5: Räumliche und zeitliche Darstellung der Elektronendichte und der  $y$ -Komponente der Elektronenstroms an der momentanen Anode. Die Zeitpunkte der Auswertung sind identisch zu denen in der Abbildung 7.3.

Elektronen erfahren zunächst in der Nähe der momentanen Kathode eine Ablenkung in  $y$ -Richtung zum Bauteilrand, wobei die Stärke der Ablenkung mit zunehmender Entfernung vom Filamentzentrum abnimmt. Auf dem weiteren Weg zur momentanen Anode werden sie wieder vom zentralen Raumladungsprofil fokussiert. Die dabei resultierenden transversalen Elektronenstromkomponenten sind im Vergleich zu den fokussierenden Elektronenstromkomponenten im direkten Bereich des stark ausgeprägten Raumladungsprofils deutlich kleiner. Sobald sich die  $y$ -Feldkomponenten an der momentanen Anode im Filamentzentrum umgekehrt haben, werden die dort ankommenden Elektronen vom Filamentzentrum weg getrieben, während auch weiterhin aus den Randbereichen des Bauelements Elektro-

nen ins Zentrum fokussiert werden (Abbn. 7.5d.)-i.). Dabei ist insgesamt zu erkennen, dass die defokussierten transversalen Elektronenstromkomponenten im Bereich des Filaments nur in der unmittelbaren Nähe des Scheitels der positiven Raumladung deutlich von Null verschieden sind. Zum Rand der positiven Raumladung fallen sie sehr stark ab. Insgesamt kann der transversale Elektronenstrom die Minima der Elektronenverteilung nicht ausgleichen. Daher behält die Elektronenverteilung während der gesamten Stromflussphase ihre Minima, die räumlich mit den Tunnelstromminima (Abb. 7.3) zusammenfallen. Die Elektronen können in diesen Bereich nicht gelangen und somit kann das Ladungsdefizit auf der momentanen Anode infolge des schwächeren longitudinalen Stroms nicht ausgeglichen werden. Dadurch bleibt dort die über die Oberflächenrekombination kontrollierte negative Grenzflächenladungsdichte im Vergleich zu allen anderen Regionen deutlich reduziert. Wäre dies nicht der Fall, so stünden für die nächsten Halbwellen auch in diesem Bereich mehr Elektronen für die Tunnelinjektion bereit. Der resultierende höhere longitudinale Strom könnte dann mit Hilfe der Stoßionisation und des Löchereinfangs die positive Raumladungszone transversal verbreitern, die wiederum selbstverstärkend auf den Strom wirkt. Damit würde sich das Stromfilament und somit die Grenzflächenladungsfilamente insgesamt lateral ausdehnen. Daher aber bleibt, wie beobachtet, in diesem Simulationsbeispiel die Filamentbreite konstant. Eine Verbreiterung ist also in dieser Situation nicht möglich, da in einer schmalen Zone ( $y$ -Position der Elektronendichteminima) alle Transportvariablen (Dichten, Ströme und Felder) in ihren Maximalwerten deutlich reduziert sind. Dadurch nehmen die für den Aufbau der positiven Raumladung wichtigen Größen (Elektronenstrom, Stoßionisation) geringe Werte an und folglich bleibt die Filamentbreite konstant.

Für die Löcherdynamik gilt eine ähnliche Argumentation. Für die Untersuchung der Stabilität des Filaments müssen wir die Dynamik entlang der ortsfesten positiven Raumladung betrachten. Zuerst konzentrieren wir uns auf den Bereich der momentanen Kathode, da hier aufgrund des bereits vorhandenen Dichteprofiles  $p_{\text{trapped}}$ , der zu erwartenden starken Stoßionisation und der starken longitudinalen Feldkomponente die größten freien Löcherdichten zu erwarten sind.

Zu Beginn der Halbwelle ist die Feldstärke an der momentanen Kathode noch zu schwach damit Elektronen in die ZnS:Mn-Schicht tunneln können. Dadurch werden zunächst keine freien Löcher über die Stoßionisation erzeugt. Freie Löcher können daher nur über die permanente Löcheremission erzeugt werden. In diesem Fall driften die freigesetzten Löcher aufgrund der longitudinalen Feldverteilung zur momentanen Kathode, wobei gleichzeitig die Löcher entweder defokussiert (Bereich: momentane Anode, Bauteilmitte) oder fokussiert (Bereich: momentane Kathode) werden. Auf dem Weg zur momentanen Kathode

kann dann wieder ein Teil der freien Löcher eingefangen werden, so dass das wannenförmige Profil auch weiterhin erhalten bleibt. Dabei sind die defokussierenden Löcherströme im Bereich der Bauteilmitte zu klein, damit sich die Raumladungszone in diesem Bereich weiter ausdehnt. Die Löcherfokussierung an der momentanen Kathode verhindert ebenfalls eine transversale Ausdehnung des positiven Raumladungsprofils, da in den äußeren Bereichen des Profils keine freien Löcher kommen. Sobald dann das Feld einen genügend großen Tunnelstrom zulässt, setzt eine starke Stoßionisation ein. Auch während dieser Phase bleiben die lateralen Felder so gerichtet, dass sie die über die Stoßionisation und die Löcheremission erzeugten freien Löcher zum Filamentzentrum fokussieren. Die Orientierung der transversalen Feldkomponenten ändert sich erst zum Ende der Tunnelinjektionsphase. Zu diesen Zeitpunkten sorgt wieder nur die Löcheremission für freie Löcher, die dann schwach nach außen defokussiert werden. Dabei ist aber der resultierende laterale Löcherstrom im Vergleich zum vorher fokussierenden Löcherstrom deutlich geringer, so dass sich die positive Raumladung und somit das gesamte Stromfilament über diesen Prozess nicht ausdehnen kann.

Betrachten wir nun den mittleren Bereich des Bauelements. In diesem Bereich ist die Dichte der eingefangenen Löcher infolge des wannenförmigen Profils eher gering. Auch hier können freie Löcher über die Stoßionisation und die Löcheremission erzeugt werden, die mit Hilfe des longitudinalen Feldes zur momentanen Kathode beschleunigt werden. Die laterale Feldverteilung ist in diesem Bereich über die gesamte betrachtete Halbwelle so gerichtet, dass eine Defokussierung der Löcher stattfindet. Aber auch hier sind die resultierenden transversalen Löcherströme zu klein, damit sie zu einer Verbreiterung des Filaments führen können.

Zum Schluss wird der Bereich der momentanen Anode betrachtet. Aufgrund der longitudinalen Feldverteilung ist hier keine Stoßionisation möglich. Daher werden hier nur freie Löcher über die Löcheremission erzeugt, die dann zur momentanen Kathode beschleunigt werden. Analog zum Fall der momentanen Kathode müssen hier zwei Zeitintervalle diskutiert werden. Das erste Zeitintervall ist der Beginn der Halbperiode. In dieser Situation sind die transversalen Stromkomponenten der Löcher nach außen gerichtet, was aber zu keiner Verbreiterung der Raumladungszone führt. Das zweite Zeitintervall beginnt mit dem Beginn der einsetzenden Tunnelinjektion und endet mit Ende der Halbperiode. Sobald sich eine gewisse negative Ladung auf der momentanen Anode angesammelt hat, ändert sich im Bereich der momentanen Anode die Orientierung der transversalen Feldkomponenten, so dass die freien Löcher wieder in die Richtung des Filamentzentrums getrieben werden. Dadurch wird auch hier eine laterale Ausbreitung des Profils der Dichte der eingefangenen Löcher verhindert.

Im obigen Abschnitt haben wir die Stabilität des Filaments im stationären Zustand besprochen. Nun werden die Aussagen des letzten Absatzes des Kapitels 7.1.1 diskutiert. Dort wurde geschrieben, dass die Ausmaße des Filaments unabhängig von der Wahl der Inhomogenitätsbreite  $l_{y_{inhom}}$  ist. Dass dies auch wirklich der Fall ist, zeigt die Abbildung 7.6. In den beiden Simulationen wurden bewusst zwei sehr unterschiedliche Breiten  $l_{y_{inhom}}$  verwendet. Die Bildfolge a.) ist dabei schon aus der Abbildung 7.2a.) bekannt und wurde hier nochmal zum besseren Vergleich geplottet. Die Breite der Inhomogenität beträgt dort  $0.8 \mu\text{m}$ . Zu Beginn der Simulation schnürt sich der Verlauf der Grenzflächenladungsdichten und damit das Stromfilament stark ein, bevor es sich dann später nicht mehr verändert. Dieser Einschnürungsprozess ist die Folge von fokussierenden und defokussierenden lateralen Strömen. Wir haben gesehen, dass im Bereich des stark ausgeprägten positiven Raumladungssprofils die Feldverstärkung an der momentanen Kathode am größten ist. Daher setzt in diesem Raumbereich zuerst die Tunnelinjektion ein. Die injizierten Elektronen werden im Bereich der momentanen Kathode ausgehend vom Filamentzentrum bei  $y = 1.0 \mu\text{m}$  nach außen defokussiert. Im mittleren Bereich sowie im Bereich der momentanen Anode werden die Elektronen wieder in die Richtung des Filamentzentrums fokussiert. Während die Elektronenfokussierung im mittleren Bereich der ZnS:Mn-Schicht über den gesamten Zeitraum einer Halbwelle erhalten bleibt, ändert sich infolge der Oberflächenrekombination an der momentane Anode die Polarität des elektrischen Feldes. Daraufhin werden dort die ankommenden Elektronen defokussiert. Dabei gelingt es nicht

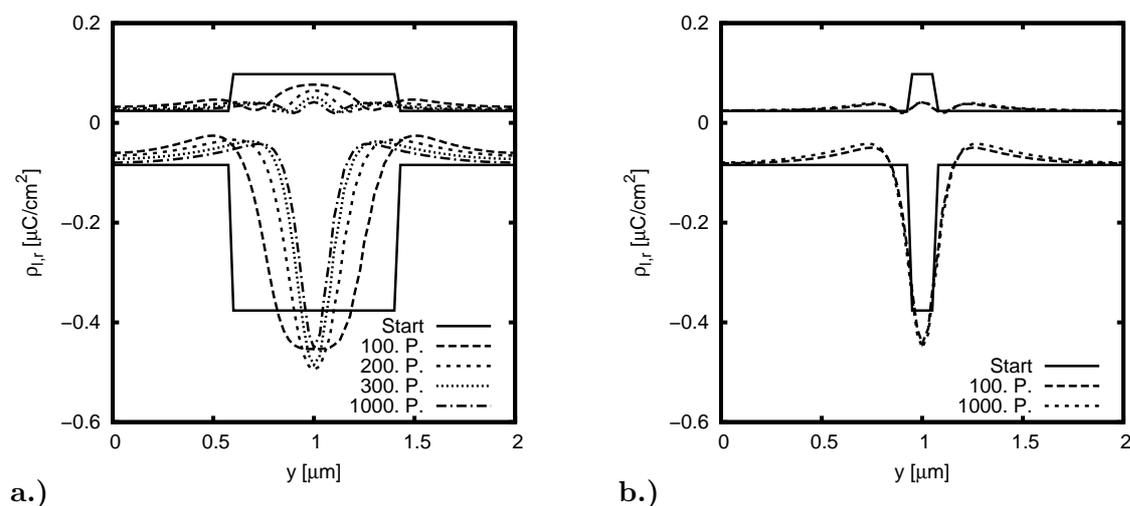


Abbildung 7.6: Vergleich der Grenzflächenladungsdynamik für zwei unterschiedlich breite Startfilamente: a.)  $l_{y_{inhom}} = 0.8 \mu\text{m}$ , b.)  $l_{y_{inhom}} = 0.2 \mu\text{m}$ . In beiden Rechnungen wurden 1000 Perioden simuliert.

vollständig den Grenzflächenladungsverlauf aus der vorherigen Halbwelle wieder herzustellen. Es werden nämlich die Elektronen effektiver zum Filamentzentrum fokussiert als zum Bauteilrand defokussiert. Somit stehen für die nächste Halbwelle an den Rändern der positiven Raumladungszone zu wenig Elektronen in den Grenzflächenzuständen für den Tunnelstrom zur Verfügung. Folglich ist der resultierende Strom und die damit verbundene Stoßionisation an den Rändern kleiner und somit kann die hohe Konzentration an eingefangenen Löchern nicht aufrechterhalten werden. Dadurch schrumpft die Raumladungszone bzw. das Stromfilament solange, bis ein Zustand erreicht ist, in dem die fokussierenden und defokussierenden Stromkomponenten die Grenzflächenladungsprofile zum Ende einer kompletten Periode vollständig wieder reproduzieren können. Dadurch wird schließlich eine konstante laterale Ausdehnung der Raumladungszone gewährleistet, die für das Stromfilament existentiell ist. In der Bildfolge b.) ist eine gegenteilige Situation zu beobachten. Die anfängliche Inhomogenitätsbreite beträgt hier  $0.1 \mu\text{m}$ . In diesem Fall nimmt die Breite des Filaments kontinuierlich zu, bis der stationäre Zustand erreicht ist. Der Grund für dieses Verhalten ist wiederum in dem Zusammenspiel zwischen fokussierenden und defokussierenden lateralen Strömen begründet. In diesem Fall werden die auf die momentane Anode auftreffenden Elektronen über den Bereich großer  $p_{\text{trapped}}$ -Konzentration hinweg defokussiert. Dadurch verbreitert sich der Bereich großer negativer Ladung auf der momentanen Anode. Folglich stehen dann im Randbereich des Raumladungsprofils mehr Elektronen in den Grenzflächenzuständen zur Verfügung. Der dort resultierende höhere Tunnelstrom sorgt dann über die gesteigerte Stoßionisation für eine größere Konzentration von freien Löchern. Diese Löcher werden dann eingefangen und verbreitern somit den Bereich mit großer  $p_{\text{trapped}}$ -Konzentration. Dadurch dehnt sich das Stromfilament lateral weiter aus, bis auch hier fokussierenden und defokussierenden Prozesse gleich groß sind. Zusätzlich ist gut zu erkennen, dass umso mehr Spannungsperioden für den stationären Zustand nötig sind, je breiter die anfängliche Inhomogenität gewählt wird. Im Zuge der Filamentstabilisierung entstehen im Verlauf der Grenzflächenladung auf der momentanen Anode zwei Nebenmaxima, die in diesem Parametersatz aus der Elektronenfokussierung zum Filamentzentrum resultieren. Im nächsten Abschnitt werden zur weiteren Untersuchung der Filamentform die lateralen Transportkoeffizienten (Mobilitäts- und Diffusionskonstanten) gezielt geändert.

### 7.1.3 Einfluss von Diffusion und Drift auf die Filamentform

In der bisherigen Diskussion der Stabilität des Stromfilaments wurde immer nur vom Strom ganz allgemein gesprochen. Durch das gewählte Transportmodell setzen sich die Ströme aus zwei Komponenten zusammen, nämlich aus einem Drift- und einem Diffusionsterm. In

diesem Abschnitt sollen die Auswirkungen der beiden Terme auf die Gestalt des Filaments untersucht werden. Dazu werden die Diffusions- und Mobilitätskonstanten der einzelnen Ladungsträger, die über die Einstein-Beziehung  $D = \frac{k_B T}{q} \mu$  gekoppelt sind, in transversaler Richtung gezielt manipuliert. Die Konstanten für den longitudinalen Transport bleiben unverändert. In der Simulation werden die Temperaturen und die Mobilitäten fest vorgegeben, so dass die Diffusionskonstante über die Einstein-Beziehung berechnet werden muss. Im Fall einer Variation der Diffusionskonstante wird einfach die entsprechende Teilchentemperatur  $T_y$  verändert. Für die Manipulation der Mobilität wird die entsprechende Konstante mit einem Faktor multipliziert. Damit zum besseren Vergleich die Diffusionskonstante unverändert bleibt, wird die Temperatur durch diesen Faktor dividiert.

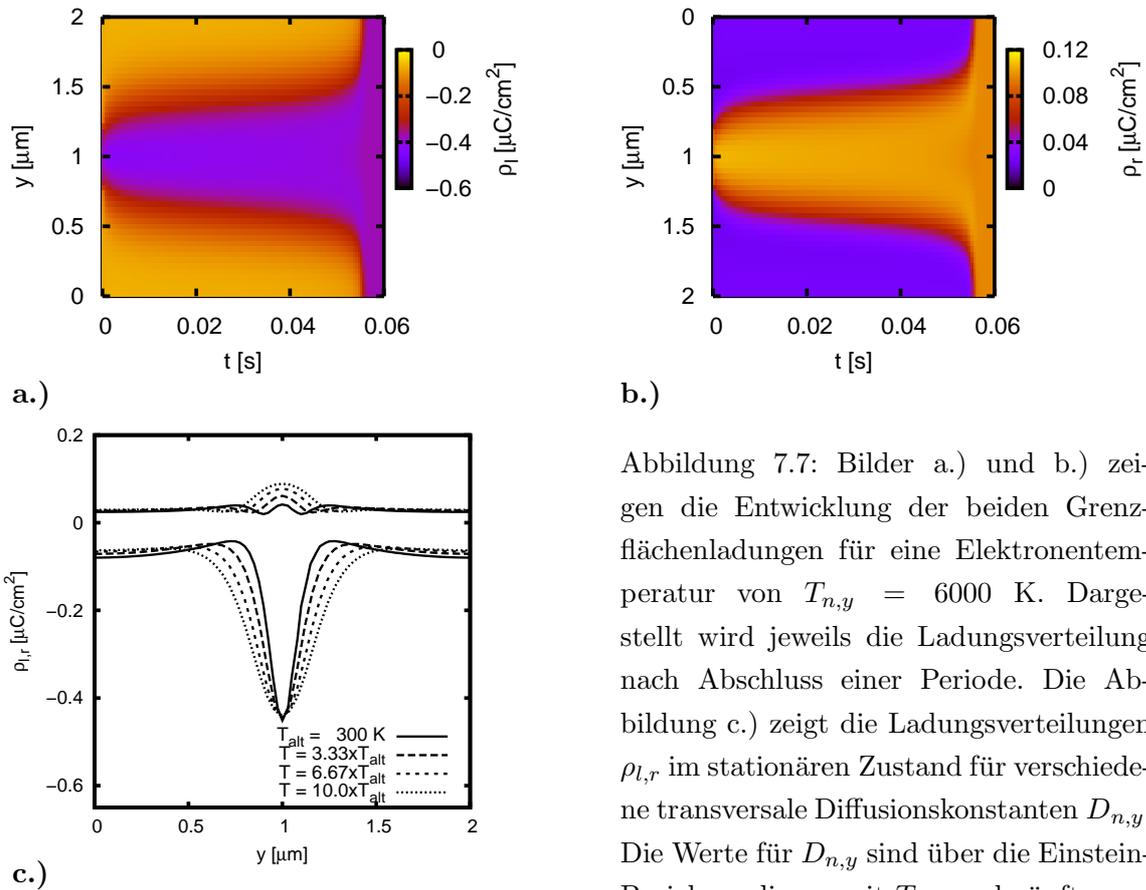


Abbildung 7.7: Bilder a.) und b.) zeigen die Entwicklung der beiden Grenzflächenladungen für eine Elektronentemperatur von  $T_{n,y} = 6000$  K. Dargestellt wird jeweils die Ladungsverteilung nach Abschluss einer Periode. Die Abbildung c.) zeigt die Ladungsverteilungen  $\rho_{l,r}$  im stationären Zustand für verschiedene transversale Diffusionskonstanten  $D_{n,y}$ . Die Werte für  $D_{n,y}$  sind über die Einstein-Beziehung linear mit  $T_{n,y}$  verknüpft.

Entscheidenden Einfluss auf die Filamentform hat die Elektronendiffusion. Wird sie bei konstanter Elektronenmobilität erhöht, so nimmt sowohl die Breite als auch die Intensität

des Stromfilaments im stationären Zustand deutlich zu, was sich wiederum in einer breiten Verteilung der Grenzflächenladungen bemerkbar macht (Abb. 7.7c.)). Bei genauer Betrachtung der Grenzflächenladungen fallen zwei weitere Details auf. Zum einen nimmt die Höhe der Nebenmaxima an der Kathode und der Anode mit zunehmender Elektronentemperatur ab und zum anderen wächst das Maximum in der Verteilung an der momentanen Kathode. Das zuletzt genannte Detail steht stellvertretend für den höheren Strom (Intensität) und die damit größere übertragene Ladung. Im Fall einer Temperatur von  $T_{n,y} = 3000$  K sind nur noch schwache Nebenmaxima zu erkennen. Außerdem verflachen sich die Flanken der Grenzflächenladungen immer mehr. Bei einer noch größeren transversalen Diffusionskonstante kann sich auf dem Grundgebiet kein lokalisiertes Stromfilament ausbilden. (Abbn. 7.7a.)-b). In der entsprechenden Simulation breitet sich die anfängliche Inhomogenität kontinuierlich aus und hinterlässt ein homogenes Grundgebiet, dessen Lösung identisch mit der des oberen Zweigs aus der entsprechenden 1D Simulation ist.

Die Verbreiterung des Stromfilaments kann mit dem im Kapitel 7.1.2 abgeleiteten Mechanismus gut interpretiert werden. Aufgrund der erhöhten transversalen Elektronendiffusion werden alle Elektronenverteilungen verstärkt geglättet. Dies betrifft wieder besonders die jeweiligen momentanen Anoden, da sich dort die Elektronen während der Stromflussphase ansammeln. Durch den hohen Diffusionsanteil in der transversalen Stromkomponente findet zu Beginn des Strompulses einer jeden Halbwelle fast keine Fokussierung an der momentanen Anode mehr statt. Die anschließende Defokussierung ist dann umso größer. Dadurch haben dann die transversalen Stromkomponenten eine größere Reichweite, was schließlich zu stark verbreiterten Filamenten führt. Im stationären Zustand hat sich dann der Hochstrombereich entsprechend der Reichweite von  $j_{n,y}$  angepasst. Mit zunehmender Diffusionskonstante gestaltet sich die Stabilisierung eines Stromfilamentes immer schwieriger, da die laterale Elektronendiffusion immer dominierender wird. Dadurch haben einerseits die transversalen Elektronenstromkomponenten immer größere Reichweiten, was die Entstehung immer breiterer Filamente begünstigt, aber andererseits fehlen die steilen Flanken im Bereich Raumladungsgrenzen, damit der Hochstrombereich eindeutig abgegrenzt wird. Bei  $T_{n,y} = 3000$  K ist diese Trennung gerade noch ausreichend, so dass sich ein räumlich stabiles Filament ausbilden kann. Bei einer weiteren Erhöhung ist das System dazu nicht mehr in der Lage. Es bilden sich zwei Stromfronten aus, die das komplette Grundgebiet transversal durchlaufen. Dieser Prozess endet in einem komplett homogenen Hochstrombereich. Insgesamt kann sich die positive Raumladung bei breiteren Stromfilamenten besser entwickeln. Im Gegensatz zur Abbildung 7.2b.) erhält man nun eine transversal breitere Verteilung, bei der insgesamt die Konzentration von eingefangenen Löchern leicht zunimmt. Daher fließt in diesem Fall auch ein höherer Strom durch die

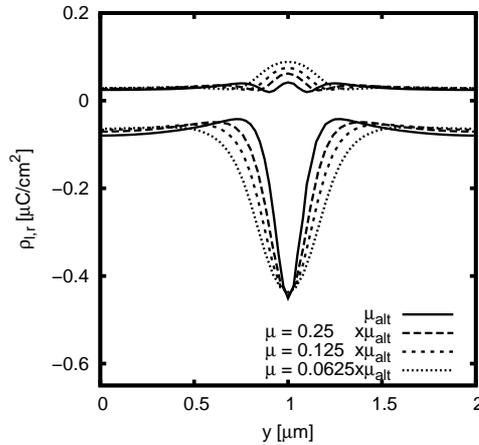


Abbildung 7.8: Räumliches Profil der Grenzflächenladungen im stationären Zustand für verschiedene transversale Elektronenmobilitäten.

ZnS:Mn-Schicht.

Die Stärke der Elektronenmobilität kann ebenfalls die Filamentform entscheidend verändern. Die Simulationen (Abb. 7.8,  $D_{n,y} = \text{konst.}$ ) mit reduzierter transversaler Mobilität zeigen wie die Abbildung 7.7c.) eine Filamentverbreiterung. Sie ist hier umso stärker ausgeprägt, je niedriger die Mobilität gewählt wird. Außerdem fällt auf, dass die Nebenmaxima in der Ladungsverteilung auf der Anode bzw. der Kathode immer kleiner werden. In diesem Fall greift auch hier die oben erwähnte Argumentation. Aufgrund der immer schwächer werdenden Elektronenfokussierung zur Filamentmitte kann sich das Stromfilament aufgrund dominierender Diffusion in der Nähe der Anode weiter ausdehnen, so dass dort die Nebenmaxima in ihrer Höhe deutlich abnehmen. Infolge des Transports nehmen dann natürlich die korrespondierenden Nebenmaxima an der gegenüberliegenden Bauteilseite ebenfalls ab. Auch können wieder zwei Stromfronten erzeugt werden, indem die transversale Elektronenmobilität weiter gesenkt wird. Die Simulationen zeigen auch hier ein komplettes Verschwinden der Nebenmaxima in den Ladungsverteilungen an der Anode und der Kathode mit dem Resultat, dass das Filament transversal auseinander läuft.

Wird die Diffusions- und die Mobilitätskonstante für die Löcher geändert, so ergibt sich ein ähnliches Bild. Da sich die positive Raumladung über die ganze ZnS:Mn-Schicht erstreckt, muss der komplette Bereich in die Diskussion mit einbezogen werden. Wird die Löchertemperatur  $T_{p,y}$  erhöht, so stellt sich analog zum Elektronenfall ein breiteres Stromfilament ein (Abb. 7.9a.)). Dabei ist die Abhängigkeit aber nicht so stark wie im Elektronenfall, da die freien Löcherdichten in der Regel nicht so hoch wie die Elektronendichten sind. Die größten Löcherkonzentrationen sind jeweils im Zeitintervall hoher Tunnelinjek-

tion im Bereich der momentanen Kathode zu beobachten. Dort schwächt die verstärkte Löcherdiffusion die Fokussierung und ermöglicht so eine breitere Löcherverteilung. Darauf reagiert die Verteilung der eingefangenen Löcher sofort, so dass sich diese ebenfalls verbreitert. Natürlich spielt auch hier die Löcheremission eine Rolle. So können im gesamten räumlichen Verlauf der Raumladung permanent Löcher emittiert werden. Durch die erhöhte Diffusion kann sich diese dann besser transversal ausbreiten, was auch hier eine Verbreiterung der Raumladungszone zur Folge hat. Beide Prozesse dehnen also die Raumladung aus. Die ausgedehnte Raumladung koppelt wieder an das Feld und sorgt so für einen breiteren Hochstrombereich, was sich wiederum in lateral breiteren inhomogenen Ladungsverteilungen an den Grenzflächen niederschlägt.

Bei der Vergrößerung der transversalen Löchermobilität ist ebenfalls eine Verbreiterung der Strominhomogenität zu beobachten (Abb.7.9b.). In diesem Fall werden die freien Löcher infolge der gesteigerten Mobilität immer effektiver defokussiert. Dadurch kann sich die positive Raumladungszone besser ausdehnen und es resultiert ein breiteres Stromfilament in der ZnS:Mn-Schicht.

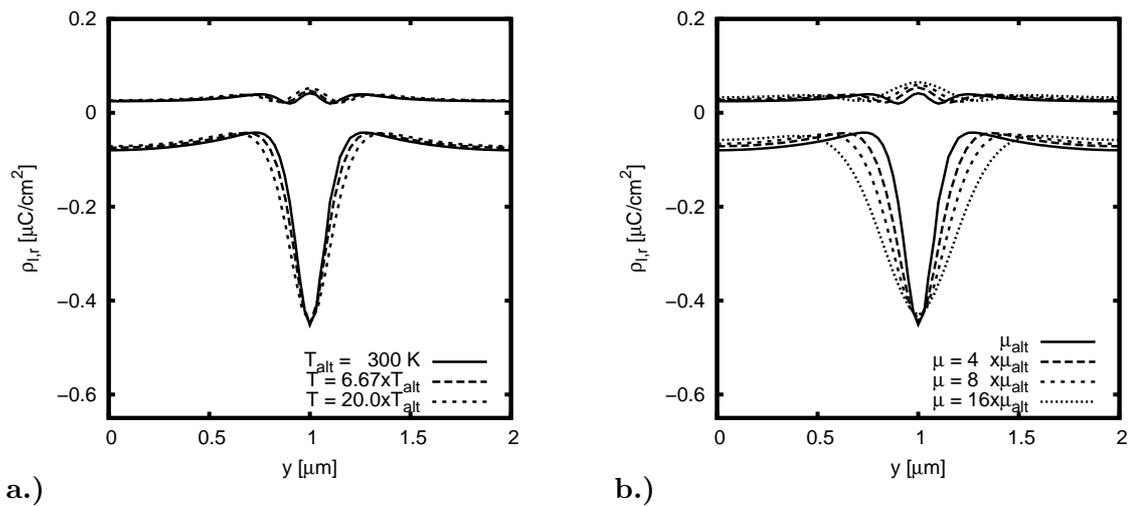


Abbildung 7.9: Grenzflächenladungsdynamik in stationären Zustand für verschiedene Löchertemperaturen  $T_{p,y}$  (a.) und Löcher mobilitäten  $\mu_{p,y}$  (b.).

#### 7.1.4 Einfluss der Oberflächenrekombination auf die Filamentform

Die Gestalt des Stromfilaments wird wesentlich von den Dichteverteilungen der Löcher und der Elektronen am Halbleiter-Isolator-Grenzflächen bestimmt. In dem verwendeten Transportmodell (Kap. 4.4) berechnen sich die entsprechenden Ladungsdichten auf den Grenzflächen über die Oberflächenrekombination und die Tunnelinjektion. Sobald sich

freie Ladungsträger in der ZnS:Mn-Schicht befinden, stellen sich die entsprechenden Dichteverteilungen gemäß dem elektrischen Feld ein. Aufgrund der sehr hohen longitudinalen Feldstärken akkumulieren sich die Elektronen (Löcher) massiv an der momentanen Anode (Kathode). Die Rekombination mit den Grenzflächenzuständen wird über eine Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit gesteuert. Ist sie klein, so stauen sich die Ladungsträger in der unmittelbaren Nähe der Grenzflächen auf, was mitunter zu relativ scharfen Dichteverteilungen führen kann. Eine gegenteilige Situation tritt ein, wenn die Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit vergrößert wird. In diesem Fall werden die entsprechenden Dichteverteilungen glatter, weil mehr Ladungsträger eingefangen werden. Die Simulationen zeigten, dass in beiden Fällen lokalisierte Stromfilamente stabilisiert werden konnten. Dabei fällt ein direkter Vergleich der Filamente bei unterschiedlichen Rekombinationsgeschwindigkeiten sehr schwer, da natürlich die jeweiligen  $Q_{1/2}$ -U-Kennlinien aus der 1D Simulation nicht identisch sind. Das betrifft sowohl die Breite der Hysterese als auch die Schwellenspannungen für die un stetigen Sprünge. So ist beispielsweise die Hysterese für größere Rekombinationsgeschwindigkeiten zu höheren Spannungen verschoben. Die entsprechende 2D Simulation zeigte ebenfalls ein Filament, dessen Gestalt ähnlich zu den bisher gezeigten Inhomogenitäten ist.

