

Karsten Meyer

**Modellierung der Bildung und Dynamik
komplexer Muster in ZnS:Mn
Dünnschicht-Strukturen**

2007

Theoretische Physik

**Modellierung der Bildung und Dynamik
komplexer Muster in ZnS:Mn
Dünnschicht-Strukturen**

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

vorgelegt von
Karsten Meyer
aus Meppen

-2007-

Dekan:	Prof. Dr. J.P. Wessels
Erster Gutachter:	Prof. Dr. T. Kuhn
Zweiter Gutachter:	Priv. Doz. Dr. F.-J. Niedernostheide
Tag der mündlichen Prüfung:	02.07.2007
Tag der Promotion:	02.07.2007

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wird ein Modell des Ladungsträgertransports in Dünnschicht-Strukturen vom Typ der lumineszierenden MISIM- Bauelemente entwickelt, wobei die Verwendung von mit Mangan dotierten Zinksulfid als Halbleiterschicht vorausgesetzt wird. Die wesentlichen Bestandteile dieses Modells sind der Tunnelprozesse von Elektronen aus Grenzflächenzuständen in das Leitungsband des Halbleiters, die Ladungsträgermultiplikation durch Stoßionisation und der Aufbau einer Raumladungsdichte durch den Einfang freier Valenzbandlücken in diskrete Energieniveaus innerhalb der Bandlücke.

Eine numerische Auswertung des auf eine Raumdimension beschränkten Modells zeigt, dass dieses in einem bestimmten Parameterbereich ein bistabiles Verhalten aufweist. Die Ursache der Bistabilität liegt in der nichtlinearen Struktur des Gleichungssystems begründet und ist nicht empfindlich von der Form des Stoßionisationskoeffizienten abhängig. Eine Bestimmung der Ausdehnung und Lage des bistabilen Bereichs im Parameterraum der experimentell variierbaren Größen ergibt eine gute qualitative Übereinstimmung mit entsprechenden Messdaten.

Wird die experimentell nachgewiesene Wechselwirkung der Raumladungsdichte mit der lokalen Bauteiltemperatur im Modell berücksichtigt, so können durch Variation der Amplitude und Frequenz der Versorgungsspannung qualitativ unterschiedliche Betriebsmodi eingestellt werden.

Bei niedrigen Frequenzen zeigt das System typische Merkmale eines bistabilen Mediums. Die Simulation eines auf zwei und drei Raumdimensionen ausgedehnten Modells zeigt, bei Verwendung geeigneter Anfangsbedingungen und Betriebsparameter, die Entstehung von stationären Hochstromfilamenten und sich ausdehnenden Hochstrombereichen.

Ein anregbares Medium besitzt zwar nur einen stationären Zustand, eine kleine Störung löst jedoch eine kurze aber starke Reaktion des Systems aus. Dieses Verhalten zeigt das präsentierte Modell bei hohen Frequenzen und nicht zu großen Amplituden. Mehrdimensionale Simulationen zeigen in diesem Modus, bei Verwendung entsprechender Anfangsbedingungen, die Entwicklung von sich ringförmig ausdehnenden oder spiralförmigen Hochstrombereichen.

Bei etwas höheren Amplituden wechselt das System in einen oszillierenden Modus. Die Stromdichte eines eindimensionalen Modells folgt in diesem Fall einer periodischen Dynamik mit einer Frequenz, die um etwa drei Größenordnungen kleiner ist als die der Versorgungsspannung. Bei entsprechenden Anfangsbedingungen können in einem dreidimensionalen System Stromdichteverteilungen in Form von konzentrischen Ringen beobachtet werden. Abhängig davon wie die Materialparameter gewählt wurden, können diese stationär sein oder wandern.

Abstract

In this thesis a model is set up to describe the charge carrier transport in thin film electroluminescent devices. It is assumed, that these devices are of a MISIM (metal insulator semiconductor insulator metal)– structure and that manganese doped zinc sulphide is used for the semiconducting layer. The most important physical processes involved in this model are electron tunneling from surface states into the conduction band of the semiconductor, charge carrier generation by impact ionisation and the evolution of a space charge by hole trapping in discrete energy states within the band gap.

If the model is restricted to only one spatial dimension, a numerical analysis shows bistable behaviour in a decent parameter range. This bistability is caused by the nonlinear structure of the system of equations and does not depend sensitively on the field dependence of the impact ionisation coefficient. An analysis of the position and extension of the bistable area within the parameter space of quantities which can be varied experimentally, shows a qualitative good agreement with experimental results.

There is experimental evidence of an interaction of the space charge with the local device temperature. If this is included in the model, qualitative different modes of operation can be found by varying the applied voltage amplitude and frequency.

At small frequencies the system shows typical characteristics of a bistable medium. The simulation of a model which is extended to two or three spatial dimensions, shows the development of stationary high current filaments and growing high current areas at suitable initial conditions and operating parameters.

Though an excitable medium shows only one stationary state, a small perturbation causes a short but strong reaction of the system. The presented model shows this behaviour at high frequencies and not too high amplitudes. In this modus multi-dimensional simulations show the development of ring or spiral shaped high current areas.

At slightly higher amplitudes the system switches into an oscillating mode. Within an one dimensional model the current density shows an oscillating dynamic with a frequency which is about three orders of magnitude lower than the one of the applied voltage. By using the right initial conditions high current areas which are similar to target patterns can be found in three dimensional systems. Depending on the material parameters these can be either stationary or dynamic.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Grundlagen	7
2.1	Die MISIM-Struktur	8
2.2	Der Memoryeffekt	9
2.3	Strukturbildungsphänomene	10
3	Theorie	13
3.1	Das Modell	14
3.2	Ladungsträgerdynamik	15
3.2.1	Die Boltzmann-Gleichung	15
3.2.2	Die Momenten-Methode	16
3.2.3	Die Streuterme	21
3.2.4	Näherungen	22
3.3	Grenzflächeneffekte	26
3.4	Die Raten	27
3.4.1	Stoßionisation	27
3.4.2	Locheinfang	28
3.5	Gittertemperatur	29
3.6	Poissongleichung	30
3.7	Diskussion	31
4	Numerik	33
4.1	Die zeitliche Diskretisierung	34
4.2	Entkopplung der Transportgleichungen	35
4.3	Transportgleichungen	37
4.4	Problematik der Ladungsneutralität	41
4.5	Poissongleichung	44
4.6	Parallelisierung	45
4.6.1	Grundlagen	46
4.6.2	Die Transportgleichungen	46

4.6.3	Poisson und Wärmeleichung	50
5	Theorie nichtlinearer dynamischer Systeme	55
5.1	Bifurkation und Hystereseeffekte	56
5.2	Zwei Komponenten Systeme	59
6	Homogene Anfangsbedingungen (1D)	63
6.1	Konstante Ladungsträger- und Gittertemperaturen	64
6.1.1	Kurzzeitverhalten	64
6.1.2	Langzeitverhalten	66
6.1.3	Der Einfluss des Stoßionisationskoeffizienten	70
6.1.4	Frequenzabhängigkeit der Hysterese	71
6.1.5	Abhängigkeit der Hysterese von der Dicke der ZnS:Mn-Schicht	74
6.1.6	Abhängigkeit der Hysterese von der Dichte der Löcherfallen .	75
6.1.7	Abhängigkeit der Hysterese von der Form der Betriebsspannung	76
6.2	Der Einfluss der Ladungsträgertemperaturen	77
6.2.1	Konstante Ladungsträgertemperaturen	77
6.2.2	Ergebnisse des hydrodynamischen Transports	78
6.3	Einfluss der Gittertemperatur	81
6.3.1	Kurz- und Lagzeitverhalten der Gittertemperatur	81
6.3.2	Kleine Frequenzen	83
6.3.3	Hohe Frequenzen	85
6.3.4	Einfluss der Wärmediffusionskonstante	89
7	Musterbildung in 2D	93
7.1	Konstante Bauteiltemperatur	94
7.2	Bistabiles System - kleine Frequenzen	97
7.2.1	Inhomogene Anfangsbedingungen	97
7.2.2	Inhomogenes Bauelement	101
7.3	Hohe Frequenzen - Anregbares Medium	104
7.3.1	Inhomogene Anfangsbedingungen	104
7.3.2	Inhomogenens Bauelement	107
7.4	Einfluss der Wärmediffusionskonstanten	109
7.4.1	mittlere Wärmeleitfähigkeit	110
7.4.2	kleine Wärmediffusion	112
8	Musterbildung in 3D	117
8.1	Muster bei großer Wärmeleitfähigkeit	118
8.2	Muster bei mittlerer Wärmeleitfähigkeit	120
8.3	Muster bei kleiner Wärmeleitfähigkeit	122

8.3.1	Spiralen	122
8.3.2	Wellenzüge	124
9	Zusammenfassung und Ausblick	127
A	Flussdiagramme	131
A.1	Hauptprogramm	131
A.2	Prozedur zu Berechnung der Raten f und g	132
A.3	Parallele Prozedur ELEKTRONENDICHTE	134
A.4	Parallele Prozedur POISSON	135
A.5	Algorithmus zu Erzeugung eines Konvergenzdiagramms	136
B	Simulationsparameter	137

Kapitel 1

Einleitung

Nachdem G. Destriau im Jahr 1936 die Hochfeldelektrolumineszenz entdeckt hatte [Des36], träumten Physiker in aller Welt davon, die herkömmliche Glühlampe durch ein „kaltes Licht“ emittierendes, elektronisches Bauelemente zu ersetzen. Nach intensiven Entwicklungsarbeiten gelang es, Lumineszenzfolien herzustellen, die unter anderem in Militärflugzeugen zur Armaturenbeleuchtung verwendet wurden. Diese Folien bestanden aus vier verschiedenen dünnen Schichten mit einer Gesamtdicke von unter einem Millimeter, wobei die eigentlich lumineszierende Schicht ein dielektrisches Material (z.B. Kunststoff oder Glas) war, in das kleine, mit Kupfer dotierte Partikel aus Zinksulfid (ZnS) eingebettet waren. Die Rückseite dieser Schicht wurde mit einem reflektierenden Material versehen, um die Lichtausbeute auf der Vorderseite zu erhöhen. Der elektrische Kontakt an der Vorderseite der Folie wurde mit einer durchsichtigen, aber elektrisch leitenden Indium-Zinn-Oxid (ITO) Schicht hergestellt, während die Rückseite mit einer gewöhnlichen Kupferelektrode versehen wurde. Zum Schutz vor Umwelteinflüsse wurden beide Seiten mit durchsichtigem Kunststoff oder Glas versiegelt [BS92]. Da aber auch nach jahrelanger Arbeit die Lichtausbeute dieser TFEL (thin film electroluminescence)-Folien nicht entscheidend gesteigert werden konnte, gab man die Hoffnung, eine alternative Beleuchtungstechnologie entwickeln zu können, auf. Stattdessen konzentrierte sich die Forschung darauf, eine auf den TFEL-Folien basierende Technologie zur Datenanzeige zu entwickeln, welche die herkömmlichen Anzeigetafeln (z.B. auf Bahnhöfen) oder sogar Fernsehgeräte ersetzen sollte. Der körnige Aufbau der Lumineszenzschicht brachte jedoch einen hohen Anteil an Streustrahlung mit sich und verhinderte so die Entwicklung von Anzeigemedien mit guter Auflösung. Die Anwendung der TFEL-Folien vom Destriau-Typ ist somit bis heute beschränkt auf Werbetafeln und ähnliche Anzeigemedien ohne den Anspruch eines hohen Auflösungsvermögen.

Diesbezüglich vielversprechender waren die von Inoguchi und Mito im Jahr 1977 [IM77] entwickelten, aus fünf Schichten bestehenden TFEL-Bauelemente. Im Unterschied zu den EL-Folien vom Destriau-Typ bestand die eigentliche Lumineszenz-

schicht aus mit Mangan (Mn) dotiertem ZnS (ZnS:Mn) und wurde von zwei dielektrischen Schichten (z.B. Aluminiumoxid (Al_2O_3)) umschlossen. Der elektrische Kontakt wurde wiederum durch eine Aluminium- auf der einen und eine ITO-Schicht auf der anderen Seite hergestellt. Dieses neue Bauelement, das aufgrund der Abfolge seiner Schichten auch MISIM (Metal Insulator Semiconductor Insulator Metal)-Struktur genannt wurde, zeigte beeindruckende Lebensdauern von etwa 10^4 Stunden und eine große Lichtausbeute von über 10^4 cd/m². Die spektakulärste Eigenschaft jedoch bestand darin, dass das Bauelement bei bestimmten Betriebsparametern eine Art Gedächtnis zeigte (Memoryeffekt)[MRO77, SKT⁺81]. Durch eine kurze Erhöhung der Betriebsspannung konnte das Bauelement dauerhaft in einen hell leuchtenden Zustand gebracht werden, aus dem es nur durch ein kurzes Senken der Spannung in den dunklen Zustand zurückgesetzt werden konnte. Es etablierte sich die Hoffnung, Anzeigemedien mit einem integrierten Speicher zu entwickeln.

In den folgenden Jahren wurden große Anstrengungen unternommen, den Memoryeffekt der ZnS:Mn MISIM-Strukturen zu verstehen. Im Jahr 1977 veröffentlichte Marrello [MRO77] eine wegweisende Arbeit, in der er experimentell zeigen konnte, dass die dem Memoryeffekt zugrunde liegende Hysterese in der Leuchtdichte-Spannungs-Kennlinie auf das bistabile Verhalten der elektrischen Stromstärke zurückzuführen war. Von nun an konzentrierten sich die theoretischen Arbeiten auf die Entwicklung von Modellen zur Beschreibung des Ladungsträgertransportes innerhalb der MISIM-Struktur. Das erste Modell dieser Art, welches bistabiles Verhalten zeigte und somit die Hysterese in der Stromdichte-Spannungs Kennlinie erklären konnte, wurde 1982 von Howard, Sahni und Alt (HSA-Modell) [HSA82] präsentiert. Es basierte auf verschiedenen Annahmen, die zum Teil entweder von Howard selbst oder anderen Wissenschaftlern experimentell nachgewiesen wurden. Nach ihrer Vorstellung sollten aus Grenzflächenzuständen an den Isolator-Halbleiter Übergängen Elektronen in das Leitungsband des ZnS:Mn tunneln, dort von starken elektrischen Feldern beschleunigt werden und durch Band-Band Stoßionisation weitere Elektronen und freie Löcher im Valenzband produzieren. Diese freien Löcher sollten zum Teil von tief in der Energiebandlücke liegenden Zuständen eingefangen werden und so eine positive Raumladungsdichte erzeugen. Die Elektronen dagegen sollten von Grenzflächenzuständen der gegenüberliegenden Seite aufgenommen werden und dort eine entsprechend negative Oberflächenladungsdichte bilden. Um den Transport der freien Ladungsträger zu beschreiben, verwendeten Howard *et al* ein System aus zwei gekoppelten Differentialgleichungen, welches sie mit Hilfe einiger Näherungen aus einem Drift Diffusions Modell herleiten konnten. Dieses relativ einfache Modell war in der Lage, die experimentell gefundene Hysterese in der Stromdichte-Spannungs Kennlinie zu reproduzieren und gab die Abhängigkeit der Hysteresebreite von der Dicke der ZnS-Schicht und von der Mn-Konzentration qualitativ richtig wieder.

Ein anderes Modell, welches ebenfalls die Tunnelinjektion von Elektronen aus Grenzflächenzuständen in das Leitungsband der ZnS-Schicht berücksichtigte, wurde

1990 von Neyts *et al* [NV90, NCVdB94] präsentiert. Im Unterschied zu Howard sahen sie die Ursache der positiven Raumladungsdichte jedoch in der Ionisierung von neutralen Donatoren statt im Einfang freier Löcher. Auch dieses Modell zeigte bistabiles Verhalten und konnte die Abhängigkeit der Hysteresebreite von der Frequenz der angelegten Wechselspannung beschreiben.

1982 warfen Mach und Müller [MM82] in ihrem Übersichtsartikel über TFEL-Bauelemente die Frage auf, wie die Ergebnisse des HSA-Modells von der von den Autoren angenommenen Form des Stoßionisationskoeffizienten abhängen und ob die Bistabilität des Systems nur eine Folge des starken Anstiegs des Koeffizienten mit dem elektrischen Feld wäre. Insbesondere nachdem von Thompson und Allen im Jahr 1987 [TA87] ein wesentlich flacherer Verlauf des Koeffizienten gemessen und von Kuligk *et al* im Jahr 2005 [RKF05] ein ähnlich flacher Verlauf berechnet wurde, galt es, diese Frage zu beantworten. Weitere Mängel des HSA-Modells waren, dass weder die Frequenzabhängigkeit der Hysteresebreite noch die Abhängigkeit von der Form der Betriebsspannung reproduziert werden konnten. Das von Neyts *et al* präsentierte Modell muss sehr kritisch gesehen werden, seitdem in den Jahren 1995 von Ang *et al* [APP⁺95] und 1998 von Hitt *et al* [HKW97] starke Hinweise darauf gefunden wurden, dass die Band-Band-Stoßionisation die Hauptursache für den Aufbau einer positiven Raumladungsdichte war.

Neben dem Memoryeffekt fand man Anfang der siebziger Jahre bei bestimmten Betriebs- und Präparationsparametern verschiedene, inhomogene Leuchtdichteverteilungen in ausgedehnten MISIM-Strukturen. Beispielsweise konnten bei kleinen Frequenzen (< 10 kHz) der Betriebsspannung isolierte, leuchtende Punkte auf dunklem Hintergrund und netzartige, leuchtende Strukturen beobachtet werden [RMA80, ZNK⁺00, Bea93, Zuc97, G⁺95, Gro94, KZNP97]. Bei höheren Frequenzen (> 50 kHz) wurden häufig sehr komplexe Leuchtdichteverteilungen, wie wandernde Fronten, rotierende Spiralen und Zielscheibenmuster beobachtet [RMA80, ZNK⁺00, BV93a, BV93b]. In den folgenden Jahren wurden diese Phänomene systematisch untersucht und es wurden erste Anstrengungen unternommen, Modelle zu entwerfen, die diese Strukturbildungen erklären konnten. Beispielsweise konnte Raker [Rak03] zeigen, dass mit einem dreidimensionalen Modell des Ladungsträgertransportes unter bestimmten Voraussetzungen die Entstehung einfacher Strukturen wie Hochstromfilamente und Multifilamente erklärt werden kann. Nachdem bekannt wurde, dass die Temperatur der MISIM-Struktur wesentlichen Einfluss auf die Stärke der positiven Raumladung hat [VDV⁺00, Bri89], favorisierte man Modelle, die eine Wechselwirkung der lokalen elektrischen Stromdichte mit der lokalen Bauteiltemperatur berücksichtigten [RMA80, ZNK⁺00]. Man nahm an, dass hohe Stromdichten durch Stoßionisation große Dichten freier Löcher produzieren würden, was die Raumladungsdichte erhöhen und somit wiederum die Stromdichte steigern würde. Hohe Stromdichten sollten andererseits die lokale Bauteiltemperatur erhöhen, was zu einer Reduktion der Raumladungsdichte und damit der Stromdichte führen würde.

Bis heute wurde ein solches Modell jedoch nicht konkretisiert, um Strukturbildungsphänomene zu simulieren. Insbesondere stellte sich heraus, dass weder das Modell von Howard *et al* noch das von Neyts *et al* sich ohne weiteres um eine oder gar zwei räumliche Dimensionen erweitern lassen würden.

Auch wenn die Hauptanwendung der TFEL-Technologie heute in der Hintergrundbeleuchtung der auf der Flüssigkristalltechnologie basierenden LCD-Displays liegt, sind die TFEL-Displays bei einigen Anwendungen nicht zu ersetzen. Ihr sehr robuster Aufbau, die große Helligkeit bei hervorragendem Auflösungsvermögen und die große Ansprechgeschwindigkeit machen die TFEL-Displays zu gefragten Produkten in der Medizin-, Industrie- und Militärtechnologie. Auch stellen sie bis heute die einzige Möglichkeit dar, durchsichtige Displays zu erzeugen, indem die Kupferelektrode ebenfalls durch eine ITO-Schicht ersetzt wird. Die bisher eingesetzten TFEL-Displays werden jedoch nicht unter Parametern betrieben, die einen Memoryeffekt hervorrufen, da dieser mit einer schlechteren Lumineszenzausbeute und einer verringerten Lebensdauer des Displays einhergeht. Durch ein tieferes Verständnis der dem Memoryeffekt zugrunde liegenden physikalischen Prozesse könnten diese Nachteile verringert werden.

Das Ziel dieser Arbeit zerfällt in zwei Teile. Einerseits sollen die Arbeiten von Howard *et al* und Neyts *et al* fortgeführt werden, indem mit einem auf verschiedenen Ebenen erweiterten Modell Stromdichte-Spannungskennlinien berechnet werden. Andererseits sollen mit einem auf zwei und drei räumliche Dimensionen ausgedehnten Modell Strukturbildungsphänomene untersucht werden.

In den Kapiteln 2 und 3 wird die dieser Arbeit zu Grunde liegende Theorie der ZnS:Mn MISIM-Struktur erläutert. Während Kapitel 2 einen Überblick über alle berücksichtigten physikalischen Prozesse gibt, werden in Kapitel 3 die entsprechenden Gleichungssysteme hergeleitet und ausformuliert. Im einzelnen werden dies Ausdrücke für die Tunnelinjektion von Elektronen aus Grenzflächenzuständen, für die Band-Band Stoßionisation, für die Wechselwirkung von freien Löchern mit Löcherfallen und für den Aufbau der Grenzflächenladungsdichte sein. Zur Beschreibung des Transportes der freien Ladungsträger wird ein hydrodynamisches Transportmodell aufgestellt. Zusätzlich wird eine Wärmediffusionsgleichung eingeführt, um die orts- und zeitabhängige Bauelementtemperatur zu berücksichtigen. Es wird sich herausstellen, dass das System eindeutig durch die Angabe der Raum- und Oberflächenladungsdichte sowie der Temperatur gekennzeichnet werden kann und dass diese Systemvariablen einer nichtlinearen zeitlichen Dynamik folgen.

Die numerisch sehr aufwendige Lösung der sich ergebenden Gleichungssysteme war einer der Gründe, weshalb lange Zeit kein mehrdimensionales Modell der MISIM-Struktur aufgestellt und simuliert wurde. In Kapitel 4 wird deshalb ausführlich auf die numerische Behandlung der in Kapitel 3 aufgestellten Gleichungssysteme eingegangen. Insbesondere wird im letzten Teil des Kapitels diskutiert, wie die entwickelten Algorithmen parallelisiert werden können, um die extrem rechenaufwen-

digen dreidimensionalen Simulationen auf Parallelrechnern ausführen zu können.

Kapitel 5 knüpft an die schon erwähnte, nichtlineare Struktur der Gleichungen an und soll einige grundlegende Einblicke in die Theorie der nichtlinearen dynamischen Systeme geben. Das Ziel des Kapitels ist nicht die Bereitstellung der in diesem großen Fachgebiet entwickelten analytischen Methoden, sondern es soll ein Überblick gegeben werden, was für Phänomene unter welchen Bedingungen auftreten können.

Kapitel 6 ist das erste von drei Kapiteln, in welchen die Ergebnisse des eingeführten Modells präsentiert werden und beschäftigt sich ausschließlich mit dem Ladungsträgertransport senkrecht zu den Schichten der MISIM-Struktur, was auf ein effektiv eindimensionales Modell führt. Der erste Teil des Kapitels behandelt die Modelleigenschaften unter der Annahme einer zeitlich und räumlich konstanten Bauelementtemperatur und stellt somit eine direkte Fortführung der Arbeiten von Howard *et al* und Neyts *et al* dar. Es wird sich herausstellen, dass das benutzte Modell die Abhängigkeiten der Hysterese von der Dicke der ZnS-Schicht, der Mn-Konzentration und der Frequenz richtig wiedergibt. Des Weiteren wird sich zeigen, dass die Variation der funktionalen Abhängigkeit des Stoßionisationskoeffizienten vom elektrischen Feld in gewissen Grenzen nur quantitative Auswirkungen auf die Stromdichte-Spannungs Kennlinie hat, die Hysterese aber erhalten bleibt. Der Vergleich der Ergebnisse bei Verwendung des Drift-Diffusionsmodells und eines vollen, die Ladungsträgertemperaturen berücksichtigenden, hydrodynamischen Modells führt zu zwei Einsichten. Zum einen haben die Ladungsträgertemperaturen kaum Einfluss auf die Kennlinien eines eindimensionalen Systems und zum anderen beeinflussen die Wärmeflussterme der freien Ladungsträger deren Temperaturen nur minimal [MRNK06]. Im zweiten Teil des Kapitels wird das interessante Wechselspiel von Raumladungsdichte und lokaler Bauteiltemperatur thematisiert. Es wird sich herausstellen, dass der gegenseitige Einfluss dieser beiden Variablen mit der Interaktion von typischen Aktivator-Inhibitor Modellen, wie sie aus der nichtlinearen Dynamik bekannt sind, verglichen werden kann.

Das Verhalten des Systems bei Hinzunahme einer räumlichen Dimension, parallel zu den Schichten der MISIM-Struktur, wird in Kapitel 7 systematisch in Abhängigkeit verschiedener Parameter untersucht. Es wird sich zeigen, dass bei großer Wärmeleitfähigkeit der ZnS:Mn-Schicht, verschiedene inhomogene aber stabile stationäre Stromdichteverteilungen existieren können. Bei sehr kleinen Wärmeleitfähigkeiten treten inhomogene Stromdichteverteilungen auf, die zwar in der Form stabil sind, jedoch als Ganzes wandern.

Bei Hinzunahme einer weiteren räumlichen Dimension sind auf Grund des enormen Rechenaufwands keine systematischen Parameterstudien mehr möglich. Statt dessen werden Parameter verwendet, die in zweidimensionalen Simulationen zu interessanten Ergebnissen führten. Auf diese Weise konnten stationäre leuchtende Punkte, Zielscheibenmuster und rotierende Spiralen gefunden werden.

Das letzte Kapitel fasst diese Arbeit noch einmal zusammen, wirft Fragen auf, die

unbeantwortet bleiben mussten und gibt Anregungen wie das präsentierte Modell erweitert werden kann, um diese vielleicht zu beantworten.

Kapitel 2

Grundlagen

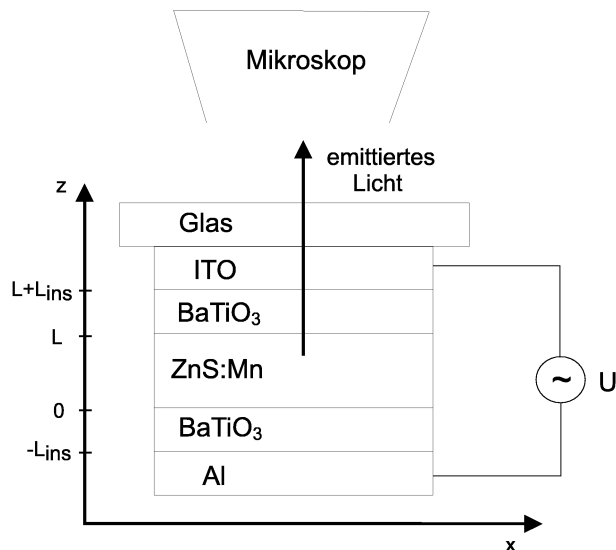


Abbildung 2.1: MISIM-Struktur mit ZnS:Mn als dotiertes Halbleitermaterial und BaTiO₃ als Isolatorschichten. Die elektrischen Kontakte werden über eine Aluminiumschicht und eine lichtdurchlässige ITO-Schicht hergestellt. Bei Anlegen einer hochfrequenten Wechselspannung (> 1 kHz) großer Amplitude (> 100 V) wird Licht emittiert, welches durch ein Mikroskop beobachtet wird.

2.1 Die MISIM-Struktur

Diese Arbeit beschäftigt sich mit dem Ladungsträgertransport in als Dünnschichtverbund hergestellten Elektrolumineszenzbaulementen (TFEL-Baulemente) vom Typ der 1977 von Inoguchi *et al* [IM77] entwickelten symmetrischen MISIM (Metal Insulator Semiconductor Insulator Metal)-Strukturen (Abbildung 2.1). In diesen wird eine dünne Schicht eines dotierten Halbleitermaterials beidseitig mit einem Dielektrikum beschichtet. Der elektrische Kontakt wird über eine Metallschicht an der einen Seite und über eine lichtdurchlässige aber elektrisch leitende Indium-Zinn-Oxid (ITO) Schicht auf der anderen Seite hergestellt. Wird die MISIM-Struktur mit einer Wechselspannung hoher Amplitude (> 100 V) und Frequenz (> 1 kHz) betrieben entstehen Feldstärken, die stark genug sind, um Elektronen aus Oberflächenzuständen an den Grenzschichten von Halbleiter und Isolatormaterial in das Leitungsband des Halbleiters tunneln zu lassen, wo sie beschleunigt werden und durch die Stoßanregung von Dotierungszentren die Elektrolumineszenz auslösen [BS92].

Entscheidend für die Lumineszenzausbeute, die Lebensdauer der MISIM-Strukturen und die Farbe des emittierten Lichts sind die verwendeten Materialien in den einzelnen Schichten. Das Isolatormaterial sollte sich durch eine hohe Dielektrizitätszahl auszeichnen, damit der Hauptteil der elektrischen Spannung an der Halbleiterschicht abfällt. Des Weiteren sollte es natürlich eine hohe Durchbruchspannung aufweisen und transparent für das emittierte Licht sein. Diese Kriterien erfüllen z.B. einige Oxide wie Aluminiumoxid (Al₂O₃) und bestimmte Ferroelektrika wie das Bariumtitanat (BaTiO₃), dessen Verwendung in dieser Arbeit angenommen wird. Das Halbleitermaterial sollte eine große Energiebandlücke aufweisen, um das emittierte Licht nicht zu stark zu absorbieren und es sollte robust gegenüber großen

Dotierung	Farbe	Leuchtdichte (cd/m^{-2})
Mn	gelborange	7000
TbF ₃	grün	6000
SmCl ₃	rot	1000
DyF ₃	gelb	620
PrF ₃	grünlichweiß	400
TmF ₃	blau	10

Tabelle 2.1: Farbe und Leuchtdichte von mit verschiedenen Materialien dotierten ZnS MISIM-Strukturen [BS92].

elektrischen Feldstärken sein. Mit Erfolg wurden bisher verschiedene Materialien aus der Klasse der II-VI-Halbleiter verwendet, von denen das Zinksulfid (ZnS) in dieser Arbeit betrachtet wird. Die Dotierungsatome sollten natürlich leicht in den Halbleiter eingebracht werden können und ebenfalls stabil gegenüber hohen Feldstärken sein. Die Kombination aus Halbleiter- und Dotierungsmaterial bestimmt die Farbe und Leuchtdichte des emittierten Lichtes. Bei der Verwendung von ZnS lassen sich durch eine Dotierung mit Mn oder verschiedenen Halogeniden die in Tabelle 2.1 aufgelisteten Farben erzeugen. Es fällt sofort auf, dass blaues Licht nur zu dem Preis einer sehr geringen Leuchtdichte erzeugt werden kann, was lange Zeit die Entwicklung von Farbdisplays verhinderte. Erst als 1993 durch die Verwendung von SrS:Se eine hinreichend helle, blaue Lumineszenz erreicht wurde, konnten Displays mit voller Farbpalette hergestellt werden. In dieser Arbeit wird von einer Dotierung mit Mangan ausgegangen. Eine ausführliche Diskussion verschiedener Materialkombinationen findet sich in dem Übersichtsartikel von Müller und Mach [MM82].

2.2 Der Memoryeffekt

Kurz nach der Entwicklung der ersten MISIM-Strukturen fand man bei der Untersuchung stark dotierter Bauelemente eine Hysterese in der Abhängigkeit der Lumineszenzdichte von der Amplitude der Betriebsspannung. In der, in Abbildung 2.2 (a) gezeigten, von Marrello [MRO77] gemessenen Kennlinie ist gut zu erkennen, dass die Lumineszenzstärke beim Reduzieren der Betriebsspannung davon abhängt, wie hoch die elektrische Spannung vorher geregelt wurde. Bei der Beobachtung einer MISIM-Struktur durch ein optisches Mikroskop konnte Marrello feststellen, dass die Lumineszenz beim Erhöhen der Spannung nicht räumlich homogen zunahm, sondern, dass die mittlere Lumineszenzstärke durch die plötzliche Entstehung kleiner, hell leuchtender Punkte gesteigert wurde. Es gelang ihm, die Leuchtdichte-Spannungs-Kennlinie eines einzelnen dieser Punkte zu ermitteln und er fand senkrechte Übergänge zwischen hell leuchtenden und dunklen Zuständen (Abbildung

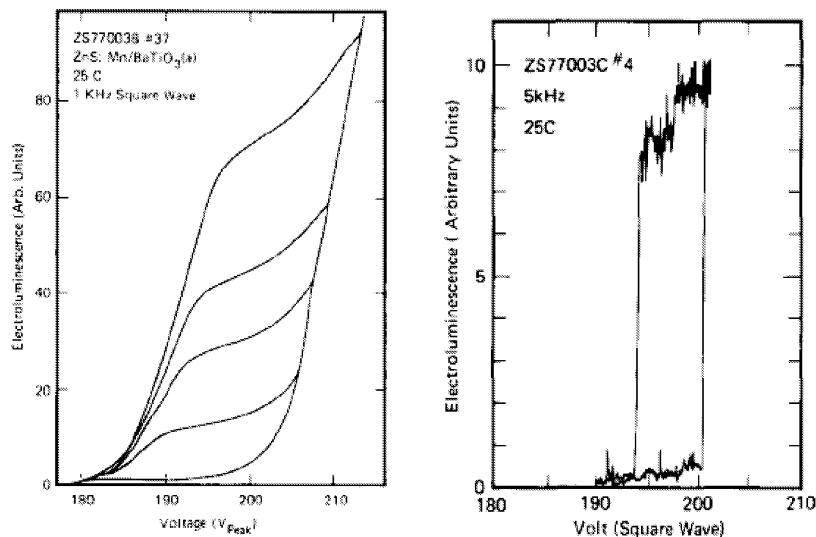


Abbildung 2.2: Leuchtsärke in Abhängigkeit von der angelegten Spannungsamplitude einer MISIM-Struktur (links) und eines kleinen homogenen Bereichs einer MISIM-Struktur (rechts) (Abbildungen entnommen aus [MRO77]).

2.2 (b)). Er schloss, dass die Hysterese der MISIM-Struktur eine Konsequenz der Mittelung kleiner bistabiler Bereiche mit leicht unterschiedlichen Sprungspannungen sein musste. Weiter konnte er in dieser Arbeit einen monotonen Zusammenhang zwischen Lumineszenzstärke und mittlerer elektrischer Stromdichte zeigen und folgerte, dass zur Erklärung des Memoryeffektes ein Modell der Ladungsträgerdynamik aufzustellen sei. In den folgenden Jahren wurde die Abhängigkeit der Hysteresebreite von verschiedenen Parametern gemessen. Sasakura [SKT⁺81] maß 1981 eine Zunahme der Hysteresebreite bei Erhöhung der Mangankonzentration sowie bei dickeren ZnS:Mn-Schichten und Neyts [NCVdB94] konnte eine breitere Hysterese bei höheren Frequenzen feststellen.

2.3 Strukturbildungsphänomene

Wie sich bald herausstellte, waren die von Maranello *et al* beobachteten leuchtenden Punkte (Abbildung 2.3 (a)) nicht die einzigen räumlich inhomogenen Leuchtdichteverteilungen. Vielmehr wurden vor allem in Bauteilen, die einen Memoryeffekt zeigten, viele sehr komplexe, raum-zeitliche Muster gefunden, von denen einige Beispiele in Abbildung 2.3 gezeigt sind.

Bei kleinen Frequenzen (< 20 kHz) der Betriebsspannung konnte, neben den

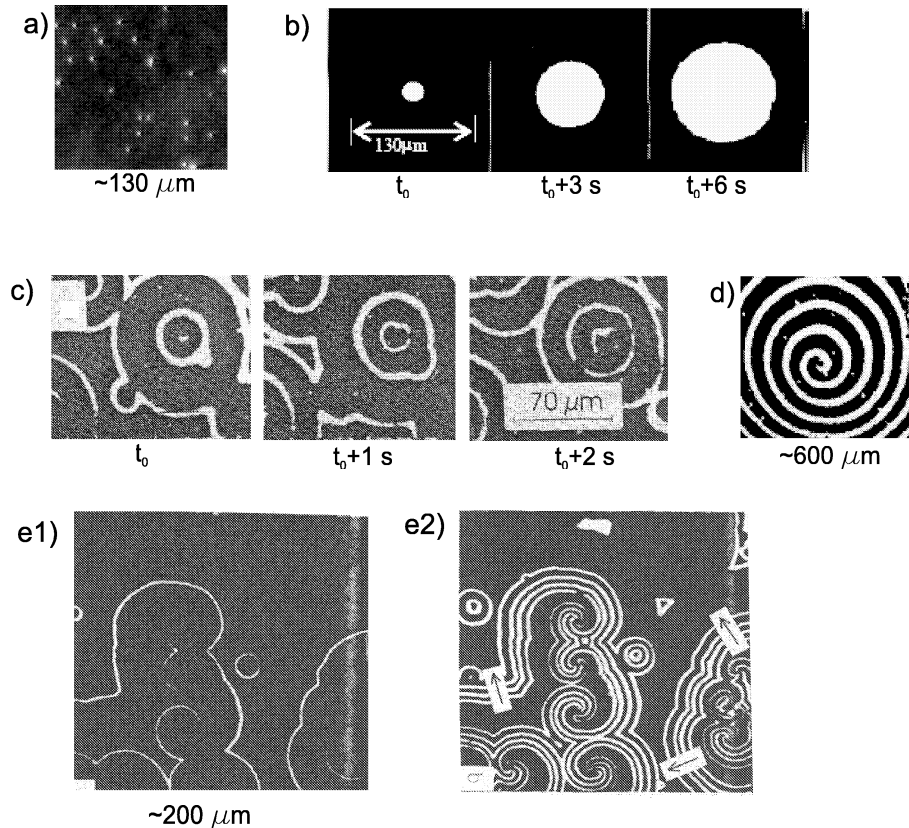


Abbildung 2.3: Verschiedene in ZnS:Mn MISIM-Bauelementen gefundene, raumzeitliche Muster: Leuchtende Punkte (a) [ZNK⁺00], wachsende Domäne (b) [VDV⁺00] (Zeit zwischen den Bildern $\Delta t = 3$ s), Wellenzüge (c) [VDV⁺00] ($\Delta t = 1$ s), rotierende Spirale (d) [RMA80], Entwicklung von Doppelspiralen (e) (die Abbildung (e2) zeigt die Überlagerung von Bildern zu verschiedenen Zeitpunkten, während (e1) den dritten Zeitpunkt allein zeigt) [Bea93].

leuchtenden Punkten, auch das in Abbildung 2.3 (b) dargestellte Wachstum von leuchtenden Domänen beobachtet werden [VDV⁺00]. Sehr viel komplexere Muster wurden während des Betriebs der MISIM-Struktur bei hohen Frequenzen (> 100 kHz) gefunden. So konnten Vlasenko *et al* [VDV⁺00] die Entwicklung so genannter Wellenzüge (wavetrains) verfolgen, bei denen sich leuchtende Ringe ausbreiten, während in ihrem Zentrum ständig neue Ringe entstehen (Abbildung 2.3 (d)). Marrello *et al* [RMA80] beobachteten im Jahr 1980 die in Abbildung 2.3 (d) dargestellte rotierende Spirale. Die Entwicklung solcher Spiralen wurde 1993 von Beale dokumentiert und ist in den Abbildungen 2.3 (e1, e2) gezeigt. Die Abbildung 2.3 (e2) ist eine Überlagerung von Bildern zu verschiedenen Zeitpunkten (wie z.B. Abbildung

2.3 (e1)), wobei die eingezeichneten Pfeile die Bewegungsrichtung der Fronten andeuten. Offensichtlich entstehen Spiralarms, indem sich lumineszierende Fronten an offenen Enden langsam einrollen.

Bisherige Erklärungsversuche dieser Strukturbildungsphänomene gehen meist von Aktivator-Inhibitor Gleichungen aus, wie sie in der nichtlinearen Physik benutzt werden. Dabei wird der Raumladungsdichte, wie schon erwähnt, eine selbstaktivierende Wirkung zugesprochen, während als Inhibitor meist die lokale Gittertemperatur herangezogen wird [ZNK⁺00]. Experimente, bei denen unter hohen Temperaturen die positive Raumladung verschwindet [Bri89], unterstützen diese These. Ein konkretes, auf mikroskopischen Mechanismen basierendes Modell, welches raumzeitliche Strukturbildungsphänomene der beschriebenen Art reproduziert, konnte bisher jedoch nicht erstellt werden.

Kapitel 3

Theorie

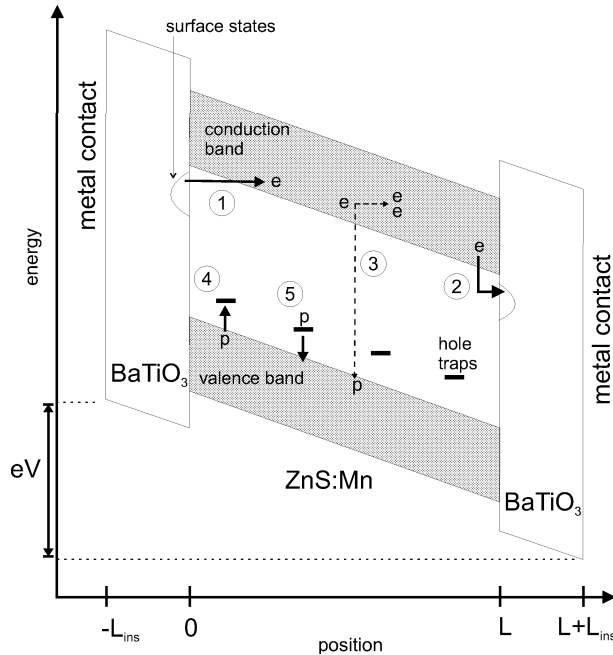


Abbildung 3.1: Energiebandschema der MISIM-Struktur unter einer äußeren elektrischen Spannung. Die Nummerierung kennzeichnet wichtige, in dem Modell berücksichtigte, physikalische Prozesse: (1) Tunnelprozess der Elektronen aus Grenzflächenzuständen, (2) Einfang von Elektronen in Grenzflächenzuständen, (3) Elektron- und Locherzeugung durch Stoßionisation, (4) Locheneinfang in diskrete Energieniveaus (Löcherfallen), (5) Emission von Löchern aus Fallen.

3.1 Das Modell

In diesem Kapitel wird das dreidimensionale hydrodynamische Transportmodell für die ZnS:Mn MISIM-Struktur schrittweise hergeleitet und diskutiert. Die Orientierung des kartesischen Koordinatensystems ist dabei so gewählt, wie in Abbildung 2.1 gezeigt. Die z-Achse zeigt also in Richtung der Hauptstromrichtung, während die x- und y-Achse eine Ebene parallel zu den Schichten des Bauelements aufspannen. Die Dicken der ZnS:Mn- und Isolatorschichten werden mit L und L_{ins} bezeichnet.

Die für den Ladungsträgertransport wichtigsten Prozesse sind in Abbildung 3.1 in einem Energiebandschema skizziert und nummeriert (1-5). Diese werden im Folgenden kurz besprochen, bevor sie im nächsten Abschnitt quantitativ eingeführt werden. Aufgrund der großen Energiebandlücke von etwa 3.7 eV ist die intrinsische Ladungsträgerkonzentration in ZnS relativ gering. Hieraus folgt, dass der Stromfluss bei kleinen Spannungen nicht groß genug ist, um viele Manganzentren anzuregen und so eine beobachtbare Lumineszenz auszulösen. Unter großen Spannungen können jedoch Elektronen aus Grenzflächenzuständen zwischen der ZnS- und den Isolatorschichten in das Leitungsband des ZnS tunneln (1) [HSA82], wo sie auf ihrem Weg zur Anode durch starke elektrische Felder beschleunigt werden und durch Stoßionisation (3) [HSA82, APP+95, HKW97] weitere Elektronen und freie Löcher erzeugen können. Die freien Löcher werden auf ihrem Weg zur Kathode teilweise von diskreten Energieniveaus innerhalb der Bandlücke, so genannten Löcherfallen, eingefangen (4) [HSA82, Bri97, HKW97] und nur langsam wieder emittiert (5) [VDV+00, HKW97],

was zum Aufbau einer positiven Raumladungsdichte führt. Die Ladungsträger die ihr Ziel erreichen, werden von den Grenzflächenzuständen an der entsprechenden Seite aufgenommen (2)[HSA82] und bilden eine negative Oberflächenladungsdichte auf der Seite der momentanen Anode.

Um ein mathematisch behandelbares System zu erhalten, müssen Gleichungen für die einzelnen Prozesse hergeleitet werden. Im einzelnen werden ein Ausdruck für den Tunnelstrom, für den Grenzflächeneinfang, für den Locheinfang und für den Stoßionisationsprozess benötigt. Alle diese Prozesse hängen jedoch von den Dichten oder Stromdichten der Elektronen, freien und eingefangenen Löcher ab, so dass zusätzlich Verteilungsfunktionen für diese bestimmt werden müssen. Da die Emissionsrate der Löcher aus den Löcherfallen empfindlich von der lokalen Temperatur der ZnS:Mn-Schicht abhängt[VDV⁺00], muss die Selbsterwärmung des ZnS:Mn-Kristallgitters durch ohmsche Wärmeproduktion berücksichtigt werden. Die auftretenden Temperaturgradienten sorgen für einen Transport der Wärme aus der Halbleiterschicht über die Isolatoren an die Oberflächen des Bauelements, wo sie an die Umgebung abgegeben wird. Für die Gittertemperatur muss also eine Wärmediffusionsgleichung mit entsprechenden Randbedingungen gelöst werden.

3.2 Ladungsträgerdynamik

Wir beginnen die Herleitung der Gleichungssysteme mit der Aufstellung eines Systems von Differentialgleichungen für die Dichten und Stromdichten der Ladungsträger.

3.2.1 Die Boltzmann-Gleichung

In der herkömmlichen Theorie zur Simulation elektronischer Bauelemente geht man davon aus, dass es zumindest prinzipiell möglich ist, für die Ladungsträger eines Festkörpers eine Verteilungsfunktion der Form $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$ zu finden [Czy00]. Quantenmechanisch macht eine solche vom Ort \vec{r} und Impuls $\hbar\vec{k}$ abhängige Funktion keinen Sinn, da diese nicht gleichzeitig scharf gemessen werden können. Rechtfertigen lässt sich dieses Konzept, wenn man die Ortsabhängigkeit auf einer Skala variiert, die groß gegen atomare Abstände ist. In diesem Fall kann man sich den Festkörper in Teilsysteme zerlegt denken, die groß genug sind, um die Gesetze der klassischen Mechanik anzuwenden, aber klein gegenüber den Längen, auf denen sich die Eigenschaften des Festkörpers (z.B. Dotierung) wesentlich ändern. In diesen Teilsystemen lassen sich die Ladungsträger durch Verteilungsfunktionen bezüglich des Impulses beschreiben. Die Ortsabhängigkeit der Gesamtfunktion ergibt sich dann aus den Orten der Teilsysteme.

Es bleibt die Aufgabe, diese Verteilungsfunktion zu bestimmen. Zu diesem Zweck verwenden wir eine Variation der klassischen Boltzmann-Gleichung [Czy00]

$$\begin{aligned}
 \frac{df(\vec{k}, \vec{r}, t)}{dt} &= \underbrace{\frac{\partial f(\vec{k}, \vec{r}, t)}{\partial t}}_1 + \underbrace{\frac{\partial f(\vec{k}, \vec{r}, t)}{\partial \vec{r}} \frac{d\vec{r}}{dt}}_2 + \underbrace{\frac{\partial f(\vec{k}, \vec{r}, t)}{\partial \vec{k}} \frac{d\vec{k}}{dt}}_3 \\
 &= \sum_{\vec{k}'} [-w_{\vec{k} \rightarrow \vec{k}'} f(\vec{k}, \vec{r}, t)(1 - f(\vec{k}', \vec{r}, t)) \\
 &\quad + w_{\vec{k}' \rightarrow \vec{k}} f(\vec{k}', \vec{r}, t)(1 - f(\vec{k}, \vec{r}, t))]. \tag{3.1}
 \end{aligned}$$

Diese Bilanzgleichung besagt, dass die explizite Änderung von f (Ausdruck 1) an einem Punkt (\vec{k}, \vec{r}) (im Phasenraum) sich aus drei Teilen zusammensetzt. Erstens kann die Position eines Teilsystems variieren, was zu einer Beeinflussung der Verteilungsfunktion des Subsystems führt, falls der Festkörper ortsabhängige Eigenschaften hat (Ausdruck 2). Zweitens kann der Impuls sich zeitlich verändern, wenn beispielsweise ein elektrisches Feld vorhanden ist (Ausdruck 3). Der Term auf der rechten Seite beinhaltet Übergänge von einem Zustand \vec{k} in andere Zustände \vec{k}' innerhalb eines Subsystems. Die Faktoren w bezeichnen dabei die Übergangswahrscheinlichkeiten.

Um Transportphänomene in Festkörpern zu verstehen und zu simulieren, muss diese komplizierte Integro-Differentialgleichung gelöst werden. Dies wird jedoch im Allgemeinen schwierig oder unmöglich sein. Macht man einige Näherungen, so können mit Monte-Carlo Rechnungen sehr gute Ergebnisse für die Verteilungsfunktion gewonnen werden. Solche Simulationen sind jedoch sehr zeitaufwendig und können nur selten durchgeführt werden, wenn man an der zeitlichen Entwicklung eines Systems unter langsamen äußeren Veränderungen (z.B. herkömmliche Wechselspannungen) interessiert ist.

Ein anderer Ansatz geht von der Tatsache aus, dass man eigentlich nicht an der gesamten Information der Verteilungsfunktion interessiert ist. Messbar sind in elektrischen Bauelementen nicht Verteilungen, sondern Größen wie Ladungsdichte, Strom und Temperatur, das heißt Mittelwerte der Verteilung und deren Abweichungen. Es reicht also eigentlich aus, nur diese Momente der Verteilung zu kennen.

3.2.2 Die Momenten-Methode

Für das weitere Vorgehen ist es sinnvoll, die \vec{k} -Abhängigkeit der Boltzmann-Gleichung durch die Geschwindigkeit zu ersetzen. Bei nicht zu großen Feldstärken können die Ladungsträger in vielen Festkörpern wie freie Teilchen behandelt werden, wenn man die effektive Masse m^* einführt und die Beziehung $\vec{v} = \frac{\hbar \vec{k}}{m^*}$ nutzt. Außerdem fügt man der Gleichung einen weiteren Term $gr(\vec{v}, \vec{r}, t)$ hinzu, welcher die Generations- und Rekombinationsraten von Teilchen am Ort \vec{r} mit der Geschwindigkeit \vec{v} zusammenfasst.

Geht man noch davon aus, dass die Änderung von \vec{k} bzw. \vec{v} von einer Kraft \vec{K} bewirkt wird, die nur vom Ort und der Zeit abhängt, so erhält die Boltzmann-Gleichung folgende Form [Sch01]:

$$\begin{aligned} \frac{df(\vec{v}, \vec{r}, t)}{dt} &= \frac{\partial f(\vec{v}, \vec{r}, t)}{\partial t} + \frac{\partial f(\vec{v}, \vec{r}, t)}{\partial \vec{r}} \vec{v} + \frac{\partial f(\vec{v}, \vec{r}, t)}{\partial \vec{v}} \frac{\vec{K}(\vec{r}, t)}{m^*} \\ &= \sum_{\vec{v}'} [-w_{\vec{v} \rightarrow \vec{v}'} f(\vec{v}, \vec{r}, t)(1 - f(\vec{v}', \vec{r}, t)) \\ &\quad + w_{\vec{v}' \rightarrow \vec{v}} f(\vec{v}', \vec{r}, t)(1 - f(\vec{v}, \vec{r}, t))] + gr(\vec{v}, \vec{r}, t) \end{aligned} \quad (3.2)$$

Natürlich hätte man eigentlich f und w durch z.B. \tilde{f} und \tilde{w} ersetzen müssen. Da aber im Folgenden nur Bezug auf Gleichung 3.2 genommen wird, wurden dieselben Bezeichnungen verwendet.

Mit der Definition der m -ten Potenz eines Vektors durch

$$\vec{v}^m = \begin{cases} |\vec{v}|^m & \text{für } m \text{ gerade} \\ |\vec{v}|^{m-1} \vec{v} & \text{für } m \text{ ungerade} \end{cases} \quad (3.3)$$

für ganzzahlige m , kann das m -te Moment einer Verteilung $f(\vec{v}, \vec{r}, t)$ bezüglich der Geschwindigkeit \vec{v} durch

$$\begin{aligned} \langle \vec{v}^m \rangle &= \frac{1}{n} \int_{\vec{v}} d^3v f(\vec{v}, \vec{r}, t) \vec{v}^m \quad \text{für } m \geq 1 \\ \text{mit} & \\ n &= \langle \vec{v}^0 \rangle = \int_{\vec{v}} d^3v f(\vec{v}, \vec{r}, t) \end{aligned} \quad (3.4)$$

definiert werden. Allerdings haben nur die niedrigsten Momente eine anschauliche physikalische Bedeutung. Das 0. Moment gibt die Dichte der Ladungsträger an, das 1. Moment die durchschnittliche Geschwindigkeit und das 2. Moment ist mit der mittleren kinetischen Energie pro Teilchen verknüpft. Bewegungsgleichungen für diese Mittelwerte können hergeleitet werden, indem Gleichung (3.2) mit Potenzen von \vec{v} multipliziert und anschließend über die Geschwindigkeit integriert wird [MRS90]. Die Streu- und Generationsterme werden in späteren Abschnitten separat behandelt und vorerst mit den Symbolen $S_{coll}^{(m)}$ und $GR^{(m)}$ abgekürzt. Der mit diesen Definitionen aus Gleichung 3.2 folgende Ausdruck

$$\begin{aligned} &\int_{\vec{v}} d^3v \frac{\partial f}{\partial t} \vec{v}^m + \int_{\vec{v}} d^3v (\nabla_{\vec{r}} f \vec{v}) \vec{v}^m + \int_{\vec{v}} d^3v \left(\frac{\vec{K}}{m^*} \nabla_{\vec{v}} f \right) \vec{v}^m \\ &= S_{coll}^{(m)} + GR^{(m)}, \end{aligned} \quad (3.5)$$

kann für gerade m leicht vereinfacht werden. Da die m -Potenzen der Geschwindigkeiten in diesem Fall Skalare sind, lassen sich die nur ortsabhängigen Faktoren in den einzelnen Termen problemlos vor die Integrale schreiben und es ergibt sich nach einer partiellen Integration im dritten Term der linken Seite (beachte: $f \rightarrow 0$ für $|\vec{v}| \rightarrow \infty$)

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\vec{v}} d^3 v f \vec{v}^m + \nabla_{\vec{r}} \int_{\vec{v}} d^3 v f \vec{v}^{m+1} + \frac{\vec{K}}{m^*} \int_{\vec{v}} d^3 v f (\nabla_{\vec{v}} \vec{v}^m) = S_{coll}^{(m)} + GR^{(m)}. \quad (3.6)$$

Schreibt man die Integrale über f und einen weiteren Ausdruck jetzt als Mittelwerte ($\langle \dots \rangle$), so erhält man für **gerade** m

$$\frac{\partial}{\partial t} (n \langle \vec{v}^m \rangle) + \nabla_{\vec{r}} (n \langle \vec{v}^{m+1} \rangle) - \frac{\vec{K}}{m^*} (n \langle \nabla_{\vec{v}} \vec{v}^m \rangle) = S_{coll}^{(m)} + GR^{(m)}. \quad (3.7)$$

Ist m dagegen ungerade, so ist \vec{v}^m ein Vektor und die Terme in Gleichung 3.5 können nicht einfach umsortiert und teilweise aus den Integralen herausgezogen werden. Wird jedoch für zwei Vektoren a und b , das dyadische Produkt \otimes durch

$$\vec{a} \otimes \vec{b} := \begin{pmatrix} a_1 b_1 & a_1 b_2 & a_1 b_3 \\ a_2 b_1 & a_2 b_2 & a_2 b_3 \\ a_3 b_1 & a_3 b_2 & a_3 b_3 \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

erklärt, so gilt für die Multiplikation eines Vektors mit einem Skalarprodukt die Identität

$$(\vec{a} \vec{b}) \vec{c} = \vec{a} (\vec{b} \otimes \vec{c}). \quad (3.9)$$

Benutzt man diese in Gleichung 3.5 für ungerade m , so können die nur ortsabhängigen Faktoren wiederum vor die Integrale geschrieben werden und man erhält

$$\begin{aligned} & \int_{\vec{v}} d^3 v \frac{\partial f}{\partial t} \vec{v}^m + \nabla_{\vec{r}} \int_{\vec{v}} d^3 v f (\vec{v} \otimes \vec{v}^m) + \frac{\vec{K}}{m^*} \int_{\vec{v}} d^3 v (\nabla_{\vec{v}} f \otimes \vec{v}^m) \\ &= S_{coll}^{(m)} + GR^{(m)}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Durch eine partielle Integration aller Elemente der Matrix $\nabla_{\vec{v}} f \otimes \vec{v}^m$ im dritten Term der linken Seite erhält man

$$\begin{aligned} & \int_{\vec{v}} d^3 v \frac{\partial f}{\partial t} \vec{v}^m + \nabla_{\vec{r}} \int_{\vec{v}} d^3 v f (\vec{v} \otimes \vec{v}^m) + \frac{\vec{K}}{m^*} \int_{\vec{v}} d^3 v (\nabla_{\vec{v}} \otimes \vec{v}^m) \\ &= S_{coll}^{(m)} + GR^{(m)}(\vec{r}, t). \end{aligned} \quad (3.11)$$

Schreibt man die Integrale über f und einen weiteren Ausdruck wiederum als Mittelwerte, so gilt für **ungerade** m

$$\frac{\partial}{\partial t}(n\langle\vec{v}^m\rangle) + \nabla_{\vec{r}}(n\langle\vec{v} \otimes \vec{v}^m\rangle) - \frac{\vec{K}}{m^*}(n\langle\nabla_{\vec{v}} \otimes \vec{v}^m\rangle) = S_{coll}^m + GR^m(\vec{r}, t). \quad (3.12)$$

Die Gleichungen 3.7 und 3.12 bilden zusammen eine Gleichungshierarchie, die nur lösbar wird, wenn sie nach einer bestimmten Ordnung sinnvoll abgebrochen werden kann. In dieser Arbeit werden das nullte, erste und zweite Moment ausgewertet und für das dritte wird ein phänomenologischer Ansatz gewählt, um ein geschlossenes Gleichungssystem zu erhalten. Die explizite Auswertung der niedrigsten Momente ergibt folgende Ausdrücke:

$m = 0$: Für das nullte Moment folgt aus Gleichung 3.7

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla_{\vec{r}}(n\langle\vec{v}\rangle) = S_{coll}^{(0)} + GR^{(0)}. \quad (3.13)$$

Die zeitliche Änderung der Ladungsträgerdichte n an einem Ort lässt sich also bestimmen, wenn neben den Stoß- und Generationstermen die mittlere Geschwindigkeit $\langle v \rangle$ bekannt ist. Diese muss aber aus der Gleichung für das erste Moment bestimmt werden.

