Modellierung und Simulation von Bauelementen der Nano– und Optoelektronik

Herbert Gajewski, Annegret Glitzky, Jens Griepentrog, Rolf Hünlich, Hans–Christoph Kaiser, Joachim Rehberg, Holger Stephan[1], *Wilfried Röpke*[2], *Hans Wenzel*[3]

[1] Weierstraß–Institut für Angewandte Analysis und Stochastik (WIAS)
Mohrenstr. 39, D – 10117 Berlin

[2] Institut für Halbleiterphysik Frankfurt (Oder) GmbH (IHP)
Walter-Korsing-Straße 2, D – 15230 Frankfurt (Oder)

[3] Ferdinand–Braun–Institut für Höchstfrequenztechnik (FBH)
Rudower Chaussee 5, D – 12489 Berlin

Inhaltsverzeichnis

Vorwort

In vielen Zweigen der modernen Technik spielen nano– und optoelektronische Bauelemente eine wichtige Rolle. Zu ihrer Entwicklung sind mathematische Modellierung und numerische Simulation unverzichtbare Hilfsmittel. Am Weierstraß–Institut wurde in den letzten Jahren intensiv an der mathematischen Modellierung von Technologieschritten zur Herstellung von Bauelementen und der in ihnen ablaufenden Ladungstransportprozesse gearbeitet. Auf der Grundlage der Analyse der beschreibenden Systeme nichtlinearer partieller Differentialgleichungen entstanden die weithin akzeptierten Simulationsprogramme DIOS (Diffusion, Implantation, Oxidation in Semiconductors) und ToSCA (Two–dimensional Semiconductor Analysis Package).

Im folgenden wird die Nutzung unserer Ergebnisse zur Entwicklung von Silizium–Germanium–Heterobipolartransistoren bzw. Quantum–Well–Halbleiterlasern innerhalb zweier, durch das BMBF geförderter Projekte[1] beschrieben. Beide Projekte leben von enger interdisziplinärer Kooperation mit unseren Partnern vom Institut für Halbleiterphysik Frankfurt(Oder) bzw. vom Ferdinand–Braun–Institut für Höchstfrequenztechnik Berlin.

Berlin, den 31. Januar 1996 H. Gajewski

[1] Förderkennzeichen GA7FVB-1.0M840 bzw. GA7FVB-1.0M850

Zu einigen Fragen der Modellierung und Simulation bei der Entwicklung von SiGe–Heterojunction–Bipolartransistoren

Rolf Hünlich, Annegret Glitzky, Jens Griepentrog[1] *und Wilfried Röpke*[2]

[1] Weierstraß–Institut für Angewandte Analysis und Stochastik (WIAS)
Mohrenstr. 39, D – 10117 Berlin
[2] Institut für Halbleiterphysik Frankfurt (Oder) GmbH (IHP)
Walter-Korsing-Straße 2, D – 15230 Frankfurt (Oder)

Abstract. The aim of this paper is to show that the cooperation of mathematicians from the WIAS with physicists and engineers from the IHP in the field of modelling and simulation effectively supports the design of modern nanoelectronic devices such as SiGe–HBTs. Because of their promising properties these transistors are expected to find many applications in the booming market for wireless systems. Moreover, they could be manufactured at low cost in large volume. The design of SiGe–HBTs requires among others the numerical simulation of basic fabrication steps and of the electrical behaviour of the devices theirselves. Corresponding simulation programs must be improved continuously. This again implies the necessity of mathematical investigations concerned with model equations which the simulation programs are based on. Here this will be demonstrated by topical examples.

1 Einleitung

Vielfältige Anwendungsmöglichkeiten in der Kommunikationstechnik (drahtlose Telefone und lokale Computernetze, Mobilfunk) und im Verkehrswesen (Abstandsradarsysteme, Verkehrsleitsysteme, Autopiloten) stimulieren die Entwicklung von neuartigen Bauelementen der Nanoelektronik, vor allem den Silizium–Germanium–Heterojunction–Bipolartransistoren (SiGe–HBT's; siehe [18]). Schaltkreise mit derartigen Bauelementen könnten kostengünstig, in großer Stückzahl und auf hohem Integrationsniveau auf der Grundlage der sicher beherrschten Silizium–Technologie hergestellt werden. Entwicklungsarbeiten zum SiGe–HBT werden weltweit stark vorangetrieben; sie bilden auch am IHP einen wichtigen Schwerpunkt, und zwar im Rahmen des LOTUS–Projektes im Verbund mit der Daimler–Benz AG Ulm, mit der Ruhr-Universität Bochum, der Universität Bremen und der Technischen Universität Ilmenau. Hierbei ist es immer häufiger notwendig, die theoretischen und experimentellen Forschungsarbeiten, insbesondere auch zu einzelnen Aspekten des Fertigungsprozesses solcher Transistoren, wegen ihrer zunehmenden Komplexität durch Simulation zu unterstützen. Am IHP werden hierzu u. a.

die Technologiesimulatoren SUPREM [15, 21] und vor allem DIOS [17, 20] sowie der Bauelementesimulator ToSCA [2, 4] benutzt. Entsprechend der technologischen Weiterentwicklung sind die Simulationsprogramme ständig sowohl bezüglich der Modelle als auch der Codes zur numerischen Lösung der entsprechenden Modellgleichungen zu verbessern, was zugleich grundlegende Arbeiten zur mathematischen Behandlung der Modellgleichungen erfordert. Der vorliegende Beitrag soll dies an Beispielen demonstrieren.

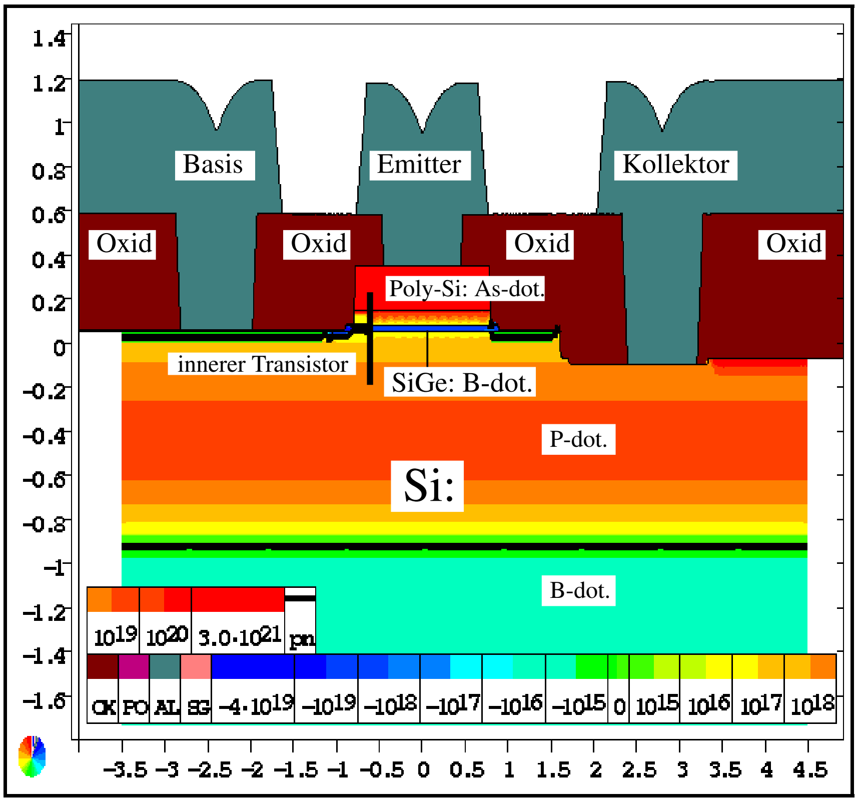
Abschnitt 2 gibt einen Überblick, wie DIOS und ToSCA bei der Entwicklung von SiGe–HBT's eingesetzt werden. Die Abschnitte 3 und 4 behandeln Teilfragen, die den Test, die Erweiterung und die Identifikation von Modellen für die Technologiesimulation sowie deren Implementierung betreffen. Mathematische Untersuchungen, die für beide Teilfragen von Bedeutung sind, werden in Abschnitt 5 erläutert. Die zitierte Literatur umfaßt vorrangig Arbeiten von Mitarbeitern des WIAS und des IHP, die in letzter Zeit im Zusammenhang mit den hier behandelten Problemen entstanden sind.

2 SiGe–Heterojunction–Bipolartransistoren

SiGe–Heterojunction–Bipolartransistoren unterscheiden sich von konventionellen Si–Homojunction–Bipolartransistoren dadurch, daß ihre Basis aus einer etwa 30 nm dicken, verspannten und mit Bor dotierten SiGe–Schicht besteht, in der mehrere vorteilhafte Effekte zur Wirkung kommen. Die durch den Ge–Einbau hervorgerufene Verringerung des Bandabstandes führt zu günstigen energetischen Bedingungen für die beweglichen Ladungsträger, die einen kleinen Steuerstrom des Transistors ermöglichen. Die Bordotierung kann so hoch gewählt werden, daß sich ein geringer Basiswiderstand ergibt. Und schließlich erzeugt der steile Ge–Gradient in der Basis ein zusätzliches inneres elektrisches Feld, was die Bordiffusion verringert und geringe Basisweiten, also kurze Laufzeiten der Ladungsträger, nach sich zieht. Die daraus folgenden Kenngrößen (hohe Grenzfrequenzen von etwa 50 bis 100 GHz, geringes Rauschen, niedrige Leistungsaufnahme) machen diese Transistoren für die eingangs erwähnten Anwendungsgebiete besonders attraktiv.