## 7.1.5 Filamentzündung durch Rauschen

### 7.1.5.1 Zündung durch statisches Rauschen

Bisher haben wir nur Stromfilamente untersucht, die sich aus einer bistabilen Anfangsbedingung entwickelt haben. Diese Untersuchungen sind aber von großem Nutzen, da so der Stabilisierungsmechanismus gut extrahiert werden konnte. Aber dennoch entspricht dieses theoretische Experiment natürlich nicht dem realen Experiment. Im folgenden Abschnitt soll versucht werden, die experimentelle Situation besser nachzubilden. Dazu wird der homogene Zustand verrauscht (vgl. Disk. in Kap. 7), damit dieser vielleicht instabil wird. Die Systemstörung erfolgt hier durch einen gaußverteilten Rauschterm in der energetischen Lage  $\epsilon_0$  der Grenzflächenzustände, welcher aufgrund der experimentellen Gegebenheiten gut zu motivieren ist. Aus theoretischer Hinsicht ist dieser Ansatz am sinnvollsten, da diese Modellierung des Rauschterms erstens die Ladungsneutralität nicht verletzt und zweitens exponentiell in die Ladungsträgerdynamik eingeht, so dass sehr kleine Störungen des Fermi-Niveaus große Veränderungen in der Tunnelinjektion hervorrufen können (Abb. 7.3). Zuerst wird nun der Fall eines statischen Rauschens untersucht. Dazu verrauscht man zu Beginn der Simulation einmalig die Variable  $\epsilon_0(y)$ . Die verrauschte Größe  $\epsilon_0(y)$  geht dann als Anfangsbedingung in die Simulation ein. Alle übrigen Variablen sind zu Beginn der Simulation räumlich homogen. Die homogene Anfangsbedingung wird mit Hilfe der entsprechenden 1D Lösung bestimmt, indem man die Lösung des unteren Zweigs

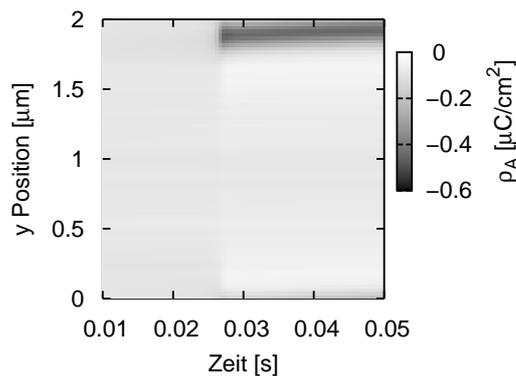


Abbildung 7.10: Zeitliche Dynamik der Grenzflächenladungen an der momentanen Anode jeweils zum Ende einer Spannungsperiode. Die Spannungsamplitude ist auch hier gemäß der Abbildung 7.1b.) gewählt.

der Hysterese (Spannung knapp unterhalb der Schwelle, 151.14 V) als räumlich homogene 2D Anfangsbedingung wählt. Auch die Spannungsamplitude bleibt im Vergleich zu den bisherigen gezeigten 2D Simulationen unverändert (vgl. Abb. 7.1a.)). Das Simulationsergebnis für die Grenzflächen ist in der Abbildung 7.10 zusammengefasst. Dargestellt ist dort die Grenzflächenladungsdichte auf der momentanen Anode zum Ende der Stromflussphase. Die Ladungsverteilung auf der entsprechenden Kathode wird hier nicht präsentiert, da sich aufgrund der geringen positiven Ladungen der Rauschterm zu stark bemerkbar macht. Man erkennt aus der Abbildung, dass bis zu dem Zeitpunkt  $t = 0.025$  s das System in  $y$ -Richtung nahe zu vollkommen homogen bleibt. Einige Simulationsperioden später entwickelt sich schlagartig eine Ladungsinhomogenität auf der Grenzfläche, die sich durch einen lokal stark anwachsenden Strom entwickelt hat. Im weiteren Verlauf dieser Arbeit soll dieser Prozess mit Filamentzündung bezeichnet werden. Nach der erfolgten Zündung ändert sich die Breite des Filaments nicht mehr.

Damit die Bildung des Stromfilaments besser untersucht werden kann, betrachten wir nun die räumliche Entwicklung von  $\rho_{l,r}$  an ausgewählten Zeitpunkten der Simulation (Abb. 7.11). In dieser Darstellung bleibt das System für  $t < 25.00$  ms räumlich homogen in  $y$ -Richtung (Abbn. 7.11a.)-b.)). Für alle nachfolgenden Zeitpunkte ist dies nicht mehr der Fall. Ab  $t > 25.00$  ms ist deutlich die Entwicklung der Inhomogenität an der Grenzfläche zu erkennen. Mit zunehmender Zeit verstärkt sich diese, wobei sie mit zunehmender Simulationszeit immer schneller wächst und sich dabei gleichzeitig verjüngt (Abbn. 7.11d.)-g.)). Es bildet sich auch hier eine zapfenförmige Struktur heraus, die den bisher beobachteten Strukturen sehr ähnlich ist. Im Zeitintervall  $26.50$  ms  $< t < 27.50$  ms nimmt die Inhomogenität am stärksten zu, so dass dieses Intervall als Zündungsintervall identifiziert werden kann. Danach ändert sich die Form des Filaments nicht mehr (Abbn. 7.11g.)-i.)). Die Form der Ladungsdichte an der Anode zeigt dann wieder einen typischen Verlauf. So sind auch hier wieder die typischen Nebenmaxima sowie die asymptotischen Ausläufer zu erkennen. Damit stellt sich neben dem Filament eine inhomogene Ladungsverteilung ein. Die Zündung dieses Filaments kann wie folgt verstanden werden.

Aufgrund der räumlich verrauschten Verteilung für die Variable  $\epsilon_0(y)$  stellen sich über den räumlich leicht inhomogenen Elektronenstrom entsprechende Ladungsverteilungen auf den beiden Grenzflächen ein. Diese wachsen dann mit fortschreitender Simulationszeit kontinuierlich an, da sich die Verteilung  $\epsilon_0(y)$  nicht ändert und so immer an den gleichen  $y$ -Positionen ein erhöhter Strom fließt. Infolge der größeren Stoßionisation wächst dann in diesen Raumbereichen die ortsfeste positive Raumladung schneller, so dass sich dort ein Stromfilament ausbilden kann. In dem hier gezeigten Simulationsbeispiel lässt die zufällige Anfangsverteilung für  $\epsilon_0$  nur einen erhöhten Strom im Bereich von  $y \approx 1.8$

$\mu\text{m}$  zu. Wie oben kurz geschildert, fließt in diesem Bereich ein höherer Elektronenstrom, der sich zunächst durch leichte Ladungsinhomogenität (mehr negative Ladung) auf der momentanen Anode bemerkbar macht (Abb. 7.11b.)-c.)). Durch die so erhöhte negative Ladung stehen mehr Elektronen in den Grenzflächenzuständen für die Tunnelinjektion bereit. Daraufhin fließt in diesen Bereichen ein höherer Elektronenstrom, der dann über die gesteigerte Stoßionisation immer mehr Elektron-Loch-Paare erzeugt. Die Löcher werden in diesen Bereichen eingefangen und leiten somit den Aufbau eines positiven Raumladungs-

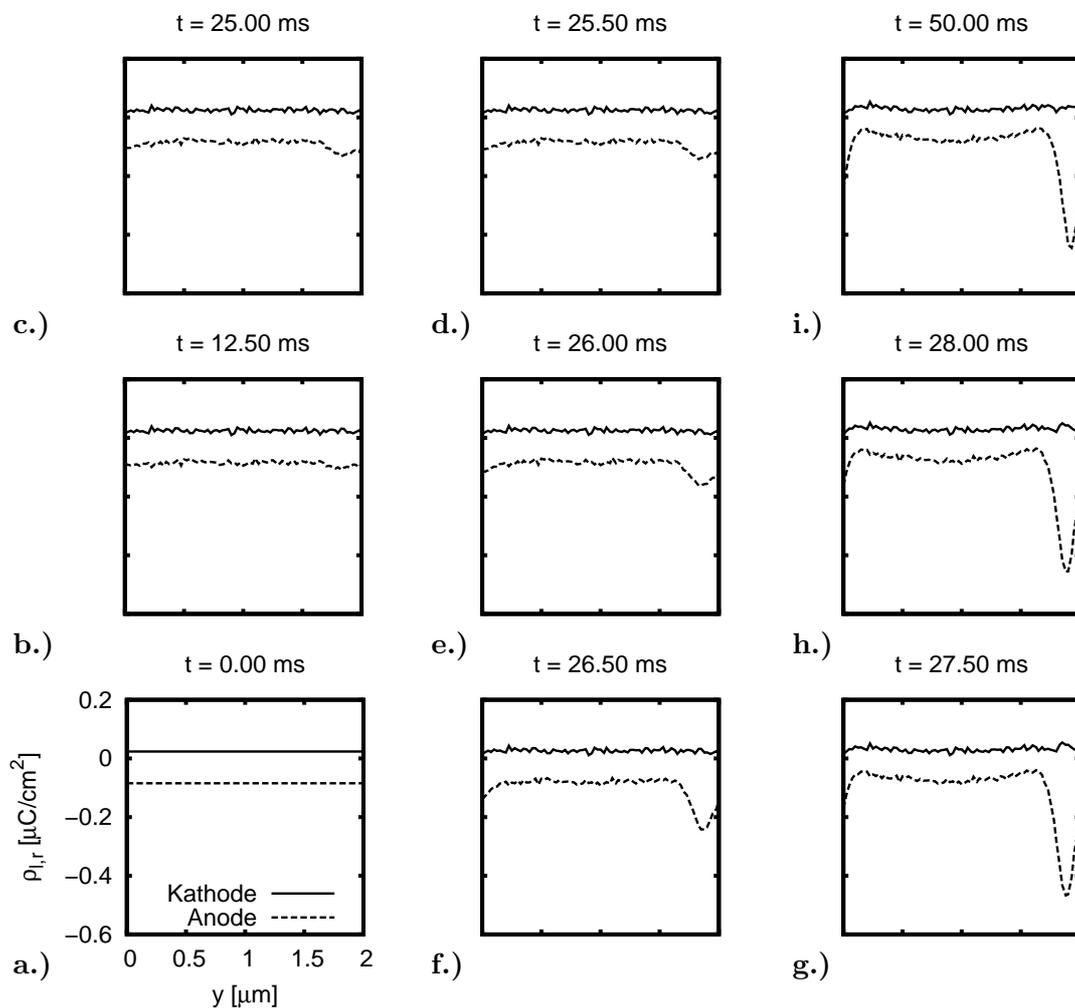


Abbildung 7.11: Räumliche Grenzflächendynamik für verschiedene Zeitpunkte der Simulation. Die Bilder a.) und i.) repräsentieren den Anfangs- bzw. den Endzustand des Systems. Man beachte die kurzen Zeitabstände in der Bildsequenz c.)-h.).

profils ein. Nun wird wieder der schon oft diskutierte selbstverstärkende Mechanismus in Gang gesetzt (vgl. Kap. 6). Der weitere Aufbau der positiven Raumladung verstärkt zunehmend das elektrische Feld, was wiederum die Tunnelinjektion und Stoßionisation verstärkt. Letztere sorgt für mehr freie Löcher, die zum Einfang bereit stehen. Somit wird das positive Raumladungsprofil (Scheitel bei  $y \approx 1.8 \mu\text{m}$ ) weiter verstärkt. Damit steigt insgesamt die pro Halbperiode Ladung weiter an und folglich wird die negative Ladungsinhomogenität auf der momentanen Anode immer größer (Abb. 7.11d.-f)). Zum Zeitpunkt  $t = 26.50 \text{ ms}$  (Abb. 7.11f.)) hat der longitudinale Ladungsträgertransport in der Nähe von  $y \approx 1.8 \mu\text{m}$  eine positive Raumladung aufgebaut, durch die eine sehr effektive Feldverstärkung möglich ist. Durch die dann lokal massiv auftretende Stoßionisation und die dadurch bedingte weitere Zunahme der Dichte der eingefangenen Löcher wird das Stromfilament gezündet (Abb. 7.11g.)). Danach ist im Bereich des Filamentzentrum kein weiterer Anstieg des lokalen Stroms zu erkennen, da das Minimum der Grenzflächenladung (momentane Anode) unverändert bleibt (Abb. 7.11g.-i)). Die weiteren Untersuchungen zeigen auch hier, dass analog zum Fall der bistabilen Anfangsbedingung die transversalen Stromkomponenten durch Drift und Diffusion das Filament stabilisieren. Die Stabilisation führt dabei auch hier auf die Nebenmaxima in der Anodenverteilung, die einen hohen Stromfluss (nächste Halbwelle) in unmittelbarer Nachbarschaft des Filaments verhindern. Somit kann sich das Filament nicht weiter ausdehnen. Im übrigen Raumbereich verhindern die sehr langsam abklingenden Ausläufer der Nebenmaxima (Anode) eine eventuelle zusätzliche Filamentzündung, da dort die negative Ladung auf der Grenzfläche zu klein ist. Ein Vergleich zwischen den Bildern 7.11a.) und 7.11i.) zeigt, dass im stationären Zustand im mittleren Bereich eine geringere negative Ladungsdichte vorliegt, wie unmittelbar zu Anfang der gesamten Simulation. Somit reichen die gegenwärtigen Fluktuationen nicht aus, um eventuell ein weiteres Filament zu zünden.

In der Abbildung 7.12 werden die auf zwei unterschiedlichen Wegen (bistabile Anfangsbedingung, Rauschterm) erzeugten Filamente miteinander verglichen. Man erkennt eine gute Übereinstimmung für die Verteilung an der Anode. Bei einer genügend kleinen Rauschamplitude ist man sogar in der Lage, den typischen Verlauf der Ladung auf der Kathode wieder zu erkennen. Dieser Vergleich zeigt sehr schön, dass die beobachtete Inhomogenität offenbar eine intrinsische Eigenschaft des Systems ist, da sich immer die gleiche Filamentform ausbildet. Die Simulationen zeigen nur dann Filamente, wenn die Fluktuationen genügend groß sind. Dabei überragt dann das resultierende Filament im Fall des stationären Rauschens wesentlich die Breite der Anfangsstörung. Damit ist die Filamentform in dem gewählten Bauteilparametersatz unabhängig von der Art der Störung (vgl. Abbn. 7.6 und 7.12), wobei natürlich im Rauschfall geringe Rauschamplituden vorausge-

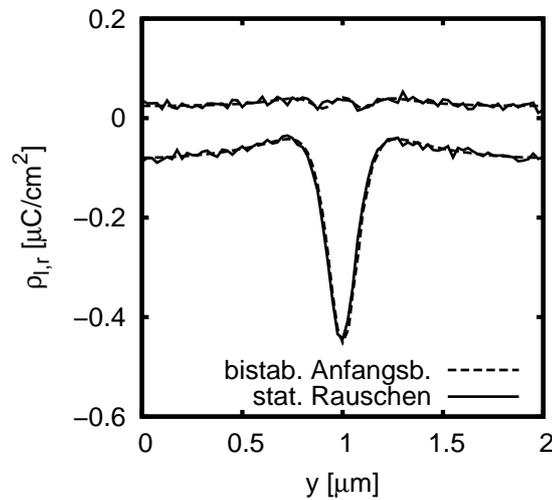


Abbildung 7.12: Vergleich der Grenzflächenladungsfilamente aus den Abbildungen 7.1a.) und 7.11i.) Das rauschinduzierte Filament wurde dabei unter Berücksichtigung der periodischen Randbedingungen zur Mitte ( $y$ -Richtung) hin verschoben.

setzt werden müssen. Ansonsten würde nämlich das System sofort nach Simulationsbeginn auf den oberen Ast der Hysterese springen. Damit wäre das ganze laterale Simulationsgebiet in einen Hochstrombereich versetzt.

### 7.1.5.2 Zündung durch zeitliches Rauschen

Abschließend soll eine zweite Rauschmethode angewendet werden, um den homogenen Zustand zu stören. Im Prinzip wird dabei wie im Abschnitt 7.1.5.1 vorgegangen, nur mit dem Unterschied, dass jetzt in jedem Zeitschritt der Simulation die Verteilung  $\epsilon_0$  auf beiden Grenzflächen neu verrauscht wird. Die Simulationsspannung bleibt auch hier unverändert.

Die Abbildung 7.13 zeigt zwei Simulationsbeispiele. Während das Bild 7.13a.) wieder ein stationäres Filament zeigt, kann in der Abbildung 7.13b.) die Entstehung von zwei Stromfilamenten beobachtet werden. Offenbar kann das System auch mehrere Stromfilamente stabilisieren, die hier unmittelbar bei identischen Zeitpunkten zünden. Interessant ist dabei die transversale Bewegung der beiden Filamente. Es existiert offenbar eine repulsive Kraft, die die Filamente auseinander treibt. Diese Kraft scheint direkt nach der Zündung am stärksten zu sein, da dort die Krümmung der beiden „Bahnkurven“ am größten ist. Zu späteren Zeiten ist dann die Bahn wesentlich schwächer gekrümmt, was auf eine stark reduzierte Wechselwirkung schließen lässt.

Auch hier lohnt wieder ein Blick auf einzelne Schnitte des Kontourplots 7.13b.). In der

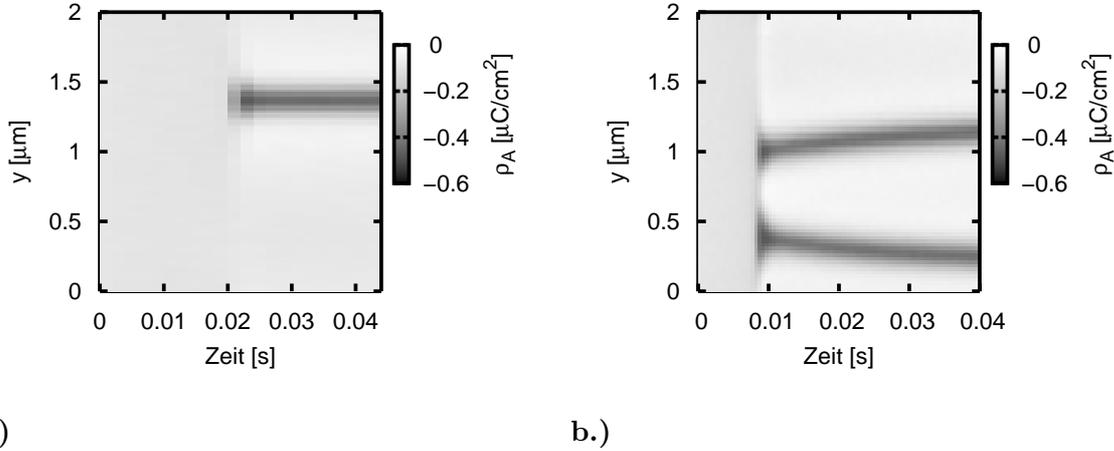


Abbildung 7.13: Grenzflächenladungsdynamik für zwei Simulationen mit zeitlichem Rauschen, wobei der Zufallszahlengenerator mit unterschiedlichen Startwerten initialisiert wurde. Spannung: 151.14 V.

Abbildung 7.14 sind diese für 9 verschiedene Zeitpunkte dargestellt. Bis zum Zeitpunkt  $t = 7.50 \text{ ms}$  bleibt das System nahezu homogen. Alle Störungen werden weggedämpft. Für  $t = 8.00 \text{ ms}$  (Abb. 7.14d.) ergibt sich dagegen eine andere Situation. Es bildet sich eine inhomogene Ladungsverteilung auf der momentanen Anode, die im weiteren Verlauf der Simulation stark ansteigt. Dabei bildet sich ein lokales Maximum aus, welches wiederum von zwei Minima umrahmt wird. Gleichzeitig wird die Ladungsverteilung auf der momentanen Kathode ebenfalls inhomogen. Bis zu diesem Zeitpunkt möchte man meinen, dass ein sehr breites Filament entsteht, welches sich dann später wieder verengt und dabei seine typische Form annimmt. Diese Erwartung bestätigt sich hier nicht (Abb. 7.14e.-i.). Es entwickeln sich zwei Filamente, die sich dann im weiteren Verlauf der Simulation voneinander wegbewegen. Dabei verjüngen sich die beiden Filamente und es ergibt sich wieder die bekannte Filamentform. Die offensichtliche Wechselwirkung zwischen einzelnen Filamenten soll jetzt in den nachfolgenden Abschnitten genauer untersucht werden. Bevor dies in Angriff genommen wird, schließen wir dieses Unterkapitel mit ein paar Bemerkungen zu den einzelnen durchgeführten Simulationen.

Die verrauschten Simulationen zeigten analog zum Fall der bistabilen Anfangsbedingung eine starke Abhängigkeit von der Größe der gewählten Spannungsamplitude. Es konnten dabei bei kleinen Rauschamplituden nur Filamente in einem schmalen Intervall unmittelbar vor der Schwellenspannung für den unstetigen Sprung vom unteren auf den

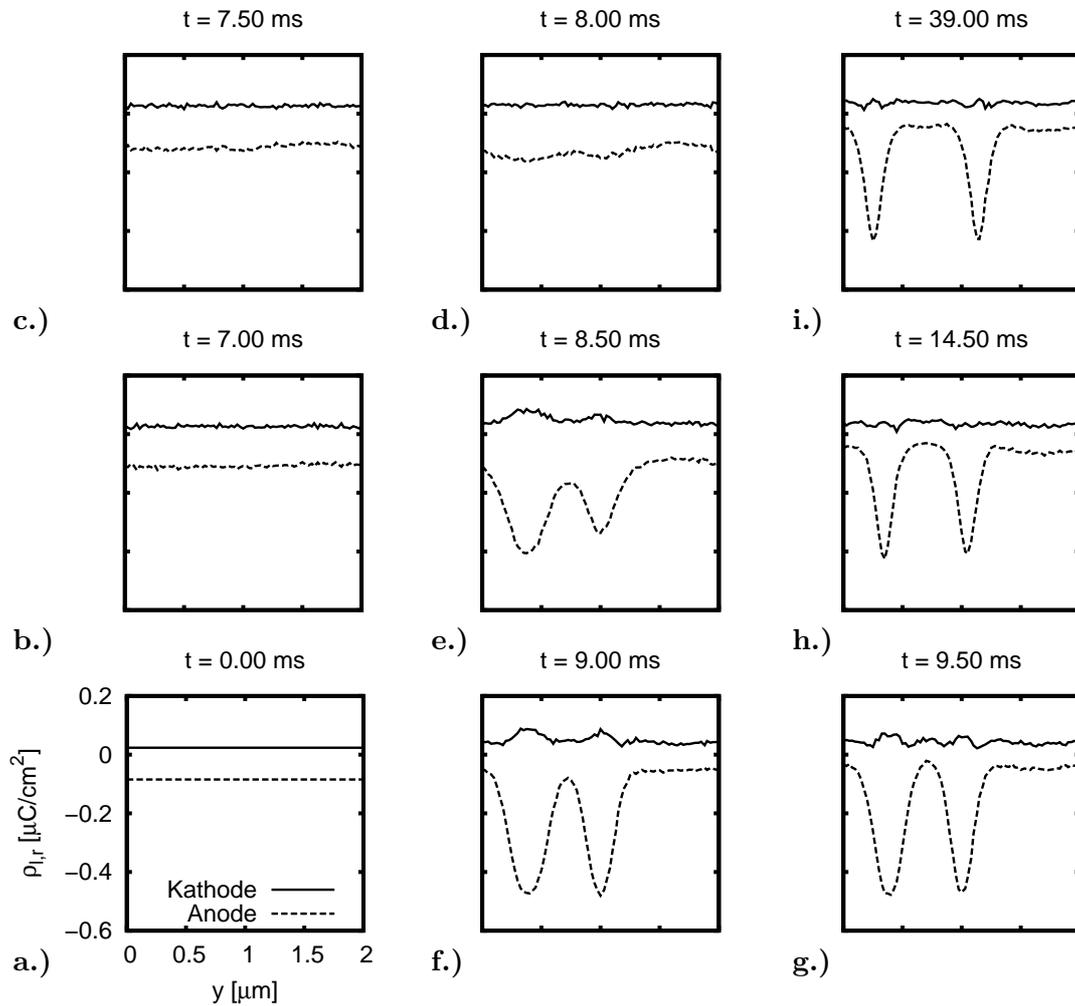


Abbildung 7.14: Räumliche Grenzflächendynamik für verschiedene Zeitpunkte der Simulation. Die Bilder a.) und i.) repräsentieren den Anfangs- bzw. den Endzustand des Systems. Man beachte die kurzen Zeitabstände in der Bildsequenz c.)-g.).

oberen Zweig der Hysterese stabilisiert werden. Ist die Amplitude zu klein gewählt, so bleibt das System homogen. Vollkommen analog zum Kapitel 7.1.3 zeigen auch die verauschten Simulationen eine starke Abhängigkeit der Filamentform von den transversalen Diffusions- und Mobilitätskonstanten. Die hier gewählten Parameter führen in der Simulation auf die Ausbildung von stationären Filamenten (Abb. 7.13). Es wurden auch Simulationen durchgeführt, in denen beispielsweise die transversale Elektronentemperatur bei konstanter Elektronenmobilität stark vergrößert wurde. In dieser Situation

lassen sich keine Filamente stabilisieren. Ein rauschinduziertes Stromfilament verbreitert sich kontinuierlich aufgrund der Elektronendiffusion mit dem Resultat, dass das ganze Grundgebiet in einen Hochstrombereich versetzt (vgl. Abb. 7.7) wird.

## 7.2 Wechselwirkung zwischen Filamenten

Um die Wechselwirkung zwischen einzelnen Filamenten systematischer untersuchen zu können, werden zuerst in diesem Abschnitt wieder Simulationen mit bistabiler Anfangsbedingung untersucht. Dabei wird zuerst ein Filament mit Hilfe einer bistabilen Anfangsbedingung erzeugt. Sobald dieses Filament stabil ist, d.h. die pro Halbperiode übertragende Ladung ist konstant, wird die Spannungsamplitude leicht erhöht, so dass wir uns nun in der  $Q_{1/2}U$ -Kennlinie (Abb.7.1b.) oberhalb der Schwelle für den unstetigen Sprung vom unteren auf den oberen Zweig befinden. Diese Vorgehensweise hat gegenüber den verrauschten Simulationen einen entschiedenen Vorteil. Durch die Spannungserhöhung (über die Schwelle hinweg) ist auf jeden Fall sichergestellt, dass das System weitere Filamente zünden kann, falls die räumlichen Gegebenheiten dies zulassen. Zusätzlich ist die benötigte Simulationszeit auf dem Rechner wesentlich geringer, da unmittelbar nach der Amplitudenvergrößerung weitere Stromfilamente aufgebaut werden können. So bauen sich die beiden Filamente in der Abbildung 7.13b.) erst nach rund 1000 simulierten Perioden auf. Im Folgenden werden Simulationen mit obiger Vorgehensweise vorgestellt. Dazu wird zusätzlich die laterale Bauteilbreite variiert (Abb. 7.15). Dies ist erforderlich, da es sich gezeigt hat, dass die bisher verwendete Bauteilbreite von  $2 \mu\text{m}$  zu klein ist, damit in der gewählten Konfiguration ein zweites Filament zündet.

### 7.2.1 Längenvariation der lateralen Bauteilbreite

#### Laterale Bauteilbreite: $2 \mu\text{m}$

Zuerst wurde die transversale Bauteilbreite unverändert gelassen. Nachdem sich das zentrale Filament komplett ausgebildet hat, wurde die Spannung um  $0.05 \text{ V}$  erhöht. Das Ergebnis dieser Simulation zeigt die Abbildung 7.15a.). Im Vergleich mit dem Startfilament (vgl. Abb. 7.1a.) ist nur eine sehr geringe Abweichung zu erkennen. Da jetzt ein wenig mehr Strom durch die ZnS:Mn-Schicht fließt, verbreitert sich das Filament ein wenig. Beim restlichen Teil der beiden Verteilungen ist eine leichte Zunahme der Ladungsdichten (Anode negativer, Kathode positiver) zu beobachten. In diesem Simulationsbeispiel kann offensichtlich kein neues Filament gezündet werden. Der Grund für dieses Verhalten ist in der Form der beiden Ladungsverteilungen an den Grenzflächen zu suchen. Ihre besondere Form verhindert einen weiteren Zündprozess, da die Spannungserhöhung zusammen mit

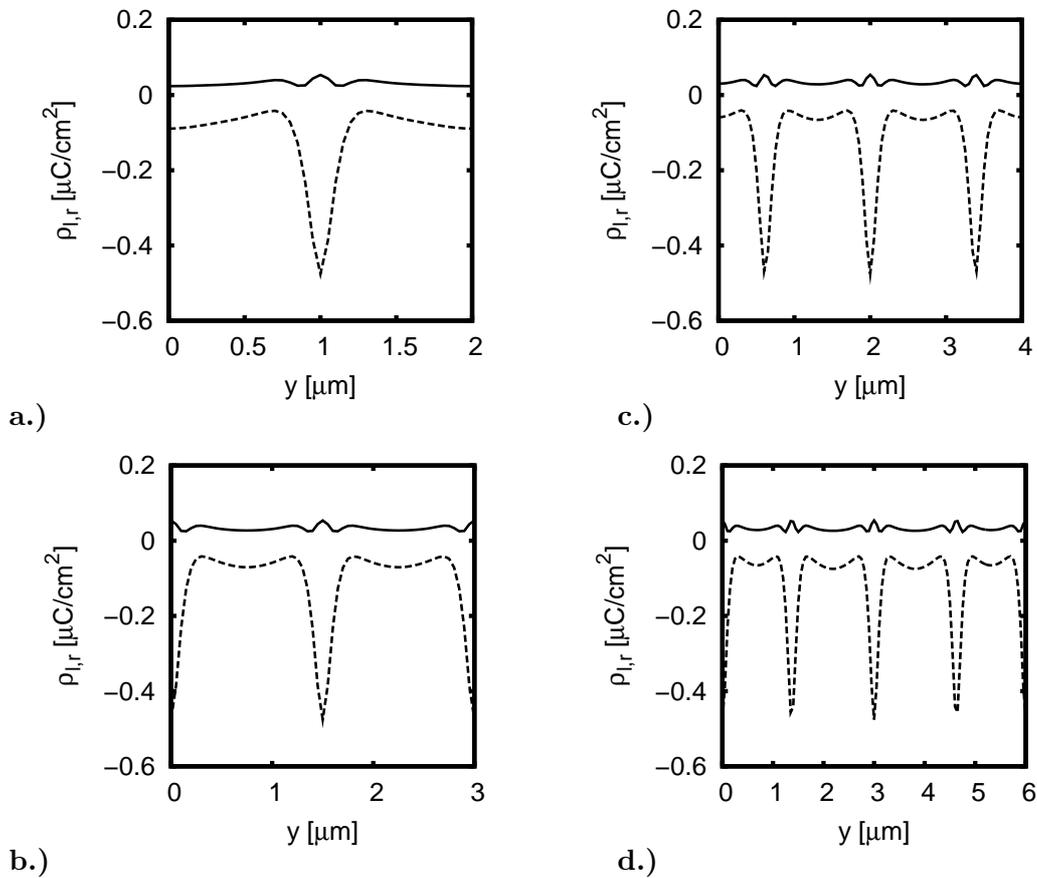


Abbildung 7.15: Grenzflächenladungsdichten im periodisch stationären Zustand für vier verschiedene transversale Bauteilbreiten von 2, 3, 4 und 6  $\mu\text{m}$ .

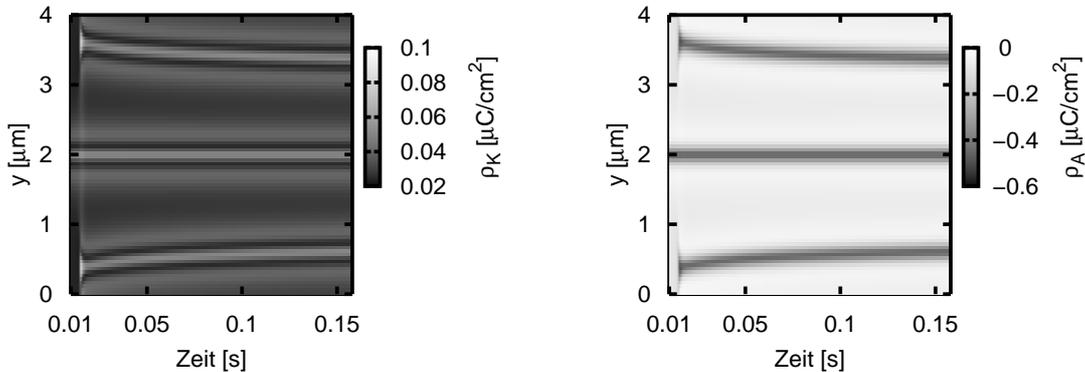
dem im zwischenfilamentären Bereich (periodische Randbedingungen) vorliegenden Ladungsdichten (Grenzflächenladungen und Raumladung) keine nennenswerte Vergrößerung der Tunnelinjektion bewirken kann. Aus der Simulation kann man schließen, dass das System in dieser Konfigurationen einen Filamentabstand von mehr als 1  $\mu\text{m}$  bevorzugt.

Dieses Ergebnis gab den Anlass, wie vorhin erwähnt, die transversale Bauteilbreite weiter zu erhöhen. Dadurch wird automatisch infolge der periodischen Randbedingungen die Periodizitätslänge des Systems verändert (Abbn. 7.15b.)-d.)). Die Abbildungen zeigen, dass zwischen den Startfilamenten weitere zünden können, wobei alle Filamente im stationären Zustand nahezu die gleiche Form besitzen. Außerdem versucht das System einen Filamentabstand von ca. 1.2-1.5  $\mu\text{m}$  einzustellen und zwar unabhängig davon, wie breit das Bauteil gewählt wurde. Bei genauer Betrachtung ist dies in den Abbildungen 7.15c.) und 7.15d.) nicht immer erfüllt. Ein mögliche Erklärung kann die mit dem Abstand zwei-

er Filamente immer schwächer werdende Wechselwirkung sein. Dies spiegelt sich auch in der pro Halbperiode übertragenden Ladung wieder. Ihre Änderung ist zum Ende der Simulation sehr klein, was auf eine sehr langsame räumliche Entwicklung der positiven Raumladung hindeutet. Die Ergebnisse zeigen z.B. für die Abbildung 7.15c.), dass sich die beiden äußeren Filamente noch weiter zum Zentrum bewegen. Dies geschieht, wie gesagt, sehr langsam und würde insbesondere für die Abbildungen 7.15c.) und 7.15d.) viel Simulationszeit erfordern, zumal auch in diesen beiden Fällen die meisten Stützstellen für die  $y$ -Richtung benötigt werden, um stets die gleiche laterale Ortsdiskretisierung zu garantieren.