$m = 1$: Aus (3.12) folgt für die zeitliche Änderung der mittleren Geschwindigkeit

$$\frac{\partial}{\partial t}(n\langle\vec{v}\rangle) + \nabla_{\vec{r}}(n\langle\vec{v} \otimes \vec{v}\rangle) - \frac{\vec{F}}{m^*}n = S_{coll}^{(1)} + GR^{(1)}. \quad (3.14)$$

Die Elemente der symmetrischen Matrix $\langle\vec{v} \otimes \vec{v}\rangle$ sind Produkte von \vec{v} -Komponenten und somit von zweiter Ordnung. Schreibt man die Teilchengeschwindigkeit \vec{v} als Summe der mittleren Geschwindigkeit und einer Abweichung $\delta\vec{v}$ von dieser $\vec{v} = \langle\vec{v}\rangle + \delta\vec{v}$, so lässt sich die Matrix in zwei Teile

$$\begin{aligned} \langle\vec{v} \otimes \vec{v}\rangle &= \langle\langle\vec{v}\rangle \otimes \langle\vec{v}\rangle + \delta\vec{v} \otimes \delta\vec{v} + \langle\vec{v}\rangle \otimes \delta\vec{v} + \delta\vec{v} \otimes \langle\vec{v}\rangle\rangle \\ &= \langle\vec{v}\rangle \otimes \langle\vec{v}\rangle + \langle\delta\vec{v} \otimes \delta\vec{v}\rangle \end{aligned} \quad (3.15)$$

zerlegen. Hierbei wurde ausgenutzt, dass der Mittelwert der Abweichung $\delta\vec{v}$ nach Definition verschwindet. Der erste Term ist eine Matrix, dessen Elemente Produkte von $\langle\vec{v}\rangle$ -Komponenten enthalten und ist somit von erster Ordnung, während der zweite Term, da er Mittelwerte der quadratischen Abweichungen enthält, von der Ordnung zwei ist.

Die Interpretation der Abweichung $\delta\vec{v}$ als chaotische Bewegung motiviert die Definition der Matrix \hat{T} durch die Gleichung

$$\frac{1}{2}k_b \hat{T} = \frac{m^*}{2}\langle\delta\vec{v} \otimes \delta\vec{v}\rangle \quad (3.16)$$

mit der Boltzmannkonstanten k_B , wodurch \hat{T} die Einheit einer Temperatur erhält. Natürlich ist eine solche Definition an dieser Stelle noch sehr willkürlich, später wird sich jedoch zeigen, dass \hat{T} tatsächlich mit der Temperatur des Ladungsträgergases verbunden ist. Mit dieser Definition und Gleichung 3.15 folgt die Bewegungsgleichung der mittleren Geschwindigkeit

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(n\langle\vec{v}\rangle) + \nabla_{\vec{r}}[n(\langle\vec{v}\rangle \otimes \langle\vec{v}\rangle)] + \nabla_{\vec{r}}[n\frac{k_B}{m^*}\hat{T}] - \frac{\vec{K}}{m^*}n \\ = S_{coll}^{(1)} + GR^{(1)}, \end{aligned} \quad (3.17)$$

die bei Kenntnis der Stoß- und Generationsterme sowie der Elemente von \hat{T} gelöst werden kann.

$m = 2$ Das zweite Moment erhält nach Auswerten von (3.7) die Form

$$\frac{\partial}{\partial t}(n\langle\vec{v}^2\rangle) + \nabla_{\vec{r}}(n\langle\vec{v}^3\rangle) - \frac{2\vec{K}}{m^*}(n\langle\vec{v}\rangle) = S_{coll}^{(2)} + GR^{(2)}. \quad (3.18)$$

Schreibt man auch hier die Geschwindigkeit als Summe aus Mittelwert und Abweichung und wertet die Terme $\langle\vec{v}^2\rangle$ und $\langle\vec{v}^3\rangle$ aus, so erhält man:

$$\langle\vec{v}^2\rangle = \langle\vec{v}\rangle^2 + \langle\delta\vec{v}^2\rangle = \langle\vec{v}\rangle^2 + \frac{k_B}{m^*}Sp(\hat{T}) \quad (3.19)$$

$$\begin{aligned} \langle\vec{v}^3\rangle &= \langle\vec{v}^2\vec{v}\rangle = \langle\vec{v}\rangle\langle\vec{v}^2\rangle + \langle\vec{v}^2\delta\vec{v}\rangle \\ &= \langle\vec{v}\rangle\langle\vec{v}^2\rangle + 2\langle(\langle\vec{v}\rangle\delta\vec{v})\delta\vec{v}\rangle + \langle\delta\vec{v}^3\rangle \\ &= \langle\vec{v}\rangle\langle\vec{v}^2\rangle + 2\langle\vec{v}\rangle\langle\delta\vec{v}\otimes\delta\vec{v}\rangle + \langle\delta\vec{v}^3\rangle \\ &= \langle\vec{v}\rangle(\langle\vec{v}\rangle^2 + \frac{k_B}{m^*}Sp(\hat{T})) + 2\frac{k_B}{m^*}\langle\vec{v}\rangle\hat{T} + \langle\delta\vec{v}^3\rangle. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Einsetzen dieser Terme in Gleichung 3.18 führt auf die Bewegungsgleichung des zweiten Moments

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}[n(\langle\vec{v}\rangle^2 + \frac{k_B}{m^*}Sp(\hat{T}))] + \nabla_{\vec{r}}[n\langle\vec{v}\rangle\langle\vec{v}\rangle^2] \\ + \nabla_{\vec{r}}[n(\frac{k_B}{m^*}\langle\vec{v}\rangle Sp(\hat{T}) + 2\frac{k_B}{m^*}\langle\vec{v}\rangle\hat{T} + \langle\delta\vec{v}^3\rangle)] \\ + \frac{\vec{K}}{m^*}(n\langle\vec{v}\rangle) = S_{coll}^{(2)} + GR^{(2)}. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Diese Gleichung ist offenbar auch bei Kenntnis des Terms dritter Ordnung $\langle\delta\vec{v}\rangle$ nicht lösbar, da neben der unbekanntes $Sp(\hat{T})$ auch alle unbekanntes Elemente von \hat{T} in die Gleichung eingehen. Aber auch wenn durch diese Gleichung $Sp(\hat{T})$ berechnet werden könnte, wäre man zur Lösung der Bewegungsgleichung des

ersten Momentes 3.17 auf die Kenntnis aller \hat{T} Elemente angewiesen. Gelöst wird dieses Problem durch eine, die Form der Verteilungsfunktion f betreffende Annahme, welche in Abschnitt 3.2.4 erläutert wird. Die Gleichungshierarchie wird in dieser Arbeit nach dem zweiten Moment abgebrochen und durch ein phänomenologisches Modell des kubischen Terms $\langle \delta \vec{v} \rangle$, welches in Abschnitt 3.2.4 eingeführt wird, geschlossen.

3.2.3 Die Streuterme

Die Streuterme in den Momentengleichungen sind Mittelwerte des Streuterms der Boltzmann-Gleichung multipliziert mit einer Potenz von \vec{v} . Ihre allgemeine Form ist also

$$S_{coll}^m = \int_{\vec{v}} d^3 v \int_{\vec{v}'} d^3 v' \vec{v}^m [-w_{\vec{v} \rightarrow \vec{v}'} f(\vec{v}, \vec{r}, t)(1 - f(\vec{v}', \vec{r}, t)) + w_{\vec{v}' \rightarrow \vec{v}} f(\vec{v}', \vec{r}, t)(1 - f(\vec{v}, \vec{r}, t))]. \quad (3.22)$$

An dieser Form lässt sich schnell erkennen, dass die Streurrate des nullten Moments verschwindet. Dies drückt die Tatsache aus, dass durch den hier gemachten Streuan-satz Ladungsträger nur innerhalb ihres Energiebands gestreut werden [Sch01]. Für die höheren Momente werden die Streuraten jedoch von den mikroskopischen Streumechanismen wie auch von der Verteilungsfunktion selbst abhängen. Um die abgeleiteten Momentengleichungen lösen zu können, werden jedoch die Streuterme als Funktionen der Momente benötigt, weshalb wir durch die Beziehung

$$S_{coll}^m = -\frac{n \langle \vec{v}^m \rangle - n \langle \vec{v}^m \rangle_0}{\tau^{(m)}} \quad (3.23)$$

eine Relaxationszeit $\tau^{(m)}$ definieren [Sch01]. Hierbei bezeichnet $\langle \vec{v}^m \rangle_0$ den Zustand des m -ten Moments im thermischen Gleichgewicht. Wohl-gemerkt ist durch diese Einführung der Relaxationszeit noch keine Näherung gemacht worden. Vielmehr wird die Relaxationszeit $\tau^{(m)}$ durch die Beziehungen 3.22 und 3.23 definiert, wobei diese im Allgemeinen von der Verteilungsfunktion f abhängt.

Da im thermischen Gleichgewicht die mittlere Geschwindigkeit der Ladungsträger verschwindet, ergeben sich die Streuterme des ersten und zweiten Moments zu

$$S_{coll}^1 = -n \frac{\langle \vec{v} \rangle - \langle \vec{v} \rangle_0}{\tau^{(1)}} = -n \frac{\langle \vec{v} \rangle}{\tau^{(1)}} \quad (3.24)$$

$$S_{coll}^2 = -n \frac{\langle \vec{v}^2 \rangle - \langle \vec{v}^2 \rangle_0}{\tau^{(2)}} = -n \frac{\langle \vec{v} \rangle^2 + \frac{k_B}{m^*} Sp(\hat{T}) - \frac{k_B}{m^*} Sp(\hat{T}_0)}{\tau^{(2)}}. \quad (3.25)$$

In einigen Spezialfällen lässt sich die Impulsrelaxationszeit ($\tau^{(1)}$) relativ leicht berechnen. Betrachtet man als mikroskopischen Streuprozess nur Störstellenstreuung

und als Verteilungsfunktion eine um die mittlere Geschwindigkeit verschobene Maxwellverteilung, so findet man eine konstante Relaxationszeit [Lun90]. Im Experiment konnte dies jedoch nur für schwache elektrische Felder bestätigt werden, während für starke Felder erhebliche Abhängigkeiten von der Feldstärke auftraten. Diese Abweichung war zu erwarten, da an der Relaxation der Verteilungsfunktion verschiedenen Streuprozesse beteiligt sind. Aus diesem Grund wird in der Bauelements simulation oft mit empirisch aufgestellten Modellen versucht, das Verhalten der Relaxation, wie es im Experiment zu beobachten ist, nachzustellen.

3.2.4 Näherungen

In Abschnitt 3.2.2 führt die durch Gleichung 3.16 definierte Matrix dazu, dass die Gleichungen des zweiten und ersten Moments nicht gelöst werden können. Im thermischen Gleichgewicht kann die Geschwindigkeitsverteilung der freien Ladungsträger im Leitungs- oder Valenzband oft sehr gut durch eine Maxwellverteilung approximiert werden. In einem solchen Fall gilt für die Diagonalelemente der Matrix \hat{T}

$$\begin{aligned} (\hat{T})_{xx} &= (\hat{T})_{yy} = (\hat{T})_{zz} = \frac{m^*}{k_B} \langle \delta v_x \delta v_x \rangle \\ &= \sqrt{\frac{m^*}{2\pi k_B T}} \int_{-\infty}^{\infty} (\delta v_x)^2 \exp\left(-\frac{m^* (\delta v_x)^2}{2k_B T}\right) d(\delta v_x) = T, \end{aligned} \quad (3.26)$$

während die nichtdiagonalen Elemente verschwinden. Die Matrix \hat{T} ist also durch die Beziehung $\hat{T} = T\hat{1}$ mit der Temperatur des Ladungsträgergases T verknüpft. Unter der Annahme, dass die Geschwindigkeitsverteilung in Gegenwart eines elektrischen Feldes in eine, um die mittlere Geschwindigkeit $\langle \vec{v} \rangle$ verschobene, Maxwellverteilung übergeht, gilt diese Beziehung auch im Nichtgleichgewicht. Hierdurch reduziert sich die Abhängigkeit der Momenten-Gleichungen von der Matrix \hat{T} auf die Abhängigkeit vom Parameter T . Dieser kann nun bei Kenntnis des Terms dritter Ordnung aus der Bewegungsgleichung des zweiten Moments 3.21 berechnet werden. Versucht man auch für den Vektor $\langle \delta \vec{v}^3 \rangle$ sich einen ersten Eindruck dieser Größe zu verschaffen und berechnet die Mittelwerte der Komponenten unter der Annahme einer verschobenen Maxwellverteilung, so erkennt man, dass dieser verschwindet. Experimentell kann jedoch gezeigt werden, dass dieser oft als Wärmefluss interpretierte Term in einigen Bauelementen einen gewissen Einfluss hat. Aus diesem Grund wird in dieser Arbeit der Ansatz

$$\frac{m^*}{2} n \langle \delta \vec{v}^3 \rangle = -\kappa \nabla_{\vec{r}} T \quad (3.27)$$

mit der Wärmeleitfähigkeit κ verwendet, um die Hierarchie der Momentengleichungen abzurechnen [Lun90].

Beachtet man, dass die Gleichgewichtstemperatur der Ladungsträgergase gleich der Temperatur des Kristallgitters T_G ist, so folgt für n , $\langle \vec{v} \rangle$ und T ein geschlossenes

System partieller Differentialgleichungen

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\nabla_{\vec{r}}(n\langle\vec{v}\rangle) + GR^{(0)} \quad (3.28)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(n\langle\vec{v}\rangle) &= -\nabla_{\vec{r}}[n(\langle\vec{v}\rangle \otimes \langle\vec{v}\rangle)] - \nabla_{\vec{r}}[n\frac{k_b}{m^*}T] \\ &\quad - \frac{\vec{F}}{m^*}n - n\frac{\langle\vec{v}\rangle}{\tau^{(1)}} + GR^{(1)} \end{aligned} \quad (3.29)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}[n(\langle\vec{v}\rangle^2 + \frac{3k_B}{m^*}T)] &= -\nabla_{\vec{r}}[n\langle\vec{v}\rangle\langle\vec{v}\rangle^2] - \nabla_{\vec{r}}[n\langle\vec{v}\rangle\frac{5k_B}{m^*}T - \frac{2\kappa}{m^*}\nabla_{\vec{r}}T] \\ &\quad - \frac{2\vec{K}}{m^*}(n\langle\vec{v}\rangle) - n\frac{\langle\vec{v}\rangle^2 + 3\frac{k_B}{m^*}(T - T_G)}{\tau^{(2)}} + GR^{(2)}. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Auch wenn dieses Gleichungssystem nach der Vorgabe von Generationsraten $GR^{(m)}$, Anfangs- und Randbedingungen prinzipiell lösbar ist, verursachen die komplizierten, nichtlinearen Kopplungen der Gleichungen untereinander einen sehr hohen Rechenaufwand. In vielen Anwendungen kann dieser jedoch durch die Einführung einiger zusätzlicher Näherungen erheblich reduziert werden.

In näherungsweise homogenen elektrischen Feldern sind die mittleren Geschwindigkeiten nur schwach ortsabhängig und die entsprechenden Gradienten können gegenüber den anderen Termen vernachlässigt werden [Lun90].

Messungen und Monte-Carlo-Simulationen zeigen, dass die kinetische Energie der mittleren Geschwindigkeit $\frac{m^*}{2}\langle\vec{v}\rangle^2$ sehr klein gegenüber den thermischen Energien $k_B T$ der Ladungsträger sind und somit ebenfalls vernachlässigt werden können [Lun90].

Mit Hilfe dieser Näherungen und mit den Definitionen der Beweglichkeit μ , der Diffusionskonstanten D und der Teilchenstromdichte \vec{j}

$$\begin{aligned} \mu &= \frac{e}{m^*}\tau_1 \quad \text{mit } e: \text{ Betrag der Elementarladung} \\ D &= \frac{k_B T_0}{e}\mu \quad \text{mit } T_0 = 300K \\ \vec{j} &= n\langle\vec{v}\rangle \end{aligned}$$

erhalten wir das vereinfachte hydrodynamische Gleichungssystem

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\nabla_{\vec{r}}\vec{j} + GR^{(0)} \quad (3.31)$$

$$\tau^{(1)}\frac{\partial \vec{j}}{\partial t} = -Dn\nabla_{\vec{r}}\left(\frac{T}{T_0}\right) - D\frac{T}{T_0}\nabla_{\vec{r}}n \pm n\mu\nabla_{\vec{r}}\varphi - \vec{j} + \tau^{(1)}GR^{(1)} \quad (3.32)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{3}{2}nk_B T\right) = -\nabla_{\vec{r}}\vec{F} \pm \vec{j}e\nabla_{\vec{r}}\varphi - \frac{3}{2}nk_B\frac{T - T_G}{\tau^{(2)}} + \frac{m^*}{2}GR^{(2)} \quad (3.33)$$

$$\vec{F} = \frac{5}{2}k_B T\vec{j} - \kappa\nabla_{\vec{r}}T. \quad (3.34)$$

Für die auf die Ladungsträger wirkende Kraft wurde hier ein elektrisches Feld (bzw. der Gradient des Potentials) verwendet, was zu verschiedenen Vorzeichen für negative und positive Ladungsträger führt. Das obere Vorzeichen bezieht sich jeweils auf Elektronen und die Abkürzung \vec{F} beschreibt den Wärmefluss.

Da die in dieser Arbeit betrachtete MISIM-Struktur von Wechselspannungen mit einer Frequenz von bis zu einigen hundert kHz betrieben wird, sind die Zeiträume in denen sich die äußeren Bedingungen des Bauelementes ändern groß gegenüber den Relaxationszeiten der Ladungsträgersysteme. Diese befinden sich somit zu jedem Zeitpunkt annähernd in einem stationären Zustand, welcher durch Vernachlässigung der zeitlichen Ableitungen aus dem Gleichungssystem bestimmt werden kann.

Die Erzeugungs- und Vernichtungsraten der Elektronen- und Löcherdichten (d.h. $GR^{(0)}$) setzen sich in der ZnS:Mn MISIM-Struktur additiv aus Raten verschiedener Prozesse zusammen. Für Elektronen sind dies die Stoßionisationsrate G_{II} , Rekombinationsraten der Elektronen mit freien Löchern R_{np} und mit eingefangenen Löchern R_{nt} . Für die freien Löcher besteht diese Rate aus der Stoßionisationsrate, der Wechselwirkung mit den Löcherfallen R_{pt} und der Rekombination mit freien Elektronen R_{ep} . Von diesen Prozessen soll im folgenden angenommen werden, dass sie die erzeugten Teilchen nicht vorzugsweise in eine bestimmte Richtung emittieren und auch keine Ladungsträger mit bestimmten Flugrichtungen bevorzugt vernichten. Es soll also keine mittlere Geschwindigkeit $\langle \vec{v} \rangle$ generiert oder vernichtet werden, was $GR^{(1)} = 0$ zur Folge hat. Um den Term $\frac{m^*}{2} GR^{(2)}$ zu bestimmen, nehmen wir an, dass die Energie eines Ladungsträrgases durch Erzeugung eines Teilchens um $\frac{3}{2} k_B T_G$ zunimmt und bei Vernichtung eines Teilchens um $\frac{3}{2} k_B T$ abnimmt. Damit ist für die Elektronendichte zu einem festen Zeitpunkt

$$0 = -\nabla_{\vec{r}} \vec{j}_n + G_{II} - R_{np} - R_{nt}, \quad (3.35)$$

$$\vec{j}_n = -D_n n \nabla_{\vec{r}} \left(\frac{T_n}{T_0} \right) - D_n \frac{T_n}{T_0} \nabla_{\vec{r}} n + \mu_n n \nabla_{\vec{r}} \varphi, \quad (3.36)$$

$$0 = -\nabla_{\vec{r}} \vec{F}_n + \vec{j}_n e \nabla_{\vec{r}} \varphi + \frac{3}{2} n \frac{k_B}{\tau_E} (T_n - T_G) + GR^2, \quad (3.37)$$

$$\vec{F}_n = -\kappa \nabla_{\vec{r}} T_n + \frac{5}{2} k_B T_n \vec{j}_n, \quad (3.38)$$

zu lösen, während sich für die freien Löcher

$$0 = -\nabla_{\vec{r}} \vec{j}_p + G_{II} - R_{np} - R_{pt}, \quad (3.39)$$

$$\vec{j}_p = -D_p p \nabla_{\vec{r}} \left(\frac{T_p}{T_0} \right) - D_p \frac{T_p}{T_0} \nabla_{\vec{r}} p - \mu_p p \nabla_{\vec{r}} \varphi, \quad (3.40)$$

$$0 = -\nabla_{\vec{r}} \vec{F}_p - \vec{j}_p e \nabla_{\vec{r}} \varphi + \frac{3}{2} p \frac{k_B}{\tau_E} (T_p - T_G) + GR^2, \quad (3.41)$$

$$\vec{F}_p = -\kappa \nabla_{\vec{r}} T_p + \frac{5}{2} k_B T_p \vec{j}_p, \quad (3.42)$$

ergibt.

Wie bereits im Kapitel über Streuung erwähnt, sind konstante Relaxationszeiten nicht immer gute Näherungen. Speziell bei hohen Spannungen werden diese schnell kleiner und das System relaxiert schneller. Die Impulsrelaxationzeit definiert die Beweglichkeit der Ladungsträger, weswegen meist direkt Modelle dieser Größe benutzt werden. Das Produkt aus Beweglichkeit und Feldstärke ist die mittlere Teilchengeschwindigkeit. Diese erreicht nach experimentellen Befunden bei hohen elektrischen Feldern E eine Sättigungsdriftgeschwindigkeit v_{sat} . Ein Modell, das dieses Verhalten richtig wiedergibt, ist [Sch01]

$$\mu(E) = \frac{\mu_0}{[1 + (\frac{\mu_0 E}{v_{sat}})^2]^{1/2}},$$

mit der Mobilitätskonstanten bei schwachen Feldern μ_0 . Die Energierelaxationszeit wird durch die einfache Beziehung

$$\tau^{(2)} = \tau_0^{(2)} \frac{T}{T_0}$$

modelliert [Lun90]. Die Wärmeleitfähigkeit sollte mit der Teilchendichte und der Temperatur steigen, was durch die Beziehung

$$\kappa = \frac{3k_B^2 \mu}{2e} n T$$

erfüllt ist, die hier verwendet werden soll [Czy00].

Während die Gleichungen in dieser Form für das gesamte innere Gebiet der ZnS:Mn Schicht also für $0 < z < L$ gelten, müssen für die Grenzflächen bei $z = 0$ und $z = L$ Randbedingungen aufgestellt werden, welche sich aus den speziellen physikalischen Prozessen an den Grenzflächen ergeben. Diese sollen im nächsten Abschnitt diskutiert und entsprechende Gleichungen aufgestellt werden.

Für die eingefangenen Löcher ergibt sich durch setzen von $\mu = 0$ eine gewöhnlich Differentialgleichung mit der entsprechenden Rate für den Wechselwirkungsprozess mit den freien Löchern und Elektronen:

$$\frac{\partial p_t}{\partial t} = R_{pt} - R_{nt}. \quad (3.43)$$

Diese Differentialgleichung muss mit Anfangsbedingungen der Form $p_t(x, y, z, t = 0) = p_t^0(x, y, z)$ komplettiert werden, welche sich aus dem Zustand des dotierten Halbleiters im thermodynamischen Gleichgewicht ergeben.

Eine häufig verwendete Näherung besteht darin, die Ladungsträgertemperaturen T_n und T_p als räumlich und zeitlich konstant anzusehen, wodurch alle Terme mit Temperaturgradienten wegfallen. In der Form werden die Gleichungen auch Drift-Diffusionsmodell genannt.

3.3 Grenzflächeneffekte

Im letzten Abschnitt wurde das hydrodynamische Transportmodell zur Beschreibung der Ladungsträgerdynamik hergeleitet. Dieses Modell ist ein System von partiellen Differentialgleichungen und muss somit durch entsprechende Randbedingungen, welche durch die Physik der Grenzflächen bestimmt sind, vervollständigt werden.

An den Grenzflächen zwischen der ZnS:Mn Schicht und dem Isolatormaterial ($z = 0$ und $z = L$) bilden sich so genannte Grenzflächenzustände [HSA82, Bri89]. Aus diesen Zuständen können bei hohen elektrischen Feldstärken Elektronen in das Leitungsband des Halbleiters tunneln. Bringuier leitete für mit Wechselspannung betriebene TFEL-Strukturen mit Hilfe einer Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB) Näherung einen Ausdruck für die Tunnelstromdichte ab [Bri89]

$$j_t^{l,r}(x, y) = n_{ss} \frac{2}{3} \frac{B|E(x, y)|}{\sqrt{2\epsilon_0}} \Phi \exp \left(-\frac{1}{B|E(x, y)|} \left(\epsilon_0 + \frac{\rho^{l,r}(x, y)}{n_{ss}} \right)^{\frac{3}{2}} \right). \quad (3.44)$$

Hier bezeichnet $E(x, y)$ das elektrische Feld an der Grenzfläche, $\rho^{l,r}$ ist die Oberflächenladungsdichte an der linken (l) bzw. rechten (r) Grenzfläche (bezogen auf Abbildung 3.1) in Einheiten der Elementarladung e und $B = \frac{3eh}{4\sqrt{2}m^*}$ mit der Planckschen Konstanten h und der effektiven Elektronenmasse m^* . Die Dichte der Grenzflächenzustände ist mit n_{ss} bezeichnet und ihre energetische Lage wird durch die Fermienergie ϵ_0 beschrieben. Die Funktion Φ ist eine schwach vom elektrischen Feld abhängige Größe und wird in allen Rechnungen durch eine Konstante mit dem Wert $1.35 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$ genähert [Bri89]. Prinzipiell tunneln natürlich auch Löcher aus den Grenzflächenzuständen in das Valenzband des ZnS:Mn, jedoch ist dieser Prozess aufgrund der Lage des Fermi-niveaus hier vernachlässigbar.

Der inverse Prozess, der Einfang von Löchern und Elektronen in Grenzflächenzuständen, ist in erster Näherung proportional zu den Dichten der Ladungsträger an den Grenzflächen [KM89]. Der Tunnelstrom und der Rekombinationsstrom geben zusammen den Strom an den Grenzflächen vor und bilden somit gemischte Randbedingungen für die Transportgleichungen der Elektronen und freien Löcher. Es ergibt sich also

$$j_n(x, y, z = 0, t) = -\sigma_n n(x, y, z = 0, t) + j_t^l(x, y, t), \quad (3.45)$$

$$j_n(x, y, z = L, t) = \sigma_n n(x, y, z = L, t) - j_t^r(x, y, t), \quad (3.46)$$

$$j_p(x, y, z = 0, t) = -\sigma_p p(x, y = 0, z, t), \quad (3.47)$$

$$j_p(x, y, z = L, t) = \sigma_p p(x, y, z = L, t), \quad (3.48)$$

mit den Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeiten $\sigma_{n,p}$ der Elektronen und Löcher.

Die resultierende Oberflächenladungsdichte hat wesentlichen Einfluss auf das elektrische Feld und variiert auf einer Zeitskala in der Größenordnung einer Periode der angelegten Wechselspannung. Für die zeitliche Entwicklung der Oberflächenladungsdichte müssen somit folgende gewöhnlichen Differentialgleichungen integriert werden:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_l(x, y, t)}{\partial t} &= -\sigma_n(n(x, y, z = 0, t) - n_0) \\ &+ \sigma_p(p(x, y, z = 0, t) - p_0) + j_t^l(x, y, t), \end{aligned} \quad (3.49)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_r(x, y, t)}{\partial t} &= -\sigma_n(n(x, y, z = L, t) - n_0) \\ &+ \sigma_p(p(x, y, z = L, t) - p_0) - j_t^r(x, y, t). \end{aligned} \quad (3.50)$$

Diese Gleichungen müssen wiederum durch entsprechende Anfangsbedingungen der Form $\rho_{l,r}(x, y, t = 0) = \rho_{l,r}^0(x, y)$ ergänzt werden. Hierbei muss beachtet werden, dass aufgrund der elektrischen Neutralität des Gesamtsystems die Anfangsbedingungen der Oberflächenladung und der Raumladungsdichte nicht unabhängig voneinander gewählt werden können. In x- und y- Richtung verwenden wir periodische Randbedingungen

$$n(x = 0, y, z, t) = n(x = L_x, y, z), \quad n(x, y = 0, z, t) = n(x, y = L_y, z), \quad (3.51)$$

$$p(x = 0, y, z, t) = p(x = L_x, y, z), \quad p(x, y = 0, z, t) = p(x, y = L_y, z) \quad (3.52)$$

um unerwünschte Grenzflächeneffekte zu vermeiden.

Die Randbedingungen zur Bestimmung der Ladungsträgertemperaturen werden an den Isolator-Halbleiterübergängen durch

$$\frac{\partial}{\partial z} T_{n,p}(x, y, z = 0) = 0 \quad \frac{\partial}{\partial z} T_{n,p}(x, y, z = L) = 0 \quad (3.53)$$

definiert [Sch01], während in x- und y-Richtung wiederum periodische Randbedingungen verwendet werden.

3.4 Die Raten

3.4.1 Stoßionisation

Der Stoßionisationseffekt ist die einzige wesentliche Quelle freier Löcher und durch den Einfang von Löchern letztlich auch Ursache der Bildung einer Raumladung. Die Stoßionisationsrate G_{II} wird üblicherweise als Produkt des Ladungsträgerstroms mit einem, vom elektrischen Feld abhängigen, Stoßionisationskoeffizienten geschrieben [Sch01]

$$G_{II} = \alpha(|E|)j_n.$$

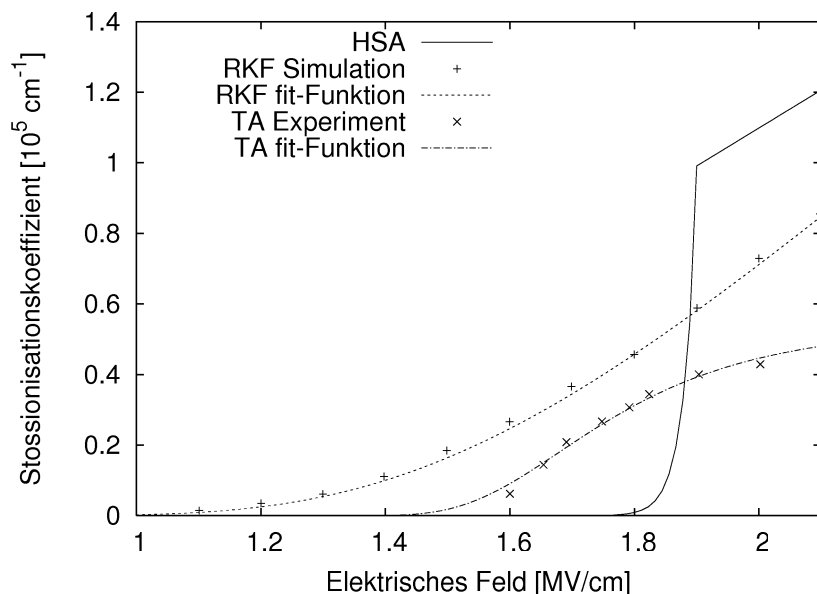


Abbildung 3.2: Stößionisationskoeffizient als Funktion des elektrischen Feldes nach Howard, Sahni and Alt (HSA) [HSA82], Thompson and Allen (TA) [TA87], and Redmer, Kuligk, Fitzer et al. (RKF) [RKF05].

Viele Modelle zum Ladungsträgertransport in ZnS:Mn MISIM-Strukturen benutzen einen Stößionisationskoeffizienten, wie er von Howard [HSA82] vorgeschlagen wurde und in Abbildung 3.2 dargestellt ist. Dieser Koeffizient zeigt einen extrem steilen Anstieg bei einer Feldstärke von etwa 1.9 MV/cm. Im Jahr 1988 warf Müller [MM82] die Frage auf, inwieweit der von den einzelnen Gruppen publizierte Memoryeffekt von der speziellen Form des Ionisationskoeffizienten abhängt oder ob dieser gar nur eine Folge des extrem steilen Anstiegs dieses Koeffizienten ist. Diese Frage ist vor allem deshalb interessant, weil Messungen von Thompson [TA87] und Monte Carlo Simulationen von Kuligk [RKF05] eine schwächere Feldabhängigkeit des Koeffizienten α nahe legen. Einige Abschnitte dieser Arbeit werden auf die unterschiedlichen Auswirkungen der verschiedenen Ionisationskoeffizienten, wie sie in Abbildung 3.2 gezeigt sind, ausführlich eingehen.

3.4.2 Locheinfang

Kurz nach dem der Memoryeffekt der ZnS:Mn MISIM-Struktur bekannt wurde, wurden Messungen veröffentlicht, die eine positive Raumladung innerhalb der Halbleiterschicht belegten [HSA82, Bri97, HKW97]. Diese blieb auch eine gewisse Zeit nach Ausschalten der Spannungsquelle erhalten und wurde deshalb als Hauptur-

sache für den Memoryeffekt angesehen. Schnell wurde klar, dass es sich bei der Raumladung um Löcher aus dem Valenzband handelte, die in diskrete Energiezustände innerhalb der Energiebandlücke übergegangen waren und nur langsam aus diesen emittiert wurden. Der Ursprung dieser Energieniveaus konnte nicht eindeutig geklärt werden, jedoch fand Howard [HSA82] Hinweise darauf, dass die Dichte der Raumladung mit der Mangankonzentration zunimmt. Um eine Rate für den Aufbau der Raumladung zu erhalten, müssen Wechselwirkungsprozesse der freien Valenzbandlöcher mit diskreten Energieniveaus innerhalb der Bandlücke betrachtet werden. Nach Shockley und Read [SR52, Sec96] gilt für die Nettoeinfangrate eines solchen Prozesses für nichtdegenerierte Halbleiter der Zusammenhang

$$R_{pt} = \gamma_c(N_t - p_t)p - \tilde{\gamma}_e \exp\left(\frac{\Delta E}{k_B T_G}\right)p_t. \quad (3.54)$$

Hierbei bezeichnen γ_c und $\tilde{\gamma}_e$ den Einfang- und den Emissionskoeffizienten, ΔE den energetischen Abstand der Löcherfallen zur Valenzbandkante und N_T die Dichte der Löcherfallen. Mit der Definition eines Emissionskoeffizienten bei einer Gittertemperatur von $T_0 = 300$ K lässt sich die Rate umschreiben und es ergibt sich

$$R_{pt} = \gamma_c(N_t - p_t)p - \gamma_e \exp\left(\frac{\Delta E}{k_B T_0}\left(1 - \frac{T_0}{T_G}\right)\right)p_t. \quad (3.55)$$

Rekombinationsprozesse zwischen Elektronen und freien und eingefangenen Löchern werden durch übliche Ratengleichungen

$$R_{np} = \gamma_{np}(np - n_0p_0), \quad (3.56)$$

$$R_{nt} = \gamma_{nt}(np_t - n_0p_{t0}) \quad (3.57)$$

mit entsprechenden Rekombinationskoeffizienten γ_{np} und γ_{nt} beschrieben [Bla62]. Hierbei bezeichnen n_0 und p_0 die Ladungsträgerdichten im thermischen Gleichgewicht.

3.5 Gittertemperatur

Wie im letzten Abschnitt diskutiert, hat die Gittertemperatur großen Einfluss auf die Emissionsrate der in Löcherfallen eingefangenen Löcher und somit auf das gesamte Verhalten der MISIM-Struktur. Messungen zeigen, dass sich das Bauelement insbesondere bei hochfrequenten Betrieb um bis zu 100 Grad aufheizen kann. Um also alle wesentlichen Effekte in dem Modell zu berücksichtigen, muss eine Wärmeleitungsgleichung für das Gitter gelöst werden. Mit Hilfe der Wärmekapazität c_G , der Wärmeleitfähigkeit κ_G und der Dichte des ZnS ρ lässt sich direkt eine partielle

Differentialgleichung für die Temperatur angeben [Kne98]:

$$\frac{\partial}{\partial t} T_G = D_G \Delta_{\vec{r}} T_G + \frac{e}{c_G \rho} (\vec{j}_p - \vec{j}_n) \vec{E} \quad (3.58)$$

$$D_G = \frac{\kappa_G}{c_G \rho}. \quad (3.59)$$

Die Wärmeproduktionsrate ist dabei die ohmsche Wärme, die beim Transport von Ladungsträgern durch ein Kristallgitter entsteht. Die Wärme wird an den Oberflächen des Bauelements bei $z = -L_{ins}$ und $z = L + L_{ins}$ an die Umgebung abgegeben, was die zur Lösung der Gleichung notwendigen Randbedingungen definiert. Der Wärmefluss an den Rändern der Isolatorschicht ist gegeben durch die Abstrahlung von Wärme von der Oberfläche an die Umgebung

$$D \frac{\partial}{\partial z} T_G(z = -L) = \alpha (T_G(z = -L_{ins}) - T_U) \quad (3.60)$$

$$D \frac{\partial}{\partial z} T_G(z = L + L_{ins}) = \alpha (T_G(z = L + L_{ins}) - T_U). \quad (3.61)$$

Hierbei bezeichnet α den Abstrahlungskoeffizienten. In x- und y-Richtung werden wiederum periodische Randbedingungen verwendet. Die Anfangsbedingung ist durch die Umgebungstemperatur T_U gegeben.

3.6 Poissongleichung

Um die Stoßionisationsrate, den Tunnelstrom und die Verteilungen der freien Ladungsträger zu bestimmen, muss das elektrische Feld durch $\vec{E} = -\nabla_{\vec{r}} \varphi$ aus dem Potential berechnet werden. Dieses lässt sich bei Kenntnis der Ladungsdichte, welche sich aus den Dichten der freien Ladungsträger, der Raumladungsdichte und der Oberflächenladungsdichte zusammensetzt, aus der Poissongleichung

$$\Delta_{\vec{r}} \varphi = -\frac{e}{\epsilon_r \epsilon_0} (p_t + p - n + \rho_l \delta(z) + \rho_r \delta(z - L)) \quad (3.62)$$

bestimmen. ϵ_0 und ϵ_r bezeichnen die elektrische Feldkonstante und die materialabhängige Dielektrizitätszahl. Die Randbedingungen dieser Differentialgleichung in z-Richtung werden durch die zeitabhängige Betriebsspannung $V(t)$ definiert

$$\begin{aligned} \varphi(-L_{ins}) &= V(t), \\ \varphi(L + L_{ins}) &= 0, \end{aligned}$$

während in x- und y-Richtung periodische Randbedingungen gewählt wurden.

3.7 Diskussion

Um den Überblick nicht zu verlieren, wollen wir das zu lösende Gleichungssystem hier noch einmal zusammenfassen und diskutieren. Die Dichten und Stromdichten der freien Ladungsträger lassen sich zu einem gegebenen Zeitpunkt aus den Transportgleichungen 3.35 bis 3.41 und der Poissongleichung 3.62 eindeutig bestimmen, wenn die Dichte eingefangener Löcher p_t , die Oberflächenladungsdichte $\rho_{l,r}$ und die Gittertemperatur T_G bekannt sind. Diese Größen definieren also den Systemzustand und werden künftig als **Systemvariablen** bezeichnet.

Da andererseits n , \vec{j}_n , p und \vec{j}_p eindeutig die Wachstumsraten der Systemvariablen definieren, sind die Differentialgleichungen 3.43, 3.49 und 3.58, die deren zeitliche Entwicklung beschreiben, von der Form

$$\frac{\partial p_t}{\partial t} = f(p_t, \sigma_{l,r}, T_G, t) \quad (3.63)$$

$$\frac{\partial \sigma_{l,r}}{\partial t} = g(p_t, \sigma_{l,r}, T_G, t) \quad (3.64)$$

$$\frac{\partial T_G}{\partial t} = D \Delta_{\vec{r}} T_G + h(p_t, \sigma_{l,r}, T_G, t). \quad (3.65)$$

Die Funktionen f , g und h hängen hierbei sicherlich nicht linear von den Systemvariablen ab, was die Existenz mehrerer (in noch zu definierender Weise) stationärer Systemzustände möglich macht.

Wir wollen nun einen ersten Eindruck von der Struktur der Gleichungen und dem Systemverhalten vermitteln. Sowohl eine positive Raumladung als auch eine negative Oberflächenladung an der momentanen Kathode unterstützen durch ein stärkeres elektrisches Feld und höher besetzte Grenzflächenzustände den Tunnelstrom und die Stoßionisation. Dies hat eine höhere Dichte freier Löcher und somit wachsende Raum- und Oberflächenladungsdichten zur Folge. Eine hohe Stromdichte führt jedoch zu einer hohen ohmschen Wärmeproduktion, wodurch die Gittertemperatur steigt und eingefangene Löcher schneller emittiert werden. Da diese mit der negativen Oberflächenladung rekombinieren, sinken die Raum- und Oberflächenladungsdichten. Solche Gleichungssysteme, die aus einer sich selbst aktivierenden und einer inhibierenden Komponente bestehen, werden oft als Aktivator-Inhibitor Systeme bezeichnet und zeigen zum Teil sehr überraschende Eigenschaften [Mur89].

Diese Einsichten motivieren, sich vor der Simulation der MISIM-Struktur ein wenig mit der Theorie der nichtlinearen Dynamik und speziell mit den Aktivator-Inhibitor Gleichungen zu beschäftigen, was in Kapitel 5 geschehen soll.

Kapitel 4

Numerik

4.1 Die zeitliche Diskretisierung

Zur zeitlichen Integration der Differentialgleichungen für die Oberflächen- und Raumladungsdichten wird ein Verfahren zweiter Ordnung verwendet, welches von Karl Heun vorgeschlagen wurde und zur Klasse der Runge-Kutta-Verfahren gehört [Cry97]. Nach diesem wird eine Differentialgleichung der Form

$$\frac{dy(t)}{dt} = f(t, y(t))$$

näherungsweise gelöst durch

$$\begin{aligned} y(t + \Delta t) &= y(t) + \frac{\Delta t}{2} \cdot \{f(t, y(t)) \\ &+ f(t + \Delta t, y(t) + \Delta t \cdot f(t, y(t)))\}. \end{aligned}$$

Dies bedeutet für die Dichte der eingefangenen Löcher und die Oberflächenladungsdichte mit den Bezeichnungen f, g für die Raten

$$\begin{aligned} p_t(t + \Delta t) &= p_t(t) + \frac{\Delta t}{2} \{f(p_t, \rho_{l,r}, T_G, t) \\ &+ f(p_t + \Delta t f(t), \rho(t) + \Delta t g(t), T_G + \Delta t h(t), t + \Delta t)\} \quad (4.1) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \rho_{l,r}(t + \Delta t) &= \rho_{l,r}(t) + \frac{\Delta t}{2} \{g(p_t, \rho_{l,r}, T_G, t) \\ &+ g(p_t + \Delta t f(t), \rho(t) + \Delta t g(t), T_G + \Delta t h(t), t + \Delta t)\}. \quad (4.2) \end{aligned}$$

Für die Diffusionsgleichung der Gittertemperatur hat sich das numerisch weniger aufwendige Verfahren erster Ordnung nach Euler

$$T_G(t + \Delta t) = T_G(t) + \Delta t [D_G \Delta_{\vec{r}} T_G(t + \Delta t) + h(p_t, \rho_{l,r}, T_G, t)] \quad (4.3)$$

bewährt. Hierbei wird der Differentialterm auf der rechten Seite implizit, d.h. zum Zeitpunkt $t + \Delta t$, behandelt, was nach der Ortsdiskretisierung auf ein lineares Gleichungssystem führt (siehe Abschnitt 4.5).

Es sind also für einen gegebenen Zeitpunkt t mit einer bestimmten Raumladungsdichte, Oberflächenladungsdichte und Gittertemperatur die Raten f, g und h zu bestimmen. Da diese jedoch von den Dichten und Stromdichten der freien Löcher und Elektronen abhängen, müssen die partiellen Differentialgleichungen des Transportmodells gelöst werden. Wie dies im einzelnen geschieht wird in den nächsten Abschnitten im Detail erläutert.

Der zeitliche Löser kann erheblich beschleunigt werden, wenn die Änderungen der Systemvariablen p_t, ρ und T_G während einer vollen Periode der Treiberspannung klein sind. In solchen Fällen kann die Gesamtänderung der Systemvariablen während

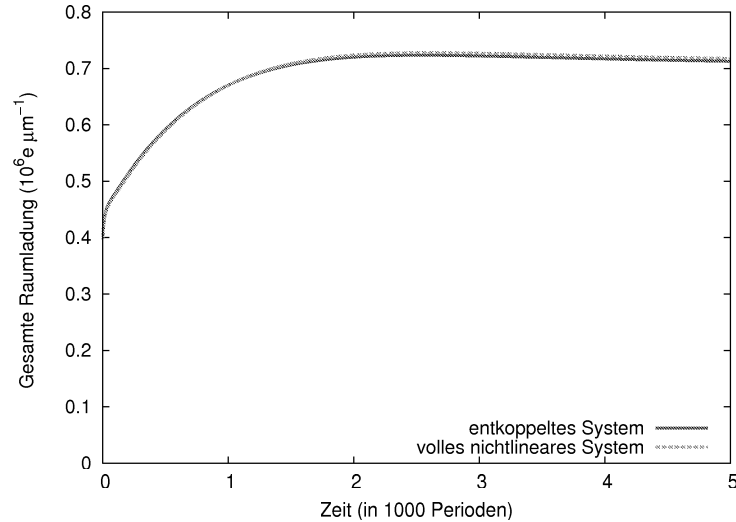


Abbildung 4.1: Gezeigt sind die Entwicklungen der gesamten positiven Raumladung einer MISIM-Struktur bei Lösung der entkoppelten Transportgleichungen und des vollen nichtlinearen Systems. Es wurden jeweils zweidimensionale Simulationen über 5000 Perioden aus inhomogenen Anfangsbedingungen durchgeführt ($f = 10$ kHz, $V_0 = 112$ V).

der n -ten Periode als Nettorate $R_{netto}(n)$ für die folgenden m Perioden herangezogen werden. Bezeichnet τ die Periodendauer, so kann auf diese Weise ein zeitlicher Löser mit Schrittweitensteuerung

$$\begin{aligned} p_t((n+m)\tau) &= p_t(n\tau) + mR_{netto}(n) \\ \rho_{l,r}((n+m)\tau) &= \dots \end{aligned}$$

konstruiert werden, wobei m so gewählt wird, dass die Änderungen der Systemvariablen genügend klein bleiben.

Eine Zusammenfassung der kompletten zeitlichen Diskretisierung ist in Anhang A.1 in Form eines Flussdiagramms gegeben. Dieses Diagramm gibt den prinzipiellen Ablauf des Hauptprogramms der Simulation wieder, ohne dabei zu viele Details zu berücksichtigen.

4.2 Entkopplung der Transportgleichungen

Die verbleibende Aufgabe besteht, wie gesagt, in der Lösung von fünf partiellen Differentialgleichungen im Ort. Problematisch wird dies dadurch, dass die Poisson-, die Kontinuitätsgleichungen und die Gleichungen der Ladungsträgertemperatur

ren auf nichtlineare Weise untereinander gekoppelt sind. Nach Diskretisierung der Gleichungen bestände die Aufgabe also darin ein nichtlineares Gleichungssystem zu lösen, was im allgemeinen sehr aufwendig ist. Numerische Experimente haben jedoch gezeigt, dass folgende Näherungen zur Entkopplung der Gleichungssysteme gut geeignet sind:

- Die Dichten der freien Ladungsträger sind sehr klein, so dass das elektrische Feld fast ausschließlich von den ortsfesten eingefangenen Löchern, der Oberflächenladung und der angelegten Spannung bestimmt wird. Die Kopplung der Poissongleichung 3.62 mit den Transportgleichungen kann also durch die Näherung

$$p_t + p + n \approx p_t \quad (4.4)$$

aufgehoben werden.

- Die Gleichungssysteme der Elektronen (3.35-3.38) und freien Löcher (3.39-3.42) beeinflussen sich wechselseitig durch den Rekombinationsterm R_{np} . Aufgrund der geringen Dichten der freien Ladungsträger und der großen Energiebandlücke ist diese Rate jedoch im Vergleich zu den anderen Termen sehr klein und kann vernachlässigt werden.
- Die Kontinuitätsgleichungen der freien Ladungsträger sind über die Ladungsträgertemperaturen und Stromdichten an die Gleichungen zur Bestimmung der Ladungsträgertemperaturen gekoppelt. Durch die Verwendung der Temperaturen des vorangegangenen Zeitpunkts in den Kontinuitätsgleichungen und anschließender Lösung der Temperaturgleichungen können auch diese entkoppelt werden. Möglich wird diese Trennung durch die nur kleinen Änderungen der Temperaturen während eines Zeitschritts (vgl. Abschnitt 6.2).

Zur Bestätigung der Güte dieser Näherungen zeigt Abbildung 4.1 die Entwicklung der über die x- und z-Achse integrierten Dichte der eingefangenen Löcher während einer zweidimensionalen Simulation der MISIM-Struktur¹ bei Verwendung der entkoppelten Gleichungen und des vollen nichtlinearen Systems. Offensichtlich stimmen die Ergebnisse der beiden Methoden hervorragend überein, was uns erlaubt, in allen folgenden Simulationen das numerisch sehr viel schneller zu lösende entkoppelte Gleichungssystem zu verwenden. Die nachfolgenden Abschnitte werden zeigen, wie die nun linearen Differentialgleichungen der Ladungsträgerdichten und Temperaturen sowie die Poissongleichung diskretisiert und die resultierenden linearen Gleichungssysteme gelöst werden.

¹Simuliert wurde eine zweidimensionale MISIM-Struktur der Breite $L_x = 10 \mu\text{m}$ mit inhomogenen Anfangsbedingungen. Als Betriebsspannung wurde eine sinusförmige Wechselspannung der Frequenz 10 kHz und der Amplitude 114 V verwendet. Mehr Einzelheiten zu zweidimensionalen Simulationen der MISIM-Struktur sind in Kapitel 6 zu finden.

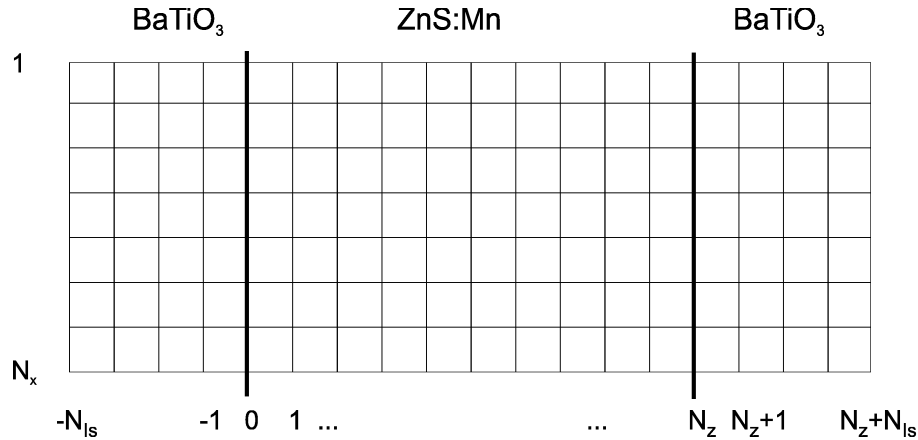


Abbildung 4.2: Diskretisierungsgitter der ZnS:Mn MISIM-Struktur in x - und z -Richtung. In z -Richtung liegen die Grenzebenen zwischen Halbleiter und Isolator bei $i = 0$ und $i = N_z$. Die Diskretisierung in y -Richtung ist analog der in x -Richtung.

Einen Überblick über die Reihenfolge aller, zur Lösung des Systems der Transportgleichungen und der Bestimmung der Raten f , g und h , benötigten Schritte gibt das in Anhang A.2 abgedruckte Flussdiagramm des Unterprogramms RATEN.

4.3 Transportgleichungen

Alle in diesem Kapitel benutzten Diskretisierungen basieren auf dem Differenzenverfahren. Das heißt die auftretenden Ableitungen werden durch entsprechende Differenzenquotienten an den Gitterpunkten ersetzt. In Abbildung 4.2 ist das verwendete Diskretisierungsgitter und die Nummerierung der Gitterpunkte gezeigt. In z -Richtung sind die Gitterpunkte von $k = -N_{Is}$ bis $k = N_z + N_{Is}$ nummeriert, wobei die Grenzflächen zwischen Halbleiter und Isolatormaterial bei den Punkten $k = 0$ und $k = N_z$ liegen. Die Isolatormaterialien sind also jeweils mit N_{Is} Punkten diskretisiert und das Halbleitermaterial mit $N_x + 1$ Gitterpunkten. In x - und in der nicht gezeigten y -Richtung läuft die Nummerierung der Gitterpunkte von $i, j = 1$ bis $i = N_x$ bzw. $j = N_y$. Zur Lösung der Transportgleichungen werden in z -Richtung natürlich nur die Punkte $k = 0 \dots N_z$ benötigt während bei der Lösung der Poissongleichung und der Gleichung für die Gittertemperatur auch der Bereich des Isolatormaterials diskretisiert werden muss.

Beginnen wir mit den Transportgleichungen. Intuitiv würde man die Stromgleichungen in die Kontinuitätsgleichungen einsetzen und nach Anwenden der Produktregel die Ableitungen durch Differenzenquotienten ersetzen. Die Lösung der Differentialgleichung reduziert sich hierdurch auf die Lösung eines linearen Gleichungs-

system. Es ist jedoch bekannt [Sch01], dass eine solche Diskretisierung von Differentialgleichungen des Konvektions- Diffusions- Reaktions- Typs auf nicht hinreichend feinen Gittern instabil ist.

In der Praxis verwendet man deshalb ein von Scharfetter und Gummel vorgeschlagenes Diskretisierungsverfahren ([SG69, Rak03, RO86, Sel84]), welches auf allen rechteckigen Gittern die Stabilität gewährleistet² [Sch01]. Sowohl in den Kontinuitätsgleichungen 3.35 und 3.39 als auch in den Energiegleichungen 3.37 und 3.41 steht der Gradient eines zugehörigen Flusses. Nimmt man nun an, dieser sei zwischen zwei Gitterpunkten konstant, erhält man aus den Flussgleichungen (3.36, 3.40 bzw. 3.38, 3.42) gewöhnliche Differentialgleichungen für n , p bzw. T_n , T_p zwischen den Gitterpunkten, welche sich unter einigen zusätzlichen Annahmen lösen lassen. Aus diesen Lösungen lassen sich schließlich Beziehungen zwischen den konstanten Flüssen in einer Gitterzelle und den Dichten bzw. den Ladungsträgertemperaturen auf den Gitterpunkten herstellen. Diese werden dann verwendet, um die Kontinuitätsgleichungen und die Energiegleichungen zu lösen. Dieses Vorgehen wird nun im Detail für die Kontinuitätsgleichung der Elektronen erläutert.