Wie bei allen modernen Festkörperschaltkreisen ist es auch bei der Entwicklung von SiGe–HBT's nur noch unter unzumutbar hohem und unwirtschaftlichem technischen und zeitlichen Aufwand möglich, alle sich ergebenden Probleme auf experimentelle Weise zu lösen. Deshalb werden in zunehmendem Maße Simulationsprogramme eingesetzt, um Varianten des Bauelementes selbst, aber auch seinen Fertigungsprozeß, zu simulieren und letzten Endes das Bauelement bezüglich der angestrebten Zielparameter zu optimieren. Abbildung 1 zeigt Ergebnisse einer mit DIOS durchgeführten Technologiesimulation und einer mit ToSCA erstellten Bauelementesimulation.

Mit DIOS können komplette Technologien mit ihren verschiedenen Teilprozessen (z. B. Abscheiden und Ätzen von Schichten zur Strukturbildung, Einbringen von Dotanden durch Ionenimplantation, Umverteilung der Dotanden bei Temperung in inerter oder oxydierender Atmosphäre) simuliert



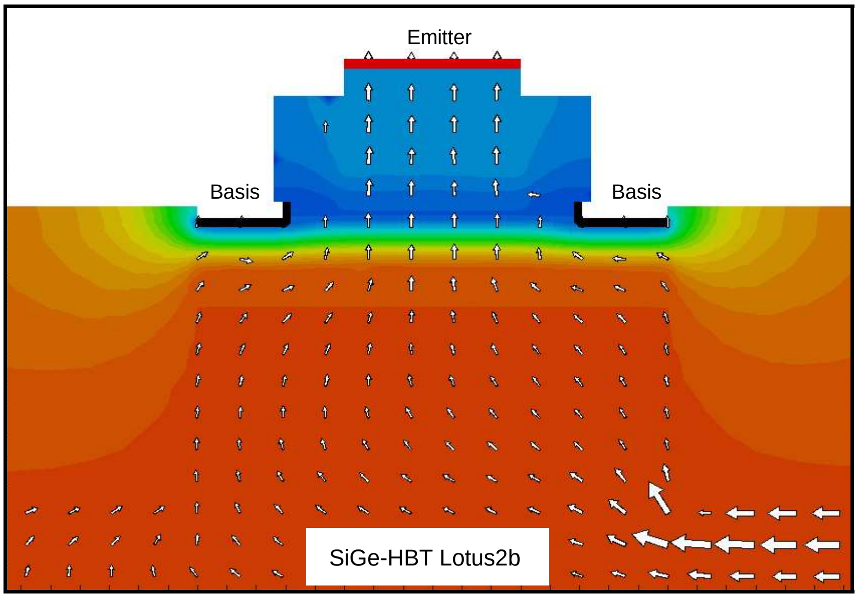


Abb. 1. Simulation eines SiGe–Heterojunction–Bipolartransistors: oben Technologiesimulation mit DIOS (gezeigt sind der Schichtaufbau, insbesondere die Lage der SiGe–Schicht und des inneren Transistors, sowie Isoflächen der Nettokonzentration im Silizium); unten Bauelementesimulation mit ToSCA (gezeigt sind die Lage des Basis– und Emitterkontaktes, der Kollektorkontakt befindet sich rechts unten außerhalb des Bildes, sowie Isoflächen der Spannung und der Verlauf der Ströme).

werden. So lassen sich technologisch kritische Stellen, die oft einer experimentellen Untersuchnung nicht zugänglich sind, überprüfen (z. B. Überlappungen von Schichten, Unterätzungen, vertikale und laterale Dotandenprofilverläufe). Die simulierte Struktur und Dotierung können dann als Eingabegrößen für den Bauelementesimulator ToSCA benutzt werden.

Nach Vorgabe der Struktur und der Dotierung, nach Festlegung der elektrischen Kontakte und nach Vorgabe von elektrischen Spannungen oder Strömen an den Kontakten lassen sich mit ToSCA eine Vielzahl von Strom–Spannungs–Kennlinien berechnen, die sowohl Gleichstrom– als auch Wechselstromeigenschaften des Transistors beschreiben. Wichtige Kenngrößen für die letzteren stellen die Grenzfrequenzen f_T und f_{max} dar, die als Gütekennziffern für Hochgeschwindigkeitstransistoren fungieren. Eine Hauptaufgabe der Bauelementesimulation ist die Designoptimierung bzgl. dieser Kenngrößen. Eine ausführliche Darstellung der Methodik zur Berechnung dieser Größen findet man in [14]. Eine Anwendung auf die Optimierung des Vertikalprofils von HBT's erfolgt in [11]. Eine weitere wichtige Gütekennziffer ist die Rauschzahl, die die Strom- und Spannungsfluktuationen innerhalb des Transistors beschreibt. Diese Größe läßt sich ebenfalls aus Kleinsignalanalysen mittels ToSCA ermitteln [13]. Gerade die Realisierung von Verstärkern mit rauscharmen Eingangsstufen durch SiGe–HBT's ist von besonderer ökonomischer Bedeutung für den ständig wachsenden Markt der Mobiltelefone.

Zusammenfassend kann gesagt werden, daß die Entwicklung von modernen Bauelementen der Nanoelektronik durch den Einsatz von Simulationsprogrammen wirkungsvoll unterstützt wird. Um dabei genügend sichere Aussagen zu erhalten, muß die Simulation auf hohem Niveau erfolgen, was durch die Qualität sowohl der zu Grunde liegenden Modelle als auch der Programme zur numerischen Lösung der entsprechenden Modellgleichungen bestimmt wird. Hieraus leiten sich vielfältige Fragestellungen für mathematische Untersuchungen ab. Modellentwicklung bedeutet immer auch die Entwicklung *mathematischer* Modelle und die analytische Untersuchung ihrer Eigenschaften (Korrektheit der Aufgabenstellung, qualitative Aussagen über das Lösungsverhalten). Untersuchungen zur Numerik der Modellgleichungen bilden schließlich die Grundlage für die Codes, die in die Simulationsprogramme eingehen. Im folgenden soll an zwei Beispielen gezeigt werden, wie solche Untersuchungen in enger Zusammenarbeit mit den Anwendern in die Weiterentwicklung der Programmsysteme einfließen.

3 Diffusion von B in SiGe-Schichten

Eine besonders aus technologischer Sicht kritische Stelle beim Design von SiGe–HBT's besteht darin, daß aus der Basis kein B in benachbartes Si ausdiffundieren darf. Durch eine angepaßte Transistorstruktur und eine geeignete Prozeßführung wird versucht, dies weitgehend zu verhindern. Um diese Problematik simulieren zu können, wurde auf der Grundlage von in letzter

Zeit erschienenen Arbeiten (siehe die Übersicht in [19]) zur Diffusion von B in verspannten SiGe–Schichten ein Modell entwickelt [19] und in einem 1D–Programm implementiert, mit dessen Hilfe die Modellparameter aus am IHP durchgeführten Messungen bestimmt worden sind. Abbildung 2 zeigt gemessene und simulierte Ge– bzw. B–Profile. Da die SIMS–Messungen bei Profilen mit nur einigen 10 nm Ausdehnung die (in der Abb. rechts liegenden) Flanken verfälschen, sind neue Verfahren zur Korrektur solcher Messungen [12] erarbeitet worden. Mit dem so identifizierten Modell gelingt es, wesentliche

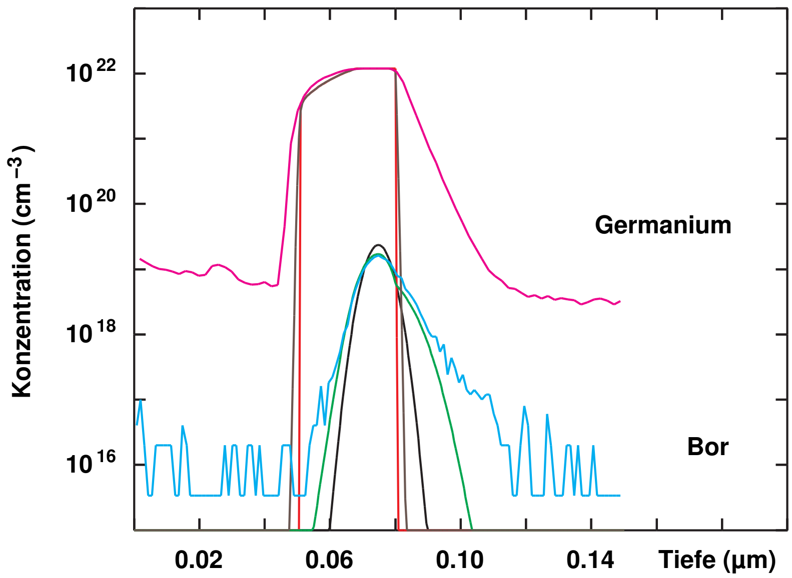


Abb. 2. Vergleich von gemessenen und simulierten Ge– bzw. B–Profilen.

Effekte vorerst ausreichend zu beschreiben, so daß dieses Modell inzwischen von DIOS übernommen worden ist.

