

Dipl.-Ing. Dr. Christoph Auer
Institut für Theoretische Physik – Computational Physics
E-Mail: auer@itp.tugraz.at
Tel.: 0316 873 8187



Dipl.-Ing. Dr. Martin Galler
Institut für Theoretische Physik – Computational Physics
E-Mail: galler@itp.tugraz.at
Tel.: 0316 873 8186



Ladungstransport in mesoskopischen Halbleiterstrukturen

Carrier Transport in Mesoscopic Systems

Moderne Mikroprozessoren beinhalten mehrere hundert Millionen Transistoren mit Abmessungen in der Größenordnung von einigen zehn Nanometern. Für die Entwicklung dieser integrierten Schaltkreise spielen Computersimulationen des Ladungstransports in Halbleiterstrukturen eine entscheidende Rolle. Die fortschreitende Verkleinerung der Bauelemente stellt immer höhere Anforderungen an die Transportsimulation. Eine genaue physikalische Beschreibung der Dynamik von Ladungsträgern ist nur mehr mit sehr komplexen Modellen möglich. Die Vielschichtigkeit der Problemstellung machen dieses Arbeitsgebiet besonders interessant. Typische Transportmodelle beruhen auf den Konzepten der Quantenmechanik, der klassischen kinetischen Theorie und der Elektrodynamik. Die effiziente numerische Lösung der Transportgleichungen ist ein weiterer wichtiger Aspekt. Für viele Anwendungen sind kinetische Gleichungen vom Boltzmann-Typ von zentraler Bedeutung. Diese Gleichungen bestimmen die zeitliche Entwicklung der Verteilung von Elektronen im Phasenraum unter dem Einfluss von elektrischen Feldern und Streuprozessen. Mathematisch gesehen handelt es sich um hochdimensionale Integro-Differentialgleichungen, deren numerische Behandlung äußerst schwierig und zeitaufwendig ist. Für den Einsatz in der industriellen Praxis ist es notwendig, möglichst effiziente Lösungsverfahren bereitzustellen.

Seit dem Abschluss des Diplomstudiums der Technischen Physik an der TU Graz im Jahr 2002 beschäftigen wir uns mit der Entwicklung neuer numerischer Methoden zur Lösung von Halbleiter-Boltzmann-Gleichungen. Unter der Betreuung von Prof. Schürer absolvierten wir das Doktoratsstudium an der TU Graz. Die Forschungsarbeit wurde hauptsächlich am Institut für Theoretische Physik - Computational Physics im Rahmen von FWF-Projekten durchgeführt. Im Frühjahr 2004 waren wir für je drei Monate als ‚Young Researchers‘ des EU-Projekts HYKE am Institut für Mathematik und Informatik der Universität Catania in Italien tätig. Mit den von uns entwickelten Verfahren können Boltzmann-Gleichungen deterministisch gelöst und so die Verteilungsfunktionen der Elektronen direkt berechnet werden. Im Gegensatz zu stochastischen Methoden, wie z.B. Monte Carlo Simulationen, sind die Ergebnisse deterministischer Rechnungen frei von statistischen Fehlern. Vor allem für zeitabhängige und niedrigdimensionale Problemstellungen (z.B. zweidimensionale Elektronengase) erweisen sich die direkten Lösungsmethoden als sehr effizient. Wesentliche Elemente unserer numerischen Algorithmen sind ‚shock-capturing‘ Finite-Differenzen Methoden, adaptive Gitter und lokale Zeitschrittverfahren.

Mit den entwickelten Methoden untersuchen wir Transportphänomene in Halbleiterbauelementen, die von einer starken Nichtgleichgewichtsdynamik der Ladungsträger geprägt sind. Aufgrund der kleinen Abmessungen treten in modernen Transistoren sehr große elektrische Felder und sehr große Gradienten der Ladungsdichte auf. Dadurch weichen die Phasenraumverteilungen der Elektronen stark von lokalen Gleichgewichtsverteilungen ab. In solchen Situationen verlieren einfache makroskopische Transportmodelle wie Drift-Diffusions oder quasi-hydrodynamische Gleichungen ihre Gültigkeit. Abbildung 1 zeigt die Verteilung der Elektronen im Impulsraum an einer Grenzschicht zwischen niedrig und hoch dotierten Bereichen eines GaAs-MESFETs.

Ein wichtiger Faktor der Elektronenkinetik sind Streuprozesse, vor allem jene verursacht durch die Wechselwirkung mit Phononen, den Quanten der Gitterschwingungen des Kristalls. Die Kinetik gekoppelter Systeme von Elektronen und Phononen gehört zu unseren

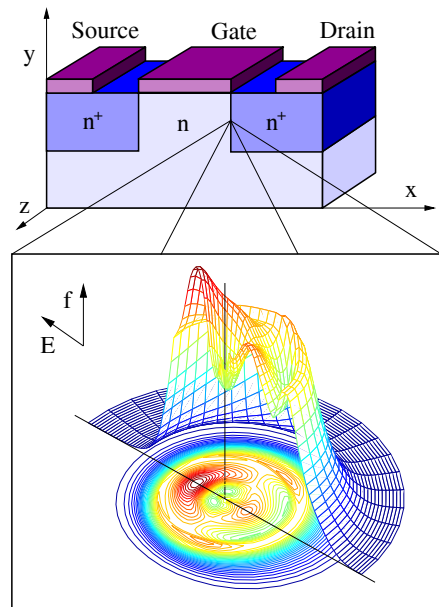


Abb.1: Elektronenverteilungsfunktion als Lösung der Halbleiter-Boltzmann-Gleichung in einem GaAs-MESFET.

vorrangigen Forschungsinteressen. Unseren Simulationen erlauben sehr genaue Studien des Hot-Phonon Effekts, der die Rückwirkung von Phononen im Nichtgleichgewicht auf den Elektronentransport beschreibt. Dieses Transportphänomen wird zur Zeit anhand niedrigdimensionaler Elektronengase untersucht. Anwendungsbeispiele sind Elektronen in nanostrukturierten Halbleitern sowie Elektronen in metallischen Kohlenstoff-Nanoröhrchen.

Carrier Transport in Mesoscopic Systems

Simulations of the carrier transport in semiconductors play an important role in the development of modern integrated circuits. With the increasing miniaturization of semiconductor devices, very sophisticated transport models must be used to accurately describe the dynamics of carriers and their interplay with the crystal. Among them, transport equations of Boltzmann-type are of essential importance. These equations determine the temporal evolution of the phase-space distribution functions of electrons under the influence of electric fields and scattering processes. Since Boltzmann transport equations are high-dimensional integro-differential equations, their numerical solution is a very complex problem.

To cope with these difficulties, we developed deterministic numerical methods based on shock-capturing finite-difference schemes, adaptive meshes and local time steps. These approaches are clearly advantageous in comparison to Monte Carlo techniques by offering results without statistical noise. In addition, they allow us to study non-equilibrium distribution functions, which are so typical in nanoscaled semiconductor devices. As an example for our recent research activities, the investigation of hot-phonon effects in low-dimensional electron gases formed in heterostructure-transistors and in carbon-nanotubes should be mentioned. Here, our methods proved to be efficient and accurate tools for gaining a deeper insight in the transport features of modern semiconductor devices.