Ersetzt man die Divergenz der Stromdichte in der Kontinuitätsgleichung der Elektronen 3.35 durch Differenzenquotienten, so erhält man die diskretisierte Form der Differentialgleichung

$$0 = -\left(\frac{j_{nx}^{i,j,k} - j_{nx}^{i-1,j,k}}{\Delta x} + \frac{j_{ny}^{i,j,k} - j_{ny}^{i,j-1,k}}{\Delta y} + \frac{j_{nz}^{i,j,k} - j_{nz}^{i,j,k-1}}{\Delta z}\right) \quad (4.5)$$

$$+ G_{II}^{i,j,k} - R_{np}^{i,j,k} - R_{nt}^{i,j,k}, \quad (4.6)$$

mit den Gitterabständen $\Delta x, \Delta y$ und Δz . Hierbei bezeichnet das Trippel (i, j, k) den Gitterpunkt des dreidimensionalen Diskretisierungsgitters während die Indizes x,y,z die Komponente der Stromdichte kennzeichnen. Für das weitere Vorgehen, werden der Übersichtlichkeit halber das normierte elektrische Potential u , die normierte Ladungsträgertemperatur r und die normierte Stromdichte \tilde{j}

$$u := \frac{e}{k_B T_0} \phi \quad r := \frac{T}{T_0} \quad \tilde{j} = \frac{\vec{j}_n}{D_n}$$

eingeführt. Aus Gleichung 3.36 folgt dann für die z-Komponente der normierten Stromdichte

$$\tilde{j}_z = -\left[r \frac{\partial n}{\partial z} + n \frac{\partial}{\partial z}(r - u)\right]. \quad (4.7)$$

Nimmt man nun an, die Stromdichte zwischen zwei Gitterpunkten (i,j,k) und $(i,j,k+1)$ sei konstant, so erhält man eine Differentialgleichung für n , die sich lösen lässt, wenn

²Dies gilt eigentlich auf allen Delauny-Gittern. Rechteckige Gitter sind ein Spezialfall dieser Gitter.

man u und r zwischen den Gitterpunkten -also für $z \in [z_k, z_{k+1}]$ - durch lineare Funktionen approximiert

$$\tilde{j}(x, y, z)_z = \tilde{j}_z^{i,j,k} = \text{const} \quad (4.8)$$

$$(4.9)$$

$$u(x, y, z) = \frac{u_{i,j,k+1} - u_{i,j,k}}{\Delta z} (z - z_k) + u_{i,j,k} := a(z - z_k) + u_{i,j,k} \quad (4.10)$$

$$(4.11)$$

$$r(x, y, z) = \frac{r_{i,j,k+1} - r_{i,j,k}}{\Delta z} (z - z_k) + r_{i,j,k} := c(z - z_k) + r_{i,j,k}. \quad (4.12)$$

Mit der Anfangsbedingung $n(z_k) = n_i$ löst

$$n(z) = -\frac{\tilde{j}_z^{i,j,k}}{c-a} + \left[n_{i,j,k} + \frac{\tilde{j}_z^{i,j,k}}{c-a} \right] \left(\frac{r(z)}{r_{i,j,k}} \right)^{-\frac{c-a}{c}} \quad \text{für } z \in [z_k, z_{k+1}]$$

die Differentialgleichung 4.7. Durch Einsetzen des Ortes z_{k+1} und Auflösen der Gleichung nach $\tilde{j}_z^{i,j,k}$ erhält man mit

$$\tilde{j}_z^{i,j,k} = -\frac{a-c}{\left(\frac{r_{i,j,k}}{r_{i,j,k+1}}\right)^{\frac{a}{c}-1} - 1} n_{i,j,k} - \frac{a-c}{\left(\frac{r_{i,j,k+1}}{r_{i,j,k}}\right)^{\frac{a}{c}-1} - 1} n_{i,j,k+1} \quad (4.13)$$

den gesuchten Zusammenhang zwischen dem Strom innerhalb einer Gitterzelle und den Dichten auf den entsprechenden Gitterpunkten. Es erweist sich als günstig, diesen Ausdruck mit Hilfe der Bernoullifunktion $B(x) = \frac{x}{e^x - 1}$ umzuschreiben. Mit den Definitionen

$$\begin{aligned} \Theta_z^{i,j,k} &= \frac{\ln r^{i,j,k} - \ln r^{i,j,k+1}}{r^{i,j,k+1} - r^{i,j,k}} \\ \Omega_z^{i,j,k} &= \Theta^{i,j,k} ((u^{i,j,k+1} - u^{i,j,k}) - (r^{i,j,k+1} - r^{i,j,k})) \end{aligned}$$

erhält die z-Komponente der Stromdichte die Form

$$j_{n,z}^{i,j,k} = -\frac{D}{\Theta_z^{i,j,k} \Delta z} [B(\Omega_z^{i,j,k}) n_{i,j,k} - B(-\Omega_z^{i,j,k}) n_{i,j,k+1}]. \quad (4.14)$$

Ein völlig analoges Vorgehen führt auf die übrigen Komponenten des Stromdichtevektors, welche in Gleichung 4.5 eingesetzt auf

$$\begin{aligned} 0 &= -\frac{D_n}{\Theta_x^{i,j,k} \Delta x^2} B(\Omega_x^{i-1,j,k}) n^{i-1,j,k} - \frac{D_n}{\Theta_x^{i,j,k} \Delta x^2} B(-\Omega_x^{i,j,k}) n^{i+1,j,k} \\ &- \frac{D_n}{\Theta_y^{i,j,k} \Delta y^2} B(\Omega_y^{i,j-1,k}) n^{i,j-1,k} - \frac{D_n}{\Theta_y^{i,j,k} \Delta y^2} B(-\Omega_y^{i,j,k}) n^{i,j+1,k} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{D_n}{\Theta_z^{i,j,k} \Delta z^2} B(\Omega_z^{i,j,k-1}) n^{i,j,k-1} - \frac{D_n}{\Theta_z^{i,j,k} \Delta z^2} B(-\Omega_z^{i,j,k}) n^{i,j,k+1} \\
& + \left[\frac{D_n}{\Theta_x^{i,j,k} \Delta x^2} B(\Omega_x^{i,j,k}) + \frac{D_n}{\Theta_x^{i-1,j,k} \Delta x^2} B(-\Omega_x^{i-1,j,k}) \right. \\
& + \frac{D_n}{\Theta_y^{i,j,k} \Delta y^2} B(\Omega_y^{i,j,k}) + \frac{D_n}{\Theta_y^{i,j-1,k} \Delta y^2} B(-\Omega_y^{i,j-1,k}) \\
& + \left. \frac{D_n}{\Theta_z^{i,j,k} \Delta z^2} B(\Omega_z^{i,j,k}) + \frac{D_n}{\Theta_z^{i,j,k-1} \Delta z^2} B(-\Omega_z^{i,j,k-1}) \right] n^{i,j,k} \\
& + G_{II}^{i,j,k} - R_{np}^{i,j,k} - R_{nt}^{i,j,k}
\end{aligned} \tag{4.15}$$

führen. Für die Raten R_{np} und R_{nt} ergeben sich aus Gleichung 3.57 sofort die diskretisierten Formen

$$R_{np}^{i,j,k} = \gamma_{np}(n^{i,j,k} p^{i,j,k} - n_0 p_0) \approx 0, \tag{4.16}$$

$$R_{nt}^{i,j,k} = \gamma_{nt}(n^{i,j,k} p_t^{i,j,k} - n_0 p_{t0}) \tag{4.17}$$

wobei R_{np} vernachlässigt werden kann, wie im letzten Abschnitt gesehen. Die Diskretisierung der Stoßionisationsrate erfordert ein wenig mehr Aufmerksamkeit, da diese vom Betrag der Elektronenstromdichte abhängt. Da aber der Stoßionisationskoeffizient $\alpha(E)$ nur für hohe Feldstärken wesentlich von Null verschieden ist und der Stromdichtevektor \vec{j}_n in diesen Fällen annähernd parallel zu \vec{E} liegt gilt

$$|\vec{j}_n| \approx \frac{-\vec{E}}{|\vec{E}|} \vec{j}_n = -\frac{1}{|\vec{E}|} (E_x j_{n,x} + E_y j_{n,y} + E_z j_{n,z}). \tag{4.18}$$

Berücksichtigt man, dass $\tilde{j}_{n,z}^{i,j,k}$ die Stromdichte zwischen den Gitterpunkten i, j, k und $i, j, k + 1$ angibt, so folgt mit

$$G_{II}^{i,j,k} = -\frac{\alpha(|\vec{E}|)}{|\vec{E}|} \left(E_x \frac{j_{n,x}^{i,j,k-1} + j_{n,x}^{i,j,k}}{2} + E_y \dots \right) \tag{4.19}$$

die diskretisierte Form der Stoßionisationsrate. Ersetzt man in dieser Gleichung die Stromdichtekomponenten erneut durch 4.14, so ergeben sich lineare Beiträge in den Dichten n . Die Gleichungen 4.15, 4.17 und 4.19 definieren demnach ein lineares Gleichungssystem für die Elektronendichten an allen inneren Punkten ($1 < i < N_x$, $1 < k < N_y$, $1 < k < N_z$) des Simulationsgebietes. Für $k = 1$ und $k = N_z$ gelten die entsprechend diskretisierten Formen der Randbedingungen

$$\begin{aligned}
& - \frac{1}{\Theta_z^{i,j,1} \Delta z} [B(\Omega_z^{i,j,1}) n_{i,j,1} - B(-\Omega_z^{i,j,1}) n_{i,j,2}] = -\sigma_n n^{i,j,1} + j_t^l(t)^{i,j} \\
& - \frac{1}{\Theta_z^{i,j,N_z-1} \Delta z} [B(\Omega_z^{i,j,N_z-1}) n_{i,j,N_z-1} - B(-\Omega_z^{i,j,N_z-1}) n_{i,j,N_z}] = \sigma_n n^{i,j,N_z} - j_t^r(t)^{i,j}.
\end{aligned}$$

An den Rändern in x,y-Richtung werden periodische Randbedingungen verwendet

$$n^{0,j,k} = n^{N_x,j,k} \quad n^{i,N_y+1,k} = n^{i,1,k} \quad (4.20)$$

$$n^{i,0,k} = n^{i,N_y,k} \quad n^{i,N_y+1,k} = n^{i,1,k}. \quad (4.21)$$

Numerische Experimente haben gezeigt, dass dieses lineare Gleichungssystem sehr effektiv durch ein überrelaxiertes Punkt-Gauß-Seidel Verfahren gelöst werden kann.

Ein Gleichungssystem für die Dichten der freien Löcher lässt sich völlig äquivalent herleiten. Außer den Raten, muss nur in der Definition von Ω das Vorzeichen des elektrischen Potentials geändert werden.

Eine exakt analoge Vorgehensweise führt, mit den Definitionen

$$\Theta_z^{i,j,k} = \frac{\ln \kappa^{i,j,k} - \ln \kappa^{i,j,k+1}}{\kappa^{i,j,k+1} - \kappa^{i,j,k}}$$

$$\Omega_z^{i,j,k} = -\frac{5k_B}{2e} j_{n,z}^{i,j,k} \Theta_z^{i,j,k}$$

zu einem Ausdruck für die Energiestromdichte

$$F_z^{i,j,k} = \frac{1}{\Theta_z^{i,j,k}} [-B(\Omega_z^{i,j,k}) T^{i,j,k} + B(-\Omega_z^{i,j,k}) T^{i,j,k+1}].$$

Da die Ladung der Teilchen in diese Rechnung nicht eingeht, gelten diese Beziehungen für positiv und negativ geladene Teilchen. Auch die Lösung der Energiegleichung reduziert sich somit auf das Lösen eines linearen Gleichungssystems.

4.4 Problematik der Ladungsneutralität

Physikalisch gesehen ist klar, dass die Gesamtladung innerhalb der MISIM-Struktur während des gesamten Betriebs gleich null sein muss. Natürlich sollte auch das von uns abgeleitete Gleichungssystem die Bedingung der Ladungsneutralität erfüllen. Eine kurze (auf zwei Dimensionen (x, z) beschränkte) Rechnung zeigt, dass dies theoretisch auch der Fall ist. Die zeitliche Änderung der Gesamtladung ρ_{ges} ist gegeben durch

$$\dot{\rho}_{ges} = \sum_{i,k} \dot{p}_t^{i,k} \Delta x \Delta z + \sum_i (\dot{\rho}_l^i + \dot{\rho}_r^i) \Delta x.$$

Die zeitlichen Ableitungen lassen sich natürlich durch die rechten Seiten der entsprechenden Differentialgleichungen 3.43 und 3.49 ersetzen und die Raten R_{pt} und R_{nt} können mit Hilfe der diskretisierten Form der Transportgleichungen 3.35 und

3.39 durch die Stromdichten ausgedrückt werden:

$$\begin{aligned}
\dot{\rho}_{ges} &= \sum_{i,k} [-\nabla j_p^{i,k} + G_{II}^{i,k} - R_{np}^{i,k} - (-\nabla j_n^{i,k} + G_{II}^{i,k} - R_{np}^{i,k})] \Delta x \Delta z \\
&+ \sum_i [-\sigma_n n^{i,1} + \sigma_p p^{i,1} + j_t^l - \sigma_n n^{i,N} + \sigma_p p_{i,N} + j_t^i] \Delta x \\
&= \sum_{i,k} \left[-\left(\frac{j_p^{i+1,k} - j_p^{i,k}}{\Delta x} + \frac{j_p^{i,k+1} - j_p^{i,k}}{\Delta z} \right) + \frac{j_n^{i+1,k} - j_n^{i,k}}{\Delta x} + \frac{j_n^{i,k+1} - j_n^{i,k}}{\Delta z} \right] \Delta x \Delta z \\
&+ \sum_i [-\sigma_n n^{i,1} + \sigma_p p^{i,1} + j_t^l - \sigma_n n^{i,N} + \sigma_p p_{i,N} + j_t^i] \Delta x \\
&= \sum_i \left[-(j_p^{i,N} - j_p^{i,1}) + (j_n^{i,N} - j_n^{i,1}) \right. \\
&\quad \left. - \sigma_n n^{i,1} + \sigma_p p^{i,1} + j_t^l - \sigma_n n^{i,N} + \sigma_p p_{i,N} + j_t^i \right] \Delta x \\
&= 0.
\end{aligned}$$

Im letzten Schritt wurde ausgenutzt, dass die Randbedingungen für die Elektronen und Löcherverteilungen eben die Oberflächenflüsse (Gl. 3.45) sind, womit sich $j_{n,p}^{i,1}$ und $j_{n,p}^{i,N}$ mit den anderen Termen zu null addieren. Dies gilt jedoch nur, wenn die Routinen zur Bestimmung der Elektronen und Löcherdichten exakte Lösungen generieren würden. Da dies aber normalerweise nicht der Fall ist, wird das Bauelement nach kurzer Simulationszeit nicht mehr neutral sein. Problematisch wird dieser Effekt dadurch, dass viele Lösungsroutinen eine Lösung systematisch unter oder überschätzen. In einem solchen Fall würde die Gesamtladung des Bauelements in jedem Zeitschritt ein wenig zunehmen, was bei sehr langen Simulationszeiten zu unbrauchbaren Ergebnissen führt. Verhindern lässt sich dieser Effekt, indem man als Raten für die zeitliche Entwicklung der Oberflächenladung nicht die von den Transportgleichungen zu erfüllenden Randbedingungen wählt, sondern die tatsächlich errechneten Ströme $j_p^{i,1}$, $j_p^{i,N}$, $j_n^{i,1}$ und $j_n^{i,N}$. Ein ähnliches Problem ergibt sich aus den Ersetzungen der Raten R_{pt} und R_{nt} mit Hilfe der Transportgleichungen. Diese sind nur richtig, wenn die Elektronen und Löcherdichten zu den vorgegebenen Raten und Randbedingungen exakt berechnet wurden. Um auch diese Fehlerquelle zu beseitigen, werden erst die Transportgleichungen mit den vorgegebenen Raten gelöst, die Raten für die zeitliche Entwicklung der eingefangenen Löcher werden dann aber aus den tatsächlich errechneten Elektronen und Löcherdichten berechnet.

In Abbildung 4.3 sind für Rechnungen mit und ohne Ratenkorrektur die zeitlichen Entwicklungen der gesamten Raumladung (RL) (Abb. 4.3 (a,c)) und der Gesamtladung in Prozent von RL (Abb. 4.3 (b,d)) für verschiedene relative Sollgenauigkeiten (er) der Transportgleichungslöser dargestellt³. Man erkennt, dass bei den Rechnungen mit Ratenkorrektur das Bauelement bis auf sehr kleine numerische

³Simuliert wurde eine zweidimensionale MISIM-Struktur der Breite $L_x = 10 \mu\text{m}$ mit inhomogenen Anfangsbedingungen. Als Treiberspannung wurde eine sinusförmige Wechselspannung der

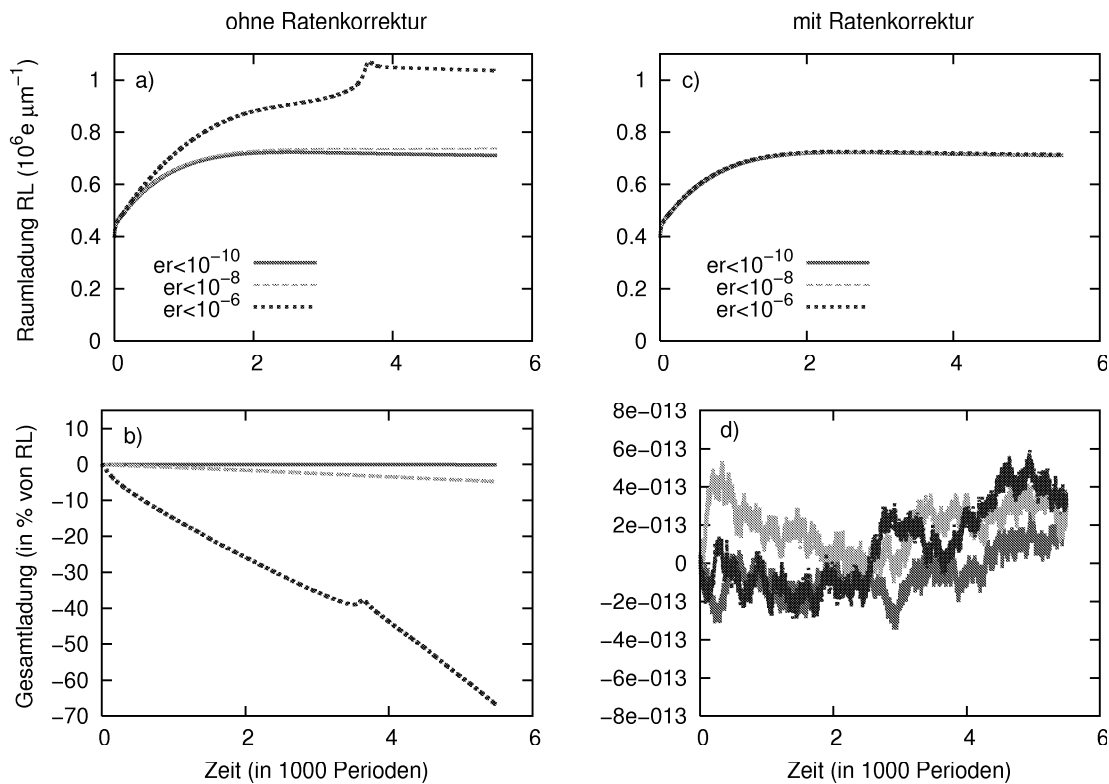


Abbildung 4.3: Positive Raumladung (a,c) und Gesamtladung (b,d) der MISIM-Struktur in Prozent der positiven Raumladung für eine zweidimensionale Simulation über 6000 Perioden ohne (links) und mit Ratenkorrektur (rechts).

Rundungsfehler ($< 10^{-12}$ Prozent!) tatsächlich immer neutral bleibt unabhängig davon, wie gut die Transportgleichungen gelöst werden (Abbildung 4.3 (d)). Bei den Rechnungen ohne Ratenkorrektur erkennt man, dass die Bauteilneutralität systematisch schlechter wird. Nur bei sehr genauer Lösung der Transportgleichungen bleibt die mangelnde Neutralität akzeptabel (Abbildung 4.3 (b)). Der numerische Fehler wird bei Verwendung der Ratenkorrektur, von der mangelnden Neutralität auf die jetzt fehlerhaften Raten übertragen. Physikalisch gesehen hat dies den Vorteil, dass fehlerhafte Raten (zumindest in gewissen Grenzen) sofort durch nicht ideale Bauelemente erklärt werden können. Numerisch hat diese Methode den großen Vorteil einer besseren Stabilität. Das System wird trotz fehlerhafter Raten in der Regel gegen einen Zustand konvergieren, der dem stationären Zustand des idea-

Frequenz 10 kHz und der Amplitude 114 V verwendet. Mehr Einzelheiten und Parameter zu zweidimensionalen Simulationen der MISIM-Struktur sind in Kapitel 6 zu finden.

len Systems sehr ähnlich ist, wie Abbildung 4.3 (c) für verschiedene Genauigkeiten bestätigt. Mangelnde Neutralität hingegen kann schnell starken Einfluss auf die zeitliche Entwicklung und den stationären Endzustand haben und schnell unbrauchbare Ergebnisse liefern wie Abbildung 4.3 (a) zeigt.

4.5 Poissongleichung

Die im Vergleich zu den Transportgleichungen einfachere Struktur der Poisson- und Temperaturgleichung erlaubt die Verwendung eines sehr effizienten Verfahrens zur Bestimmung des elektrischen Feldes und der Gittertemperatur. Wird in der Poissongleichung 3.62 der Laplaceoperator durch symmetrische Differenzenquotienten ersetzt, so erhält man ein lineares Gleichungssystem mit $N_x \times N_y \times (N_z + 2N_{ins})$ Unbekannten:

$$\frac{\varphi^{i-1,j,k} - 2\varphi^{i,j,k} + \varphi^{i+1,j,k}}{(\Delta x)^2} + \frac{\varphi^{i,j-1,k} - 2\varphi^{i,j,k} + \varphi^{i,j+1,k}}{(\Delta y)^2} + \frac{\varphi^{i,j,k-1} - 2\varphi^{i,j,k} + \varphi^{i,j,k+1}}{(\Delta z)^2} = -\frac{e}{\epsilon_r \epsilon_0} p_t^{i,j,k} \quad k \notin \{0, N_z\} \quad (4.22)$$

$$\epsilon_{ZnS} \frac{\varphi^{i,j,k+1} - \varphi^{i,j,k}}{\Delta z} - \epsilon_{Is} \frac{\varphi^{i,j,k} - \varphi^{i,j,k-1}}{\Delta z} = \frac{\rho_{l,r}^{i,j}}{\epsilon_0} \quad k \in \{0, N_z\}. \quad (4.23)$$

Die Gleichung 4.22 gilt, mit der entsprechenden Dielektrizitätszahl, im Inneren der ZnS-Schicht ($\epsilon_r = \epsilon_{ZnS}$) und der Isolatoren ($p_t = 0$, $\epsilon_r = \epsilon_{Is}$). Die aus den Deltafunktionen ($\delta(z)$, $\delta(z-L)$) resultierenden Sprungbedingungen des elektrischen Feldes an den geladenen Grenzflächen zwischen den Isolatoren und der ZnS-Schicht werden durch die Gleichung 4.23 beschrieben ([Nol93]).

Die zweidimensionale diskrete Fouriertransformation (DFT) der Dichte eingefangener Löcher $p_t^{i,j,k}$ in x und y-Richtung (bzw. über die Indizes i und j) ist durch

$$\tilde{p}_t^{m,n,k} = \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} p_t^{i,j,k} e^{-\iota \frac{2\pi}{N_x} (i-1)m} e^{-\iota \frac{2\pi}{N_y} (j-1)n}$$

definiert, wobei ι die imaginäre Einheit des Körpers der komplexen Zahlen kennzeichnet. Aus Gleichung 4.22 folgt der Zusammenhang von $\tilde{p}_t^{m,n,k}$ mit dem fouriertransformierten elektrischen Potential $\tilde{\varphi}^{m,n,k}$

$$\frac{1}{\Delta x^2} \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} e^{-\iota \frac{2\pi}{N_x} (i-1)m} e^{-\iota \frac{2\pi}{N_y} (j-1)n} [\varphi^{i-1,j,k} - 2\varphi^{i,j,k} + \varphi^{i+1,j,k}] + \frac{1}{\Delta y^2} \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} e^{-\iota \frac{2\pi}{N_x} (i-1)m} e^{-\iota \frac{2\pi}{N_y} (j-1)n} [\varphi^{i,j-1,k} - 2\varphi^{i,j,k} + \varphi^{i,j+1,k}]$$

$$+ \frac{\tilde{\varphi}^{m,n,k-1} - 2\tilde{\varphi}^{m,n,k} + \tilde{\varphi}^{m,n,k+1}}{(\Delta z)^2} = -\frac{\tilde{p}_t^{m,n,k}}{\epsilon_r \epsilon_0}.$$

Nutzt man die periodischen Randbedingungen des Potentials (d.h. $\varphi^{0,j,k} = \varphi^{N_x,j,k}$, ...) aus, so ergibt sich nach kurzer Rechnung für jedes (m,n)-Paar ein tridiagonales, lineares Gleichungssystem

$$\begin{aligned} & \left[\frac{1}{\Delta x^2} \left[2 \cos\left(\frac{2\pi m}{N_x}\right) - 2 \right] + \frac{1}{\Delta y^2} \left[2 \cos\left(\frac{2\pi m}{N_y}\right) - 2 \right] \right] \tilde{\varphi}^{m,n,k} \\ & + \frac{\tilde{\varphi}^{m,n,k-1} - 2\tilde{\varphi}^{m,n,k} + \tilde{\varphi}^{m,n,k+1}}{(\Delta z)^2} = -\frac{\tilde{p}_t^{m,n,k}}{\epsilon_0 \epsilon_r} \quad k \notin \{0, N_z\} \end{aligned} \quad (4.24)$$

$$\epsilon_{ZnS} \frac{\varphi^{m,n,k+1} - \varphi^{m,n,k}}{\Delta z} - \epsilon_{Is} \frac{\varphi^{m,n,k} - \varphi^{m,n,k-1}}{\Delta z} = \frac{\tilde{\rho}_{l,r}^{m,n}}{\epsilon_0} \quad k \in \{0, N_z\} \quad (4.25)$$

mit jeweils $N_z + 2N_{ins}$ Unbekannten. Diese Gleichungssysteme können durch schnelle Standardroutinen gelöst werden. Das elektrische Potential erhält man schließlich aus der Rücktransformation von $\tilde{\varphi}^{m,n,k}$.

Auch wenn die Temperaturdiffusionsgleichung eine zeitabhängige partielle Differentialgleichung ist, ähnelt die Struktur des aus der Diskretisierung resultierenden linearen Gleichungssystem

$$\begin{aligned} & \frac{T_G^{i,j,k}}{\Delta t} + D_G \frac{T_G^{i-1,j,k} - 2T_G^{i,j,k} + T_G^{i+1,j,k}}{(\Delta x)^2} + D_G \frac{T_G^{i,j-1,k} - 2T_G^{i,j,k} + T_G^{i,j+1,k}}{(\Delta y)^2} \\ & + D_G \frac{T_G^{i,j,k-1} - 2T_G^{i,j,k} + T_G^{i,j,k+1}}{(\Delta z)^2} = \frac{e}{c_{GP}} (\vec{j}_p + \vec{j}_n) \vec{E} + \frac{\tilde{T}_G^{i,j,k}}{\Delta t} \end{aligned} \quad (4.26)$$

der diskretisierten Poissongleichung 4.22. Die Temperatur zum Zeitpunkt t ist hierbei durch \tilde{T}_G gekennzeichnet, während die Temperaturen zum neuen Zeitpunkt $t + \Delta t$ ohne Tilde geschrieben sind. Offensichtlich bewirkt die Zeitabhängigkeit nur jeweils einen zusätzlichen Term auf der rechten Seite der linearen Gleichung sowie in der Diagonalen der zum linearen Gleichungssystem gehörenden Matrix. Auch dieses System lässt sich demnach durch DFTs in tridiagonale Gleichungssysteme überführen und so sehr effektiv lösen.

4.6 Parallelisierung

Um Stukturbildungen in der Leuchtdichteverteilung der ZnS:Mn-MISIM Struktur zu studieren, müssen Zeiten bis zu einigen Sekunden simuliert werden. Dies entspricht bei einer Betriebsspannung der Frequenz $f = 10$ kHz einigen zehntausend Perioden, was bei hundert Zeitschritten pro Periode etwa eine Million Zeitschritte ergibt.

Für eine 3d-Simulation, in der die z-Richtung mit 70 und die x- und y-Richtung mit 128 Punkten diskretisiert sind, ergeben sich etwa eine Million unbekannte Variablen. In jedem der eine Million Zeitschritte müssen also sechs lineare Gleichungssysteme mit mehr als einer Million Unbekannte gelöst werden! Diese Abschätzungen machen deutlich, dass es sinnvoll ist diese Simulation auf schnellen Parallelrechnern durchzuführen. Natürlich ergeben sich nur Geschwindigkeitsvorteile, wenn sich die zu lösenden Aufgaben zu einem Großteil tatsächlich parallel lösen lassen. Inwieweit und wie das gelingt, soll in diesem Kapitel erläutert werden.

4.6.1 Grundlagen

Es existieren im wesentlichen zwei verschiedene Architekturen für Parallelcomputer. Die eine stellt einen gemeinsamen Speicher für alle Prozessoren zur Verfügung (Shared Memory), während die andere ein schnelles Netzwerk impliziert mit dem Prozessoren Daten austauschen können (Message Passing). Für das Lösen partieller Differentialgleichungen ist die Shared Memory Architektur von Vorteil, da der Austausch großer Datenmengen entfallen kann. Aufgrund der vorhandenen Ressourcen wurde für diese Arbeit jedoch eine Message Passing Architektur mit MPI als Message Passing Protokoll verwendet. Die im folgenden vorgestellten Algorithmen können natürlich völlig analog und zum Teil mit wesentlich höherer Effizienz auf anderen Rechnerarchitekturen benutzt werden.

4.6.2 Die Transportgleichungen

Wie schon gesagt, werden die linearen Gleichungssysteme, die sich aus den Diskretisierungen der Transportgleichungen ergeben, mit einem überrelaxierten Punkt-Gauß-Seidel Iterationsverfahren [Cry97] gelöst. Dieses Verfahren berechnet den Wert der Dichte $n^{i,j,k}$ am Gitterpunkt (i,j,k) aus den aktuellsten Werten der Dichten an den direkt benachbarten Gitterpunkten. Kürzt man die Koeffizienten des linearen Gleichungssystems 4.15 mit den Bezeichnungen $a^{i,j,k}, \dots, g^{i,j,k}$ ab, fasst den inhomogenen Anteil der Gleichung als Rate $R^{i,j,k}$ zusammen und löst die Gleichungen nach $n^{i,j,k}$ auf, so ergibt sich nach Hinzufügen des Relaxationsterms

$$\begin{aligned} n_{l+1}^{i,j,k} &= \alpha \frac{1}{g^{i,j,k}} [a^{i,j,k} n_{l+1}^{i-1,j,k} + b^{i,j,k} n_l^{i+1,j,k} + c^{i,j,k} n_{l+1}^{i,j-1,k} + d^{i,j,k} n_l^{i,j+1,k} \\ &\quad + e^{i,j,k} n_{l+1}^{i,j,k-1} + f^{i,j,k} n_l^{i,j,k+1}] + (1 - \alpha) n_l^{i,j,k}. \end{aligned} \quad (4.27)$$

Ein Iterationsschritt besteht nun aus der sukzessiven Auswertung dieser Gleichung an den Gitterpunkten beginnend mit $i = j = k = 1$. Der untere Index l bezeichnet den Iterationsschritt und stellt sicher, dass immer die aktuellsten zur Verfügung stehenden Werte zur Auswertung der Gleichung verwendet werden. Der günstigste Relaxationsparameter α muss durch numerische Experimente ermittelt werden.

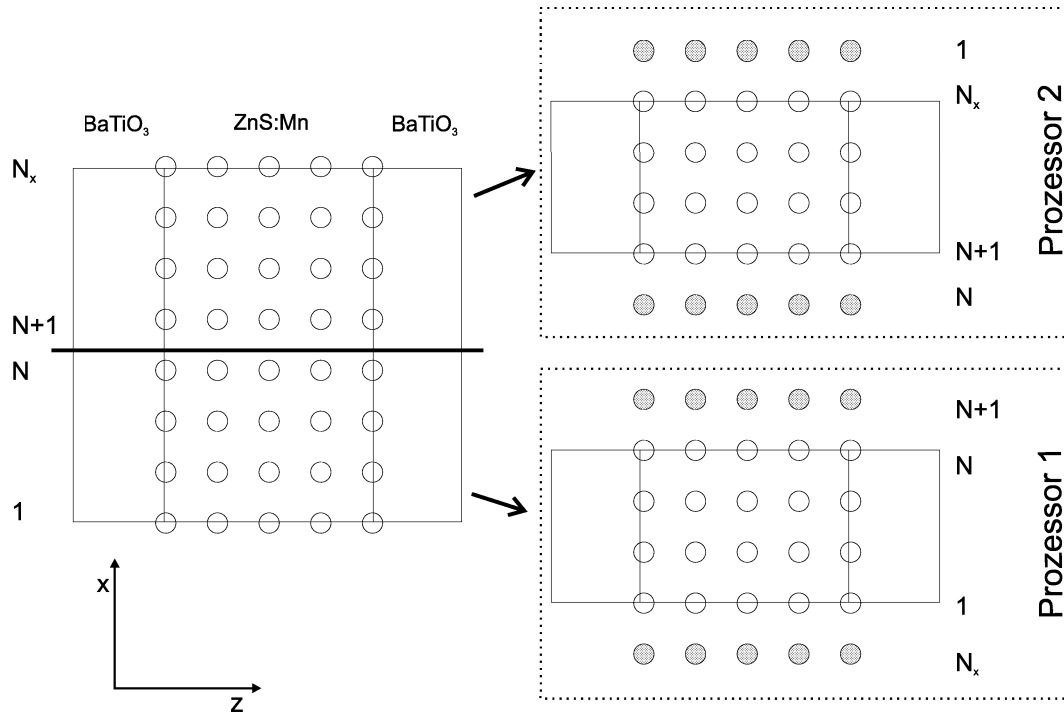


Abbildung 4.4: Aufteilung der Gitterpunkte des Diskretisierungsgitters auf zwei Prozessoren zur Parallelisierung des Gauß-Seidel-Verfahrens. Die ghost points sind grau schattiert.

Die Idee der Parallelisierung dieses Algorithmus besteht nun einfach in der Aufteilung der ZnS:Mn -Schicht, durch zur z -Achse parallele Schnitte, auf mehrere Prozessoren [GLS99, Gei04]. Hierdurch werden die zu berechnenden Gitterpunkte pro Prozessor reduziert, wie in Abbildung 4.4 für zwei Prozessoren und zwei Raumdimensionen (x, z) gezeigt. Dies bedeutet für einen Iterationsschritt, dass ein einzelner Prozessor nicht mehr die gesamte i und j Schleife durchlaufen muss, sondern nur noch einen Teil. Für den in Abbildung 4.4 skizzierten Fall von zwei Prozessoren muss Prozessor 1 die Schleife von $i = 1$ bis $i = N = N_x/2$ durchlaufen während Prozessor 2 die Schleife von $i = N + 1$ bis $i = N_x$ abarbeitet. Da ein Prozessor für die Berechnung der Randpunkte seines Bereichs jedoch Werte von Gitterpunkten benötigt, die von einem anderen verwaltet werden, muss jeder Prozessor die Werte seiner neu errechneten Randpunkte an die Nachbarprozessoren senden und selbst die Daten der entsprechenden Gitterpunkte empfangen und als so genannte ghost points speichern, bevor er mit dem nächsten Iterationsschritt beginnt. Man sieht sofort, dass der Algorithmus auf diese Weise eigentlich nicht parallelisiert werden kann, da jeder Prozessor, um das Gauß-Seidel Verfahren zu beginnen, auf die Re-

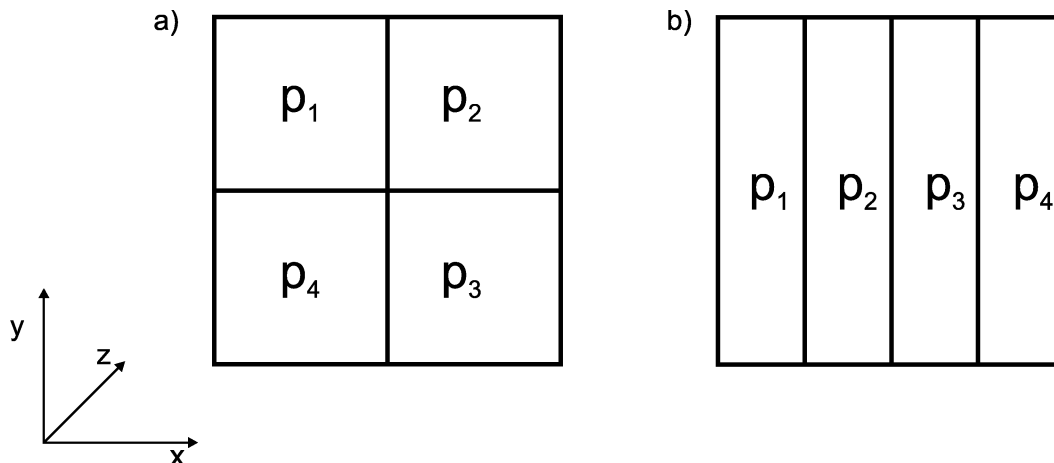


Abbildung 4.5: Verschiedene Geometrien bei der Aufteilung der x-y-Ebene an vier Prozessoren (p₁ bis p₄). (a) Aufteilung in x und y-Richtung, (b) Aufteilung nur in y-Richtung.

sultate des Prozessors angewiesen ist, der den i -Schleifenabschnitt direkt vor seinen eigenem berechnet. Man umgeht dieses Problem indem man das Verfahren auf den einzelnen Prozessoren mit Randwerten aus dem letzten Iterationsschritt startet, was allerdings eine Erhöhung der Anzahl an Iterationsschritten zur Folge haben kann. Ist die Anzahl der Gitterpunkte pro Prozessor groß genug, so überwiegt die Geschwindigkeitszunahme durch die Aufteilung der Rechnung der Geschwindigkeitseinbuße durch den Qualitätsverlust des numerischen Verfahrens jedoch bei weitem.

In drei Dimensionen erfolgt die Aufteilung der Gitterpunkte auf die Prozessoren ebenfalls durch Schnitte senkrecht zur x-y-Ebene, so dass alle Punkte mit gleichem (i,j) -Indizes von einem Prozessor verwaltet werden. Die Zerlegung der x-y-Ebene kann jedoch auf sehr verschiedene Weisen geschehen wie in Abbildung 4.5 für den Fall von vier Prozessoren (p₁ bis p₄) veranschaulicht. Da die Prozessoren die Werte ihre Randpunkte austauschen müssen, ist die Größe der Grenzflächen ein Maß für den Kommunikationsaufwand. Die Aufteilung der (x,y) -Ebene sollte also so geschehen, dass die Gesamtheit der Grenzflächen des Gebietes eines Prozessors minimiert wird. Für den Fall von vier Prozessoren führt also die in Abbildung 4.5 (a) verwendete Geometrie zu wesentlich weniger Kommunikationsaufwand als die Aufteilung in Abbildung 4.5 (b). In Anhang A.3 ist der parallele Algorithmus zur Lösung der Kontinuitätsgleichung der Elektronen als Flussdiagramm abgebildet.

Mit Hilfe der bisher gemachten Überlegungen lässt sich eine einfache Skalierbarkeitsanalyse [GLS99] des Algorithmus durchführen, indem die gesamte Rechen- und Kommunikationszeit eines Iterationsschrittes abgeschätzt wird. Um die Berechnun-

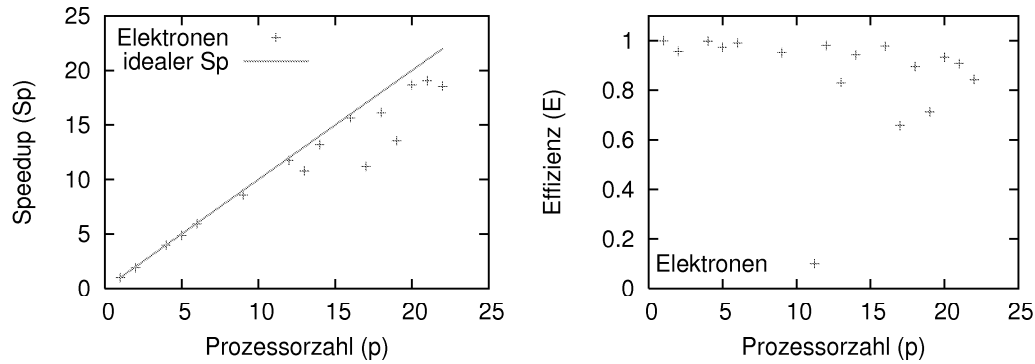


Abbildung 4.6: (a) Beschleunigung (Speed up) und Effizienz (b) der Lösung der Transportgleichungen für Elektronen und Löcher bei Verwendung mehrerer Prozessoren.

gen einfach zu halten, nehmen wir an, bei der Anzahl p der Prozessoren handele es sich um eine Quadratzahl und die Anzahl der Gitterpunkte in x und y -Richtung seien identisch ($N_x = N_y = N$), woraus sich für einen Prozessor $4NN_z/\sqrt{p}$ zu kommunizierende Randpunkte ergeben. Ist τ^{com} die Zeit, die benötigt wird um eine Gleitkommazahl zu senden und geschieht das Senden und Empfangen der Daten gleichzeitig (Nonblocking Communication), so beträgt die Zeit die ein Prozessor für die Datenkommunikation verwendet

$$T^{com} = 4 \frac{NN_z}{\sqrt{p}} \tau^{com}. \quad (4.28)$$

Die reine Rechenzeit eines Prozessors ist proportional zu der Anzahl der Gitterpunkte die dieser verwaltet. Bezeichnet τ^{cal} die Dauer einer Fließkommaoperation, so ist die Rechenzeit

$$T^{cal} = c \frac{N^2 N_z}{p} \tau^{cal}, \quad (4.29)$$

mit einer Proportionalitätskonstanten c . Betrachtet man das Verhältnis von Kommunikations- zu Rechenzeit

$$\frac{T^{com}}{T^{cal}} = \frac{4}{c} \frac{1}{N} \sqrt{p} \frac{\tau^{com}}{\tau^{cal}}, \quad (4.30)$$

so fällt auf, dass dieses mit $1/N$ abfällt. Auch wenn τ^{com} meist deutlich größer ist als τ^{cal} , kann also für hinreichend große Probleme (großes N) T^{com} gegenüber T^{cal} vernachlässigt werden. Die Gesamtrechenzeit wird also für $N \rightarrow \infty$ proportional zu $\frac{1}{p}$ und skaliert mit der Prozessorzahl.

Da der Algorithmus nur für große Probleme skaliert, stellt sich die Frage wie groß das Problem sein muss und ob eine solche Größe überhaupt noch bearbeitet werden

kann. Um dies zu untersuchen, wird ein Standardproblem einer realistischen Größe mit unterschiedlichen Prozessorzahlen bearbeitet und der Erfolg der Parallelisierung mit Hilfe der Beschleunigung (speed up) Sp und der Effizienz E

$$Sp^{(p)} = \frac{T^{(1)}}{T^{(p)}} \leq p \quad E^{(p)} = \frac{Sp^{(p)}}{p} \leq 1 \quad (4.31)$$

überprüft. Hierbei bezeichnet p die Anzahl der Prozessoren, und $T(p)$ die Zeit die p Prozessoren benötigen um das Problem zu lösen. Natürlich kann $Sp^{(p)}$ nicht größer sein als die Anzahl der Prozessoren und wird aufgrund der nicht vollständigen Parallelisierbarkeit der meisten Probleme normalerweise deutlich kleiner sein. Abbildung 4.6 (a) zeigt die Beschleunigung der Lösung der Transportgleichungen für Elektronen im Vergleich zur idealen Beschleunigung. Wie zu erwarten, liegen die tatsächlichen Beschleunigungen stets unter der idealen. Sehr auffällig sind die Einbrüche der Effizienz in Abbildung 4.6 (b) bei der Verwendung von 13,17 oder 19 Prozessoren. Diese haben ihre Ursache in der schon oben diskutierten ungünstigen Verteilung des Grundgebietes auf die Prozessoren. MPI versucht aus einer gegebenen Anzahl von Prozessoren ein möglichst quadratisches Prozessornetzwerk zu generieren auf welches das Grundgebiet dann verteilt wird. Dies bedeutet, dass bei der Verwendung von 16 Prozessoren ein Netzwerk aus 4×4 Prozessoren entsteht, bei der Verwendung von 17 Prozessoren aber nur ein Netzwerk von 1×17 Prozessoren möglich ist. Dies führt wie schon diskutiert zu erheblich größeren Randflächen und so zu einem höheren Kommunikationsaufwand.

4.6.3 Poisson und Wärmeleichung

Der Algorithmus zur Lösung der Poisson- und der Wärmeleichung besteht im wesentlichen aus zwei verschiedenen Aufgaben. Erst muss für jede x-y-Ebene, also für jeden Wert des Gitterindex k , eine zweidimensionale DFT (z.B. mit Hilfe einer schnellen Fouriertransformation (FFT)) durchgeführt werden und anschließend muss für jedes Indexpaar (i, j) ein tridiagonales lineares Gleichungssystem gelöst werden. Da alle FFTs völlig unabhängig voneinander sind, können diese parallel durchgeführt werden. Es empfiehlt sich also das Diskretisierungsgitter durch Schnitte senkrecht zur z-Achse zu zerlegen und so auf die Prozessoren zu verteilen, wie in Abbildung 4.7 (links) für zwei Prozssoren dargestellt.

Auch die aus den Fouriertransformationen resultierenden linearen Gleichungssysteme sind völlig unabhängig voneinander und lassen sich somit von verschiedenen Prozessoren gleichzeitig lösen. Für diese Aufgabe ist jedoch eine Aufteilung der Gitterpunkte durch Schnitte parallel zur z-Achse, wie in Abbildung 4.7 (rechts) dargestellt, nötig. Problematisch bei dieser Parallelisierung ist also die Datenkommunikation zwischen den Prozessoren. Da ein Prozessor für eine FFT alle Daten

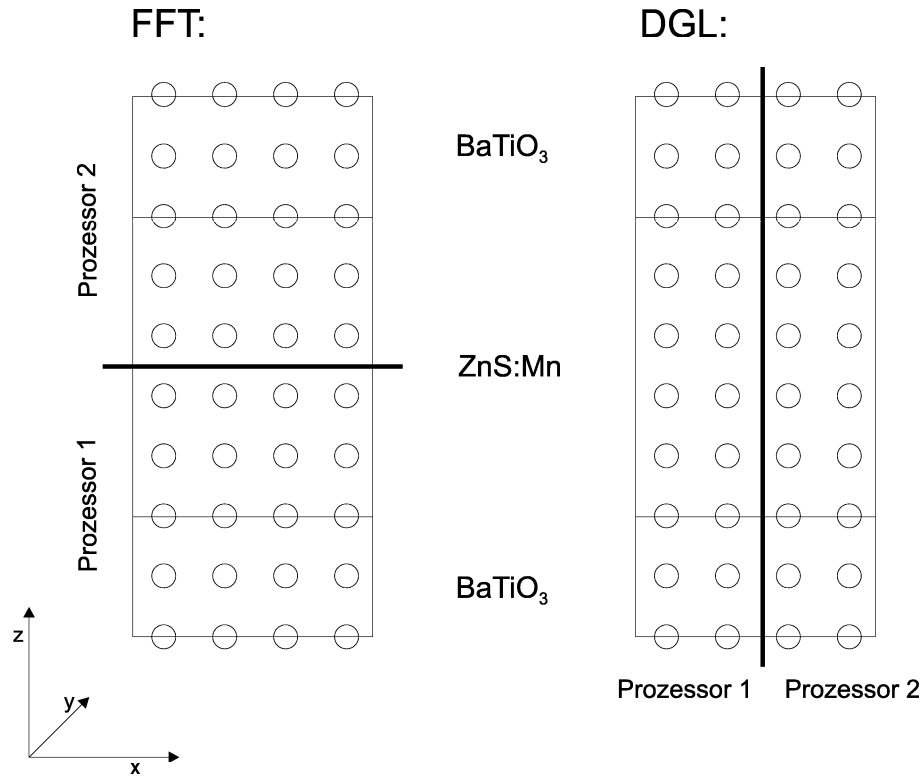


Abbildung 4.7: Links: Aufteilung der Gitterpunkte auf zwei Prozessoren um die FFT in den x - y -Ebenen durchzuführen. Rechts: Aufteilung der Gitterpunkte auf zwei Prozessoren um die linearen Gleichungssysteme zu lösen.

einer x - y -Ebene benötigt, während für das Lösen eines Gleichungssystems alle Daten einer z -Linie benötigt werden, müssen zwischen diesen beiden Operationen große Datenmengen ausgetauscht werden. In Abbildung 4.8 ist das Kommunikationsschema für vier Prozessoren und eine x - y -Ebene dargestellt. Bevor Prozessor 1 die FFT durchführen kann, muss er die Werte der Gitterpunkte aller anderen Prozessoren sammeln und gleichzeitig die Werte der von ihm verwalteten Gitterpunkte einer anderen x - y -Ebene an den Prozessor senden, der die FFT auf dieser Ebene durchführen soll. Sind für alle Ebenen die FFTs durchgeführt, müssen die transformierten Werte jeder Ebene aufgeteilt und an den Prozessor übermittelt werden, der die linearen Gleichungssysteme für den Bereich lösen soll. Schließlich müssen die Lösungen der Gleichungssysteme rücktransformiert werden, was ein weiteres Sammeln, Transformieren und Verteilen der Daten notwendig macht. Eine Übersicht des parallelen Algorithmus zur Lösung der Poissongleichung gibt das Flussdiagramm des Unterprogramms POISSON in Anhang A.3.

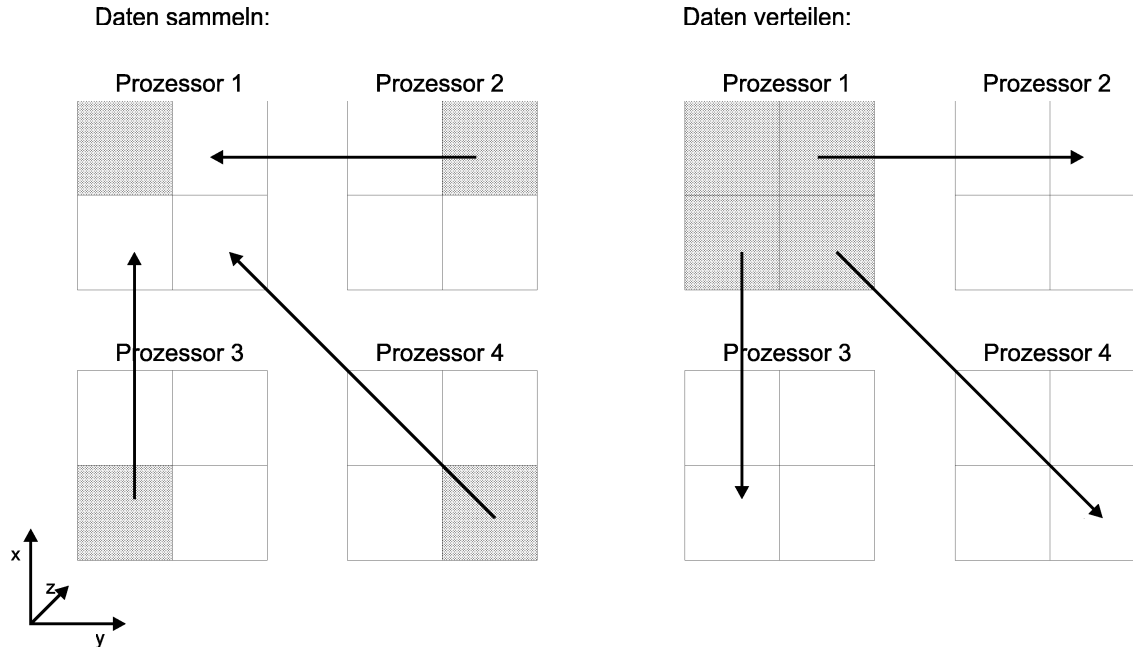


Abbildung 4.8: Kommunikationsschema für vier Prozessoren und eine x-y-Ebene. Vor der FFT muss z.B. Prozessor 1 alle Daten der übrigen Prozessoren sammeln. Nach der FFT muss Prozessor 1 die Daten wieder an die entsprechenden Prozessoren verteilen.

Der große Kommunikationsaufwand dieses Algorithmus lässt die Frage nach der Skalierung aufkommen. Die Kommunikationszeit besteht aus der Zeit zum Verteilen und zum Sammeln der Daten vor und nach Ausführung der beiden FFTs. Während der Sammelphase muss ein Prozessor die von ihm verwalteten Gitterpunkte jeder x-y-Ebene, für die er nicht selbst die FFT durchführen soll, senden. Andererseits muss jeder Prozessor für alle Ebenen deren FFT er durchführen soll, die nicht von ihm verwalteten Daten empfangen. Mit den Bezeichnungen des letzten Abschnitts lassen sich also die Sendezeit T_s^{com} und die Empfangszeit T_e^{com} berechnen:

$$T_s^{com} = \frac{N_x N_y N_z (p-1)}{p} \tau^{com} \quad (4.32)$$

$$T_e^{com} = \frac{N_x N_y (p-1) N_z}{p} \tau^{com}. \quad (4.33)$$

Diese beiden Zeiten sind offensichtlich gleich und da Empfang und Senden der Daten gleichzeitig ablaufen, ist dies die Dauer der Sammelphase. Da die Verteilung der Daten nach Durchführung der FFT der genau umgekehrte Prozess zur Datensammlung ist, ist die Dauer der Verteilungsphase gleich der der Sammelphase. Die

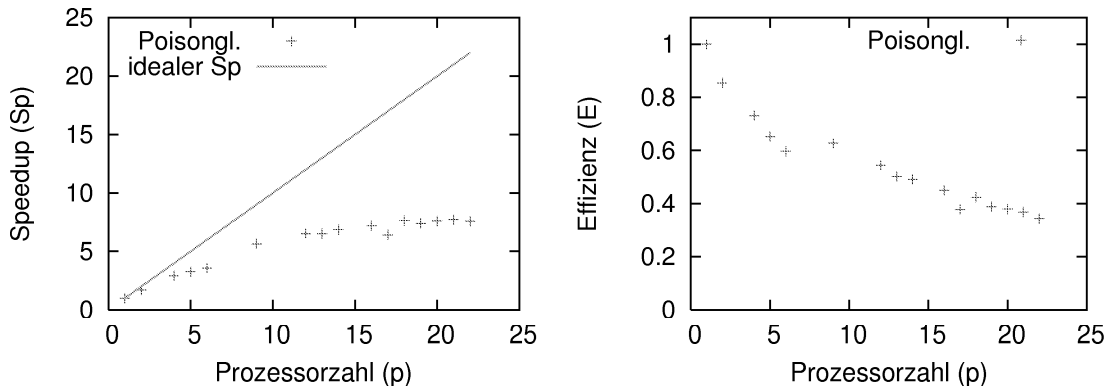


Abbildung 4.9: (a) Beschleunigung (Speed up) und Effizienz (b) der Lösung der Transportgleichungen für Elektronen und Löcher bei Verwendung mehrerer Prozessoren.

Rechenzeit eines Prozessors besteht aus den Zeiten zur Durchführung der FFTs (T_{FFT}^{cal}), den Zeiten der LR-Zerlegungen (T_{LR}^{cal}) der tridiagonalen Matrizen und den Zeiten zur anschließenden Lösung der linearen Gleichungssysteme (T_{lgs}^{cal}). Die Anzahl der Fließkommaoperationen einer FFT mit n Elementen ist proportional zu $n \ln(n)$, die einer LR-Zerlegung einer tridiagonalen Matrix zu n und die der anschließenden Lösung des Gleichungssystems zu n^2 . Die Rechenzeiten der einzelnen Schritte bestimmen sich also zu

$$T_{FFT}^{cal} = a \frac{N_z}{p} (N_x N_y \ln(N_x N_z)) \tau^{cal} \quad (4.34)$$

$$T_{LR}^{cal} = b \frac{N_x N_y}{p} N_z \tau^{cal} \quad (4.35)$$

$$T_{lgs}^{cal} = c \frac{N_x N_y}{p} N_z^2 \tau^{cal}. \quad (4.36)$$

Bildet man wiederum das Verhältnis von Kommunikations- und Rechenzeit

$$\frac{T^{com}}{T^{cal}} = 4 \frac{p-1}{p} \frac{1}{a \ln(N_x N_y) + b + c N_z} \frac{\tau^{com}}{\tau^{cal}} \quad (4.37)$$

so erkennt man, dass auch bei diesem Algorithmus zumindest für sehr große Probleme die Kommunikationszeit gegenüber der Rechenzeit vernachlässigt werden kann und die Lösungszeit mit der Prozessorzahl skaliert.

Auch für diesen Algorithmus soll durch numerische Experimente geklärt werden, ob realistische Probleme groß genug sind, um näherungsweise mit der Prozessorzahl zu skalieren. Abbildung 4.9 (a) und (b) zeigen wiederum die Beschleunigung und

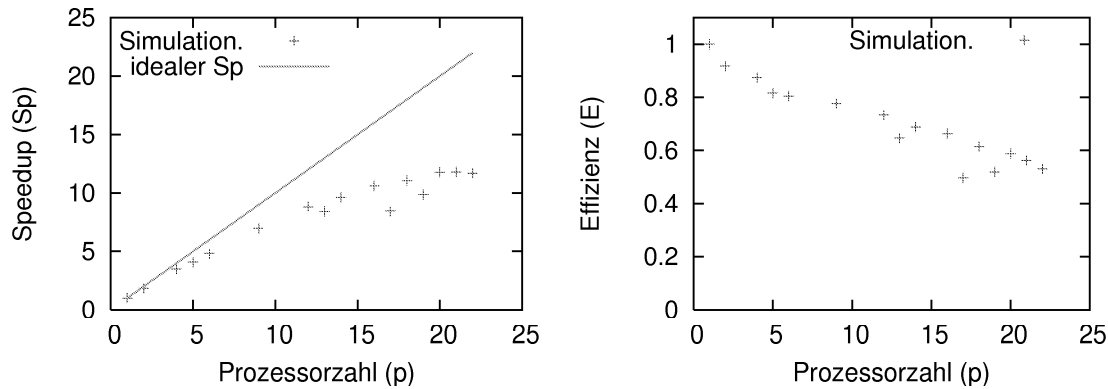


Abbildung 4.10: (a) Beschleunigung (Speed up) und Effizienz (b) der Lösung der Transportgleichungen für Elektronen und Löcher bei Verwendung mehrerer Prozessoren

die Effizienz des Algorithmus in Abhängigkeit von der Prozessorzahl. Offensichtlich sinkt die Effizienz der Parallelisierung sehr schnell mit der Prozessorzahl und ab etwa zehn Prozessoren ist kaum noch eine Geschwindigkeitszunahme zu erkennen. Das von uns gestellte Problem ist also zu klein, um ein günstiges Verhältnis von Kommunikationszeit zu Rechenzeit zu erreichen, was daran liegt, dass die in unserem Problem große Zahl $N_x N_y$ nur logarithmisch in das Verhältnis der Zeiten eingeht.