Das Modell stellt eine Modifikation der SUPREM-III–Modelle [15] dar. Die SiGe–Schicht wird wie verspanntes Si behandelt, Ge wie ein Dotand, der Ursache der Verspannung ist. Die Spannungen werden mit einem einfachen Ansatz berechnet und gehen in die Diffusionsparameter für B ein. Für genauere Untersuchungen ist eine Verbesserung des bisherigen Modells notwendig. Statt die SUPREM-III–Modelle zu modifizieren, müßte man von Modellen ausgehen, die die Kinetik der Punktdefekte berücksichtigen, da die Verspannung des Kristalls das Gleichgewicht der Defekte stört. Weiterhin scheint es notwendig zu sein, die Verspannung selbst genauer zu modellieren. Dies würde bedeuten, die Diffusionsgleichungen für Ge und B mit Gleichungen zur Beschreibung des mechanischen Verhaltens der Struktur zu koppeln. Erste Überlegungen zu derartigen Modellgleichungen und deren mathematischen Eigenschaften liegen vor. Es zeigt sich, daß es hier Parallelen zu Aufgaben der Thermoelastizität mit recht komplexen Randbedingungen gibt.

4 Diffusion elektrisch geladener Teilchen bei hohen Konzentrationen

In modernen Bauelementen, z. B. auch in HBT's, kommt es vor, daß Profile elektrisch geladener Dotanden mit sehr hohen Konzentrationen sehr eng benachbart sind. Hier taucht die Frage auf, ob durch deren elektrische Wechselwirkung zusätzliche Effekte entstehen und inwieweit diese durch die vorhandenen Simulationsprogramme beschrieben werden. Die auch in DIOS benutzten SUPREM-III–Modelle sind im wesentlichen durch Versuche mit einzelnen Dotanden identifiziert worden, sagen aber für die beschriebene Situation kooperative Effekte (ähnlich einer ambipolaren Diffusion) voraus. Zur Klärung der Frage wurden am IHP Experimente durchgeführt. Erste Auswertungen mit noch relativ geringer Meßgenauigkeit haben das Auftreten dieses Phänomens qualitativ bestätigt. Für eine quantitative Analyse wurden am WIAS mit Hilfe von DIOS eine Reihe von Rechnungen durchgeführt. Eine einigermaßen zufriedenstellende Übereinstimmung mit den gemessenen und geeignet reduzierten Daten ergab sich nur dann, wenn einige der Diffusionsparameter (insbesondere für As) gegenüber den Standardwerten geändert wurden. Einige Ergebnisse sind in Abb. 3 dargestellt.

Obwohl noch nicht alle Messungen ausgewertet und mit entsprechenden Simulationsrechnungen verglichen worden sind, wird bereits jetzt deutlich, daß die SUPREM-III–Modelle quantitativ diese komplizierte Wechselwirkung nicht in allen Details beschreiben. Zu berücksichtigen sind vielleicht eine genauere Modellierung der Randbedingungen und der Löslichkeitsgrenzen sowie die Kinetik der Punktdefekte zumindest in der Anfangsphase der Temperung. Außerdem wird darüber diskutiert, ob für das elektrostatische Potential die Poissongleichung (anstelle der bisherigen Annahme der Quasineutralität) und für die Elektronen und Löcher die Fermistatistik (anstelle der bisher benutzten Boltzmannstatistik) einbezogen werden sollten.

Als mathematisches Modell derartiger Modellerweiterungen erhält man allgemeine Elektro–Reaktions–Diffusionsgleichungen, deren analytische und numerische Untersuchung einen Schwerpunkt am WIAS bildet. Hier sind in letzter Zeit eine Reihe neuer Ergebnisse erzielt worden.

5 Analysis und Numerik von Elektro–Reaktions–Diffusionsgleichungen in Heterostrukturen

Wir behandeln im folgenden Gleichungen, die die Umverteilung elektrisch geladener Spezies in Heterostrukturen durch Diffusion und Reaktionen unter Berücksichtigung ihrer elektrischen Wechselwirkung beschreiben. Einen Überblick über solche Gleichungen, die für die Halbleitertechnologie relevant sind, sowie über verschiedene Grenzfälle, die vor allem aus der Sicht der Simulation interessant sind, findet man z. B. in [1, 16].

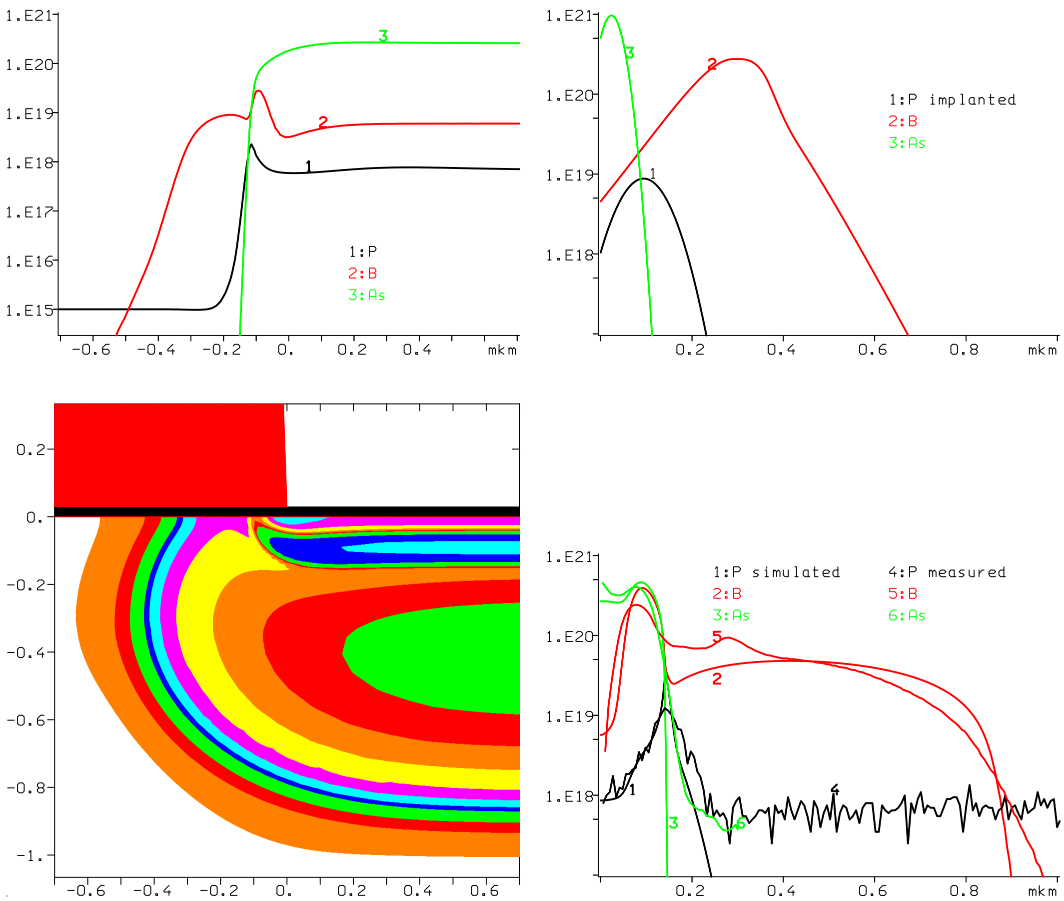


Abb. 3. P–B–As–Wechselwirkung: Simulierte vertikale Verteilung von P, B, As nach Implantation (rechts oben); simulierte und gemessene vertikale Verteilung von P, B, As nach 300 min inerter Temperung bei $900^{\,0}$ C (rechts unten); simulierte Isoflächen für B (links unten) und laterale Verteilung von P, B, As 5 nm unterhalb der Substratobergrenze (links oben) nach genannter Temperung.

Ein in Simulationsprogrammen häufig benutzter Weg zur Modellierung elektrischer Wechselwirkungen ist die Quasineutralitäts–Näherung. Unter einer solchen Annahme haben wir in [5] ein Modell mit nur einer Sorte geladener Fremdatome behandelt. Dort sind die eindeutige Lösbarkeit der Modellgleichungen, die globale Beschränktheit der Lösungen und deren exponentielles Streben zum Gleichgewicht nachgewiesen worden. Analoge Aussagen haben sich für ein implizites und ein semi–implizites Zeitdiskretisierungsschema ergeben. Die Konvergenz dieser Schemata ist gezeigt worden.