### Laterale Bauteilbreite: $4\mu\text{m}$

Um die Wechselwirkung der Filamente untereinander besser zu untersuchen, betrachten wir zunächst die Abbildung 7.16 für den Fall einer Bauteilbreite von  $4\mu\text{m}$ . Auch hier zeigt sich das aus der Abbildung 7.13b.) bekannte Bild. Zu Beginn ist die Wechselwirkung stark ausgeprägt und später nimmt sie kontinuierlich ab. Die Vermutung liegt nahe, dass diese abstoßende Wechselwirkung mit den transversalen Feldkomponenten an den Grenzflächen verbunden ist. Dazu betrachten wir jetzt die Dynamik der Grenzflächen (Abb.



a.)

b.)

Abbildung 7.16: Grenzflächenladungsdynamik an der Kathode a.) und der Anode b.) eines Startfilamentes bei  $y = 2\mu\text{m}$  infolge einer Spannungserhöhung von  $\Delta V = 0.05\text{V}$ . Die Zeitachse beginnt hier bei  $t = 0.01\text{s}$ . Dies verdeutlicht, dass sich das erste zentrale Filament nach 1000 Perioden stabilisiert hat. Danach wurde die Spannungsamplitude um  $\Delta V$  erhöht.

7.17). Unmittelbar nach der Spannungserhöhung wird insgesamt mehr Ladung durch die ZnS:Mn-Schicht transferiert. Dies ist besonders gut an den Rändern ( $y = 0, 4 \mu\text{m}$ ) sowie in der Mitte ( $y = 2 \mu\text{m}$ ) des Bauelements für die momentane Anode zu erkennen (Abb. 7.17b.)). Direkt neben dem zentralen Grenzflächenfilament wird diese Erhöhung des Stroms durch die Form der Grenzflächenladungen erfolgreich unterbunden, so dass die Nebenmaxima an der Anode und der Kathode erhalten bleiben. Im weiteren Simula-

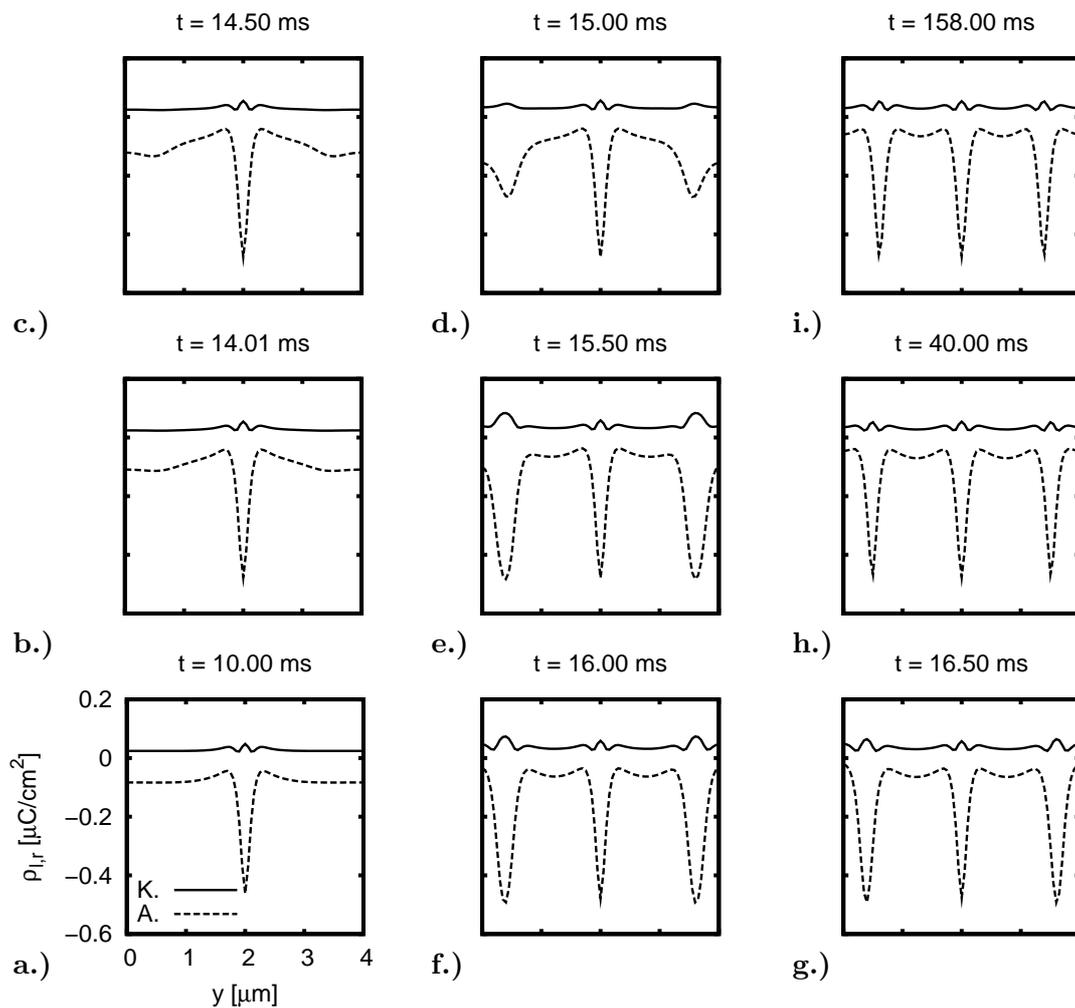


Abbildung 7.17: Räumliche Grenzflächendynamik für verschiedene Zeitpunkte der Simulation. Bild a.) zeigt das über die bistabile Anfangsbedingung erzeugte Startfilament. Danach ( $t > 10.00 \text{ ms}$ ) wird die Spannung erhöht. Man beachte die kurzen Zeitabstände in der Bildsequenz c.)-g.). Der Endzustand ist im Bild i.) dargestellt.

tionsverlauf nimmt diese Ladungsakkumulation noch weiter zu. Zum Zeitpunkt  $t = 14.50$  ms (Abb. 7.17c.)) tritt eine besondere Situation auf. Es sind zwei Zündprozesse an den Positionen  $y = 0.5$  und  $3.5 \mu\text{m}$  zu beobachten. Sie resultieren aus einer sich langsam entwickelnden transversalen inhomogenen Feldverteilung an den beiden Grenzflächen, die sich infolge der Tunnelstrominhibition rund um das zentrale Filament ergibt (Abb. 7.18). Diese Feldverteilung sorgt infolge von fokussierenden und defokussierenden transversalen Elektronenströmen für eine Anhäufung von negativer Ladung auf der momentanen Anode an den obengenannten  $y$ -Positionen (hier nur für  $y = 0.5 \mu\text{m}$  gezeigt). Durch die so erhöhte negative Ladung stehen immer mehr Elektronen in den Grenzflächenzuständen für die Tunnelinjektion bereit. Daraufhin fließt in diesen Bereichen ein höherer Elektronenstrom (größere übertragene negative Ladung, vgl. Abb. 7.17d.)), der dann über die gesteigerte Stoßionisation immer mehr Elektron-Loch-Paare erzeugt. Die Löcher werden in diesen Bereichen eingefangen und leiten somit den Aufbau von zwei positiven Raumladungsrprofilen ein. Die weitere Verstärkung der positiven Raumladungsrprofile verstärkt lokal das elektrische Feld an der momentanen Kathode und sorgt so für eine höhere Tunnelinjektion, die ihrerseits wieder einer Vergrößerung des lokalen Elektronenstroms und der lokalen Stoßionisation sorgt. Die resultierenden Löcher werden dann wieder eingefangen, was die positive Raumladung weiter verstärkt (Abb. 7.17e.)). Insgesamt entstehen auf den Grenzflächen zwei neue Ladungsfilamente, deren Form den bisher vorgestellten Filamenten wieder sehr ähnlich sind. Es sind aber noch leichte Unterschiede bezüglich der Filamentbreite zu erkennen. So sind die beiden neuen Filamente im Vergleich zum zentra-

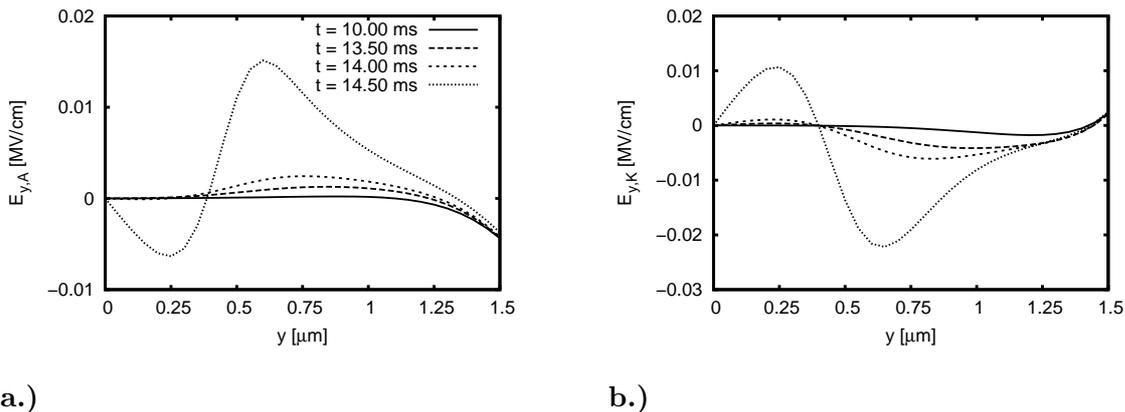


Abbildung 7.18: Transversale Feldverteilungen an der momentanen Anode a.) und Kathode b.) jeweils zu Beginn einer neuen Spannungsperiode. Dabei ist nur ein räumlicher Ausschnitt rund um einen Zündpunkt ( $y = 0.5 \mu\text{m}$ ) dargestellt. Die im Bild a.) eingetragenen Zeitpunkte gelten für beide Bilder.

len Filament ein wenig breiter (Abb. 7.17f.)). Dies liegt an dem noch nicht abgeschlossenen Stabilisierungsprozess. Schon in den Abbildungen 7.17d.)-f.) ist zu erkennen, dass sich die neu entstehenden Filamente infolge der fokussierenden Eigenschaften der anwachsenden positiven Raumladung einschnüren und sich somit dem zentralen Filament weiter anpassen. Dass gerade zwei Filamente entstehen, hängt entscheidend vom Abstand zwischen den beiden neuen Filamenten ab. Der Abstand ist in diesem Fall zu klein, um ein weiteres zu zünden. Durch die Stabilisierung wird sofort die Ladung zwischen diesen beiden Filamenten reduziert. Im weiteren Simulationsverlauf schnüren sich die beiden Filamente noch weiter ein und gleichzeitig bewegen sie sich zum Zentrum, so dass sich allmählich ein einheitlicher Filamentabstand einstellt (Abb. 7.17g.)-i.)). Dieser Abstoßungsprozess zwischen den neu hinzu gekommenen Filamenten ist in den Abbildungen 7.19 und 7.20 gut zu erkennen. Infolge der Abschirmung durch die neu hinzugekommenen ortsfesten positiven Raumladungsprofile und die dadurch resultierenden Grenzflächenladungen stellen sich zum jeweiligen Filamentzentrum unsymmetrische transversale Feldverteilungen ein (Abb. 7.19). Dadurch verlaufen die fokussierenden und defokussierenden Transportprozesse ebenfalls unsymmetrisch. Zur Diskussion betrachten wir beispielsweise das neue Filament am linken Bauteilrand. So werden zu Beginn der Stromflussphase die Elektronen im Bereich der momentanen Kathode stärker nach rechts (zur Bauteilmitte  $y = 2.0 \mu\text{m}$ ) als nach links (zum Bauteilrand) defokussiert. Im mittleren Bereich des Bauelements sowie an der momentanen Anode setzt sich dieser unsymmetrische Transport fort, nur mit dem Unter-

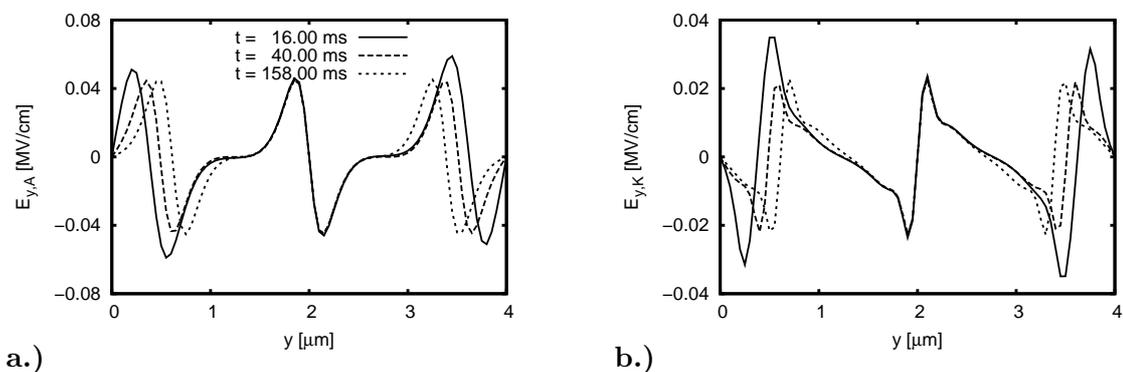


Abbildung 7.19: Räumliche Verteilung der transversalen Feldkomponenten an der momentanen Anode a.) und Kathode b.) zum Ende einer Periode. Die zunächst lokal unsymmetrische Feldanordnung für die neu dazukommenden Filamente sorgt für eine räumlich inhomogene Fokussierung bzw. Defokussierung der Ladungsträger. Dadurch stoßen sie sich voneinander ab. Mit zunehmender Simulationszeit werden die Feldkomponenten immer symmetrischer, was gleichbedeutend mit einer Abnahme der Abstoßung ist.

schied, dass hier die Elektronen unsymmetrisch ins Filamentzentrum fokussiert werden. Im Zeitintervall mit großer Tunnelinjektion kehren sich dann die transversalen Feldkomponenten an der momentanen Anode um, mit dem Resultat, dass die Elektronen nun stärker zur Bauteilmitte als zum Bauteilrand defokussiert werden. Dadurch sammeln sich auf der rechten Seite des Filaments mehr negative Ladungen auf der momentanen Anode an als auf der linken Seite, so dass die Grenzflächenladungsdichte aus der letzten Halbwelle nicht reproduziert (links weniger, rechts mehr) werden kann. An der momentanen Kathode werden auch weiterhin die Elektronen nach außen defokussiert. In dem betrachteten Zeitintervall sind hier die longitudinalen Feldstärken am größten. Dadurch tritt die Stoßionisation stark in Erscheinung, die aufgrund der stärkeren rechtsseitigen Defokussierung der Elektronen mehr Löcher im äußeren rechtsseitigen Bereich als im linksseitigen Bereich des Filaments

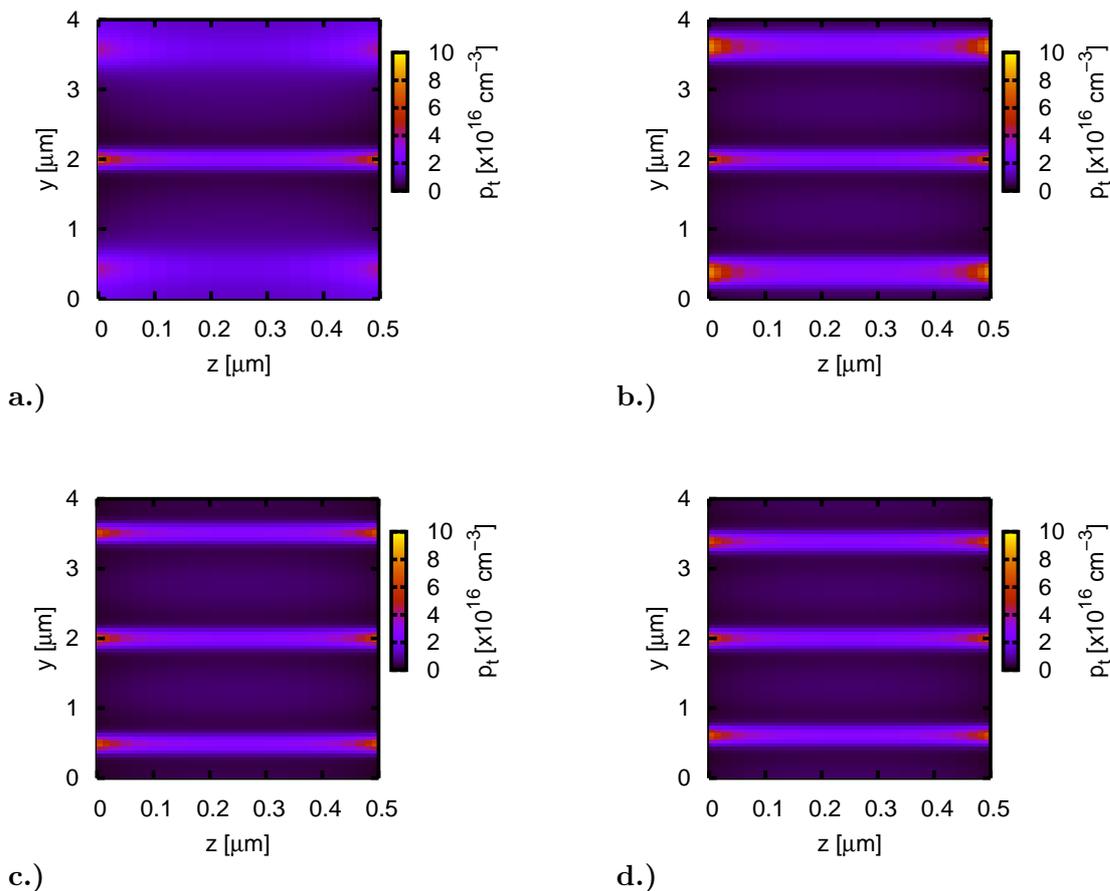


Abbildung 7.20: Zeitlich gemittelte positive Raumladungsprofile an vier verschiedenen Zeitpunkten: a.)  $t = 15.00$  ms, b.)  $t = 16.00$  ms, c.)  $t = 40.00$  ms, d.)  $t = 158.00$  ms.

generiert. Somit wird auch das Raumladungsprofil ungleichmäßig unterstützt. Betrachtet man dann die nächste Halbperiode, so nimmt das positive Raumladungsprofil auf der dem Bauteilrand zugewandten Seite leicht ab, da dort die Intensität der Tunnelinjektion aufgrund der geringeren negativen Grenzflächenladungsdichten (schwächere Defokussierung in vorheriger Halbperiode) nachlässt. Somit wird der Elektronenstrom reduziert und die Raumladung rekombiniert im Bereich der momentanen Kathode aufgrund schwächerer Stoßionisation und dadurch bedingter reduzierter Einfangrate. Außerdem resultiert daraus eine geringere negative Grenzflächenladung auf der momentanen Anode. Auf der anderen Seite des Raumladungsprofils ist die gegenteilige Situation zu erkennen. Dort wächst die Raumladung an, da der Tunnelstrom durch die anwachsenden Grenzflächenladungen (stärkere Defokussierung in vorheriger Halbperiode) erhöht wird. Aufgrund des höheren Elektronenstroms wird die Stoßionisation verstärkt, die dann die positive Raumladung in diesem Bereich anwachsen lässt. An dieser Stelle sei angemerkt, dass auch hier wieder die Teilchen gemäß obiger Diskussion fokussiert bzw. defokussiert werden. Somit verschieben sich beide Raumladungsprofile in die Richtung des zentralen Filaments (Abb. 7.20). Diese Filamentabstoßung kommt dann zum Erliegen, wenn die transversalen Feldkomponenten für eine in beide Richtungen gleichmäßige Fokussierung bzw. Defokussierung der Ladungsträger sorgen (Abb. 7.19). Im stationären Zustand stellen sich also in diesem Fall drei Stromfilamente ein, die alle die gleiche Form und ungefähr den gleichen räumlichen Abstand zueinander haben. Der Abstand ist bei genauer Betrachtung nicht exakt gleich. Damit dieser Zustand erreicht wird, müssen extrem viele Perioden gerechnet werden, da die Wechselwirkung mit zunehmenden Abstand immer kleiner wird (vgl. Diskussion oben).

### Laterale Bauteilbreite: 3 $\mu\text{m}$

Mit Hilfe der obigen Diskussion kann die Entwicklung der Ladungsfilamente auf den Grenzflächen der Abbildungen 7.15b.) und 7.15d.) leicht verstanden werden. Im Fall einer Bauteilbreite von 3  $\mu\text{m}$  entstehen zwei neue „halbe“ Filamente. Dies liegt im Wesentlichen in der reduzierten Periodizitätslänge (von 4 auf 3  $\mu\text{m}$ ) begründet. Die Ladungsinhomogenitäten auf den Grenzflächen versuchen in einem möglichst großen Gebiet um das Filamentzentrum eine Erhöhung der Tunnelinjektion zu verhindern (Abb. 7.21a.)). Durch die geringe Bauteilbreite bleibt nur ein sehr schmaler Bereich am Bauteilrand übrig, in dem durch eine inhomogene Feldverteilung überhaupt eine Zündung möglich ist (Abb. 7.21b.)). In diesem Fall ergibt sich nur eine Filamentzündung genau am Bauteilrand (Abb. 7.21c.)). Danach wird der Stabilisierungsmechanismus eingeleitet, der für die bekannte Filamentform auf der Grenzfläche sorgt.

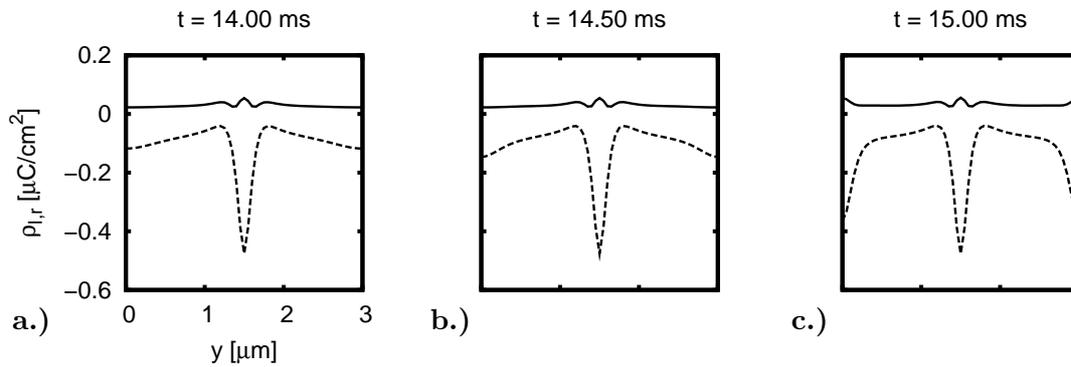


Abbildung 7.21: Räumliche Grenzflächendynamik für verschiedene Zeitpunkte der Simulation aus der Abbildung 7.15b.). Gezeigt wird hier nur der unmittelbare Zündprozess. Die Filamentanordnung im stationären Zustand ist in Abbildung 7.15b.) zu sehen.

### Laterale Bauteilbreite: $6 \mu\text{m}$

Bei Simulationen mit einer großen Periodizitätslänge entstehen auf dem Grundgebiet drei neue Filamente, die infolge eines scheinbar komplizierten Zündmechanismus entstehen (Abb. 7.22). Dem ist aber nicht so. Vielmehr ist die hier vorliegende Strukturierung der Grenzflächenladungsdichte eine Kombination der Prozesse, die für die Filamentierung in den Abbildungen 7.15b.) und 7.15c.) sorgt. Zunächst setzen wie im Fall der Abbildung 7.15c.) zwei Zündungen im Abstand von ca.  $1.5 \mu\text{m}$  vom zentralen Startfilament ein (Abb. 7.22a.)). Die beiden herauswachsenden Ladungsfilamente schnüren sich infolge des Stabilisierungsmechanismus ein (Abb. 7.22b.)). Bedingt durch den großen Abstand zwischen den beiden neuen Filamenten entstehen im zwischenfilamentären Bereich an den Positionen  $y = 0.5, 3.5 \mu\text{m}$  zwei weitere Ladungsinhomogenitäten, an denen eine Zündung möglich ist (Abb. 7.22c.)). Das System kommt dem auch nach, aber die darauf folgende Stabilisierung lässt beide Inhomogenitäten zu einem Filament verschmelzen (Abbn. 7.22d.)-f.)), da ihr gegenseitiger Abstand zu klein ist (vgl. Abb. 7.15b.)), so dass insgesamt drei Filamente durch die Spannungserhöhung hinzukommen.

### 7.2.2 Vergleich mit rauschinduzierten Filamentstrukturen

Mit dem oben abgeleiteten Mechanismus der Filamentwechselwirkung sollen nun die beiden rauschinduzierten Filamente der Abbildung 7.13b.) diskutiert werden. Sie wechselwirken auf dieselbe Art und Weise. Die beiden Stromfilamente zünden zufällig gerade soweit voneinander entfernt, so dass der Stabilisierungsmechanismus an der Grenzfläche zwei lokalisierte Filamente zulässt. Dennoch ist ihr gegenseitiger Abstand zunächst noch zu

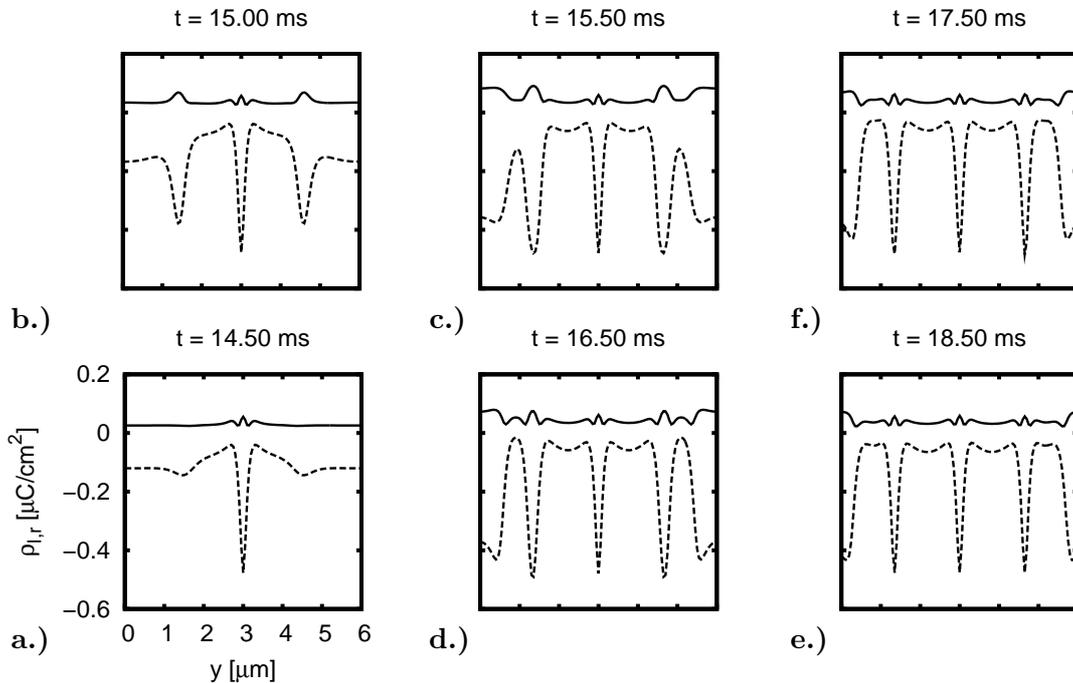


Abbildung 7.22: Räumliche Grenzflächendynamik für verschiedene Zeitpunkte der Simulation aus der Abbildung 7.15d.). Gezeigt werden hier nur die Zündprozesse.

klein. Für die abstoßende Wechselwirkung sorgen dann die transversalen Feldkomponenten, die über die Ladungsträgerfokussierung bzw. -defokussierung den lateralen Abstand vergrößern, bis sich ein ausreichender Abstand eingestellt hat. Eine endgültige Angabe des Abstands kann hier noch nicht angegeben werden, da der Abstoßungsprozess noch nicht vollständig abgeschlossen ist. Zum Simulationsende beträgt er immerhin schon ca.  $1 \mu\text{m}$ , was gut mit den Abständen aus dem Abschnitt 7.2.1 zusammenpasst. Im Gegensatz zu den Simulationen mit zentriertem Startfilament und einer Bauteilbreite von  $2 \mu\text{m}$  entwickeln sich hier im Fall des statischen Rauschens zwei Filamente. Der entscheidende Parameter neben dem Rauschterm ist die Spannungsamplitude. Sie liegt in diesem Fall unterhalb der Schwelle in der  $Q_{1/2}$ -U-Kennlinie. Im Fall der bistabilen Anfangsbedingung liegt sie knapp oberhalb der Schwelle, so dass (vgl. Abb.7.15a.)) eine weitere Filamentzündung im restlichen Simulationsgebiet sehr effektiv unterbunden wird.

Zum Schluss werden noch zwei Simulationen mit zeitlichem Rauschen gezeigt, bei denen ebenfalls die transversale Bauteilbreite verändert wurde. Damit kann untersucht werden, ob sich auch hier annähernd eine homogene Filamentierung ergibt und ob auch zeit-

verzögerte Filamentzündungen möglich sind. Auch hier zeigt sich wieder die bekannte

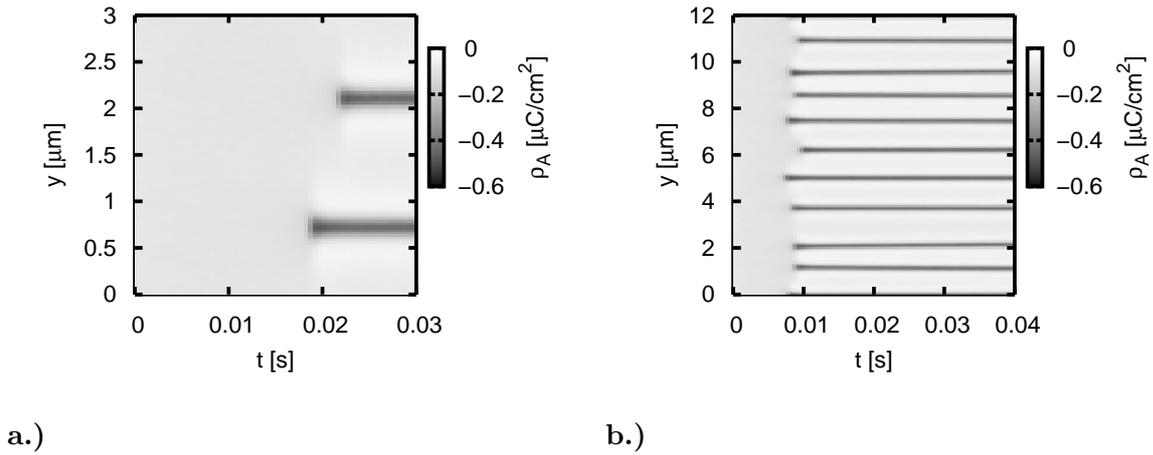


Abbildung 7.23: Grenzflächenladungsdynamik auf der momentanen Anode zum Ende einer Periode für zwei verschiedene Bauteilbreiten: a.)  $3 \mu\text{m}$ , b.)  $12 \mu\text{m}$ . Die Spannungsamplitude beträgt  $151.14 \text{ V}$ .

Situation. Zu Beginn bleiben die Systeme in transversaler Richtung homogen. Erst nach ca.  $0.018 \text{ s}$  (Abb. 7.23a.) bzw.  $0.008 \text{ s}$  (Abb. 7.23b.) treten die ersten Filamentzündungen auf. Im Gegensatz zur Abbildung 7.13b.) zünden in beiden Simulationen die Filamente zeitversetzt. In der Simulation 7.23a.) ist keine Filamentwechselwirkung zu erkennen. Der Grund hierfür ist, dass das zweite Filament zufällig genau in der Mitte (periodische Randbedingungen) der zuerst gezündeten Filamente entsteht. Somit haben die Filamente sofort den optimalen Abstand (ca.  $1.5 \mu\text{m}$ ) zueinander erreicht. In der Simulation 7.23b.) ist die Situation ein wenig anders. Aufgrund der großen Bauteilbreite treten deutlich mehr zeitversetzte Filamentzündungen auf. Neben dem vorhin besprochenen Effekt, dass zusätzliche Filamente offenbar bevorzugt in der Mitte zwischen zwei schon existierenden Filamenten zünden, treten auch Filamente auf, die in einem sehr geringen Abstand voneinander zünden. Dann tritt zwischen den beiden Inhomogenitäten eine abstoßende Kraft auf, die den gegenseitigen Abstand vergrößert. So stellt sich wieder ein Mindestabstand von ca.  $1 \mu\text{m}$  ein. Insgesamt ergibt sich in diesem Fall eine Filamentierung, in der die einzelnen Filamente nicht immer den gleichen Abstand haben.