Da aber die Rechenzeiten zur Lösung der Poisson und Temperaturgleichung bei Verwendung von einem Prozessor relativ kurz im Vergleich zu den Lösungszeiten der Transportgleichungen sind, lässt sich das Gesamtproblem bei Verwendung von 16 Prozessoren noch um einen Faktor zehn beschleunigen, wie das Diagramm 4.10 (a) zur Beschleunigung des Gesamtproblems bestätigt. Dies entspricht nach Abbildung 4.10 (b) einer noch akzeptablen Effizienz von etwa 0.6.

Kapitel 5

Theorie nichtlinearer dynamischer Systeme

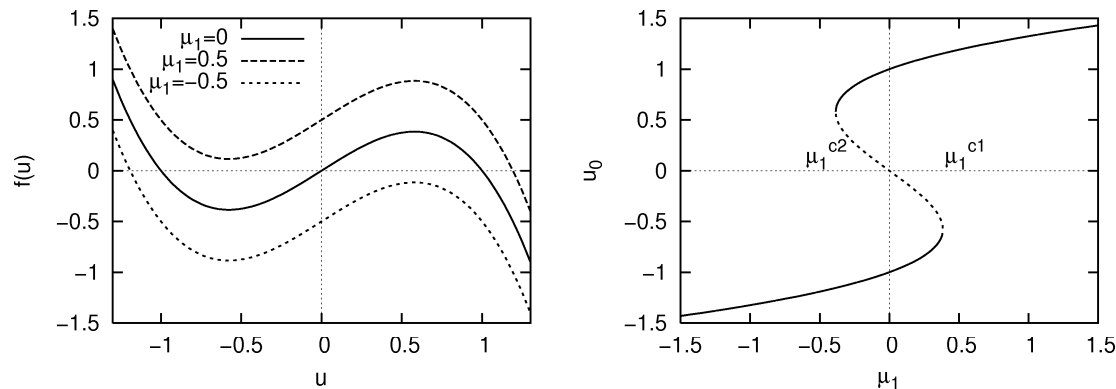


Abbildung 5.1: (a) Die Funktion $f(x)$ für verschiedene Werte des Parameters μ_1 . (b) Stationäre Lösungen von Gleichung 5.1 aufgetragen über den Parameter μ_1 ($\mu_2 = 1$).

Am Ende von Kapitel 3 haben wir herausgestellt, dass das Ladungsträgersystem also die Dichte eingefangener Löcher p_t und die Oberflächenladungsdichten $\rho_{l,r}$ einer Dynamik folgen, die durch eine nichtlineare Rate bestimmt wird. Da solche Nichtlinearitäten häufig die Ursache für das komplexe raumzeitliche Verhalten eines Systems sind, sollen in diesem Kapitel einige Themen der nichtlinearen Physik behandelt werden. Das Ziel ist jedoch nicht die analytischen Werkzeuge dieser umfangreichen Disziplin bereitzustellen, sondern die Ursachen einiger Phänomene, die uns in späteren Kapiteln begegnen werden, zu erläutern. Eine ausführliche Behandlung dieser Thematik findet sich z.B. in [AFH96, Mur89].

5.1 Bifurkation und Hystereseeffekte

In diesem Abschnitt betrachten wir eine gewöhnliche Differentialgleichung der Form

$$\frac{du}{dt} = f(u; \vec{\mu}) \quad (5.1)$$

mit einer nichtlinearen Funktion $f(u; \vec{\mu})$ die außer von u noch von einem Satz freier wählbarer Parameter $\vec{\mu}$ abhängt. Die stationären Lösungen dieser Differentialgleichungen sind offensichtlich durch

$$f(u, \vec{\mu}) = 0 \quad (5.2)$$

definiert. Man macht sich leicht klar, dass die Zahl und die Stabilität der stationären Lösungen u_0 im Allgemeinen von den Parametern $\vec{\mu}$ abhängen wird. Ändert sich die Anzahl der stationären Lösungen oder deren Stabilität für bestimmte $\vec{\mu} = \vec{\mu}^c$, so

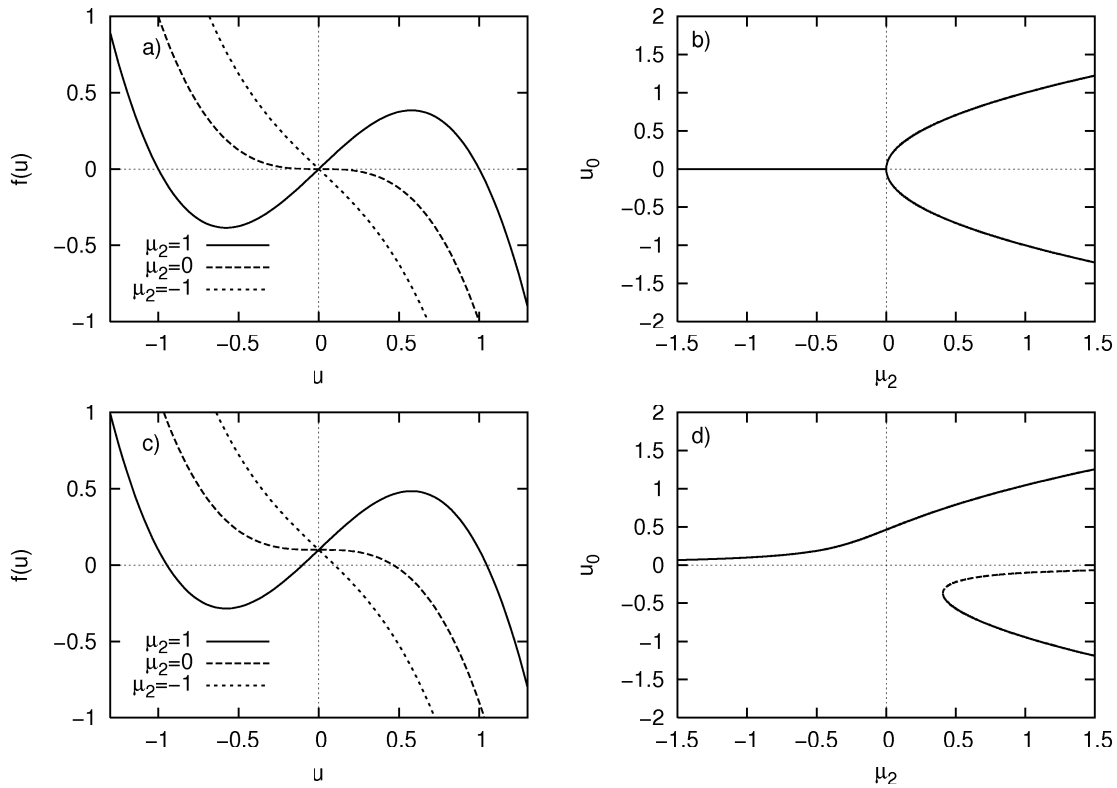


Abbildung 5.2: Die Funktion $f(x)$ für verschiedene Werte des Parameters μ_2 und $\mu_1 = 0$ (a) bzw. $\mu_1 = 0.1$ (b). Stationäre Lösungen von Gleichung 5.1 aufgetragen über den Parameter μ_2 für $\mu_1 = 0$ (c) bzw. $\mu_1 = 0.1$ (d).

spricht man von einer lokalen Bifurkation. Um eine Vorstellung von der Entstehung von Hystereseeffekten zu erhalten, betrachte man das Beispiel

$$\frac{du}{dt} = f(u, \mu) = \mu_1 - u^3 + \mu_2 u.$$

mit den zwei Parametern μ_1 und μ_2 . In Abbildung 5.1 (a) ist die Funktion f über die Variable u für $\mu_2 = 1$ und verschiedene μ_1 in einem so genannten **Konvergenzdiagramm** aufgetragen. In diesem lassen sich für alle u die Änderungsraten $f(u)$ ablesen und somit die stationären Lösungen und deren Stabilität bestimmen. Für $\mu_1 = 0$ besitzt Gleichung 5.1 offensichtlich zwei stabile stationäre Zustände u_{01} und u_{02} und einen instabilen stationären Zustand. Wird nun μ_1 erhöht, verändert sich die Lage der stabilen stationären Zustände stetig bis das Minimum von f die y-Achse überquert und der stationäre Zustand u_{01} verschwindet. Der Parameter μ_1 bewirkt bei einem kritischen Wert $\mu_1 = \mu_1^{c1}$ also eine so genannte Sattel-Knotenbifurkation [AFH96]. Offensichtlich führt das Senken des Parameters μ_1 zum Verschwinden des

stationären Zustands u_{02} und damit zu einer weiteren Sattel-Knotenbifurkation bei $\mu_1 = \mu_1^{c2}$. Trägt man nun die stationären Zustände der Gleichung 5.1 über den Parameter μ_1 auf, so erhält man das in Abbildung 5.1 (b) dargestellte **Bifurkationsdiagramm**, in welchem deutlich zu erkennen ist, dass das System in einem gewissen Bereich des Parameters μ_1 mehrere stationäre Zustände hat. Wird in einem System mit einer solchen Kennlinie der Parameter μ_1 (z.B. eine angelegte Spannung) langsam, verglichen mit der Geschwindigkeit der Systemdynamik, variiert, so verändert sich der Systemzustand quasistationär. Bei $\mu_1 = \mu_1^{c1}$ verschwindet jedoch der stationäre Zustand und das System konvergiert sehr schnell in den stabilen stationären Zustand auf dem oberen Ast der Kennlinie. Wird μ_1 nun gesenkt, bleibt das System auf dem oberen Ast bis dieser bei $\mu_1 = \mu_1^{c2}$ endet. Der stationäre Zustand des Systems beschreibt also bei Variation des Parameters μ_1 eine Hysterese.

Einen anderen Bifurkationstyp durchläuft das von Gleichung 5.1 beschriebene System bei Variation des Parameters μ_2 , der bestimmt ob die Funktion f zwei Extrema aufweist oder monoton verläuft. Abbildung 5.2 (a) zeigt $f(u)$ für verschiedene Werte des Parameters μ_2 bei $\mu_1 = 0$. Es wird deutlich, dass die Funktion für $\mu_2 < 0$ drei stationäre Zustände aufweist, während sie für $\mu_2 \geq 0$ nur einen zeigt. Das entsprechende Bifurkationsdiagramm (Abbildung 5.2 (b)) in dem die stationären Lösungen über den Parameter μ_2 aufgetragen sind, gibt der Gabel (Pitchfork)-Bifurkation ihren Namen. Für negative Werte von μ_2 existiert eine stabile stationäre Lösung, die sich am kritischen Punkt $\mu_2 = \mu_2^c = 0$ aufspaltet in zwei stabile und eine instabile stationäre Lösung. Ein Hystereseeffekt bei Variation des Parameters μ_1 ist offensichtlich nur möglich für $\mu_2 > 0$. Eine ideale Gabelbifurkation wird nur in Systemen mit einer bestimmten Symmetrie beobachtet ($\mu_1 = 0$). Ist eine solche nicht gegeben verläuft die Funktion f im allgemeinen nicht mehr durch den Ursprung, wie in Abbildung 5.2 (c) für $\mu_1 = 0.1$ gezeigt. Das zugehörige Bifurkationsdiagramm (d) zeigt eine Gabelbifurkation mit gebrochener Symmetrie. Hierbei bleibt ein Lösungsast für alle μ_2 stabil, während bei einem kritischen Wert μ_2^c ein neuer stabiler und ein instabiler Ast durch eine Sattel-Knotenbifurkation entstehen. Wohlgermerkt führt die Variation des Parameters μ_2 nicht zu einer Hysterese, sondern ermöglicht durch die Gabelbifurkation erst einen Zustand, in dem durch Variation des Parameters μ_1 zwei Sattelknoten-Bifurkationen möglich werden ¹.

¹Ein dreidimensionales Modell des zweiparametrischen (μ_1, μ_2) Bifurkationsdiagramms des hier behandelten Beispiels ist im Institut für angewandte Physik der WWU Münster zu bewundern.

5.2 Zwei Komponenten Systeme

In diesem Abschnitt werden einige grundlegende Eigenschaften des zweikomponentigen nichtlinearen Differentialgleichungssystems

$$\frac{du}{dt} = f(u, v) \quad (5.3)$$

$$\frac{dv}{dt} = g(u, v) \quad (5.4)$$

diskutiert. Einen guten Überblick über das Langzeitverhalten eines solchen Systems gibt ein so genanntes **Nullklinendiagramm**. Ein solches Diagramm kann erstellt werden, indem, in einem von den Variablen u und v gebildeten Koordiantensystem, die beiden Kurven $f(u, v) = 0$ (u -Nullkline) und $g(u, v) = 0$ (v -Nullkline) eingetragen werden. Die Schnittpunkte dieser Kurven sind offensichtlich die stationären Lösungen des Gleichungssystems. Sind f und g nichtlineare Funktionen, so können ein oder mehrere stabile und instabile stationäre Lösungen existieren. Die Art und Stabilität der stationären Zustände und damit das Verhalten des Systems in der Umgebung dieser Punkte kann mit Hilfe der linearen Stabilitätsanalyse bestimmt werden. Da die Techniken dieser Theorie auf das später zu behandelnde ZnS:Mn MISIM System nicht anwendbar sind, wird hier nicht weiter auf sie eingegangen. Vielmehr sollen einige häufig auftretende, allgemeine Situationen im Nullklinendiagramm gezeigt und die resultierende Systemdynamik diskutiert werden. Als Beispiel betrachte man

$$\frac{du}{dt} = -u^3 + u \quad (5.5)$$

$$\frac{dv}{dt} = \epsilon(\mu_1 u - v + \mu_2) \quad (5.6)$$

mit den frei wählbaren Parametern μ_1 und μ_2 und dem Parameter ϵ der das Verhältnis der Reaktionsgeschwindigkeiten von u und v bestimmt, aber keinen Einfluss auf die stationären Zustände hat.

Sei nun zunächst $\mu_1 = 0.2$, dann lassen sich durch Variation des Parameters μ_2 drei qualitativ unterschiedliche Situationen erzeugen. Abbildung 5.3 (a) zeigt das Nullklinendiagramm für $\mu_2 = 0.5$. Die u -Nullkline teilt die u - v -Ebene in einen oberen Bereich mit $f < 0$ und einen unteren Bereich mit $f > 0$. Hieraus lässt sich schließen, dass die Nullkline aus zwei stabilen Abschnitten (durchgezogene Linie) und einem instabilen Abschnitt (unterbrochene Linie), besteht. Die v -Nullkline steigt dagegen linear mit u und schneidet die u -Nullkline an einer Stelle im stabilen Bereich. Es existiert also eine stationäre stabile Lösung. Die zu dieser Situation gehörende Dynamik der Variablen u und v lässt sich an dem in Abbildung 5.3 (b) gezeigten Phasenraumdiagramm erkennen. In diesem sind die Trajektorien der DGL 5.5 für

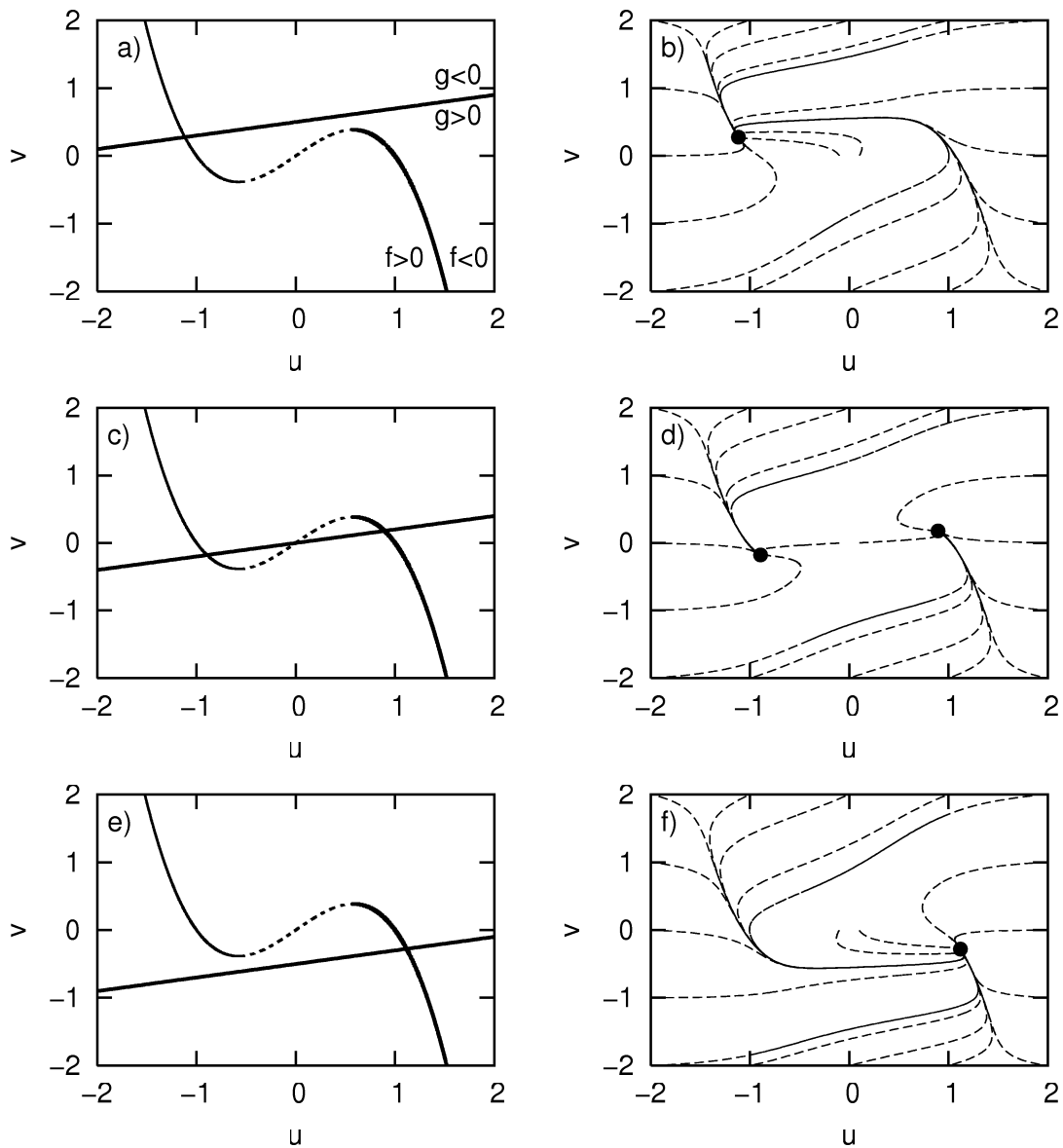


Abbildung 5.3: (a,c,e) Nullklinendiagramme des Gleichungssystems 5.5 mit $\mu_2 = 0.5$ (a), $\mu_2 = 0$ (c) und $\mu_2 = -0.5$ (e). b,d,f) Den Nullklinendiagrammen entsprechende Phasenflüsse des Differentialgleichungssystems ($\mu_1 = 0.2$).

verschiedene Anfangsbedingungen in die (u,v) -Ebene eingetragen. Zwar werden alle Trajektorien vom einzigen stationären stabilen Punkt angezogen (Punktattraktor), jedoch bewirkt die durch den Parameter $\epsilon = 0.1$ vorgegebene langsamere Dynamik von v , dass einige Trajektorien erst nach erheblichen Umwegen in den stationären Zustand laufen.

Das Nulklinendiagramm für $\mu_2 = 0$ in Abbildung 5.3 (c) zeigt drei Schnittpunkte der Nulklinen und lässt somit auf drei stationäre Zustände schließen. Von diesen sind jedoch nur zwei stabil wie ein Blick auf das entsprechende Phasendiagramm (Abbildung 5.3 (d)) sofort zeigt. Je nachdem, wie die Anfangsbedingungen gewählt wurden, führen die Trajektorien zu der stabilen Lösung mit $u < 0$ oder $u > 0$. Durch Variation des Parameters μ_2 entstehen also spontan ein stabiler und ein instabiler stationärer Zustand durch die zweidimensionale Version einer Sattelknoten-Bifurkation. Wird μ_2 weiter verringert, verschwindet ein stabiler sowie der instabile stationäre Zustand mittels einer weiteren Sattel-Knoten-Bifurkation und dem System bleibt nur ein stabiler, stationärer Zustand, wie die Abbildungen 5.3 (e) und (f) zeigen. Wird der Parameter μ_2 langsam variiert führt also auch im zweikomponentigen Fall das Szenario von zwei nacheinander ablaufenden Sattel-Knoten-Bifurkationen zu einer Hysterese in der $u(\mu_2)$ -Kennlinie.

Zu vollkommen anderen Situationen führt ein Parameterwert von $\mu_1 = 2$. Das Nullklinendiagramm zu $\mu_2 = 0.5$ in Abbildung 5.4 (a) zeigt zwar wiederum nur einen stationären stabilen Zustand von dem alle Trajektorien angezogen werden wie Abbildung 5.4 (b) zeigt. Allerdings fällt auf, dass auch bei der Wahl von Anfangsbedingungen in der unmittelbaren Umgebung des Punktattraktors die Trajektorie nicht unbedingt auf direktem Weg in den stationären Zustand führt. In Abbildung 5.4 (b) ist ein Beispiel einer solchen Trajektorie hervorgehoben und man erkennt, dass diese Anfangs fast in die dem Punktattraktor entgegengesetzte Richtung läuft, bevor sie nach einem langen Umweg konvergiert. In einem solchen System können also auch im stabilen stationären Zustand sehr kleine (nicht infinitesimale) Störungen zu großen Änderungen der Variablen u und v führen. Medien mit Nulklinendiagrammen dieser Art werden häufig anregbare Medien genannt und können in zwei und drei räumlichen Dimensionen zu der Entstehung von wandernden Pulsen oder auch rotierenden Spiralen führen.

Medien mit Nullklinen, wie sie in Abbildung 5.4 gezeigt sind, zeigen ebenfalls eine außerordentlich komplexe Dynamik. Man erkennt keinen stabilen, sondern nur einen instabilen stationären Zustand. Da das System einerseits nicht in den instabilen Zustand konvergieren wird, andererseits aber auch nicht divergieren kann, stellt sich die Frage nach dem Langzeitverhalten des Systems. Das Phasendiagramm in Abbildung 5.4 (d) zeigt, dass alle Trajektorien gegen einen geschlossenen Grenzyklus konvergieren und das System somit einer oszillierenden Dynamik folgt. Offensichtlich bewirkt die Variation des Parameters μ_2 eine nach dem Mathematiker Hopf benannte Hopf-Bifurkation, bei der aus einem Punktattraktor ein geschlossener Grenzyklus

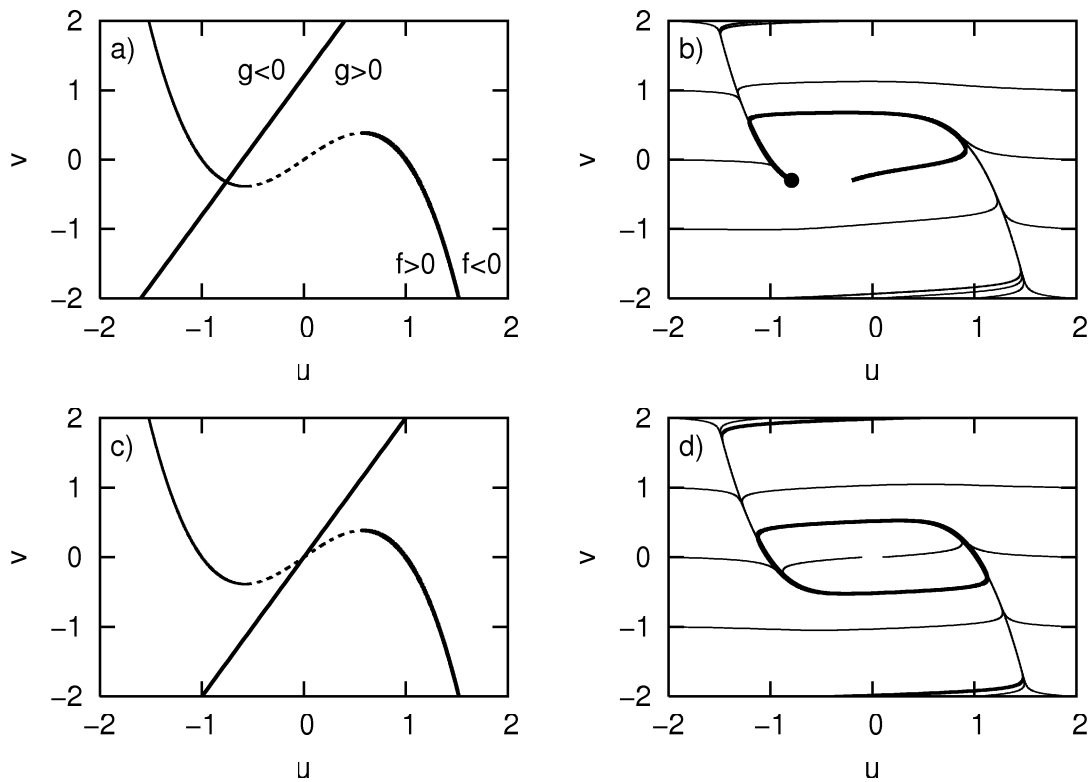


Abbildung 5.4: Nullklinendiagramme (a,c) des Gleichungssystems 5.5 und die entsprechenden Phasenflüsse (b,d) ($\mu_1 = 2, \mu_2 = 1.2$ (a,b), $\mu_1 = 2, \mu_2 = 0$ (c,d)).

wird. Systeme mit einer solchen Dynamik zeigen in höheren Dimensionen häufig die bekannten Turingmuster oder auch Ringwellen.

Kapitel 6

Homogene Anfangsbedingungen (1D)

In diesem ersten der drei Kapitel, die sich mit der Auswertung und Interpretation des hergeleiteten Modells für die ZnS:Mn MISIM-Struktur beschäftigen, geht es ausschließlich um den longitudinalen Ladungsträgertransport. Wir nehmen also an, sowohl das Bauteil als auch die Anfangsbedingungen ($p_t^0(x, y, z)$, $\rho_{l,r}^0(x, y)$, $T_l^0(x, y, z)$) seien in x- und y-Richtung ideal homogen, was auf ein effektiv eindimensionales Gleichungssystem führt. In diesem Sinne stellen die Ergebnisse dieses Kapitels eine direkte Fortführung der Arbeiten Howards [HSA82] und Neyts [NV90, NCVdB94] dar.

Um das umfangreiche System von Differentialgleichungen zu analysieren und zu verstehen, ist es günstig, die Gleichungen in einem ersten Schritt stark zu vereinfachen. Im ersten Teil dieses Kapitels wird deshalb eine zeitlich und räumlich konstante Gittertemperatur $T_G = T_0 = 300$ K angenommen, wodurch aus dem Aktivator-Inhibitor-Modell eine nichtlineare Differentialgleichung wird. Desweiteren werden die Ladungsträgertemperaturen bis auf weiteres als räumlich und zeitlich konstant ($T_n = T_p = T_G$) angesehen, wodurch aus den hydrodynamischen Transportgleichungen die einfacher zu lösenden Drift-Diffusionsgleichungen werden. Im zweiten Abschnitt bleibt die Gittertemperatur weiterhin konstant, jedoch wird der Einfluss der nun variablen Ladungsträgertemperaturen auf das Systemverhalten untersucht. Im dritten Abschnitt wird schließlich das volle, Gittertemperaturabhängige Modell simuliert.

6.1 Konstante Ladungsträger- und Gittertemperaturen

6.1.1 Kurzzeitverhalten

Bevor wir Ergebnisse von Langzeitsimulationen diskutieren, soll zunächst kurz besprochen werden, wie sich das System während einer Periode der Betriebsspannung verhält¹. Hierzu wird die Simulation mit den Anfangsbedingungen $p_t(z) = 0$ und $\sigma_{l,r} = 0$ bei einer sinusförmigen Wechselspannung der Frequenz $f = 1$ kHz und der Amplitude $V_0 = 139$ V gestartet. Abbildung 6.1 zeigt in vier Diagrammen die Entwicklung der wichtigsten Variablen während der ersten Periode der angelegten Spannung. In Abbildung 6.1 (a) ist die Elektronenstromdichte $j_n(t, z)$ über die Zeit und die z-Achse aufgetragen. Da diese über die Randbedingungen mit dem, exponentiell vom elektrischen Feld abhängigen, Tunnelstrom zusammenhängt, sind die scharfen Maxima zu den Zeiten hoher äußerer Spannungen nicht sehr überraschend. Die örtliche Zunahme der Stromdichte von der momentanen Kathode bis zur momentanen Anode, ist eine direkte Folge der, durch Stoßionisation erzeugten,

¹Eine ausführlichere Abhandlung dieser Thematik findet sich z.B. in [Rak03, Rak00].

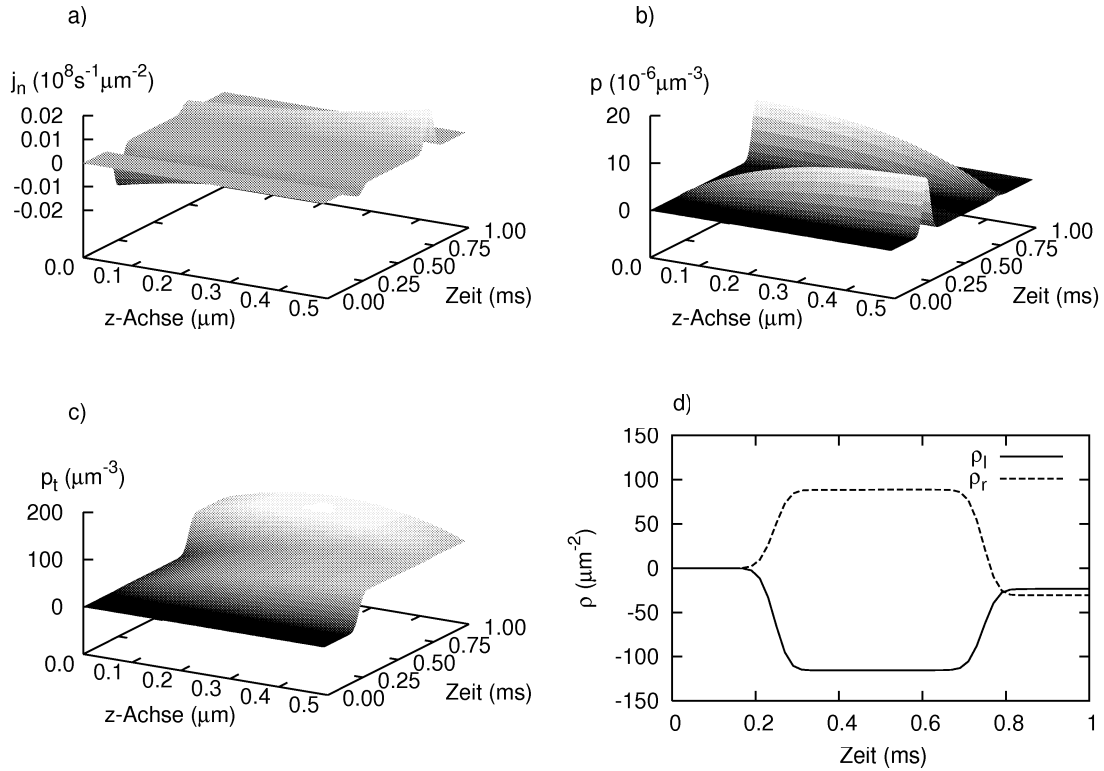


Abbildung 6.1: Zeitliche Entwicklung der ortsabhängigen Elektronenstromdichte (a), der Dichte freier Löcher (b), der Dichte eingefangener Löcher (c) und der Oberflächenladung (d) während einer Periode ($V_0 = 139 \text{ V}$, $f = 1 \text{ kHz}$, RKF-Stoßionisationskoeffizient)

zusätzlichen Elektronen. Abbildung 6.1 (b) zeigt die entsprechende zeitliche Entwicklung der Dichte freier Löcher $p(t, z)$ mit den, durch den Stoßionisationsprozess erzeugten, Maxima zu Zeiten hoher Feldstärken und Elektronenstromdichten. Hohe Löcherdichten verursachen hohe Locheinfangraten und ermöglichen so den in Abbildung 6.1 (c) dargestellten, stufenartigen Anstieg der Dichte eingefangener Löcher $p_t(t, z)$. Natürlich werden zu allen Zeiten auch Löcher aus den Fallen emittiert, was zu einer Abnahme von $p_t(t, z)$ zwischen den Maxima der freien Löcher führt. Dieser Effekt wird jedoch erst bei deutlich höheren Dichten eingefangener Löcher sichtbar. Abbildung 6.1 (d) zeigt schließlich die zeitliche Änderung der Oberflächenladungsdichten $\rho_{l,r}$. Wie erwartet ändert die Grenzfläche auf der Seite der momentanen Kathode während des Spannungsmaximums seinen Ladungszustand von neutral zu positiv, da Elektronen in die Halbleiterschicht tunneln. Entsprechend ändert die Grenzschicht auf der Seite der momentanen Anode ihren Ladungszustand von neutral zu negativ, da Elektronen in die Grenzflächenzustände übergehen. Am Ende

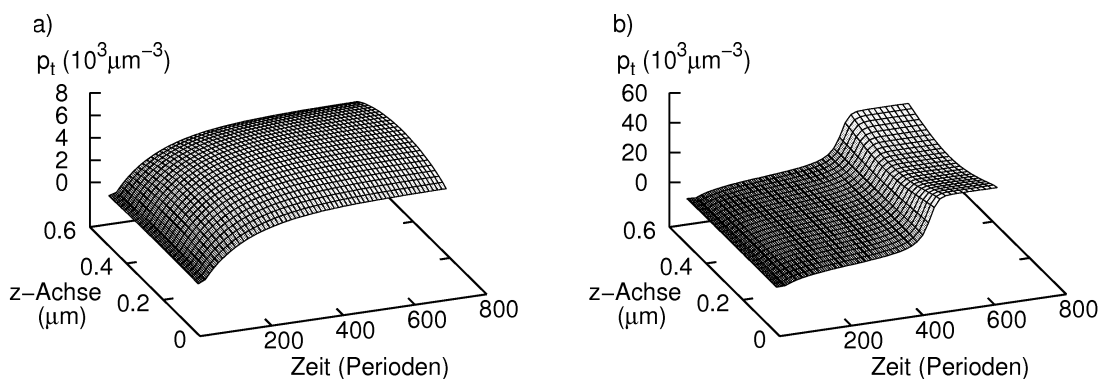


Abbildung 6.2: Zeitliche Entwicklung der Dichte eingefangener Löcher $p_t(t, z)$ bei einer sinusförmigen Betriebsspannung der Frequenz 1 kHz und der Amplitude 142.0 V (a) und 142.5 V (b)

der Periode sind beide Grenzflächen leicht negativ geladen und kompensieren so die positive Raumladung in der ZnS:Mn-Schicht.

Der stufenförmige Anstieg der Raumladungsdichte wirft die Frage auf, wie weit die Dichte der eingefangenen Löcher ansteigt, ob sie einen stationären Zustand erreicht und wie dieser Zustand von Anfangsbedingungen und Parametern abhängt. Diese Fragen zu beantworten ist das Ziel der Untersuchungen dieses Abschnitts.

6.1.2 Langzeitverhalten

Abbildung 6.2 zeigt die zeitliche Entwicklung der Dichte eingefangener Löcher über mehrere Hundert Spannungsperioden ($f = 1$ kHz) für zwei verschiedene Amplituden und den Anfangsbedingungen $p_t = 0$, $\sigma_{l,r} = 0$. Es wurden jeweils nur die Dichten am Ende einer Periode ermittelt, weswegen die, durch die Wechselfrequenz vorgegebene, zeitliche Periodizität der Dichten nicht im Diagramm erscheint. Man sieht deutlich, dass sich zwei qualitativ sehr unterschiedliche stationäre Zustände einstellen. Während die Raumladungsdichte bei einer Amplitude von 142.0 V ein Maximum von etwa $8 \cdot 10^3 \mu\text{m}^{-3}$ in der Mitte der ZnS:Mn-Schicht ausbildet, entstehen bei einer Amplitude von 142.5 V zwei Maxima von etwa $50 \cdot 10^3 \mu\text{m}^{-3}$ an den Rändern der Schicht. Obwohl die Amplituden sich also um weniger als 1 Prozent unterscheiden, zeigen die stationären Zustände große quantitative und qualitative Unterschiede. Dieses Szenario lässt eine Bifurkation des Systems bei Variation des Parameters Spannungsamplitude vermuten und es empfiehlt sich die Anfertigung und Analyse eines Konvergenzdiagramms in dem, nach dem Muster aus Kapitel 5.1, die Änderungsraten gegen die Systemzustände für verschiedene Spannungsam-

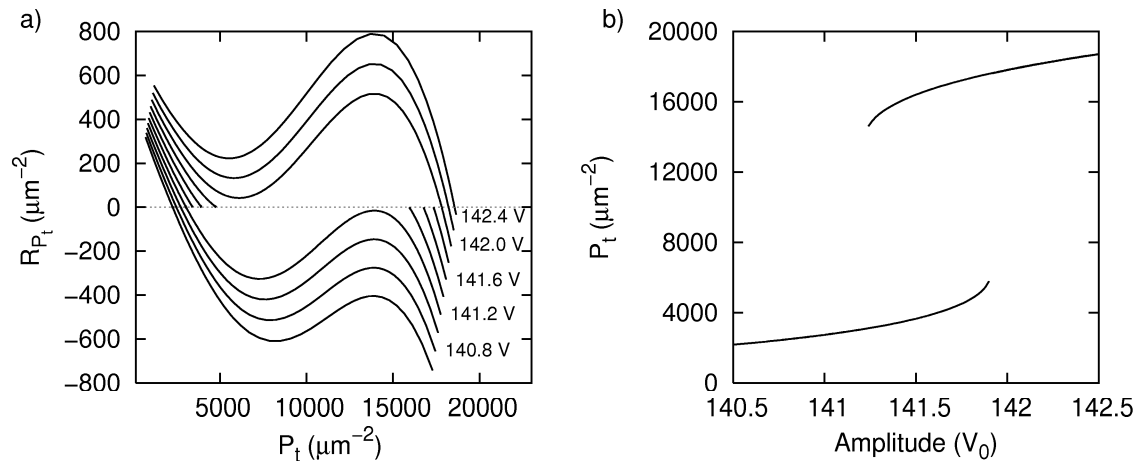


Abbildung 6.3: (a) Nettorate R_{P_t} pro Periode in der R_{P_t} - P_t Ebene für kleine ($R_{P_t} < 0$) und große ($R_{P_t} > 0$) Werte als Anfangsbedingungen für die Dichte der eingefangenen Löcher p_t und für die Oberflächenladungsdichten $\rho_{l,r}$. Die einzelnen Kurven gehören zu verschiedenen Spannungsamplituden V_0 ($\Delta V_0 = 0.2$ V, $f = 0.2$ kHz, RKF-Modell). (b) Periodisch stationäre und stabile Dichte eingefangener Löcher P_t in Abhängigkeit von der Amplitude V_0 der Betriebsspannung.

plituden aufgetragen werden. Ein solches Vorhaben erweist sich jedoch als nicht so einfach, da sowohl der Zustand als auch die Änderungsrate des Ladungsträgersystems nicht durch eine Zahl, sondern durch ortsabhängige Funktionen definiert sind. Desweiteren verhindern die zeitabhängigen Randbedingungen der MISIM-Struktur eine Konvergenz des Systems in einen streng stationären Zustand. Dennoch kann ein aussagekräftiges, zweidimensionales Konvergenzdiagramm erstellt werden, wenn folgende Vereinbarungen getroffen werden:

- Die Diskussion zu Abbildung 6.2 motiviert die Definition eines **periodisch stationären Zustands** durch

$$0 \equiv p_t(z, t + \tau) - p_t(z, t), \quad (6.1)$$

wobei $\tau = 1/f$ die Periodenlänge der Betriebsspannung bezeichnet. Ist diese Bedingung erfüllt, so sind auch die Oberflächenladungsdichten periodisch stationär da die Gesamtladung sich zu null addiert.

- Die über die Dicke L der ZnS-Schicht integrierte Dichte der eingefangenen Löcher definiert eine Flächendichte

$$P_t(t) = \int_0^L p_t(t, z) dz, \quad (6.2)$$

mit der wir im folgenden den **Zustand des Ladungsträgersystems** kennzeichnen werden.

- Die über L und eine Periodendauer integrierte Änderungsrate

$$\begin{aligned} R_{P_t} &= [P_t(t + \tau) - P_t(t)] \\ &= \int_t^{t+\tau} dt \int_0^L dz [R_{pt}(z, t) - R_{nt}(z, t)] \end{aligned} \quad (6.3)$$

definiert schließlich eine **Nettorate** R_{P_t} , welche die Änderung des Systemzustands P_t pro Periode wiedergibt. Das Verschwinden dieser Nettorate ist offensichtlich notwendige aber nicht hinreichende Bedingung für einen periodisch stationären Zustand.

Natürlich ist das System durch die Angabe von P_t nicht eindeutig charakterisiert, da verschiedene Dichten $p_t(z)$ zum selben Integralwert führen können. Problematisch wird dies vor allem dadurch, dass zwei verschiedene Dichten eingefangener Löcher die zum gleichen P_t führen, nicht zwangsläufig dieselbe Nettorate liefern. Es ist also nicht möglich, wie in Kapitel 5.1 vorzugehen, indem zu jedem Wert von P_t die entsprechende Nettorate R_{P_t} berechnet und in einem Diagramm aufgetragen wird. Da wir aber nicht an einer Analyse aller theoretisch möglichen Zustände des Ladungsträgersystems interessiert sind, sondern nur die gemessenen Hysteresen in den Strom-Spannungs-Kennlinien verstehen wollen, werden wir nur die in einer solchen Messung möglichen Zustände auswerten. Wir starten also die Simulation mit den Anfangsbedingungen $p_t^0(z) = 0$ und $\rho_{l,r}^0 = 0$ unter Verwendung einer relativ niedrigen Amplitude V_{min} und berechnen nach jeder Periode P_t und R_{P_t} . Nachdem das System (im Sinne von Def. 6.1) konvergiert ist, erhöhen wir die Amplitude um eine gewisse Schrittweite, setzen die Anfangsbedingungen auf Null und starten die Simulation erneut. Dieser Schritt wird wiederholt, bis eine bestimmte maximale Amplitude V_{max} erreicht wurde. Nun wird der stationäre Endzustand $(p_t^h(z), \rho_{l,r}^h)$ gespeichert und die Prozedur wird mit sinkender Spannung und den Anfangsbedingungen $p_t^0 = p_t^h$ und $\rho_{l,r}^0 = \rho_{l,r}^h$ fortgesetzt, bis wiederum die Amplitude V_{min} erreicht ist. Der exakte Verlauf dieses Algorithmus zur Erzeugung eines Konvergenzdiagramms ist in Anhang A.5 als Flussdiagramm zusammengefasst.

Abbildung 6.3 zeigt als Ergebnis der Simulation die Abhängigkeit der Nettorate R_{P_t} von der Flächendichte P_t für verschiedene Amplituden der Betriebsspannung. Es fällt auf, dass nicht alle Kurven des Diagramms vollständig sind, was daran liegt, dass der verwendete Algorithmus die Kurven nur bis zu ihrem ersten stationären Zustand berechnet. Existieren nun zu einer bestimmten Amplitude zwei stationäre Zustände, so werden die Änderungsraten der dazwischen liegenden Zustände nicht berechnet. Für eine Amplitude von 140.8 V hat das System einen stabilen stationären Zustand mit $R_{P_t} = 0$, der bei $P_t \approx 2000 \mu\text{m}^{-2}$ liegt. Desweiteren zeigt die

entsprechende Konvergenzkurve ein ausgeprägtes Maximum und Minimum, was die nichtlineare Struktur des Systems noch einmal veranschaulicht. Die Lage der Konvergenzkurve zu einer Amplitude von 141.2 V macht deutlich, dass der wesentliche Effekt einer Amplitudenerhöhung darin besteht, die Konvergenzkurve zu höheren R_{P_t} zu verschieben. Mit wachsender Amplitude wächst also das, zum stationären Zustand gehörende, P_t langsam an, bis bei einer kritischen Amplitude $V_0^{c1} \approx 141.9$ V das Minimum der Kurve die $R_{P_t}=0$ -Linie überquert und der stationäre Zustand bei kleinem P_t verschwindet (vgl. Kapitel 5.1). Das System konvergiert nun nach einem langen Weg durch die R_{P_t} - P_t -Ebene gegen einen Zustand mit $P_t \approx 18000 \mu\text{m}^{-2}$. Bei weiterer Erhöhung der Amplitude wächst das, zum stationären Zustand gehörende, P_t nur langsam. Wird die Amplitude schließlich wieder verringert, so bleibt das System in einem stationären Zustand mit hohem P_t , bis das Maximum der Konvergenzkurve die $R_{P_t}=0$ -Linie überquert, was bei der kritischen Amplitude von $V_0^{c2} \approx 141.2$ V geschieht. Es existiert also ein Spannungsbereich von etwa 0.7 V in dem das System zwei verschiedene, stabile stationäre Zustände besitzt und die Anfangsbedingungen den Ausschlag für den tatsächlich realisierten Zustand geben. Die Amplitude kann also als kritischer Parameter identifiziert werden, der bei zwei kritischen Werten V_0^{c1} und V_0^{c2} durch Sattel-Knoten-Bifurkationen die Dynamik des Systems qualitativ entscheidend verändert. Erstellt man nun analog zum Vorgehen in Kapitel 5.1 ein Bifurkationsdiagramm, indem man die stabilen stationären Zustände (gekennzeichnet durch P_t) über den kritischen Parameter V_0 aufträgt, so erhält man die in Abbildung 6.3 (b) gezeigte Abhängigkeit. Bei einer gegenüber der Systemdynamik langsamen Variation der Amplitude ändert der Systemzustand sich quasistationär und das System springt bei der kritischen Amplitude V_0^{c1} fast instantan aus dem stationären Zustand des unteren Astes auf den oberen Ast. Eine Messung der $P_t(V_0)$ -Kennlinie ergibt also eine Hysterese mit senkrechten Übergängen an den kritischen Spannungen V_0^{c1} und V_0^{c2} .

Da bei einer höheren Raumladungsdichte auch ein stärkerer Strom fließt, führt das diskutierte Szenario zu einer Hysterese in der Strom-Spannungskennlinie. In den folgenden Abschnitten wird die Abhängigkeit dieser Hysterese von Modellparametern diskutiert, da in Experimenten meist die Stromdichte oder die, monoton mit dieser steigende, Lumineszenzdichte gemessen wird. Aufgrund der oszillierenden Betriebsspannung wird für die Kennlinien die, über eine Periode und die ZnS:Mn-Schicht gemittelte, elektrische Stromdichte

$$\bar{j} = \frac{1}{\tau L} \int_t^{t+\tau} \int_0^L |ej_n(z, t)| dz dt \quad (6.4)$$

verwendet.

Um den Sprachgebrauch zur Unterscheidung der zwei stationären Zustände im bistabilen Bereich im Folgenden ein wenig zu vereinfachen, wird von einem Hochstromzustand gesprochen, wenn $p_t(z)$ und $\sigma_{l,r}$ Werte enthalten die zu Stromdichten

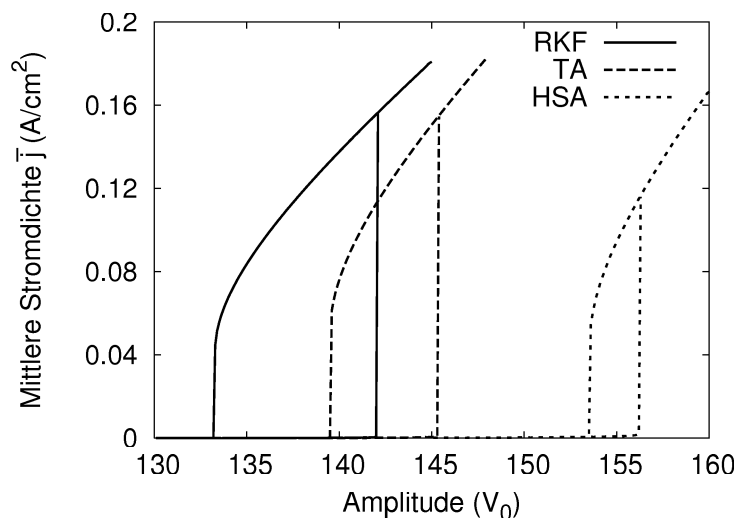


Abbildung 6.4: Mittlere elektrische Stromdichte \bar{j} als Funktion der Amplitude der Betriebsspannung V_0 für die drei verschiedenen Stoßionisationskoeffizienten $\alpha(E)$ nach Howard (HSA) [HSA82], Thompson (TA) [TA87] und Redmer (RKF) [RKF05] (Vergl. Abbildung 3.2, $f = 4$ kHz)

auf dem oberen Ast der Hysterese gehören. Anderenfalls wird ein Zustand Tiefstromzustand genannt.

6.1.3 Der Einfluss des Stoßionisationskoeffizienten

Abbildung 6.4 zeigt die $\bar{j}(V_0)$ -Kennlinien für die drei, in Kapitel 3.4.1 eingeführten, Stoßionisationskoeffizienten bei einer Frequenz der Betriebsspannung von $f = 4.0$ kHz. Offensichtlich zeigt unser Modell bei Verwendung aller drei Koeffizienten eine ausgeprägte Hysterese, die Lage und Breite der bistabilen Bereiche unterscheiden sich jedoch deutlich voneinander.

Bei Verwendung des Stoßionisationskoeffizienten nach Howard liegt die bistabile Zone zwischen etwa 153 V und 156 V und damit bei den höchsten Amplituden aller hier diskutierten Koeffizienten. Aufgrund des sehr kleinen Koeffizienten bei mittleren elektrischen Feldstärken kann eine, den Rückkopplungseffekt auslösende, positive Raumladung erst bei sehr hohen Spannungen aufgebaut werden. Die mit $\Delta V_0 \approx 3$ V geringe Breite der Hysterese ist eine Folge der sehr starken Steigung des Stoßionisationskoeffizienten. Diese bewirkt einen extrem schnellen Abfall der Dichte freier Löcher mit der Feldstärke, wodurch die hohe Dichte eingefangener Löcher nicht über einen sehr großen Amplitudenbereich aufrecht erhalten werden kann.

Bei Verwendung des RKF-Ionisationsmodells springt die $\bar{j}(V_0)$ -Kennlinie bereits

bei einer Amplitude von etwa 142 V auf den oberen Ast der Hysterese. Die Ursache hierfür ist die schon bei mittleren Feldstärken einsetzende, relativ starke Löcherproduktion, welche schnell zu einer großen Raumladung führt. Die geringere Steigung des Koeffizienten bewirkt einen im Vergleich zum HSA-Koeffizienten langsameren Rückgang der Dichte freier Löcher mit sinkender Betriebsspannung. Hierdurch kann die hohe Raumladungsdichte auch bei relativ kleinen Amplituden noch erhalten werden, was zu der großen Hysteresebreite von $\Delta V_0 \approx 9$ V führt.

Der TA-Ionisationskoeffizient liegt unterhalb des RKF-Koeffizienten und bei niedrigen bis mittleren Feldstärken um einige Größenordnungen oberhalb des HSA-Koeffizienten. Dem entsprechend, liegt die Sprungspannung der TA-Kennlinie mit etwa 145 V oberhalb der des RKF- und unterhalb der des HSA-Koeffizienten. Die Tatsache, dass der HSA-Koeffizient den TA-Koeffizienten bei hohen Feldstärken um etwa einen Faktor zwei übertrifft, hat zwar geringe Auswirkungen auf die Stärke der Raumladung im stationären Zustand, beeinflusst die Sprungspannung jedoch nicht. Auch die Steigung des TA-Koeffizienten liegt, zumindest im kritischen Feldstärkebereich von 1.6 bis 1.8 MVcm⁻¹, zwischen den Steigungen der anderen Ionisationskoeffizienten und führt somit auf eine Hysteresebreite, die mit $\Delta V_0 \approx 6$ V eine mittlere Stellung einnimmt.

Die Form des Stoßionisationskoeffizienten beeinflusst die Hysterese der $\bar{j}(V_0)$ -Kennlinien demnach nur quantitativ. Die Eigenschaft der Bistabilität jedoch, ist in der nichtlinearen Struktur der Modellgleichungen begründet und nicht empfindlich vom verwendeten Stoßionisationskoeffizienten abhängig. Diese Eigenschaft zeichnet das von uns verwendete Modell gegenüber dem von Howard eingeführten aus, da es in keiner Simulationen des HSA-Modells mit einem flacheren Stoßionisationskoeffizienten gelang, eine Hysterese zu erzeugen [RNK⁺02].

6.1.4 Frequenzabhängigkeit der Hysterese

In Abbildung 6.5 sind die bistabilen Bereiche für die drei verschiedenen Stoßionisationskoeffizienten (RKF, TA, HSA) in der f - V_0 -Kontollparameterebene durch schraffierte Flächen hervorgehoben. Für alle drei untersuchten Koeffizienten ergibt sich ein qualitativ sehr ähnliches Verhalten. Während unterhalb einer bestimmten Grenzfrequenz f^c die Strom-Spannungskennlinie keine Hysterese zeigt, nimmt die Breite des bistabilen Bereiches oberhalb dieser Frequenz stetig zu. Aus den im letzten Abschnitt diskutierten Gründen sind die bistabilen Bereiche des TA- und HSA-Modells bei gleicher Betriebsfrequenz kleiner und liegen bei höheren Spannungen als der Bereich des RKF-Modells.

Um zu verstehen warum die Hysterese erst ab einer gewissen Grenzfrequenz einsetzt, erstellen wir je ein Konvergenzdiagramm für eine Frequenz die ein wenig kleiner ist als f^c (Abbildung 6.6 (a)) und für eine die ein wenig größer ist (Abbildung 6.6 (b)). Als Stoßionisationskoeffizient wurde hierbei der RKF-Koeffizient gewählt,

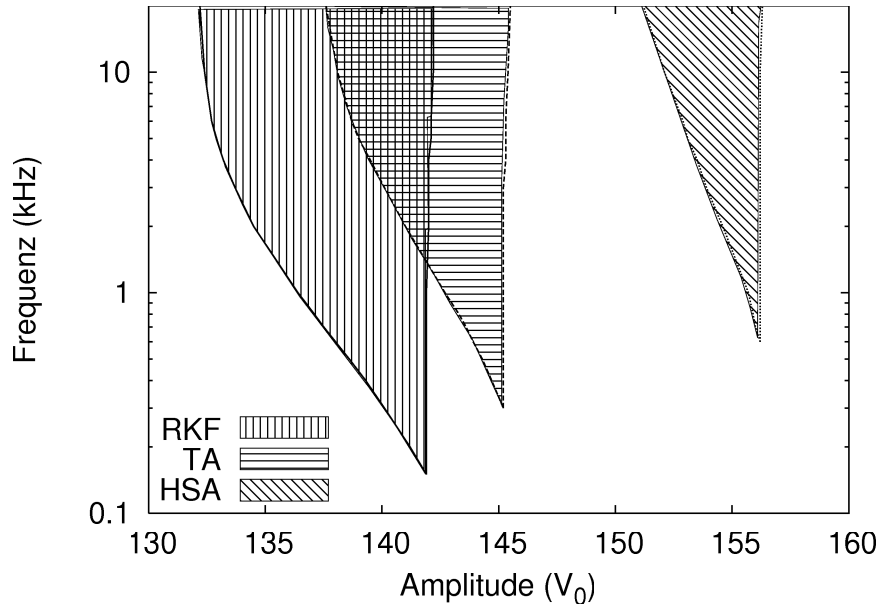


Abbildung 6.5: Bistabile Bereiche (schraffiert) in der f_D - V_0 Ebene für die drei verschiedenen Stoßionisationskoeffizienten aus Abbildung 3.2.

was aber die Allgemeinheit der nachfolgenden Diskussion nicht einschränkt. In Abbildung 6.6 (a) verlaufen alle Konvergenzkurven als Funktionen von P_t monoton, womit für jede Spannungsamplitude nur ein Schnittpunkt mit der $R_{P_t}=0$ -Achse existiert. Das System besitzt also für alle Amplituden genau einen stationären Zustand. Der Grund hierfür liegt in den bei kleinen Frequenzen vergleichsweise langen Zeiten geringer elektrischer Feldstärken zwischen den Spannungsmaxima. Während dieser Zeiten werden viele eingefangene Löcher aus Löcherfallen emittiert und rekombinieren mit Elektronen in den Grenzflächenzuständen. Das System ist so nicht in der Lage eine Raumladung aufzubauen, die groß genug ist, um das elektrische Feld wirkungsvoll zu verstärken. Steigt die Frequenz der Betriebsspannung an, so verringert sich die Zeit pro Spannungsperiode in der Löcher emittiert werden proportional zur Periodenlänge. Da die Dichte eingefangener Löcher eine langsam veränderliche Größe ist und die Emissionsrate nur von dieser abhängt, ist die Gesamtemission von Löchern pro Periode annähernd proportional zur Periodenlänge. Für den Gesamteinfang gilt dies jedoch nicht, da dieser im Wesentlichen von der Dichte freier Löcher bestimmt wird, welche jedoch nur zu Zeiten starker elektrischer Felder und hoher Elektronenstromdichten groß ist. Durch den Wechsel der Grenzflächenladung und den damit verbundenen Aufbau eines Gegenfeldes, existieren große Dichten freier Löcher nicht während des ganzen Zeitraums hoher äußerer Spannungen, sondern

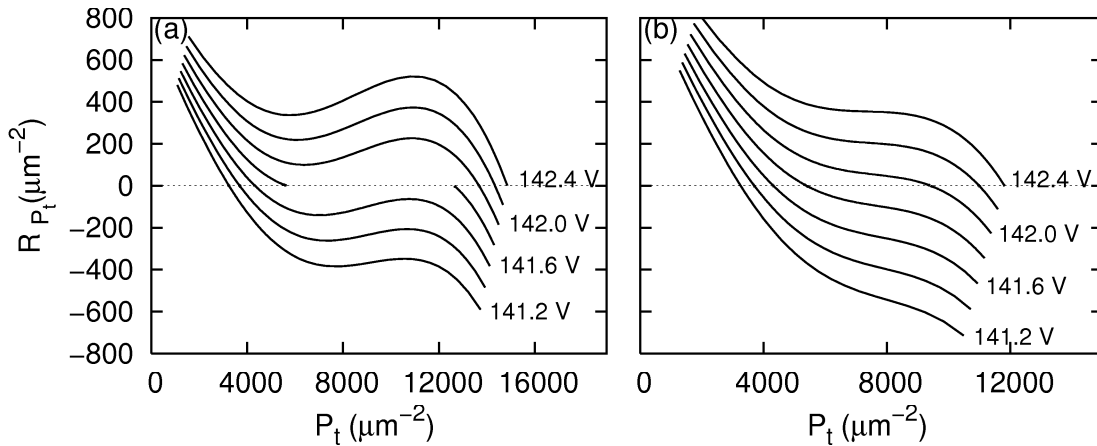


Abbildung 6.6: Konvergenzdiagramme für Betriebsfrequenzen von 0.15 kHz (a) und 0.12 kHz (b) (RKF-Stoßionisationskoeffizient).

nur während der Anstiegsphase der äußeren Spannung (vgl. auch [Rak03]). Hieraus folgt, dass die Einfangrate weit schwächer als proportional mit der Periodenlänge abnimmt. Die Nettorate steigt also mit der Frequenz und das System ist in der Lage eine wirkungsvolle Raumladungsdichte aufzubauen. Für die Konvergenzkurven in der R_{P_t} - P_t Ebene 6.6 (b) bedeutet dies, dass sie sich deformieren und ein Minimum und Maximum ausbilden. In einem gewissen Amplitudenintervall zeigt das System nun zwei stabile stationäre Zustände, wodurch eine Hysterese in der $\bar{j}(V_0)$ -Kennlinie entsteht. Die Frequenz ist offenbar ein weiterer kritischer Parameter des Systems, bei dessen Variation am kritischen Wert f^c ein instabiler und ein weiterer stabiler stationärer Zustand durch eine Gabelbifurkation (mit gebrochener Symmetrie) entstehen.