Ein anderer Weg zur Modellierung elektrischer Wechselwirkungen besteht darin, das innere elektrische Feld mit Hilfe der Poisson–Gleichung zu berechnen. Ein allgemeines Modell für beliebig viele elektrisch geladene Spezies in Heterostrukturen führt auf ein Elektro–Reaktions–Diffusionssystem mit nichtglatten Daten. Wir bezeichnen mit u_i, q_i, v_i and $\zeta_i = v_i + q_i v_0$,

$i = 1, \ldots, m$, die Konzentration, den Ladungszustand, das chemische bzw. elektrochemische Potential der i–ten Spezies, mit v_0 das elektrostatische Potential und mit $u_0 = \sum_{i=1}^m q_i u_i$ die Ladungsdichte der mobilen Spezies. Das zu untersuchende Differentialgleichungssystem besteht aus m Kontinuitätsgleichungen gekoppelt mit der Poisson–Gleichung:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} - \nabla \cdot (D_i u_i \nabla \zeta_i) + R_i = 0 \text{ in } \mathbb{R}_+ \times \Omega,$$

$$\nu \cdot (D_i u_i \nabla \zeta_i) + R_i^\Gamma = 0 \text{ auf } \mathbb{R}_+ \times \Gamma,\ u_i(0) = U_i \text{ in } \Omega;$$

$$-\nabla \cdot (\varepsilon \nabla v_0) = f + u_0 \text{ in } \mathbb{R}_+ \times \Omega,$$

$$\nu \cdot (\varepsilon \nabla v_0) + \tau v_0 = f^\Gamma \text{ auf } \mathbb{R}_+ \times \Gamma.$$

Dabei sind R_i bzw. R_i^Γ die Reaktionsraten im Volumen bzw. am Rand, die ausgehend vom Massenwirkungsgesetz in der Form

$$R_i = \sum_{(\alpha,\, \beta)} k_{\alpha\beta} \Big(\prod_{k=1}^m e^{\zeta_k \alpha_k} - \prod_{k=1}^m e^{\zeta_k \beta_k} \Big)(\alpha_i - \beta_i)$$

angesetzt werden. Hierbei bezeichnen α und β die stöchiometrischen Vektoren der entsprechenden Reaktionen. Für den Zusammenhang zwischen Konzentrationen und chemischen Potentialen wird hier die Boltzmannstatistik $u_i = \bar{u}_i e^{v_i}$ angenommen. Dabei sind die Bezugskonzentrationen $\bar{u}_i$, ebenso wie D_i, ε, τ und $k_{\alpha\beta}$, wegen der Heterostruktur ortsabhängig. Die Untersuchungen erfolgen für den räumlich zweidimensionalen Fall, da Beschränktheitsaussagen für die Lösungen elliptischer Gleichungen aus [10] in der Form, wie sie hier benötigt werden, nur im Zweidimensionalen verfügbar sind.

Die funktionalanalytische Formulierung der Aufgabe lautet unter Benutzung der Variablen $u = (u_0, \ldots, u_m)$ und $v = (v_0, \ldots, v_m)$

$$\begin{gathered} u'(t) + Av(t) = 0,\ u(t) = Ev(t) \text{ f.f.a. } t \in \mathbb{R}_+,\ u(0) = U, \\ u \in H^1_{\mathrm{loc}}(\mathbb{R}_+, (H^1(\Omega, \mathbb{R}^{m+1}))^*), \\ v \in L^2_{\mathrm{loc}}(\mathbb{R}_+, H^1(\Omega, \mathbb{R}^{m+1})) \cap L^\infty_{\mathrm{loc}}(\mathbb{R}_+, L^\infty(\Omega, \mathbb{R}^{m+1})). \end{gathered} \tag{P}$$

Dabei ist E ein nichtlinearer, monotoner Potentialoperator, der den Zusammenhang zwischen den Potentialen und den Dichten beschreibt. Der nichtlineare Operator A enthält die Diffusions–, Drift– und Reaktionsterme.

Mit Hilfsmitteln der konvexen Analysis wird in [7] gezeigt, daß unter der Annahme

$$\sum_{i=1}^m \kappa_i \int_\Omega U_i \mathrm{d}x > 0 \ \forall \kappa \in \mathcal{S}^\perp,\ \kappa \geq 0,\ \kappa \neq 0,$$

wobei $\mathcal{S}$ den von den Vektoren $\alpha - \beta$ aufgespannten stöchiometrischen Unterraum bezeichnet, die Aufgabe (P) genau einen stationären Zustand (u^*, v^*)

innerhalb einer Kompatibilitätsklasse, die durch den Anfangswert charakterisiert wird, besitzt.

Ausgangspunkt für die Untersuchungen des instationären Problems (P) sind physikalisch motivierte Abschätzungen der freien Energie

$$F(u) = \int_\Omega \Big\{ \frac{\varepsilon}{2} |\nabla v_0|^2 + \sum_{i=1}^m \Big\{ u_i (\ln \frac{u_i}{\bar{u}_i} - 1) + \bar{u}_i \Big\} \Big\} \mathrm{d}x + \int_\Gamma \frac{\tau}{2} v_0^2 \,\mathrm{d}\Gamma.$$

Zunächst erhält man, daß die freie Energie entlang von Trajektorien des Systems beschränkt bleibt und monoton fällt. Ein wesentliches, neues Resultat ist eine Abschätzung der freien Energie durch die Energiedissipationsrate

$$D(v) = \sum_{i=1}^m \Big\{ \int_\Omega \Big\{ D_i \bar{u}_i \, e^{v_i} \, |\nabla \zeta_i|^2 + R_i \zeta_i \Big\} \,\mathrm{d}x + \int_\Gamma R_i^\Gamma \zeta_i \,\mathrm{d}\Gamma \Big\}.$$

Und zwar beweisen wir in [7] unter gewissen Voraussetzungen an das Reaktionssystem, die für relevante Probleme aus der Halbleitertechnologie erfüllt sind, die Abschätzung

$$F(Ev) - F(u^*) \le c_R D(v)$$

für alle v, für die Ev in der Kompatibilitätsklasse liegt, die durch den Anfangswert U definiert wird, und für die $F(Ev) - F(u^*) \le R$ gilt. Derartige Abschätzungen für Reaktions–Diffusionssysteme mit ungeladenen Spezies gehen auf [9] zurück. In [6] werden unsere Resultate auf allgemeinere Statistiken, Stromrelationen und Reaktionsterme sowie auf eine nichtlineare Poisson–Gleichung erweitert. Als Folgerung aus dieser Abschätzung erhält man, daß die freie Energie entlang von Trajektorien des Systems (P) exponentiell zu ihrem Gleichgewichtswert fällt.

Analoge Resultate gelten für ein implizites Zeitdiskretisierungsschema [7]. Es seien $n \in \mathbb{N}$, $\{t_n^0, \dots, t_n^k, \dots\}$ eine Diskretisierung von $\mathbb{R}_+$ und $S_n^k := (t_n^{k-1}, t_n^k]$. Unter $C_n(\mathbb{R}_+, B)$ verstehen wir den Raum der stückweise konstanten Funktionen u_n von $\mathbb{R}_+$ nach B, u_n^k bezeichne den konstanten Wert der Funktion u_n auf dem Intervall S_n^k. Das implizite Zeitdiskretisierungsschema zum Problem (P) lautet dann

$$\begin{aligned} &\Delta_n u_n(t) + A v_n(t) = 0, \ u_n(t) = E v_n(t) \ \forall t \in \mathbb{R}_+, \\ &v_n \in C_n(\mathbb{R}_+, H^1(\Omega, \mathbb{R}^{m+1})) \cap C_n(\mathbb{R}_+, L^\infty(\Omega, \mathbb{R}^{m+1})), \end{aligned} \tag{P$_n$}$$

wobei Δ_n der Differenzenoperator

$$(\Delta_n u_n)^k := \frac{1}{t_n^k - t_n^{k-1}} \left(u_n^k - u_n^{k-1} \right), \ u_n^0 := U$$

ist. Auch längs Trajektorien der zeitdiskreten Aufgabe (P$_n$) fällt die freie Energie monoton und exponentiell zu ihrem Gleichgewichtswert. Hieraus folgt, daß das implizite Zeitdiskretisierungsschema, ebenso wie die kontinuierliche Aufgabe selbst, Grundprinzipien der Thermodynamik genügt.

Erwähnt sei, daß wir zu den bisherigen Aussagen kommen, ohne a priori–Schranken für Konzentrationen und Potentiale zu kennen. Im Gegenteil, wir verwenden diese Ergebnisse, um unter zusätzlichen Annahmen über die Anfangswerte und über die Ordnung der Reaktionen solche a priori–Abschätzungen zu gewinnen. Zunächst folgert man aus der globalen Beschränktheit der freien Energie mit Hilfe der Moser–Technik wie in [3] globale a priori–Abschätzungen für die Konzentrationen nach oben. Danach können wir, im Unterschied zu [3], aus dem exponentiellen Fallen der freien Energie schließen, daß die L^1–Norm von $\ln u_i$ global beschränkt ist. Durch Moser–Iteration kann damit die globale Beschränktheit der Konzentrationen nach unten durch eine positive, nur von den Daten des Problems abhängende Konstante nachgewiesen werden.

Um die Lösbarkeit der Aufgabe (P) zu zeigen, regularisieren wir das Problem durch ein „Abschneiden“ der Nichtlinearitäten in geeigneter Weise. Wir finden a priori–Abschätzungen für dieses regularisierte Problem, die nicht von dem Abschneidelevel abhängen. Die Lösbarkeit der regularisierten Aufgabe wird über Zeitdiskretisierung und einen Auswahlsatz bewiesen. Ausführlicher werden die Aussagen zur Existenz, Eindeutigkeit und zu globalen Abschätzungen der Lösung der Aufgabe (P) in [8] zusammengestellt. Die Herleitung analoger Ergebnisse für die zeitdiskreten Aufgaben (P_n) und die Begründung der Konvergenz des Näherungsverfahrens sind Gegenstand aktueller Untersuchungen.

Anmerkung. An den hier vorgestellten Arbeiten, an zahlreichen Diskussionen über die hier geschilderten Probleme oder an der Vorbereitung dieses Beitrages waren folgende Kollegen beteiligt: K.–D. Bolze, B. Heinemann, F. Herzel, D. Krüger, R. Kurps (IHP), H. Gajewski, R. Nürnberg (WIAS), K. Gröger (WIAS, Humboldt–Universität Berlin), N. Strecker (ETH Zürich).

