

# Inhaltsverzeichnis

<b>Einleitung</b>	<b>vii</b>
<b>1 Simulation in der Halbleiterphysik</b>	<b>1</b>
1.1 Aktueller Stand in der Halbleitersimulation . . . . .	1
1.2 Neuer Ansatz für Nichtgleichgewichts-Situationen . . . . .	3
1.3 Eingabesystem . . . . .	5
<b>2 Bandstruktur</b>	<b>9</b>
2.1 Grundlagen . . . . .	10
2.2 Darstellung des $kp$ -Hamiltonoperators . . . . .	14
2.3 Diskretisierung . . . . .	21
2.4 Einband-Schrödingergleichung . . . . .	25
2.5 Magnetfeld . . . . .	26
2.6 Zusammenfassung . . . . .	29
<b>3 Elektronische Struktur im Nichtgleichgewicht</b>	<b>31</b>
3.1 Pauli-Master-Gleichung . . . . .	32
3.2 Neues Transportmodell für dissipativen Transport . . . . .	34
3.3 Vergleich der Methoden . . . . .	43
3.4 Zusammenfassung und Ausblick . . . . .	48
<b>4 Halbleitergleichungen</b>	<b>49</b>
4.1 Poissongleichung . . . . .	49
4.2 Stromgleichungen . . . . .	51
4.3 Spannungsgleichung . . . . .	53
4.4 Numerik partieller Differenzialgleichungen . . . . .	60
4.5 Zusammenfassung . . . . .	64
<b>5 Numerische Lösung des Gesamtproblems</b>	<b>67</b>
5.1 Mathematische Formulierung des Gleichungssystems . . . . .	67
5.2 Selbstkonsistente Lösung der Schrödinger- und Poissongleichung . . . . .	70
5.2.1 Nichtlineare Poissongleichung . . . . .	70
5.2.2 Newton-Verfahren . . . . .	71

5.2.3	Schrödinger-Poisson . . . . .	72
5.3	Lösung des Nichtgleichgewichtsproblems . . . . .	74
5.3.1	Blockiteratives Verfahren . . . . .	74
5.3.2	Gekoppelte Lösung . . . . .	75
5.4	Zusammenfassung . . . . .	78
<b>6</b>	<b>Vorhersage für optische und elektrische Eigenschaften einzelner Quantenpunkte</b>	<b>79</b>
6.1	Experimenteller Aufbau . . . . .	80
6.2	Grundgeometrie der Quantenpunkte . . . . .	81
6.3	Inhomogenes Legierungsprofil . . . . .	94
6.4	Optische Eigenschaften . . . . .	96
6.5	Exzitoniche Korrektur . . . . .	101
6.6	Simulation von Quantenpunkten mit Magnetfeld . . . . .	103
<b>7</b>	<b>Weitere Anwendungen</b>	<b>109</b>
7.1	Nano-MOSFET . . . . .	109
7.1.1	Double-Gate-MOSFET . . . . .	110
7.1.2	Vergleich mit Single-Gate-MOSFET . . . . .	121
7.1.3	Zusammenfassung . . . . .	121
7.2	Si/SiGe-Quantenkaskaden-Strukturen . . . . .	125
7.3	Zweidimensionale Löchgase in GaN/AlGaIn-Heterostrukturen . .	131
<b>8</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>137</b>
<b>A</b>	<b>Diskretisierung der Poisson- und Stromgleichung</b>	<b>139</b>
<b>B</b>	<b>Diskretisierung der Verspannungsgleichung</b>	<b>151</b>
<b>C</b>	<b>Kp-Hamiltonoperator für Wurtzit</b>	<b>161</b>
<b>D</b>	<b>Modelle für die Dichteberechnung in 1D, 2D und 3D</b>	<b>167</b>
<b>E</b>	<b>Diskretisierung des Hamiltonoperators</b>	<b>177</b>
<b>F</b>	<b>Fermi-Funktionen</b>	<b>185</b>
<b>G</b>	<b>Modellierung von Metall-Oxid-Silizium-Kontakten</b>	<b>189</b>
<b>H</b>	<b>Ladungsträgerbeweglichkeit und Rekombination</b>	<b>193</b>
<b>I</b>	<b>Bandkantenverlauf in Heterostrukturen</b>	<b>197</b>
<b>J</b>	<b>Gitterdefinition</b>	<b>201</b>

<i>Inhaltsverzeichnis</i>	v
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>207</b>
<b>Danksagung</b>	<b>214</b>