Sowohl eine solche Grenzfrequenz für bistabiles Verhalten als auch eine mit der Frequenz steigende Hysteresebreite konnte von Neyts [NCVdB94] experimentell beobachtet werden.

Ein weiterer interessanter Aspekt in Abbildung 6.5 ist, dass die Sprungspannung bei der das System vom unteren auf den oberen Ast der Hysterese wechselt, für alle Ionisationskoeffizienten nahezu unabhängig von der Frequenz ist. Im Tiefstromzustand sind die Raum- und Oberflächenladungsdichten sehr klein und haben deshalb kaum Einfluss auf das elektrische Feld. Dies bedeutet aber, dass die Dichten freier Löcher bei verschiedenen Frequenzen für gleiche Amplituden fast gleich sind. Da sich bei verschiedenen Frequenzen gleicher Amplitude nur das Zeitintervall unterscheidet in dem alle Spannungen durchlaufen werden, ist die Einfangrate der freien Löcher pro Periode im Tiefstromzustand annähernd proportional zur Periodendauer. Weil aber

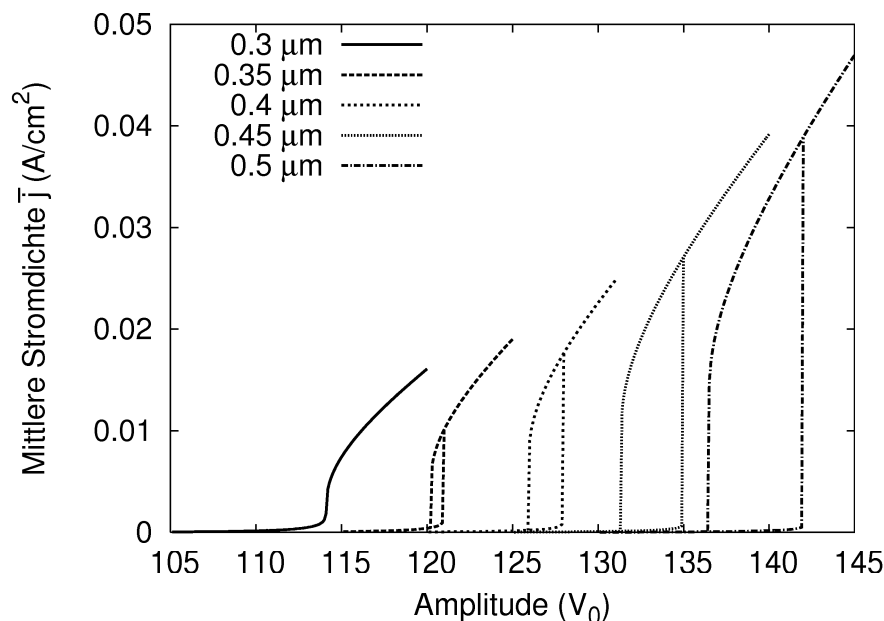


Abbildung 6.7: $\bar{j}(V_0)$ -Kennlinien für verschieden Dicken der ZnS:Mn-Schicht ($f = 1$ kHz, RKF-Stoßionisationskoeffizient).

auch die Emissionsrate der eingefangenen Löcher annähernd proportional zur Periodendauer ist, ändert sich der stationäre Zustand des Systems im Tiefstromzustand fast nicht mit der Frequenz. Für den Hochstromzustand gilt diese Argumentation nicht mehr. Zwar ist die Emissionsrate von Löchern aus den Fallen nach wie vor fast proportional zur Periodendauer, jedoch verändert sich die Oberflächenladung innerhalb einer Periode sehr schnell. Da große Dichten freier Löcher nur vorhanden sind, solange die momentane Kathode eine hohe negative Oberflächenladung aufweist, diese aber schon während des Anstiegs der Amplitude verschwindet, sinkt die Gesamteinfangrate pro Periode kaum, wenn sich die Periodendauer verringert.

6.1.5 Abhängigkeit der Hysterese von der Dicke der ZnS:Mn-Schicht

Abbildung 6.7 zeigt die $\bar{j}(V_0)$ -Kennlinien für verschiedene Dicken L der ZnS:Mn-Schicht. Offenbar ergibt sich eine Hysterese in der Kennlinie erst ab einer Mindestschichtdicke von etwa $0,35 \mu\text{m}$. Die Breite des bistabilen Bereiches nimmt, oberhalb dieses Grenzwertes mit steigender Schichtdicke zu, während sich die Lage der Sprungspannung vom Tief- zum Hochstromzustand zu höheren Amplituden verschiebt.

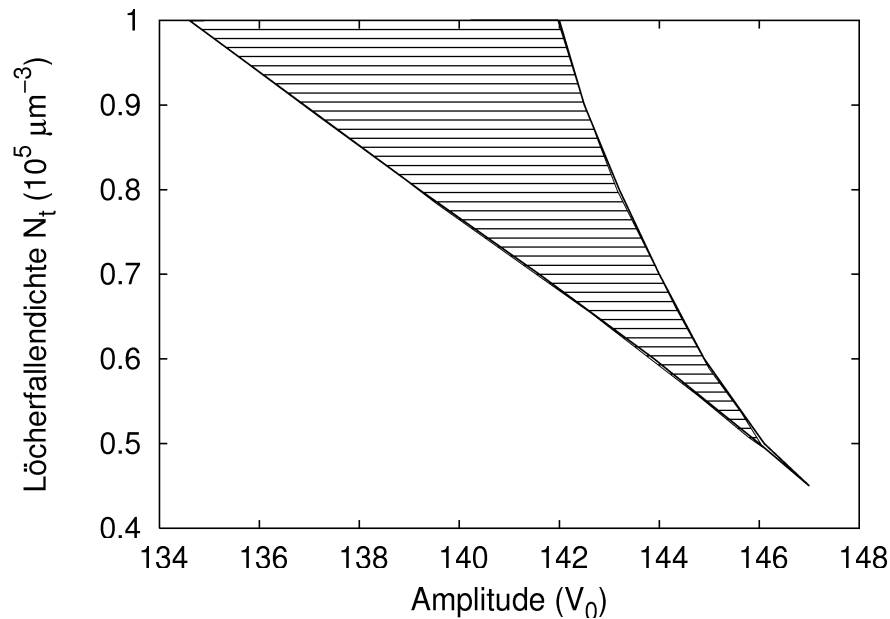


Abbildung 6.8: Bistabiler Bereich (schraffiert) in der N_t - V_0 Parameter Ebene ($f = 2$ kHz, RKF Stoßionisationsmodell).

Eine geringere Dicke der Halbleiterschicht hat natürlich bei gleicher Spannungsamplitude ein stärkeres elektrisches Feld zur Folge. Somit ist klar, dass sich die Sprungspannung für dünnere Schichten bei kleineren Amplituden befindet. Das Verschwinden der Hysterese ist auf die geringere Gesamtzahl der Löcherfallen bei gleicher Löcherfallendichte zurückzuführen. Hierdurch sinkt die gesamte Raumladung und das elektrische Feld wird in zu dünnen ZnS:Mn-Schichten nicht effektiv genug verstärkt. Sasakura [SKT⁺81] präsentierte 1981 experimentelle Ergebnisse, die die Zunahme der Hysteresebreite mit der Dicke der ZnS:Mn-Schicht zeigten und auch das Verschwinden der Hysterese bei zu dünnen Schichten bestätigten.

6.1.6 Abhängigkeit der Hysterese von der Dichte der Löcherfallen

Aus einigen Experimenten ([MM82, HK79, HSA82]) ist bekannt, dass die Hysterese, mit steigender Mangankonzentration der ZnS-Schicht, breiter wird. Jedoch wird weder in dem hier präsentierten Modell noch in den Arbeiten von Howard [HSA82] und Neyts [NV90, NCVdB94] die Mangankonzentration als Parameter direkt verwendet. Howard fand jedoch deutliche Hinweise darauf, dass die positive Raumladungsdichte innerhalb der ZnS-Schicht monoton mit der Mangankonzentration steigt. Dement-

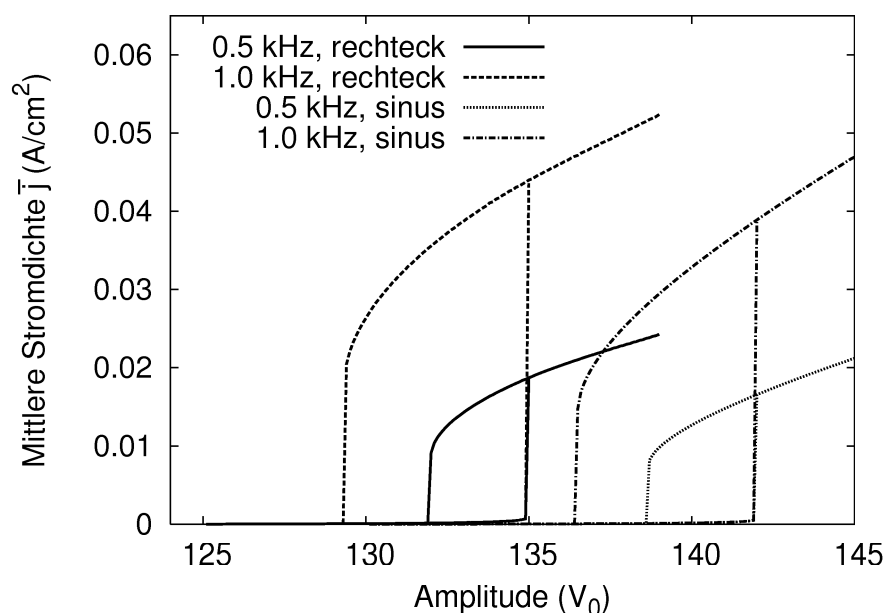


Abbildung 6.9: $\bar{j}(V_0)$ Kennlinie für eine Rechteck- und eine Sinusspannung für zwei verschiedenen Frequenzen der Treiberspannung (RKF-Modell).

sprechend führte er eine Löcherfallendichte N_t ein, die alle möglichen Arten von Löcherfällen, wie isovalente Manganfallen und Gitterdefekte, zusammenfasst. Der genaue Ursprung und die energetische Lage der Fallen sind bis heute jedoch nicht hinreichend geklärt.

Abbildung 6.8 zeigt die Abhängigkeit der Breite des bistabilen Bereichs (schraffierte Fläche) von der Dichte der Löcherfallen N_t . Die mit steigender Dichte breiter werdende Hysterese ist die Folge einer höheren Raumladungsdichte, die durch eine höhere Fallendichte entsteht. Bei sinkender Amplitude kann diese das abfallende elektrische Feld länger kompensieren als es bei kleinen Löcherfallendichten möglich wäre. Die Einfangrate von freien Löchern in Fallen steigt mit N_t an, womit schon bei kleineren Amplituden eine effektive Feldverstärkung durch eingefangene Löcher möglich wird. Die Sprungspannungen verschieben sich also, wie in der Abbildung wiedergegeben, zu kleineren Amplituden.

6.1.7 Abhängigkeit der Hysterese von der Form der Betriebsspannung

Die unterschiedlichen Modelle, die zur Erklärung des Ladungsträgertransport in ZnS:Mn MISIM-Strukturen aufgestellt wurden, verwenden verschiedene Wechsel-

spannungstypen. Beispielsweise verwendete Howard [HSA82] zur Berechnung seiner Hysteresen Rechteckspannungen, während Neyts [NCVdB94] in seinen Simulationen mit Dreieckspannungen arbeitete und in seinen analytischen Arbeiten Rechteckspannungen und parabolische Spannungen verwendete. In Experimenten werden die MISIM-Strukturen andererseits meist mit Sinus- oder Rechteckspannungen betrieben und für beide wurden unter geeigneten Parametern bistabile Amplitudenbereiche gefunden.

Auch unsere Simulationen zeigen unter Verwendung verschiedenartiger Wechselspannungen bistabile Bereiche. Abbildung 6.9 zeigt für jeweils zwei verschiedene Frequenzen die hysteresartige $\bar{j}(V_0)$ -Kennlinien für Sinus- und Rechteckspannungen. Während die Breiten der Hysteresen bei verschiedenen Spannungsformen recht ähnlich sind, unterscheiden sich die Sprungspannungen erheblich. Dieser Unterschied ist zurückzuführen auf eine unterschiedliche durchschnittliche Produktion freier Löcher. Wenn die MISIM-Struktur mit einer sinusförmigen Spannung betrieben wird, steigt das von der externen Spannungsquelle erzeugte Feld stetig an, während die negative Oberflächenladungsdichte von der momentanen Kathode auf die Anode fließt und ein entgegengesetztes, inneres Feld erzeugt. Wenn die Maximale äußere Feldstärke erreicht wird, wird diese von einem starken inneren Feld bereits abgeschwächt. Aus dem plötzlichen Richtungswechsel des äußeren elektrischen Feldes folgt ein völlig anderes Szenario, wenn die MISIM-Struktur mit einer Rechteckspannung betrieben wird. In dem Moment, in dem das, von der äußeren Spannungsquelle erzeugte, Feld umgekehrt wird, hat das innere elektrische Feld der Oberflächenladungsdichte dieselbe Orientierung und besitzt seine maximale Stärke. Insgesamt ergibt sich so ein durchschnittlich höheres elektrisches Feld, was eine Verschiebung der Sprungspannung zu kleineren Amplituden erklärt.

6.2 Der Einfluss der Ladungsträgertemperaturen

6.2.1 Konstante Ladungsträgertemperaturen

Um die Effekte des vollständigen hydrodynamischen Modells besser zu verstehen, ist es sinnvoll, in einem ersten Schritt den Einfluss einer Variation der Ladungsträgertemperaturen im Drift-Diffusions Modell auf das Systemverhalten zu untersuchen. Die Gleichungen 3.36 und 3.40 machen deutlich, dass veränderte aber zeitlich und räumlich konstante Ladungsträgertemperaturen ausschließlich den Diffusions-term der Teilchenstromgleichungen beeinflussen. Abbildung 6.10 zeigt die $\bar{j}(V_0)$ -Kennlinien für Ladungsträgertemperaturen von $T_{n,p} = 300$ K und $T_{n,p} = 20000$ K bei einer Betriebsfrequenz von 2 kHz. Obwohl die Ladungsträgertemperaturen sich um fast zwei Größenordnungen unterscheiden, weichen die Kennlinien kaum voneinander ab. Der Grund hierfür ist, dass sich die gesamte Raumladung kaum

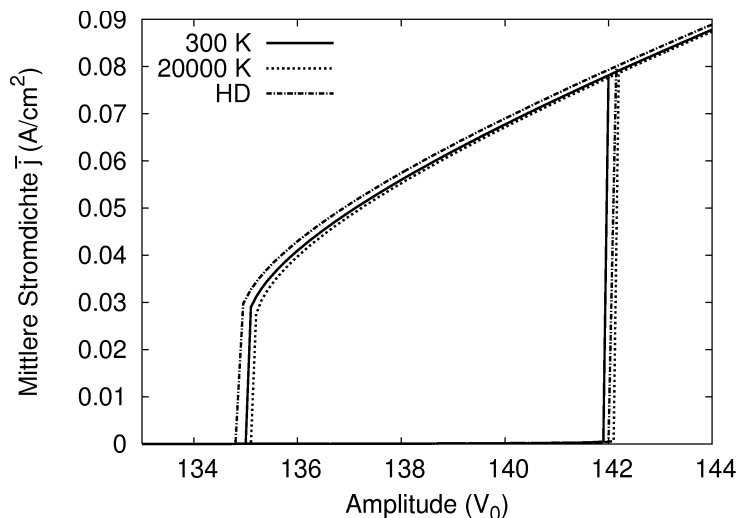


Abbildung 6.10: Aus dem Drift-Diffusionsmodell unter verschiedenen konstanten Ladungsträgertemperaturen (300 K, 20000 K) und dem hydrodynamischen Modell (HD) berechnete $\bar{j}(V_0)$ -Kennlinie der ZnS:Mn MISIM-Struktur ($f = 2$ kHz, RKF Stoßionisationskoeffizient).

verändert, auch wenn durch die Erhöhung des Diffusionsstroms die Verteilung der freien Löcher etwas verändert wird. Dies gilt dann natürlich auch für das elektrische Feld an der momentanen Kathode und somit für den Tunnelstrom, der den Hauptteil der mittleren Stromdichte \bar{j} ausmacht. Der longitudinale Ladungsträgertransport wird also im wesentlichen vom Driftterm der Stromgleichungen dominiert. In den lateralen Richtungen, in denen die elektrischen Feldstärkekomponenten sehr viel schwächer sind, kann eine durch Erhöhung der Ladungsträgertemperaturen gesteigerte Diffusion deutliche Auswirkungen auf das Verhalten der MISIM-Struktur haben [Rak03].

6.2.2 Ergebnisse des hydrodynamischen Transports

In diesem Abschnitt werden die Ladungsträgertemperaturen der Elektronen T_e und Löcher T_p nicht mehr als freie Parameter behandelt, sondern aus dem vollen hydrodynamischen Modell bestimmt. Abbildung 6.11 zeigt für eine Amplitude von 145 V bei einer Frequenz von 2 kHz die zeitliche Entwicklung der Ladungsträgertemperaturen in der ZnS:Mn-Schicht während einer Periode der Betriebsspannung. Natürlich findet man die höchsten Temperaturen zu den Zeiten der stärksten elektrischen Felder, jedoch steigen die Temperaturen nicht wie die Stromdichten exponentiell an. Dies sieht man leicht ein, wenn man wiederum berücksichtigt, dass die Stromdich-

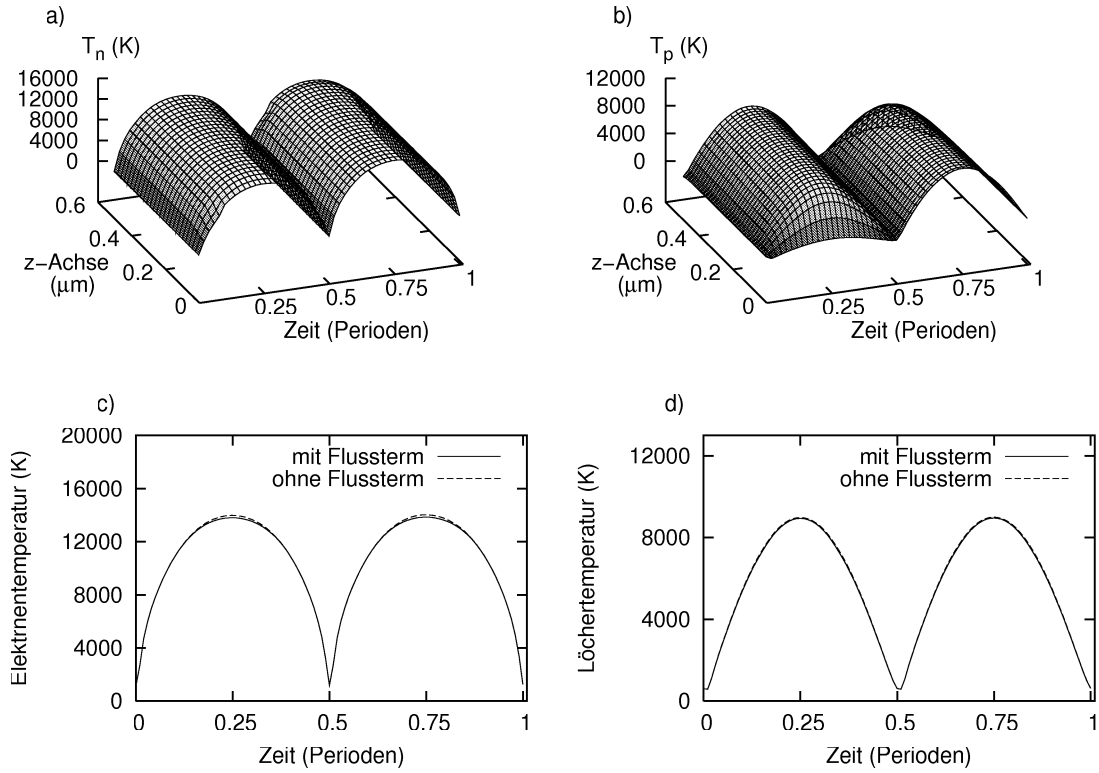


Abbildung 6.11: Oben: Zeitliche Entwicklung der Elektronentemperatur (a) und der Löchertemperatur (b) während der ersten Periode der Betriebsspannung. Unten: Vergleich der zeitlichen Entwicklung der Elektronen- (c) und Löchertemperaturen (d) des vollen hydrodynamischen Modells und des, durch Vernachlässigung der Flussterme, vereinfachten Modells in der Mitte ($z = 0.25 \mu\text{m}$) der ZnS:Mn-Schicht ($f = 2 \text{ kHz}$, $V_0 = 145 \text{ V}$, RKF Stoßionisationskoeffizient).

ten von den jeweiligen Drifttermen dominiert werden. Setzt man nur diese in die Gleichungen 3.37 und 3.41 ein, so ergibt sich

$$0 \approx -\nabla_{\vec{r}} \vec{F}_n + en \left(\frac{\partial \varphi}{\partial z} \right)^2 - \frac{3}{2} n \frac{k_B}{\tau_{E,n}} (T_n - T_0) + G_n^{(2)}, \quad (6.5)$$

$$0 \approx -\nabla_{\vec{r}} \vec{F}_p - ep \left(\frac{\partial \varphi}{\partial z} \right)^2 - \frac{3}{2} p \frac{k_B}{\tau_{E,p}} (T_p - T_0) + G_p^{(2)}. \quad (6.6)$$

Da also sowohl die ohmsche Wärmeproduktion als auch die Relaxation proportional zu den Ladungsträgerdichten sind folgt, dass die Ladungsträgertemperaturen quadratisch mit dem elektrischen Feld steigen. Die Temperaturen variieren also, verglichen mit den Dichten und Stromdichten der freien Ladungsträger, nur sehr

langsam, was die, in Abschnitt 4.2 eingeführte, Entkopplung der Temperatur- von den Kontinuitätsgleichungen noch einmal rechtfertigt.

Berechnet man die $\bar{j}(V_0)$ -Kennlinie aus dem vollen hydrodynamischen Modell und vergleicht diese mit den Ergebnissen des Drift Diffusions Modells (Abbildung 6.11 HD), so erkennt man wiederum kaum einen Unterschied. Offensichtlich sind auch die Terme in den Stromdichtegleichungen, die Temperaturgradienten enthalten, nur von untergeordneter Bedeutung für den longitudinalen Ladungsträgertransport.

Eine genauere Analyse der Energiegleichungen 3.37 und 3.41 ergibt, dass die Ladungsträgertemperaturen fast ausschließlich durch den ohmschen Wärmeproduktionsterm und den Relaxationsterm bestimmt werden [Mey03]. Dies liegt daran, dass die geringen Ladungsträgerdichten sehr kleine Wärmeleitfähigkeiten und Stromgradienten verursachen, was wiederum kleine Gradienten der Energieflüsse zur Folge hat. In sehr guter Näherung kann also der Wärmezufuss gegenüber der lokalen Wärmeproduktion und der Wärmeabfluss gegenüber der lokalen Wärmerelaxation vernachlässigt werden, was die Differentialgleichungen 3.37 und 3.41 in zwei einfacher zu lösende algebraische Gleichungen der Form

$$0 = e j_n \frac{\partial \varphi}{\partial z} - \frac{3}{2} n \frac{k_B}{\tau_{E,n}} (T_n - T_0) + G_n^{(2)}, \quad (6.7)$$

$$0 = -e j_p \frac{\partial \varphi}{\partial z} - \frac{3}{2} p \frac{k_B}{\tau_{E,p}} (T_p - T_0) + G_p^{(2)} \quad (6.8)$$

überführt. In den Abbildungen 6.11 (c) und (d) sind die nach dieser Näherung und dem vollen hydrodynamischen Modell berechneten Ladungsträgertemperaturen während einer Periode in der Mitte der ZnS:Mn-Schicht ($z = 0.25 \mu\text{m}$) gezeigt. Tatsächlich ist nur bei sehr hohen Elektronentemperaturen eine minimal höhere Temperatur des vereinfachten Modells 6.7 erkennbar, während die aus den verschiedenen Modellen errechneten Löchertemperaturen fast völlig identisch sind. Mit Hilfe der einfachen algebraischen Gleichungen können also auch in mehrdimensionalen Modellen die für den lateralen Transport wichtigen Ladungsträgertemperaturen erfasst werden, ohne den numerischen Aufwand entscheidend zu erhöhen.

Da auch in mehrdimensionalen Simulationen die Teilchenstromdichten an einer lateralen position (x,y) hauptsächlich durch den Driftterm der Gleichungen 3.36 und 3.40 bestimmt werden, sind nach Gleichung 6.5 und 6.6 die räumlichen Inhomogenitäten der Ladungsträgertemperaturen von der Größenordnung der Inhomogenität des elektrischen Feldes und relativ unabhängig von den lokalen Stromdichten. Die elektrische Feldstärke wird jedoch zum größten Teil durch die homogene Betriebsspannung bestimmt, was zu relativ homogenen Ladungsträgertemperaturen führt. In mehrdimensionalen Modellen ist also der wesentliche Unterschied des hydrodynamischen Modells zum Drift-Diffusionsmodell nicht die Berücksichtigung von Temperaturgradienten, sondern die Beeinflussung des Diffusionsterms der Stromdichtegleichungen durch zeitlich veränderliche Ladungsträgertemperaturen.

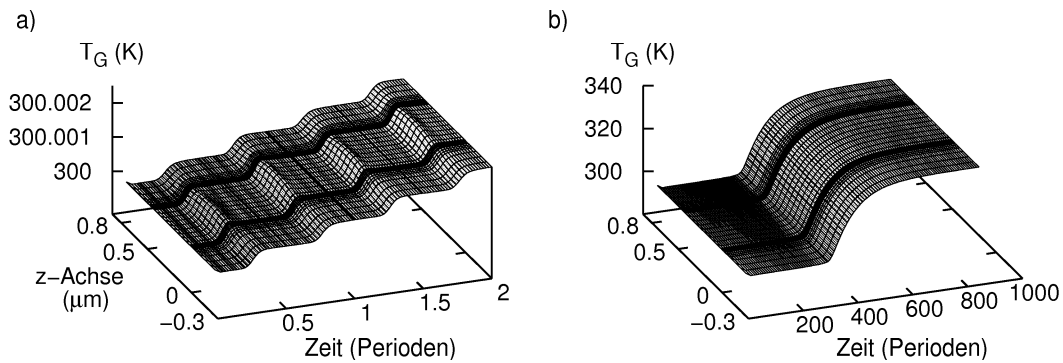


Abbildung 6.12: (a) Zeitliche Entwicklung der Gittertemperatur T_G der ZnS-Schicht und der Isolatoren während der ersten zwei Perioden der Betriebsspannung. (b) Entwicklung der Gittertemperatur über einige hundert Perioden. Aufgetragen sind hierbei nur die Temperaturen am Ende einer Periode. (Sinusförmige Betriebsspannung mit $U = 117$ V, $f = 10$ kHz.)

6.3 Einfluss der Gittertemperatur

Die Gittertemperatur T_G hat, wie im Theorieteil erläutert, wesentlichen Einfluss auf den Emissionsprozess der Löcher aus den Löcherfallen. Bei hohen Gittertemperaturen werden eingefangene Löcher wesentlich schneller wieder an das Valenzband abgegeben als bei niedrigen Temperaturen. Da eine Zunahme der Temperatur durch einen hohen lokalen Stromfluss aktiviert wird und diesen dann durch Reduktion der Raumladungsdichte und damit des elektrischen Feldes im Gegenzug verringert, zeigt das Modell einige Ähnlichkeiten zu zwei Komponenten Systemen des Aktivator-Inhibitor Typs. In diesem Kapitel wird das Zusammenspiel des Ladungsträgersystems und der Gittertemperatur in Abhängigkeit einiger wesentlicher Parameter studiert.

6.3.1 Kurz- und Lagzeitverhalten der Gittertemperatur

Zunächst wollen wir mit Abbildung 6.12 einen kurzen Überblick geben, wie sich die Temperatur der ZnS:Mn- und der Isolatorschichten zeitlich entwickelt. Abbildung 6.12 (a) zeigt eine, der Entwicklung von $p_t(z)$ ähnliche, stufenartige Erhöhung der ortsabhängigen Gittertemperatur $T_G(z)$ während der ersten zwei Perioden der Betriebsspannung ($V_0 = 117$ V, $f = 10$ kHz). Diese hat natürlich ihren Ursprung in den scharfen zeitlichen Maxima der elektrischen Stromdichte, die für die ohmsche Wärmeproduktion verantwortlich ist. Auch in diesem Fall stellt sich die Frage, wie

weit die Temperatur steigen wird und ob sie einen periodisch stationären Zustand (nach Definition 6.1) erreicht. Aus Abbildung 6.12 (b), in dem die ortsabhängige Temperatur am Ende einer Periode gegen die Zeit aufgetragen ist, wird deutlich, dass dies für die hier verwendeten Betriebsparameter tatsächlich der Fall ist. Nach etwa 400 Perioden steigt die Temperatur stark an und konvergiert schließlich gegen etwa 340 K. Auffällig ist hierbei die starke räumliche Homogenität der Gittertemperatur, welche auf die sehr hohe Wärmeleitfähigkeit der Materialien zurückzuführen ist. Wie die Gittertemperatur mit dem Zustand des Ladungsträgersystems, also mit P_t , zusammenhängt und ob es immer eine stabile, periodisch stationäre Temperatur gibt, soll in den nachfolgenden Abschnitten diskutiert werden.

Viel über das Verhalten eines zwei Komponenten Systems kann ausgesagt werden, wenn das Nullklinendiagramm des Systems bekannt ist. In einem solchen Diagramm werden in der zweidimensionalen Menge aller möglichen Zustände des Systems alle stationären Zustände der einzelnen Komponenten gekennzeichnet (vgl. Abschnitt 5.2). Leider erweist sich die Konstruktion des Nullklinendiagramms für unser System, ähnlich der des Konvergenzdiagramms, als etwas schwierig. Das Problem der Kennzeichnung eines bestimmten Zustands $(p_t(z), \rho_{l,r})$ des Ladungsträgersystems durch die integrierte Dichte der eingefangenen Löcher P_t (siehe Gl. 6.2) und die Definition des periodisch stationären Zustands durch Gleichung 6.1 haben wir bereits diskutiert. Aufgrund des intensiven Charakters des Temperaturbegriffs wird zur Zustandskennzeichnung der ortsabhängigen Gittertemperatur $T_G(z)$ die mittlere Temperatur

$$\bar{T}_G = \frac{1}{Lz_{nS}} \int_0^L T_G(z) dz \quad (6.9)$$

verwendet. Auch für einen stationären Zustand der Gittertemperatur ist eine notwendige Voraussetzung das Verschwinden einer Nettorate

$$\bar{R}_{T_G} = \frac{1}{L\tau} \int_t^{t+\tau} dt \int_0^L dz [D_G \frac{\partial^2}{\partial z^2} T_G + \frac{e}{c_L \rho} (\vec{j}_p - \vec{j}_n) \cdot \vec{E}]. \quad (6.10)$$

Um nun die stationären Zustände des Ladungsträgersystems in der P_t - \bar{T}_G -Ebene zu berechnen, wird die MISIM-Struktur homogen auf eine bestimmte, hohe Temperatur $\tilde{T} = \tilde{T}_{max}$ gesetzt und eine zu dieser Temperatur stationäre Dichte eingefangener Löcher berechnet, aus der dann P_t bestimmt wird. Anschließend wird zu dieser Dichte eine stationäre Lösung $T_G(z)$ der Temperaturgleichung berechnet. Auf diese Weise erhält man einen stationären Zustand des Ladungsträgersystems bei gegebener Temperatur (P_t, \tilde{T}) und einen stationären Zustand der Temperaturgleichung bei gegebener Raumladungsdichte (P_t, \bar{T}_G) . Im nächsten Schritt wird \tilde{T} um eine Schrittweite gesenkt und es werden wie im ersten Schritt die stationären Lösungen gesucht. Wurde auf diese Weise eine minimale Temperatur \tilde{T}_{min} erreicht, wird die Prozedur wiederholt wobei jedoch nach jedem Schritt \bar{T}_G erhöht wird, bis

die Ausgangstemperatur \tilde{T}_{max} erreicht ist. Sind die durch \bar{T}_G bezeichneten Temperaturverteilungen $T_G(z)$ räumlich nahezu konstant, so sind die durch \tilde{T} und \bar{T}_G^0 bezeichneten Zustände für $\tilde{T} = \bar{T}_G$ sehr ähnlich und die stabilen stationären Zustände des Ladungsträger- und Temperatursystems können in ein P_t - \bar{T}_G -Diagramm eintragen und als Nullklinen interpretiert werden. Die instabilen stationären Zustände lassen sich durch den verwendeten Algorithmus wiederum nicht berechnen.

6.3.2 Kleine Frequenzen

Abbildung 6.13 (a) zeigt für eine relativ kleine Betriebsfrequenz von 10 kHz und eine Amplitude von 109 V das Nullklinendiagramm. Die stabilen stationären Zustände des Ladungsträgersystems sind in der P_t - \bar{T}_G -Ebene durch die P_t -Linie und die der Temperaturgleichung durch die T_G -Linie gekennzeichnet. Wie oben erläutert, ist die Berechnung der instabilen stationären Zustände mit dem verwendeten Algorithmus nicht möglich, was zu den Unterbrechungen der Nullklinen führt. Betrachtet man die Nullkline des Ladungsträgersystems, so fällt auf, dass dieses für sehr hohe Gittertemperaturen nur einen stabilen Zustand bei sehr kleinen Dichten eingefangener Löcher (Tiefstromzustand) zeigt. Da bei hohen Temperaturen eingefangene Löcher sehr schnell wieder emittiert werden und so der Aufbau einer Raumladung verhindert wird, überrascht diese Erkenntnis kaum. Bei sehr tiefen Temperaturen werden aufgrund des sehr kleinen Emissionskoeffizienten einmal eingefangene Löcher kaum noch emittiert. Das Ladungsträgersystem besitzt unter solchen Umständen ebenfalls nur einen stabilen Zustand, welcher sich aber durch eine sehr hohe Dichte eingefangener Löcher (Hochstromzustand) auszeichnet. Bei mittleren Temperaturen jedoch führt die nichtlineare Struktur des Ladungsträgersystems zu zwei stabilen stationären Zuständen (Niedrig- und Hochstromzustand). Da die P_t -Linie die *stabilen* stationären Zustände kennzeichnet, kann gefolgert werden, dass die Nettorate der eingefangenen Löcher R_{p_t} oberhalb dieser Linie negativ und unterhalb positiv ist. Hieraus folgt, dass für jede Temperatur \bar{T}_G im bistabilen Intervall der Temperaturachse der nicht bekannte, instabile stationäre Zustand die P_t -Achse in einen attraktiven Bereich zum Tiefstromzustand und einen attraktiven Bereich zum Hochstromzustand unterteilt.

Im Gegensatz zur P_t -Linie steigen die beiden Abschnitte der T_G -Linie monoton mit der Dichte der eingefangenen Löcher, da, bei gleicher äußerer Spannungsamplitude, durch die höhere Raumladung das innere Feld und damit auch die Ladungsträgerströme steigen. Dies hat eine höhere ohmsche Wärmeproduktion und damit eine höhere Gittertemperatur zur Folge. Da die stabilen Zustände des Gesamtsystems, bestehend aus Ladungsträgern und Gittertemperatur, natürlich gleichzeitig stabile Zustände der einzelnen Systeme sein müssen, sind diese durch die Schnittpunkte der P_t - und der T_G -Linie im Nullklinendiagramm gekennzeichnet. Für eine Spannung von 109 V ergibt sich somit aus dem Diagramm 6.13 (a) ein stabiler Zustand

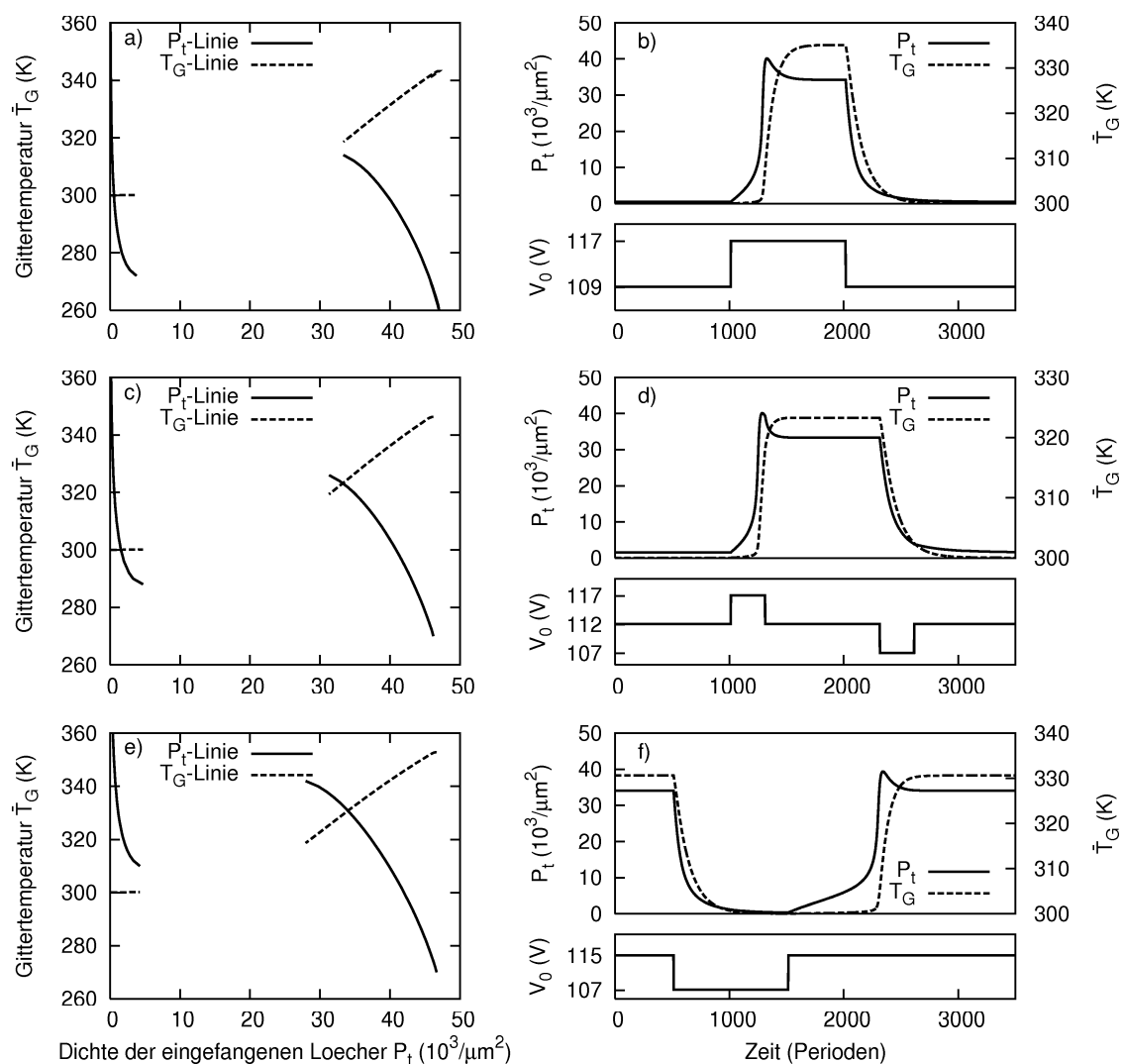


Abbildung 6.13: Linke Seite (a,c,e): Nullklinendiagramme für drei verschiedene Amplituden der Betriebsspannung bei einer Frequenz von 10 kHz. Rechte Seite (b,d,f): Entwicklung der Systemzustände (P_t , \bar{T}_G) nach Störungen in Form von kurzen Variationen der Amplitude V_0 der Betriebsspannung (Amplituden der Betriebsspannung: (a,b) 109 V, (c,d) 112 V, (e,f) 115V).

des Gesamtsystems bei $P_t \approx 400 \mu\text{m}^{-2}$ und $\bar{T}_G \approx 300 \text{ K}$.

Die zeitliche Entwicklung der, durch P_t und \bar{T}_G gekennzeichneten, Systemzustände nach einer äußeren Störung gibt Abbildung 6.13 (b) wieder. Das im stationären Zustand befindliche System wird zum Zeitpunkt $t = 1000$ Perioden (der Betriebsspannung) für etwa 1000 Perioden (= 0.1 s) durch eine Erhöhung der Amplitude um 8 V gestört und reagiert mit einer deutlichen Steigerung von P_t auf etwa $40 \cdot 10^3 \mu\text{m}^{-2}$. Erst etwas später steigt auch die Gittertemperatur an und verringert die Dichte der eingefangenen Löcher ein wenig, bevor \bar{T}_G und P_T stationär werden. Nach Abschalten der Störung kehren P_T und mit etwas Verspätung auch \bar{T}_G in den, im Nullklinendiagramm gezeigten, stationären Zustand zurück, wodurch die Qualität der von uns gemachten Näherungen bei der Konstruktion des Nullklinendiagramms noch einmal bestätigt werden.

Für die etwas höhere Spannung von 112 V verschiebt sich die Nullkline des Ladungsträgersystems (P_t -Linie) deutlich zu höheren Gittertemperaturen (Abbildung 6.13 (c)) und ein zweiter Schnittpunkt mit der Temperaturnullkline (T_G -Linie) bei hohen Dichten eingefangener Löcher entsteht. Die Reaktion des Systems auf kurzzeitige Spannungsveränderungen ist in Abbildung 6.13 (d) gezeigt. Eine kurze (≈ 300 Perioden) Erhöhung der Spannung um 5 V reicht aus, um das System dauerhaft vom Zustand niedriger Dichten in den Zustand hoher Dichten zu schalten. Die Rückkehr in den Anfangszustand kann nur durch kurzzeitiges (≈ 300 Perioden) senken der Amplitude um 5 V erreicht werden.

Eine weitere Erhöhung der Spannungsamplitude auf 115 V verschiebt die P_t -Linie zu noch höheren Gittertemperaturen, was den Schnittpunkt bei niedriger Dichte eingefangener Löcher verschwinden lässt, wie Abbildung 6.13 (e) zeigt. Eine kurzzeitige Reduzierung der Amplitude bewirkt in diesem Fall, dass die hohe Dichte eingefangener Löcher sehr schnell sinkt und dadurch auch die Gittertemperatur fällt. Kehrt die Amplitude zu ihrem alten Wert zurück, so steigen auch P_t und \bar{T}_G wieder an und konvergieren gegen den stationären Zustand.

Die Variation der Amplitude bewirkt also auch bei Berücksichtigung der Gittertemperatur die Entstehung und Vernichtung von stabilen stationären Zuständen mittels Sattel-Knoten-Bifurkationen. Eine Strom-Spannungs-Kennlinie würde also auch in diesem Fall eine Hysterese aufweisen, die aber aufgrund der positiven Steigung der Temperaturnullkline etwas schmaler ist als im Fall konstanter Gittertemperatur.

6.3.3 Hohe Frequenzen

Bei kleinen Betriebsfrequenzen sind die Zeitspannen starker, äußerer, elektrischer Felder natürlich länger als bei höheren Frequenzen. Da aber der Seitenwechsel der Oberflächenladungen schon nach kurzer Zeit ein starkes, inneres Gegenfeld erzeugt, sind die Zeitspannen eines starken Stromflusses und hoher ohmscher Wärmeproduk-

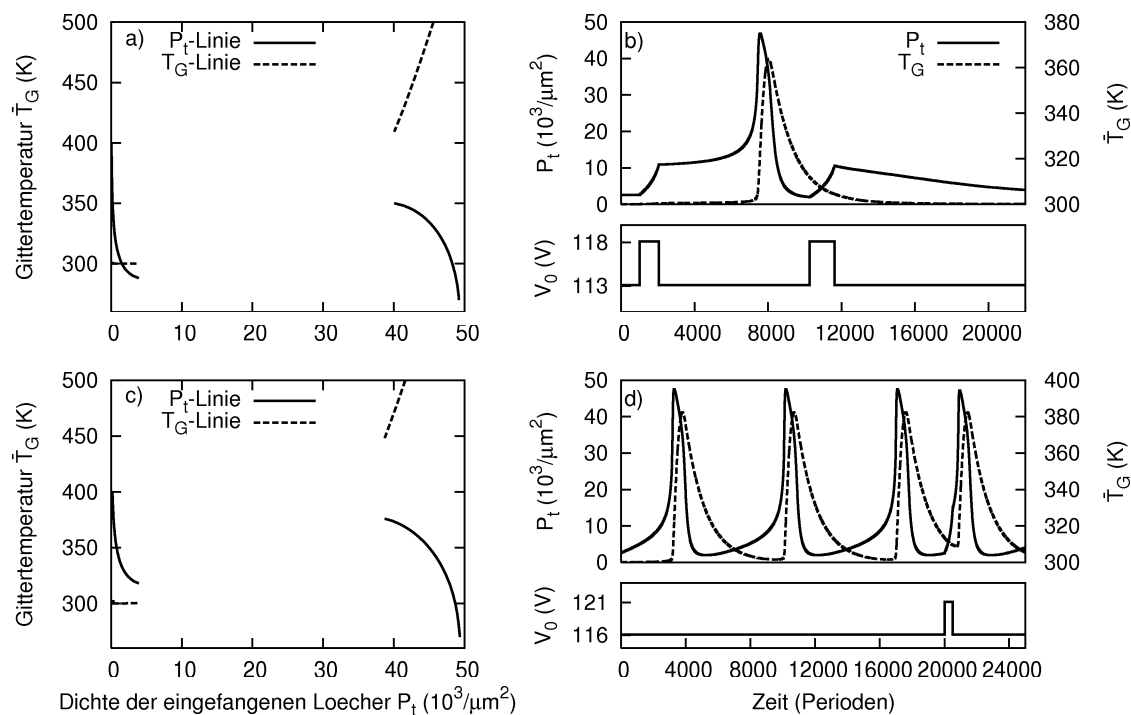


Abbildung 6.14: Linke Seite (a,c): Nullklinendiagramme für drei verschiedene Amplituden der Betriebsspannung bei einer Frequenz von 100 kHz. Rechte Seite (b,d): Entwicklung der Systemzustände (P_t , \bar{T}_G) nach Störungen in Form von kurzen Variationen der Amplitude der Betriebsspannung V_0 (Amplituden der Betriebsspannung: (a,b) 113 V, (c,d) 116 V).

tion nicht proportional zur Periodenlänge der Betriebsspannung. Da die Zeitspanne der Wärmeabgabe pro Periode aber proportional mit der Periodenlänge zunimmt, erhöht sich das Verhältnis von Wärmeproduktions- zur Emissionszeit mit der Betriebsfrequenz und führt so zu höheren stationären Gittertemperaturen, wie die, im Vergleich zu $f = 10$ kHz, sehr viel steileren Temperaturnullklinen für $f = 100$ kHz in den Abbildungen 6.14 (a,c) bestätigen.

Abbildung 6.14 (a) zeigt das Nullklinendiagramm der MISIM-Struktur bei einer Amplitude von 113 V. Der Schnittpunkt der beiden Nullklinen definiert den einzigen stabilen stationären Zustand des Systems bei relativ kleinem P_t . Allerdings fällt auf, dass schon eine kleine Erhöhung von P_t das Ladungsträgersystem in den attraktiven Bereich zum Zustand hoher Dichten eingefangener Löcher überführen kann (vgl. Kapitel 5.2). Abbildung 6.14 zeigt die Reaktion eines solchen Systems auf kurzzeitige Variationen der Amplitude. Bis zu einem Zeitpunkt von etwa 1500 Perioden bleibt das System in seinem, im Nullklinendiagramm ablesbaren, stationären Zustand mit

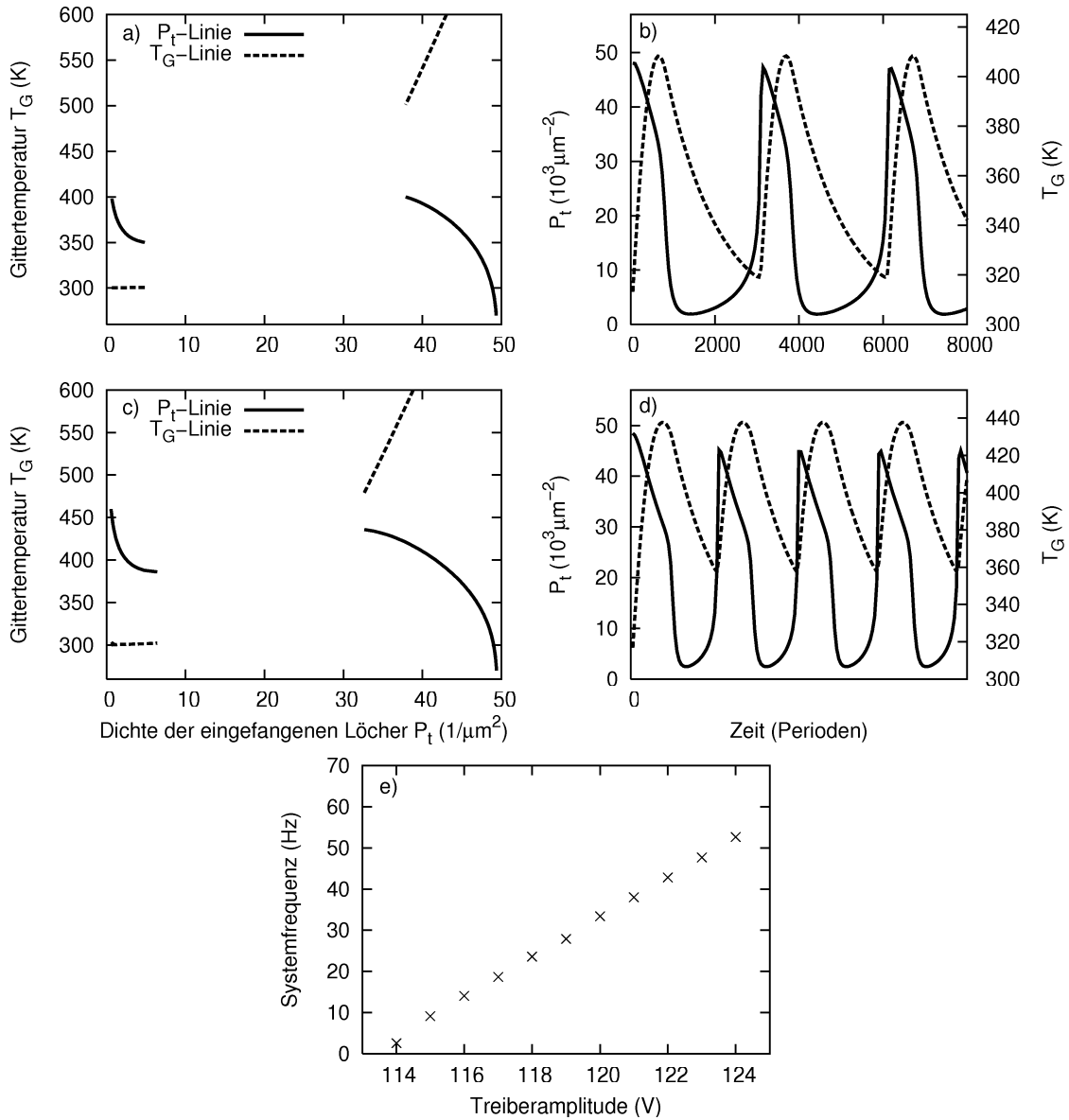


Abbildung 6.15: Nullklinendiagramme (a,c) und Systemdynamik (b,d) bei einer Amplitude von 120 V (a,b) und 124 V (c,d). In (e) ist die Frequenz der oszillierenden Systemdynamik über die Amplitude der Betriebsspannung aufgetragen ($f = 100$ kHz).

einer Flächendichte von $P_t \approx 5000 \mu\text{m}^{-2}$ und einer Gittertemperatur von $\bar{T}_G \approx 300$ K. Nachdem eine, etwa 1000 Perioden anhaltende, Erhöhung der Amplitude um 5 V die Dichte eingefangener Löcher auf $P_t \approx 10000 \mu\text{m}^{-2}$ angehoben hat, wächst diese auch nach Abschalten der Störung selbständig bis $P_t \approx 45000 \mu\text{m}^{-2}$ weiter. Diese hohe Raumladung hat jedoch ein stärkeres elektrisches Feld und eine höhere Stromdichte zur Folge, was durch ohmsche Wärmeproduktion zu einer Erwärmung des Gitters führt. Die höhere Temperatur sorgt nun für eine verstärkte Emission von Löchern aus Löcherfallen, wodurch P_t schnell abnimmt. Als Folge der nun ausbleibenden Wärmeproduktion fällt auch die Gittertemperatur ab. Da die Temperatur aber nur sehr langsam abnimmt, lässt sich das System nicht direkt nach dem Abfallen von P_t durch eine erneute Erhöhung der Amplitude ein weiteres mal anregen, sondern erst nachdem auch die Gittertemperatur ihren stationären Wert erreicht hat (ab etwa 9000 Perioden). Das System befindet sich zwischen 4000 und 9000 Perioden in einem so genannten refraktären Zustand. Systeme mit einer solchen Dynamik werden oft als anregbare Medien bezeichnet und spielen eine große Rolle bei der Erklärung von Ringwellen und Spiralmustern in höherdimensionalen Systemen.

Wird die Amplitude der Betriebsspannung auf 116 V erhöht, so verschwindet der stabile stationäre Zustand bei kleinen P_t wie Abbildung 6.14 deutlich macht. Da aber, bedingt durch die starke Steigung der Temperaturnullklinen, auch kein stabiler Zustand bei hohen P_t entsteht, kann nur ein instabiler stationärer Zustand existieren. Von diesem wird das System nicht angezogen, kann aber aufgrund der beschränkten Löcherfallendichte auch nicht divergieren. Stattdessen folgt das System der in 6.14 (d) gezeigten periodischen Dynamik. Bei kleinen Gittertemperaturen nimmt P_t schnell zu und erreicht nach etwa 4000 Perioden einen Spitzenwert von fast $50000 \mu\text{m}^{-2}$. Durch die wachsende Stromdichte erhöht sich die Gittertemperatur und P_t sinkt bis auf sehr kleine Werte ab, wodurch auch die Wärmeproduktion extrem verringert wird. Die Temperatur geht infolge dessen bis auf ihren ursprünglichen Wert zurück und der Kreislauf beginnt von vorn. Die Periodenlänge dieser Dynamik lässt sich im Diagramm ablesen und beträgt etwa 7000 Perioden der Betriebsspannung, was in etwa 0.07 s entspricht. Die Amplitude ist also auch bei hohen Frequenzen ein kritischer Parameter, bei dessen Variation an einem kritischen Wert aus einem stabilen stationären Zustand ein stabiler Grenzzyklus wird und das System somit eine Hopfbifurkation durchläuft. Durch eine kurze Störung in Form einer Amplitudenerhöhung bei $t \approx 20000$ Perioden, kann eine Phasenverschiebung der Systemdynamik erreicht werden. In ausgedehnten Medien zeigen Systeme mit einer periodischen eindimensionalen Dynamik häufig ein räumlich, zeitlich oder raum-zeitlich periodisches Verhalten [Mur89].