Literatur

1. Fahey, P. M., Griffin, P. B., Plummer, J. D.: Point defects and dopant diffusion in silicon. Reviews of Modern Physics **61** (1989) 289–384
2. Gajewski, H.: Analysis und Numerik von Ladungstransport in Halbleitern. GAMM–Mitteilungen **16** (1993) 35–57
3. Gajewski, H., Gröger, K.: Reaction–diffusion processes of electrically charged species. Math. Nachr. **177** (1996) 109–130
4. Gajewski, H., Heinemann, B., Nürnberg, R., Langmach, H., Telschow, G., Zacharias, K.: Der 2D–Bauelementesimulator ToSCA. Handbuch. Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Berlin, 1986, 1991
5. Glitzky, A., Gröger, K., Hünlich, R.: Discrete–time methods for equations modelling transport of foreign–atoms in semiconductors. Nonlinear Analysis (erscheint)

6. Glitzky, A., Gröger, K., Hünlich, R.: Free energy and dissipation rate for reaction diffusion processes of electrically charged species. Applicable Analysis (erscheint)
7. Glitzky, A., Hünlich, R.: Energetic estimates and asymptotics for electro–reaction–diffusion systems. Z. Angew. Math. Mech. (eingereicht)
8. Glitzky, A., Hünlich, R.: Electro–reaction–diffusion systems for heterostructures. Proc. FBP'95 (eingereicht)
9. Gröger, K.: Free energy estimates and asymptotic behaviour of reaction–diffusion processes. Preprint 20, Institut für Angewandte Analysis und Stochastik im Forschungsverbund Berlin e.V., Berlin, 1992
10. Gröger, K.: Boundedness and continuity of solutions to second order elliptic boundary value problems. Nonlinear Anal. **26** (1996) 539–549
11. Heinemann, B., Herzel, F., Zillmann, U.: Influence of low doped emitter and collector regions on high–frequency performance of SiGe–base HBTs. Solid State Electr. **38** (1995) 1183–1189
12. Herzel, F., Ehwald, K.-E., Heinemann, B., Krüger, D., Kurps, R., Röpke, W., Zeindl, H.-P.: Deconvolution of narrow boron SIMS depth profiles in Si and SiGe. Surface and Interface Analysis **23** (1995) 764–770
13. Herzel, F., Heinemann, B.: High–frequency noise of bipolar devices in consideration of carrier heating and low temperature effects. Solid State Electr. **38** (1995) 1905–1909
14. Herzel, F., Heinemann, B., Gajewski, H.: Small–signal analysis by means of transient excitations and its applications in bipolar transistor modelling. Int. J. of High Speed Electronics and Systems (erscheint)
15. Ho, C. P., Hansen, S. E., Fahey, P. M.: SUPREM III – A program for integrated circuit process modeling and simulation. Technical Report SEL84–001, Stanford Electronics Laboratories, Stanford University, Stanford, 1984
16. Höfler, A., Strecker, N.: On the coupled diffusion of dopants and silicon point defects. Technical Report 94/11, ETH Integrated Systems Laboratory, Zurich, 1994
17. Hünlich, R., Krause, U., Model, R., Pomp, A., Schmelzer, I., Stephan, H., Strecker, N., Unger, S.: Der 2D-Technologiesimulator DIOS. VI. Symposium „Physikalische Grundlagen zu Bauelementetechnologien der Mikroelektronik“ (Frankfurt(Oder), 1990) 169–182
18. Kermarrec, C., Tewksbury, T., Dawe, G., Baines, R., Meyerson, B., Harame, D., Gilbert, M.: New application opportunities for SiGe HBTs. Microwave Journal (October 1994) 23–35
19. Röpke, W.: Diffusion von Bor in verspannten SiGe–Schichten. Forschungsbericht, Weierstraß–Institut für Angewandte Analysis und Stochastik, Berlin, 1994
20. Strecker, N.: The 2D-process simulator DIOS. Version 3.5. User manual. ETH Integrated Systems Laboratory, Zurich, 1993
21. Technology Modeling Associates, Inc.: TSUPREM–4. Version 6.1. Palo Alto, 1994

Modellierung und Simulation von Quantum–Well–Halbleiterlasern

H. Gajewski, H.–Chr. Kaiser, J. Rehberg, H. Stephan[1] *und H. Wenzel*[2]

[1] Weierstraß Institut für Angewandte Analysis und Stochastik (WIAS)
Mohrenstraße 39, D – 10117 Berlin
[2] Ferdinand–Braun–Institut für Höchstfrequenztechnik (FBH)
Rudower Chaussee 5, D – 12489 Berlin

Abstract. The development of modern quantum–well semiconductor lasers requires effective numerical tools for their simulation. In cooperation of physicists from the FBH and mathematicians from the WIAS design and optimization of high–power semiconductor lasers could be achieved using the WIAS based semiconductor device simulator ToSCA. The main theoretical problem is the connection and interaction of microscopic (Schroedinger's equation) and macroscopic (drift–diffusion equations) models in the same domain. Modelling, analysis, numerics and simulation of quantum–well semiconductor lasers are shown. As examples, ToSCA–simulations of aluminum-free RISAS and ARROW type lasers operating at 800 nm and 940 nm, respectively, are presented.

1 Einführung

Halbleiterlaser (Synonyme sind Diodenlaser und Laserdioden) sind wegen ihrer Kompaktheit und Effizienz als Quelle kohärenter Strahlung weit verbreitet. Sie sind z.B. in jedem CD-Spieler als Abtastlaser (Emissionswellenlänge 780 nm) zu finden und spielen bei der Langstrecken-Nachrichtenübertragung über Glasfaserkabel als Sendelaser (Wellenlängen 1300 und 1550 nm) eine entscheidende Rolle.

Gegenwärtig wird weltweit intensiv an der Verbesserung bestehender und der Entwicklung neuer Laserstrukturen gearbeitet. So versucht man, mit Halbleiterlasern immer kürzere Wellenlängen bis in den blauen Spektralbereich hinein und immer höhere Ausgangsleistungen von mehr als einem Watt zu erzeugen. Vollkommen neue Strukturen stellen vertikal emittierende Laserdioden dar.

Ein Schwerpunkt der Tätigkeit des FBH ist die Entwicklung neuartiger Laserdioden, die Strahlung von bis zu einem Watt im Grundmodebetrieb emittieren. Solche Laser besitzen in Abhängigkeit von der Emissionswellenlänge vielfältige Einsatzmöglichkeiten. Halbleiterlaser mit der Wellenlänge 808 nm und entsprechenden Strahleigenschaften könnten z.B. die bisher verwendeten und mit einem sehr geringen Wirkungsgrad arbeitenden Blitzlampen als Pumpquelle von Nd:YAG-Festkörperlasern ablösen.

Halbleiterlaser sind sehr komplexe Halbleiterstrukturen. Sie bestehen aus mehreren Schichten verschiedener Halbleitermischkristalle (InGaAsP, GaAs, AlGaAs, InGaP, ...) mit unterschiedlicher Dicke (von einigen Mikrometern bis wenigen Nanometern). Bei Halbleiterschichten, deren Dicken im Nanometerbereich liegen und damit klein sind im Vergleich zur Elektronenwellenlänge, spielen Quanteneffekte eine entscheidende Rolle. Das ist in modernen Halbleiterlasern (sogenannten „Quantum–Well–Lasern"), wie sie auch am FBH entwickelt und hergestellt werden, der Fall.

Für das bessere Verständnis der im Halbleiterlaser ablaufenden Vorgänge und für den Entwurf und die Optimierung neuartiger Strukturen sind Simulationsrechnungen unumgänglich. Dabei wird der im WIAS entwickelte Bauelementesimulator ToSCA verwendet [4], der bereits bei der Simulation der elektrischen Vorgänge in Silizium–Bauelementen sehr erfolgreich ist.

Gegenüber der Simulation von reinen Silizium–Bauelementen treten bei der Simulation moderner Halbleiterlaser neue Probleme auf:

- Während man sich bei der Simulation von rein elektronischen Bauelementen nur für die Ladungsträgerdichten und –ströme sowie das elektrische Feld interessiert, ist bei Halbleiterlasern zusätzlich das optische Feld von Bedeutung, was die selbstkonsistente Berücksichtigung der Ladungsträger–Licht–Kopplung erfordert.
- Es sind grundsätzlich Heterostrukturen, bestehend aus verschiedenen, meistens nicht routinemäßig beherrschten, Materialien zu betrachten.
- Die explizite Berücksichtigung von lokalen Quanteneffekten erfordert das simultane Lösen mikroskopischer (Schrödinger–) und makroskopischer (Drift–Diffusions–) Gleichungen. Die Kopplung derartiger Gleichungen ist auch in den einfachsten Fällen nur in Ansätzen untersucht und verstanden.