### 7.2.3 Einfluss einer Spannungserhöhung auf weitere Filamentzündungen

In Kapitel 7.2.2 wurde die Filamentwechselwirkung untersucht, indem ausgehend von einem Startfilament die Spannung knapp über die Schwelle der  $Q_{1/2}$ -U-Kennlinie (vgl. Abb. 7.1b.)) erhöht wurde. Dadurch zündeten je nach Bauteilbreite (vgl. Abb. 7.15) neben dem alten Filament weitere Filamente. Nun soll untersucht werden, wie sich das System bei einer größeren Spannungserhöhung verhält. Dabei sei angemerkt, dass die Simulationen immer mit dem selben Startfilament als Anfangsbedingung gestartet werden. Die Ergebnisse sind in der Abbildung 7.24 dargestellt, wobei das Bild a.) schon in Abbildung 7.16 gezeigt wurde. Für eine Spannungserhöhung unmittelbar über der Schwelle (151.2 V, Abb.

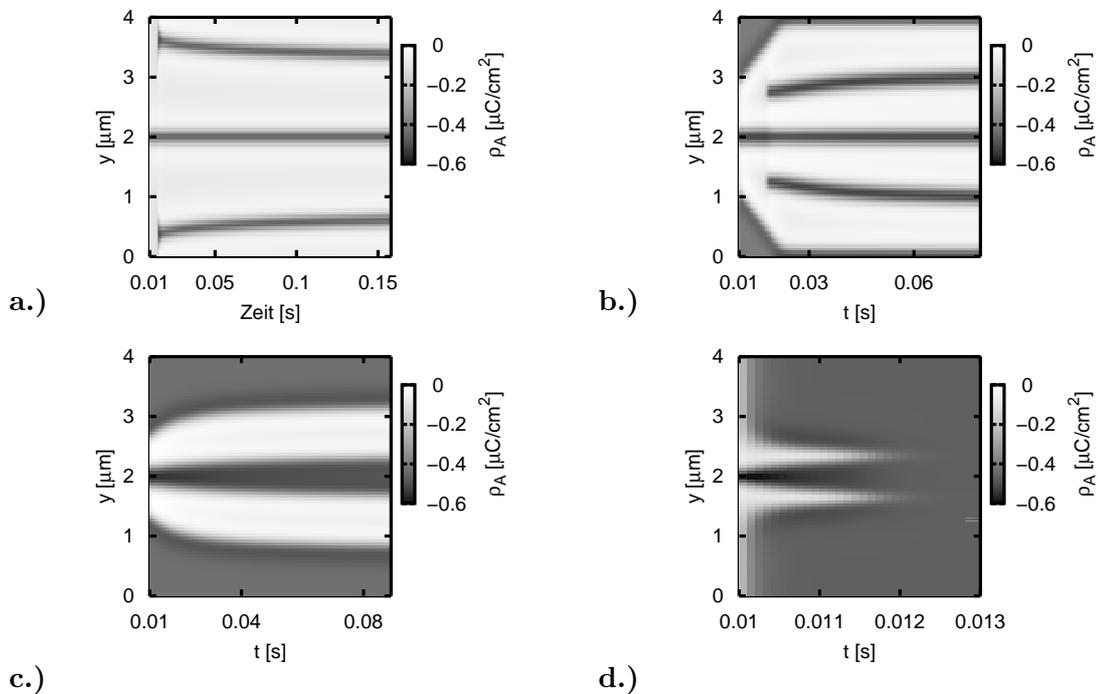


Abbildung 7.24: Grenzflächenladungsdynamik an der momentanen Anode zum Ende einer Periode für verschiedene Spannungsamplituden: a.) 151.2 V, b.) 151.5 V, c.) 152.0 V und d.) 152.7 V.

7.24a.)) hinweg kann das System, wie im Abschnitt 7.2.2 diskutiert, zwei neue Filamente stabilisieren. Der Filamentabstand beträgt in diesem Fall ca. 1.2-1.3  $\mu\text{m}$ . Wird die Spannungserhöhung größer gewählt (151.5 V, Abb. 7.24b.)), so nimmt die Filamentdichte zu. Es kommen dann drei neue Filamente hinzu, wobei sich der Filamentabstand auf 1.0  $\mu\text{m}$  reduziert. Zuerst entwickeln sich zwei breite Inhomogenitäten in der Nähe des zentralen Filaments. Im Zuge ihrer Stabilisierung tritt eine Verkleinerung der Inhomogenitäten

ein. Obwohl sie ihre endgültige Form noch nicht eingenommen haben, zündet infolge der erhöhten Spannungsamplitude jeweils im Bereich zwischen dem alten und dem sich noch weiter stabilisierenden Filament eine weitere Inhomogenität. Im Laufe der weiteren Simulation versucht das System wieder gleich große Filamentabstände einzustellen. Der Abstand der Zündung der beiden neuen Filamente in unmittelbarer Nachbarschaft des zentralen Filaments ist zu klein, woraufhin sich beide Filamente vom zentralen Startfilament abstoßen. Man kann also auch hier die Filamentwechselwirkung gut beobachten. Insgesamt stellen sich aufgrund des erhöhten Stroms breitere und größere Ladungsfilamente an den beiden Grenzflächen ein. Fällt die Spannungserhöhung noch stärker aus, so nähert man sich immer mehr dem Fall einer homogenen Zündung. Im Falle einer Spannung vom 152.0 V (Abb. 7.24c.) zünden neben dem Startfilament zwei breite Filamente, die sich direkt nach der Zündung verkleinern. Im weiteren Simulationsverlauf findet aber kaum noch eine Reduzierung der neuen Filamente statt. Dafür dehnt sich das zentrale Filament kontinuierlich aus. Das System versucht offenbar wieder eine homogene Filamentierung einzustellen. Dieser Prozess verläuft nur sehr langsam. Um dies weiter zu untersuchen, müssen noch sehr viele Spannungsperioden simuliert werden. Dies ist aber mit den zur Verfügung stehenden Computerressourcen nur schwer möglich, da sehr viel Rechenzeit benötigt wird. Aber trotzdem wird eine Tatsache sehr deutlich. Je größer die Spannungserhöhung gewählt wird, desto näher zünden die Filamente am zentralen Filament und umso schwieriger ist es für das System eine homogene Filamentierung einzustellen. Wird die Spannungserhöhung noch größer gewählt (152.7 V, Abb. 7.24d.), so wird das gesamte Simulationsgebiet in einen Hochstrombereich versetzt. Die Zündung erfolgt dann zu dicht am Startfilament und folglich verschmelzen die einzelnen Filamente zu einem homogenen Hochstrombereich.

#### 7.2.4 Einfluss einer Spannungssenkung auf die Filamentierung

Im vorherigen Abschnitt wurde die Filamentierung in Abhängigkeit einer weiteren Spannungserhöhung untersucht. Nun soll die gegenteilige Situation diskutiert werden. Ausgehend von einer Filamentierung, die z.B. in der Abbildung 7.24b.) zu sehen ist, wird die Spannung gesenkt. Dabei ist folgendes Szenario zu beobachten. Durch die Verkleinerung der Spannungsamplitude wird das longitudinale Feld reduziert und somit fließt weniger Strom durch die ZnS:Mn-Schicht. Daraufhin wird die positive Raumladung reduziert, da nicht genügend Elektron-Loch-Paare über die Stoßionisation erzeugt werden, um das bisherige Raumladungsprofil aufrecht zu erhalten. Somit wird insgesamt weniger Ladung durch die Zinksulfidschicht transferiert, was sich in verringerte Ladungsdichten an den Grenzflächen bemerkbar macht. Dadurch werden auch die transversalen Feldkomponenten geschwächt, die sich infolge der positiven Raumladung und den Grenzflächenladungen

ausbilden. Insgesamt bleibt für Spannungssenkungen  $\Delta U$ , wobei die resultierende Spannung oberhalb der Schwelle für den un stetigen Sprung vom oberen zum unteren Zweig liegt, die bestehende Filamentierung erhalten. Lediglich die Ladungsspitzenwerte sind minimal reduziert. Kritisch wird es erst, wenn die Amplitude noch weiter, also in den bistabilen Bereich der Kennlinie hinein, abgesenkt wird. Es zeigt sich dann auch hier das typische Schwellenverhalten, was schon im Zusammenhang mit der Filamentstabilisierung angesprochen wurde. Für Spannungsamplituden knapp unterhalb der Schwellenspannung (vgl. Abb. 7.1b.)) bleibt die bestehende Filamentierung immer noch erhalten, wobei dann die Ladungsspitzen an den Grenzflächen deutlich kleiner werden. Parallel dazu ist eine Verbreiterung des Filaments zu beobachten, was damit zusammenhängt, dass der Fokussierungsmechanismus infolge der Raumladung und der Grenzflächenladungen nicht mehr so effektiv ist. Beide Veränderungen treffen alle Filamente gleichzeitig. Bei noch größeren Amplitudenverkleinerungen verschwinden dann alle Filamente, so dass sich insgesamt die Lösung des unteren Zweiges der Hysterese durchsetzt. Somit sind alle Hochstrombereiche abgebaut.

## Kapitel 8

# Numerische Ergebnisse für drei Raumdimensionen

Um die Simulationsergebnisse mit experimentellen Beobachtungen vergleichen zu können, muss die hier aufgestellte Transportsimulation um die restliche Raumdimension ( $x$ -Richtung) erweitert werden. Die bisher durchgeführten zweidimensionalen Simulationen können naturgemäß noch keine endgültige Aussage über die Form der Filamente machen. Wir haben bisher gewissermaßen nur unendlich dicke Streifen als Leuchtmuster identifiziert. Die experimentell beobachteten stationären Mikrofilamente (Abb. 3.14, 3.13) haben selbstverständlich eine dreidimensionale Struktur. Sie haben in der Beobachtungsebene eine kreisförmige Ausdehnung. Daher soll nun der Frage nachgegangen werden, welche Form die in der 2D Simulation erhaltenden Filamente in der entsprechenden 3D Simulation annehmen. Zusätzlich soll wieder die Filamentwechselwirkung genauer untersucht werden. Dabei ist von besonderem Interesse, wie sich die einzelnen Filamente in der  $xy$ -Ebene anordnen. In den nachfolgenden Abschnitten sollen nun die ersten dreidimensionalen Simulationsergebnisse präsentiert werden.

Bevor damit begonnen wird, sind noch einige ergänzende Bemerkungen (vgl. Kap. 5.2) zur numerischen Simulation nötig. Die Lösung des dreidimensionalen Transportmodells ist aus numerischer Sicht sehr aufwändig, da die auftretenden linearen dünnbesetzten Gleichungssysteme sehr groß werden. Daher wird, obwohl iterative Lösungsverfahren verwendet werden, der Zeitaufwand immer größer um die Lösung für einen Zeitschritt zu berechnen. Natürlich ist man jetzt an einer besonders feinen Auflösung in der  $xy$ -Ebene interessiert, damit die Filamentform besonders gut untersucht werden kann. Aber gerade diese Diskretisierungspunkte machen die Simulationen aufwändiger, da die Anzahl der  $x$ - und  $y$ -Punkte die Bandbreite der entsprechenden Koeffizientenmatrix bestimmen (vgl.

Abb. C). Um aber dennoch mit einer akzeptablen Auflösung in der xy-Ebene rechnen zu können, wurde die Anzahl der Stützpunkte in z-Richtung reduziert, damit die Simulationen nicht zu viel Zeit in Anspruch nehmen. Die Simulationsparameter sind die gleichen wie in der Tabelle 7. Es müssen nur noch die Parameter, die die dritte Raumdimension betreffen, hinzugefügt werden.

Spannung:	Wechselspannung: $f = 100$ kHz
Bauteilabmessungen:	Isolatoren: $0.3 \times 2 \times 2 \mu\text{m}^3$ ZnS:Mn: $0.5 \times 2 \times 2 \mu\text{m}^3$
Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit:	$s_n = 10 \times 10^6$ cm/s $s_p = 10 \times 10^6$ cm/s
Einfangkoeffizient:	$\gamma = 1 \times 10^{-6}$ cm <sup>3</sup> /s
Rekombinationswirkungsquerschnitt:	$\sigma = 1 \times 10^{-14}$ cm <sup>2</sup>
Grenzflächenzustandsdichte:	$n_{\text{ss}} = 5 \times 10^{13}$ cm <sup>-2</sup> eV <sup>-1</sup>
Löcherfallendichte:	$p_{\text{max}}^t = 1 \times 10^{18}$ 1/cm <sup>3</sup>
Löcheremissionsrate:	$\beta = 5 \times 10^4$ 1/s
Dielektrizitätskonstanten:	Isolator: $\varepsilon_{\text{is}} = 14$ ZnS:Mn: $\varepsilon_{\text{s}} = 8$
Mobilitätskonstanten:	$\mu_{n_{z,y,x}} = 165$ cm <sup>2</sup> /Vs $\mu_{p_{z,y,x}} = 5$ cm <sup>2</sup> /Vs
Teilchentemperaturen:	$T_{n_{z,y,x}} = 300$ K $T_{p_{z,y,x}} = 300$ K
Pos. d. Grenzfl.-zustände (unter LB-Kante):	$\epsilon_0 = 0.9$ eV

Tabelle 8.1: Basissatz für die Parameter der 3D Simulationen. Änderungen der Parameter für die Untersuchung spezieller Effekte werden dann im nachfolgenden Text gesondert angegeben.

## 8.1 Filament durch bistabile Anfangsbedingung

Um zu untersuchen, ob die 3D Simulation ein kreisförmiges Filament liefert, berechnen wir die Lösung des Transportproblems infolge einer bistabilen Anfangsbedingung, die sich aus einer entsprechenden 1D Simulation ergibt. Die resultierende  $Q_{1/2}$ U-Kennlinie ist in der Abbildung 8.1 zu sehen. Dabei ist anzumerken, dass aufgrund der reduzierten Diskretisierung in z-Richtung die absoluten Werte der Kennlinie nicht exakt mit der  $Q_{1/2}$ U-Kennlinie aus Abbildung 7.1b.) übereinstimmen. Außerdem hat sich die Hysteresebreite leicht ver-

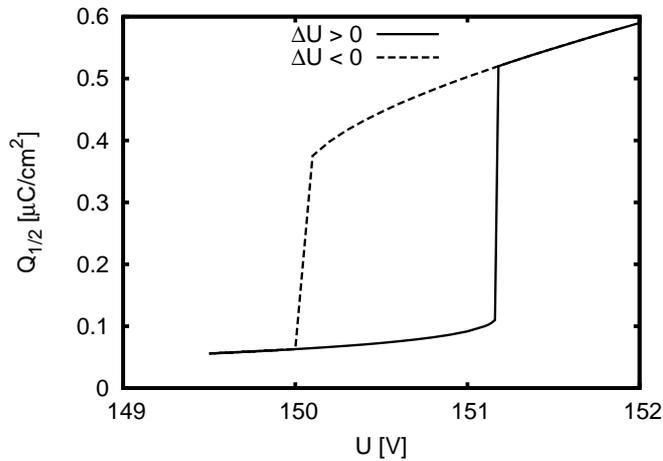


Abbildung 8.1:  $Q_{1/2}U$ -Kennlinie bei reduzierter Diskretisierung in  $z$ -Richtung (vgl. 7.1b.))

breitert. Das Startfilament hat dabei eine quadratische Ausdehnung. In diesem Simulationsbeispiel ist die Diskretisierung der  $xy$ -Ebene nicht äquidistant. Um eine möglichst feine Auflösung zu erreichen, ist der Bereich in unmittelbarer Umgebung des Startfilaments wesentlich feiner diskretisiert als die Randbereiche der Ebene.

Wie in der Abbildung 8.2 zu sehen ist, stellt sich in der Tat auf den beiden Grenzflächen eine kreisförmige Ladungsinhomogenität aufgrund des innerhalb der  $\text{ZnS:Mn}$ -Schicht fließenden Stromes auf den beiden Grenzflächen ein. Dabei sind weiterhin wichtige Details, die auch schon in der 2D Simulation auftauchten, hier wieder zu erkennen. Auf der momentanen Kathode (Abb. b.)) sind wieder die Nebenmaxima zu beobachten, die sich nun ringförmig um das zentrale Maximum gruppieren. An den Positionen, an denen die Nebenmaxima in der Ladungsverteilung der Kathode auftreten, treten korrespondierende Nebenmaxima in der Ladungsverteilung der momentanen Anode (Abb. a.)) auf. Analog zur 2D Simulation verhindert diese spezielle Ladungsverteilung auf den Grenzflächen eine weitere Ausdehnung des Filaments, da aufgrund der Nebenmaxima in unmittelbarer Nähe rund um das Filament ein deutlich reduzierter Strom fließt. Der lokal dort fließende Elektronenstrom kann zusammen mit der vorliegenden elektrischen Feldverteilung keine massive Stoßionisation auslösen, die für den Aufbau einer positiven Raumladungsdichte und der daraus resultierenden Feldverstärkung notwendig ist. Der Stabilisierungsprozess verläuft wieder mit Hilfe der Ladungsträgerfokussierung und Ladungsträgerdefokussierung an den Grenzflächen und entlang des Raumladungsprofils. Der Vergleich zu einer entsprechenden zweidimensionalen Simulation zeigt, dass die Struktur der dreidimensionalen Ladungsfilamente auf den beiden Grenzflächen identisch zum 2D Fall ist. Die absoluten

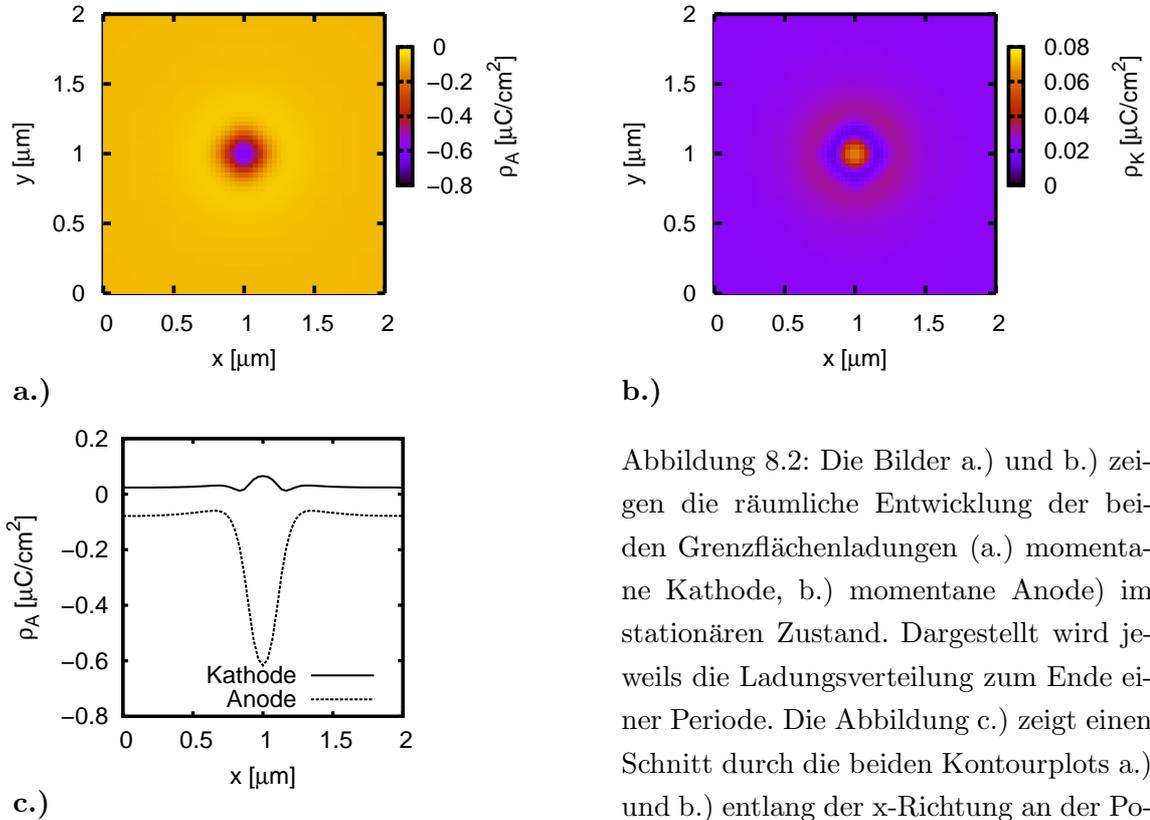


Abbildung 8.2: Die Bilder a.) und b.) zeigen die räumliche Entwicklung der beiden Grenzflächenladungen (a.) momentane Kathode, b.) momentane Anode) im stationären Zustand. Dargestellt wird jeweils die Ladungsverteilung zum Ende einer Periode. Die Abbildung c.) zeigt einen Schnitt durch die beiden Kontourplots a.) und b.) entlang der x-Richtung an der Position  $y = 1 \mu\text{m}$ . Die Spannungsamplitude beträgt 151.16 V.

Werte stimmen noch nicht vollständig überein, da der Stabilisierungsprozess noch nicht vollständig abgeschlossen ist. Es wären also noch viele weitere Simulationsperioden nötig, um die endgültige Form zu diskutieren. Dies bedeutet bei der hier gewählten Ortsdiskretisierung in der xy-Ebene eine sehr große Simulationsdauer auf dem Rechner. Die bisher durchgeführten Simulationen zeigen aber eindeutig die Tendenz, dass das Filament nahezu den gleichen Durchmesser annehmen wird wie in der entsprechenden 2D Rechnung. Natürlich könnte man die Diskretisierung in der xy-Ebene verringern um Rechenzeit zu sparen. Diese Reduzierung geht dann aber zu Lasten der kreisförmigen Filamentstruktur. Die Inhomogenität erscheint dann immer eckiger. Somit kann andererseits die Frage eines runden 3D Filaments nicht ausreichend diskutiert werden.

Auch hier sei kurz angemerkt, dass die Filamentstabilisierung nur relativ nahe an der Schwelle der  $Q_{1/2}$ -U-Kennlinie für den Sprung vom unteren auf den oberen Ast möglich ist. Ist die Spannung zu klein gewählt, so wird die Anfangsinhomogenität kontinuier-

lich abgebaut und es resultiert somit im periodisch stationären Zustand kein lokalisierter Hochstrombereich. Außerdem wurden auch hier verschiedene Startfilamente getestet. Dabei wurde sowohl die Form als auch die räumliche Ausdehnung verändert. Wird z.B. ein schmales Rechteck als Anfangsbedingung gewählt, so bildet sich ebenfalls daraus ein kreisförmiges Filament heraus. Selbstverständlich können auch einzelne Filamente mit Hilfe des in Kapiteln 7.1.5.1 und 7.1.5.2 benutzten Rauschterms erzeugt werden. Es zeigt sich auch hier unter der Voraussetzung kleiner Rauschamplituden die Unabhängigkeit der Filamentform von der Art der Störung (vgl. Abb. 7.10).

## 8.2 Multifilamente und Filamentwechselwirkung

In diesem Abschnitt soll nun die Wechselwirkung zwischen mehreren Filamenten untersucht werden. Um dies durchzuführen, muss das System natürlich in die Lage versetzt werden, weitere Filamente zu zünden. Dies wurde im Fall der Lösung des zweidimensionalen Transportproblems auf zwei verschiedene Vorgehensweisen ermöglicht. Der erste Weg bestand darin, die Simulation mit einer bistabilen Anfangsbedingung zu starten. Sobald sich eine runde Filamentstruktur stabilisiert hat, d.h. die pro Halbperiode übertragende Ladung ist näherungsweise konstant, wird die anliegende Spannungsamplitude über die Schwelle hinweg leicht erhöht. Damit wird das System prinzipiell in die Lage versetzt, weitere Filamente zu zünden. Die andere Möglichkeit besteht darin, die Simulationen einem kleinem Rauschen zu unterwerfen. Auch hier wird wieder die Variable  $\varepsilon_0(x, y)$ , die die energetische Lage der Grenzflächenzustände angibt, verwechselt. Nun werden die Ergebnisse beider Methoden diskutiert, wobei zusätzlich noch die Größe des Grundgebiets verändert wird.

### 8.2.1 Filamentzündung durch Spannungserhöhung über die Schwelle

Wir präparieren das System gemäß der obigen Anleitung. Sobald sich das erste zentrale Filament stabilisiert hat, wird die Spannung auf 151.3 V erhöht. Diese Simulationemethode wird für vier verschiedene Größen der xy-Ebene durchgeführt. Dabei wurde im Vergleich zu den Simulationen im Abschnitt 8.1 die Diskretisierung der xy-Ebene wieder vergrößert. Somit erscheinen die einzelnen Filamente zunehmend eckiger. Dieser Kompromiss ist aber nötig, da man nun möglichst viele Spannungsperioden simulieren möchte. Die Simulationsergebnisse sind in der Abbildung 8.3 zusammengefasst.

Im Fall des kleinsten Grundgebiets von  $1 \mu\text{m}^2$  (Abb. 8.3a.) kann kein weiteres Filament zünden, obwohl das System aufgrund der  $Q_{1/2}U$ -Kennlinie dazu eigentlich in der Lage sein müsste. Die Situation hier ähnelt sehr stark der, die im Kapitel 7.2.1 (Abb.

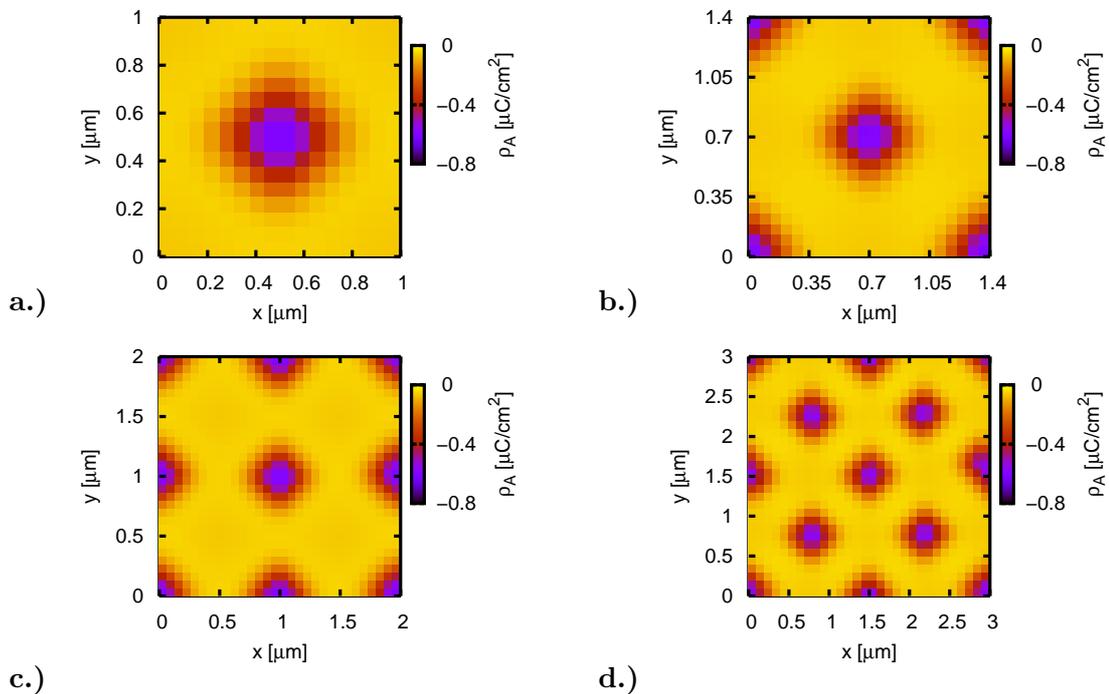


Abbildung 8.3: Grenzflächenladungen an der momentanen Anode zum Ende einer Periode für verschiedene Grundgebietsgrößen: a.)  $1 \mu\text{m}^2$ , b.)  $1.96 \mu\text{m}^2$ , c.)  $4.0 \mu\text{m}^2$  und d.)  $9.0 \mu\text{m}^2$ . Spannung: 151.3 V.

7.15a.)) vorliegt. Es fließt zwar geringfügig mehr Strom durch die ZnS:Mn-Schicht, was z.B. in dem leicht vergrößerten Startfilament sichtbar wird. Aber insgesamt verhindert wieder die spezielle Anordnung der Grenzflächenladungen eine merklich höhere Tunnelinjektion und somit einen höheren Gesamtstrom in der Umgebung des zentralen Filaments. Aufgrund der periodischen Randbedingungen stehen die zuerst gezündeten Filamente zu dicht zusammen, so dass kein Platz für ein weiteres Filament ist. Eine andere Situation ergibt sich bei einer Grundgebietsvergrößerung auf  $1.96 \mu\text{m}^2$  (Abb. 8.3b.)). In diesem Fall ist das Grundgebiet größer als die Reichweite der Tunnelstrominhibition und folglich können mehrere Filamente in den Ecken der xy-Ebene, also in der Mitte der Verbindungsline zweier Startfilamente, zünden. Durch die periodischen Randbedingungen ist jeweils nur ein Viertel der Struktur zu erkennen. Folglich liegt der Abstand vom zentralen Filament zum nächsten Nachbarn bei ca.  $1 \mu\text{m}$ . Bei weiterer Grundgebietsvergrößerung ( $4.0 \mu\text{m}^2$  Abb. 8.3c.) u.  $9.0 \mu\text{m}^2$ , Abb. 8.3d.)) kommen zusätzliche Filamente hinzu. Man erhält eine räumlich periodische Anordnung der Filamente, wobei der Abstand zum nächsten Nachbarn stets ca.  $1 \mu\text{m}$  beträgt. In diesem Beispiel lohnt ein Blick auf die zeitliche Entwicklung der Grenzflächenladungsdichten um den Zündprozess besser zu erläutern (Abb.

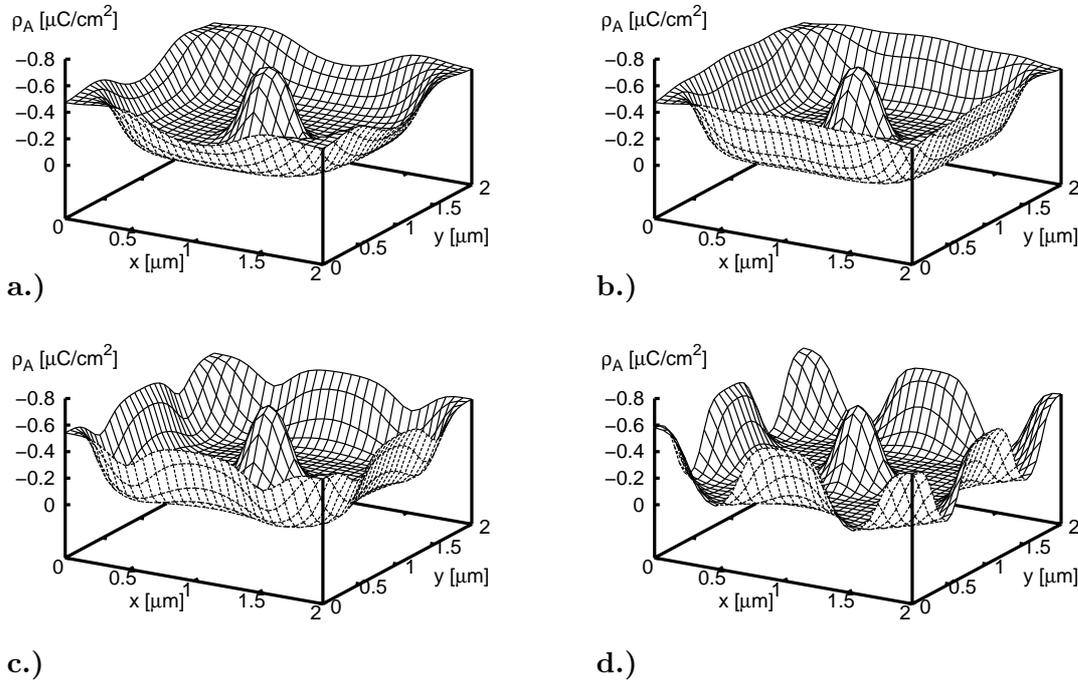


Abbildung 8.4: Zeitliche Entwicklung der Filamentzündung. Dargestellt ist die Grenzflächenladungsdichte an der momentanen Anode zum Ende einer Periode für vier verschiedene Zeitpunkte: a.)  $t = 9$  ms, b.)  $t = 9.9$  ms, c.)  $t = 12.3$  ms, d.)  $t = 14.4$  ms. Spannung: 151.3 V.

8.4).

Infolge der Spannungserhöhung fließt unmittelbar ein höherer Strom. Dies macht sich besonders im Bereich des zentralen Filaments und an den Rändern des Grundgebiets deutlich. In der Umgebung um das zentrale Filament wird die Stromzunahme durch die Nebenmaxima der Grenzflächenladungsdichten verhindert. Mit zunehmender Simulationszeit führt dieser Prozess zur Filamentzündung am Rand des Grundgebiets, wobei in den Ecken des Grundgebiets deutlich mehr Ladung infolge des Stroms übertragen wird, als in den restlichen Zündbereichen (Abb. 8.4a.)) Es stellt sich also eine räumlich inhomogene Zündung ein. Sofort nach der Zündung versucht das System, einzelne Filamente zu stabilisieren (Abb. 8.4b.)). Dies wird auch hier wieder mit Hilfe der Ladungsträgerfokussierung und Ladungsträgerdefokussierung erreicht. Sie ist nun aufgrund der zweidimensionalen Anordnungsmöglichkeit der Filamente viel komplizierter. Aufgrund der größeren Ladungsdichte und der besseren Zündposition werden zuerst die Filamente in den Ecken des Grundgebiets stabilisiert (Abb. 8.4c.)-d.)). Dieser Einschnürungsprozess führt zu einer deutlichen Ladungsreduzierung in der Umgebung der Grundgebietsecken mit dem

Ergebnis, dass sich dort kreisförmige Filamente bilden. Die daraufhin übrig bleibenden Grenzflächeninhomogenitäten im mittleren Randbereich haben nicht die vom System bevorzugte kreisförmige Form. Auch diese werden dann mittels Ladungsträgerdrift und Ladungsträgerdiffusion kreisförmig stabilisiert. Es stellen sich also dort auch kreisförmige Filamente ein. Insgesamt ist die Stabilisierung erst dann abgeschlossen, wenn alle Filamente eine einheitliche Gestalt besitzen (Abb. 8.3c.).