Eine weitere Erhöhung der Amplitude auf 120.0 V bewirkt die in Abbildung 6.15 (a) gezeigte Verschiebung der P_t -Nullklinen zu noch höheren Gittertemperaturen, was zu der in Abbildung 6.15 (b) ablesbaren Verkürzung der Periodendauer der Systemdynamik auf etwa 3000 Perioden führt. Bei einer Amplitude von 124 V wird

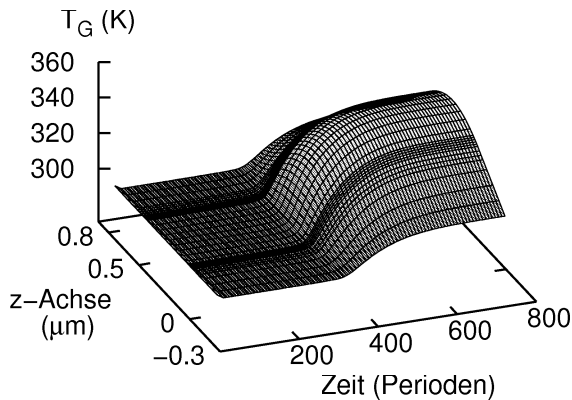


Abbildung 6.16: Zeitliche Entwicklung der Gittertemperatur über einige hundert Perioden bei geringer Wärmeleitfähigkeit. Aufgetragen sind hierbei nur die Temperaturen am Ende einer Periode. Sinusförmige Wechselspannung mit $V_0 = 117$ V, $f = 10$ kHz.

das System durch das Nullklinendiagramm 6.15 (c) beschrieben, aus dem hervorgeht, dass das System sich bei anhaltender Amplitudenerhöhung allmählich einem stabilen, stationären Zustand mit hoher Dichte eingefangener Löcher nähert. Dies spiegelt sich auch in der entsprechenden periodischen Systemdynamik (Abbildung 6.15 (d)) wieder, dessen Periodenlänge nun auf etwa 1900 Perioden gesunken ist. Wird die Amplitude der Betriebsspannung weiter erhöht, so sinkt die Amplitude der periodischen Systemdynamik sehr schnell, während dessen Frequenz weiter zunimmt. Bei einer Amplitude von 125 V zeigt das Nullklinendiagramm einen stabilen, stationären Zustand bei hohen Dichten eingefangener Löcher und die Systemdynamik verliert ihren oszillierenden Charakter (umgekehrte Hopfbifurkation). Abbildung 6.15 (e) zeigt die Frequenz der periodischen Systemdynamik als Funktion der Betriebsamplitude und offenbart einen nahezu linearen Zusammenhang.

6.3.4 Einfluss der Wärmediffusionskonstante

Natürlich hat ein Experimentator kaum Einfluss auf die Wärmeleitfähigkeit des ZnS:Mn, trotzdem werden wir diese, aus noch zu diskutierenden Gründen, in einigen Abschnitten dieser Arbeit stark senken. In diesem Abschnitt sollen deshalb die Auswirkungen einer verringerten Wärmeleitfähigkeit auf die zeitliche Entwicklung der Gittertemperatur $T_G(z)$ und auf die Nullklinen in einem eindimensionalen Modell diskutiert werden.

Als Vergleich zu der Entwicklung bei hoher Wärmeleitfähigkeit, zeigt Abbildung 6.16 für $D_G = 10^1 \mu\text{m}^2\text{s}^{-1}$ aber ansonsten gleichen Parametern ($f = 10$ kHz, $U = 117$ V) die Veränderung der ortsabhängigen Gittertemperatur über einige hundert Perioden. Auch in diesem Fall steigt die Temperatur in der ZnS:Mn-Schicht und den Isolatoren nach etwa 400 Perioden stark an und konvergiert gegen ein stationäres Profil. Dieses zeigt aber, im Unterschied zum Fall hoher Wärmeleitfähigkeit,

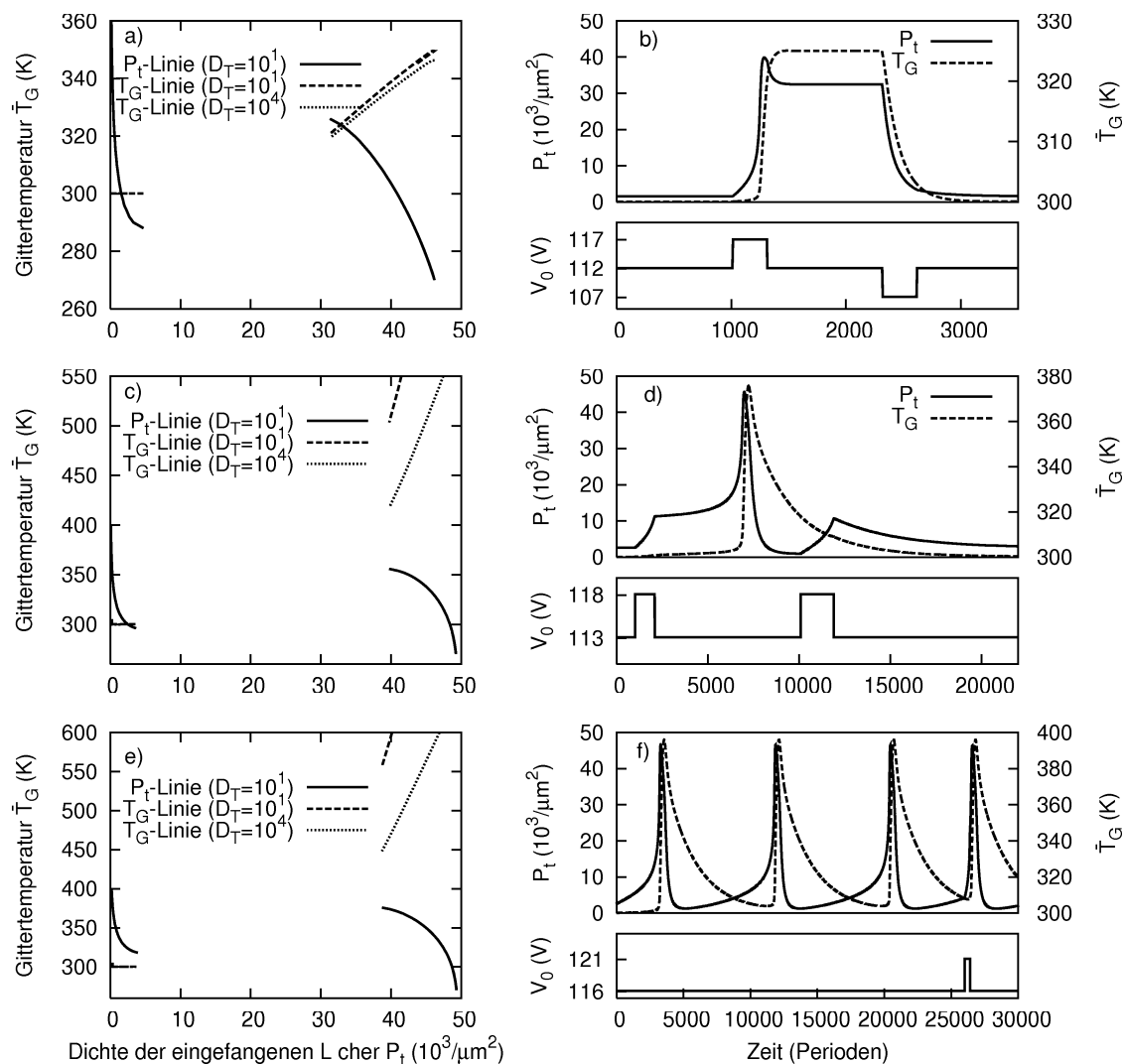


Abbildung 6.17: linke Seite: Nullklinendiagramme für drei verschiedene Betriebsbedingungen. Rechte Seite (b,d,f): Entwicklung der Systemvariablen (P_t , T_G) nach Störungen in Form von kurzen Variationen der Amplitude der Betriebsspannung V_0 . Betriebsspannung: (a,b) $V_0 = 112$ V, $f = 10$ kHz, (c,d) $V_0 = 113$ V, $f = 100$ kHz (e,f) $V_0 = 116$ V, $f = 100$ kHz; Temperaturdiffusionskoeffizient: $D_G = 10^1 \mu\text{m}^2\text{s}^{-1}$

ein deutliches Maximum in der Mitte der ZnS:Mn-Schicht. Verantwortlich hierfür ist der langsamere Wärmetransport, welcher Temperaturunterschiede innerhalb des Bauelements nicht so schnell ausgleicht.

Da die Konstruktion der Nullklinendiagramme auf der Annahme einer homogenen Temperatur innerhalb der ZnS-Schicht beruht, sollte die Gültigkeit dieser Diagramme für die zeitliche Dynamik eines Systems im Fall geringer Wärmeleitfähigkeit überprüft werden. Abbildung 6.17 (a) zeigt das Nullklinendiagramm der MISIM-Struktur bei einer Betriebsfrequenz von 10 kHz und einer Amplitude von 112 V. Dargestellt sind die Nullklinen des Ladungsträgersystems und der Gittertemperatur bei hoher ($D_G = 8.5 \cdot 10^4 \mu\text{m}^2\text{s}^{-1}$) und niedriger ($D_G = 10^1 \mu\text{m}^2\text{s}^{-1}$) Wärmeleitfähigkeit. Während die P_t -Linien aufgrund des Konstruktionsalgorithmus natürlich exakt übereinander liegen, weichen die Nullklinen der Gittertemperatur bei hohen Dichten eingefangener Löcher leicht voneinander ab. Aufgrund des langsameren Wärmeabtransportes ist die Steigung der Nullklinen bei kleinem D_G größer. Entsprechend gering ist auch der Unterschied der zeitlichen Dynamik, wie Abbildung 6.17 (b) bestätigt. Auch bei kleiner Wärmeleitfähigkeit lässt sich das System durch kurzzeitiges Erhöhen und Verringern der Amplitude in den Hoch- bzw. Tiefstromzustand schalten.

Sehr viel deutlicher unterscheidet sich die Steigung der Temperaturnullklinen bei einer Betriebsfrequenz von 100 kHz und einer Amplitude von 113 V, wie Abbildung 6.17 (c) deutlich macht, jedoch bleibt auch in diesem Fall die Struktur des Nullklinendiagramms erhalten. Folglich zeigt auch die eindimensionale Dynamik in Abbildung 6.17 (d) ein zum Fall hoher Wärmeleitfähigkeit ähnliches Verhalten. Das im stationären Zustand befindliche System wird durch eine kurze Amplitudenerhöhung angeregt, wodurch die Dichte eingefangener Löcher selbständig auf etwa $50 \cdot 10^3 \mu\text{m}^{-2}$ steigt, bevor diese, bedingt durch die Temperaturerhöhung, sogar deutlich unter den stationären Wert sinkt. Da die Temperatur bei niedriger Wärmeleitfähigkeit noch langsamer sinkt als bei hoher, befindet sich das System für eine noch längere Zeit in einem refraktären Zustand.

Auch bei einer Amplitude von 116 V ändern sich die wesentlichen Merkmale des Nullklinendiagramms durch Variation der Wärmeleitfähigkeit nicht, wie Abbildung 6.17 (e) belegt. Zwar wird auch hier die Temperaturnullkline etwas steiler, der oszillierende Charakter des Systems bleibt jedoch erhalten. Aus der in Abbildung 6.17 (f) gezeigten Systemdynamik lässt sich ablesen, dass beim Ansteigen der Raumladungsdichte die Temperatur schneller folgt als im Fall großer Wärmeleitfähigkeit, während nach dem Abklingen von P_t die Temperatur länger benötigt um zu sinken. Beide Effekte sind auf den langsameren Abtransport von Wärme aus dem Inneren der ZnS-Schicht zu den Randflächen zurückzuführen und führen insgesamt zu einer etwas längeren Periodendauer von etwa 9000 Perioden. Wiederum lässt sich durch eine kurze Erhöhung der Amplitude eine Phasenverschiebung herbeiführen.

Auch wenn bei kleinen Wärmeleitfähigkeiten die Bauelementtemperatur räum-

lich deutlich inhomogener ist, lässt sich das System qualitativ und quantitativ gut durch die eingeführten Nullklinendiagramme beschreiben. Trotzdem sollte man sich über die gemachten Näherungen stets im klaren sein.

Kapitel 7

Musterbildung in 2D

Bisher wurde das Langzeitverhalten einer in x- und y-Richtung perfekt homogenen MISIM-Struktur untersucht, was auf ein effektiv eindimensionales Gleichungssystem führte. Charakteristisch für das System waren in diesem Fall die Anzahl und Stabilität der stationären Lösungen des Gleichungssystems und die Art der Attraktoren im Phasenraum. Natürlich kommt ein solches System real nie vor, da einerseits die Anfangsbedingungen nicht perfekt homogen präpariert werden können und andererseits das Bauelement selbst erhebliche Inhomogenitäten (z.B. in der Schichtdicke, Dotierung,...) aufweist. In diesem Abschnitt wird nun eine nur noch in y-Richtung ideal homogene MISIM-Struktur betrachtet, während in x-Richtung Inhomogenitäten zugelassen und gezielt erzeugt werden.

7.1 Konstante Bauteiltemperatur

Bevor wir die zweidimensionale Dynamik des Systems aus Ladungsträger und Gittertemperatur diskutieren, ist es hilfreich, in einem ersten Schritt lediglich die Dynamik des Ladungsträgersystems für inhomogene Anfangsbedingungen bei verschiedenen aber zeitlich und räumlich konstanten Gittertemperaturen zu kennen und zu verstehen.

Für eine MISIM-Struktur die mit einer sinusförmigen Wechselspannung der Frequenz $f = 10$ kHz und der Amplitude $V_0 = 110$ V betrieben wird, ergibt sich, wie in Kapitel 3 ausführlich diskutiert, eine nicht monotone Ladungsträgernullkline. In Abbildung 7.1 (a) ist diese zusammen mit den trivialen Temperaturnullklinen verschiedener, zeitlich und räumlich konstanter Gittertemperaturen noch einmal gezeigt. Offensichtlich besitzt ein in x- und y-Richtung homogenes Ladungsträgersystem bei einer Gittertemperatur von $T_G = 300$ K zwei stabile stationäre Zustände, von denen einer durch niedrige Raum- und Oberflächenladungsdichten $p_t^l(z)$ und $\rho_{l,r}^l$ charakterisiert ist, während der andere vergleichsweise hohe Dichten $p_t^h(x)$ und $\rho_{l,r}^h$ aufweist. Ein inhomogener Anfangszustand des Ladungsträgersystems in einer zweidimensionalen Simulation wird nun durch

$$p_t^0(x, z) = \begin{cases} p_t^l(z) & : x \notin X^h \\ p_t^h(z) & : x \in X^h \end{cases} \quad \rho_t^0(x) = \begin{cases} \rho_t^l & : x \notin X^h \\ \rho_t^h & : x \in X^h \end{cases} \quad (7.1)$$

präpariert, wobei X^h die Teilmenge der x-Achse bezeichnet, die in einen Hochstromzustand gesetzt werden soll. In diesem Abschnitt sei $X^h = [12 \mu\text{m}, 28 \mu\text{m}]$ also ein etwa $14 \mu\text{m}$ breiter, zusammenhängender Bereich in der Mitte der simulierten x-Achse. Es soll nun in Abhängigkeit von der Gittertemperatur untersucht werden, ob und wie sich der Hoch- und Tiefstrombereich gegenseitig in ihrer zeitlichen Entwicklung beeinflussen.

Abbildung 7.1 (b) zeigt in einem Oberflächendiagramm die zeitliche Entwicklung

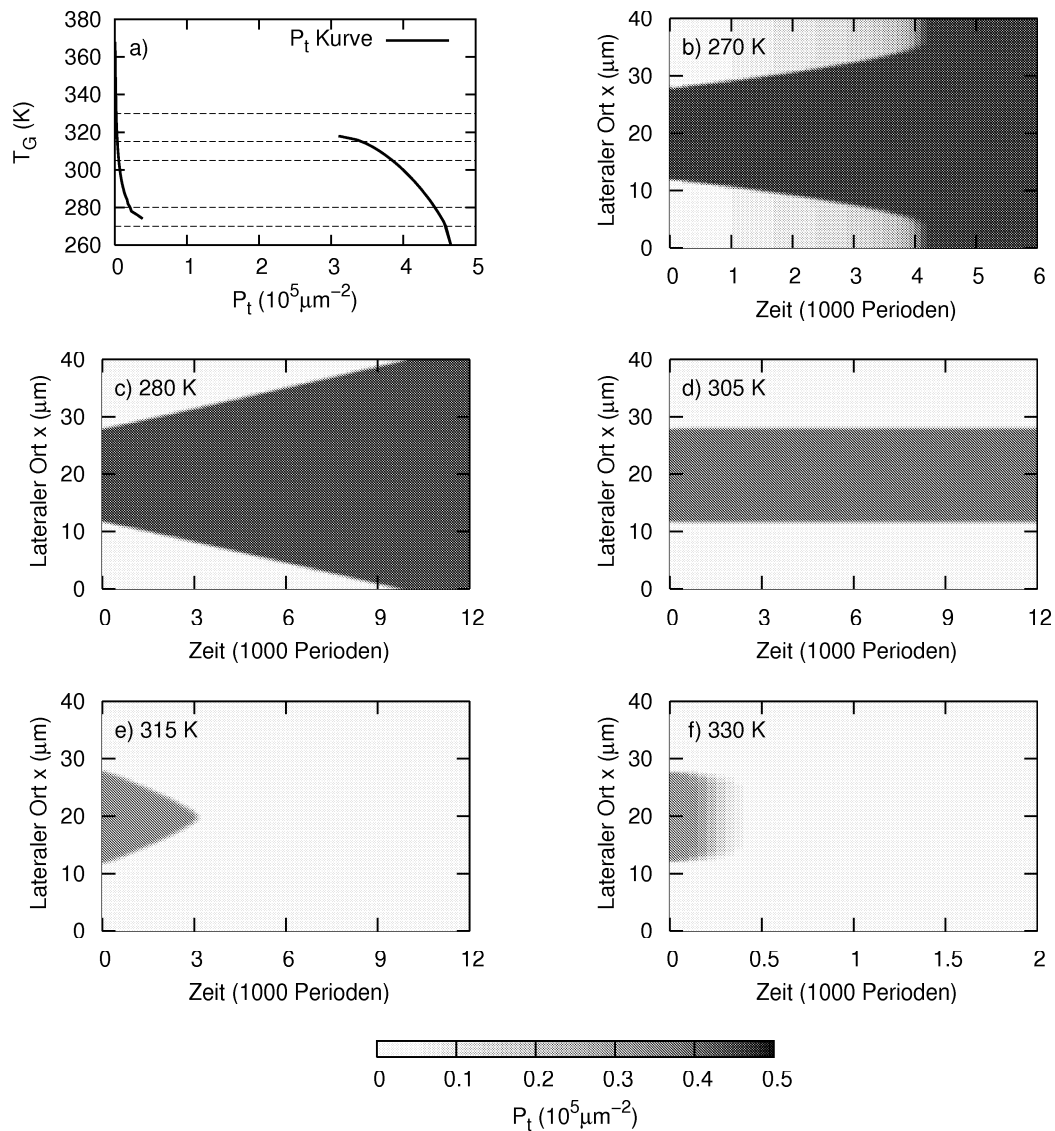


Abbildung 7.1: a) Nullkinendiagramm mit der Ladungsträgernulklie (P_t -Kurve) und Geraden bei den Temperaturen 270, 280 K, 305 K, 315 K und 330 K. b)-f) Zeitliche Entwicklung der Dichte eingefangener Löcher $P_t(x)$ nach der Initialisierung mit inhomogenen Anfangsbedingungen. (Zeit in Einheiten der Periodenlänge der Betriebsspannung, $U = 110 \text{ V}$, $f = 10 \text{ kHz}$)

der über die z-Achse integrierten Dichte der eingefangenen Löcher

$$P_t(t, x) = \int_0^{L_z} p_t(t, x, z) dz \quad (7.2)$$

bei einer Gittertemperatur von $T_G = 270$ K. Die Zeit ist dabei in Perioden der Betriebsspannung angegeben. Zwar breitet sich der Hochstrombereich anfangs aus, nach etwa 4000 Perioden wechselt jedoch die gesamte x-Achse in den Hochstromzustand. Bei Berücksichtigung des Nullklinendiagramms ist dies nicht sehr überraschend, da bei der gegebenen Gittertemperatur nur ein stabiler, stationärer Zustand mit einer hohen Dichte eingefangener Löcher existiert und somit das ganze System von Anfang an gegen diesen Zustand konvergiert. Die Tiefstrombereiche an der Grenze des Hochstrombereichs konvergieren dabei lediglich etwas schneller, da einige der im Hochstrombereich produzierten freien Löcher in den grenznahen Tiefstrombereich diffundieren und so den Aufbau der Raumladungsdichte beschleunigen.

Eine Temperatur von $T_G = 330$ K, die dem System, wie im Nullklinendiagramm zu sehen, einen stabilen, stationären Zustand mit einer kleinen Dichte eingefangener Löcher bietet, führt zu der in Abbildung 7.1 (f) gezeigten Entwicklung der Hoch- und Tiefstrombereiche. Der gesamte Hochstrombereich wechselt nach etwa 400 Perioden in den Tiefstromzustand, wobei die Grenzgebiete des Hochstrombereichs wiederum etwas schneller konvergieren, da diese durch Diffusion freie Löcher an den Tiefstrombereich verlieren.

Wesentlich interessantere Entwicklungen bieten Temperaturen, bei denen das Nullklinendiagramm zwei verschiedene stabile, stationäre Zustände erkennen lässt. In einer solchen Situation werden Gebiete tief im Inneren eines Hochstrombereichs im Hochstromzustand bleiben, da ihre Umgebung annähernd homogen ist und sie somit der eindimensionalen Dynamik folgen. Entsprechendes gilt auch für Gebiete im Inneren der Tiefstrombereiche. Die Entwicklung der inhomogenen Grenzgebiete an den Übergängen zwischen den Hoch- und Tiefstrombereichen hängt jedoch empfindlich von der Gittertemperatur ab.

Wie in Abbildung 7.1 (c) für $T_G = 280$ K dargestellt, bleibt die scharfe Trennung der Hoch- und Tiefstrombereiche erhalten. Die Übergangsfrenten zwischen diesen Bereichen bewegen sich jedoch in Richtung des Tiefstrombereichs, bis ein über das gesamte Simulationsgebiet ausgedehnter homogener Hochstromzustand erreicht ist. Genau entgegengesetzt verläuft die zeitliche Entwicklung der Bereiche bei einer Gittertemperatur von $T_G = 315$ K, wie aus Abbildung 7.1 (e) deutlich wird. Die Übergangsfrenten bewegen sich in Richtung des Hochstrombereichs und löschen diesen nach etwa 3000 Perioden vollständig aus. Die Vermutung liegt nahe, dass es eine Gittertemperatur gibt, bei der die Frontgeschwindigkeiten verschwinden. Dieser Fall ist in Abbildung 7.1 (d) gezeigt und tritt ein bei einer Gittertemperatur von $T_G \approx 305$ K.

Auch dieses Verhalten lässt sich mit Hilfe des Nullklinendiagramms erklären.

Betrachtet man die Temperaturkurve zu der Situation in Abbildung c) d.h zu $T_G = 315\text{K}$ so fällt auf, dass diese nur wenig unterhalb des Maximums der P_t -Kurve liegt. Somit reichen schon relativ kleine Störungen, um das System aus dem stabilen Hochstromzustand in den attraktiven Bereich des Tiefstromzustandes zu bringen, während andererseits ein System im Tiefstromzustand sehr stark gestört werden müsste, um in einen Hochstromzustand zu wechseln. Berühren sich in einem durch Diffusion räumlich gekoppelten System nun ein Tief- und Hochstrombereich, so stören sich die beiden Bereiche in der Umgebung des Berührungspunktes gegenseitig und der stabilere Zustand setzt sich durch. Während dieser stabilere Zustand für eine Gittertemperatur von 315 K der Tiefstromzustand ist, dominiert bei $T_G = 280$ K der Hochstromzustand. Die nahezu still stehenden Übergangsfrenten des Systems bei $T_G = 305$ K, sind auf ähnliche Stabilitäten des Hoch- und Niedrigstromzustandes zurückzuführen. Die Gittertemperatur, bei der die Frontgeschwindigkeit v_F verschwindet, spielt in späteren Diskussionen eine Rolle und wird von nun an mit T_G^F bezeichnet. Diese ist natürlich von der Amplitude und Frequenz der Betriebsspannung abhängig.

7.2 Bistabiles System - kleine Frequenzen

7.2.1 Inhomogene Anfangsbedingungen

Berücksichtigt man die Selbsterwärmung der MISIM-Struktur durch ohmsche Wärmeproduktion, so steigt die Temperatur mit der mittleren elektrischen Feldstärke an und die flachen Temperaturnullklinen aus dem letzten Abschnitt müssen durch mit P_t ansteigende Kurven ersetzt werden (vgl. Abschnitt 6.3). Für ein zweidimensionales System bedeutet dies, dass an Orten hoher Raumladungsdichte viel Wärme produziert wird, welche durch das Gitter diffundiert und an anderen Orten den Aufbau einer Raumladung beeinflusst. Dieses Zusammenspiel der beiden Komponenten in einem System, welches mit zwei verschiedenen inhomogenen Anfangsbedingungen der Form 7.1 gestartet wurde, ist in den Abbildungen 7.2 (a)-(f) für eine Spannungsamplitude von 110 V und eine Frequenz von 10 kHz zu sehen. Die zeitliche Entwicklung der Dichte eingefangener Löcher aus einem anfangs breiten Hochstrombereich ($X^h = [15\ \mu\text{m}, 25\ \mu\text{m}]$) zeigt Abbildung 7.2 c), während Abbildung 7.2 d) die entsprechende Entwicklung der mittleren Gittertemperatur

$$\bar{T}_G(x) = \frac{1}{\tau L_{ZnS}} \int_0^L \int_t^{t+\tau} T_G(t, x, z) dt dz \quad (7.3)$$

veranschaulicht. Der breite Hochstrombereich verjüngt sich erst schnell und dann immer langsamer, bis er nach etwa 30000 Perioden wieder ein wenig breiter wird, um schließlich gegen eine Ausdehnung von etwa $4\ \mu\text{m}$ zu konvergieren. Gleichzeitig

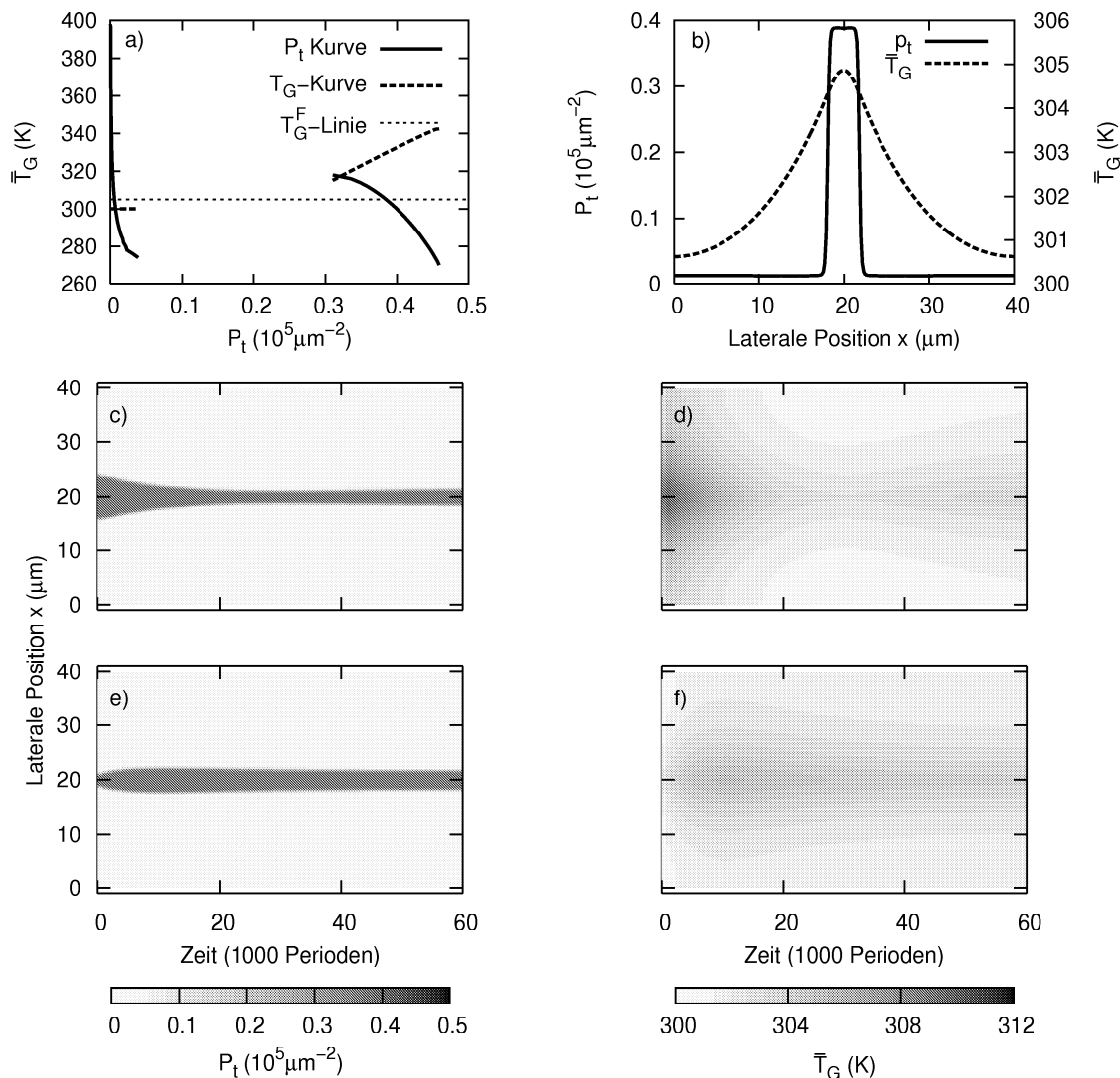


Abbildung 7.2: Nullklinendiagramm mit Nullklinen des Ladungsträgersystems und der Gittertemperatur (a), Dichte der eingefangenen Löcher P_t und Gittertemperatur \bar{T}_G als Funktion des Ortes x nach 60000 Perioden (b), zeitliche Entwicklung der Dichte eingefangener Löcher (c,e) und der Gittertemperatur (d,f) aus einem anfangs breiten (c,d) und aus einem anfangs schmalen Hochstrombereich (e,f). ($U = 110$ V, $f = 10$ kHz)

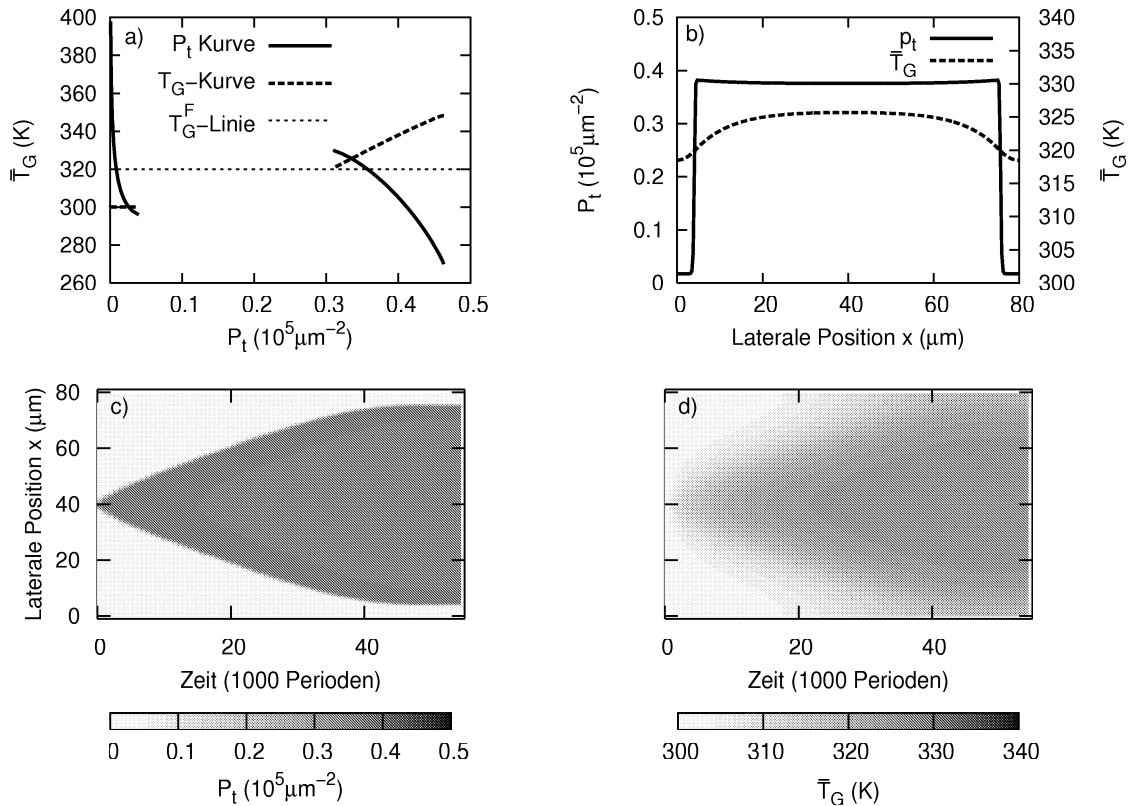


Abbildung 7.3: Nullklinendiagramm mit Nulklinen des Ladungsträgersystems und der Gittertemperatur (a), Dichte der eingefangenen Löcher P_t und Gittertemperatur \bar{T}_G als Funktion des Ortes x nach 50000 Perioden (b), zeitliche Entwicklung der Dichte eingefangener Löcher (c) und der Gittertemperatur (d) aus einem anfangs schmalen Hochstrombereich. ($U = 113$ V, $f = 10$ kHz)

kühlt das anfangs in der Umgebung des Hochstrombereichs sehr warme Gitter erst schnell ab, erhitzt sich ab etwa 30000 Perioden leicht und bildet dann ebenfalls ein räumlich inhomogenes, stationäres Temperaturprofil mit einem Maximum von etwa 305 K im Zentrum des Hochstrombereichs.

Mit Hilfe des Nullklinendiagramms in Abbildung 7.2 (a) und der eingezeichneten T_G^F -Linie lässt sich dieses Verhalten erklären. Ohne die räumliche Kopplung der Gittertemperatur durch Diffusion würde die Temperatur innerhalb des Hochstrombereichs, dem stationären Zustand entsprechend, etwa 320 K betragen, während das Gitter innerhalb des Tiefstrombereichs etwa 300 K warm wäre. Durch den Wärmediffusionsprozess stellt sich in der Umgebung einer Übergangsfrent eine Gittertem-

peratur ein, die zwischen den Temperaturen der stationären Zustände liegt. Aus Abbildung 7.2 (d) geht hervor, dass diese Temperatur anfangs deutlich über T_G^F liegt und so zu einer Frontbewegung in Richtung des Hochstrombereichs führt. Da dieser dadurch kleiner wird, überlagern sich irgendwann die Wärmediffusionsprozesse an den beiden Fronten, wodurch die Temperatur in der Umgebung des Hochstrombereichs stark abnimmt, was wiederum eine Abnahme der Frontgeschwindigkeiten zur Folge hat. Da der Wärmediffusionsprozess stark gegenüber dem Diffusionsprozess des Ladungsträgersystems ist, unterschreitet die Temperatur an den Fronten den Wert T_G^F bevor die Diffusionsprozesse der Ladungsträger an den beiden Übergangsfrenten sich gegenseitig beeinflussen. Die Frontgeschwindigkeiten kehren sich also um und der Hochstrombereich wächst ein wenig, wodurch die Temperaturen an den Fronten etwas steigen bis sie $T_G^{k'}$ erreichen und die Frontgeschwindigkeiten verschwinden. Abbildung 7.2 (b) zeigt das stationäre Profil der Dichte eingefangener Löcher und der Temperatur nach 60000 Perioden der Betriebsspannung. Deutlich zu erkennen sind die Temperaturen von ≈ 305 K an den Fronten des P_t -Profils, die weitere Frontbewegungen verhindern.

Die Entwicklung eines anfangs sehr schmalen Hochstrombereichs ($X^h=[19 \mu\text{m}, 21 \mu\text{m}]$) ist in Abbildung 7.2 (e) gezeigt und bestätigt die vorangegangene Argumentation. Aufgrund der anfangs niedrigen Gittertemperatur an den Fronten (7.2 (f)) wächst der Hochstrombereich, was zu einer Erwärmung des Gitters und einer Reduktion der Frontgeschwindigkeiten führt. Schließlich bildet sich ein stabiler Hochstrombereich mit der gleichen Ausdehnung, die auch in Abbildung 7.2 (c) gefunden wurde.

In beiden Fällen bildet sich also ein stationärer Hochstrombereich, dessen Breite nur von den Systemparametern und nicht von den Anfangsbedingungen abhängt. Einen solchen stabilen, stationären Hochstrombereich in mitten eines Tiefstrombereichs werden wir künftig Hochstromfilament nennen.

Bei einer Spannung von 113 V verändert sich das entsprechende Nullklinendiagramm nur quantitativ, wie Abbildung 7.3 (a) deutlich macht. Nach wie vor besitzt das System zwei stabile, stationäre Zustände, von denen einer oberhalb und der andere unterhalb der T_G^F -Linie liegt. Allerdings ist der Temperaturunterschied zwischen oberen stationären Zustand und der Temperatur $T_G^{k'}$ sehr viel geringer als bei 110 V. Dies hat entscheidenden Einfluss auf die zeitliche Entwicklung eines mit inhomogenen Anfangsbedingungen ($X^h=[19 \mu\text{m}, 21 \mu\text{m}]$) gestarteten Systems. Abbildung 7.1 (c) zeigt, dass die Fronten des P_t -Profils in Richtung des Tiefstrombereichs laufen und sich der Hochstrombereich somit ausbreitet. Dabei ist die Frontgeschwindigkeit lange Zeit konstant und völlig unabhängig von der Breite des Hochstrombereiches. Erst wenn sich die Übergangsfrenten den Rändern des Simulationsgebietes bei $x = 0$ und $x = 40$ nähern, werden die Fronten langsamer und kommen schließlich zum Stillstand.

Wenn wir die Gittertemperaturen an den Fronten betrachten, fällt auf, dass diese zwar wiederum zwischen den Temperaturen der stationären Zustände liegen,

allerdings unterhalb von T_G^H was die Bewegungsrichtung der Fronten erklärt. Der entscheidende Unterschied zu der Situation bei einer Amplitude von 110 V ist aber, dass die Fronttemperatur nicht nur für sehr kleine Hochstrombereiche unterhalb von T_G^H liegt sondern auch wenn der Bereich so groß ist, dass die Diffusionsprozesse der Gittertemperatur an den beiden Fronten sich gegenseitig nicht mehr überlagern. Die Fronten würden sich also auf einem unendlichen Simulationsgebiet für alle Zeiten mit konstanter Geschwindigkeit in die gleiche Richtung bewegen. Unsere Simulation ist jedoch in x-Richtung mit periodischen Randbedingungen ausgestattet, so dass die Fronten sich aufeinander zu bewegen. Kommen sie sich nahe genug, so überlagern sich die Wärmediffusionsprozesse der beiden Fronten, was in diesem Fall zu einer Zunahme der Fronttemperaturen führt. Die Fronten werden also langsamer und kommen schließlich zum Stillstand, bevor der Hochstrombereich das gesamte Simulationsgebiet ausfüllt. Für hohe Amplituden ist also die Breite des Tiefstrombereichs eine von den Anfangsbedingungen unabhängige Größe.

Zusammenfassend lässt sich also sagen, dass wenn die Temperatur des Hochstromzustands oberhalb und die des Tiefstromzustands unterhalb von T_G^F liegt zwei Fronten eine repulsive Wechselwirkung aufeinander ausüben. Diese ist Folge der starken Wärmediffusion, die die Gittertemperatur in einer großen Umgebung der Front beeinflusst und somit auch die Frontgeschwindigkeit einer in diese Umgebung eindringenden anderen Front variiert. Die Richtung in der eine einzelne, ungestörte Front wandert hängt von der relativen Lage von T_G^H zu den Temperaturen der stationären Zustände ab.

7.2.2 Inhomogenes Bauelement

Realistischer als die in den letzten Abschnitten diskutierten willkürlich gesetzten inhomogenen Anfangsbedingungen ist die Annahme eines inhomogenen Bauelements. Beispielsweise werden in realen MISIM-Strukturen Eigenschaften wie die Schichtdicken, die Dotierung oder das Fermi-niveau mit der lateralen Position x variieren. Wir wollen in dieser Arbeit keine ausgereiften Modelle und daraus folgende statistische Verteilungen für Unregelmäßigkeiten in der MISIM-Struktur diskutieren, sondern nur exemplarisch zeigen, dass auch in nicht homogenen Bauelementen Strukturbildungen auftreten. Hierzu nehmen wir an, dass die Fermienergie x -abhängig ist und auf einer Längenskala variiert, die viel kleiner ist als die beobachteten Ausdehnungen der Filamente aber nicht so klein, dass die für den Tunnelstrom folgenden Inhomogenitäten durch den Diffusionsprozess der Elektronen während einer Schichtdurchquerung herausgemittelt werden. Für die verwendete Diskretisierung von 512 Punkten auf 80 μm haben wir eine Variation der Fermienergie an jedem dritten Gitterpunkt zugelassen, wobei wir einen Gaußverteilten Faktor $\sigma(m, p)$ mit dem Mittelwert $m = 1$ und der Standardabweichung $p = 0.01$ angenommen haben. Für

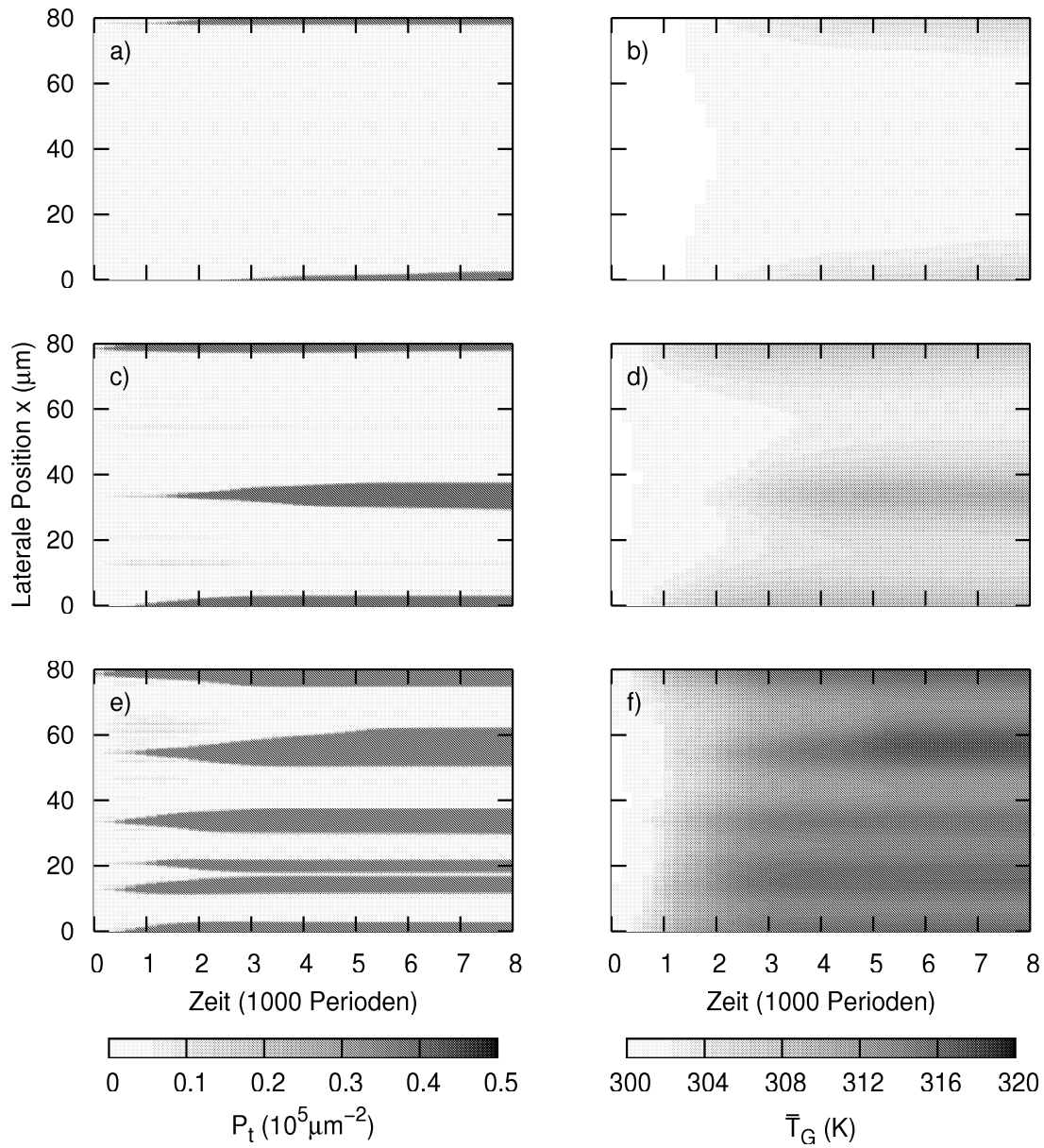


Abbildung 7.4: Zeitliche Entwicklung der Dichte eingefangener Löcher (a,c,e) und der Gittertemperatur (b,d,f) in einem inhomogenen Bauelement bei verschiedenen Spannungen (110 V (a,b), 112 V (c,d) und 113 V (e,f); $f = 10$ kHz).

die Fermienergie an dem Gitterpunkt i haben wir also den Ansatz

$$\epsilon_0^i = \epsilon_0 \sigma(m, p)^{i \bmod 3} \quad (7.4)$$

gewählt, wobei mod die Modulofunktion bezeichnet. Es werden also nur an sehr wenigen Gitterpunkten Abweichungen von über einem Prozent auftreten.

Abbildung 7.4 zeigt die zeitliche Entwicklung von $P_t(x)$ und $T_G(x)$ für verschiedene Amplituden bei einer Frequenz von 10 kHz und homogenen Anfangsbedingungen. Für eine Amplitude von 110 V zeigt Abbildung 7.4 (a) das plötzliche Entstehen eines sehr kleinen Hochstrombereiches bei $x \approx 78 \mu\text{m}$. Dieser breitet sich schnell aus wodurch sich die lokale Gittertemperatur erhöht und sich schließlich, den Prinzipien des letzten Abschnitts entsprechend, ein Hochstromfilament von etwa $4 \mu\text{m}$ Ausdehnung bildet. Die spontane Entstehung des kleinen Hochstromkeims kann auf eine zufällige starke Absenkung der Fermienergie an dieser Stelle zurückgeführt werden, wodurch ein hoher mittlerer Tunnelstrom fließt. Am entsprechenden Nullklinendiagramm kann abgelesen werden, dass ein im Tiefstromzustand befindliches System bei einer Amplitude von 110 V sehr stark gestört werden muss, um in den Hochstromzustand zu wechseln. Eine solch starke Störung ist aber auf Grund des gaußverteilten Störterms in Gleichung 7.4 nur sehr selten, wodurch bei dieser Amplitude nur sehr wenige Hochstromfilamente auftreten.

Die zeitliche Entwicklung des Systems für eine Amplitude von 112 V zeigen die Abbildungen 7.4 (c) und (d). Die MISIM-Struktur befindet sich bei dieser Amplitude noch immer in einem Modus in dem Hochstromfilamente stabilisiert werden können, jedoch wechselt das System schon bei kleineren Störungen von dem Tief- in den Hochstromzustand. Hierdurch wird die Zündung eines Filaments wahrscheinlicher, was in dem hier gezeigten Beispiel durch die Entstehung eines zweiten Filaments bei $x \approx 35 \mu\text{m}$ zum Ausdruck kommt.

Bei einer Amplitude von 113 V können keine Hochstromfilamente mehr stabilisiert werden und die zum Zustandswechsel nötige Störung ist nur noch sehr klein. Folglich zünden, wie die Abbildungen 7.4 (d) und (e) zeigen, an vielen Stellen des Simulationsgebiets Hochstrombereiche, die sich anschließend schnell ausbreiten, bis sie auf andere Hochstrombereiche treffen und stationär werden.

Howard [MRO77] und Zuccaro [Zuc97] fanden experimentell, dass sich bei einer schrittweisen Erhöhung der Amplitude die Anzahl der Filamente auf dem beobachteten Gebiet erhöht, wobei deren Form und Ausdehnung relativ stabil blieb. Ab einer gewissen Amplitude beobachteten sie jedoch, dass die Filamente ihre definierte Form verloren und zu ausgedehnten Hochstrombereichen wurden, die aber weiterhin durch Tiefstrombereiche separiert waren. Diese Beobachtungen passen sehr gut zu den in diesen Abschnitt gefundenen Ergebnissen. Es wurden ähnliche Simulationen mit einer räumlich schneller variierenden Fermienergie ($i \bmod 2$ und $i \bmod 1$) durchgeführt, wobei sich zeigte, dass gerade bei niedrigen Amplituden die Entstehungswahrscheinlichkeit eines Filaments stark abnahm. Insbesondere konnten für $i \bmod 1$

bei Amplituden unter denen eine Filamentstabilisation möglich ist keine Zündprozesse gefunden werden. Dies liegt vermutlich daran, dass für die Entstehung eines Hochstrombereichs eine gewisse Mindestbreite der Anregung nötig ist und diese für den Fall $i \bmod 1$ sehr unwahrscheinlich ist.

7.3 Hohe Frequenzen - Anregbares Medium

7.3.1 Inhomogene Anfangsbedingungen

Wie in Kapitel 5 ausführlich diskutiert, erhöht sich die Steigung der Temperaturnullklinen mit der Frequenz, so dass ab einer bestimmten Frequenz bei keiner Spannungsamplitude zwei stabile, stationäre Zustände existieren. Vielmehr ergeben sich zwei qualitativ andere Nullklinendiagramme, die schon im homogenen System zu interessanten dynamischen Verhalten führen.

Beginnen wir die Analyse der zweidimensionalen Dynamik bei hohen Betriebsfrequenzen mit den anregbaren Medien, dessen Nullklinendiagramm ($U=113$ V) in Abbildung 7.5 (a) zusammen mit der T_G^F -Linie abgebildet ist. Der Anfangszustand des Systems wird so präpariert, dass sich ein kleiner Bereich ($X^h = [79 \mu\text{m}, 81 \mu\text{m}]$) in der Mitte der simulierten x-Achse im Hochstromzustand befindet. Die zeitliche Entwicklung der mittleren Dichte eingefangener Löcher ist in Abbildung 7.5 (c) dargestellt. Anfangs bewegen sich die Übergangsfrenten in Richtung des Tiefstrombereichs bevor ihre Geschwindigkeit sich verringert und sie schließlich zur Ruhe kommen. Die Gittertemperatur, gezeigt in Abbildung 7.5 (d), nimmt in der Umgebung des Hochstrombereichs schnell zu und bildet dann ein entsprechendes stationäres Profil. Warum sich ein stationärer Hochstrombereich stabilisieren kann, obwohl kein stationärer Hochstromzustand existiert, kann wiederum anhand des Nullklinendiagramms erklärt werden. Anfangs liegen die Gittertemperaturen an den Übergangsfrenten unterhalb von T_G^F und die Fronten laufen in Richtung des Tiefstrombereichs. Die Temperatur nimmt jedoch mit der Breite des Hochstrombereichs zu, was die Fronten verlangsamt und schließlich bei einem bestimmten Abstand zum Stillstand bringt. Dieser Abstand ist jedoch noch nicht so groß, dass die Temperatur im Inneren des Hochstrombereichs auf den Wert ansteigt den ein homogenes System bei gleicher Dichte eingefangener Löcher anstreben würde, sondern nur etwa 340 K beträgt (Abbildung 7.5 (b)). Bei dieser Temperatur kann aber laut Nullklinendiagramm durchaus eine hohe Dichte eingefangener Löcher existieren, was die Stabilisation eines Hochstromfilaments möglich macht.

Diese Argumentation wirft natürlich sofort die Frage nach der zeitlichen Entwicklung eines anfangs sehr breiten Hochstrombereichs auf. Ein solches Szenario ist in Abbildung 7.5 (e,f) gezeigt. Während das Innere des Hochstrombereichs nach etwa 500 Perioden in den Tiefstromzustand übergeht, bleiben an den beiden Rändern

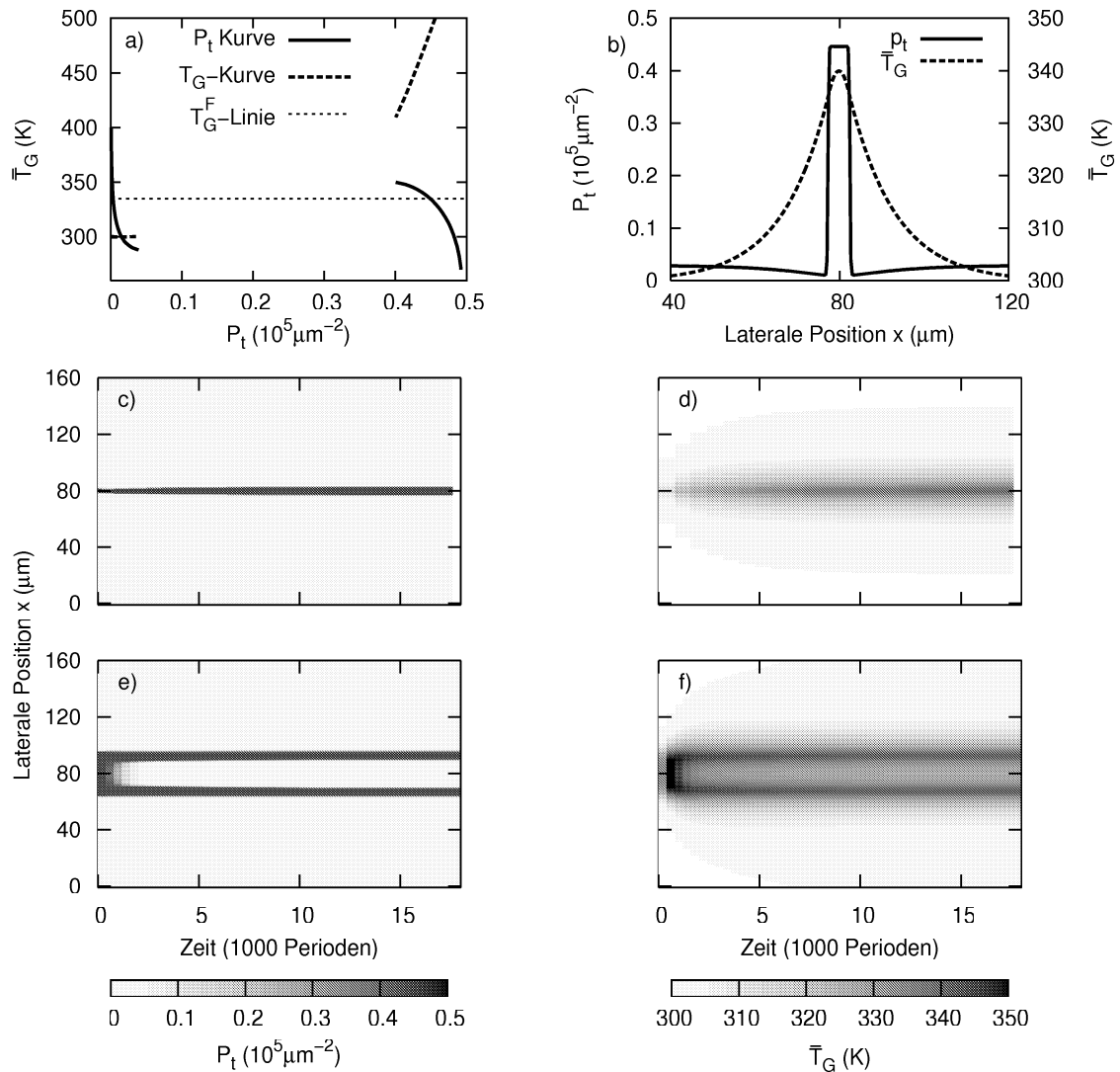


Abbildung 7.5: Nullklinendiagramm mit Nullklinen des Ladungsträgersystems und der Gittertemperatur (a), Dichte der eingefangenen Löcher P_t und Gittertemperatur \bar{T}_G als Funktion des Ortes x nach 60000 Perioden (b), zeitliche Entwicklung der Dichte eingefangener Löcher (c,e) und der Gittertemperatur (d,f) aus einem anfangs breiten (c,d) und aus einem anfangs schmalen Hochstrombereich (e,f). ($U = 113$ V, $f = 100$ kHz)

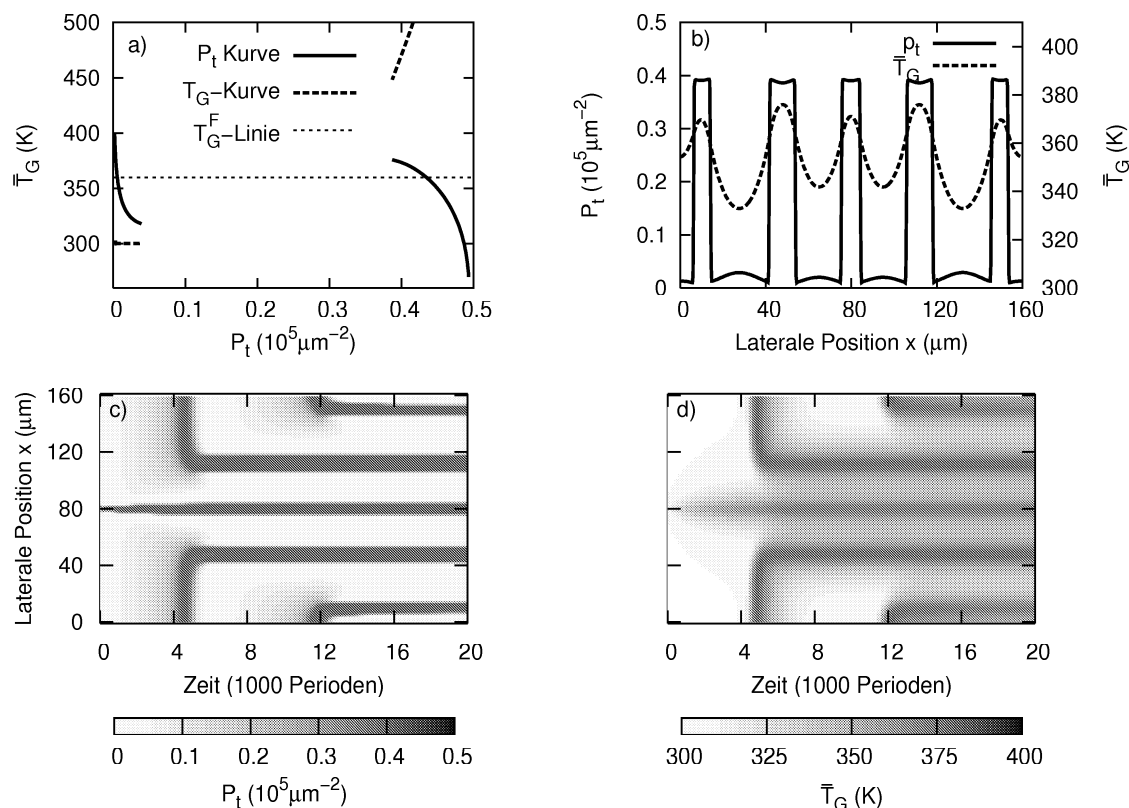


Abbildung 7.6: Nullklinendiagramm mit Nulllinien des Ladungsträgersystems und der Gittertemperatur (a), Dichte der eingefangenen Löcher P_t und Gittertemperatur \bar{T}_G als Funktion des Ortes x nach 60000 Perioden (b), zeitliche Entwicklung der Dichte eingefangener Löcher (c) und der Gittertemperatur (d) aus einem anfangs schmalen Hochstrombereich (e,f). ($U = 116$ V, $f = 100$ kHz)

schmale stationäre Hochstrombereiche zurück. Die Temperatur steigt anfangs besonders im Inneren des Hochstrombereichs stark an, um dann wieder zu fallen und am Ende nur in der Umgebung der neuen Hochstrombereiche zwei Maxima aufzuweisen. Mit Blick auf das Nullklinendiagramm wird auch dieses Verhalten schnell klar. Das Innere des ursprünglichen Hochstrombereiches wird kaum von den Wärmediffusionsprozessen beeinflusst, so dass die Temperatur der homogenen Dynamik folgend bis auf über 350 K steigt und einen stabilen Hochstromzustand unmöglich macht. An den Rändern dagegen hält die Wärmediffusion die Temperatur bei Werten, für die eine hohe Dichte eingefangener Löcher möglich ist und erzeugt so aus einem anfangs großen Hochstrombereich zwei schmale Hochstromfilamente.