Die erfolgreiche Simulation der genannten praktischen Probleme erfordert folgende Schritte:

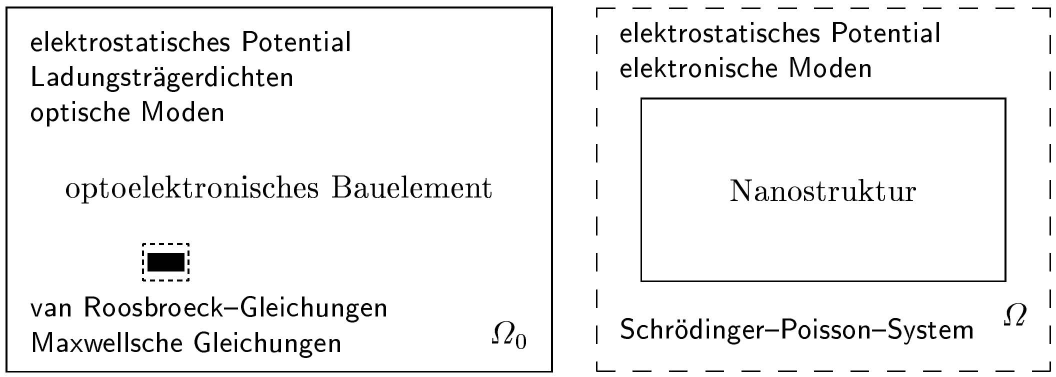
- **Modellierung:** Auswahl der zu berücksichtigenden Effekte, Herleitung der beschreibenden Gleichungen mit den erforderlichen Randbedingungen.
- **Analysis:** Untersuchungen der Gleichungen in Bezug auf Fragen wie Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen (Korrektheit und Verträglichkeit der Gleichungen), Eigenschaften der Lösungen (Regularitätsaussagen, asymptotisches Verhalten).
- **Numerik:** Entwicklung, Erprobung und Implementation effektiver Verfahren zur approximativen Lösung der Gleichungen auf der Grundlage von Ergebnissen der Analysis, Erstellung von Software.
- **Simulation:** Anpassung der entwickelten Software an konkrete Probleme und deren Lösung.

In diesem Artikel werden Ergebnisse zu diesen vier Punkten vorgestellt.

2 Modellierung

Im einfachsten Fall besteht ein Halbleiterlaser aus einer nominell undotierten aktiven Schicht, die in entsprechend kontaktiertes p- und n-dotiertes Halbleitermaterial mit einer größeren Energielücke und einem kleineren Brechungsindex eingebettet ist. Legt man an die elektrischen Kontakte eine Spannung an, werden Elektronen aus dem n-Gebiet und Löcher aus dem p-Gebiet in die aktive Zone injiziert. Durch (stimulierte) Rekombination dieser Überschußelektronen und –löcher entsteht Licht, dessen Wellenlänge durch die Energielücke des aktiven Materials bestimmt wird. Durch die höhere Brechzahl der aktiven Zone wird das erzeugte Licht an der Grenzfläche zum umgebenden Halbleitermaterial totalreflektiert, so daß es auf das Gebiet der aktiven Zone beschränkt bleibt. Gleichzeitig wird ein Teil des Lichtes in longitudinaler Richtung zurückgekoppelt, im einfachsten Fall durch die Wirkung der Grenzfläche Halbleiter/Luft. Damit sind alle Bedingungen für das Ingangkommen eines Laserprozesses erfüllt.

Schematisch ist ein Quantum–Well–Laser ein elektronisches Bauelement, das das Raumgebiet Ω_0 einnimmt (siehe folgendes Bild) und eine aktive Zone Ω besitzt. In Ω_0 interessiert man sich für die Dichten und Ströme der Ladungsträger, das elektrische und das optische Feld.



Im Gebiet Ω_0 beschreiben die bewährten van Roosbroeck–Gleichungen (1) – (3) Drift und Diffusion der Ladungsträger (Gleichungen (1) und (2)) und das Potential des elektrischen Feldes (Poissongleichung (3)). Die Intensität des optischen Feldes (Laserlicht) gewinnt man aus den Eigenlösungen der Helmholtzgleichung (4).

$$-\nabla \cdot J_n(n, \nabla\varphi_n) = q(R + R_{stim}) \tag{1}$$
$$\nabla \cdot J_p(p, \nabla\varphi_p) = q(R + R_{stim}) \tag{2}$$
$$-\nabla \cdot (\varepsilon\nabla\varphi) = q(D + p - n) \tag{3}$$
$$-\Delta\Phi_j + \varepsilon_{opt}(n, p)\Phi_j = \sigma_j\Phi_j \tag{4}$$

Hierbei sind:

φ	– elektrostatisches Potential
v_n, v_p	– chemische Potentiale der Elektronen und Löcher
$n = N_n f(v_n),\ p = N_p f(v_p)$	– Elektronen– und Löcherdichten
$f(t) = 2/\sqrt{\pi} \int_0^\infty \frac{\sqrt{t'}}{e^{t'-t}} dt'$	– Fermiintegral der Ordnung 1/2
N_n, N_p	– Zustandsdichten
$J_n = -\mu_n n \nabla \varphi_n,\ J_p = -\mu_p p \nabla \varphi_p$	– Stromdichten
$\mu_n,\ \mu_p$	– Beweglichkeiten
$\varphi_n = \varphi - q v_n,\ \varphi_p = \varphi + q v_p$	– elektrochemische Potentiale
$q > 0$	– Elementarladung
ε	– Dielektrizitätsfunktion
D	– Dotandenverteilung
$R = R(\varphi, n, p)$	– Generation/Rekombination
$R_{stim} = \sum_j f_{opt}(\sigma_j, n, p, \varphi_n, \varphi_p) \frac{\|\Phi_j\|^2}{\\|\Phi_j\\|^2}$	– stimulierte Rekombination
$\|\Phi_j\|^2$	– elektrische Feldintensität des Lichts der j–ten Mode
$\varepsilon_{opt}(n, p)$	– optische Dielektrizitätsfunktion
σ_j	– Energie der j–ten Mode

Die Gleichungen (1) – (4) sind unter anderem durch folgende Effekte nichtlinear miteinander gekoppelt:

Die Triebkräfte der Ströme in den Kontinuitätsgleichungen (1) und (2) sind die Gradienten der elektrochemischen Potentiale. In die rechten Seiten geht die durch das Laserlicht stimulierte Rekombination ein. Das elektrostatische Potential hängt über Gleichung (3) von der Ladungsverteilung ab. Die Intensität des Laserlichts hängt über Gleichung (4) von der optischen Dielektrizitätsfunktion und diese wiederum von der Ladungsverteilung ab.

Ist die aktive Zone Ω in bestimmten Raumrichtungen klein, treten Quanteneffekte auf, die bewirken, daß ein Teil der Ladungsträger (im weiteren werden der Einfachheit halber nur die Elektronen betrachtet) in dieser Richtung gebunden ist. Die Elektronen können sich dann nicht mehr wie quasifreie Teilchen bewegen. Ist die aktive Zone in ein, zwei oder drei Dimensionen klein, erhält man ein dimensionsreduziertes Elektronengas (zwei–, ein– bzw. null–dimensional). Die Elektronendichte kann dann in diesen Richtungen nicht mehr durch die Zustandsgleichung

$$n = N_n f(v_n)$$

beschrieben werden. Statt dessen wird in der aktiven Zone Ω eine Einteilchen–Schrödingergleichung in Effektivmassennäherung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \nabla \cdot \frac{\nabla}{m^*} + V \right] \psi_k = \mathcal{E}_k \psi_k \tag{5}$$

für die normierten Wellenfunktionen betrachtet und die Dichte der (gebundenen) Elektronen (im thermodynamischen Gleichgewicht) durch

$$n_q = \sum_{k=0}^{\infty} N_k \, |\psi_k|^2 \,, \tag{6}$$

definiert. Hierbei sind:

$\mathcal{E}_k$	– mögliche Energiewerte
$\lvert\psi_k\rvert^2$	– entsprechende Aufenthaltswahrscheinlickeit
$V = V_0 + V_{xc} - q\varphi$	– Gesamtpotential
$V_{xc}(n_q)$	– Austauschkorrelationspotential
V_0	– äußeres Potential
n_q	– quantenmechanische Elektronendichte
$N_k = f_{eq}(\mathcal{E}_k - \mathcal{E}_F)$	– Besetzungsfaktor des k–ten Energieniveaus
f_{eq}	– Gleichgewichtsverteilungsfunktion
$\mathcal{E}_F$	– Ferminiveau der gebundenen Elektronen

Die Ladung im Gebiet Ω wird durch n_q und die aus der Sicht des Quantensystems vorgegeben Ladungen n_D gebildet, so daß Gleichung (3) in der Form

$$-\nabla \cdot (\varepsilon \nabla \varphi) = q(n_D - n_q) \tag{7}$$

erscheint. Die Gleichungen (7), (5) und (6) bilden zusammen mit einer Gleichgewichtsbedingung das sogenannte Schrödinger–Poisson–System, welches n_q und φ nichtlinear miteinander koppelt.

Gleichung (5) beschreibt die möglichen Energiewerte und Zustände, die ein Elektron annehmen kann. Durch Gleichung (6) wird festgelegt, daß sich die Elektronen im thermodynamischen Gleichgewicht befinden, die Belegung der möglichen Zustände also durch die Fermiverteilung beschrieben wird. Der Tatsache, daß es sich um ein Mehrteilchensystem handelt, wird einerseits dadurch Rechnung getragen, daß die Einteilchen–Schrödingergleichung (5) mit einem von allen Teilchen erzeugten Feld betrachtet wird, andererseits durch Berücksichtigung des Austauschkorrelationspotentials .