Bei einer weiteren Vergrößerung des Grundgebiets auf  $9 \mu\text{m}^2$  (Abb. 8.3d.)) setzt sich die periodische Anordnung der Filamente fort. Der Abstand zum nächsten Nachbarn liegt auch hier bei ca.  $1 \mu\text{m}$ . Auch hier ist der Zündungsprozess sehr interessant. Zuerst zünden die Filamente an den Rändern des Grundgebiets, wobei auch hier die Ladungsinhomogenitäten in den Grundgebietsecken deutlich größer sind als die in den Randmitten. In den Ecken werden dann die Filamente zuerst stabilisiert. Darauf erfolgt die Stabilisation der mittleren Randfilamente. Ist ihre Stabilisation näherungsweise abgeschlossen, zünden fast simultan nacheinander die vier direkten Nachbarfilamente des zentralen Filaments, da der Abstand zwischen dem zentralen Filament zu seinen nächsten Nachbarn offenbar zu groß ist, so dass ein erhöhter Tunnelstrom nicht komplett in dem betreffenden Raumbereich verhindert werden kann.

### 8.2.2 Filamentzündung durch Rauschen

Nun wird die zweite Methode eingesetzt, um Filamente zu erzeugen. Dabei wird die Simulation mit einer homogenen Anfangsbedingung und einem kleinen Rauschterm gestartet. Die angelegte Spannung liegt knapp unterhalb der Schwelle für den Sprung vom unteren auf den oberen Ast der Hysteresekurve. Um auch hier Rechenzeit zu sparen, wird die homogene Anfangsbedingung mit Hilfe der entsprechenden 1D Simulation bestimmt. Das Ergebnis einer solchen Simulation ist in der Abbildung 8.5 dargestellt. Analog zu den vorauschten 2D Simulationen (vgl. Kap. 7.1.5.1 u. 7.1.5.2) bleibt die 3D Simulation für  $t < 8$  ms räumlich homogen in der xy-Ebene. Wird diese Zeit überschritten, so treten mehrere räumlich unstrukturierte Ladungsinhomogenitäten auf den beiden Grenzflächen auf, die auf entsprechende Hochstrombereiche innerhalb der ZnS:Mn-Schicht hindeuten. Mit zunehmender Simulationszeit versucht das System aus diesen Inhomogenitäten einzelne kreisförmige Filamente zu stabilisieren. An einigen Stellen gelingt dies relativ schnell. So erkennt man beispielsweise drei runde Filamente, die alle drei auf einer Geraden liegen und jeweils ungefähr den gleichen Abstand zueinander haben. In diesem Bereich deutet sich schon eine periodische Struktur an. Andererseits bleibt infolge der Stabilisierungsprozesse der anderen Filamente eine längliche Inhomogenität im oberen Bereich des Grundgebiets übrig, die sich nur sehr langsam reduziert. Die Zeitentwicklung lässt vermuten, dass sich

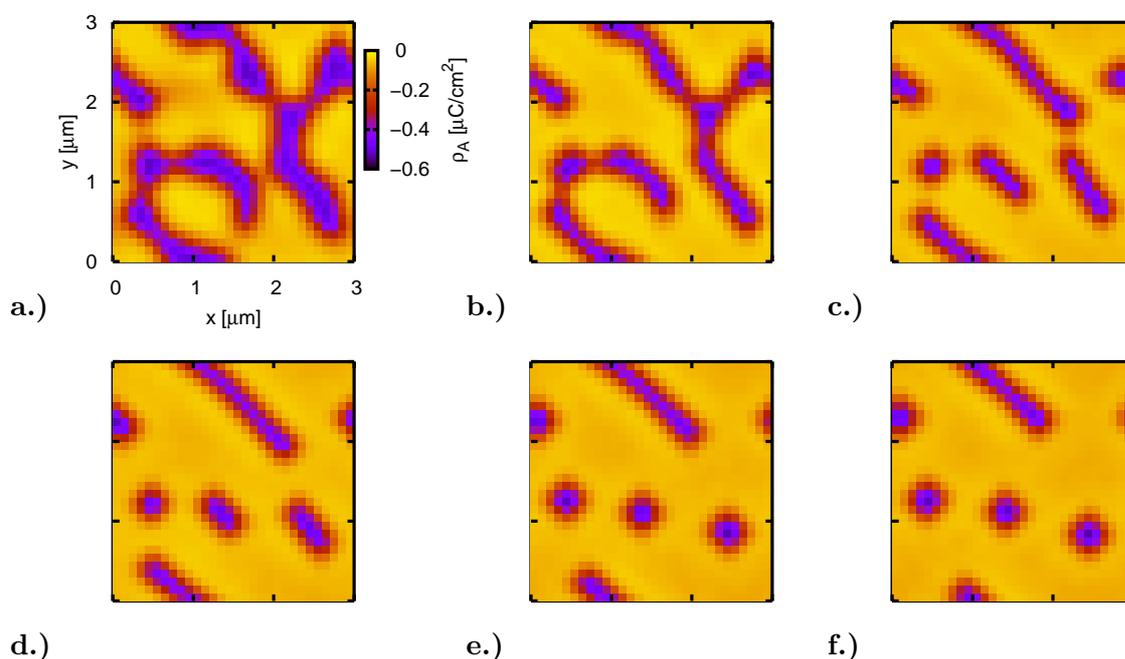


Abbildung 8.5: Zeitliche Entwicklung der Grenzflächenladung an der momentanen Anode zum Ende eine Periode. Zeitpunkte: a.) 8 ms, b.) 10 ms, c.) 14 ms, d.) 18 ms, e.) 30 ms und f.) 46 ms. Größe des Grundgebiets:  $9 \mu\text{m}^2$ .

aus dieser Inhomogenität ebenfalls ein kreisförmiges Filament herausbildet. Wenn dies der Fall ist, dann würde es ein relativ großes Gebiet in der  $xy$ -Ebene geben, in dem kein Stromfilament existiert. Die Vermutung liegt dann nahe, dass dann dort weitere Filamente zünden können, die anschließend mit den bereits existierenden Filamenten wechselwirken. Dabei stellt sich insgesamt die Frage, wie sich die einzelnen Filamente auf dem Grundgebiet anordnen. Diese sicherlich sehr interessante Frage kann mit dem gegenwärtigen Simulationsprogramm nicht abschließend geklärt werden, da die Rechenzeit selbst bei stark reduzierter Auflösung in der  $xy$ -Ebene zur Zeit einfach noch zu groß ist. So benötigte die hier präsentierte Simulation mehr als zwei Wochen(!) Rechenzeit.

## Kapitel 9

# Vergleich zwischen Theorie und Experiment

Zum Ende des dritten Teils dieser Arbeit sollen die umfangreichen Ergebnisse der numerischen Simulation für die verschiedenen Bauteilgeometrien (vgl. Kap. 6 (1D), 7 (2D) u. 8 (3D)) mit experimentell verfügbaren Daten verglichen werden. Für den Experimentator gestaltet sich die Untersuchung der Elektrolumineszenz nicht selten als äußerst schwierig. So weisen die ZnS:Mn-Bauelemente oft nur eine sehr begrenzte Lebensdauer auf. Daher sind zeitlich umfangreiche Experimente an einer bestimmten Probe nicht durchführbar. Im Falle der Untersuchung der spontanen Musterbildung werden die dazu nötigen Experimente noch zusätzlich dadurch behindert, dass viele Proben überhaupt keine Leuchtinhomogenitäten aufweisen.

Konzentrieren wir uns zu Beginn auf den longitudinalen Transport (1D). Im Kapitel 6 wurde der Transport ausgiebig diskutiert. Dabei spielt der Prozess der Feldabschirmung eine sehr große Rolle. Infolge der Abschirmung werden die jeweiligen Strommaxima zu kürzeren Zeiten hin verschoben, so dass das Maxima der anliegenden Wechselspannung nicht mehr mit dem Strommaxima übereinstimmen (vgl. Kap. 6.1.1 u. 6.1.2). Dies steht in guter qualitativer Übereinstimmung mit den experimentellen Untersuchungen. So sind beispielsweise in den Arbeiten [GOSSEN 1994, ZUCCARO 1997] sehr ähnliche Verläufe für den hier untersuchten Dissipativstrom nachzulesen. Auch dort zeigt sich eine Verschiebung der Strommaxima zu früheren Zeiten. Um möglichst auch eine gute quantitative Übereinstimmung mit den experimentellen Daten zu erzielen, wurde versucht die Bauteilparameter so gut wie möglich der experimentellen Situation anzupassen. Die Parameter können z.B. so verändert werden, dass der Stromverlauf für eine bestimmte Spannungsamplitude quantitativ gut reproduziert wird. Werden dann in dieser Parameterkonfigu-

ration verschiedene Spannungsamplituden simuliert, so ist ein deutlicher Unterschied zu den jeweiligen experimentell bestimmten Kurven zu erkennen. Es ist aber trotzdem stets eine sehr gute qualitative Übereinstimmung zu erkennen. Dies betrifft besonders die Zunahme der Verschiebung der Strommaxima zu kürzeren Zeiten bei der Vergrößerung der Spannungsamplitude. Die Gründe für diese Diskrepanz sind sowohl auf der theoretischen als auf experimentellen Seite zu suchen. So beinhaltet das hier abgeleitete Transportmodell (vgl. Kap. 4.4) einige Bauteilparameter, über die in der einschlägigen Literatur nur wenig bekannt ist. Das betrifft in erster Linie die Mobilitäten der Elektronen und der Löcher in diesen stark polykristallinen Bauelementen. Über sie ist nichts bekannt, so dass in den hier präsentierten Rechnungen auf die Konstanten des einkristallinen Zinksulfids zurückgegriffen wird. Ebenso sind z.B. die Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeiten, der Einfangkoeffizient und die Emissionsrate für die hier untersuchte MISIM-Struktur nicht genau bekannt, so dass die entsprechenden Größen mehr oder weniger abgeschätzt werden müssen. Diese Problematik der ungenauen Kenntnis einiger Bauteilparameter ist ein sehr wichtiger Punkt für die weiteren Untersuchungen auf diesem Gebiet. Diese Thematik wird später noch einmal im Kapitel 10 aufgegriffen. Auf experimenteller Seite können z.B. ungenaue Angaben der Schichtdicken sowie eine räumlich unterschiedliche Beschaffenheit der Grenzflächenzustände, aus die Elektronen in das Leitungsband injiziert werden, den Vergleich erheblich beeinflussen. Zum Abschluss der Diskussion des 1D Transports folgen noch einige Bemerkungen zu den simulierten  $Q_{1/2}U$ -Kennlinien (vgl. Kap. 6.2). Auch hier ist ein direkter Vergleich mit experimentellen Daten aufgrund der oben angesprochenen Problematik nicht so einfach. Es zeigt sich aber insgesamt, dass die simulierten Hysteresebreiten typische Werte annehmen, die auch im Experiment beobachtet werden.

Die räumlich höherdimensionalen Simulationen zeigen, dass in der ZnS:Mn-Schicht einzelne lokalisierte Hochstrombereiche existieren können. Dabei treten in Abhängigkeit der Mobilitäts- und Diffusionskonstanten entweder statische und dynamische Stromverteilungen auf, die wir infolge der Abhängigkeit der Lichtemission vom Strom als Leuchtmuster interpretieren. Die simulierten statischen Verteilungen ähneln in ihren Abmessungen und ihrem gegenseitigen Abstand im Mikrometerbereich sehr stark den im Experiment beobachteten statischen Mikrofilamenten (vgl. Abbn. 3.14 (Bild 6) u. 3.13 (türkis u. grün)). Auch der kreisförmige Charakter der Hochstrombereiche konnte in ersten dreidimensionalen Simulationen bestätigt werden. Dynamische Stromdichteverteilungen werden in der numerischen Simulation dadurch erreicht, indem man beispielsweise die transversale Diffusionskonstante der Elektronen erhöht. Im hier erwähnten Simulationsbeispiel breitet sich die anfängliche Inhomogenität kontinuierlich aus, bis das gesamte Simulationsgebiet in den Hochstromzustand versetzt ist. Diese Form der Inhomogenität zeigt gewisse Ähnlichkeiten

zu den kreisförmigen Domänen (vgl. Abbn. 3.14 (Bild 5)), deren innerer Bereich bei gleichzeitiger radialer Ausdehnung stets homogen leuchtet. Entsprechende 3D Simulationen, die eventuell die kreisförmige Ausdehnung bestätigen könnte, stehen noch aus.

Sehr interessant sind die Ergebnisse bei vergrößertem Grundgebiet. Dabei sind zwei verschiedene Simulationsmethoden zum Einsatz gekommen. Bei der ersten Methode wird ein in der  $xy$ -Ebene zentriertes Startfilament vorgegeben und daraufhin wird die Rechnung mit einer leicht vergrößerten Spannungsamplitude gestartet. Die Spannungsamplitude ist dabei gerade so gross, dass sie in der entsprechenden  $Q_{1/2}U$ -Kennlinie (1D Simulation) oberhalb des unstetigen Sprungs von kleiner zu großer übertragender Ladung liegt. In der zweidimensionalen Rechnung zünden dann im weiteren Verlauf der Simulation weitere Filamente. Insgesamt stellt sich eine nahe zu räumlich periodische Anordnung der einzelnen Filamente ein. Die Rechnungen zeigen, dass der gegenseitige Filamentabstand im Bereich von  $1\text{-}2\ \mu\text{m}$  liegt. Ähnliche Filamentabstände sind auch in experimentellen Untersuchungen zu finden. In einer analogen dreidimensionalen Simulation zeigt sich ein ähnliches Bild. Es resultiert hier ein quadratisches Filamentgitter (vgl. Abb. 8.3). An dieser Stelle sei angemerkt, dass solche periodischen Filamentanordnungen im Experiment nicht beobachtet werden. Eine mit dem Experiment vergleichbare Situation kann mit der zweiten Methode realisiert werden. Hier startet die 2D Simulation mit einer homogenen Anfangsbedingung und einem zusätzlichen Rauschterm. Die Spannungsamplitude wird dabei so gewählt, dass sie unterhalb der Schwellenspannung für den Sprung vom unteren auf den oberen Zweig liegt. In diesem Fall entwickeln sich mehrere Filamente auf dem Grundgebiet, wobei eher eine mit dem Experiment vergleichbare unregelmäßige Filamentierung zu beobachten ist (vgl. Abb. 7.23b.)). In diesem Zusammenhang ist dabei die 3D Simulation besonders interessant (vgl. Abb. 8.5). Hier deutet sich zu Beginn der Simulation eine teilweise räumlich inhomogene Verteilung der einzelnen Filamente an. Aber aufgrund der extremen Rechenzeit kann noch nicht endgültig geklärt werden, ob sich eine räumlich periodische oder inhomogene Verteilung einstellt.

Im Experiment treten neben den stationären Mikrofilamenten und kreisförmigen Domänen noch weitere dynamische Muster auf (vgl. Abbn. 3.14), die mit dem hier vorliegenden Ladungsträgertransportmodell bisher noch nicht simuliert werden konnten. Besonders interessant sind dabei die sich radial nach außen ausbreitenden Autowellen (vgl. Abbn. 3.14 (Bild 2)). Sie entwickeln sich dabei aus einem punktförmigen Hochstrombereich, aus dem sich dann die Ringwelle entwickelt. Diese Erscheinung ist deshalb so interessant, da bei deren Dynamik zwei Prozesse gleichzeitig ablaufen. Dabei wirkt der äußere Rand der Ringwelle als „Einschaltfront“ für das Hochschalten des Niedrigstrombereichs, während der innere Rand als „Ausschaltfront“ wirkt. Dadurch kann sich die Ringwelle nach außen

ausbreiten, wobei zusätzlich die Breite des lumineszierenden Ringes konstant bleibt. Dies deutet darauf hin, dass sich beide Fronten gleich schnell ausbreiten.

In allen diskutierten Simulationen ist für einen lokalisierten Hochstrombereich stets eine positive ortsfeste Raumladungszone verantwortlich. Ihre feldverstärkende Wirkung leitet über die verstärkte Tunnelinjektion die Ausbildung eines räumlich lokalisierten Hochstrombereichs in der ZnS:Mn-Schicht ein. Das Raumladungsprofil wird dann nach erfolgtem Aufbau autokatalytisch vom hohen Elektronenstrom (Stoßionisation) und vom Löchereinfang aufrechterhalten. Im Fall einer Autowelle muss in der numerischen Simulation im Gegensatz zu einem lokalisierten Filament folgende Situation eintreffen. Zunächst zündet ein Filament innerhalb des Grundgebiets und daraufhin leitet der in diesem Bereich erhöhte Elektronenstrom den Aufbau des ortsfesten positiven Raumladungsprofils ein. Dieses Profil sollte sich dann im weiteren Simulationsverlauf lateral ausbreiten. Diese „Einschaltfront“ könnte beispielsweise dadurch erreicht werden, indem man die laterale Diffusionskonstante der Elektronen ausreichend vergrößert. Parallel dazu muss ausgehend von Filamentmitte die positive Raumladung abgebaut werden, damit man die typische Form der Autowelle erhält. Diese Ausbildung einer „Ausschaltfront“ wurde aber in den Simulationen nie beobachtet. Ein einmal lokal voll ausgeprägtes Profil der eingefangenden Löcher bleibt erhalten. Daher liegt die Vermutung nahe, dass ein Prozess für die Ausbildung solcher Muster in dem hier verwendeten Transportmodell noch fehlt. Dieser Prozess hätte dafür zu sorgen, dass die Raumladung nur über einen bestimmten Zeitraum bestehen kann. Ist er überschritten, so setzt die Rekombination der Raumladung ein und folglich könnte die oben besprochene „Ausschaltfront“ entstehen. Dabei sollte idealerweise die Ausbreitungsgeschwindigkeit der „Ausschaltfront“ nicht schneller wie die Geschwindigkeit der „Einschaltfront“ sein, damit immer der ringförmige Hochstrombereich erhalten bleibt.

Verschiedene Experimente deuten darauf hin, dass räumlich inhomogene Temperaturverteilungen einen entscheidenden Einfluss auf die Ausbildung der Autowellen haben. In Systemen fern vom Gleichgewicht gibt es keinen einheitlichen Temperaturbegriff mehr. Dennoch können unter bestimmten Annahmen einzelne Teilsysteme wie Elektronen, Löcher und Kristallgitter durch Temperaturen charakterisiert werden, wobei die einzelnen Temperaturen voneinander sehr verschieden sein können. Um die Temperaturdynamik auf der theoretischen Seite besser untersuchen zu können, muss das bestehende Modell zum Ladungsträgertransport erweitert werden. Im Zuge dieser Erweiterung (hydrodynamisches Modell) kommen Transportgleichungen für die Teilchentemperaturen und die Gittertemperatur hinzu. Physikalisch ist die Mitberücksichtigung der verschiedenen Temperaturen interessant, da sie auf eine unterschiedliche Art und Weise die Dynamik beeinflussen. So bestimmt die Gittertemperatur neben den thermischen Emissionsraten (Löcheremission)

ebenfalls die Injektionsraten durch phononenassistiertes Tunneln. Die Elektronentemperatur bestimmt dagegen Einfangraten und insbesondere die Stoßionisation, die bei stark inhomogenen elektrischen Feldverteilungen nicht notwendigerweise am Ort mit der höchsten Feldstärke maximal wird. Mit dieser Erweiterung sind auch einige Probleme verknüpft. So wächst natürlich der numerische Aufwand beträchtlich, da nun weitere lineare Gleichungssysteme in jedem Zeitintervall gelöst werden müssen. Ausserdem treten in den hinzugekommenen Differentialgleichungen neue Transportparameter auf, deren Werte für typische ZnS:Mn-Strukturen nicht bekannt sind, so dass auch hier wieder für ihre Werte Annahmen gemacht werden müssen, die auf dem experimentellen Wege noch zu verifizieren sind. Für den longitudinalen Transport (1D) hat [MEYER 2003] das hier betrachtete Transportmodell um die Teilchentemperaturen von Elektronen und Löchern erweitert. Dabei blieb aber die Löcheremissionsrate noch konstant. Die Simulationsergebnisse sind dabei sehr ähnlich zu denen aus dieser Arbeit, da kaum räumlich inhomogene Temperaturverteilungen zu beobachten sind. Die einzelnen Temperaturen für die am Transport beteiligten Teilchen sind zwar recht hoch, aber die Gradienten sind nicht stark ausgeprägt. Die berechneten  $Q_{1/2}U$ -Kennlinien zeigen ebenfalls eine Hysterese, wobei nur eine geringe Abweichung zu der Kennlinie aus dem Drift-Diffusions-Modell zu erkennen ist. Inwieweit diese hydrodynamische Erweiterung die Ausbildung von dynamischen Mustern (z.B. Autowellen) begünstigt, ist zur Zeit noch nicht bekannt. Dabei ist insbesondere der Einfluss einer temperaturabhängigen Löcheremission (Berücksichtigung der Gittertemperatur) auf den gesamten Ladungstransport zu untersuchen.

Neben dieser Erweiterung auf ein hydrodynamisches Modell sind schon auf der Drift-Diffusions-Ebene weitere Modellmodifikationen möglich. Diese Modifikationen betreffen besonders die eingefangenen Löcher. Aktuelle experimentelle Untersuchungen zum Temperaturverhalten und zu Gedächtniseffekten zeigen, dass mehrere Typen von gebundenen Löchern den Ladungstransport beeinflussen. In diesem Zusammenhang spricht man von flachen und tiefen Störstellenniveaus, die freie Löcher einfangen können. Während die an flachen Störstellen gebundenen Löcher thermisch und feldinduziert emittiert werden können, können die an tiefen Störstellen gebundenen Löcher nur mit Elektronen rekombinieren. Im Transportmodell sind diese verschiedenen Typen von gebundenen Löchern, die durch unterschiedliche Einfang- und Emissionsraten charakterisiert sind, durch zusätzliche Differentialgleichungen zu berücksichtigen. Numerisch bedeutet diese Ergänzung keine Erschwerung, da die gebundenen Löcher nur durch gewöhnliche Differentialgleichungen beschrieben werden. Aber auch hier spielt wieder eine realistische Modellierung der verschiedenen Einfang- und Emissionsraten eine wichtige Rolle. Dabei stößt man wieder auf das bekannte Problem der Unkenntnis wichtiger Parameter. Bis jetzt sind nur die energetischen

Positionen der Niveaus bekannt. Experimentelle verifizierte Angaben über die jeweiligen Raten sind aber zur Zeit noch nicht bekannt. Auch hier müssen in einem ersten Schritt wieder sinnvolle Parameterwerte angenommen werden, um so die wesentlichen Auswirkungen dieser Erweiterung studieren zu können. Dabei ist insbesondere zu prüfen, wie die Berücksichtigung weiterer Störstellen die bisherige Ladungsträgerdynamik beeinflusst und ob sich in den höherdimensionalen Simulationen auch dynamische Muster einstellen.

## Teil IV

# Zusammenfassung und Ausblick

# Kapitel 10

## Zusammenfassung und Ausblick

Gegenstand dieser Arbeit ist die **Modellierung von Ladungstransports und Strukturbildung** in elektrolumineszierenden in wechsellspannungsgetriebenen ZnS:Mn-Bauelementen.

Zu Beginn der Arbeit wurde die **Modellierung des Ladungstransports** ausführlich diskutiert. Das Ziel war die Entwicklung eines Transportmodells für die ZnS:Mn-Bauelemente. Dazu benötigten wir zuerst möglichst viele experimentelle Informationen zum Ladungstransport bzw. zur Elektrolumineszenz in den ZnS:Mn-Bauelementen. Dabei konzentrierten wir uns zunächst hauptsächlich auf den longitudinalen Transport, um die wesentlichen Prozesse zur Elektrolumineszenzbildung zu extrahieren. So zeigen die ZnS:Mn-Bauelemente eine Vielzahl von sehr interessanten Eigenschaften, die in dieser Arbeit mit Hilfe von einigen Kennlinien diskutiert wurden. Dazu gehören beispielsweise die starke Spannungsabhängigkeit der Elektrolumineszenz, die Abhängigkeit der Lumineszenz von der Mangankonzentration und der ZnS:Mn-Schichtdicke oder Gedächtniseffekte (Lumineszenz-Spannungs-Hysterese). Durch die Diskussion verschiedener Kennlinien und Hinzunahme weiterer experimenteller Ergebnisse wurde ein Transportschema aufgestellt, mit dem die Elektrolumineszenzbildung in den ZnS-Mn-Bauelementen gut veranschaulicht werden kann. Die wesentlichen Transportprozesse sind hier noch einmal zusammengefasst dargestellt:

- Tunnelinjektion von Elektronen aus lokalisierten Zuständen der Halbleiter-Isolator-Grenzschicht
- Elektronenbeschleunigung und Band-Band-Stoßionisation
- Löcherstrom und Löchereinfang (positive Raumladung)
- Rekombination zwischen Elektronen und eingefangenen Löchern, Löcheremission

- Anregung der Manganzentren und Lichtemission
- Ladungsträgereinfang an beiden Halbleiter-Isolator-Grenzschichten.

Neben den longitudinalen Bauteileigenschaften, zeigen die ZnS:Mn-Bauelemente in der lateralen Elektrolumineszenzverteilung viele verschiedene spontan auftretende Muster. Diese hier vorgestellten Muster können dabei sowohl räumlich statisch (Filamente) als auch dynamisch (Domänen, Ringwellen) sein. Verschiedene Untersuchungen zeigten, dass die beobachteten Leuchtdichteverteilungen nur in einem sehr engen Parameterbereich (Spannungsamplitude, Frequenz, Dotierungskonzentration und ZnS:Mn-Schichtdicke) auftreten. Um ein theoretisches (mathematisches) Modell für den Ladungsträgertransport zu bilden, musste eine passende Beschreibungsebene gefunden werden. Infolgedessen wurden drei verschiedene Modell-Kategorien, nämlich

- klassische Gleichungen der Mechanik,
- Boltzmann-Gleichung und
- Bilanz-Gleichungen

intensiv besprochen. Dabei können die Bilanz-Gleichungen durch Integration über den Geschwindigkeitsraum aus der Boltzmann-Gleichung, die wiederum aus den exakten Grundgleichungen der Mechanik unter bestimmten Voraussetzungen abgeleitet werden. Ein wesentliches Auswahlkriterium war dabei die Vergleichbarkeit der Lösung mit experimentell zugänglichen makroskopischen Größen. Im Zuge der Diskussion schieden daraufhin die ersten beiden Beschreibungsebenen aus, da die jeweils zu berechnende Lösung der Transportmodelle viel zu detaillierte Informationen enthalten würde, so dass eine direkte Vergleichsmöglichkeit zwischen Theorie und Experiment nicht gegeben wäre. Wir sind eher an makroskopischen Größen, wie z.B. Ströme und Dichten, interessiert, die genau diesen Vergleich mit dem Experiment zulassen. Daher diente die dritte Modell-Kategorie als Ausgangspunkt. In dieser Kategorie liegt eine unendliche Hierarchie von makroskopischen Bilanz-Gleichungen vor, die für die konkrete Modellbildung auf einer bestimmten Ebene abgebrochen werden muss. Bei dem hier entwickelten Modell geschah dies auf der Drift-Diffusions-Ebene. Zusammen mit der Poisson-Gleichung folgt ein Transportmodell für die hier im Fall der ZnS:Mn-Struktur zu berücksichtigten Ladungsträgertypen (freie Elektronen, freie und eingefangene Löcher). Charakteristisch für dieses Modell ist, dass der Transport der freien Ladungsträger nur über Drift und Diffusion erfolgen kann. Die weiter oben in diesem Abschnitt erwähnten charakteristischen Transportprozesse wurden durch entsprechende Raten (Stoßionisation, Löchereinfang, Rekombination) und Randbedingungen

(Tunnelinjektion, Oberflächenrekombination) realisiert. Hierbei sei noch darauf hingewiesen, dass die Anregung der Manganzentren nicht modelliert wird, da die Elektrolumineszenz proportional zur übertragenen Ladung (Strom) in der ZnS:Mn-Schicht ist. Beim abgeleiteten Transportmodell handelt es sich um ein partielles Differentialgleichungssystem, das nicht analytisch lösbar ist. Daraufhin wurde ein numerisches Simulationsprogramm entwickelt, das die Lösung für ein-, zwei- und dreidimensionale Bauteilgeometrien berechnet. Aufgrund der besonderen Struktur der Bilanz-Gleichungen wurde das DD-Modell mit Hilfe der Scharfetter-Gummel-Verfahrens diskretisiert. Die Diskretisierung führt dazu, dass in jedem Zeitschritt lineare Gleichungssysteme gelöst werden müssen, deren Lösung insbesondere in der 2D bzw. 3D Simulation sehr viel Rechenzeit in Anspruch nimmt.

Für die **Modellierung der Strukturbildung** wurde zunächst das Drift-Diffusions-Modell für den longitudinalen Transport (1D) in der HSA-Konfiguration (keine Löcheremission, Rekombination zwischen  $n$  und  $p_{\text{trapped}}$  über  $R = \sigma j_n p_t$ ) gelöst. Dabei haben wir zunächst die Ladungsträgerdynamik innerhalb einer Periode der angelegten sinusförmigen Wechselspannung untersucht. Schon diese Konfiguration ermöglichte einen tiefen Einblick in die wichtigsten Transportmechanismen. So konnten in Abhängigkeit der angelegten Spannungsamplitude drei verschiedene Transportszenarien extrahiert werden. Während bei niedrigen Amplituden das Strommaximum mit dem Spannungsmaximum zusammenfällt, führen mit zunehmender Amplitude zunächst die sich ausbildenden Grenzflächenladungen und dann die Reduktion des Tunnelstroms durch Entleerung der Grenzflächenzustände zu einer deutlichen Verschiebung des Strommaximums zu früheren Zeiten. Bei großen Spannungen setzt sich diese Verschiebung weiter fort und zusätzlich führt schließlich das Einsetzen der Ladungsträgermultiplikation durch Stoßionisation zum Auftreten eines zweiten Nebenmaximums in Stromverlauf. Dabei werden die generierten Löcher eingefangen und somit bildet sich ein wannenförmiges Ladungsprofil aus, das das Feld inhomogen abschirmt. Natürlich wurde auch die Ladungsträgerdynamik für viele Spannungsperioden betrachtet. Die Ladungsträgerdynamik strebt dabei einen periodisch stationären Zustand an, in dem sich die Löcherrekombination und die Löchergeneration im Gleichgewicht befinden. Aufgrund dieses Gleichgewichts wird pro Halbperiode stets die gleiche Ladungsmenge durch die ZnS:Mn-Schicht transferiert. Im Zuge der Untersuchungen zum periodisch stationären Zustand wurde das abgeleitete DD-Modell mit dem oft in der Literatur benutztem Standardmodell von Howard, Sahni und Alt (HSA-Modell) verglichen. Dabei ergab sich nur für den Fall eines sehr großen Einfangkoeffizienten eine sehr gute Übereinstimmung der beiden Transportmodelle.

Mit der Einführung der Löcheremission veränderte sich bei konstant gehaltener Spannungsamplitude die Ladungsdynamik. Es zeigte sich, dass das positive Raumladungprofil

infolge der Löcheremission nicht so stark ausgeprägt ist. Somit ist ihre feldverstärkende Wirkung kleiner und darauf wird weniger Ladung durch die Zinksulfidschicht transferiert. Aber trotzdem macht sich die Feldabschirmung durch die Grenzflächenladungen und die positive Raumladung bemerkbar, wobei die Abschirmung durch letztere infolge der Löcheremission schwächer ist.