Bei einer Amplitude von 116 V besitzt das System keinen stabilen sondern nur noch einen instabilen stationären Zustand, was bei homogenen Anfangsbedingungen zu einem zeitlich oszillierenden Verhalten der Ladungsträgerdichten und der Gittertemperatur führt (vgl. Abschnitt 6.3.3). Präparieren wir auch für diese Parameter einen Anfangszustand mit $X^h = [79 \mu\text{m}, 81 \mu\text{m}]$, so ergibt sich die in Abbildung 7.6 (c) und (d) gezeigte Dynamik für $P_t(x)$ und \bar{T}_G . Man erkennt, dass der ursprüngliche Hochstrombereich etwas breiter wird und dass die Gittertemperatur in der Umgebung dieses Bereiches schnell steigt. Diese höhere Temperatur verhindert, dass das System wie auf dem Rest der x-Achse der homogenen Dynamik folgt und große Dichten eingefangener Löcher generiert. Während innerhalb des entstandenen breiten Hochstrombereichs die Gittertemperatur natürlich schnell ansteigt und das System nach etwa 12500 Perioden zurück in den Tiefstromzustand zwingt, herrschen am Rand dieses Bereiches aufgrund des Wärmediffusionsprozesses gemäßigte Temperaturen, bei denen der Hochstromzustand erhalten bleibt. Auf diese Weise entstehen nacheinander schmale Hochstromfilamente einer bestimmten Breite und mit einem bestimmten Abstand voneinander. Abbildung 7.6 zeigt das Profil der Dichte eingefangener Löcher und der mittleren Gittertemperatur nach etwa 20000 Perioden. Dieses Profil ist zwar noch nicht der stationäre Zustand des Systems, die unterschiedlichen Breiten und Abstände der Hochstrombereiche gleichen sich jedoch nur sehr langsam aus, da die Frontgeschwindigkeiten durch das entstandene Temperaturprofil sehr klein sind.

7.3.2 Inhomogenens Bauelement

Auch für hohe Frequenzen wollen wir die Auswirkungen eines inhomogenen Bauelements auf die Entwicklung der Raumladungsdichte und der Gittertemperatur untersuchen. Hierfür verwenden wir wiederum eine ortsabhängige, verrauschte Fermienergie der Form 7.4 mit dem Mittelwert $m = 1$ und der Standardabweichung $p = 0.01$. Für eine Amplitude von 112 V, bei der das System als anregbares Medium betrieben wird, ergibt sich die in Abbildung 7.7 dargestellte Entwicklung der Raumladungsdichte (a) und Gittertemperatur (b). Wiederum sorgen zufällige, lokale Absenkungen der Fermienergie für die Zündung schmaler Hochstrombereiche, die sich anschließend, gemäß der im letzten Abschnitt diskutierten Prinzipien, ausbreiten und zu stationären Hochstromfilamenten werden. Auch bei der etwas höheren Amplitude von 113 V wird das System als anregbares Medium betrieben und kann folglich Hochstromfilamente stabilisieren. Der Tiefstromzustand ist jedoch etwas instabiler gegenüber Störungen, weshalb in einem inhomogenen Bauelement, wie in den Abbildungen 7.7 (c,d) zu sehen, an vielen Stellen Hochstrombereiche gezündet werden und sich zu Filamenten entwickeln. Zünden in einer kleineren Umgebung, wie in dem gezeigten Beispiel zwischen $20 \mu\text{m}$ und $80 \mu\text{m}$, mehrere Hochstrombereiche fast gleichzeitig, so verursacht die hohe Stromdichte in jedem dieser Bereiche

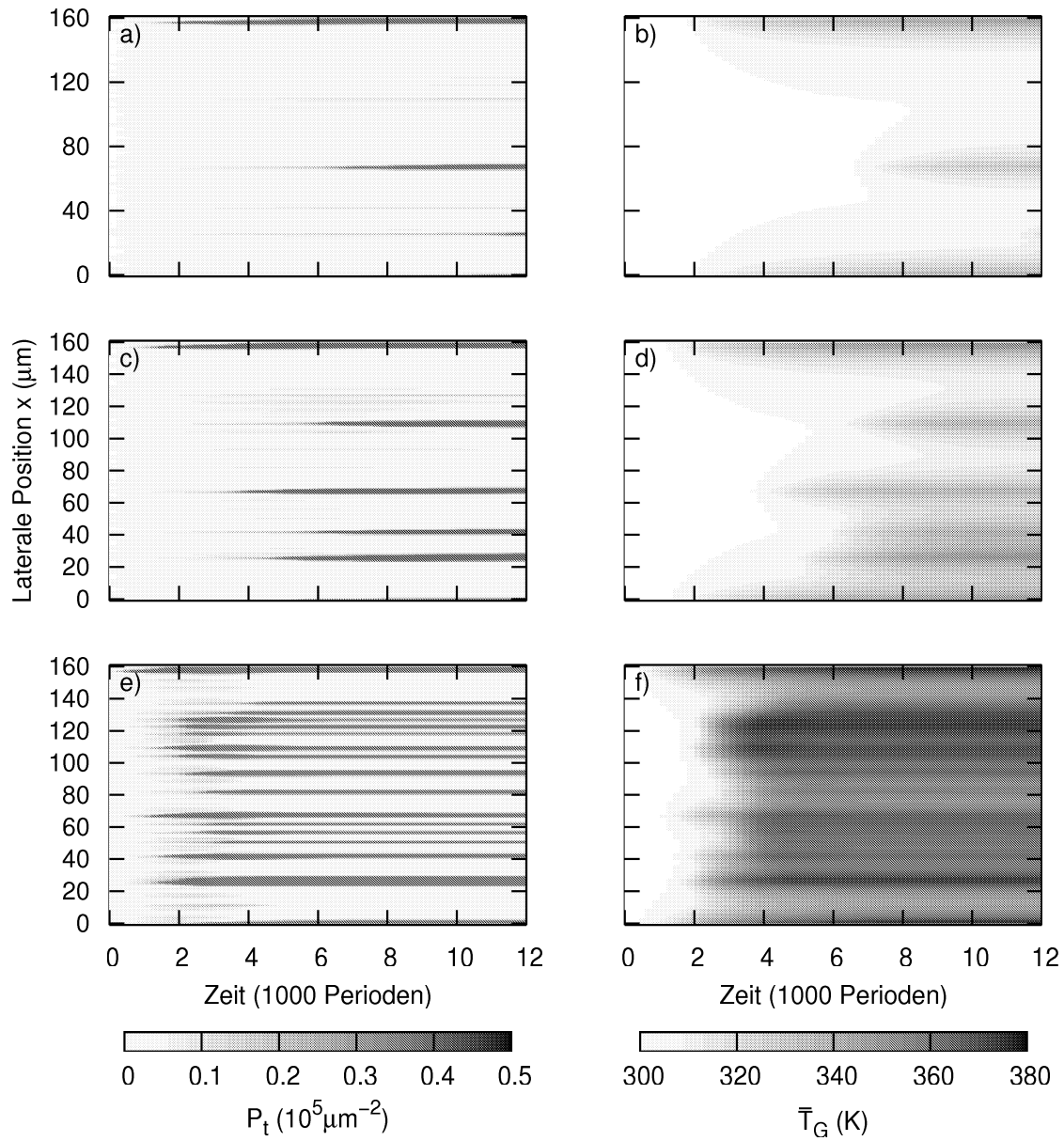


Abbildung 7.7: Zeitliche Entwicklung der Dichte eingefangener Löcher (a,c,e) und der Gittertemperatur (b,d,f) in einem inhomogenen Bauelement bei verschiedenen Spannungen (112 V (a,b), 113 V (c,d) und 116 V (e,f); $f = 100$ kHz)

eine Temperaturerhöhung in den anderen Bereichen. Dies aber verringert die Frontgeschwindigkeiten und somit auch die Breite der stationären Filamente. Auch in diesem Fall ist nach 20000 Perioden der stationäre Zustand des Gesamtsystems eigentlich noch nicht erreicht, jedoch bewegen sich die Filamente aufgrund der geringen Frontgeschwindigkeiten nur sehr langsam.

Die Entwicklung von P_t und \bar{T}_G in einem oszillierenden Medium ($V_0 = 116$ V) ist in den Abbildungen 7.7 (e,f) zu sehen. In diesem Fall wird an allen lateralen Positionen langsam eine hohe Dichte eingefangener Löcher generiert, jedoch verläuft dieser Prozess an einigen Positionen schneller, wodurch diese eher einen Hochstromzustand erreichen und somit das Bauelement in ihrer Umgebung erwärmen. Folglich wird die Entstehung einer hohen Raumladungsdichte in der Umgebung eines entstandenen Hochstrombereichs unterbunden. Im Unterschied zum anregbaren Medium, in dem breite homogene Tiefstrombereiche auftreten können, ist die Ausdehnung eines Tiefstrombereichs im oszillierenden Medium beschränkt. Nur Orte, die durch die Nähe zu einem Hochstrombereich eine hohe Temperatur aufweisen, können dauerhaft in einem Tiefstromzustand bleiben.

7.4 Einfluss der Wärmediffusionskonstanten

Die Art der erzeugten Muster in Aktivator-Inhibitor-Systemen hängt wie schon diskutiert stark von der Struktur des Nullklinendiagramms ab. Ein anderer entscheidender Parameter in solchen Systemen ist das Verhältnis der Diffusionskonstanten der Komponenten, wie die Argumentationen des letzten Kapitels deutlich machen, in denen oft die schnellere Ausbreitungsgeschwindigkeit der Gittertemperatur angeführt wurde.

Verschiedene Messungen zeigen, dass die Ausbreitungsgeschwindigkeit von hell leuchtenden Bereichen in der MISIM-Struktur, über viele Größenordnungen variieren kann und dass ein entscheidender Faktor hierfür die Technik der Auftragung der Isolatorschichten auf die ZnS:Mn-Schicht ist [VDV⁺00]. Diese Techniken scheinen Einfluss zu haben auf die Möglichkeit der Grenzflächenladungen innerhalb der Grenzfläche zu wandern, was die Ausbreitungsgeschwindigkeit eines Hochstrombereichs stark beeinflussen könnte. Da aber für solche Prozesse noch keine hinreichend erprobten Modelle existieren, sollen in dieser Arbeit Oberflächendiffusionseffekte nicht berücksichtigt werden. Um dennoch die sehr interessanten Auswirkungen verschiedener Verhältnisse der Ausbreitungsgeschwindigkeiten zu untersuchen, wird in diesem Kapitel die Wärmeleitfähigkeit variiert. Natürlich ist es physikalisch gesehen schwierig die Wärmeleitfähigkeit des ZnS:Mn entscheidend zu verändern, da aber der Prozess der Strukturbildung qualitativ nur vom Verhältnis der Ausbreitungsgeschwindigkeiten abhängt, können aus den Ergebnissen dieser Untersuchungen Rückschlüsse auf das Verhalten des Systems bei stärkeren Diffusionsprozessen

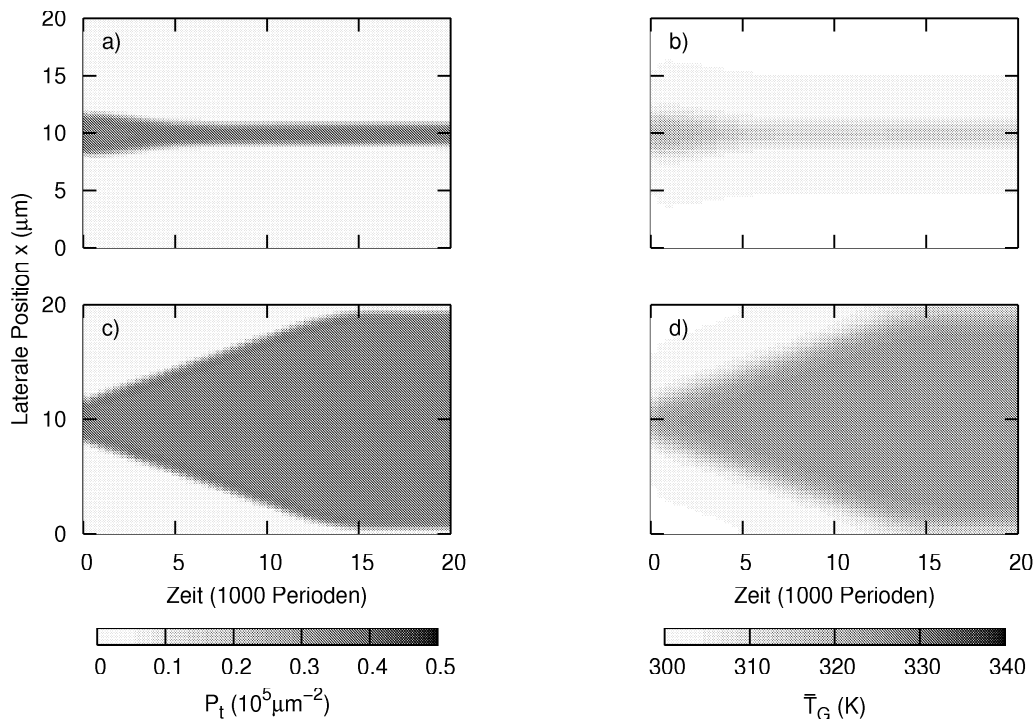


Abbildung 7.8: Zeitliche Entwicklung der Raumladungsdichte (a,c) und der Temperatur (b,d) aus einem inhomogenen Anfangszustand in einem bistabilen Medium ($U = 110$ V (a,b), $U = 113$ V (c,d), $f=10$ kHz).

des Ladungsträgersystems gezogen werden.

7.4.1 mittlere Wärmeleitfähigkeit

Unter mittleren Wärmeleitfähigkeiten sollen hier Diffusionskonstanten verstanden werden, die sehr viel kleiner als $10^4 \mu\text{m}^2\text{s}^{-1}$ sind, jedoch einen Diffusionsprozess bewirken, der immer noch stärker als der des Ladungsträgersystems ist. Abbildung 7.8 zeigt die zeitliche Entwicklung eines bistabilen Systems bei inhomogenen Anfangsbedingungen und zwei verschiedenen Spannungsamplituden für eine Temperaturdiffusionskonstante von $10^2 \mu\text{m}^2\text{s}^{-1}$. Bei einer Amplitude von 110 V verringert sich die Breite des Hochstrombereichs und bildet wiederum ein stabiles Hochstromfilament, welches aber im Unterschied zu Abbildung 7.2 nur etwa $3 \mu\text{m}$ breit ist. Dies ist eine direkte Folge der geringeren Wärmediffusion, welche die Gittertemperatur an den Übergangsfrenen erst entscheidend sinken lässt, wenn diese sich schon sehr nahe

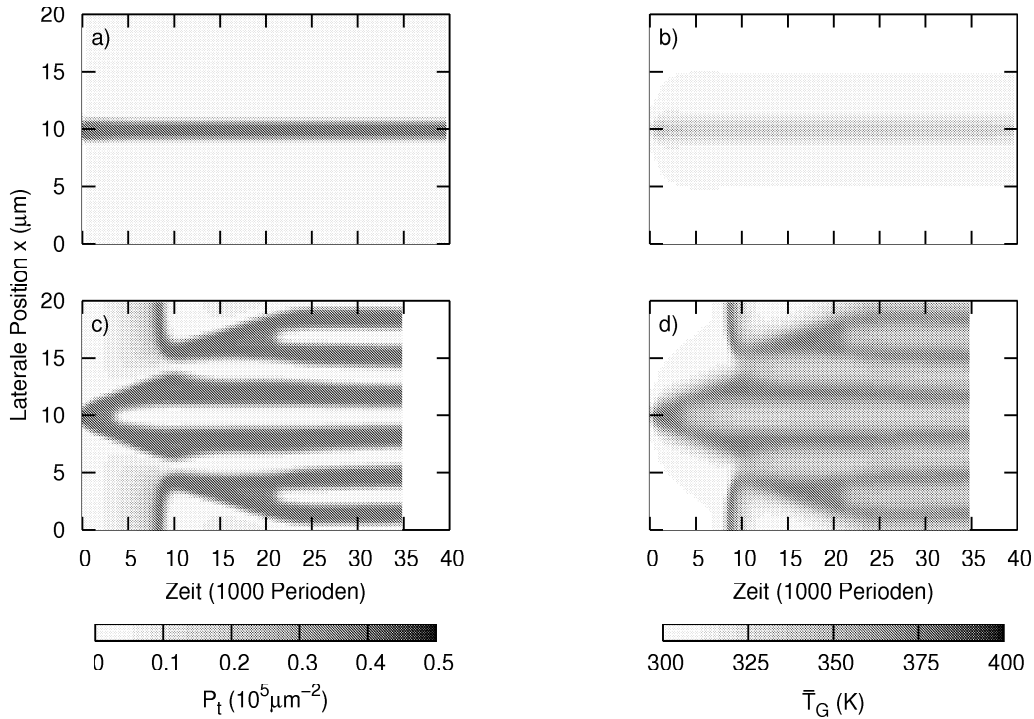


Abbildung 7.9: Zeitliche Entwicklung der Raumladungsdichte (a,c) und der Temperatur (b,d) aus einem inhomogenen Anfangszustand in einem anregbaren (a,b) und einem oszillierenden (c,d) Medium bei mittlerer Wärmeleitfähigkeit ($10^2 \mu\text{m}^2\text{s}^{-1}$, $U = 113 \text{ V}$ (a,b), $U = 116 \text{ V}$ (c,d), $f=100\text{kHz}$).

sind (Abbildung 7.8 (b)). Durch das Herabsetzen der Wärmediffusionskonstanten wird also die Reichweite der Wechselwirkung zwischen den Fronten verringert. Bei einer Amplitude von 113 V entwickelt sich ein anfangs schmaler Hochstrombereich wie in Abbildung 7.8 (c) gezeigt. Wiederum laufen die Übergangsfrenten in Richtung des Tiefstrombereichs und werden erst am Rand des Simulationsgebietes durch die repulsive Wechselwirkung der Fronten gestoppt. Die im Vergleich zu hoher Wärmeleitfähigkeit geringere Breite des stationären Tiefstrombereichs ist wiederum eine Folge der geringeren Reichweite der Wechselwirkung.

Die Auswirkungen der geringeren Wärmediffusion auf die Entwicklung von inhomogenen Anfangsbedingungen bei hohen Betriebsfrequenzen sind sehr ähnlich. Abbildung 7.9 (a) zeigt die zeitliche Entwicklung der Dichte eingefangener Löcher aus einem anfangs schmalen Hochstrombereich bei einer Spannung von 113 V . Bei dieser Amplitude wird das System als anregbares Medium betrieben was die Stabilisierung

des Hochstromfilaments erklärt. Die, im Vergleich zu hoher Wärmeleitfähigkeit geringerer Ausdehnung des Filaments ist wiederum auf die geringere Reichweite der repulsiven Wechselwirkung der Fronten zurückzuführen.

Eine Amplitude von 116 V führt auf eine oszillierende Dynamik des eindimensionalen Systems und auf die in Abbildung 7.9 (c) gezeigte Entwicklung der Dichte eingefangener Löcher aus einem inhomogenen Anfangszustand. Im Unterschied zu Abbildung 7.6 (c) breitet sich der Hochstrombereich anfangs schnell aus, bis die homogenen äußeren Bereiche nach etwa 8000 Perioden in den Hochstromzustand wechseln und durch die Temperaturerhöhung im Grenzbereich die Ausdehnung stoppen. Da auch das Zentrum des ursprünglichen Hochstromzustand der homogenen Dynamik folgt, wechselt dieses nach etwa 3000 Perioden in den Tiefstromzustand und erzeugt so zwei schmale Hochstrombereiche, deren Position und Breite in den folgenden 20000 Perioden nur noch leicht variiert. Die äußeren homogenen Bereiche wechseln wiederum in den Tiefstromzustand, wobei an den Rändern aufgrund der geringeren Temperaturen wiederum jeweils ein schmaler Hochstrombereich zurückbleibt. Diese breiten sich in der Folgezeit aus, spalten sich und bilden so schließlich ein periodisches Muster aus Hoch- und Tiefstrombereichen. Auch wenn also die Entwicklung sich etwas von dem Fall hoher Wärmeleitfähigkeit unterscheidet, sind die stationären, räumlich periodischen Profile die sich für beide Fälle ergeben sehr ähnlich. Die kleineren Abmessungen des Musters sind auch hier die Folge der kleineren Reichweite der Wechselwirkungen zwischen den Fronten.

7.4.2 kleine Wärmediffusion

Inhomogene Anfangsbedingungen

Unter einer sehr kleinen Wärmeleitfähigkeit soll hier eine Diffusionskonstante verstanden werden, bei der sich das Ladungsträgersystem schneller ausbreitet als die Gittertemperatur. Dies bedeutet, nach den Diskussionen im letzten Abschnitt, dass die repulsive Wechselwirkung zwischen den Übergangsfrenten entfällt. In einem bistabilen Medium führt dies dazu, dass sich zwei Fronten ungebremst aufeinander zu bewegen und je nach Amplitudenstärke einen homogenen Hoch- oder Tiefstromzustand erzeugen. In anregbaren und oszillierenden Medien kommt es dagegen zu sehr interessanten dynamischen Phänomenen.

Abbildung 7.10 zeigt die zeitliche Entwicklung von P_t (a) und \bar{T}_G (b), im Betriebsmodus des anregbaren Mediums ($U = 113$ V, $f = 100$ kHz) bei kleiner Wärmeleitfähigkeit ($10^1 \mu\text{m}^2\text{s}^{-1}$) aus einem inhomogenen Anfangszustand mit einem recht breitem Hochstrombereich. Auch in diesem Fall wechselt die homogene Mitte des Hochstrombereichs schnell in den Tiefstromzustand und nur an den Rändern bleiben zwei schmale Hochstrombereiche zurück. Diese jedoch wandern mit annähernd konstanter Geschwindigkeit in Richtung der positiven bzw. negativen x-Achse. Diese

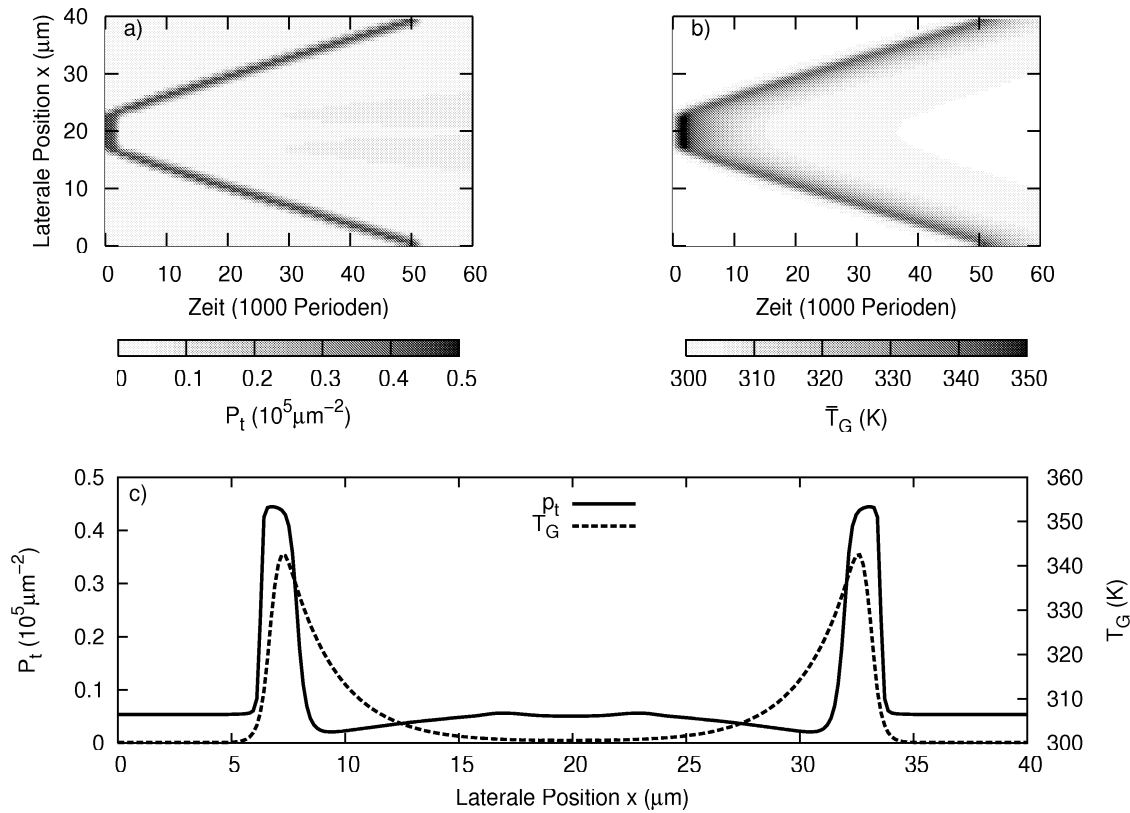


Abbildung 7.10: Zeitliche Entwicklung der Raumladungsdichte (a) und der Temperatur (b) eines anregbaren Mediums aus einem inhomogenen Anfangszustand. (c) $P_t(x)$ und $T_G(x)$ zum Zeitpunkt 35000 Perioden. ($U = 113 \text{ V}$, $f = 100 \text{ kHz}$)

Verhalten erklärt sich bei genauerer Analyse der Temperatur- und Ladungsträgerprofile wie sie in Abbildung 7.10 (c) für die Periode 35000 dargestellt sind. Die linke Front des schmalen Hochstrombereichs bei $x \approx 7 \mu\text{m}$ ist, aufgrund der langsamen Wärmediffusion, einer Gittertemperatur von nur $T_G \approx 305 \text{ K} < T_G^0 \approx 330 \text{ K}$ ausgesetzt, wodurch sich die Front in Richtung des Tiefstrombereichs bewegt. An den in den Hochstromzustand versetzten Orten heizt sich das Gitter jedoch auf und löst die Raumladungsdichte, der eindimensionalen Dynamik folgend, langsam auf. Hierdurch entsteht ein wandernder Hochstimpuls, der erst ausgelöscht wird, wenn er auf einen sehr warmen Bereich trifft. Dies tritt ein, wenn beide Pulse am Rand des Simulationsgebietes aufeinander treffen und in den Hochtemperaturbereich des jeweils anderen Pulses hinein laufen. Solche wandernden Pulse sind die Voraussetzung um in dreidimensionalen Simulationen Ringwellen oder rotierende Spiralen erzeugen

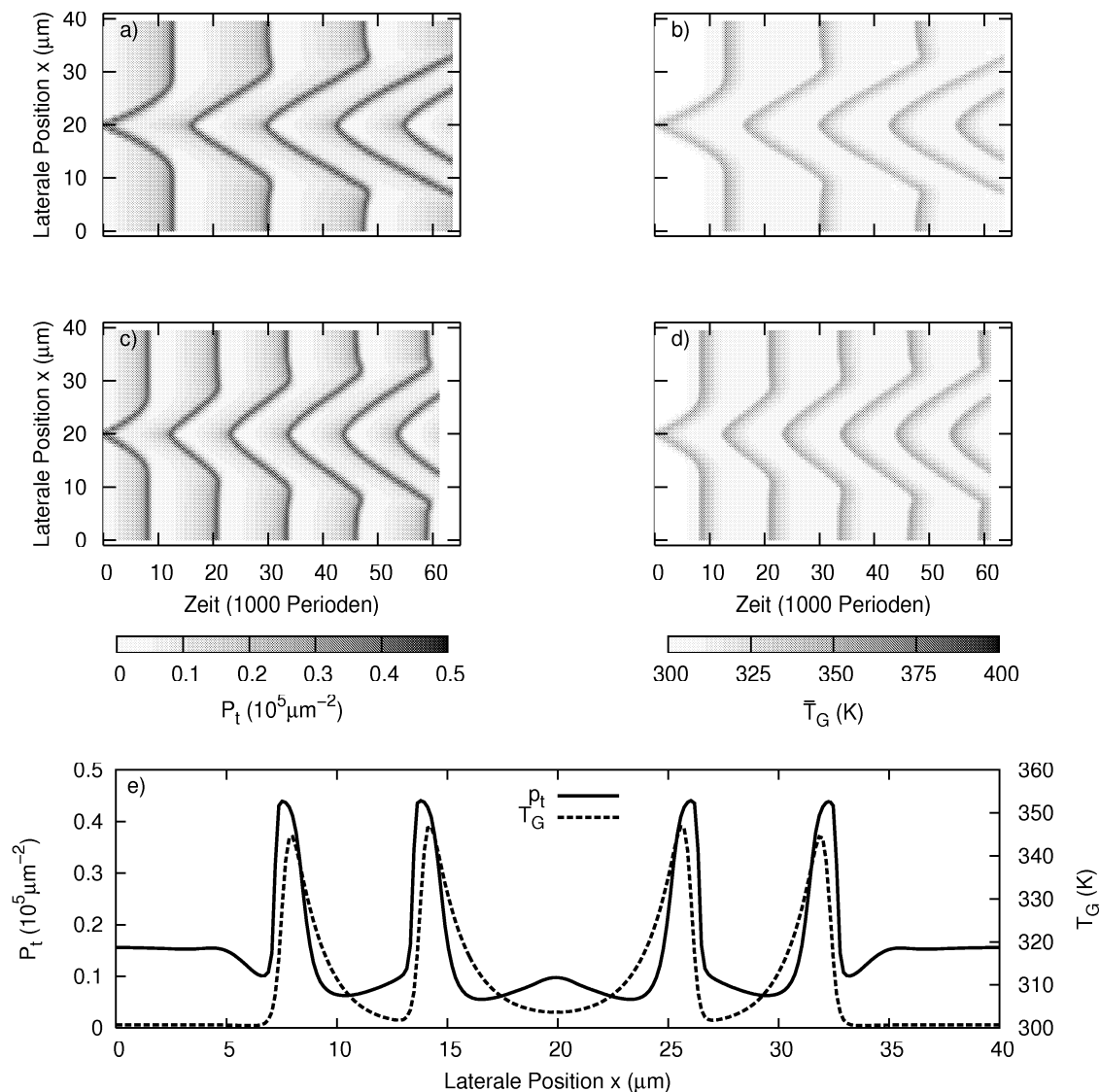


Abbildung 7.11: Zeitliche Entwicklung der Raumladungsdichte (a,c) und der Temperatur (b,d) eines oszillierenden Mediums aus einem inhomogenen Anfangszustand. (e) $P_t(x)$ und $T_G(x)$ zum Zeitpunkt 60000 Perioden für $V_0 = 114.5$ V. ($V_0 = 114.5$ V (a,b), $V_0 = 115.0$ (c,d), $f = 100$ kHz)

zu können.

Die Entwicklung eines anfangs sehr schmalen Hochstombereichs ($X^h = [79 \mu\text{m}, 81 \mu\text{m}]$) in einem oszillierenden Mediums bei geringer Wärmeleitfähigkeit ist in Abbildung 7.11 für zwei verschiedene Amplituden der Betriebsspannung ($V_0 = 114.5$ V (a,b),

$V_0 = 115.0$ V (c,d), $f = 100$ kHz) dargestellt. In beiden Fällen ist der schmale Hochstrombereich der Ursprung zweier nach außen wandernder Hochstimpulse (Abbildung 7.11 (a,c)). Im Gegensatz zum anregbaren Medium bauen sich jedoch in den oszillierenden Medien an den Orten des anfänglichen Hochstrombereichs neue Raumladungen auf, sobald die Gittertemperaturen niedrig genug sind. Diese senden dann erneut zwei wandernde Pulse aus. Da jeder Puls eine etwas größere Strecke zurücklegt als der vorangegangene Puls, werden die homogenen Ränder der Simulationsgebiete mit der Zeit verdrängt und es entstehen Muster aus laufende Wellen. Das Verhalten des Systems für die zwei verschiedenen Amplituden unterscheidet sich nur durch die verschiedenen, schon aus der eindimensionalen Dynamik bekannten Systemfrequenzen. In Abbildung 7.11 (e) sind für eine Amplitude von 114.5 V $P_t(x)$ und $\bar{T}_G(x)$ zu einen bestimmten Zeitpunkt ($t = 60000$ Perioden) aufgetragen. Wiederum erkennt man sehr deutlich, dass die Hochstimpulse den Hochtemperaturpulsen vorausseilen.

Inhomogenes Bauelement

Auch in dieser, zu qualitativ neuen Phänomenen führenden, Situation einer geringen Wärmeleitfähigkeit wollen wir das Systemverhalten in einem inhomogenen Bauelement untersuchen. Hierzu verwenden wir wiederum das bereits eingeführte Modell der räumlich inhomogenen Fermienergie aus Abschnitt 7.2.2 mit dem Mittelwert $m = 1$ und der Standardabweichung $p = 0.01$. In den Abbildungen 7.12 ist die Entwicklung der Dichte eingefangener Löcher (a) und der Gittertemperatur (b) gezeigt, wenn das System als anregbares Medium betrieben wird ($V_0 = 113$ V). Wiederum zünden an zufälligen Stellen des simulierten Gebiets kleine Hochstrombereiche. Diese folgen im wesentlichen den im letzten Abschnitt diskutierten Prinzipien und bilden wandernde Hochstimpulse, die sich gegenseitig auslöschen wenn sie aufeinander treffen. Aufgrund der inhomogenen Bauteilstruktur sind die Ausdehnungen und die Geschwindigkeiten der wandernden Pulse nicht für alle Zeiten konstant, sondern hängen stark von der Fermienergie der lateralen Position x ab, an der sich der Hochstrombereich befindet. Ein weiterer Unterschied zum Fall inhomogener Anfangsbedingungen ist, dass an einer Position, an der einmal ein Hochstrombereich entstanden ist, nach abklingen der Gittertemperatur erneut ein Hochstromzustand entsteht, da die Bauteilinhomogenität natürlich nicht verschwindet. Man kann sich die MISIM-Struktur also als Verbund kleiner Bereiche vorstellen, die entweder als anregbare Medien oder als oszillierende Medien arbeiten. Bei einer Amplitude von 113 V sind jedoch die Bereiche des anregbaren Mediums deutlich in der Überzahl. Bemerkenswert an der auf die zweite Zündung folgende Dynamik ist, dass diese der Dynamik nach der ersten Zündung zwar ähnelt aber nicht identisch ist. Ob sich jemals ein periodisch wiederkehrendes Verhalten einstellt oder das System dauerhaft einer chaotischen Dynamik folgt, kann in dieser Arbeit nicht beantwortet werden.

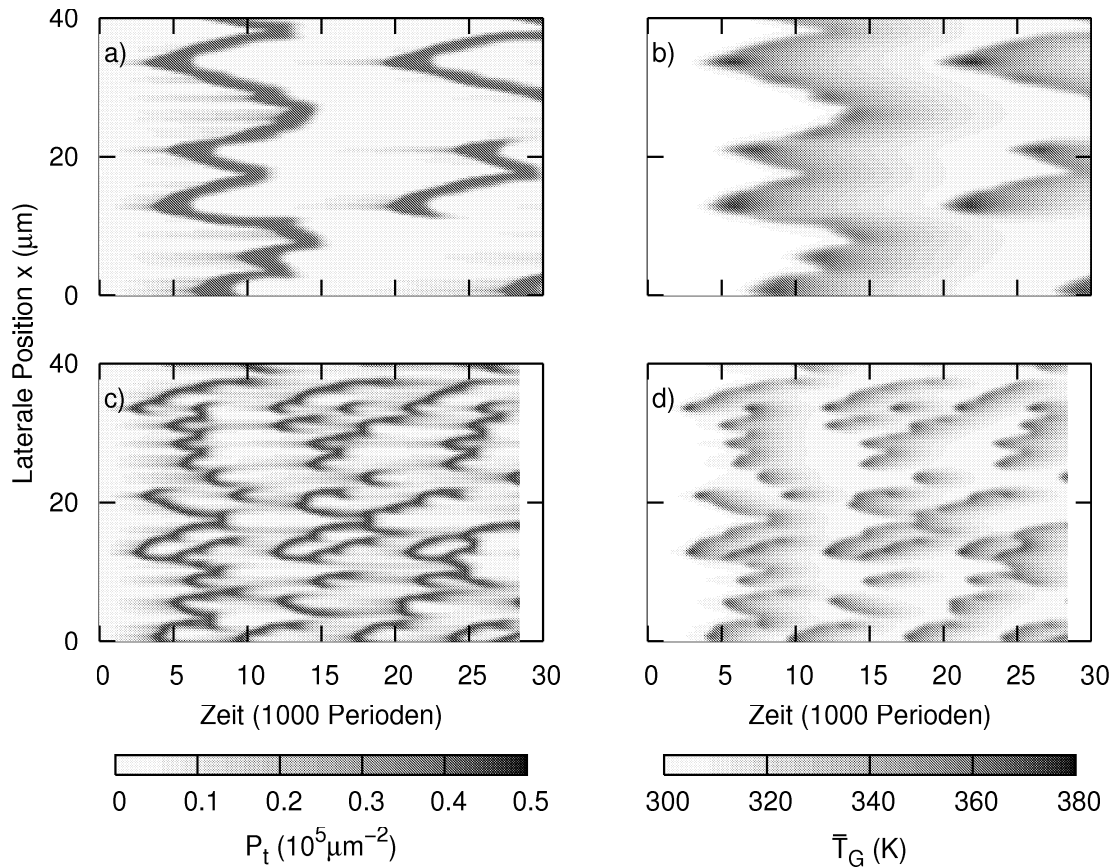


Abbildung 7.12: Zeitliche Entwicklung der Dichte eingefangener Löcher (a,c) und der Gittertemperatur (b,d) in einem inhomogenen Bauelement unter den Einfluss einer kleinen Wärmeleitfähigkeit bei verschiedenen Spannungen (112 V (a,b) und 113 V (c,d); $f = 100$ kHz)

Bei einer Amplitude von 115 V folgen fast alle Punkte des Systems einer periodischen Dynamik, jedoch mit unterschiedlichen Periodenlängen. Das resultierende Systemverhalten ist in den Abbildungen 7.12 (c) und (d) dargestellt. An sehr vielen Orten zünden innerhalb kurzer Zeit Hochstrombereiche, welche dann, wie im letzten Abschnitt diskutiert, Hochstimpulse aussenden, die aber meist nur sehr kurze Strecken zurücklegen können, bevor sie durch die Kollision mit einem anderen Puls vernichtet werden. Die Dynamik nach der zweiten Zündung ähnelt der nach der ersten Zündung nur noch an wenigen Orten und legt so die Vermutung nahe, dass das System dauerhaft einer chaotischen Dynamik folgen wird. Jedoch kann diese Frage auch in diesem Fall nicht eindeutig beantwortet werden.

Kapitel 8

Musterbildung in 3D

Im letzten Kapitel wurden Phänomene wie Frontausbreitung und Filamentstabilisation in zweidimensionalen ZnS:Mn MISIM-Strukturen eingehend diskutiert. Auch wenn also durch die zweidimensionalen Simulationen schon weitreichende Einsichten in die Prozesse die MISIM-Struktur gewonnen werden konnten, sind dreidimensionale Simulationen des Systems nicht nur interessant sondern auch notwendig. Beispielsweise kann mit Hilfe von zweidimensionalen Rechnungen nichts über die Stabilität einer Front gegenüber lokalen Krümmungen derselben ausgesagt werden [Hag94]. In Systemen mit krümmungsinstabilen Fronten werden häufig komplexe, labyrinthartige Muster beobachtet. Desweiteren können in dreidimensionalen Simulationen topologisch vielfältigere Anfangsbedingungen gewählt werden, von denen einige zu überraschenden Ergebnissen wie zum Beispiel Spiralmuster führen.

8.1 Muster bei großer Wärmeleitfähigkeit

Aufgrund der vorhandenen Rechnerressourcen und der notwendigen Diskretisierung können in dreidimensionalen Simulationen nur Grundgebiete einer maximalen Ausdehnung von $40 \mu\text{m}$ in x - und y -Richtung simuliert werden. Aus Kapitel 7.2 wissen wir jedoch, dass bei einer Wärmeleitfähigkeit von $D_G = 10^4 \mu\text{m}^2\text{s}^{-1}$ größere Grundgebiete notwendig sind, um die bei hohen Frequenzen auftretenden periodischen Muster zu simulieren. In dreidimensionalen Simulationen lassen sich also bei großer Wärmeleitfähigkeit nur die Hochstromfilamente und wachsenden Hochstrombereiche untersuchen, die bei einer Betriebsspannung von 10 kHz auftreten.

Für eine Amplitude von 110 V bei einer Frequenz von 10 kHz zeigt Abbildung 8.1 (links) Momentaufnahmen der zeitlichen Entwicklung von $P_t(x, y)$ und $\bar{T}_G(x, y)$ aus Anfangsbedingungen der Form

$$p_t^0(x, y, z) = \begin{cases} p_t^h(z) & : x \in X^h \wedge y \in Y^h \\ p_t^l(z) & : \text{sonst} \end{cases} \quad (8.1)$$

$$\rho_{l,r}^0(x, y) = \begin{cases} \rho_t^h & : x \in X^h \wedge y \in Y^h \\ \rho_t^l & : \text{sonst} \end{cases} \quad (8.2)$$

mit $X=Y=[19 \mu\text{m}, 21 \mu\text{m}]$. Völlig analog zum zweidimensionalen Fall breitet sich der Hochstrombereich anfangs aus, da die Gittertemperatur an der Ausbreitungsfront kleiner als T_G^k ist. Mit dem größer werdenden Hochstrombereich steigt diese Temperatur jedoch an und verringert die Frontgeschwindigkeit, bis diese zum Stillstand kommt und ein Hochstromfilament von etwa $4 \mu\text{m}$ Durchmesser bildet. Auch in einem dreidimensionalen Modell stellt sich also heraus, dass ein Hochstromfilament eine stabile stationäre Lösung des Gleichungssystems ist.

Die Entwicklung des Systems bei einer Amplitude von 113 V und identischen Anfangsbedingungen zeigt Abbildung 8.1 (rechts). Der Hochstrombereich breitet sich

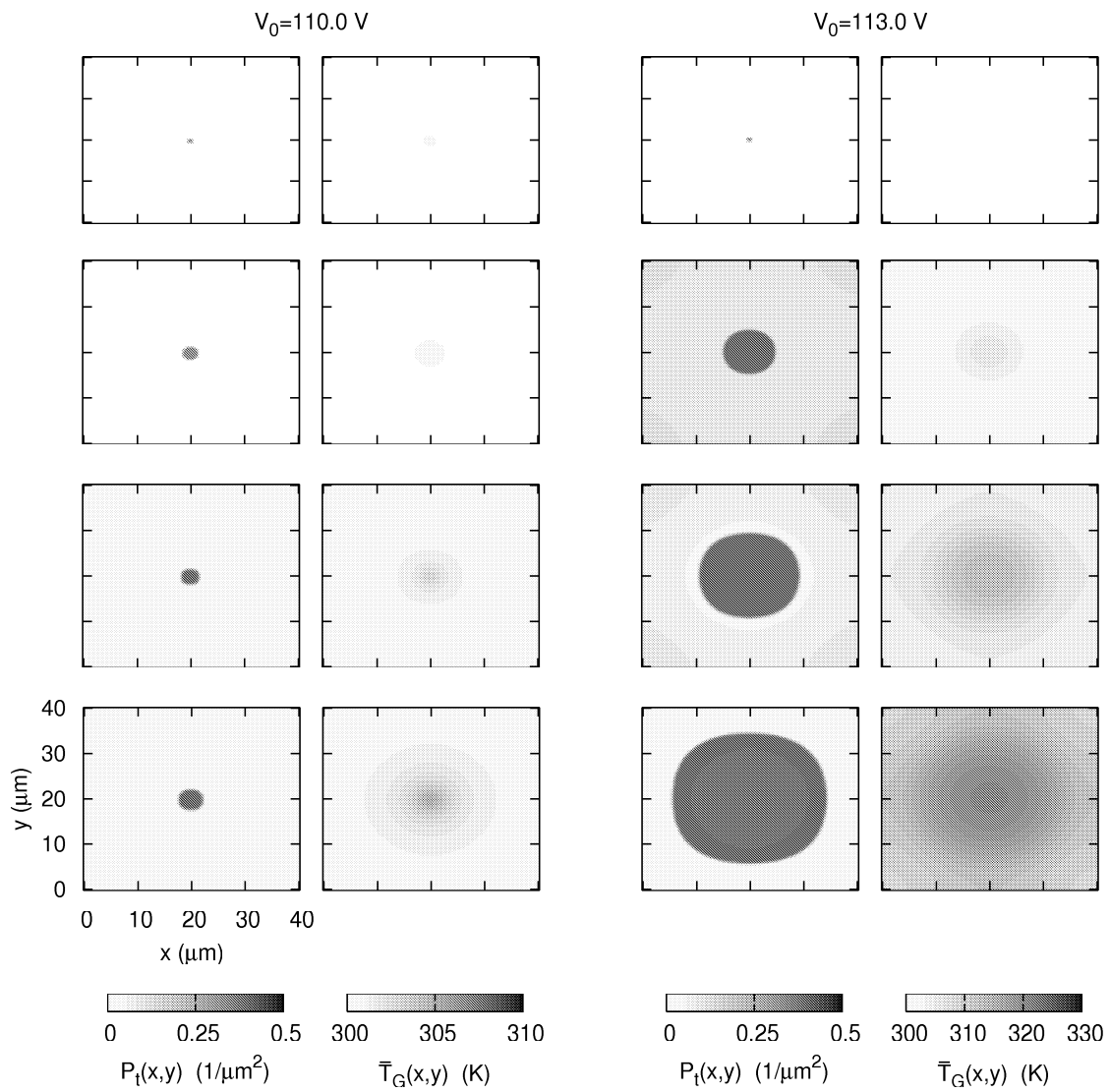


Abbildung 8.1: Raumladungsdichten $P_t(x, y)$ und mittlere Gittertemperaturen \bar{T}_G für vier verschiedene Zeitpunkte (Zeilen 1 bis 4) bei einer Amplitude von 110 V (links) und 113 V (rechts). Die Zeilen 1 bis 4 entsprechen den Zeitpunkten 100, 500, 1000 und 10000 Perioden der Betriebsspannung ($f = 10\text{ kHz}$).

wiederum aus, wodurch die Gittertemperatur steigt. Analog zum zweidimensionalen Fall bleibt die Temperatur an der Ausbreitungsfront jedoch anfangs an allen Positionen unterhalb von T_G^F . Erst wenn eine Stelle der Front sich dem Rand des Simulationsgebiets nähert und damit aufgrund der periodischen Randbedingungen in den Einflussbereich der Front auf der anderen Seite gerät, reduziert sich die Geschwindigkeit dieser Stelle bis die Frontgeschwindigkeit lokal verschwindet. Da wir ein quadratisches Simulationsgebiet verwenden folgt, dass der sich einstellende stationäre Hochstrombereich nicht kreisförmig ist, sondern in den diagonalen Richtungen etwas breiter ist als in den zur x- und y-Achse parallelen Richtungen. Im Unterschied zum zweidimensionalen Fall entsteht in diesem Fall also kein Tiefstromfilament, sondern ein von einem schmalen Tiefstromring umgebener Hochstrombereich. Die Entstehung eines isolierten Tiefstromfilaments ist bei den gegebenen Anfangsbedingungen schon aus topologischen Gründen unmöglich. Stellt man sich den von uns simulierten Bereich in alle Richtungen periodisch fortgesetzt vor, so sind die als Anfangsbedingungen gesetzten Hochstrombereiche separierte Inseln in einem zusammenhängenden Tiefstrombereich. Da sich aber zwei Hochstrombereiche aufgrund der repulsiven Wechselwirkung zweier Fronten nicht vereinigen können, bleibt die Topologie der Anfangsbedingungen für alle Zeiten erhalten. Die Hochstrominseln können sich also ausbreiten und so den Großteil des Tiefstrombereichs verdrängen, werden aber immer durch schmale Tiefstromgräben voneinander getrennt bleiben. Isolierte Tiefstrominseln in einem zusammenhängenden Hochstrombereich können also keinesfalls entstehen.

Man könnte an dieser Stelle die Entwicklung und den stationären Zustand des Systems in Abhängigkeit der Topologie der Anfangsbedingungen (Hochstromkreis, Hochstromring, Tiefstromkreis, Tiefstromring, ...) untersuchen. Da aber in realen Systemen Anfangsbedingungen meist kleine, zusammenhängende Hochstrombereiche (z.B. durch Zündung mittels Rauschen) sind und wir nur über begrenzte Rechnerressourcen verfügen, soll eine solche Diskussion hier unterbleiben.

8.2 Muster bei mittlerer Wärmeleitfähigkeit

Wie schon erwähnt ist es nicht möglich bei starker Wärmediffusion dreidimensionale Simulationen von Gebieten durchzuführen, die groß genug sind, um die bei hohen Frequenzen gefundenen Zielscheibenmuster aus Kapitel 7.3 zu erhalten. Wir haben jedoch in Kapitel 7.4.1 den Einfluss der Wärmeleitfähigkeit auf die zeitliche Entwicklung einer mit inhomogenen Anfangsbedingungen gestarteten Simulation in einem zweidimensionalen System untersucht und dabei festgestellt, dass sich die Ergebnisse qualitativ kaum ändern, solange die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Gittertemperatur größer ist als die des Ladungsträgersystems. Die Unterschiede lagen vor allem in den Größenordnungen der beobachteten Strukturen. Aus diesem Grund können

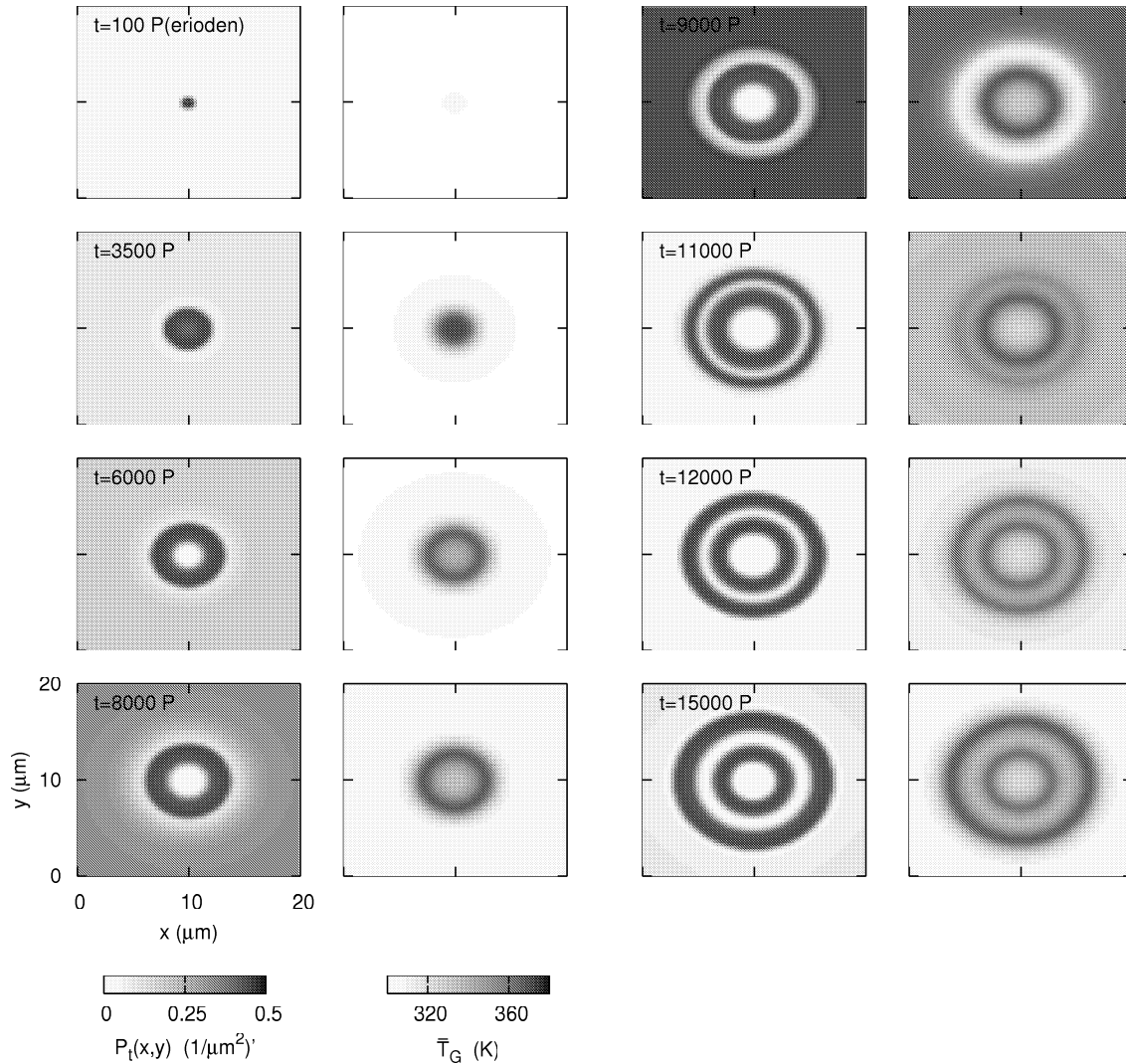


Abbildung 8.2: Raumladungsdichte $P_t(x, y)$ (links) und mittlere Gittertemperatur \bar{T}_G (rechts) für verschiedene Zeitpunkte ($V_0 = 116$ V, $f = 100$ kHz).

die in diesem Abschnitt diskutierten Ergebnisse von dreidimensionalen Simulationen der MISIM-Struktur zumindest qualitativ auf Systeme mit höherer Wärmediffusion übertragen werden.

Abbildung 8.2 zeigt für eine als oszillierendes Medium betriebene ($V_0 = 116$ V, $f = 100$ kHz) MISIM-Struktur die zeitliche Entwicklung der Dichte eingefangener Löcher (linke Spalte) und der mittleren Gittertemperatur (rechte Spalte) aus Anfangsbedingungen der Form 8.3 mit $X=Y=[19\ \mu\text{m}, 21\ \mu\text{m}]$. Anfangs herrschen an den Fronten des kleinen Hochstrombereich nur sehr geringe Temperaturen, was zu

einer Ausdehnung des Bereiches führt. Während der Tiefstrombereich seiner homogenen Dynamik folgt und in den Hochstromzustand wechselt, steigt die Temperatur innerhalb des anfänglich kleinen Hochstrombereichs und zwingt diesen zum Wechsel in den Tiefstromzustand. Da der Rand dieses Bereichs geringeren Temperaturen ausgesetzt ist, kann der Hochstromzustand dort aufrecht erhalten werden. Dies führt zu der Entstehung eines ringförmigen Hochstrombereichs. Da auch der mittlerweile im Hochstromzustand befindliche Rand der x - y -Ebene, der oszillierenden Dynamik folgt und zurück in den Tiefstromzustand wechselt, bleibt ein weiterer Hochstromring zurück. Das System stabilisiert also ein stationäres Muster aus konzentrischen Ringen. Solche Muster werden aus nahe liegenden Gründen Zielscheiben- (target-) Muster genannt.