Das makroskopische Problem in Ω_0 und das mikroskopische Problem in Ω sind, für sich genommen, vielfältig untersucht worden (siehe [2] und die dort zitierte Literatur). Für die Simulation des Gesamtproblems ist eine physikalisch sinnvolle und selbstkonsistente Einbettung der mikroskopischen Quantenschicht in das makroskopische Bauelement erforderlich. Das Problem der Kopplung mikroskopischer und makroskopischer Modelle ist von allgemeiner Natur und wurde bisher wenig untersucht, obwohl es durch die Betrachtung immer kleinerer, aber makroskopisch dennoch relevanter Strukturen in vielen Bereichen der angewandten Mathematik in zunehmendem Maße auftritt. Wir gehen von folgendenden Annahmen aus:

– In der Quantenschicht wird das Schrödinger–Poisson–System betrachtet. Dabei werden nur die Ladungsträger berücksichtigt, die in der Quantenschicht lokalisiert sind (gebundene Zustände). Für diese Zusände kann angenommen werden, daß die Wellenfunktionen am Rande der Quantenschicht verschwinden. Physikalisch bedeutet das, daß die gebundenen Ladungsträger nur den unteren Teil des Potentialgrabens spüren.
– Die Nanostruktur Ω und das Halbleitergebiet Ω_0 sind über
  - das elektrostatische Potential,
  - die Ladungsträgerdichten und
  - den Austausch der Ladungsträger zwischen gebundenen und ungebundenen Zuständen

  miteinander gekoppelt.

Eine Schwierigkeit des Problems liegt in der Festlegung des Quantengebietes. Dieses Gebiet muß so festgelegt werden, daß die Annahmen gerechtfertigt sind; das heißt, es muß einerseits aus makroskopischer Sicht klein genug und aus mikroskopischer Sicht groß genug (damit die gebundenen Ladungträger die Umgebung nicht spüren) sein.

3 Analysis

In diesem Abschnitt wird auf analytische Untersuchungen des Schrödinger–Poisson–Systems eingegangen, die am WIAS durchgeführt wurden. Ergebnisse zu den phänomenologischen van Roosbroeck–Gleichungen, die seit Anfang der Siebziger Jahre mathematisch untersucht werden, findet man unter anderem in [2] und [3].

Das Schrödinger–Poisson–System beschreibt ein Elektronenensemble im thermodynamischen Gleichgewicht. Dem entspricht mathematisch, daß die Gleichungen (5) bis (7) durch ein konstant vorgegebenes Ferminiveau $\mathcal{E}_F$ oder die folgende Bedingung der Ladungserhaltung

$$N = \int_\Omega n_q(V)(x)dx = \sum_{k=1}^{\infty} f_{eq}(\mathcal{E}_k(V) - \mathcal{E}_F(V)), \tag{8}$$

kompletiert werden müssen, wobei N die Anzahl der in Ω gebundenen Elektronen ist.

Unter Vernachlässigung des Austauschkorrelationspotentials V_{xc} kann das Schrödinger–Poisson System als nichtlineare Operatorgleichung

$$A(\varphi) := -\nabla \cdot (\varepsilon \nabla \varphi) + q n_q(V_0 - q\varphi) = q n_D, \quad \varphi \in H_0^1(\Omega; \mathbb{R}) \tag{9}$$

im Sobolewraum $H^{-1}(\Omega; \mathbb{R})$ geschrieben werden. Für diesen Fall konnte Nier [8] zeigen, daß $A \in \left(H_0^1 \to H^{-1}\right)$ ein stark monotoner Potentialoperator ist. Damit ist die eindeutige Lösbarkeit des Systems (5), (6), (8), (7) sichergestellt. Darüber hinaus konnte von uns gezeigt werden, daß die negative

Elektronendichte $-n_q$ ein monotoner, beschränkt Lipschitz–stetiger Operator $-n_q \in \big(L^2(\Omega;\mathbb{R}) \to L^2(\Omega;\mathbb{R})\big)$ ist (siehe [5], [6], [1]).

Unter Berücksichtigung des (physikalisch relevanten) Austauschkorrelationspotentials konnte gezeigt werden [7], daß in dem Fall, wo die dem Austauschkorrelations-Term der Schrödinger-Gleichung entsprechende Abbildung $V_{xc} : L^1 \longmapsto L^2$ die Menge $\{n|0 \le n, \int n(x)dx = N\}$ in eine L^2-beschränkte Menge abbildet, das Schrödinger-Poisson-System ebenfalls eine Lösung besitzt. Bildet überdies V_{xc} die Menge $H^1 \cap \{n \mid n|_\Gamma = 0, 0 \le n \le M\}$ für ein hinreichend großes, von den Daten des Problems abhängiges M, Lipschitz–stetig in H^1 ab und ist die Lipschitz–Konstante dieser Abbildung hinlänglich klein (z.B. im Fall kleiner Kopplungskonstanten), so ist die Lösung des Schrödinger- Poisson-Systems sogar eindeutig bestimmt.

4 Numerik

Das Programmsystem ToSCA dient der numerischen Lösung der Gleichungen für den Ladungsträgertransport in Halbleitern. Es ist geeignet, die Gleichungen in praktisch beliebig strukturierten räumlich zweidimensionalen Gebieten sowohl stationär als auch instationär zu lösen. Dabei wird die Methode der finiten Elemente (mit Dreieckselementen) angewendet. Der Diskretisierung der Kontinuitätsgleichungen liegt die auf Scharfetter und Gummel zurückgehende Annahme konstanter Stromdichten entlang der Dreieckskanten zugrunde. Nichtlinearitäten werden mit dem Newtonverfahren behandelt und die entstehenden linearen Gleichungssysteme iterativ gelöst. Die Grundlagen hierzu sind unter anderem in [4] und [2] beschrieben.

Das Schrödinger–Poisson System läßt sich im Fall $V_{xc} = 0$ iterativ lösen. Es gilt nämlich folgendes: Für jedes $n_D \in L^2(\Omega)$ ist der Schrödinger–Poisson Operator $A \in \big(H^1_0 \to H^{-1}\big)$ ein stark monotoner, beschränkt Lipschitz–stetiger Potentialoperator. Daher ist sein inverser $A^{-1} \in \big(H^{-1} \to H^1_0\big)$ ein strikt monotoner Lipschitz–stetiger Potentialoperator und für jedes $\varphi_1 \in H^1_0$ existiert ein Intervall I derart, daß für alle $t \in I$ das Gradientenverfahren

$$\varphi_{l+1} = (1-t)\varphi_l + tq\Big(-\nabla\cdot(\varepsilon\nabla)\Big)^{-1} (n_D - n(V_0 - q\varphi_l)), \quad l = 1, 2, \ldots$$

in L^∞ gegen die Lösung φ der Schrödinger–Poisson Gleichung (9) konvergiert. Aus dem Intervall I läßt sich ein t_0 mit optimaler Konvergenzrate bestimmen (siehe [5],[6], [1]).

5 Simulation

Es werden im weiteren zwei am FBH entwickelte konkrete Strukturen vorgestellt (siehe [9]): Ein ARROW Laser (anti-resonant reflecting optical waveguide), der Laserlicht der Wellenlänge 940nm aussendet und ein RISAS Laser (real-index guided self-aligned structure), dessen Lichtwellenlänge 800nm beträgt. Beide wurden mit ToSCA optimiert. Anstelle der selbstkonsistenten Einbindung des Schrödinger–Poisson–System wurde hier die aktiven Zone näherungsweise durch eine makroskopische Schicht mit effektiven Materialparametern, die durch separate Lösung einer Schrödingergleichung erhalten wurden, modelliert.

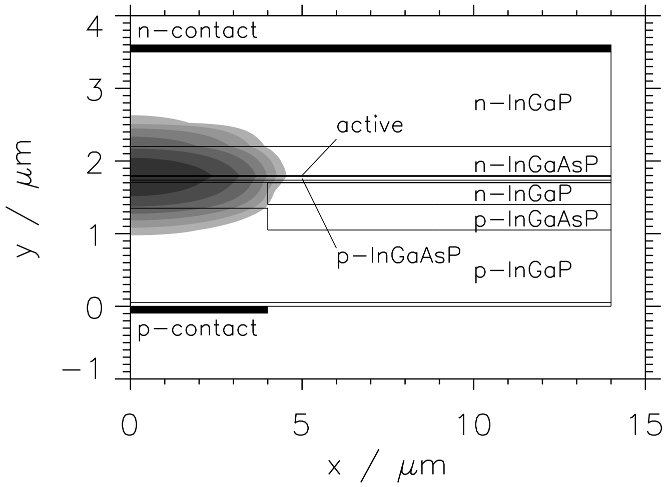


Abb. 1. Schnitt durch einen RISAS Laser mit Intensität der Grundmode des optischen Feldes.

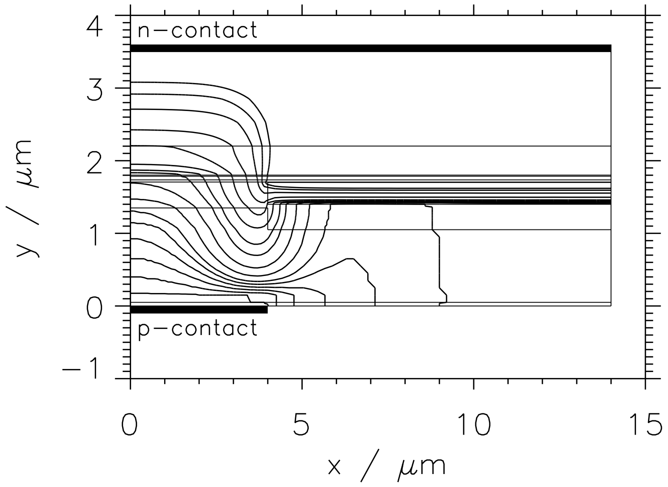


Abb. 2. Schnitt durch einen RISAS Laser mit Quasi–Fermi Energie der Löcher.