Als nächstes wurde untersucht, ob die in verschiedenen Experimenten beobachtete Lumineszenz-Spannungs-Hysterese mit dem DD-Modell simuliert werden konnte. In der Simulation wurde dazu eine zur Lumineszenz äquivalente Größe  $Q_{1/2}$  (pro Halbperiode im stationären Zustand übertragende Ladung) berechnet und gegen die Spannungsamplitude aufgetragen. Die Kennlinien zeigten analog zum Experiment ebenfalls ein bistabiles bzw. hystereseartiges Verhalten. Der Auslöser dieser Bistabilität ist die ortsfeste positive Raumladung, deren Dynamik mit Hilfe der Nettogenerationsrate  $\Omega = T - G_2 - R$  untersucht wurde. Für den Fall der ansteigenden Spannung baut sich ausgehend von einer kleinen Startspannung die positive Raumladung infolge der Stoßionisation und des Löchereinfangs kontinuierlich auf. Zunächst fließt aber nur ein geringer Strom ( $Q_{1/2}$  klein) durch die ZnS:Mn-Schicht (Niedrigstromzustand), da die positive Raumladung zu schwach ausgeprägt ist, damit sie das Feld verstärken und somit einen höheren Tunnelstrom auslösen kann. Wird aber eine Schwellenspannung  $U < U_{\text{Schwelle}}$  erreicht, so ändert sich  $Q_{1/2}$  schlagartig und somit fließt nun ein deutlich größerer Strom durch die ZnS:Mn-Schicht (Hochstromzustand). Die Kennlinie zeigt bei dieser Spannung einen unstetigen Sprung. Der Grund hierfür liegt in der massiven Generation von Elektronen und Löchern begründet, wobei letztere eingefangen werden und somit das Raumladungsprofil immer weiter anwächst. Dieses koppelt wiederum an das elektrische Feld und löst eine höhere Tunnelinjektion aus, die ihrerseits wieder die Stoßionisation noch weiter verstärkt und noch mehr Löcher zum Einfang bereit stellt. Somit wächst die Raumladung schnell an, bis im periodisch stationären Zustand die Löchergeneration (Löchereinfang) und die Löcherrekombination (Löcheremission, Rekombination zwischen  $n$  und  $p_{\text{trapped}}$ ) im Gleichgewicht sind. Bei weiteren Spannungserhöhungen ist dann nur eine geringe Erhöhung in der übertragenden Ladung zu beobachten. Wird dann die Spannung ausgehend von diesem Hochstromzustand kontinuierlich gesenkt, so bleibt der Zustand zunächst auch für Spannungen unterhalb von  $U < U_{\text{Schwelle}}$  erhalten. Infolge der Spannungsabnahme reduziert die Rekombination infolge schwächerer Generation die positive Raumladung, aber insgesamt bleibt ihr wannenförmiges Profil erhalten und kann so für eine hohe Tunnelinjektion sorgen. Bei einer weiteren Spannungsreduzierung bricht das wannenförmige Raumladungsprofil zusammen, da zu wenige Löcher eingefangen werden, um so den Verlust an Raumladung infolge der Rekombination zu kompensieren. Daraufhin kann der Hochstromzustand nicht mehr auf-

rechterhalten werden, und  $Q_{1/2}$  springt unstetig auf den Niedrigstromzustand zurück. Im Zuge weiterer Untersuchungen zur Hysterese bzw. Bistabilität wurden einige Simulationsparameter gezielt variiert. Dabei zeigte sich, dass die Hysteresebreite stark von Parametern abhängt, die für den Aufbau der positiven Raumladung verantwortlich sind. Dazu zählen neben dem Einfangkoeffizienten, die Löcheremissionsrate auch die Frequenz der angelegten Spannung. Im Fall der Löcheremissionsrate konnte beispielsweise die Rate so optimiert werden, so dass die Hysteresebreite maximal wurde.

Die simulierten  $Q_{1/2}$ -U-Kennlinien waren für den weiteren Untersuchungen der Strukturbildung sehr wichtig, da in typischen Experimenten nur Muster in einem Spannungsbereich in der Nähe des unstetigen Sprungs von schwacher zu starker Lumineszenz (d.h. Übergang: Niedrigstromzustand  $\rightarrow$  Hochstromzustand) zu beobachten waren. Daher wurden entsprechende 2D Simulationen durchgeführt, wobei die Spannung so gewählt wurde, dass sie knapp unterhalb der Schwellenspannung  $U_{\text{Schwelle}}$  lag. Im Fall räumlich homogener Anfangsbedingungen konnten keine Stromfilamente beobachtet werden. Eventuell auftretende Inhomogenitäten wurden sofort vom System gedämpft und somit blieb der räumlich homogene Zustand stabil. Zur weiteren Untersuchung wurde die Anfangsbedingung verändert. Die Simulationen wurden daraufhin zunächst mit einer bistabilen Anfangsbedingung gestartet, deren Form sich dabei an die entsprechende für die gewählte Spannung bistabile  $Q_{1/2}$ -U-Kennlinie richtete. Dadurch fließt zu Beginn der Simulation im Bereich aufgrund des Vorhandenseins eines wannenförmigen positiven Raumladungsprofils ein wesentlich höherer Strom als im restlichen Bereich des Bauelements. Man gab gewissermaßen ein Startfilament vor und betrachtet anschließend dessen weitere Zeitentwicklung. Die Simulationen zeigten, dass sich mit dieser Form der Anfangsbedingung ein räumlich lokalisiertes Stromfilament stabilisieren lässt. Dabei resultierte stets die gleiche Filamentform und zwar unabhängig davon, wie breit der anfängliche Hochstrombereich gewählt wurde. Da bei einer räumlich homogenen Anfangsbedingung alle Fluktuationen gedämpft wurden, wurde zusätzlich das Fermi-niveau der Grenzflächenzustände verrauscht. In den durchgeführten Simulationen (Spannung unverändert,  $U < U_{\text{Schwelle}}$ ) konnten ebenfalls lokalisierte Filamente stabilisiert werden, wobei ihre Form identisch zu denen war, die mit Hilfe der bistabilen Anfangsbedingung erzeugt wurden. An dieser Stelle ist anzumerken, dass die Filamente sich nur dann herausbildeten, wenn die Simulationsspannung knapp unterhalb der Schwellenspannung  $U < U_{\text{Schwelle}}$  lag. Anderenfalls baute sich die bistabile Anfangsbedingung ab bzw. die „verrauschte“ Simulation blieb räumlich homogen. Die räumliche Gestalt eines Stromfilaments wird durch die positive Raumladung und durch die beiden Grenzflächenladungen bestimmt. Die daraus resultierenden transversalen Feldkomponenten sorgen dafür, dass die Elektronen und Löcher in die Richtung des Filament-

zentrums fokussiert oder defokussiert werden. Zusätzlich sind transversale defokussierende Diffusionsströme infolge Dichtegradienten zu beachten. Im Fall der bistabilen Anfangsbedingung führen die fokussierenden und defokussierenden lateralen Stromkomponenten dazu, dass sich das anfängliche Startfilament je nach Breite entweder ausdehnt oder einschnürt. Im Fall des Rauschterms zünden die Filamente aufgrund räumlicher Stromfluktuationen, die dann den autokatalytischen Aufbau des wannenförmigen Raumladungsprofils einleiten. Auch hier werden die Filamente mit Hilfe lateraler fokussierender und defokussierender Stromkomponenten stabilisiert. Um den Stabilisierungsprozess noch besser zu verstehen, wurden gezielt die lateralen Diffusions- bzw. Mobilitätskonstanten geändert. Daraus folgte unter anderem, dass sich mit einer bistabilen Anfangsbedingung und einer vergrößerten Elektronendiffusionskonstanten (Mobilität unverändert) kein stationäres Filament bildete. Es entstanden stattdessen zwei Fronten die sich nach außen bewegten und so das gesamte laterale Simulationsgebiet in einen homogenen Hochstromzustand versetzten.

Motiviert durch „verrauschte“ Simulationen, in denen sich zwei Filamente ausbildeten und sich gegenseitig abstießen, wurde die Filamentwechselwirkung genauer untersucht. Zur besseren Untersuchung wurde dazu zuerst ein in  $y$ -Richtung zentriertes Filament mit Hilfe einer bistabilen Anfangsbedingung ( $U < U_{\text{Schwelle}}$ ) erzeugt. Nach erfolgter Stabilisation wurde die Spannung leicht über die Schwellenspannung erhöht ( $U > U_{\text{Schwelle}}$ ). Dadurch können neben dem bereits bestehenden Filament weitere Filamente zünden, wobei insgesamt sowohl die Filamentbreite als auch die Stromscheitelwerte leicht zunehmen. Wieviele neue Filamente hinzukommen hängt aufgrund der periodischen Randbedingungen entscheidend von der lateralen Bauteilbreite ab. Ist sie zu klein, so sind aufgrund der besonderen räumlichen Form der Grenzflächenladungsdichten (Nebenmaxima an der momentanen Kathode) neben dem existierenden Filament keine starken Tunnelinjektionen möglich und somit unterbleiben weitere Zündungen. Da diese strominhibierende Eigenschaft der Grenzflächenladungen nur eine begrenzte Reichweite hat, können bei einer Vergrößerung der lateralen Bauteilbreite neue Filamente hinzukommen. Dabei entstehen z.B. bei einer Bauteilbreite von  $4.0 \mu\text{m}$  neben dem bestehenden Filament noch zwei Filamente. Im Zuge ihrer Stabilisierung durch transversale Drift- und Diffusionsströme entsteht zunächst eine Strukturierung mit ungleichen Filamentabständen. Die ungleichen Abstände werden aber im weiteren Verlauf der Simulation langsam abgebaut, da das elektrische Feld zwischen den beiden neuen Stromfilamenten abgeschirmt wird. Dies führt bezogen auf das jeweilige Filamentzentrum zu unsymmetrischen fokussierenden bzw. defokussierenden lateralen Transportprozessen, die dazu führen, dass sich die beiden Filamente voneinander abstoßen. Somit stellt sich im periodisch stationären Zustand eine Filamentierung ein, in der alle Stromfilamente den gleichen räumlichen Abstand (ca.  $1.2\text{-}1.3 \mu\text{m}$ ) voneinander-

der haben. Dabei ist zu beachten, dass dieser Abstand charakteristisch für eine bestimmte Spannungserhöhung über die Schwelle hinweg ist. Fällt die Spannungserhöhung größer aus, so nimmt der lateraler Abstand bei gleichzeitiger Filamentverbreiterung ab. Bei einem zu großen Anstieg der Spannung können keine einzelnen Filamente stabilisiert werden. In diesem Fall wird das gesamte Gebiet in den Hochstromzustand versetzt.

Damit man die Simulationsergebnisse besser mit den experimentellen Ergebnissen vergleichen kann, wurden erste dreidimensionale Simulationen durchgeführt. Dabei stellte sich zuerst heraus, dass der Rechenaufwand im Vergleich zu den 2D Simulationen deutlich anstieg. Um eine möglichst feine Auflösung in der transversalen Ebene zu erlangen, wurde die bisherige Anzahl der Diskretisierungspunkte in longitudinaler Richtung reduziert. Analog zu den 2D Simulationen haben wir auch hier versucht einzelne Stromfilamente zu stabilisieren. Dazu wurden in einem ersten Schritt 3D Simulationen mit unterschiedlichen bistabilen Anfangsbedingungen (quadratische oder rechteckige Geometrie) gestartet, wobei die Simulationsspannung knapp unterhalb der Schwellenspannung  $U_{\text{Schwelle}}$  der  $Q_{1/2}$ -U-Kennlinie lag. Die Rechnungen zeigten, dass stets kreisförmige Stromfilamente in der ZnS:Mn-Schicht durch transversale Drift- und Diffusionsströme stabilisiert werden können. Infolge der Stabilisierung zeigt die räumliche Anordnung der Grenzflächenladungen ebenfalls die gleichen Details wie in der 2D Simulation, mit dem Resultat, dass sich das Filament lateral nicht weiter ausdehnen kann.

Ausgehend von einem bereits stabilisierten Filament in der Mitte der transversalen Ebene haben wir die Spannung wieder über die Schwellenspannung  $U_{\text{Schwelle}}$  hinweg erhöht. Dabei vergrößert sich das bereits bestehende Filament leicht und zusätzlich zündeten je nach Größe der transversalen Ebene weitere Filamente. Auch hier konnten wir eine zum 2D Fall identische Situation beobachten. Infolge der speziellen Anordnung der Grenzflächenladungen fand in einem kreisförmigen Gebiet rund um das bereits existierende Filament keine Zündung statt. Deckt dieses Gebiet die transversale Ebene ab, so zünden keine weiteren Filamente. Wird nun die Ebene leicht vergrößert, so ist dies nicht mehr der Fall. In dieser Situation zündeten kreisförmige Filamente in den vier Ecken der Ebene, so dass ein quadratisches Filamentgitter mit einer charakteristischen Gitterkonstante entstand. Diese Form des Filamentgitters stellt sich auch bei größeren Grundgebieten ein. Dabei stabilisieren sich stets zuerst einzelne Filamente am Rand wie bisher. Falls der Abstand dieser neuen Filamente zum zentralen Filament genügend groß ist, können weitere im Zwischenraum stabilisiert werden. Zusätzlich wurde auch hier versucht Filamente aus dem räumlich homogenen Zustand mit Hilfe eines Rauschterms zu erzeugen. Die endgültigen Simulationsergebnisse konnten zu diesem Zeitpunkt noch nicht abschließend diskutiert werden, da die Lösung aufgrund der extremen Rechenzeit noch nicht stationär war. In der

Zeitentwicklung der ersten 5000 Perioden konnte die Stabilisierung einiger kreisförmiger Filamente aus einer „wabenförmigen“ Zündung beobachtet werden. Dabei erschien die Filamentierung zunächst unregelmäßig und es sind teilweise noch einige länglich ausgedehnte Strukturen zu erkennen. Inwieweit sich die Filamentierung noch weiter verändert, muss in weiteren Rechnungen geklärt werden.

Zum Abschluss dieser Arbeit wird ein kurzer Ausblick für zukünftige Projekte gegeben. Die Simulationen für eine zwei- bzw. dreidimensionale Bauteilgeometrie zeigten, dass lokalisierte Hochstrombereiche in der ZnS:Mn-Schicht stabilisiert werden konnten. Dabei konnten bisher sowohl räumlich stationäre (Mikrofilamente) als auch räumlich dynamische (Domänen) Stromdichteverteilungen beobachtet werden. Das Experiment zeigt aber noch weitere kompliziertere Muster wie z.B. Ringwellen oder Spiralen. Sie konnten bisher in der Simulation noch nicht stabilisiert werden. Dabei ist in weiteren Projekten zu prüfen, ob das hier verwendete Transportmodell überhaupt zur Ausbildung solche Muster in der Lage ist oder ob noch zusätzliche Transportprozesse berücksichtigt werden müssen. Im Fall zusätzlicher Transportprozesse sind vor allen Dingen die Prozesse interessant, die die Dynamik der positiven Raumladung betreffen, da sie für die lokalisierten Hochstrombereiche äußerst wichtig sind.

Aktuelle experimentelle Untersuchungen zeigen, dass offenbar mehrere Typen von gebundenen Löchern (flache und tiefe Störstellenniveaus) den Ladungsträgertransport sowie die Strukturbildung beeinflussen. Ihre Berücksichtigung im bestehenden Simulationsprogramm wäre problemlos, da ihre Modellierung auf die Lösung von gewöhnlichen Differentialgleichungen führt. Diese Modifikation wäre sehr interessant, da die Störstellenniveaus durch verschiedene Einfang- und Emissionsraten charakterisiert sind. Dabei ist insbesondere die Frage zu untersuchen, wie sich das Raumladungsprofil verändert und welche Strukturen sich stabilisieren lassen. Motiviert durch experimentelle Untersuchungen, in denen räumlich inhomogene Temperaturverteilungen einen wesentlichen Einfluss auf die Ausbildung von Autowellen haben, scheint eine Erweiterung auf ein hydrodynamisches Modell ebenfalls sehr interessant zu sein. Für den longitudinalen Transport wurde diese Modifikation bereits schon vorgenommen. Im nächsten Schritt müssen im Simulationsprogramm weitere Raumdimensionen implementiert werden, damit die Strukturbildung untersucht werden kann.

Im Zuge der Diskussion möglicher Verbesserungen des Transportmodells stößt man immer wieder auf das Problem der Unkenntnis wichtiger Materialgrößen. Alle diskutierten Erweiterungen benötigen aufgrund der hinzukommenden Transportgleichungen weitere Materialparameter, die nur teilweise oder gar nicht für die ZnS:Mn-Struktur bekannt sind. Daher fällt zur Zeit eine möglichst realistische Modellierung der auftretenden Transport-

koeffizienten schwer. In einem ersten Schritt können Annahmen über ihre Werte gemacht werden. Diese Problematik tritt auch schon im hier verwendeten Drift-Diffusions-Modell auf und erschwert so den direkten Vergleich mit experimentellen Ergebnissen. Inwieweit aktuelle Ergebnisse für den Stoßionisationskoeffizienten für einkristallines Zinksulfid die bisherigen Simulationsergebnisse beeinflusst, muss noch untersucht werden.

Der periodisch stationäre Zustand stellte sich oft erst nach sehr vielen Spannungsperioden ein. Dies bedeutete im Fall zweidimensionaler bzw. dreidimensionaler Simulationen sehr lange Simulationszeiten auf dem Rechner. Insbesondere konnten dreidimensionale Simulationen teilweise nur mit reduzierter räumlicher Diskretisierung durchgeführt werden, weil die Lösung der linearen Gleichungssysteme sehr aufwändig ist. Da bei Hinzunahme weiterer Transportgleichungen (hydrodynamisches Modell, weitere flache und tiefe Störstellen) der Rechenaufwand noch weiter steigt, muss über eine verbesserte Lösungsstrategie nachgedacht werden. Aufgrund der großen Dimension der Gleichungssysteme und der Verwendung von iterativen Lösungsverfahren bietet sich die Implementierung des bestehenden Simulationsprogrammes auf einen Parallelrechner an. Dabei ist die Hoffnung, dass das resultierende Simulationsprogramm gute Skalierungseigenschaften besitzt und erweiterte Transportmodelle in einem akzeptablen Zeitraum gelöst werden können.

**Teil V**

**Anhang**

# Anhang A

## Komplette Diskretisierung

Hier wird die vollständige Diskretisierung des im Kapitel 4.4 vorgestellten Transportmodells erläutert. Dabei werden alle diskreten Gleichungen für die ein-, zwei- und dreidimensionale Simulation aufgelistet. Zuvor folgen einige Bemerkungen und Definitionen.

### A.1 Bemerkungen und Definitionen

- Alle Indizes in den folgenden Gleichungen beziehen sich auf die Abbildungen
  - 1D: Abbildungen 5.3 und 5.4
  - 2D: Abbildungen 5.6 und 5.8
  - 3D: Abbildungen 5.7 und 5.9
- Von außen an die MISIM-Struktur angelegtes Potential:  $U(t)$
- Der Index  $t$  bzw.  $t + \Delta t$  bezieht sich auf den jeweiligen Zeitschritt
- Das Potential  $V$  ist hier bereits auf die thermische Spannung  $k_B T/q$  skaliert
- Bernoulli-Funktion:  $B(x) \equiv \frac{x}{\exp(x)-1}$
- Intervallmitten:  $\alpha_i \equiv \frac{1}{2}(l_i + l_{i-1})$     $\beta_j \equiv \frac{1}{2}(k_j + k_{j-1})$     $\gamma_m \equiv \frac{1}{2}(h_m + h_{m-1})$
- Periodische Randbedingungen in 2D:
  - Index  $j - 1 = 0$  für  $j = 1$ : Indextransformation  $(j - 1) \rightarrow n_y$
  - Index  $j + 1 = n_y + 1$  für  $j = n_y$ : Indextransformation  $(j + 1) \rightarrow 1$
- Periodische Randbedingungen in 2D:

- Für Index  $j$  analog wie in 2D
- Index  $m - 1 = 0$  für  $m = 1$ : Indextransformation  $(m - 1) \rightarrow n_x$
- Index  $m + 1 = n_x + 1$  für  $m = n_x$ : Indextransformation  $(m + 1) \rightarrow 1$

## A.2 1D Diskretisierung

### A.2.1 Poisson-Gleichung

#### Kontakte

$$V_1^t = U(t) \quad V_{n_l+n_m+n_r}^t = 0 \quad (\text{A.1})$$

#### Gesamtes Simulationsgebiet ohne Grenzflächen

Diskretisierung gültig für:  $\forall i \in \{2, \dots, n_l + n_m + n_r - 1\} \setminus \{n_l, n_l + n_m\}$

$$V_i^t \left( -\frac{1}{l_i \alpha_i} - \frac{1}{l_{i-1} \alpha_i} \right) + V_{i-1}^t \frac{1}{l_{i-1} \alpha_i} + V_{i+1}^t \frac{1}{l_i \alpha_i}$$

$$= \begin{cases} 0 & \text{für } i = 2, \dots, n_l - 1 \text{ und} \\ & i = n_l + n_m - 1, \dots, n_l + n_m + n_r - 1 \\ \frac{q}{\varepsilon_0 \varepsilon_z} \left( n_i^t - p_i^t - p_i^{\text{trapped},t} \right) & \text{für } i = n_l + 1, \dots, n_l + n_m - 1 \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

#### Linke Isolator-Halbleiter-Grenzfläche

Diskretisierung gültig für:  $i = n_l$

$$V_i^t \left( -\frac{\varepsilon_z}{l_i} - \frac{\varepsilon_{d,1}}{l_{i-1}} \right) + V_{i-1}^t \frac{\varepsilon_{d,1}}{l_{i-1}} + V_{i+1}^t \frac{\varepsilon_z}{l_i}$$

$$= \frac{q l_i}{2 \varepsilon_0} \left( n_i^t - p_i^t - p_i^{\text{trapped},t} \right) - \frac{\rho_i^{\text{links},t}}{\varepsilon_0} \quad (\text{A.3})$$

#### Rechte Halbleiter-Isolator-Grenzfläche

Diskretisierung gültig für:  $i = n_l + n_m$

$$V_i^t \left( -\frac{\varepsilon_{d,2}}{l_i} - \frac{\varepsilon_z}{l_{i-1}} \right) + V_{i-1}^t \frac{\varepsilon_z}{l_{i-1}} + V_{i+1}^t \frac{\varepsilon_{d,2}}{l_i}$$

$$= \frac{q l_{i-1}}{2 \varepsilon_0} \left( n_i^t - p_i^t - p_i^{\text{trapped},t} \right) - \frac{\rho_i^{\text{rechts},t}}{\varepsilon_0} \quad (\text{A.4})$$

## A.2.2 Kontinuitätsgleichung der Elektronen und der Löcher

### Ohne Halbleiter-Isolator-Grenzflächen

Diskretisierung gültig für:  $\forall i \in \{n_l, \dots, n_l + n_m\}$

$$\begin{aligned}
& n_i^{t+\Delta t} \left( -D_{n,z} \frac{1}{l_i} B(V_i^t - V_{i+1}^t) - D_{n,z} \frac{1}{l_{i-1}} B(V_i^t - V_{i-1}^t) - \right. \\
& \quad \left. \left[ \frac{1}{\Delta t} + \frac{R_i^{t+\Delta t}}{n_i^{t+\Delta t}} \right] \alpha_i \right) + \\
& n_{i-1}^{t+\Delta t} D_{n,z} \frac{1}{l_{i-1}} B(V_{i-1}^t - V_i^t) +
\end{aligned} \tag{A.5}$$

$$\begin{aligned}
& n_{i+1}^{t+\Delta t} D_{n,z} \frac{1}{l_i} B(V_{i+1}^t - V_i^t) \\
& = \left( -G_i^t - \frac{1}{\Delta t} n_i^t \right) \alpha_i \\
& p_i^{t+\Delta t} \left( -D_{p,z} \frac{1}{l_i} B(-(V_i^t - V_{i+1}^t)) - D_{p,z} \frac{1}{l_{i-1}} B(-(V_i^t - V_{i-1}^t)) - \right. \\
& \quad \left. \left[ \frac{1}{\Delta t} + \frac{T_i^{t+\Delta t}}{p_i^{t+\Delta t}} \right] \alpha_i \right) + \\
& p_{i-1}^{t+\Delta t} D_{p,z} \frac{1}{l_{i-1}} B(-(V_{i-1}^t - V_i^t)) +
\end{aligned} \tag{A.6}$$

$$\begin{aligned}
& p_{i+1}^{t+\Delta t} D_{p,z} \frac{1}{l_i} B(-(V_{i+1}^t - V_i^t)) \\
& = -G_i^t - \Omega_i^t - \frac{1}{\Delta t} p_i^t \alpha_i
\end{aligned}$$

### Linke Isolator-Halbleiter-Grenzfläche

Diskretisierung gültig für:  $i = n_l$

$$\begin{aligned}
& n_i^{t+\Delta t} \left( -D_{n,z} \frac{2}{l_i^2} B(V_i^t - V_{i+1}^t) - \frac{1}{\Delta t} - \frac{2}{l_i} s_n - \frac{R_i^{t+\Delta t}}{n_i^{t+\Delta t}} \right) + \\
& n_{i+1}^{t+\Delta t} D_{n,z} \frac{2}{l_i^2} B(V_{i+1}^t - V_i^t)
\end{aligned} \tag{A.7}$$

$$\begin{aligned}
& = -G_i^t - \frac{1}{\Delta t} n_i^t - \frac{2}{l_i} j_i^{\text{tunnel},t}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& p_i^{t+\Delta t} \left( -D_{p,z} \frac{2}{l_i^2} B(-(V_i^t - V_{i+1}^t)) - \frac{1}{\Delta t} - \frac{2}{l_i} s_p - \frac{T_i^{t+\Delta t}}{p_i^{t+\Delta t}} \right) + \\
& p_{i+1}^{t+\Delta t} D_{p,z} \frac{2}{l_i^2} B(-(V_{i+1}^t - V_i^t))
\end{aligned} \tag{A.8}$$

$$\begin{aligned}
& = -G_i^t - \Omega_i^t - \frac{1}{\Delta t} p_i^t
\end{aligned}$$

Rechte Halbleiter-Isolator-Grenzfläche

Diskretisierung gültig für:  $i = n_l + n_m$

$$\begin{aligned}
& n_i^{t+\Delta t} \left( -D_{n,z} \frac{2}{l_{i-1}^2} B(V_i^t - V_{i-1}^t) - \frac{1}{\Delta t} - \frac{2}{l_{i-1}} s_n - \frac{R_i^{t+\Delta t}}{n_i^{t+\Delta t}} \right) + \\
& n_{i-1}^{t+\Delta t} D_{n,z} \frac{2}{l_{i-1}^2} B(V_{i-1}^t - V_i^t) \\
& = -G_i^t - \frac{1}{\Delta t} n_i^t - \frac{2}{l_{i-1}} j_i^{\text{tunnel},t}
\end{aligned} \tag{A.9}$$

$$\begin{aligned}
& p_i^{t+\Delta t} \left( -D_{p,z} \frac{2}{l_{i-1}^2} B(-(V_i^t - V_{i-1}^t)) - \frac{1}{\Delta t} - \frac{2}{l_{i-1}} s_p - \frac{T_i^{t+\Delta t}}{p_i^{t+\Delta t}} \right) + \\
& p_{i-1}^{t+\Delta t} D_{p,z} \frac{2}{l_{i-1}^2} B(-(V_{i-1}^t - V_i^t)) \\
& = -G_i^t - \Omega_i^t - \frac{1}{\Delta t} p_i^t
\end{aligned} \tag{A.10}$$

**A.2.3 Kontinuitätsgleichung der eingefangenen Löcher**

Diskretisierung gültig für:  $\forall i \in \{n_l, \dots, n_l + n_m\}$

$$p_i^{\text{trapped},t+\Delta t} = p_i^{\text{trapped},t} + \Delta t (T_i^{t+\Delta t} - R_i^{t+\Delta t} - \Omega_i^t) \tag{A.11}$$

**A.2.4 Grenzflächenladungen**

Diskretisierung gültig für:  $i = n_l, n_l + n_m$

$$\rho_i^{t+\Delta t} = \rho_i^t + \Delta t \left( -s_n n_i^{t+\Delta t} + j_i^{\text{tunnel},t} + s_p p_i^{t+\Delta t} \right) q \tag{A.12}$$

**A.2.5 Generations- und Rekombinationsraten**

$$\text{Stoßionisation:} \quad G_i^t = \alpha(E_i^t) j_i^{n,t} \tag{A.13}$$

$$\text{Rekombination (n-p}^{\text{trapped}}\text{):} \quad R_i^{t+\Delta t} = \sigma_{np_i} v_{\text{therm}} n_i^{t+\Delta t} p_i^{\text{trapped},t} \tag{A.14}$$

$$\text{Löchereinfang:} \quad T_i^{t+\Delta t} = \gamma p_i^{t+\Delta t} (p_{\text{max}}^t - p_i^{\text{trapped},t}) \tag{A.15}$$

$$\text{Löcheremission:} \quad \Omega_i^t = \beta p_i^{\text{trapped},t} \tag{A.16}$$

### A.3 2D Diskretisierung

#### A.3.1 Poisson-Gleichung

##### Kontakte

Diskretisierung gültig für:  $\forall j \in \{1, \dots, n_y + 1\}$

$$V_{1,j}^t = U(t) \quad V_{n_l+n_m+n_r,j}^t = 0 \quad (\text{A.17})$$

##### Gesamtes Simulationsgebiet ohne Grenzflächen

Diskretisierung gültig für:  $\forall i \in \{2, \dots, n_l + n_m + n_r - 1\} \setminus \{n_l, n_l + n_m\}$  und  $\forall j \in \{1, \dots, n_y + 1\}$

$$\begin{aligned} & V_{i,j}^t \left( -\frac{1}{l_i \alpha_i} - \frac{1}{l_{i-1} \alpha_i} - \frac{1}{k_j \beta_j} - \frac{1}{k_{j-1} \beta_j} \right) + \\ & V_{i-1,j}^t \frac{1}{l_{i-1} \alpha_i} + V_{i+1,j}^t \frac{1}{l_i \alpha_i} + V_{i,j-1}^t \frac{1}{k_{j-1} \beta_j} + V_{i,j+1}^t \frac{1}{k_j \beta_j} \\ & = \begin{cases} 0 & \text{für } i = 2, \dots, n_l - 1 \text{ und} \\ & i = n_l + n_m - 1, \dots, n_l + n_m + n_r - 1 \\ \frac{q}{\varepsilon_0 \varepsilon_z} \left( n_{i,j}^t - p_{i,j}^t - p_{i,j}^{\text{trapped},t} \right) & \text{für } i = n_l + 1, \dots, n_l + n_m - 1 \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

##### Linke Isolator-Halbleiter-Grenzfläche

Diskretisierung gültig für:  $i = n_l$  und  $\forall j \in \{1, \dots, n_y + 1\}$

$$\begin{aligned} & V_{i,j}^t \left( -\frac{2\varepsilon_z}{l_i(\varepsilon_{d,1} l_{i-1} + \varepsilon_z l_i)} - \frac{2\varepsilon_{d,1}}{l_{i-1}(\varepsilon_{d,1} l_{i-1} + \varepsilon_z l_i)} - \right. \\ & \quad \left. \frac{1}{k_j \beta_j} - \frac{1}{k_{j-1} \beta_j} \right) + \\ & V_{i-1,j}^t \frac{2\varepsilon_{d,1}}{l_{i-1}(\varepsilon_{d,1} l_{i-1} + \varepsilon_z l_i)} + V_{i+1,j}^t \frac{2\varepsilon_z}{l_i(\varepsilon_{d,1} l_{i-1} + \varepsilon_z l_i)} + \\ & V_{i,j-1}^t \frac{1}{k_{j-1} \beta_j} + V_{i,j+1}^t \frac{1}{k_j \beta_j} \\ & = \frac{q l_i}{\varepsilon_0(\varepsilon_{d,1} l_{i-1} + \varepsilon_z l_i)} \left( n_{i,j}^t - p_{i,j}^t - p_{i,j}^{\text{trapped},t} \right) - \frac{2\rho_{i,j}^{\text{links},t}}{\varepsilon_0(\varepsilon_{d,1} l_{i-1} + \varepsilon_z l_i)} \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

Rechte Halbleiter-Isolator-Grenzfläche

Diskretisierung gültig für:  $i = n_l + n_m$  und  $\forall j \in \{1, \dots, n_y + 1\}$

$$\begin{aligned}
& V_{i,j}^t \left( -\frac{2\varepsilon_{d,2}}{l_i(\varepsilon_{d,2}l_i + \varepsilon_z l_{i-1})} - \frac{2\varepsilon_z}{l_{i-1}(\varepsilon_{d,2}l_i + \varepsilon_z l_{i-1})} - \right. \\
& \quad \left. \frac{1}{k_j\beta_j} - \frac{1}{k_{j-1}\beta_j} \right) + \\
& V_{i-1,j}^t \frac{2\varepsilon_z}{l_{i-1}(\varepsilon_{d,2}l_i + \varepsilon_z l_{i-1})} + V_{i+1,j}^t \frac{2\varepsilon_{d,2}}{l_i(\varepsilon_{d,2}l_i + \varepsilon_z l_{i-1})} + \\
& V_{i,j-1}^t \frac{1}{k_{j-1}\beta_j} + V_{i,j+1}^t \frac{1}{k_j\beta_j} \\
& = \frac{ql_{i-1}}{\varepsilon_0(\varepsilon_{d,2}l_i + \varepsilon_z l_{i-1})} \left( n_{i,j}^t - p_{i,j}^t - p_{i,j}^{\text{trapped},t} \right) - \frac{2\rho_{i,j}^{\text{rechts},t}}{\varepsilon_0(\varepsilon_{d,2}l_i + \varepsilon_z l_{i-1})}
\end{aligned} \tag{A.20}$$