8.3 Muster bei kleiner Wärmeleitfähigkeit

8.3.1 Spiralen

Aus zweidimensionalen Simulationen wissen wir, dass sich in anregbaren Medien bei kleiner Wärmeleitfähigkeit aus entsprechenden Anfangsbedingungen wandernde Pulse entwickeln können. Ferner haben wir in Abschnitt 2.3 die von Beale beobachtete Entwicklung von Spiralen aus offenen Frontenden beschrieben. In diesem Abschnitt wollen wir eine solche Situation nachstellen und berechnen, ob unser System die Beobachtungen qualitativ reproduziert. Hierzu verwenden wir als Anfangsbedingungen einen schmalen Hochstromstreifen ($X^h=[7\ \mu\text{m}, 13\ \mu\text{m}]$, $Y^h=[9\ \mu\text{m}, 10\ \mu\text{m}]$) welcher direkt neben einen schmalen Hochtemperaturstreifen liegt. Völlig analog zum Ladungsträgersystem werden die inhomogenen Anfangsbedingungen für die Gittertemperatur durch

$$T_G^0(x, y, z) = \begin{cases} 330\text{K} & : x \in X_T^h \wedge y \in Y_T^h \\ 300\text{K} & : \text{sonst} \end{cases} \quad (8.3)$$

mit $X_T^h=[7\ \mu\text{m}, 13\ \mu\text{m}]$ und $Y_T^h=[10\ \mu\text{m}, 11\ \mu\text{m}]$ präpariert. Abbildung 8.3 zeigt die Entwicklung des Systems aus diesen Anfangsbedingungen. Der mittlere Bereich des Hochstromstreifens bewegt sich mit der Zeit erwartungsgemäß in Richtung negativer y -Achse und zieht einen schmalen Hochtemperaturstreifen hinter sich her. Die Ränder des Hochstromstreifens jedoch legen sich um den anfänglichen Hochtemperaturstreifen und bilden so mit der Zeit eine rotierende Doppelspirale.

Verstehen lässt sich dieser Effekt, wenn man sich eines Vergleichs mit den Huygenschen Elementarwellen aus der optischen Beugung bedient. Betrachtet man, wie in der Skizze 8.4 dargestellt, jeden Ort des Hochstromstreifens als Ausgangspunkt für einen sich kreisförmig ausdehnenden Hochstrombereich, so erkennt man, dass der mittlere Bereich des Hochstromstreifens sich nur in Richtung negativer y -Achse

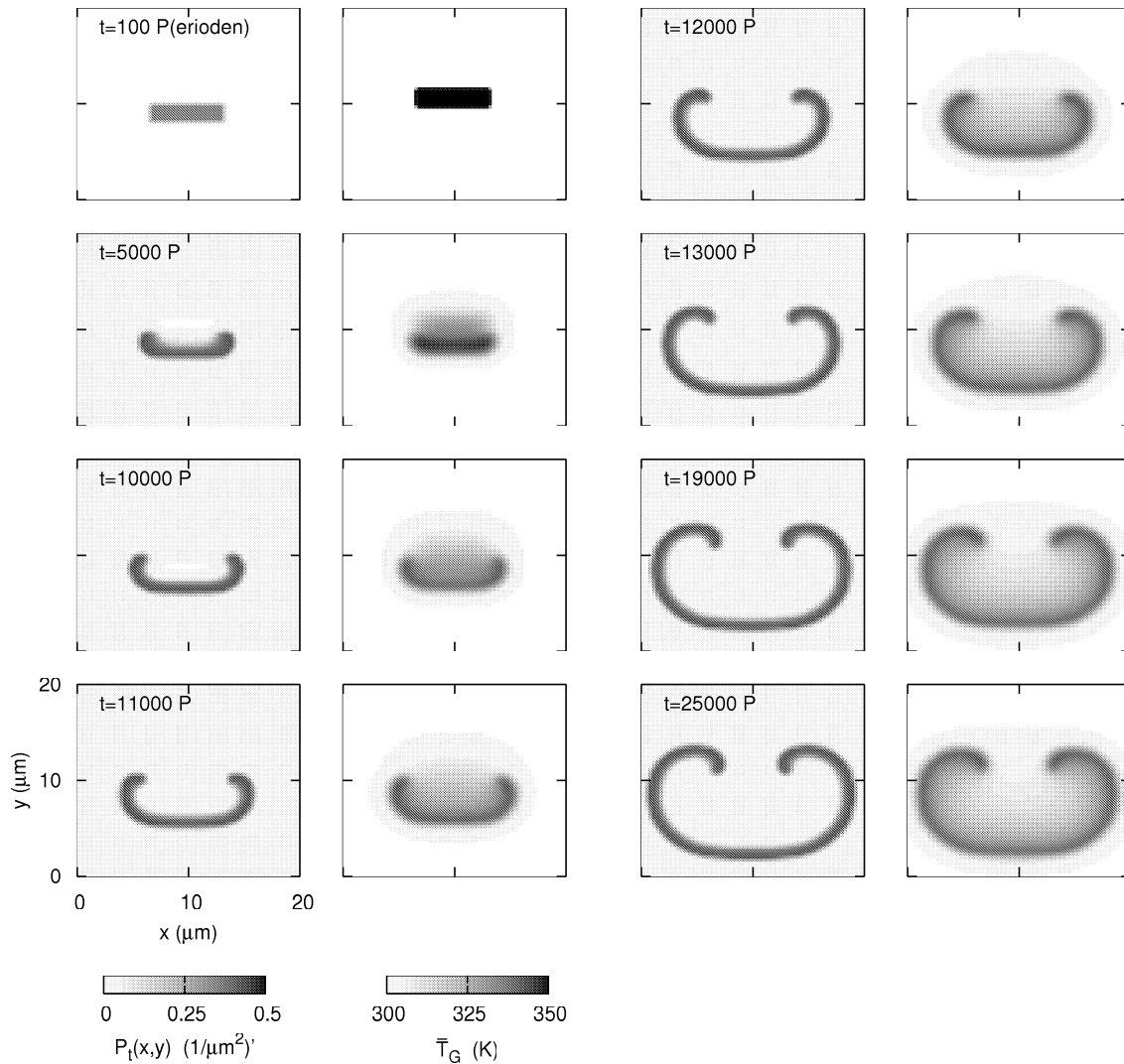


Abbildung 8.3: Raumladungsdichte $P_t(x, y)$ und mittlere Gittertemperatur \bar{T}_G für acht verschiedene Zeitpunkte ($V_0 = 116$ V, $f = 100$ kHz).

ausbreiten kann, da die Gittertemperatur in Richtung positiver y-Achse zu groß ist. Die Randpunkte jedoch können sich bis zu einem gewissen Winkel auch in Richtung positiver y-Achse ausdehnen, wodurch sich der Hochstromstreifen an den Rändern etwas krümmt. Einige Zeit später hat sich der Hochtemperaturstreifen in Richtung negativer y-Achse verschoben und die neuen Randpunkte können sich wiederum in Richtungen ausbreiten, die mehr als 90 Grad vom Normalenvektor der Front abweichen. Auf diese Weise rollen sich die Enden der Front mit der Zeit ein und es entwickelt sich eine Spirale. Das genaue Aussehen dieser Spirale wird von weiteren

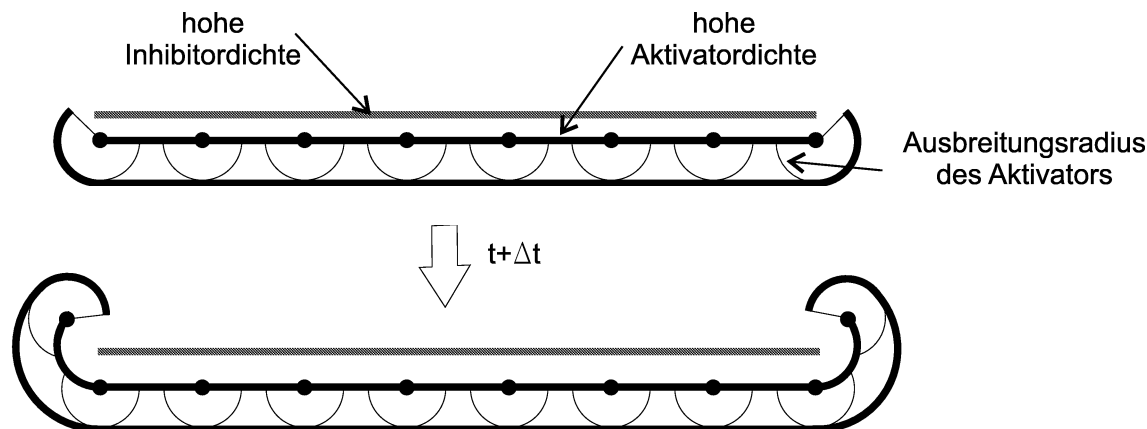


Abbildung 8.4: Schematische Darstellung zur Entwicklung von Spiralen aus offenen Enden einer wandernden Front.

Eigenschaften des Systems bestimmt. Eine wichtige Rolle spielen hierbei das Verhältnis der Reaktionsgeschwindigkeiten der beiden Komponenten (Ladungsträgersystem und Gittertemperatur) und das Verhältnis der Ausbreitungsgeschwindigkeiten.

Unser System zeigt also tatsächlich eine Entwicklung von rotierenden Spiralen aus offenen Frontenden, wie sie in Experimenten mehrfach beobachtet wurden (vgl. Abschnitt 2.3). Dabei haben vor allem die von Beale gezeigten Doppelspiralen große Ähnlichkeit mit dem von uns berechneten Systemverhalten.

8.3.2 Wellenzüge

In oszillierenden Medien konnten wir bei kleiner Wärmeleitfähigkeit in zweidimensionalen Simulationen die Entwicklung von Wellenzügen beobachten. Abbildung 8.5 zeigt in acht Momentaufnahmen die Entwicklung eines dreidimensionalen oszillierenden Mediums aus einem anfangs kleinen Hochstrombereich ($X^h = Y^h = [29 \mu\text{m}, 31 \mu\text{m}]$). Völlig analog zum zweidimensionalen Fall entwickelt sich eine ringförmige, sich ausdehnende Welle, während die fast homogenen Randgebiete langsam gegen den Hochstromzustand konvergieren. Nach der Vernichtung der Ringwelle entsteht auch in der dreidimensionalen Simulation im Zentrum der x-y-Ebene ein neuer Hochstrombereich, welcher sich wiederum zu einer Ringwelle entwickelt. Nach etwa 25000 Perioden hat diese die gleiche Ausdehnung wie die erste zum Zeitpunkt ihrer Vernichtung ($t \approx 12000$ Perioden). Die homogenen Randbereiche haben jedoch erst sehr geringe Dichten eingefangener Löcher generiert. Wie im zweidimensionalen Fall kann sich also die zweite Welle etwas weiter ausdehnen als die erste, was zu der Vermutung führt, dass auch die folgende Entwicklung analog zum zweidimensionalen Fall ist. Sicherheit kann in dieser Frage jedoch nur eine fortdauernde Simulation der dreidimensionalen Dynamik bringen. Sollte sich die Vermutung bestätigen, hat

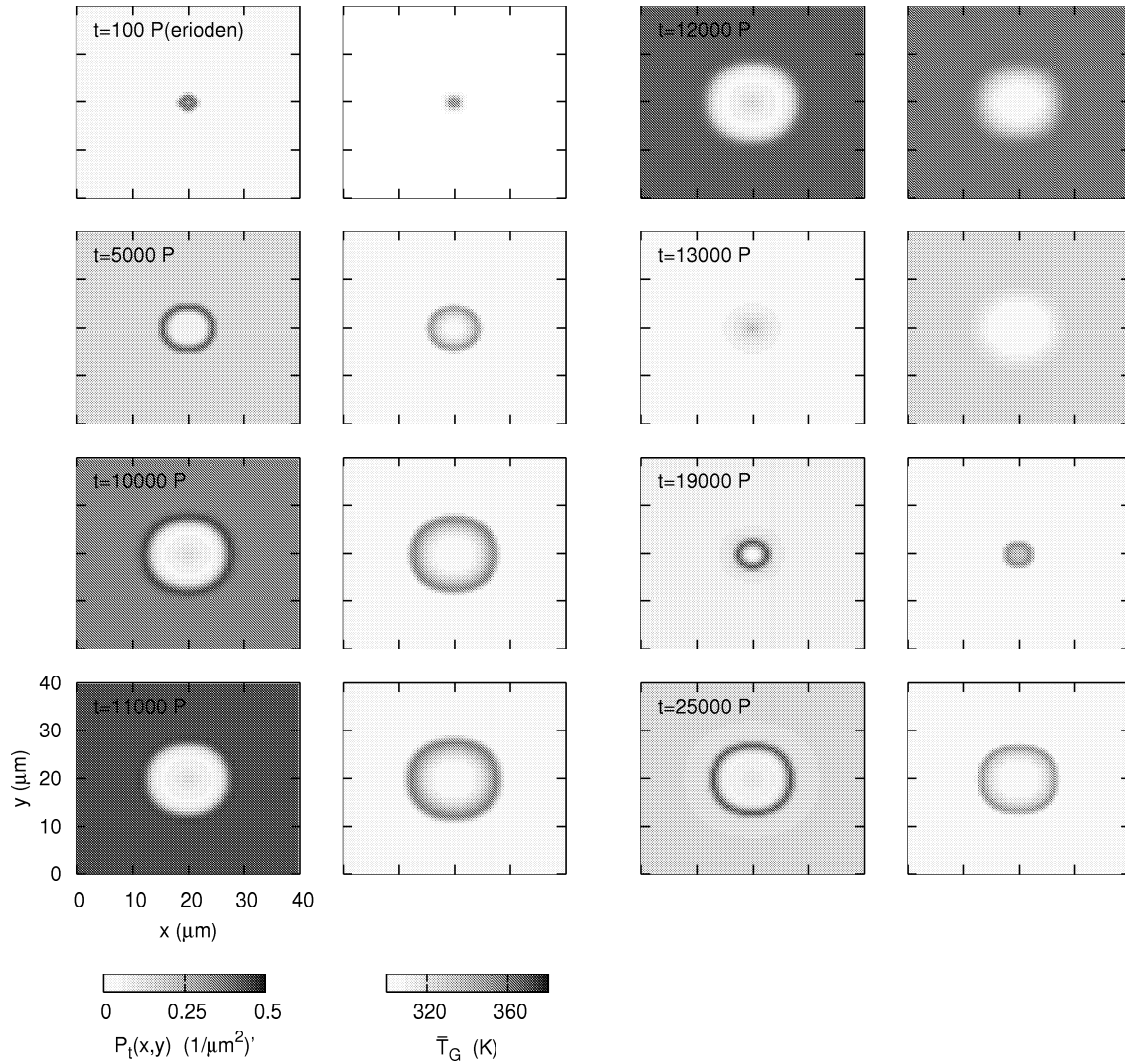


Abbildung 8.5: Raumladungsdichte $P_t(x, y)$ und mittlere Gittertemperatur \bar{T}_G für acht verschiedene Zeitpunkte bei kleiner Wärmeleitfähigkeit ($D_G = 10^1 \mu\text{m}^2\text{s}^{-1}$, $V_0 = 114.5 \text{ V}$, $f = 100 \text{ kHz}$).

das Szenario sehr große Ähnlichkeit mit den von Vlasenko [VDV⁺00] experimentell gefundenen und in Abschnitt 2.3 vorgestellten konzentrischen Ringwellen.

Kapitel 9

Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurden verschiedene Aspekte des Ladungsträgertransports einer MISIM (Metal Insulator Semiconductor Insulator Metal)-Struktur untersucht, dessen Halbleiterschicht aus mit Mangan dotiertem Zinksulfid (ZnS) besteht. Hierzu wurde ein Modell dieser Struktur erstellt, dessen wichtigste Bestandteile die Tunnelemission von Grenzflächenelektronen in das Leitungsband des ZnS, die Ladungsträgermultiplikation durch Stoßionisation, der Einfang freier Löcher in Löcherfallen und die Erwärmung des Kristallgitters durch ohmsche Wärmeproduktion sind. Da diese Prozesse von den Dichten und Stromdichten der freien Ladungsträger abhängen, wurde aus der Boltzmann-Gleichung mit Hilfe einer Momentenentwicklung ein hydrodynamisches Transportmodell zur Bestimmung dieser Größen hergeleitet.

Um das nichtlineare System partieller Differentialgleichungen zu lösen, wurde ein komplexer numerischer Algorithmus entwickelt. Dieser konnte zu einem hohen Grad parallelisiert werden, wodurch Langzeitsimulationen großer, dreidimensionaler Probleme erst möglich wurden.

Ein wichtiger Aspekt dieser Arbeit war die Untersuchung des longitudinalen Ladungsträgertransports. In einem ersten Schritt konnte gezeigt werden, dass das entworfene Modell bei zeitlich konstanter Kristallgittertemperatur eine Hysterese in der Strom-Spannungs-Kennlinie aufweist. In frühen Modellen zum Ladungsträgertransport in MISIM-Strukturen wurden häufig Stoßionisationskoeffizienten verwendet, die einen sehr steilen Anstieg mit der elektrischen Feldstärke zeigten. Da dieses Vorgehen nach der Veröffentlichung von Messungen, die eine wesentlich schwächere Feldabhängigkeit des Koeffizienten vermuten ließen, kritisch gesehen wurde, wurde in dieser Arbeit der Einfluss verschiedener Stoßionisationsmodelle auf die Strom-Spannungs-Kennlinien untersucht. Es stellte sich heraus, dass zwar die Ausdehnung und Lage des bistabilen Bereichs nicht aber dessen Existenz empfindlich von der Form des verwendeten Koeffizienten abhängt. Als Ursache dieser Bistabilität konnten Nichtlinearitäten in den Entwicklungsgleichungen der Dichte eingefangener Löcher und der Oberflächenladungsdichten identifiziert werden. Desweiteren wurde die Abhängigkeit der berechneten Hysteresebreite von verschiedenen Parametern untersucht und mit Experimenten verglichen, wobei sehr gute qualitative Übereinstimmungen gefunden wurden. Zwar stellte sich heraus, dass die Temperaturen der Ladungsträger weit höher als die des Kristallgitters sind, jedoch konnten für den longitudinalen Transport keine großen Unterschiede zwischen den Ergebnissen des Drift-Diffusions und des hydrodynamischen Modells gefunden werden.

Da hohe Dichten eingefangener Löcher starke elektrische Felder und damit hohe Stromdichten erzeugen, führen diese zu einer starken Zunahme der Gittertemperatur. Wird dies im Modell berücksichtigt, so ergibt sich eine zum Teil sehr komplexe Wechselwirkung der Dichte eingefangener Löcher mit der lokalen Gittertemperatur. Es konnte gezeigt werden, dass in diesem Fall viele Aspekte des Systemverhaltens qualitativ sehr gut durch relativ einfache, zweidimensionale Nullklinendiagramme beschrieben werden können. Die Dynamik des Systems zeigt dabei verschiedene Ei-

genschaften, die denen von bekannten Aktivator-Inhibitor-Systemen ähneln. Je nach Amplitude und Frequenz der Betriebsspannung verhielt sich die MISIM-Struktur wie ein bistabiles, anregbares oder oszillierendes Medium.

Um Strukturbildungsphänomene in der zur Hauptstromrichtung senkrechten Ebene zu studieren, wurde das Modell erst um eine und schließlich um zwei räumliche Dimensionen erweitert. Bei kleinen Frequenzen und einer Amplitude, die das System als bistabiles Medium charakterisiert, konnten sowohl in zweidimensionalen als auch in dreidimensionalen Simulationen stabile Hochstromfilamente und sich ausdehnende Hochstrombereiche (Domänen) gefunden werden.

Wurde das System als anregbares Medium betrieben (d.h. bei einer hohen Frequenz und nicht zu hohen Amplitude), traten bei hoher Wärmeleitfähigkeit des Kristallgitters wiederum stabile Hochstromfilamente auf. Beim Betrieb des Systems als oszillierendes Medium (hohe Frequenzen, hohe Amplituden), konnten in zweidimensionalen Simulationen stationäre, periodische Muster gefunden werden, während sich aus dreidimensionalen Rechnungen stationäre Muster aus konzentrischen Ringen (Zielscheibenmuster) ergaben.

Eine reduzierte Wärmeleitfähigkeit führte zu der Destabilisierung der stationären Muster. In anregbaren Medien konnten daraufhin wandernde Pulse in zweidimensionalen sowie Ringwellen in dreidimensionalen Simulationen beobachtet werden. In drei Dimensionen spielte die Topologie der Anfangsbedingungen eine entscheidende Rolle für die Entwicklung der dynamischen Muster. So konnte durch die Vorgabe einer wandernden Front mit offenen Enden die Entwicklung einer rotierenden Spirale initiiert werden. In oszillierenden Medien ergab sich aus zweidimensionalen Rechnungen das Bild eines Pulse aussendenden Zentrums, was sich in dreidimensionalen Simulationen als Ringwellen aussendender Mittelpunkt manifestierte. In dieser Arbeit konnte somit erstmals die Entwicklung komplexer stationärer und dynamischer Lumineszenzmuster in ZnS:Mn Dünnschicht-Strukturen auf der Basis eines mikroskopischen Modells des Ladungsträgertransports erklärt werden.

Die naheliegendste Aufgabe für zukünftige Arbeiten liegt sicherlich in der Ausarbeitung von Modellen, die eine höhere Ausbreitungsgeschwindigkeit des Ladungsträgersystems ermöglichen und so die unrealistische Annahme der reduzierten Wärmeleitfähigkeit unnötig werden lassen. Da auch von einer aktivierenden Wirkung der lokalen Gittertemperatur berichtet wurde [ZNK⁺00], könnte die Implementierung einer temperaturabhängigen Tunnelinjektion von Elektronen in die ZnS:Mn-Schicht zu interessanten Ergebnissen führen.

Auch innerhalb des präsentierten Modells sind jedoch noch einige Fragen offen. Beispielsweise konnte eine umfassende Analyse von Wechselwirkungen zwischen einzelnen Filamenten in bistabilen Medien und wandernden Pulsen in anregbaren und oszillierenden Medien im Rahmen dieser Arbeit nicht mehr durchgeführt werden.

Des weiteren wäre ein intensiveres Studium der Strukturbildungsphänomene in inhomogenen Bauelementen sicherlich lohnenswert. Vor allem der Einfluss von zeit-

lich veränderlichen Störtermen auf die Musterbildungsprozesse in zwei- und besonders in dreidimensionalen Simulationen wäre von großem Interesse für Vergleiche mit experimentellen Ergebnissen.

Auch hat das dreidimensionale Modell das Potential weitere komplexe Strukturen wie z.B. Labyrinthmuster zu erzeugen. Diese treten auf, wenn in einem System die Frontgeschwindigkeit mit der lokalen Krümmung der Front zunimmt. Auf diese Weise werden leichte Unebenheiten in einer glatten Front verstärkt und es entstehen labyrinthartige Strukturen. Um solche Muster zu finden wären weitere systematische Parameterstudien notwendig.

Anhang A

Flussdiagramme

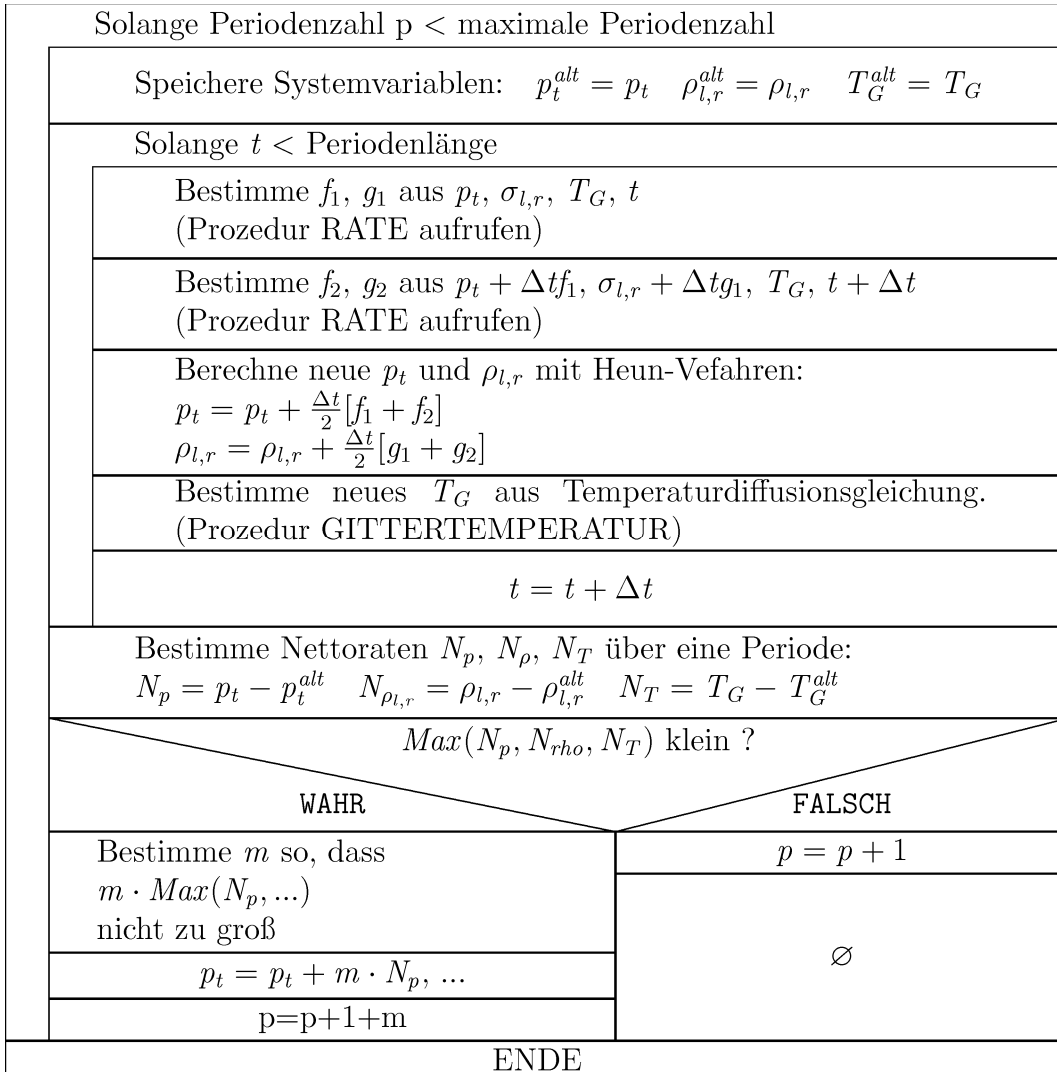
A.1 Hauptprogramm

Das Hauptprogramm führt die zeitliche Integration unseres Modells durch (vgl. Abschnitt 4.1), d.h. es berechnet für den neuen Zeitpunkt $t + \Delta t$ die Dichte eingefangener Löcher p_t und die Oberflächenladungsdichten $\rho_{l,r}$ durch das Heun-Verfahren (Gleichungen 4.1, 4.2)

$$\begin{aligned} p_t(t + \Delta t) &= p_t(t) + \frac{\Delta t}{2} \{f(p_t, \rho_{l,r}, T_G, t) \\ &\quad + f(p_t + \Delta t f(t), \rho(t) + \Delta t g(t), T_G + \Delta t h(t), t + \Delta t)\} \\ \rho_{l,r}(t + \Delta t) &= \rho_{l,r}(t) + \frac{\Delta t}{2} \{g(p_t, \rho_{l,r}, T_G, t) \\ &\quad + g(p_t + \Delta t f(t), \rho(t) + \Delta t g(t), T_G + \Delta t h(t), t + \Delta t)\}. \end{aligned}$$

Die neue Gittertemperatur T_G wird mit Hilfe des Eulerverfahrens bestimmt (Gleichung 4.3)

$$T_G(t + \Delta t) = T_G(t) + \Delta t [D_G \Delta \bar{r} T_G(t + \Delta t) + h(p_t, \rho_{l,r}, T_G, t)].$$



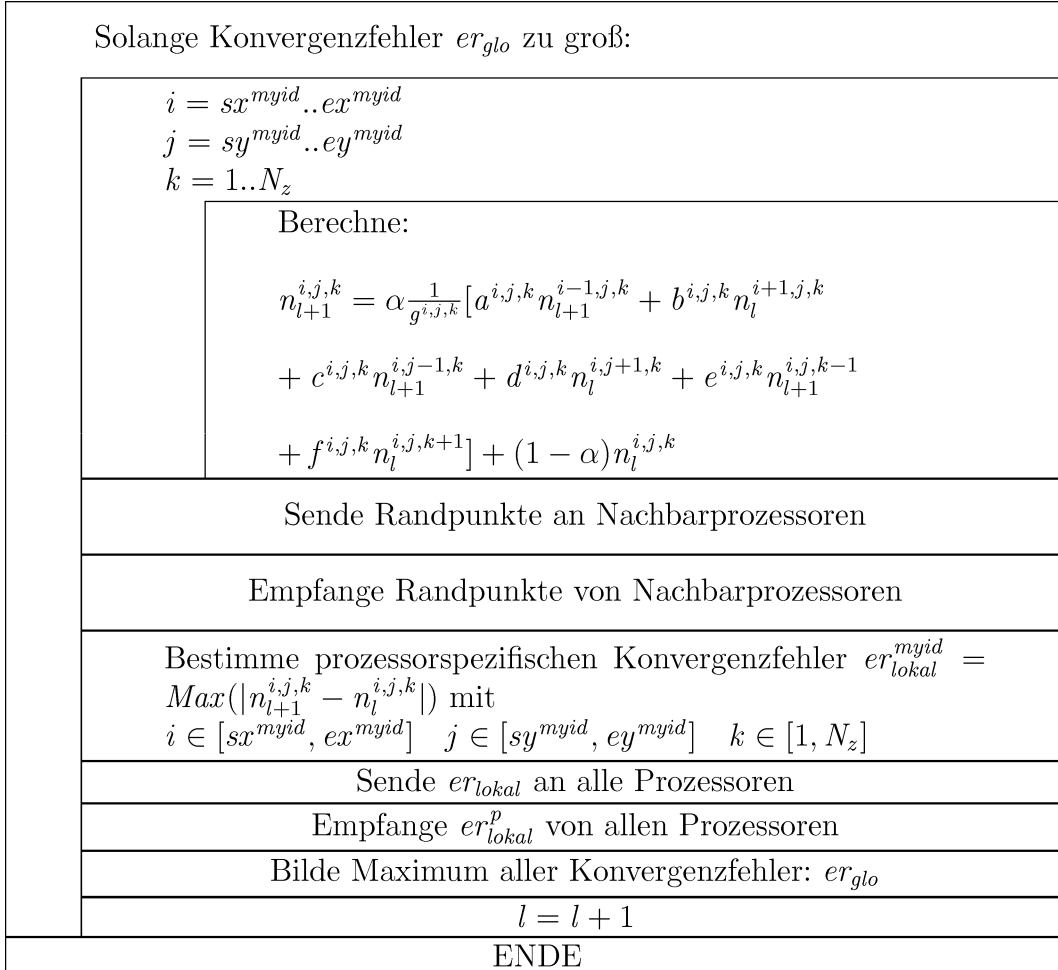
A.2 Prozedur zu Berechnung der Raten f und g

Diese Prozedur dient dazu, die Raten f und g zu bestimmen. Hierzu müssen die Transport- und die Poissongleichung gelöst werden, was jedoch in anderen Prozeduren geschieht. Aus diesem Flussdiagramm geht vielmehr hervor, in welcher Reihenfolge die Gleichungssysteme mit welchen Raten gelöst werden müssen um die Ladungsneutralität zu gewährleisten (vgl. Abschnitt 4.4).

Gegeben sind ein p_t , ein $\rho_{l,r}$, ein T_G und ein t
Bestimme Potential aus Poissongleichung (Prozedur POISSON)
Bestimme Tunnelstrom
Bestimme implizite und explizite Anteile der Raten G_{II} , R_{np} und R_{nt} und der Randbedingungen.
Löse die Kontinuitätsgleichung der Elektronen mit der Elektrentemperatur des letzten Zeitpunktes. (Prozedur ELEKTRO-NENDICHTE)
Bestimme korrigierte Rate \tilde{R}_{nt} und tatsächliche Oberflächenstromdichten $\tilde{j}_n^1, \tilde{j}_n^N$
Löse die Temperaturgleichung der Elektronen. (Prozedur ELEKTRONENTEMPÉRATUR)
Bestimme implizite und explizite Anteile der Raten G_{II} , R_{np} und R_{pt}
Löse die Kontinuitätsgleichung der freien Löcher mit der Löcher-temperatur des letzten Zeitpunktes. (Prozedur LÖCHERDICHTE)
Bestimme korrigierte Rate \tilde{R}_{pt} und tatsächliche Oberflächenstromdichten $\tilde{j}_p^1, \tilde{j}_p^N$
Löse die Temperaturgleichung der freien Löcher. (Prozedur LÖCHERTEMPÉRATUR)
Bestimme $f = \tilde{R}_{pt} - \tilde{R}_{nt}$ Bestimme g aus Oberflächenstromdichten
ENDE

A.3 Parallele Prozedur ELEKTRONENDICHTE

Die Prozessoren seien nummeriert von 1 bis Prozessorzahl und in der Variablen *myid* sei die eigene Prozessornummer gespeichert. Prozessor *n* verfüge über die Daten der Elektronendichte $n^{i,j,k}$ mit $i \in [sx^n, ex^n]$ $j \in [sy^n, ey^n]$ $k \in [1, N_z]$. Hierbei enthalten sx^n , ex^n , sy^n und ey^n die Aufteilung des Diskretisierungsgitters auf die Prozessoren. Zur Lösung der Kontinuitätsgleichung führt jeder Prozessor folgendes Unterprogramm aus (vgl. Abschnitt 4.6.2):



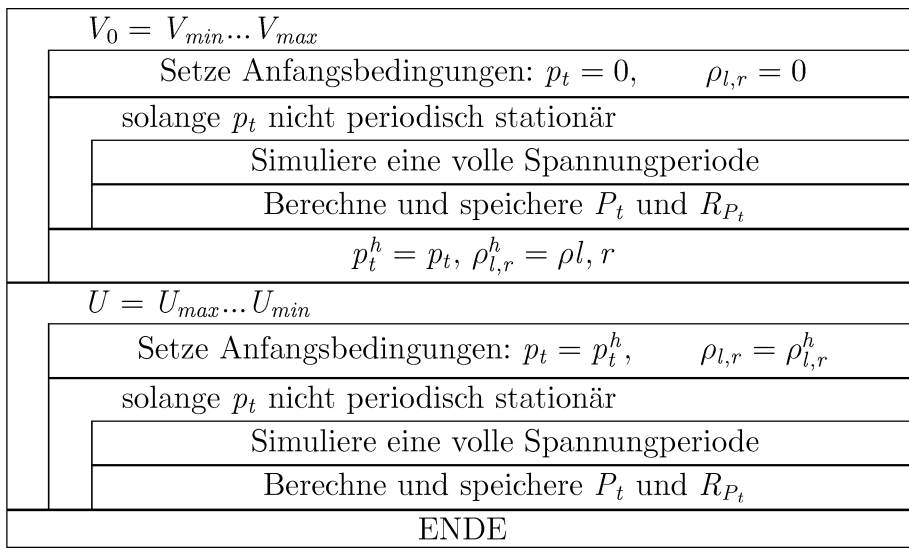
A.4 Parallele Prozedur POISSON

Zu Beginn verfüge Prozessor n über die Daten der Ladungsdichte $\rho^{i,j,k}$ mit $i \in [sx^n, ex^n]$ $j \in [sy^n, ey^n]$ $k \in [1, N_z]$. Hierbei enthalten sx^n , ex^n , sy^n und ey^n die Aufteilung des Diskretisierungsgitters auf die Prozessoren. Zur Lösung der Poissongleichung führt jeder Prozessor folgendes Unterprogramm aus (vgl. Abschnitt 4.6.3):

Lokal sind folgende Daten gegeben: $\rho^{i,j,k}$ mit $i \in [sx^{myid}, ex^{myid}]$ $j \in [sy^{myid}, ey^{myid}]$ $k \in [-N_{Is}, N_z + N_{Is}]$							
Durchlaufe $k = -N_{Is}..N_z + N_{Is}$ mit Schrittweite: Prozessorzahl							
<table border="1"> <tr> <td>$n = 1$ bis Prozessorzahl</td> </tr> <tr> <td>Sende Daten $\rho^{i,j,k+n}$ mit $i \in [sx^{myid}, ex^{myid}]$ $j \in [sy^{myid}, ey^{myid}]$ an Prozessor n</td> </tr> <tr> <td>Empfange Daten $\rho^{i,j,k+myid}$ mit $i \in [sx^n, ex^n]$ $j \in [sy^n, ey^n]$ von Prozessor n</td> </tr> <tr> <td>Fouriertransformiere $\rho^{i,j,k+myid}$</td> </tr> <tr> <td>$n = 1$ bis Prozessorzahl</td> </tr> <tr> <td>Sende Daten $\rho^{i,j,k+myid}$ mit $i \in [sx^n, ex^n]$ $j \in [sy^n, ey^n]$ an Prozessor n</td> </tr> <tr> <td>Empfange Daten $\rho^{i,j,k+n}$ mit $i \in [sx^{myid}, ex^{myid}]$ $j \in [sy^{myid}, ey^{myid}]$ von Prozessor n</td> </tr> </table>	$n = 1$ bis Prozessorzahl	Sende Daten $\rho^{i,j,k+n}$ mit $i \in [sx^{myid}, ex^{myid}]$ $j \in [sy^{myid}, ey^{myid}]$ an Prozessor n	Empfange Daten $\rho^{i,j,k+myid}$ mit $i \in [sx^n, ex^n]$ $j \in [sy^n, ey^n]$ von Prozessor n	Fouriertransformiere $\rho^{i,j,k+myid}$	$n = 1$ bis Prozessorzahl	Sende Daten $\rho^{i,j,k+myid}$ mit $i \in [sx^n, ex^n]$ $j \in [sy^n, ey^n]$ an Prozessor n	Empfange Daten $\rho^{i,j,k+n}$ mit $i \in [sx^{myid}, ex^{myid}]$ $j \in [sy^{myid}, ey^{myid}]$ von Prozessor n
$n = 1$ bis Prozessorzahl							
Sende Daten $\rho^{i,j,k+n}$ mit $i \in [sx^{myid}, ex^{myid}]$ $j \in [sy^{myid}, ey^{myid}]$ an Prozessor n							
Empfange Daten $\rho^{i,j,k+myid}$ mit $i \in [sx^n, ex^n]$ $j \in [sy^n, ey^n]$ von Prozessor n							
Fouriertransformiere $\rho^{i,j,k+myid}$							
$n = 1$ bis Prozessorzahl							
Sende Daten $\rho^{i,j,k+myid}$ mit $i \in [sx^n, ex^n]$ $j \in [sy^n, ey^n]$ an Prozessor n							
Empfange Daten $\rho^{i,j,k+n}$ mit $i \in [sx^{myid}, ex^{myid}]$ $j \in [sy^{myid}, ey^{myid}]$ von Prozessor n							
$i = sx^{myid}..ex^{myid}$ $j = sy^{myid}..ey^{myid}$							
Löse tridiagonales Gleichungssystem zur Bestimmung des Transformierten Potentials $\tilde{\varphi}^{i,j,k}$ $k \in [-N_{Is}, N_z + N_{Is}]$							
Durchlaufe $k = -N_{Is}..N_z + N_{Is}$ mit Schrittweite: Prozessorzahl							
<table border="1"> <tr> <td>$n = 1$ bis Prozessorzahl</td> </tr> <tr> <td>Sende Daten $\tilde{\varphi}^{i,j,k+n}$ mit $i \in [sx^{myid}, ex^{myid}]$ $j \in [sy^{myid}, ey^{myid}]$ an Prozessor n</td> </tr> <tr> <td>Empfange Daten $\tilde{\varphi}^{i,j,k+myid}$ mit $i \in [sx^n, ex^n]$ $j \in [sy^n, ey^n]$ von Prozessor n</td> </tr> <tr> <td>Fouriertransformiere $\tilde{\varphi}^{i,j,k+myid}$</td> </tr> <tr> <td>$n = 1$ bis Prozessorzahl</td> </tr> <tr> <td>Sende Daten $\tilde{\varphi}^{i,j,k+myid}$ mit $i \in [sx^n, ex^n]$ $j \in [sy^n, ey^n]$ an Prozessor n</td> </tr> <tr> <td>Empfange Daten $\tilde{\varphi}^{i,j,k+n}$ mit $i \in [sx^{myid}, ex^{myid}]$ $j \in [sy^{myid}, ey^{myid}]$ von Prozessor n</td> </tr> </table>	$n = 1$ bis Prozessorzahl	Sende Daten $\tilde{\varphi}^{i,j,k+n}$ mit $i \in [sx^{myid}, ex^{myid}]$ $j \in [sy^{myid}, ey^{myid}]$ an Prozessor n	Empfange Daten $\tilde{\varphi}^{i,j,k+myid}$ mit $i \in [sx^n, ex^n]$ $j \in [sy^n, ey^n]$ von Prozessor n	Fouriertransformiere $\tilde{\varphi}^{i,j,k+myid}$	$n = 1$ bis Prozessorzahl	Sende Daten $\tilde{\varphi}^{i,j,k+myid}$ mit $i \in [sx^n, ex^n]$ $j \in [sy^n, ey^n]$ an Prozessor n	Empfange Daten $\tilde{\varphi}^{i,j,k+n}$ mit $i \in [sx^{myid}, ex^{myid}]$ $j \in [sy^{myid}, ey^{myid}]$ von Prozessor n
$n = 1$ bis Prozessorzahl							
Sende Daten $\tilde{\varphi}^{i,j,k+n}$ mit $i \in [sx^{myid}, ex^{myid}]$ $j \in [sy^{myid}, ey^{myid}]$ an Prozessor n							
Empfange Daten $\tilde{\varphi}^{i,j,k+myid}$ mit $i \in [sx^n, ex^n]$ $j \in [sy^n, ey^n]$ von Prozessor n							
Fouriertransformiere $\tilde{\varphi}^{i,j,k+myid}$							
$n = 1$ bis Prozessorzahl							
Sende Daten $\tilde{\varphi}^{i,j,k+myid}$ mit $i \in [sx^n, ex^n]$ $j \in [sy^n, ey^n]$ an Prozessor n							
Empfange Daten $\tilde{\varphi}^{i,j,k+n}$ mit $i \in [sx^{myid}, ex^{myid}]$ $j \in [sy^{myid}, ey^{myid}]$ von Prozessor n							
ENDE							

A.5 Algorithmus zu Erzeugung eines Konvergenzdiagramms

Mit diesem Algorithmus können die Konvergenzdiagramme des ZnS:Mn-Modells bei konstanter Gittertemperatur erstellt werden (vgl. Abschnitt 6.1.2). V_0 bezeichnet die Amplitude der Betriebsspannung, P_t ist die über z integrierte Dichte der eingefangenen Löcher und R_{P_t} bezeichnet die Nettoeinfangrate von freien Löchern.



Anhang B

Simulationsparameter

Diese Parameter wurden in allen Simulationen verwendet, wenn nicht ausdrücklich etwas anderes erwähnt wurde.

parameter	value
Dicke der Isolatorschichten Dicke der ZnS:Mn-Schicht	$L_{ins} = 300 \text{ nm}$ $L = 500 \text{ nm}$
Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeiten	$\sigma_n = 10^7 \text{ cm/s}$ $\sigma_p = 10^7 \text{ cm/s}$
Ladungsträgermobilitäten (bei kleinen Feldern)	$\mu_n^0 = 165 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ [Sze69] $\mu_p^0 = 5 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ [Sze69]
Sättigungsdriftgeschwindigkeiten	$v_n^s = 210^7 \text{ cm/s}$ [FKR ⁺ 03] $v_p^s = 210^7 \text{ cm/s}$
Energierelaxationszeit	$\tau_0 = 10^{-13} \text{ s}$
Löcherfallendichte Locheinfangkoeffizient Lochemissionsrate bei 300 K	$N_t = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ $\gamma_c = 10^{-6} \text{ cm}^3/\text{s}$ $\tilde{\gamma}_e = 10^2 \text{ s}^{-1}$
Spezifische Wärmekapazität Dichte des ZnS Dichte des Isolatormaterial Wärmeleitfähigkeit des ZnS Wärmeleitfähigkeit des Isolators Thermische Widerstand an den Oberflächen	$c_L = 500 \text{ J/kgK}$ $\rho = 4 \text{ g/cm}^3$ $\rho = 4 \text{ g/cm}^3$ $\kappa = 17 \text{ W/mK}$ $\kappa = 17 \text{ W/mK}$ $\alpha = 40.0 \text{ m/s}$
Energetischer Abstand der Löcherfallen zum Valenzband ($E_t - E_v$)	$\Delta E = 0.5 \text{ eV}$ [VDV ⁺ 00]

Literaturverzeichnis

- [AFH96] John Argyris, Gunter Faust, and Maria Haase. *Die Erforschung des Chaos*. vieweg, 1996.
- [APP⁺95] W. M. Ang, S. Pennathur, L. Pham, J. F. Wagner, S. M. Goodnick, and A. A. Douglas. Evidence for band-to-band ionization in evaporated zns:mn alternating-current thin-film electroluminescent devices. *J. Appl. Phys* 77 6,2719, 1995.
- [Bea93] M. Beale. Uniform and filamentary transport in d.c. thin-film zns:mn electroluminescence devices. *Philosophical Magazine B* 68(5) 573, 1993.
- [Bla62] J. Blakemore. *Semiconductor Statistics*. Pergamon Press, 1962.
- [Bri89] E. Bringuier. Charge transfer in ZnS-type electroluminescence. *J.Appl.Phys* 66,1314, 1989.
- [Bri97] E. Bringuier. High-field conduction in semi-insulating ZnS-films. *Philosophical Magazine B* 75, 209, 1997.
- [BS92] Bergmann and Schäfer. *Lehrbuch der Experimentalphysik*. de Gruyter, 1992.
- [BV93a] A. Beletskii and N. Vlasenko. Autowaves in electroluminescent structures with intrinsic memory. *Tech. Phys. Lett.* 19 1, 13, 1993.
- [BV93b] A. Beletskii and N. Vlasenko. Flip-flop autowaves in thin-film electroluminescent structures. *Tech. Phys. Lett.* 19, 61, 1993.
- [Cry97] Colin Cryer. Numerik partieller Differentialgleichungen I. Homepage des Institutes für numerische Mathematik der WWU Münster, 1997.
- [Czy00] G. Czycholl. *Theoretische Festkörperphysik*. vieweg, 2000.
- [Des36] G. Destriau. *J. Chem Phys* 33,587, 1936.

- [FKR⁺03] N. Fitzer, A. Kuligk, R. Redmer, M. Städele, S. M. Goodnick, and W. Schattke. Full-band monte carlo simulation of high-field electron transport in gaas and zns. *Phys Review B* 67 201201, 2003.
- [G⁺95] C. Großen et al. Pattern formation of the electroluminescence in ac ZnS:Mn devices. *Springer Proceedings in Physics 79, Nonlinear Dynamics and Pattern Formation in Semiconductors and Devices*, 1995.
- [Gei04] A. Geiger. *Paralleles und Verteiltes Rechnen*. T-Systems, 2004.
- [GLS99] W. Groop, E. Lusk, and A. Skjellum. *Using MPI*. MIT Press, 1999.
- [Gro94] C. Großen. Strukturbildung in der ZnS:Mn Elektrolumineszenz. Diplomarbeit in der AG Purwins, Institut für angewandte Physik, WWU Münster, 1994.
- [Hag94] A. A. Hagberg. Fronts and patterns in reaction-diffusion equations. Dissertation, University of Arizona, 1994.
- [HK79] J. M. Hurd and C. N. King. Physical and electrical characterization of co-deposited zns:mn electroluminescent thin film structures. *J. Electronic Materials* 8 (6), 879, 1979.
- [HKW97] J. C. Hitt, D. Keir, and J. F. Wager. Static space charge in evaporated zns:mn alternating-current thin-film electroluminescent devices. *J. Appl. Phys* 83 (2), 1141, 1997.
- [HSA82] W. Howard, O. Sahni, and P. Alt. A simple model for the hysteretic behavior of ZnS:Mn thin-film electroluminescent devices. *J. Appl. Phys.* 53, 639, 1982.
- [IM77] T. Inoguchi and S. Mito. Phosphor films. *Electroluminescence* 179, 1977.
- [KM89] T. Kuhn and G. Mahler. Surface models for perpendicular ambipolar transport in kinetic and hydrodynamic theories. *Phy. Rev. B*, 18, 1989.
- [Kne98] Martin Kneip. Modellierung von temperatureinflüssen in halbleiterbauelementen. Dissertation an der Fakultät für Elektrotechnik, TU Wien, 1998.
- [KZNP97] B. Kukuk, S. Zuccaro, F.-J. Niedernostheide, and H. G. Purwins. Pattern formation and bifurcations in electroluminescent ZnS:Mn-films. *Acta Techn. CSAV* 42, 717, 1997.

- [Lun90] Mark Lundstrom. *Fundamentals of Carrier Transport*. Addison Wesley, 1990.
- [Mey03] K. Meyer. Hydrodynamischer ladungsträgertransport in ZnS:Mn misim-strukturen. Diplomarbeit in der AG Kuhn, Institut für Theoretische Physik II, WWU Münster, 2003.
- [MM82] R. Mach and G. O. Müller. Physical concepts of high-field, thin-film electroluminescence devices. *Physica Status Solidi A (1)*, 11, 1982.
- [MRNK06] K. Meyer, T. Raker, F.-J. Niedernostheide, and T. Kuhn. Hydrodynamic and drift-diffusion modelling of charge carrier transport in zns:mn thin-film electroluminescent structures. *Semicond. Sci. Technol.* 21 565, 2006.
- [MRO77] V. Mareello, W. Rühle, and A. Onton. The memory effect of ZnS:Mn ac thin-film electroluminescence. *Appl. Phys. Lett.* 31,452, 1977.
- [MRS90] P. Markowich, C. Ringhofer, and C. Schmeiser. *Semiconductor Equations*. Springer Verlag, 1990.
- [Mur89] J.D. Murray. *Mathematical Biology*. Springer, 11989.
- [NCVdB94] K. Neyts, D. Corlatan, P. De Visschere, and Van den Bossche. Observation and simulation of space-charge effects and hysteresis in zns:mn ac thin-film electroluminescent devices. *J.Appl.Phys.* 75 (10) 5339, 1994.
- [Nol93] W. Nolting. *Grundkurs: Theoretische Physik*. Verlag Zimmermann-Neufang, 1993.
- [NV90] K. Neyts and P. De Visschere. Analytical model for thin-film electroluminescent devices. *J.Appl.Phys.* 66 (8), 1990.
- [Rak00] T. Raker. Ladungsträgerdynamik in ZnS:Mn misim-strukturen. Diplomarbeit in der AG Kuhn, Institut für Theoretische Physik II, WWU Münster, 2000.
- [Rak03] T. Raker. Modellierung von ladungsträgertransport und strukturbildung in elektrolumineszierenden ZnS:Mn halbleiterbauelementen. Doktorarbeit in der AG Kuhn, Institut für Theoretische Physik II, WWU Münster, 2003.
- [RKF05] R. Redmer, A. Kuligk, and N. Fitzer. Ab initio impact ionization rate in gaas, gan, and zns. *Physical Review B*, 2005.

- [RMA80] H. Rüfer, W. Marrello, and A. Onton. Domain electroluminescence in ac thin-film devices. *J. Appl. Phys.* 51(2), 1163, 1980.
- [RNK⁺02] T. Raker, F. J. Niedernostheide, T. Kuhn, N. Fitzer, R. Redmer, S. Zuccaro, and H.G. Purwins. High field transport in electroluminescent devices: theory and experiment. *Physica B* 314, 185, 2002.
- [RO86] M. Rudan and F. Odeh. Multi-dimensional discretization scheme for the hydrodynamic model of semiconductor devices. *COMPEL* 5 3, 149-183, 1986.
- [Sch01] Andreas Schenk. Halbleiterbauelemente - Physikalische Grundlagen und Simulation. Homepage von Andreas Schenk, 2001.
- [See96] K. Seeger. *Semiconductor Physics*. Springer Verlag, 1996.
- [Sel84] S. Selberherr. *Analysis and Simulation of Semiconductor Devices*. Springer Verlag, 1984.
- [SG69] D. Scharfetter and H. Gummel. Large signal analysis of a silicon read diode oscillator. *IEEE Trans. Electron Devices ED-16*, 64-77, 1969.
- [SKT⁺81] H. Sasakura, H. Kobayashi, S. Tanaka, J. Mita, T. Tanaka, and H. Nakayama. The dependences of electroluminescence characteristics of zns:mn thin films upon their device parameters. *J. Appl. Phys.* 52 (11) 6901, 1981.
- [SR52] W. Shockley and W. T. Read. Statistics of the recombination of holes and electrons. *Phys. Review* 87 5, 835, 1952.
- [Sze69] S. Sze. *Physics of Semiconductor Devices*. John Wiley and Sons, 1969.
- [TA87] T. D. Thompson and J. W. Allen. Band-to-band impact ionisation rates in zns. *Journal of Physics C* 20, L499, 1987.
- [VDV⁺00] N. A. Vlasenko, Z. Denisova, L. Veligura, S. Zuccaro, F.-J. Niedernostheide, and H.-G. Purwins. Energy levels of defects in electroluminescent ZnS:Mn thin films exhibiting hysteresis and self-organized patterns. *J. Crystal Growth*, 214-215, 944, 2000.
- [ZNK⁺00] S. Zuccaro, F.-J. Niedernostheide, B. Kukuk, M. Strych, and H.-G. Purwins. Solitary current-density patterns in thin ZnS:Mn films. *Phys. Rev. E* 62, 1284, 2000.

- [Zuc97] S. Zuccaro. Diplomarbeit in der AG Purwins, Institut für angewandte Physik, WWU Münster, 1997.

Danksagung

Zum Abschluss dieser Arbeit möchte ich all denjenigen danken, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Mein erster Dank gilt selbstverständlich Herrn Prof. Dr. Kuhn, der mir ermöglicht hat in seiner Arbeitsgruppe diese interessante Thematik zu bearbeiten. Besonders für die ständige Gesprächsbereitschaft und die zahlreichen wertvollen Anregungen möchte ich mich noch einmal herzlich bedanken.

Ebenso danke ich dem zweiten Betreuer dieser Arbeit Priv. Doz. Dr. Franz-Josef Niedernostheide, der mir vor allem bei Veröffentlichungen von Ergebnissen stets zur Seite stand.

Weiterhin bedanke ich mich bei Dr. Markus Glanemann, Dr. Juliane Wühr, Dr. Thomas Raker, Dr. Birgit Krummheuer, Dr. Annette Krügel, Dr. Tobias Pfingsten, Doris Reiter, Florian Büter, Sabine Körbel und Andreas Krumpel für die freundschaftliche Arbeitsatmosphäre.

Besonders bedanken möchte ich mich bei Thomas Bauer für die schnelle Hilfe bei zahlreichen Problemen mit der Informationstechnologie und bei Daniel Ebbeler für das gemeinsame Kaffeeprojekt.

Auch den Korrekturlesern Oliver Matschuck, Imke Schöpfer, Stefanie Knaup und Volker Meyer möchte ich meinen Dank aussprechen.

Der letzte Dank gilt meinen Eltern, die mich während des Studium und der Promotion zu jeder Zeit bedingungslos unterstützt haben.

Lebenslauf

Name: Karsten Meyer
Geburtsdatum: 24. Januar 1977
Geburtsort: Meppen
Staatsangehörigkeit: deutsch
Eltern: Georg Meyer und
Katharina Meyer geb. Deters

Schulbildung:

1983-1987 Grundschohle Stavorn
1987-1989 Orientierungsstufe Sögel
1989-1996 Hümmling-Gymnasium Sögel, Abitur

Studium:

1997-2000 Physik an der WWU Münster
2000-2001 Physik an der University of Auckland (Neuseeland)
2001-2003 Physik an der WWU Münster
19.09.2003 Diplom
seit 04.2004 Promotionsstudium am Institut für Festkörpertheorie
der WWU-Münster in der AG Prof. Kuhn

Tätigkeiten:

2001-2003 Studentische Hilfskraft als Tutor in theoretischer Physik
2003-2007 Wissenschaftlicher Mitarbeiter und Tutor an der WWU Münster

Publikationen und Konferenzbeiträge

Konferenzbeiträge:

- „Ladungsträgerdynamik in ZnS:Mn Halbleiterbauelementen“, DPG-Fühjahrstagung 2005, Berlin
- „Transportphenomena in ZnS:Mn Devices“, Windows to Complexity, April 2005, Münster
- „Anwendung paralleler Algorithmen in der Ladungsträgerdynamik am Beispiel des Drift-Diffusionsmodells“, Münsteraner Kolloquium Parallelität, 6. Dezember 2005
- „Charge transport and filament formation in ZnS:Mn thin film structures“, ICPS, Juli 2006, Wien

Veröffentlichungen:

- K.Meyer, T.Raker, F.-J. Niedernostheide and T. Kuhn, „Hydrodynamic and drift-diffusion modelling of charge carrier transport in ZnS:Mn thin-film electroluminescent structures“, Semiconductor Science and Technology 21 565-574 (2006)
- K.Meyer, T.Raker, F.-J. Niedernostheide and T. Kuhn, „Charge transport and filament formation in ZnS:Mn thin film structures“, Proceedings of the 28th ICPS (2006)