5.1 RISAS Laser

Bei der relativ kleinen Wellenlänge von 800 nm ist eine relativ große effektive Energielücke (diese setzt sich aus Leitungs– und Valenzbanddiskontinuität zusammen) von etwa 1.55 eV der aktiven Zone notwendig. Nur wenige Matrialsysteme erreichen derartige Energielücken. Eins davon ist das hier zur Anwendung gekommene System InGaAsP/InGaP auf einem GaAs-Substrat (vgl. Abbildung 1); die maximal erreichbare Energielücke ist hier 1.9 eV. Allerdings ist die Leitungsbanddiskontinuität in diesem Materialsystem viel kleiner als die des Valenzbandes. Das führt zu einem erhöhten Strom der Elektronen in das p-dotierte Gebiet über die Heterobarrieren hinweg, wo sie dann mit Löchern rekombinieren. Dies ist ein Verluststrom, da die Elektronen eigentlich in der aktiven Zone unter Lichtaussendung rekombinieren sollen. Dieser Verluststrom führt dazu, daß der Leistungszuwachs mit zunehmendem Strom immer geringer wird. Das kann man verhindern, indem man den Laser verlängert und die internen Verluste klein hält, oder die p-Dotierung erhöht. Bezüglich dieser Größen läßt sich das Bauelement optimieren. Abbildung 1 zeigt die optimierte Struktur (es ist nur die rechte Hälfte des bezüglich der Geraden $x = 0$ symmetrischen Bauelementes dargestellt) und die Intensität des optischen Feldes (Laserlicht) im Grundzustand. Abbildung 2 zeigt die Isolinien der quasi–Fermienergie der positiven Ladungsträger (Löcher) an der Laserschwelle und läßt den senkrecht zu den Isolinien fließenden Löcherstrom erkennen. Ziel ist es, den Strom dorthin fließen zu lassen, wo auch die Lichtintensität groß ist. Dort wird nämlich durch das Licht selbst die Rekombination der Ladungsträger unter Lichtaussendung stimuliert (stimulierte Rekombination). Das wird hier durch in Sperrichtung gepolte pn-Übergänge erreicht.

5.2 ARROW Laser

Eine alternative Struktur stellen ARROW Laser dar, die möglicherweise eine höhere Ausgangsleistung erreichen. Bei einer Wellenlänge von 940 nm stellt der Verluststrom nicht das Hauptproblem dar. Bei dieser Struktur beruht die Wellenführung in x-Richtung auf einem Resonanzeffekt. Wichtig sind hier die unterhalb der aktiven Schicht liegenden vier Bereiche mit unterschiedlichen Brechungsindizes. Es kommt darauf an, die Größe dieser Teilbereiche derart zu wählen, daß die Lichtintensität ein ausgeprägtes Maximum bei $x = 0$ und nur geringe Nebenmaxima aufweist. Abbildungen 3 und 4 zeigen die empfindliche Abhängigkeit der Lichtintensität von der Struktur. Abbildung 3 zeigt einen Querschnitt durch den optimierten Laser. Die dunklen Bereiche markieren hohe Intensitäten des optischen Feldes. Neben dem ausgeprägten Hauptmaximum treten nur unbedeutende Nebenmaxima auf. Abbildung 4 zeigt einen Querschnitt durch die ursprüngliche Laserstruktur. Die dunklen Bereiche bezeichnen wieder hohe Intesitäten des optischen Feldes. Neben dem Hauptmaximum treten auch bedeutende Nebenmaxima auf, weil die Weite des zweiten Bereiches (etwa von $x = 3$ bis $x = 6.4$) zu groß gewählt wurde. Abbildung 5 zeigt die Isolinien der quasi–Fermienergie der positiven Ladungsträger (Löcher) an der Laserschwelle. Das Fließen des Stromes in das Gebiet mit hoher Lichtintensität wurde hier durch eine zusätzliche He–Implantation in das grau unterlegte Gebiet unterstützt, die die Leitfähigkeit verringert. Man sieht den Erfolg an den „herausgedrückten“ Isolinien.

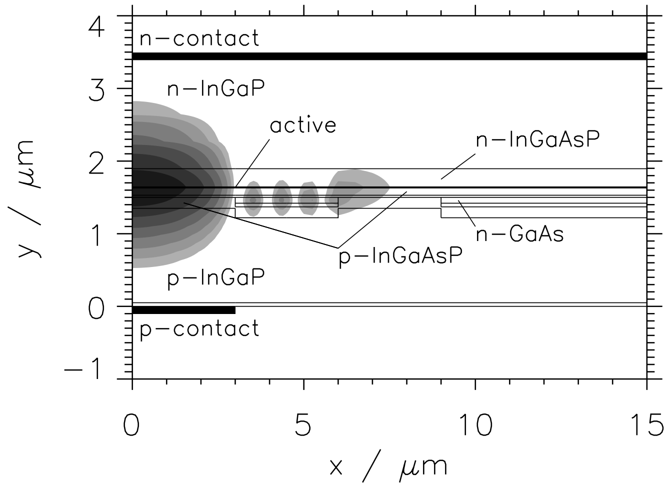


Abb. 3. Schnitt durch einen ARROW Laser (optimierte Struktur) mit Intensität der Grundmode des optischen Feldes.

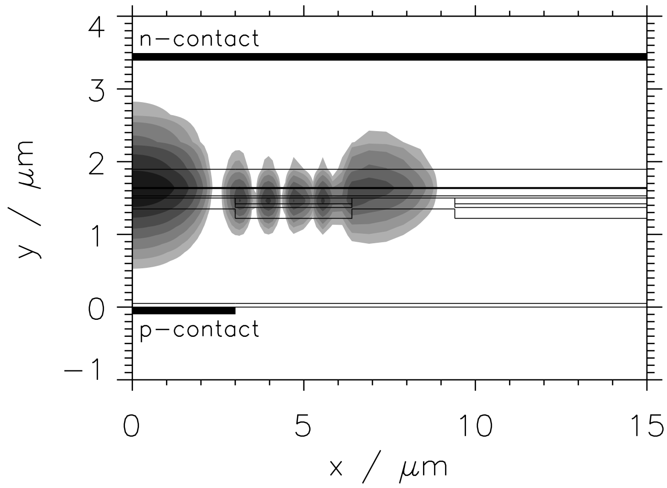


Abb. 4. Intensität der Grundmode (nicht optimierter ARROW Laser).

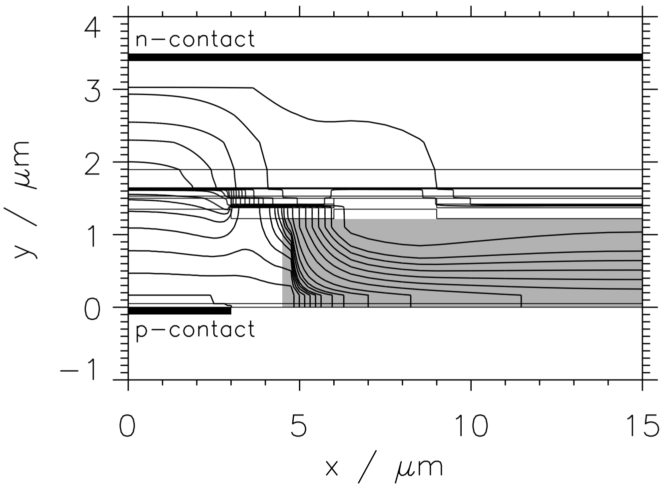


Abb. 5. Schnitt durch einen ARROW Laser (optimierte Struktur) mit Quasi–Fermi Energie der Löcher.

Literatur

1. Albinus, G., Kaiser, H.–Chr., Rehberg, J.: On stationary Schrödinger–Poisson equations. Preprint 66, WIAS, Berlin, 1993
2. Gajewski, H.: Analysis und Numerik des Ladungstransports in Halbleitern. GAMM Mitteilungen **16** (1993) 35–57
3. Gajewski, H., Gröger, K.: Semiconducter Equations for variable Mobilities Based on BOLTZMANN Statistics or FERMI–DIRAC Statistics. Math. Nachr. **140** (1989) 7–36
4. Gajewski, H., Heinemann, B., Nürnberg, R., Langmach, H., Telschow, G., Zacharias, K.: Der 2D–Bauelementesimulator ToSCA. Handbuch. Karl-Weierstraß-Institut für Mathematik, Berlin, 1986, 1991
5. Kaiser, H.–Chr., Rehberg, J.: On stationary Schrödinger–Poisson equations. ZAMM **75** (1995) 467–468
6. Kaiser, H.–Chr., Rehberg, J.: On stationary Schrödinger–Poisson equations modelling an electron gas with reduced dimension. (erscheint)
7. Kaiser, H.–Chr., Rehberg, J.: On the stationary Schrödinger–Poisson system with exchange–correlation potential and mixed boundary conditions. ZAMM (erscheint)
8. Nier, F.: A variational Formulation of Schrödinger–Poisson systems in dimensions $d \leq 3$. Commun. in Partial Differential Equations **18** (1993) 1125–1147
9. Wenzel, H., Erbert, G.: Simulation of single–mode high–power semiconductor lasers. Physics and Simulation of optoelectronic devices IV. Proc. SPIE **2693** (1996)