**A.3.2 Kontinuitätsgleichung der Elektronen und der Löcher**Ohne Halbleiter-Isolator-Grenzflächen

Diskretisierung gültig für:  $\forall i \in \{n_l, \dots, n_l + n_m\}$  und  $\forall j \in \{1, \dots, n_y + 1\}$

$$\begin{aligned}
& n_{i,j}^{t+\Delta t} \left( -D_{n,x} \frac{\beta_j}{l_i} B(V_{i,j}^t - V_{i+1,j}^t) - D_{n,x} \frac{\beta_j}{l_{i-1}} B(V_{i,j}^t - V_{i-1,j}^t) - \right. \\
& \quad D_{n,y} \frac{\alpha_i}{k_j} B(V_{i,j}^t - V_{i,j+1}^t) - D_{n,y} \frac{\alpha_i}{k_{j-1}} B(V_{i,j}^t - V_{i,j-1}^t) - \\
& \quad \left. \left[ \frac{1}{\Delta t} + \frac{R_{i,j}^{t+\Delta t}}{n_{i,j}^{t+\Delta t}} \right] \alpha_i \beta_j \right) + \\
& n_{i-1,j}^{t+\Delta t} D_{n,x} \frac{\beta_j}{l_{i-1}} B(V_{i-1,j}^t - V_{i,j}^t) + n_{i+1,j}^{t+\Delta t} D_{n,x} \frac{\beta_j}{l_i} B(V_{i+1,j}^t - V_{i,j}^t) + \\
& n_{i,j-1}^{t+\Delta t} D_{n,y} \frac{\alpha_i}{k_{j-1}} B(V_{i,j-1}^t - V_{i,j}^t) + n_{i,j+1}^{t+\Delta t} D_{n,y} \frac{\alpha_i}{k_j} B(V_{i,j+1}^t - V_{i,j}^t) \\
& = \left( -G_{i,j}^t - \frac{1}{\Delta t} n_{i,j}^t \right) \alpha_i \beta_j
\end{aligned} \tag{A.21}$$

$$\begin{aligned}
& p_{i,j}^{t+\Delta t} \left( -D_{p,x} \frac{\beta_j}{l_i} B(-(V_{i,j}^t - V_{i+1,j}^t)) - D_{p,x} \frac{\beta_j}{l_{i-1}} B(-(V_{i,j}^t - V_{i-1,j}^t)) - \right. \\
& \quad \left. D_{p,y} \frac{\alpha_i}{k_j} B(-(V_{i,j}^t - V_{i,j+1}^t)) - D_{p,y} \frac{\alpha_i}{k_{j-1}} B(-(V_{i,j}^t - V_{i,j-1}^t)) - \right. \\
& \quad \left. \left[ \frac{1}{\Delta t} + \frac{T_{i,j}^{t+\Delta t}}{p_{i,j}^{t+\Delta t}} \right] \alpha_i \beta_j \right) + \\
& p_{i-1,j}^{t+\Delta t} D_{p,x} \frac{\beta_j}{l_{i-1}} B(-(V_{i-1,j}^t - V_{i,j}^t)) + p_{i+1,j}^{t+\Delta t} D_{p,x} \frac{\beta_j}{l_i} B(-(V_{i+1,j}^t - V_{i,j}^t)) + \\
& p_{i,j-1}^{t+\Delta t} D_{p,y} \frac{\alpha_i}{k_{j-1}} B(-(V_{i,j-1}^t - V_{i,j}^t)) + p_{i,j+1}^{t+\Delta t} D_{p,y} \frac{\alpha_i}{k_j} B(-(V_{i,j+1}^t - V_{i,j}^t)) \\
& = \left( -G_{i,j}^t - \Omega_{i,j}^t - \frac{1}{\Delta t} p_{i,j}^t \right) \alpha_i \beta_j
\end{aligned} \tag{A.22}$$

### Linke Isolator-Halbleiter-Grenzfläche

Diskretisierung gültig für:  $i = n_l$  und  $\forall j \in \{1, \dots, n_y + 1\}$

$$\begin{aligned}
& n_{i,j}^{t+\Delta t} \left( -D_{n,x} \frac{2}{l_i^2} B(V_{i,j}^t - V_{i+1,j}^t) - D_{n,y} \frac{1}{k_j \beta_j} B(V_{i,j}^t - V_{i,j+1}^t) - \right. \\
& \quad \left. D_{n,y} \frac{1}{k_{j-1} \beta_j} B(V_{i,j}^t - V_{i,j-1}^t) - \frac{1}{\Delta t} - \frac{2}{l_i} s_n - \frac{R_{i,j}^{t+\Delta t}}{n_{i,j}^{t+\Delta t}} \right) + \\
& n_{i+1,j}^{t+\Delta t} D_{n,x} \frac{2}{l_i^2} B(V_{i+1,j}^t - V_{i,j}^t) + \\
& n_{i,j-1}^{t+\Delta t} D_{n,y} \frac{1}{k_{j-1} \beta_j} B(V_{i,j-1}^t - V_{i,j}^t) + n_{i,j+1}^{t+\Delta t} D_{n,y} \frac{1}{k_j \beta_j} B(V_{i,j+1}^t - V_{i,j}^t) \\
& = -G_{i,j}^t - \frac{1}{\Delta t} n_{i,j}^t - \frac{2}{l_i} J_{i,j}^{\text{tunnel},t} \\
& p_{i,j}^{t+\Delta t} \left( -D_{p,x} \frac{2}{l_i^2} B(-(V_{i,j}^t - V_{i+1,j}^t)) - D_{p,y} \frac{1}{k_j \beta_j} B(-(V_{i,j}^t - V_{i,j+1}^t)) - \right. \\
& \quad \left. D_{p,y} \frac{1}{k_{j-1} \beta_j} B(-(V_{i,j}^t - V_{i,j-1}^t)) - \frac{1}{\Delta t} - \frac{2}{l_i} s_p - \frac{T_{i,j}^{t+\Delta t}}{p_{i,j}^{t+\Delta t}} \right) + \\
& p_{i+1,j}^{t+\Delta t} D_{p,x} \frac{2}{l_i^2} B(-(V_{i+1,j}^t - V_{i,j}^t)) + \\
& p_{i,j-1}^{t+\Delta t} D_{p,y} \frac{1}{k_{j-1} \beta_j} B(-(V_{i,j-1}^t - V_{i,j}^t)) + p_{i,j+1}^{t+\Delta t} D_{p,y} \frac{1}{k_j \beta_j} B(-(V_{i,j+1}^t - V_{i,j}^t)) \\
& = -G_{i,j}^t - \Omega_{i,j}^t - \frac{1}{\Delta t} p_{i,j}^t
\end{aligned} \tag{A.23}$$

$$\begin{aligned}
& p_{i,j}^{t+\Delta t} \left( -D_{p,x} \frac{2}{l_i^2} B(-(V_{i,j}^t - V_{i+1,j}^t)) - D_{p,y} \frac{1}{k_j \beta_j} B(-(V_{i,j}^t - V_{i,j+1}^t)) - \right. \\
& \quad \left. D_{p,y} \frac{1}{k_{j-1} \beta_j} B(-(V_{i,j}^t - V_{i,j-1}^t)) - \frac{1}{\Delta t} - \frac{2}{l_i} s_p - \frac{T_{i,j}^{t+\Delta t}}{p_{i,j}^{t+\Delta t}} \right) + \\
& p_{i+1,j}^{t+\Delta t} D_{p,x} \frac{2}{l_i^2} B(-(V_{i+1,j}^t - V_{i,j}^t)) + \\
& p_{i,j-1}^{t+\Delta t} D_{p,y} \frac{1}{k_{j-1} \beta_j} B(-(V_{i,j-1}^t - V_{i,j}^t)) + p_{i,j+1}^{t+\Delta t} D_{p,y} \frac{1}{k_j \beta_j} B(-(V_{i,j+1}^t - V_{i,j}^t)) \\
& = -G_{i,j}^t - \Omega_{i,j}^t - \frac{1}{\Delta t} p_{i,j}^t
\end{aligned} \tag{A.24}$$

Rechte Halbleiter-Isolator-Grenzfläche

Diskretisierung gültig für:  $i = n_l + n_m$  und  $\forall j \in \{1, \dots, n_y + 1\}$

$$\begin{aligned}
& n_{i,j}^{t+\Delta t} \left( -D_{n,x} \frac{2}{l_{i-1}^2} B(V_{i,j}^t - V_{i-1,j}^t) - D_{n,y} \frac{1}{k_j \beta_j} B(V_{i,j}^t - V_{i,j+1}^t) - \right. \\
& \quad \left. D_{n,y} \frac{1}{k_{j-1} \beta_j} B(V_{i,j}^t - V_{i,j-1}^t) - \frac{1}{\Delta t} - \frac{2}{l_{i-1}} s_n - \frac{R_{i,j}^{t+\Delta t}}{n_{i,j}^{t+\Delta t}} \right) + \\
& n_{i-1,j}^{t+\Delta t} D_{n,x} \frac{2}{l_{i-1}^2} B(V_{i-1,j}^t - V_{i,j}^t) + \\
& n_{i,j-1}^{t+\Delta t} D_{n,y} \frac{1}{k_{j-1} \beta_j} B(V_{i,j-1}^t - V_{i,j}^t) + n_{i,j+1}^{t+\Delta t} D_{n,y} \frac{1}{k_j \beta_j} B(V_{i,j+1}^t - V_{i,j}^t) \\
& = -G_{i,j}^t - \frac{1}{\Delta t} n_{i,j}^t - \frac{2}{l_{i-1}} j_{i,j}^{\text{tunnel},t}
\end{aligned} \tag{A.25}$$

$$\begin{aligned}
& p_{i,j}^{t+\Delta t} \left( -D_{p,x} \frac{2}{l_{i-1}^2} B(-(V_{i,j}^t - V_{i-1,j}^t)) - D_{p,y} \frac{1}{k_j \beta_j} B(-(V_{i,j}^t - V_{i,j+1}^t)) - \right. \\
& \quad \left. D_{p,y} \frac{1}{k_{j-1} \beta_j} B(-(V_{i,j}^t - V_{i,j-1}^t)) - \frac{1}{\Delta t} - \frac{2}{l_{i-1}} s_p - \frac{T_{i,j}^{t+\Delta t}}{p_{i,j}^{t+\Delta t}} \right) + \\
& p_{i-1,j}^{t+\Delta t} D_{p,x} \frac{2}{l_{i-1}^2} B(-(V_{i-1,j}^t - V_{i,j}^t)) + \\
& p_{i,j-1}^{t+\Delta t} D_{p,y} \frac{1}{k_{j-1} \beta_j} B(-(V_{i,j-1}^t - V_{i,j}^t)) + p_{i,j+1}^{t+\Delta t} D_{p,y} \frac{1}{k_j \beta_j} B(-(V_{i,j+1}^t - V_{i,j}^t)) \\
& = -G_{i,j}^t - \Omega_{i,j}^t - \frac{1}{\Delta t} p_{i,j}^t
\end{aligned} \tag{A.26}$$

**A.3.3 Kontinuitätsgleichung der eingefangene Löcher**

Diskretisierung gültig für:  $\forall i \in \{n_l, \dots, n_l + n_m\}$  und  $\forall j \in \{1, \dots, n_y + 1\}$

$$p_{i,j}^{\text{trapped},t+\Delta t} = p_{i,j}^{\text{trapped},t} + \Delta t (T_{i,j}^{t+\Delta t} - R_{i,j}^{t+\Delta t} - \Omega_{i,j}^t) \tag{A.27}$$

**A.3.4 Grenzflächenladungen**

Diskretisierung gültig für:  $i = n_l, n_l + n_m$  und  $\forall j \in \{1, \dots, n_y + 1\}$

$$\rho_{i,j}^{t+\Delta t} = \rho_{i,j}^t + \Delta t \left( -s_n n_{i,j}^{t+\Delta t} + j_{i,j}^{\text{tunnel},t} + s_p p_{i,j}^{t+\Delta t} \right) q \tag{A.28}$$

### A.3.5 Generations- und Rekombinationsraten

Stoßionisation: 
$$G_{i,j}^t = \alpha(E_{i,j}^t) j_{i,j}^{n,t} \quad (\text{A.29})$$

Rekombination ( $n$ - $p^{\text{trapped}}$ ): 
$$R_{i,j}^{t+\Delta t} = \sigma_{np} v_{\text{therm}} n_{i,j}^{t+\Delta t} p_{i,j}^{\text{trapped},t} \quad (\text{A.30})$$

Löchereinfang: 
$$T_{i,j}^{t+\Delta t} = \gamma p_{i,j}^{t+\Delta t} (p_{\text{max}}^t - p_{i,j}^{\text{trapped},t}) \quad (\text{A.31})$$

Löcheremission: 
$$\Omega_{i,j}^t = \beta p_{i,j}^{\text{trapped},t} \quad (\text{A.32})$$

## A.4 3D Diskretisierung

### A.4.1 Poisson-Gleichung

#### Kontakte

Diskretisierung gültig für:  $\forall j \in \{1, \dots, n_y + 1\}$  und  $\forall m \in \{1, \dots, n_x + 1\}$

$$V_{1,j,m}^t = U(t) \quad V_{n_l+n_m+n_r,j,m}^t = 0 \quad (\text{A.33})$$

#### Ohne Isolator-Halbleiter-Grenzflächen

Diskretisierung gültig für:  $\forall i \in \{2, \dots, n_l + n_m + n_r - 1\} \setminus \{n_l, n_l + n_m\}$ ,  $\forall j \in \{1, \dots, n_y + 1\}$  und  $\forall m \in \{1, \dots, n_x + 1\}$

$$\begin{aligned} & V_{i,j,m}^t \left( -\frac{1}{l_i \alpha_i} - \frac{1}{l_{i-1} \alpha_i} - \frac{1}{k_j \beta_j} - \frac{1}{k_{j-1} \beta_j} - \frac{1}{h_m \gamma_m} - \frac{1}{h_{m-1} \gamma_m} \right) + \\ & V_{i-1,j,m}^t \frac{1}{l_{i-1} \alpha_i} + V_{i+1,j,m}^t \frac{1}{l_i \alpha_i} + \\ & V_{i,j-1,m}^t \frac{1}{k_{j-1} \beta_j} + V_{i,j+1,m}^t \frac{1}{k_j \beta_j} + \\ & V_{i,j,m-1}^t \frac{1}{h_{m-1} \gamma_m} + V_{i,j,m+1}^t \frac{1}{h_m \gamma_m} \end{aligned} \quad (\text{A.34})$$

$$= \begin{cases} 0 & \text{für } i = 2, \dots, n_l - 1 \text{ und} \\ & i = n_l + n_m - 1, \dots, n_l + n_m + n_r - 1 \\ \frac{q}{\varepsilon_0 \varepsilon_z} \left( n_{i,j,m}^t - p_{i,j,m}^t - p_{i,j,m}^{\text{trapped},t} \right) & \text{für } i = n_l + 1, \dots, n_l + n_m - 1 \end{cases}$$

**Linke Isolator-Halbleiter-Grenzfläche**

Diskretisierung gültig für:  $i = n_l$ ,  $\forall j \in \{1, \dots, n_y + 1\}$  und  $\forall m \in \{1, \dots, n_x + 1\}$

$$\begin{aligned}
& V_{i,j,m}^t \left( -\frac{2\varepsilon_z}{l_i(\varepsilon_{d,1}l_{i-1} + \varepsilon_z l_i)} - \frac{2\varepsilon_{d,1}}{l_{i-1}(\varepsilon_{d,1}l_{i-1} + \varepsilon_z l_i)} - \right. \\
& \quad \left. \frac{1}{k_j\beta_j} - \frac{1}{k_{j-1}\beta_j} - \frac{1}{h_m\gamma_m} - \frac{1}{h_{m-1}\gamma_m} \right) + \\
& V_{i-1,j,m}^t \frac{2\varepsilon_{d,1}}{l_{i-1}(\varepsilon_{d,1}l_{i-1} + \varepsilon_z l_i)} + V_{i+1,j,m}^t \frac{2\varepsilon_z}{l_i(\varepsilon_{d,1}l_{i-1} + \varepsilon_z l_i)} + \\
& V_{i,j-1,m}^t \frac{1}{k_{j-1}\beta_j} + V_{i,j+1,m}^t \frac{1}{k_j\beta_j} + \\
& V_{i,j,m+1}^t \frac{1}{h_{m-1}\gamma_m} + V_{i,j,m-1}^t \frac{1}{h_m\gamma_m} \\
& = \frac{ql_i}{\varepsilon_0(\varepsilon_{d,1}l_{i-1} + \varepsilon_z l_i)} \left( n_{i,j,m}^t - p_{i,j,m}^t - p_{i,j,m}^{\text{trapped},t} \right) - \frac{2\rho_{i,j,m}^{\text{links},t}}{\varepsilon_0(\varepsilon_{d,1}l_{i-1} + \varepsilon_z l_i)}
\end{aligned} \tag{A.35}$$

**Rechte Halbleiter-Isolator-Grenzfläche**

Diskretisierung gültig für:  $i = n_l + n_m$ ,  $\forall j \in \{1, \dots, n_y + 1\}$  und  $\forall m \in \{1, \dots, n_x + 1\}$

$$\begin{aligned}
& V_{i,j,m}^t \left( -\frac{2\varepsilon_{d,2}}{l_i(\varepsilon_{d,2}l_i + \varepsilon_z l_{i-1})} - \frac{2\varepsilon_z}{l_{i-1}(\varepsilon_{d,2}l_i + \varepsilon_z l_{i-1})} - \right. \\
& \quad \left. \frac{1}{k_j\beta_j} - \frac{1}{k_{j-1}\beta_j} - \frac{1}{h_m\gamma_m} - \frac{1}{h_{m-1}\gamma_m} \right) + \\
& V_{i-1,j,m}^t \frac{2\varepsilon_z}{l_{i-1}(\varepsilon_{d,2}l_i + \varepsilon_z l_{i-1})} + V_{i+1,j,m}^t \frac{2\varepsilon_{d,2}}{l_i(\varepsilon_{d,2}l_i + \varepsilon_z l_{i-1})} + \\
& V_{i,j-1,m}^t \frac{1}{k_{j-1}\beta_j} + V_{i,j+1,m}^t \frac{1}{k_j\beta_j} + \\
& V_{i,j,m+1}^t \frac{1}{h_{m-1}\gamma_m} + V_{i,j,m-1}^t \frac{1}{h_m\gamma_m} \\
& = \frac{ql_{i-1}}{\varepsilon_0(\varepsilon_{d,2}l_i + \varepsilon_z l_{i-1})} \left( n_{i,j,m}^t - p_{i,j,m}^t - p_{i,j,m}^{\text{trapped},t} \right) - \frac{2\rho_{i,j,m}^{\text{rechts},t}}{\varepsilon_0(\varepsilon_{d,2}l_i + \varepsilon_z l_{i-1})}
\end{aligned} \tag{A.36}$$

## A.4.2 Kontinuitätsgleichung der Elektronen und der Löcher

Ohne Halbleiter-Isolator-Grenzflächen

Diskretisierung gültig für:  $\forall i \in \{n_l, \dots, n_l + n_m\} \setminus \{n_l, n_l + n_m\}$ ,  $\forall j \in \{1, \dots, n_y + 1\}$  und  $\forall m \in \{1, \dots, n_x + 1\}$

$$\begin{aligned}
& n_{i,j,m}^{t+\Delta t} \left( -D_{n,z} \frac{\beta_j \gamma_m}{l_i} B(V_{i,j,m}^t - V_{i+1,j,m}^t) - D_{n,z} \frac{\beta_j \gamma_m}{l_{i-1}} B(V_{i,j,m}^t - V_{i-1,j,m}^t) - \right. \\
& \quad D_{n,y} \frac{\alpha_i \gamma_m}{k_j} B(V_{i,j,m}^t - V_{i,j+1,m}^t) - D_{n,y} \frac{\alpha_i \gamma_m}{k_{j-1}} B(V_{i,j,m}^t - V_{i,j-1,m}^t) - \\
& \quad D_{n,x} \frac{\alpha_i \beta_j}{h_m} B(V_{i,j,m}^t - V_{i,j,m+1}^t) - D_{n,x} \frac{\alpha_i \beta_j}{h_{m-1}} B(V_{i,j,m}^t - V_{i,j,m-1}^t) - \\
& \quad \left. \left[ \frac{1}{\Delta t} + \frac{R_{i,j,m}^{t+\Delta t}}{p_{i,j,m}^{t+\Delta t}} \right] \alpha_i \beta_j \gamma_m \right) + \tag{A.37}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& n_{i-1,j,m}^{t+\Delta t} D_{n,z} \frac{\beta_j \gamma_m}{l_{i-1}} B(V_{i-1,j,m}^t - V_{i,j,m}^t) + n_{i+1,j,m}^{t+\Delta t} D_{n,z} \frac{\beta_j \gamma_m}{l_i} B(V_{i+1,j,m}^t - V_{i,j,m}^t) + \\
& n_{i,j-1,m}^{t+\Delta t} D_{n,y} \frac{\alpha_i \gamma_m}{k_{j-1}} B(V_{i,j-1,m}^t - V_{i,j,m}^t) + n_{i,j+1,m}^{t+\Delta t} D_{n,y} \frac{\alpha_i \gamma_m}{k_j} B(V_{i,j+1,m}^t - V_{i,j,m}^t) + \\
& n_{i,j,m-1}^{t+\Delta t} D_{n,x} \frac{\alpha_i \beta_j}{h_{m-1}} B(V_{i,j,m-1}^t - V_{i,j,m}^t) + n_{i,j,m+1}^{t+\Delta t} D_{n,x} \frac{\alpha_i \beta_j}{h_m} B(V_{i,j,m+1}^t - V_{i,j,m}^t) \\
& = \left( G_{i,j,m}^t - \frac{1}{\Delta t} n_{i,j,m}^t \right) \alpha_i \beta_j \gamma_m
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& p_{i,j,m}^{t+\Delta t} \left( -D_{p,z} \frac{\beta_j \gamma_m}{l_i} B(-(V_{i,j,m}^t - V_{i+1,j,m}^t)) - D_{p,z} \frac{\beta_j \gamma_m}{l_{i-1}} B(-(V_{i,j,m}^t - V_{i-1,j,m}^t)) - \right. \\
& \quad D_{p,y} \frac{\alpha_i \gamma_m}{k_j} B(-(V_{i,j,m}^t - V_{i,j+1,m}^t)) - D_{p,y} \frac{\alpha_i \gamma_m}{k_{j-1}} B(-(V_{i,j,m}^t - V_{i,j-1,m}^t)) - \\
& \quad D_{p,x} \frac{\alpha_i \beta_j}{h_m} B(-(V_{i,j,m}^t - V_{i,j,m+1}^t)) - D_{p,x} \frac{\alpha_i \beta_j}{h_{m-1}} B(-(V_{i,j,m}^t - V_{i,j,m-1}^t)) - \\
& \quad \left. \left[ \frac{1}{\Delta t} + \frac{T_{i,j,m}^{t+\Delta t}}{p_{i,j,m}^{t+\Delta t}} \right] \alpha_i \beta_j \gamma_m \right) + \\
& p_{i-1,j,m}^{t+\Delta t} D_{p,z} \frac{\beta_j \gamma_m}{l_{i-1}} B(-(V_{i-1,j,m}^t - V_{i,j,m}^t)) + p_{i+1,j,m}^{t+\Delta t} D_{p,z} \frac{\beta_j \gamma_m}{l_i} B(-(V_{i+1,j,m}^t - V_{i,j,m}^t)) + \\
& p_{i,j-1,m}^{t+\Delta t} D_{p,y} \frac{\alpha_i \gamma_m}{k_{j-1}} B(-(V_{i,j-1,m}^t - V_{i,j,m}^t)) + p_{i,j+1,m}^{t+\Delta t} D_{p,y} \frac{\alpha_i \gamma_m}{k_j} B(-(V_{i,j+1,m}^t - V_{i,j,m}^t)) + \\
& p_{i,j,m-1}^{t+\Delta t} D_{p,x} \frac{\alpha_i \beta_j}{h_{m-1}} B(-(V_{i,j,m-1}^t - V_{i,j,m}^t)) + p_{i,j,m+1}^{t+\Delta t} D_{p,x} \frac{\alpha_i \beta_j}{h_m} B(-(V_{i,j,m+1}^t - V_{i,j,m}^t)) \\
& = \left( -G_{i,j,m}^t - \Omega_{i,j,m}^t - \frac{1}{\Delta t} p_{i,j,m}^t \right) \alpha_i \beta_j \gamma_m \tag{A.38}
\end{aligned}$$

Linke Isolator-Halbleiter-Grenzfläche

Diskretisierung gültig für:  $i = n_l, \forall j \in \{1, \dots, n_y + 1\}$  und  $\forall m \in \{1, \dots, n_x + 1\}$

$$\begin{aligned}
& n_{i,j,m}^{t+\Delta t} \left( -D_{n,z} \frac{2}{l_i^2} B(V_{i,j,m}^t - V_{i+1,j,m}^t) - \right. \\
& D_{n,y} \frac{1}{k_j \beta_j} B(V_{i,j,m}^t - V_{i,j+1,m}^t) - D_{n,y} \frac{1}{k_{j-1} \beta_j} B(V_{i,j,m}^t - V_{i,j-1,m}^t) - \\
& D_{n,x} \frac{1}{h_m \gamma_m} B(V_{i,j,m}^t - V_{i,j,m+1}^t) - D_{n,x} \frac{1}{h_{m-1} \gamma_m} B(V_{i,j,m}^t - V_{i,j,m-1}^t) - \\
& \left. \frac{1}{\Delta t} - \frac{2}{l_i} s_n - \frac{R_{i,j,m}^{t+\Delta t}}{n_{i,j,m}^{t+\Delta t}} \right) + \\
& n_{i+1,j,m}^{t+\Delta t} D_{n,z} \frac{2}{l_i^2} B(V_{i+1,j,m}^t - V_{i,j,m}^t) + \\
& n_{i,j-1,m}^{t+\Delta t} D_{n,y} \frac{1}{k_{j-1} \beta_j} B(V_{i,j-1,m}^t - V_{i,j,m}^t) + n_{i,j+1,m}^{t+\Delta t} D_{n,y} \frac{1}{k_j \beta_j} B(V_{i,j+1,m}^t - V_{i,j,m}^t) + \\
& n_{i,j,m-1}^{t+\Delta t} D_{n,x} \frac{1}{h_{m-1} \gamma_m} B(V_{i,j,m-1}^t - V_{i,j,m}^t) + n_{i,j,m+1}^{t+\Delta t} D_{n,x} \frac{1}{h_m \gamma_m} B(V_{i,j,m+1}^t - V_{i,j,m}^t) \\
& = -G_{i,j,m}^t - \frac{1}{\Delta t} n_{i,j,m}^t - \frac{2}{l_i} j_{i,j,m}^{\text{tunnel},t}
\end{aligned} \tag{A.39}$$

$$\begin{aligned}
& p_{i,j,m}^{t+\Delta t} \left( -D_{p,z} \frac{2}{l_i^2} B(-(V_{i,j,m}^t - V_{i+1,j,m}^t)) - \right. \\
& D_{p,y} \frac{1}{k_j \beta_j} B(-(V_{i,j,m}^t - V_{i,j+1,m}^t)) - D_{p,y} \frac{1}{k_{j-1} \beta_j} B(-(V_{i,j,m}^t - V_{i,j-1,m}^t)) - \\
& D_{p,x} \frac{1}{h_m \gamma_m} B(-(V_{i,j,m}^t - V_{i,j,m+1}^t)) - D_{p,x} \frac{1}{h_{m-1} \gamma_m} B(-(V_{i,j,m}^t - V_{i,j,m-1}^t)) - \\
& \left. \frac{1}{\Delta t} - \frac{2}{l_i} s_p - \frac{T_{i,j,m}^{t+\Delta t}}{p_{i,j,m}^{t+\Delta t}} \right) + \\
& p_{i+1,j,m}^{t+\Delta t} D_{p,z} \frac{2}{l_i^2} B(-(V_{i+1,j,m}^t - V_{i,j,m}^t)) + \\
& p_{i,j-1,m}^{t+\Delta t} D_{p,y} \frac{1}{k_{j-1} \beta_j} B(-(V_{i,j-1,m}^t - V_{i,j,m}^t)) + p_{i,j+1,m}^{t+\Delta t} D_{p,y} \frac{1}{k_j \beta_j} B(-(V_{i,j+1,m}^t - V_{i,j,m}^t)) + \\
& p_{i,j,m-1}^{t+\Delta t} D_{p,x} \frac{1}{h_{m-1} \gamma_m} B(-(V_{i,j,m-1}^t - V_{i,j,m}^t)) + p_{i,j,m+1}^{t+\Delta t} D_{p,x} \frac{1}{h_m \gamma_m} B(-(V_{i,j,m+1}^t - V_{i,j,m}^t)) \\
& = -G_{i,j,m}^t - \Omega_{i,j,m}^t - \frac{1}{\Delta t} p_{i,j,m}^t
\end{aligned} \tag{A.40}$$

Rechte Halbleiter-Isolator-Grenzfläche

Diskretisierung gültig für:  $i = n_l + n_m, \forall j \in \{1, \dots, n_y + 1\}$  und  $\forall m \in \{1, \dots, n_x + 1\}$

$$\begin{aligned}
& n_{i,j,m}^{t+\Delta t} \left( -D_{n,z} \frac{2}{l_{i-1}^2} B(V_{i,j,m}^t - V_{i-1,j,m}^t) - \right. \\
& \quad D_{n,y} \frac{1}{k_j \beta_j} B(V_{i,j,m}^t - V_{i,j+1,m}^t) - D_{n,y} \frac{1}{k_{j-1} \beta_j} B(V_{i,j,m}^t - V_{i,j-1,m}^t) - \\
& \quad D_{n,x} \frac{1}{h_m \gamma_m} B(V_{i,j,m}^t - V_{i,j,m+1}^t) - D_{n,x} \frac{1}{h_{m-1} \gamma_m} B(V_{i,j,m}^t - V_{i,j,m-1}^t) - \\
& \quad \left. \frac{1}{\Delta t} - \frac{2}{l_{i-1}} s_n - \frac{R_{i,j,m}^{t+\Delta t}}{n_{i,j,m}^{t+\Delta t}} \right) + \\
& n_{i-1,j,m}^{t+\Delta t} D_{n,z} \frac{2}{l_{i-1}^2} B(V_{i-1,j,m}^t - V_{i,j,m}^t) + \\
& n_{i,j-1,m}^{t+\Delta t} D_{n,y} \frac{1}{k_{j-1} \beta_j} B(V_{i,j-1,m}^t - V_{i,j,m}^t) + n_{i,j+1,m}^{t+\Delta t} D_{n,y} \frac{1}{k_j \beta_j} B(V_{i,j+1,m}^t - V_{i,j,m}^t) + \\
& n_{i,j,m-1}^{t+\Delta t} D_{n,x} \frac{1}{h_{m-1} \gamma_m} B(V_{i,j,m-1}^t - V_{i,j,m}^t) + n_{i,j,m+1}^{t+\Delta t} D_{n,x} \frac{1}{h_m \gamma_m} B(V_{i,j,m+1}^t - V_{i,j,m}^t) \\
& = -G_{i,j,m}^t - \frac{1}{\Delta t} n_{i,j,m}^t - \frac{2}{l_{i-1}} j_{i,j,m}^{\text{tunnel},t}
\end{aligned} \tag{A.41}$$

$$\begin{aligned}
& p_{i,j,m}^{t+\Delta t} \left( -D_{p,z} \frac{2}{l_{i-1}^2} B(-(V_{i,j,m}^t - V_{i-1,j,m}^t)) - \right. \\
& \quad D_{p,y} \frac{1}{k_j \beta_j} B(-(V_{i,j,m}^t - V_{i,j+1,m}^t)) - D_{p,y} \frac{1}{k_{j-1} \beta_j} B(-(V_{i,j,m}^t - V_{i,j-1,m}^t)) - \\
& \quad D_{p,x} \frac{1}{h_m \gamma_m} B(-(V_{i,j,m}^t - V_{i,j,m+1}^t)) - D_{p,x} \frac{1}{h_{m-1} \gamma_m} B(-(V_{i,j,m}^t - V_{i,j,m-1}^t)) - \\
& \quad \left. \frac{1}{\Delta t} - \frac{2}{l_{i-1}} s_p - \frac{T_{i,j,m}^{t+\Delta t}}{p_{i,j,m}^{t+\Delta t}} \right) + \\
& p_{i-1,j,m}^{t+\Delta t} D_{p,z} \frac{2}{l_{i-1}^2} B(-(V_{i-1,j,m}^t - V_{i,j,m}^t)) + \\
& p_{i,j-1,m}^{t+\Delta t} D_{p,y} \frac{1}{k_{j-1} \beta_j} B(-(V_{i,j-1,m}^t - V_{i,j,m}^t)) + p_{i,j+1,m}^{t+\Delta t} D_{p,y} \frac{1}{k_j \beta_j} B(-(V_{i,j+1,m}^t - V_{i,j,m}^t)) + \\
& p_{i,j,m-1}^{t+\Delta t} D_{p,x} \frac{1}{h_{m-1} \gamma_m} B(-(V_{i,j,m-1}^t - V_{i,j,m}^t)) + p_{i,j,m+1}^{t+\Delta t} D_{p,x} \frac{1}{h_m \gamma_m} B(-(V_{i,j,m+1}^t - V_{i,j,m}^t)) \\
& = -G_{i,j,m}^t - \Omega_{i,j,m}^t - \frac{1}{\Delta t} p_{i,j,m}^t
\end{aligned} \tag{A.42}$$

### A.4.3 Kontinuitätsgleichung der eingefangenen Löcher

Diskretisierung gültig für:  $\forall i \in \{n_l, \dots, n_l + n_m\}$ ,  $\forall j \in \{1, \dots, n_y + 1\}$  und  $\forall m \in \{1, \dots, n_x + 1\}$

$$p_{i,j,m}^{\text{trapped},t+\Delta t} = p_{i,j,m}^{\text{trapped},t} + \Delta t (T_{i,j,m}^{t+\Delta t} - R_{i,j,m}^{t+\Delta t} - \Omega_{i,j,m}^t) \quad (\text{A.43})$$

### A.4.4 Grenzflächenladungen

Diskretisierung gültig für:  $i = n_l, n_l + n_m$  und  $\forall j \in \{1, \dots, n_y + 1\}$

$$\rho_{i,j,m}^{t+\Delta t} = \rho_{i,j,m}^t + \Delta t \left( -s_n n_{i,j,m}^{t+\Delta t} + J_{i,j,m}^{\text{tunnel},t} + s_p p_{i,j,m}^{t+\Delta t} \right) q \quad (\text{A.44})$$

### A.4.5 Generations- und Rekombinationsraten

$$\text{Stoßionisation:} \quad G_{i,j,m}^t = \alpha(E_{i,j,m}^t) J_{i,j}^{n,t} \quad (\text{A.45})$$

$$\text{Rekombination } (n\text{-}p^{\text{trapped}}) : \quad R_{i,j,m}^{t+\Delta t} = \sigma_{npt} v_{\text{therm}} n_{i,j,m}^{t+\Delta t} p_{i,j,m}^{\text{trapped},t} \quad (\text{A.46})$$

$$\text{Löchereinfang:} \quad T_{i,j,m}^{t+\Delta t} = \gamma p_{i,j,m}^{t+\Delta t} (p_{\text{max}}^t - p_{i,j,m}^{\text{trapped},t}) \quad (\text{A.47})$$

$$\text{Löcheremission:} \quad \Omega_{i,j,m}^t = \beta p_{i,j,m}^{\text{trapped},t} \quad (\text{A.48})$$

## Anhang B

# Koeffizientenmatrizen in der 2D Simulation

[Struktur der Koeffizientenmatrizen in der 2D Simulation] In diesem Abschnitt wird der schematische Aufbau der Koeffizientenmatrizen gezeigt. Vom besonderen Interesse sind die Positionen der einzelnen von Null verschiedenen Koeffizienten. Die linearen dünnbesetzten Gleichungssysteme ergeben sich aufgrund der zeit- und räumlichen Diskretisierung. Im folgenden wird die Matrix für ein 2D Raster, das aus  $4 \times 4$  ( $n_z = 4$ ,  $n_y = 4$ ) Diskretisierungspunkten besteht, abgebildet. Die resultierende Matrix hat daher eine Bandbreite von  $B = 9$ . Diese Variable gibt die Zahl der Diagonalen in der Matrix an, in den von Null verschiedene Elemente auftauchen.

