

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	vii
1 Simulation in der Halbleiterphysik	1
1.1 Aktueller Stand in der Halbleitersimulation	1
1.2 Neuer Ansatz für Nichtgleichgewichts-Situationen	3
1.3 Eingabesystem	5
2 Bandstruktur	9
2.1 Grundlagen	10
2.2 Darstellung des kp-Hamiltonoperators	14
2.3 Diskretisierung	21
2.4 Einband-Schrödinger-Gleichung	25
2.5 Magnetfeld	26
2.6 Zusammenfassung	29
3 Elektronische Struktur im Nichtgleichgewicht	31
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
4 Halbleitergleichungen	49
4.1 Poissons-Gleichung	49
4.2 Stromgleichungen	51
4.3 Verspannungsgleichung	53
4.4 Numerik partieller Differenzialgleichungen	60
4.5 Zusammenfassung	64
5 Numerische Lösung des Gesamtproblems	67
5.1 Mathematische Formulierung des Gleichungssystems	67
5.2 Selbstkonsistente Lösung der Schrödinger- und Poissons-Gleichung	70
5.2.1 Nichtlineare Poissons-Gleichung	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
6 Vorhersage für optische und elektrische Eigenschaften einzelner Quantenpunkte	79
6.1 Experimenteller Aufbau	80
6.2 Grundgeometrie der Quantenpunkte	81
6.3 Inhomogenes Legierungsprofil	94
6.4 Optische Eigenschaften	96
6.5 Exzitonische Korrektur	101
6.6 Simulation von Quantenpunkten mit Magnetfeld	103
7 Weitere Anwendungen	109
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 Löchergase in GaN/AlGaN-Heterostrukturen	131
8 Zusammenfassung und Ausblick	137
A Diskretisierung der Poisson- und Stromgleichung	139
B Diskretisierung der Verspannungsgleichung	151
C K_p-Hamiltonoperator für Wurtzit	161
D Modelle für die Dichteberechnung in 1D, 2D und 3D	167
E Diskretisierung des Hamiltonoperators	177
F Fermi-Funktionen	185
G Modellierung von Metall-Oxid-Silizium-Kontakten	189
H Ladungsträgerbeweglichkeit und Rekombination	193
I Bandkantenverlauf in Heterostrukturen	197
J Gitterdefinition	201

Inhaltsverzeichnis

v

Literaturverzeichnis	207
Danksagung	214