- Ordnungsschema:  $Z = n_y(i - 1) + j$
- ★: Hauptdiagonale (HD)
- ●: eine Diagonale ober- bzw. unterhalb der HD
- ◆:  $(n_y - 1)$  Diagonalen ober- bzw. unterhalb der HD
- ▲:  $n_y$  Diagonalen ober- bzw. unterhalb der HD



## Anhang C

# Struktur der Koeffizientenmatrizen in der 3D Simulation

Hier wird der schematische Aufbau der Matrizen des 3D Problems gezeigt. In diesem Beispielfall besteht das Diskretisierungsraster aus  $3 \times 3 \times 3$ , also  $n_x = n_y = n_z = 3$ , Punkten. Die Bandbreite beträgt hier  $B = 18$ .

- Ordnungsschema:  $Z = n_x(j - 1) + n_x n_y(i - 1) + m$
- ★: Hauptdiagonale (HD)
- ●: eine Diagonale ober- bzw. unterhalb der HD
- ▲:  $(n_x - 1)$  Diagonalen ober- bzw. unterhalb der HD
- ▼:  $n_x$  Diagonalen ober- bzw. unterhalb der HD
- ■:  $(n_y - 1)n_x$  Diagonalen ober- bzw. unterhalb der HD
- ◆:  $n_x n_y$  Diagonalen ober- bzw. unterhalb der HD

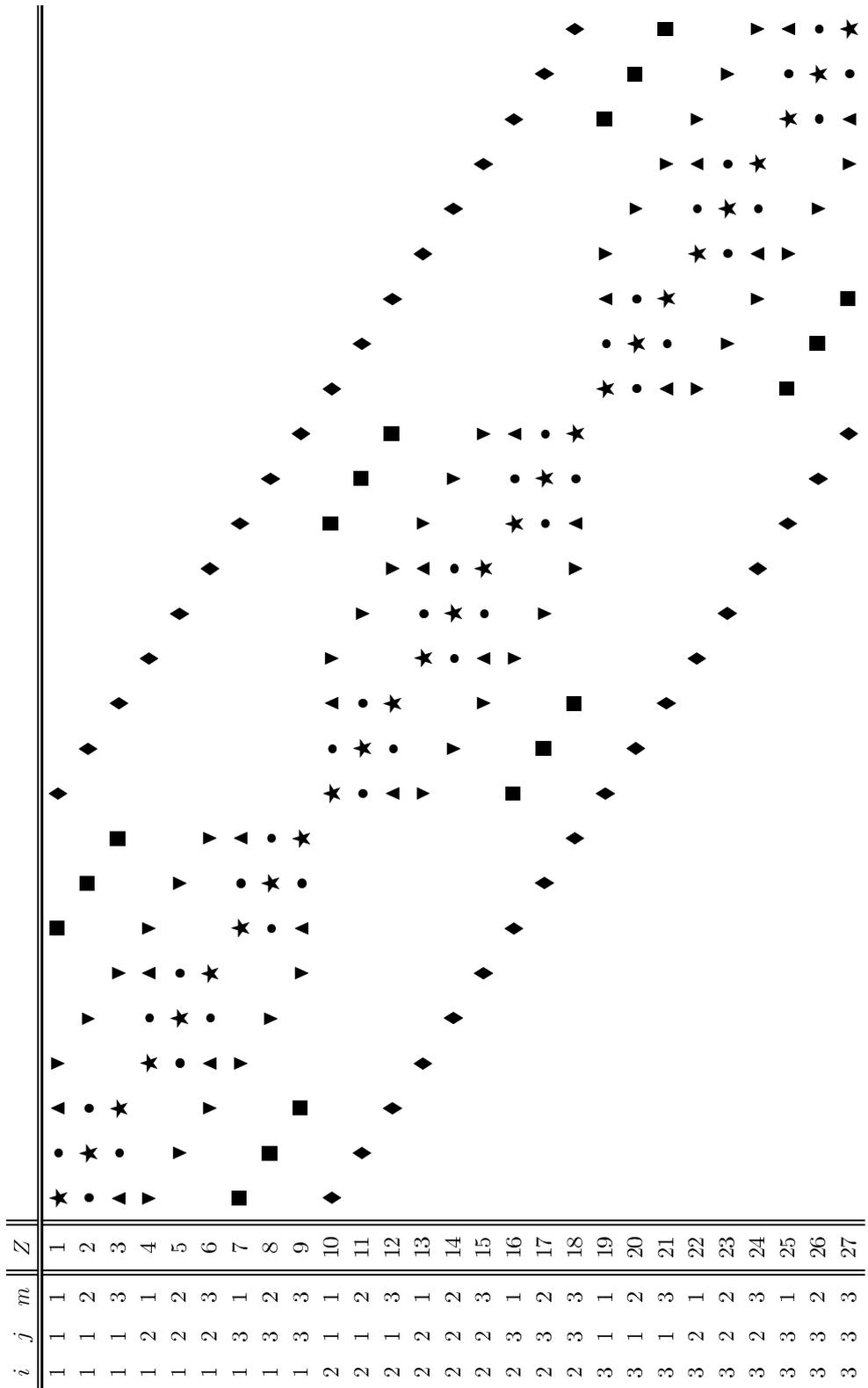


Abbildung C.1: Schematischer Aufbau der Matrizen im 3D Fall. Nur die verschiedenen Symbole deuten auf von Null verschiedene Matrix an. Alle anderen Elemente sind identisch Null.





# Literaturverzeichnis

- [ADAM und HITTMAIR 1988] ADAM, G. und O. HITTMAIR (1988). *Wärmetheorie*. Vieweg Verlag.
- [AMMELT et al. 1998] AMMELT, E., Y. A. ASTROV und H.-G. PURWINS (1998). *Hexagon structures in a two-dimensional dc-driven gas discharge system*. Phys. Rev. E **58** (6), 7109.
- [ANDERSON et al. 1995] ANDERSON, E., Z. BAI, C. BISCHOF, S. BLACKFORD, J. DEMMEL, J. DONGARRA, J. D. CROZ, A. GREENBAUM, S. HAMMARLING, A. MCKENNEY und D. SORENSEN (1995). *Lapack User's Guide*. Society for Industrial and Applied Mathematics.
- [ASTROV und PURWINS 2001] ASTROV, YU. A. und H.-G. PURWINS (2001). *Plasma Spots in a Gas Discharge System: Birth, Scattering and Formation of Molecules*. Phys. Lett. A **283** (5-6), 349.
- [BEALE 1993] BEALE, M. (1993). *Uniform and filamentary transport in d.c. thin-film ZnS:Mn electroluminescent devices*. Philosophical Magazine B **68**, 573.
- [BELETSKII und VLASENKO 1993a] BELETSKII, A. und N. VLASENKO (1993a). *Autowaves in Electroluminescent Structures with Intrinsic Memory*. Tech. Phys. Lett. **19**, 1, 13.
- [BELETSKII und VLASENKO 1993b] BELETSKII, A. und N. VLASENKO (1993b). *Flip-Flop Autowaves in Thin-Film electroluminescent Structures*. Tech. Phys. Lett. **19**, 61.
- [BERRETT et al. 1994] BERRETT, R., M. BERRY, T. CHAN, J. DEMMEL, J. DONATO, J. DONGARRA, V. EIJKHOUT, R. POZO, C. ROMINE und H. VAN DER VORST (1994). *Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods*. Society for Industrial and Applied Mathematics.

- [BHATTACHARYYA et al. 1993] BHATTACHARYYA, K., S. M. GOODNICK und J. F. WAGER (1993). *Monte Carlo simulation of electron transport in alternating current thin-film electroluminescent devices*. J. Appl. Phys. **73**, 3390.
- [BRAUER 2000] BRAUER, I. (2000). *Experimentelle und numerische Untersuchungen zur Strukturbildung in dielektrischen Barrierenentladungen*. Doktorarbeit, Institut für Angewandte Physik, WWU-Münster.
- [BRAUER et al. 1999] BRAUER, I., C. PUNSET, H.-G. PURWINS und J. BOEUF (1999). *Simulation of Self-Organized Filaments in a Dielectric Barrier Glow Discharge*. J. App. Phys. **85**, 7569.
- [BRENNAN 1988] BRENNAN, K. (1988). *Theory of high-field transport in bulk ZnS and ZnSe*. J. Appl. Phys. **64**, 4024.
- [BREUER et al. 2004] BREUER, M., S. WESSLING, J. SCHMALZL und U. HANSEN (2004). *Effect of inertia in Rayleigh-Bénard convection*. Physical Review E **69**, 26302-1.
- [BRINGUIER 1989] BRINGUIER, E. (1989). *Charge transfer in ZnS-type electroluminescence*. J. Appl. Phys. **66**, 1314.
- [BRINGUIER 1990] BRINGUIER, E. (1990). *Electron multiplication in ZnS-type electroluminescent devices*. Appl. Phys. Lett. **67**, 7040.
- [BRINGUIER 1991] BRINGUIER, E. (1991). *Impact excitation in ZnS-type electroluminescence*. J. Appl. Phys. **70**, 4505.
- [BRINGUIER 1992] BRINGUIER, E. (1992). *Charge transfer in ZnS-type electroluminescence revisited*. Appl. Phys. Lett. **60** (10), 1256.
- [BRINGUIER 1994] BRINGUIER, E. (1994). *Tentative anatomy of ZnS-type electroluminescence*. J. Appl. Phys. **75**, 4291.
- [BRINGUIER 1997] BRINGUIER, E. (1997). *High-field conduction in semi-insulating ZnS films*. Philosophical Magazine B **75**, 209.
- [CERCIGNANI 1988] CERCIGNANI, C. (1988). *The Boltzmann Equation and its Applications*. Springer Verlag.
- [COMPAQ COMPUTER CORPORATION 2001] COMPAQ COMPUTER CORPORATION (2001). *Compaq Extended Math Library, Reference Guide*. Houston Texas.
- [CZYCHOLL 2000] CZYCHOLL, G. (2000). *Theoretische Festkörperphysik*. Vieweg Verlag.

- [DESTRIAU 1936] DESTRIAU, G. (1936). *J. Chem. Physique Phys.* **33**, 587.
- [FERRY und JACOBONI 1992] FERRY, D. K. und C. JACOBONI (1992). *Quantum Transport in Semiconductors*. Plenum Publishing Corporation.
- [FLIESSBACH 1995] FLIESSBACH, T. (1995). *Statistische Physik*. Spektrum Akademischer Verlag.
- [FURDYNA et al. 1996] FURDYNA, J., M. DOBROWOLSKA und H. LUO (1996). *Semiconductors, Diluted Magnetic*. Encyclopedia of Applied Physics **17**, 403.
- [GLANSDORFF und PRIGOGINE 1971] GLANSDORFF, P. und I. PRIGOGINE (1971). *Thermodynamic Theory of Structure, Stability and Fluctuations*. Wiley.
- [GOLDENBLUM et al. 1994] GOLDENBLUM, A., A. OPREA und V. BOGATU (1994). *Time behavior of currents in ZnS:Mn metal-insulator-semiconductor-insulator-metal structures*. J. Appl. Phys. **75**, 5177.
- [GOSSEN 1994] GOSSEN, C. (1994). *Strukturbildung in der ZnS:Mn-Elektrolumineszenz*. Diplomarbeit, Institut für Angewandte Physik, WWU Münster.
- [GOSSEN et al. 1995] GOSSEN, C., F.-J. NIEDERNOSTHEIDE und H.-G. PURWINS (1995). *Pattern formation of the electroluminescence in AC ZnS:Mn devices*. Springer Proceedings in Physics **79**, Nonlinear Dynamics and Pattern Formation in Semiconductors and Devices.
- [GROSSMANN und ROOS 1993] GROSSMANN, C. und H.-G. ROOS (1993). *Numerik partieller Differentialgleichungen*. Teubner Studienbücher Mathematik.
- [GUMMEL 1964] GUMMEL, H. K. (1964). *A self-consistent iterative scheme for one-dimensional steady state transistor calculations*. IEEE Trans. Electron Devices ED-**11**, 11, 455-465.
- [HACKBUSCH 1994] HACKBUSCH, W. (1994). *Iterative Solution of Large Sparse Systems*. Springer Verlag.
- [HAKEN 1983] HAKEN, H. (1983). *Synergetik*. Springer Verlag.
- [HAUG 1996] HAUG, H. (1996). *Statistische Physik*. World Scientific.
- [HOWARD 1977] HOWARD, W. (1977). *The importance of insulator properties in a thin-film electroluminescent device*. IEEE Trans. Electron Devices ED-**24**, 7, 903.

- [HOWARD 1981] HOWARD, W. (1981). *Memory in thin-film electroluminescent devices*. J. Lumin. **23**, 155.
- [HOWARD et al. 1982] HOWARD, W., O. SAHNI und P. ALT (1982). *A simple model for the hysteretic behavior of ZnS:Mn thin-film electroluminescent devices*. J. Appl. Phys. **53**, 639.
- [H.RÜFER et al. 1980] H.RÜFER, W. MARRELLO und A. ONTON (1980). *Domain Electroluminescence in AC Thin-Film Devices*. J. Appl. Phys. **51**(2), 1163.
- [INOUCHI und MITO 1973] INOUCHI, T. und S. MITO (1973). *Phosphor Films*. Journal of the French Physical Society **37**, 4485.
- [JAREM und SINGH 1988] JAREM, J. und V. SINGH (1988). *A computationally simple model for hysteretic thin-film electroluminescent devices*. IEEE Trans. Electron Devices ED-**35**, 1834.
- [JÄCKLE 1978] JÄCKLE, J. (1978). *Einführung in die Transporttheorie*. Vieweg Verlag.
- [KEIR et al. 1995] KEIR, P., W. ANG und J. WAGER (1995). *Modeling space charge in alternating current thin-film electroluminescent devices using a single-sheet charge model*. J. Appl. Phys. **78**, 4668.
- [KIND et al. 2002] KIND, R., U. HANSEN und F. SCHILLING (2002). *Die Physik des Erdmantels*. Physik Journal 1 Nr. **20**.
- [KITTEL 1996] KITTEL, C. (1996). *Einführung in die Festkörperphysik*. Oldenbourg.
- [KNABER und ANGERMANN 2000] KNABER, P. und L. ANGERMANN (2000). *Numerik partieller Differentialgleichungen*. Springer Verlag.
- [KUKUK et al. 1997] KUKUK, B., S. ZUCCARO, F.-J. NIEDERNOSTHEIDE und H.-G. PURWINS (1997). *Pattern Formation and bifurcations in electroluminescent ZnS:Mn Films*. Acta Techn. CSAV **42**, 717-722.
- [LUNDSTROM 2000] LUNDSTROM, M. (2000). *Fundamentals of carrier transport*. Cambridge University Press.
- [MACH und MÜLLER 1982] MACH, R. und G. O. MÜLLER (1982). *Physical Concepts of High Field, Thin-Film Electroluminescence Devices*. Phys. stat. sol. (a) **69**, 11.
- [MACH und MÜLLER 2000] MACH, R. und G. O. MÜLLER (2000). *Thin-Film Electroluminescence*. Semiconductors and Semimetals **65**, 25.

- [MADELUNG 1970] MADELUNG, O. (1970). *Grundlagen der Halbleiterphysik*. Springer Verlag.
- [MADELUNG 1972] MADELUNG, O. (1972). *Festkörpertheorie, Bände I-III*. Springer Verlag.
- [MAIER 1998] MAIER, A. (1998). *Reaktions-Diffusions-Modelle zur Strukturbildung in ZnS-Filmen*. Diplomarbeit, Institut für Theoretische Physik, TU Berlin.
- [DE MARI 1968a] MARI, A. DE (1968a). *An accurate numerical steady state one-dimensional solution of the p-n junction*. Solid State Electron. **11**, 33-58.
- [DE MARI 1968b] MARI, A. DE (1968b). *An accurate numerical steady state one-dimensional solution of the p-n junction under arbitrary transient conditions*. Solid State Electron. **11**, 1021-1053.
- [MARKOWICH et al. 1990] MARKOWICH, P., C. RINGHOFER und C. SCHMEISER (1990). *Semiconductor Equations*. Springer Verlag.
- [MARRELLO und ONTON 1980] MARRELLO, V. und A. ONTON (1980). *Dependence of Electroluminescence Efficiency and Memory Effect on Mn Concentration in ZnS:Mn ACTEL Devices*. IEEE Trans. Electron Devices ED-**37**, 1767.
- [MARRELLO et al. 1977] MARRELLO, V., W. RÜHLE und A. ONTON (1977). *The Memory Effect of ZnS:Mn AC Thin-Film Electroluminescence*. Appl. Phys. Lett. **31**, 452.
- [MEINHARDT 1982] MEINHARDT, H. (1982). *Models of Biological Pattern Formation*. Academic Press London.
- [MEYER 2003] MEYER, K. (2003). *Hydrodynamischer Ladungsträgertransport in ZnS:Mn MISIM-Strukturen*. Diplomarbeit, Institut für Festkörpertheorie, WWU-Münster.
- [MURRAY 1989] MURRAY, J. (1989). *Mathematical Biology*. Oxford Science Publications.
- [MÜLLER et al. 1999] MÜLLER, I., C. PUNSET, E. AMMELT, H.-G. PURWINS und J. BOEUF (1999). *Self-Organized Filaments in Dielectric Barrier Glow Discharges*. IEEE Transactions on Plasma Science **27**, 20.
- [NEYTS 1991] NEYTS, K. (1991). *Simple model for the hysteretic behavior of thin-film electroluminescent devices*. IEEE Trans. Electron Devices ED-**38**, 2604.

- [NEYTS et al. 1994] NEYTS, K., D. CORLATAN, P. VISSCHERE und J. DEN BOSSCHE (1994). *Observation and simulation of space-charge effects and hysteresis in ZnS:Mn ac thin-film electroluminescent devices*. J. Appl. Phys. **75**, 5339.
- [NEYTS und VISSCHERE 1990] NEYTS, K. und P. D. VISSCHERE (1990). *Analytical model for thin-film electroluminescent devices*. J. Appl. Phys. **66** (8).
- [NICOLIS und PRIGOGINE 1987] NICOLIS, G. und I. PRIGOGINE (1987). *Die Erforschung des Komplexen*. Piper.
- [NIEDERNOSTHEIDE 1999] NIEDERNOSTHEIDE, F.-J. (1999). *Selbstorganisation in Halbleitern*. Habilitationsschrift, Institut für Angewandte Physik, WWU-Münster.
- [NOLTING 1993] NOLTING, W. (1993). *Grundkurs: Theoretische Physik Band 3*. Verlag Zimmermann-Neufang.
- [NOLTING 1996] NOLTING, W. (1996). *Grundkurs: Theoretische Physik Band 6*. Verlag Zimmermann-Neufang.
- [ONO 1995] ONO, Y. (1995). *Electroluminescent Displays*. World Scientific.
- [ONO 1997] ONO, Y. (1997). *Materials for full-colour electroluminescent Displays*. Annu. Rev. Mater. Sci. **27**, 283.
- [ONO et al. 1987] ONO, Y. et al. (1987). *Transferred charge in the active layer and EL device characteristics of TFEL cells*. Jpn. J. Appl. Phys. **73**, 1482.
- [PRESS et al. 1992] PRESS, W., S. TEUKOLSKY, W. VETTERLING und B. FLANNERY (1992). *Numerical Recipes in Fortran*. Cambridge University Press.
- [RAKER 2000] RAKER, T. (2000). *Ladungsträgerdynamik in ZnS:Mn MISIM-Strukturen*. Diplomarbeit, Institut für Theoretische Physik II, WWU-Münster.
- [RAKER et al. 2002] RAKER, T., T. KUHN, N. FITZER, R. REDMER, S. ZUCCARO, F.-J. NIEDERNOSTHEIDE und H.-G. PURWINS (2002). *High-field transport in electroluminescent devices: theory and experiment*. Physica B **314**, 185.
- [REIGROTZKI et al. 2001] REIGROTZKI, M. et al. (2001). *Impact ionization and high field effects in wide band gap semiconductors*. Int. J. of High Speed Electronics and Systems **11**, 511.
- [REISER 1972] REISER, M. (1972). *Large-scale numerical simulation in semiconductor device modelling*. Comp. Meth. Appl. Mech. Eng. **1**, pp. 17-38.

- [REISER 1973] REISER, M. (1973). *A two-dimensional numerical FET model for DC, AC and large signal analysis*. IEEE Trans. Electron Devices ED-**20**, 35-45.
- [RIECKERS und STUMPF 1977] RIECKERS, A. und H. STUMPF (1977). *Thermodynamik Band 2*. Vieweg Verlag.
- [RIGBY et al. 1988] RIGBY, N., T. THOMPSON und J. ALLEN (1988). *Hot-electron effects in zinc sulphide*. J. Phys. C: Solid State Phys. **21**, 3295.
- [RÖPKE 1986] RÖPKE, G. (1986). *Statistische Mechanik für das Nichtgleichgewicht*. Weinheim: Physik Verlag.
- [RÜHLE et al. 1979] RÜHLE, W., V. MARRELLO und A. ONTON (1979). *Filamentary AC Electroluminescence in ZnS:Mn-Films*. J. Elec. Mat. **8**, 839.
- [SAPOVAL und HERMANN 1993] SAPOVAL, B. und C. HERMANN (1993). *Physics of Semiconductors*. Springer Verlag.
- [SASAKURA et al. 1981a] SASAKURA, H., H. KOBAYASHI, S. TANAKA, J. MITTA und T. TANAKA (1981a). *Electroluminescent mechanisms of ZnS:Mn and ZnS:TbF<sub>3</sub> ac thin-film devices*. J. Luminescence **24/25**, 897.
- [SASAKURA et al. 1981b] SASAKURA, H., H. KOBAYASHI, S. TANAKA, J. MITTA, T. TANAKA und H. NAKAYAMA (1981b). *The dependences of electroluminescent characteristics of ZnS:Mn thin-films upon their device parameters*. J. Appl. Phys. **52**, 6901.
- [SCHARFETTER und GUMMEL 1969] SCHARFETTER, D. L. und H. K. GUMMEL (1969). *Large-signal analysis of a silicon Read diode oscillator*. IEEE Trans. Electron Devices ED-**16**, 64-77.
- [SCHENK 2001] SCHENK, A. (2001). *Halbleiterbauelemente - Physikalische Grundlagen und Simulation*. Homepage von Andreas Schenk (ETH Zürich).
- [SCHÖLL 1987] SCHÖLL, E. (1987). *Nonequilibrium Phase Transitions in Semiconductors*. Springer Verlag.
- [SCHÖLL 2001] SCHÖLL, E. (2001). *Nonlinear Spatio-Temporal Dynamics and Chaos in Semiconductors*. Cambridge University Press.
- [SCHÖLL et al. 1998] SCHÖLL, E., F.-J. NIEDERNOSTHEIDE, J. PARISI, W. PRETTL und H.-G. PURWINS (1998). *Formation of Spatio-Temporal Structures in Semiconductors*. In: BUSSE, F. und S. MÜLLER, Hrsg.: *Evolution of Spontaneous Structures in Dissipative Continuous Systems*, S. 446–494. Springer Verlag.

- [SEEGER 1996] SEEGER, K. (1996). *Semiconductor Physics*. Springer Verlag.
- [SELBERHERR 1984] SELBERHERR, S. (1984). *Analysis and Simulation of Semiconductor Devices*. Springer Verlag.
- [SHIH et al. 1995] SHIH, S., P. KEIR und J. WAGER (1995). *Space charge generation in alternating current thin-film electroluminescent devices*. J. Appl. Phys. **78**, 5775.
- [SLOOTBOM 1969] SLOOTBOM, J. W. (1969). *Iterative scheme for 1- and 2-dimensional DC transistor simulation*. Electron. Lett. **5**, 677-678.
- [SLOOTBOM 1972] SLOOTBOM, J. W. (1972). *Computer-aided two-dimensional analysis of bipolar transistors*. IEEE Trans. Electron Devices ED-**20**, 669-679.
- [SMITH 1981] SMITH, D. H. (1981). *Modeling AC Thin-Film Electroluminescent Devices*. J. Lumin. **23**, 209.
- [SNOWDEN 1986] SNOWDEN, C. M. (1986). *Introduction to semiconductor device modeling*. World Scientific.
- [STOER 1994] STOER, J. (1994). *Numerische Mathematik*. Springer Verlag.
- [STRYCH 1996] STRYCH, M. (1996). *Statistische Untersuchungen von Leuchtdichteverteilungen in ZnS:Mn Strukturen*. Diplomarbeit, Institut für Angewandte Physik, WWU Münster.
- [STRÜMPPEL et al. 2001] STRÜMPPEL, C., H.-G. PURWINS und Y. A. ASTROV (2001). *Spatiotemporal filamentary patterns in a dc-driven planar gas discharge system*. Phys. Rev. E **63** (2), 26409-1.
- [SZE 1969] SZE, S. (1969). *Physics of Semiconductor Devices*. John Wiley and Sons.
- [THOMPSON und ALLEN 1990] THOMPSON, T. und J. ALLEN (1990). *Electroluminescence from minority carrier injection produced by deep level impact ionization*. J. Crystal Growth **101**, 981.
- [TÖRNQVIST 1982] TÖRNQVIST, R. (1982). *Saturation of the  $Mn^{2+}$  emission in AC ZnS:Mn electroluminescent thin-film devices*. J. Crystal Growth **59**, 399.
- [TÖRNQVIST et al. 1983] TÖRNQVIST, R., J. ANTON, J. SKARP und V. TANNINEN (1983). *How the ZnS:Mn layer thickness contributes to the performance of AC thin-film EL devices grown by atomic layer epitaxy (ALE)*. IEEE Trans. Electron Devices ED-**30**, 468.

- [VLASENKO et al. 2000a] VLASENKO, N., M. CHUMACHKOVA, Z. DENISOVA und L. VELIGURA (2000a). *On the nature of centers responsible for inherent memory in ZnS:Mn thin-film electroluminescent devices*. J. Crystal Growth **216**, 249.
- [VLASENKO et al. 2000b] VLASENKO, N., Z. DENISOVA, L. VELIGURA, S. ZUCARRO, F.-J. NIEDERNOSTHEIDE und H.-G. PURWINS (2000b). *Energy levels of defects in electroluminescent ZnS:Mn thin-films exhibiting hysteresis and self-organized patterns*. J. Crystal Growth **214/215**, 944.
- [VLASENKO et al. 2004] VLASENKO, N., H.-G. PURWINS, Z. DENISOVA, Y. KONONETS, F.-J. NIEDERNOSTHEIDE, L. VELIGURA und S. ZUCCARO (2004). *Self-organization patterns in electroluminescence of bistable ZnS:Mn thin-film structures*. Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics **7**, 82.
- [WAGER und KEIR 1997] WAGER, J. und P. KEIR (1997). *Electrical characterization of thin-film electroluminescent devices*. Annu. Rev. Mater. Sci. **27**, 223.
- [WINFREE 1972] WINFREE, A. (1972). *Spiral waves of chemical activity*. Science **175**, 634.
- [WINFREE 1973] WINFREE, A. (1973). *Scroll shaped waves of chemical activity in three dimensions*. Science **181**, 937.
- [YANG und OWEN 1983] YANG, K. und S. OWEN (1983). *Mechanisms of the negative resistance characteristics in ac thin-film electroluminescent devices*. IEEE Trans. Electron Devices ED-**30**, 452.
- [ZAIKIN und ZHABOTINSKY 1970] ZAIKIN, A. und A. ZHABOTINSKY (1970). *Concentration wave propagation in a two-dimensional liquid-phase self-oscillating system*. Nature **225**, 535.
- [ZUCCARO 1997] ZUCCARO, S. (1997). *Elektrische Eigenschaften und Stromdichtestrukturen in wechelspannungsgetriebenen ZnS:Mn Filmen*. Diplomarbeit, Institut für Angewandte Physik, WWU Münster.
- [ZUCCARO et al. 2000] ZUCCARO, S., F.-J. NIEDERNOSTHEIDE, B. KUKUK, M. STRYCH und H.-G. PURWINS (2000). *Solitary current-density patterns in thin ZnS:Mn films*. Phys. Rev. E **62**, 1284.
- [ZUCCARO et al. 2003] ZUCCARO, S., T. RAKER, F.-J. NIEDERNOSTHEIDE, T. KUHN und H.-G. PURWINS (2003). *Physical processes in thin-film electroluminescent structu-*

*res based on ZnS:Mn showing self-organized patterns.* Chaos, Solitons and Fractals **17**  
no. 2-3, 231.





# Lebenslauf

## **Persönliche Daten:**

Name: Thomas Peter Raker  
geboren: am 11.02.1975 in Wilhelmshaven  
Familienstand: ledig  
Eltern: Elisabeth Raker, geb. Preut, und Dieter Raker

## **Schulbildung:**

1981 – 1985: Grundschule Horsten, Horsten  
1985 – 1987: Orientierungsstufe Altes Amt Friedeburg, Friedeburg  
1987 – 1991: Realschule Altes Amt Friedeburg, Friedeburg  
1991 – 1994: Alexander-von-Humboldt-Schule (Oberstufe), Wittmund  
Abitur am 08.06.1994

## **Studium:**

1994 – 2000: Studium der Physik an der Westfälischen  
Wilhelms-Universität Münster  
Vordiplom in Physik am: 22.10.1996  
Diplom in Physik am: 23.03.2000

## **Tätigkeiten:**

April 2000: Beginn der Dissertation am Institut für Festkörpertheorie  
der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster  
unter Betreuung von Prof. Dr. T. Kuhn  
April 2000 – April 2003: Stipendiat des Graduiertenkollegs „Untersuchung nichtlinearer  
kontinuierlicher Systeme mit numerischen, qualitativen und  
experimentellen Methoden“  
Mai 2003 – September 2004: wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Festkörpertheorie  
der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster

