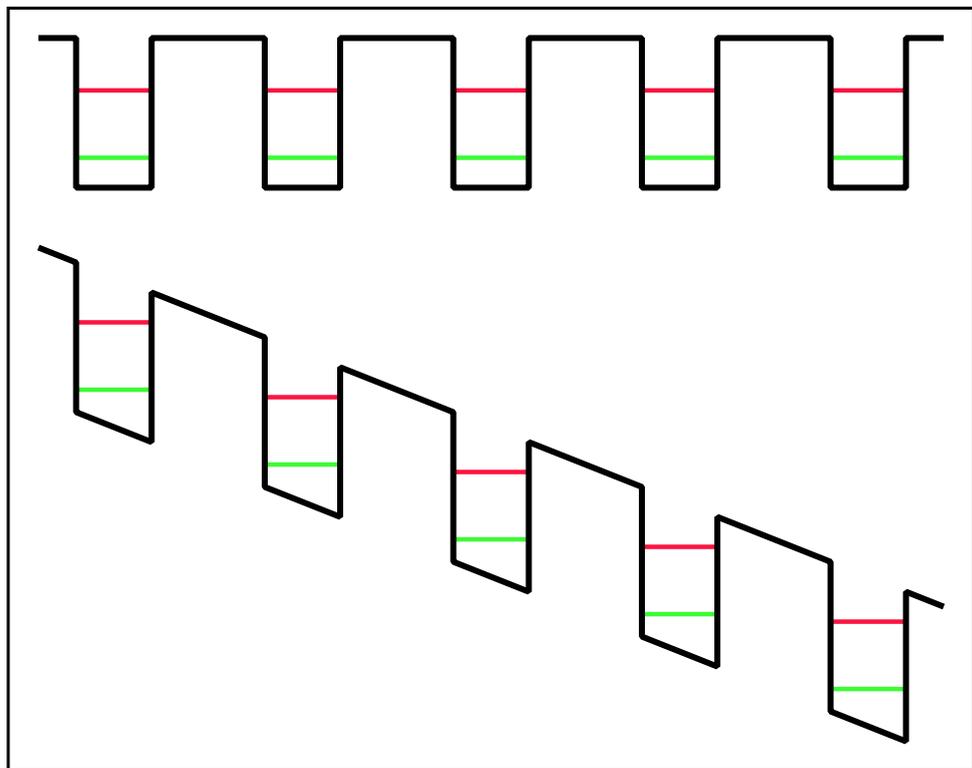


Domänenendynamik in Halbleiter-Übergittern



Michael Patra

Domänenendynamik in Halbleiter- Übergittern

Diplomarbeit

Michael Patra

angefertigt am
Institut für Theoretische Physik
der Technischen Universität Berlin
bei Prof. Dr. E. Schöll

März 1996

Michael Patra
Institut für Theoretische Physik
Technische Universität Berlin
Sekretariat P-N 7-1
10623 Berlin
Deutschland

Michael Patra
Sprosserweg 11 B
12351 Berlin
Deutschland

eMail: patra@physik.tu-berlin.de
WWW: <http://itp1.physik.tu-berlin.de/~patra/>

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Grundbegriffe der nichtlinearen Dynamik	3
2.1	Allgemeines	3
2.2	Sattel-Knoten-Bifurkation	3
2.3	Transkritische Bifurkation	4
2.4	Konjugierte Punkte	5
2.5	Isola-Bifurkation	5
2.6	Cusp-Punkt	7
2.6.1	Gestörter Hysteresis-Punkt	8
2.6.2	Gestörte Pitchfork-Bifurkation	9
2.6.3	Cusp-Kurve	9
2.6.4	Kodimension	9
2.7	Hopf-Bifurkation	11
2.8	Instabile Mannigfaltigkeiten	12
2.9	Homokliner Orbit	12
2.10	Saddle-Loop-Bifurkation	13
2.11	Takens-Bogdanov-Punkt	13
2.12	Zweigverfolgung	14
3	Modell	15
3.1	Einleitung	15
3.2	Übergangsraten	17
3.3	Feldverteilung	19
3.4	Stromdichte	20
3.5	Felddomänen	20
3.6	Randbedingungen	21
4	Ungestörtes Übergitter	25
4.1	Kennlinie mit ausgebildeter Aststruktur	25
4.2	Oszillationen	31
4.3	Kennlinien bei verschiedenen Dotierungen	39
4.4	Dotierungsabhängigkeit	40
4.5	Lage der Bifurkationspunkte	42
4.6	Verschieden lange Übergitter	43
4.7	„Seltsame Zustände“	46

5 Leicht gestörte Kennlinie	51
5.1 Analytische Abschätzung	52
5.2 Numerische Überprüfung der Aussagen	55
5.3 Vergleich verschiedener Störungsstärken	60
5.4 Vergleich verschiedener Fluktuationsrealisierungen	61
6 Stark gestörte Kennlinie	69
6.1 Ungestörte Kennlinie als Ausgangspunkt	69
6.2 Gestörte Kennlinie als Ausgangspunkt	70
6.3 „Seltsame“ Zustände	73
6.3.1 Zusammenwachsen von geschlossenen Kennlinienstücken	79
6.4 Zusammenwachsen der Kennlinie	82
6.5 Weitere Erhöhung von α	86
6.6 Vergleich von Simulation und Zweigverfolgung	88
6.7 Oszillationen	90
7 Neumann-Randbedingungen	97
7.1 Kleine und mittlere Dotierungen	97
7.2 Oszillationen	100
7.3 Hochdotiertes Übergitter	104
7.4 Unterschiedlich langes Übergitter	104
7.5 Gestörtes Übergitter	107
7.6 Abschließende Bemerkungen	107
8 Zusammenfassung und Ausblick	109
A Quantitative Störungsbestimmung von Proben	111
B Laseranregung	115
C Sehr stark dotiertes Übergitter	117
D Umskalierung der Variablen	119
E Anzahl notwendiger Energieniveaus	123
F Numerik und Programme	127
F.1 Numerische Genauigkeit	127
F.2 Anzahl der Variablen	128
F.3 Verwendete Programme	129
F.4 Rechenzeit	130
G Übergangskoeffizienten	131
H Daten der Berechnungen	133
Danksagung	137
Legende	145

Kapitel 1

Einleitung

Die hinter Halbleiter-Übergittern stehende Idee ist mittlerweile über 25 Jahre alt [Esa70]. Schon kurz nachdem sie vorgeschlagen worden waren, konnten das Vorhandensein eines Bereiches mit negativer differentieller Leitfähigkeit (negative differential conductivity = NDC) in der Strom-Spannungs-Kennlinie [Kaz72] vorhergesagt und Unstetigkeiten bei Spannungsveränderung [Esa74] nachgewiesen werden. Nach Verbesserung der Wachstumstechnologie konnten in jüngerer Zeit rasch Fortschritte erzielt werden, so der Nachweis, daß die Kennlinie aus einzelnen Ästen besteht [Kas94]. Auch wurde das für eine Modellierung notwendige Verständnis der beteiligten Transportprozesse verbessert [Kaw86, Cho87, Zha94, Kwo94, Kwo95a, Kwo95b, Kea95, Mer95, Kla95].

Nach ersten Ansätzen zur Erklärung von Feldomänen [Lai93, Kor93] wurden Modelle entwickelt, die Halbleiterübergitter auch dann beschreiben können, wenn keine Domänenstruktur vorliegt. Diese Modelle basieren entweder auf einfachen mikroskopischen Annahmen über die beteiligten Transportvorgänge [Pre94a, Pre94b] oder auf phänomenologischen Annahmen [Kor93, Bon94, Mil94]. Seit kurzem wird versucht, mikroskopische Modelle durch Hinzufügen phänomenologischer Größen an den Stellen, wo mikroskopische Vorgänge und Parameter nicht hinreichend genau bekannt sind, zu verbessern [Pre95, Kas96].

Nachdem durch diese Modelle zuerst die Ausbildung einer Aststruktur in der Strom-Spannungs-Kennlinie erklärt werden konnte, wurden dann auch ungedämpfte Oszillationen gefunden [Pre94a, Bon95, Wac95a, Wac], die experimentell bestätigt werden konnten [Kas95b, Gra95b].

Die weitere Entwicklung beschäftigt sich zum einen mit der Tatsache, daß experimentell untersuchte Übergitter nicht so regelmäßige Kennlinien aufweisen, wie sie von den oben angegebenen Modellen beschrieben werden [Gra95a]. Durch Ergänzungen am PRENGELschen Modell konnten bereits signifikante Verbesserungen erzielt werden [Sch94, Sch95b].

Die andere Richtung ist die Untersuchung der verschiedenen Modelle mit Methoden der nichtlinearen Dynamik. Für das relativ einfache Modell von BONILLA konnten zuerst Aussagen über die Entstehung von Ästen [Bon94], dann auch über die von Oszillationen [Wac] abgeleitet werden. Untersuchungen dieser Art am mehr physikalisch ausgerichteten PRENGELschen Modell begannen parallel dazu [Pat95, Sch96a].

In dieser Arbeit soll die Dynamik des PRENGELschen Modells untersucht werden, insbesondere für nicht „perfekte“ Übergitter. Sie steht damit am Schnittpunkt zweier Disziplinen, nämlich der Halbleiterphysik und der nichtlinearen Dynamik. Dies muß sich auch in ihrem Aufbau bemerkbar machen. An den Anfang sind deshalb zwei Kapitel gestellt, in denen die notwendigen Grundlagen der beiden Fachgebiete kurz vorgestellt werden.

In diesem Zusammenhang sei ausdrücklich auf den Index am Ende der Arbeit hingewiesen. Die meisten Leser dieser Arbeit werden Vorkenntnisse auf mindestens einem der beteiligten Fachgebiete haben, so daß das Studium des entsprechenden einführenden Kapitels nicht notwendig sein wird. Im Falle von Schwierigkeiten kann durch den Index gezielt der entsprechende, den Begriff erklärende Abschnitt gefunden werden.

Auf der letzten Seite dieser Arbeit befindet sich die Legende für die in den Abbildungen verwendeten Symbole und Stricharten. Oftmals werden bei Abbildungen nicht die Daten für alle Parameter (U , N_D , α usw.) angegeben, da diese für das Verständnis der Dynamik häufig unwesentlich sind. Selbstverständlich müssen, insbesondere für den Vergleich mit dem Experiment, diese Daten vorliegen. Aus diesem Grund befindet sich im Anhang H (Seite 133) eine tabellarische Übersicht aller Berechnungen mit ihren Parametern.

Neue Untersuchungen nach Beendigung dieser Diplomarbeit

Es gab im wesentlichen in zwei der in dieser Diplomarbeit dargestellten Ergebnisse Erweiterungen/Änderungen: Die analytische Herleitung der Auswirkungen von Dotierungsfluktuationen im Abschnitt 5.1 konnte durch Verwendung neuer Ergebnisse aus [Wac] mathematisch schärfer formuliert werden. Im Abschnitt 6.7 wurde dargelegt, daß “links” eine superkritische Hopf-Bifurkation und “rechts” eine Saddle-Loop-Bifurkation vorliegt. Tatsächlich ist die “rechte” Bifurkation eine Sattel-Knoten-Bifurkation auf einem Grenzzyklus, während die linke Bifurkation in Wirklichkeit ein Gesamtzenario aus einer superkritischen Hopf-Bifurkation, einer Saddle-Loop-Bifurkation und einer Sattel-Knoten-Bifurkation auf einem Grenzzyklus ist; diese drei Bifurkation liegen extrem dicht beieinander und sind nur sehr schwer zu trennen.

Kapitel 2

Grundbegriffe der nichtlinearen Dynamik

In diesem Kapitel soll ein kurzer Überblick über die für das Verständnis dieser Arbeit wichtigen Begriffe der „Nichtlinearen Dynamik“ gegeben werden. Selbstverständlich kann dieses nicht mit speziellen Arbeiten über dieses Thema konkurrieren, so daß für eine fundierte Einarbeitung auf andere Quellen verwiesen werden muß. Es gibt eine Anzahl Bücher, die sich entweder allgemein mit den Grundlagen der nichtlinearen Dynamik beschäftigen wie zum Beispiel [Abr83, Dra92] oder speziell auf Halbleiter eingehen [Pei92, Sch87]. Für speziellere Bifurkationstypen sei neben dem Standardwerk [Guc83] auch auf [Guc86] hingewiesen.

2.1 Allgemeines

Die Dynamik eines Systems wird im folgenden immer durch eine gewöhnliche Differentialgleichung

$$\dot{x} = f(x)$$

beschrieben. Hierbei wird x meistens keine reelle Zahl, sondern ein Vektor sein. Ein *Fixpunkt* ist ein Punkt, an dem $f(x) = 0$ gilt; befindet sich ein System in einem Fixpunkt, so wird es ihn (theoretisch) nie verlassen. Gilt dieses auch, wenn kleine Störungen auf das System einwirken, so heißt der Fixpunkt *stabil*. Führen beliebig kleine Störungen dazu, daß sich das System aus einer Umgebung des Fixpunktes herausbewegt, so heißt er *instabil*. Hinreichende Bedingung für einen stabilen Fixpunkt ist, daß die Realteile aller Eigenwerte negativ sind. Ist mindestens ein Realteil positiv, so ist der Fixpunkt instabil. Besitzt ein instabiler Fixpunkt mindestens einen Eigenwert mit negativem Realteil,

so wird er auch als *Sattelpunkt* bezeichnet.

Durch die Differentialgleichung können auch geschlossene und damit periodische Trajektorien beschrieben werden können. Diese werden als *Grenzyklen* bezeichnet, wenn in der Nähe liegende Trajektorien entweder auf den Grenzyklus hingezogen oder aber von ihm weggedrückt werden. Dies unterscheidet in von einer periodischen Bewegung wie zum Beispiel der von Planeten im Gravitationspotential der Sonne, bei der (in einem bestimmten Intervall) für jeden Wert von Energie und Drehimpuls eine geschlossene Bahn existiert. Grenzyklusoszillationen sind daher mit intrinsischen Werten für Oszillationsamplitude und Oszillationsfrequenz verbunden. Ähnlich wie Fixpunkte können auch Grenzyklen stabil oder instabil sein. Die Unterscheidung erfolgt mittels der Floquet-Exponenten [Par89, Dra92].

2.2 Sattel-Knoten-Bifurkation

Die Sattel-Knoten-Bifurkation wird durch die Gleichung

$$\dot{x} = f(x) \quad \text{mit} \quad f(x) = x^2 - \mu$$

beschrieben. Als Lösungen $x_0(\mu)$ der stationären Gleichung $\dot{x} = 0$ ergeben sich

$$x_0^{(1)}(\mu) = \sqrt{\mu} \quad \text{und} \quad x_0^{(2)}(\mu) = -\sqrt{\mu}.$$

Die Lösungen sind also auf das Parametergebiet $\mu \geq \mu_0 = 0$, d. h. auf eine Seite des Bifurkationspunktes μ_0 , beschränkt. Die partielle Ableitung von f lautet

$$\frac{\partial f}{\partial x} = 2x.$$

Damit ist $x_0^{(1)}$ wegen $\frac{\partial f}{\partial x}|_{x_0^{(1)}(\mu)} = 2\sqrt{\mu} > 0$ instabil (wenn im folgenden gesagt wird, daß ein bestimmter Ast stabil oder instabil sei, so gilt diese Aussage nicht für den Bifurkationspunkt

selber, hier also nicht für den Punkt $\mu = \mu_0$) und dementsprechend $x_0^{(2)}$ stabil. Dieses ist in Abbildung 2.1 dargestellt. Der Wechsel von stabil zu instabil im Bifurkationspunkt, mithin also von einem Sattel zu einem Knoten, führt zu der Bezeichnung Sattel-Knoten-Bifurkation, es sind allerdings auch die geometrisch begründeten Bezeichnungen „Turning point“ und „Fold“ sowie – primär in der Singularitätentheorie – „limit point“ gebräuchlich.

2.3 Transkritische Bifurkation

Die transkritische Bifurkation wird zum Beispiel mit der Gleichung

$$\dot{x} = f(x) \quad \text{mit} \quad f(x) = \mu x - x^2$$

beschrieben.¹ Als Lösungen $x_0(\mu)$ der stationären Gleichung $\dot{x} = 0$ ergeben sich unmittelbar

$$x_0^{(1)}(\mu) = 0 \quad \forall \mu \quad \text{und} \quad x_0^{(2)}(\mu) = \mu,$$

die sich im Bifurkationspunkt bei $\mu_0 = 0$ schneiden. Die partielle Ableitung von f lautet

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \mu - 2x,$$

mithin ist also $\frac{\partial f}{\partial x}|_{x_0^{(1)}(\mu)} = \mu$ und $\frac{\partial f}{\partial x}|_{x_0^{(2)}(\mu)} = -\mu$. Die Lösung $x_0^{(1)}$ ist also für $\mu < 0$ stabil und für $\mu > 0$ instabil, während $x_0^{(2)}$ genau das entgegengesetzte Verhalten zeigt: Die beiden Lösungen tauschen also im Bifurkationspunkt ihre Stabilitätseigenschaften. Dies ist in Abbildung 2.2(b) dargestellt.

Damit eine Bifurkation auch experimentell (oder auch bei einer numerischen Berechnung²) beobachtet werden kann, ist es notwendig, daß

sie strukturell stabil ist³, d. h., daß sie auch bei einer von f leicht abweichenden Funktion \tilde{f} auftritt – wenngleich bei einem etwas anderen Parameterwert $\tilde{\mu}_0$.

Als ein Beispiel für eine leicht abweichende Funktion wird \tilde{f} hier gewählt zu

$$\tilde{f}(\mu) = f(\mu) - \epsilon = \mu x - x^2 - \epsilon.$$

Für $\epsilon > 0$ ergeben sich als stationäre Lösungen \tilde{x}_0 nun

$$\tilde{x}_0^{(1)/(2)} = \frac{\mu}{2} \pm \sqrt{\frac{\mu^2}{4} - \epsilon}.$$

Man erkennt unmittelbar, daß für $-2\sqrt{\epsilon} < \mu < 2\sqrt{\epsilon}$ keine stationären Lösungen mehr existieren.

Durch Substitution $\frac{\mu}{2} - x \rightarrow x$ und $\epsilon - \frac{\mu^2}{4} \rightarrow \mu$ sieht man im Vergleich mit dem Abschnitt 2.2, daß zwei Sattel-Knoten-Bifurkationen in einem Abstand $4\sqrt{\epsilon}$ voneinander entstehen. Dieses ist in Abbildung 2.2(c) dargestellt.

Der andere mögliche Fall ist $\epsilon < 0$. Dann erge-

¹Eine andere Möglichkeit ist $f(x) = x^2 - \mu^2$. Diese besitzt eine höhere Symmetrie als die im Text verwendete Funktion, außerdem sieht man der eben angegebenen Funktion sofort an, daß sie aus der Entfaltung des Cuspoids x^2 , als $x^2 + b$, hervorgeht. Allerdings ist die graphische Darstellung (meiner Meinung nach) nicht so übersichtlich.

²Jede Routine zur numerischen Erkennung eines bestimmten Bifurkationstyps besitzt einen gewissen „Fangbereich“. Nur hierdurch ist es überhaupt möglich, auch strukturell instabile Bifurkationen zu finden.

³Es wird an dieser Stelle nicht weiter darauf eingegangen, daß durch Einbettung in einen höherdimensionalen Parameterraum strukturell instabile Bifurkationen strukturell stabil werden können.

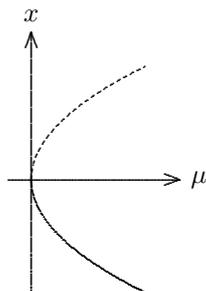


Abbildung 2.1: Sattel-Knoten-Bifurkation

ben sich als Lösungen

$$\tilde{x}_0^{(1)/(2)} = \frac{\mu}{2} \pm \sqrt{\frac{\mu^2}{4} + |\epsilon|}.$$

Für jedes μ ist die Wurzel größer als Null, es gibt also zwei für alle μ existierende Lösungen, die sich an keiner Stelle schneiden. Beachtet man, daß $\frac{\partial \tilde{f}}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial x} = \mu - 2x = \mp 2\sqrt{\dots}$ ist, so ergibt sich unmittelbar $\frac{\partial \tilde{f}}{\partial x}|_{\tilde{x}_0^{(1)}(\mu)} < 0$ und $\frac{\partial \tilde{f}}{\partial x}|_{\tilde{x}_0^{(2)}(\mu)} > 0$. Auch die Stabilitätseigenschaften der beiden Lösungen ändern sich durch die (nicht mehr vorhandene) Bifurkation nicht. Dies

ist in Abbildung 2.2(a) zu sehen.

Wie sich zeigen läßt, führt auch eine andere Wahl für die Störung nicht zu weiteren Bifurkationsszenarien als in den drei in Abbildung 2.2 dargestellten. Die Variation eines einzigen Störungsparameters, hier mit ϵ bezeichnet, ist also ausreichend, d. h. die Kodimension der transkritischen Bifurkation beträgt 1. Damit ist die transkritische Bifurkation die in dieser Hinsicht einfachste Bifurkation⁴, und wirst deshalb häufig auch als „simple bifurcation“ oder – falls keine Verwechslung möglich ist – auch nur als „bifurcation“ bezeichnet.

2.4 Konjugierte Punkte

Betrachtet wird die Gleichung

$$\dot{x} = f(x) \quad \text{mit} \quad f(x) = -x^2 - \mu^2.$$

Die zugehörige stationäre Gleichung $\dot{x} = 0$ besitzt nur eine einzige Lösung, nämlich $x_0 = 0$ für $\mu_0 = 0$ (siehe Abbildung 2.3(b)). Dies ändert sich, wenn statt f eine leicht gestörte Funktion

$$\tilde{f}(x) = f(x) + \epsilon = -x^2 - \mu^2 + \epsilon$$

betrachtet wird. Als Lösungen x_0 ergeben sich dann

$$x_0^{(1)/(2)} = \pm \sqrt{\epsilon - \mu^2},$$

die für $\epsilon < 0$ nicht und für $\epsilon > 0$ im Bereich $-\sqrt{\epsilon} \leq \mu \leq \sqrt{\epsilon}$ existieren. Die beiden Fälle sind in den Abbildungen 2.3(a) und 2.3(c) dargestellt.

Die für $\epsilon > 0$ entstehende geschlossene Lösungskurve wird als „Insel“ oder „Isola“ bezeichnet, die bei Veränderung von ϵ bei $\epsilon_0 = 0$ stattfindende Bifurkation dementsprechend als „isola center“. Eine andere Form der Störung führt zu keinen weiteren Bifurkationsszenarien, womit auch ein konjugierter Punkt Kodimension 1 besitzt.

2.5 Isola-Bifurkation

Im Abschnitt 2.3 wurde gezeigt, wie die Störung einer transkritischen Bifurkation dazu führt,

daß sich (siehe Abbildungen 2.2(a) bis 2.2(c))

⁴Die Sattel-Knoten-Bifurkation wird in diesem Zusammenhang nicht als „vollwertige“ Bifurkation angesehen. Für viele Autoren wie z. B. [Ioo90] ist für einen singulären Punkt neben $\frac{\partial f}{\partial x} = 0$ auch $\frac{\partial f}{\partial \mu} = 0$ erforderlich, so daß es sich bei einer Sattel-Knoten-Bifurkation nicht um einen singulären Punkt handelt. Weiterhin geht bei einer Vertauschung von x und μ der Bifurkationscharakter verloren. Es ist also ein gewichtiger Unterschied, ob eine Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ betrachtet wird, die zusätzlich von einem weiteren reellen Parameter abhängt, oder eine Funktion $f : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ mit zwei „gleichberechtigten“ Eingängen.

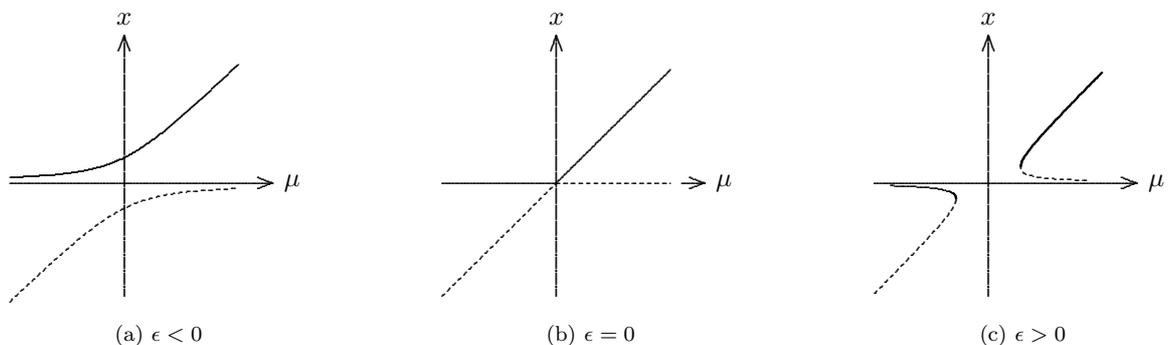


Abbildung 2.2: Gestörte transkritische Bifurkation. Dargestellt sind die Lösungen der Gleichung $\mu x - x^2 - \epsilon = 0$ für verschiedene ϵ .

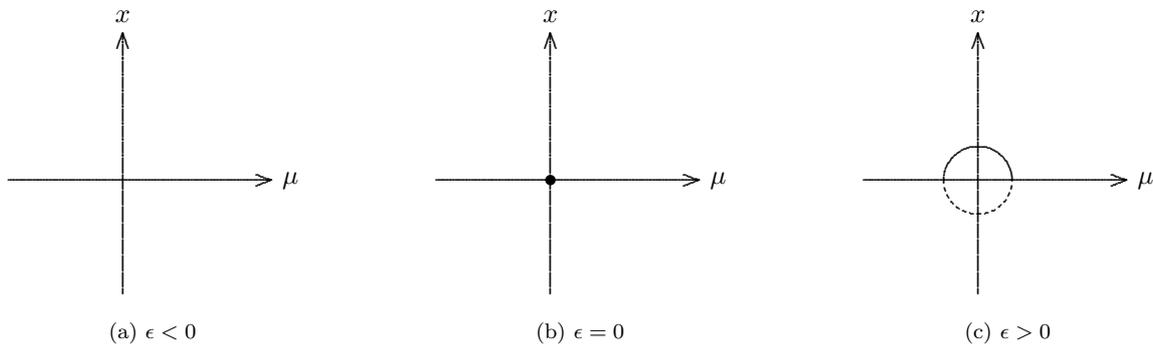


Abbildung 2.3: Konjugierter Punkt. Dargestellt sind die Lösungen der Gleichung $0 = -x^2 - \mu^2 + \epsilon$ für verschiedene ϵ .

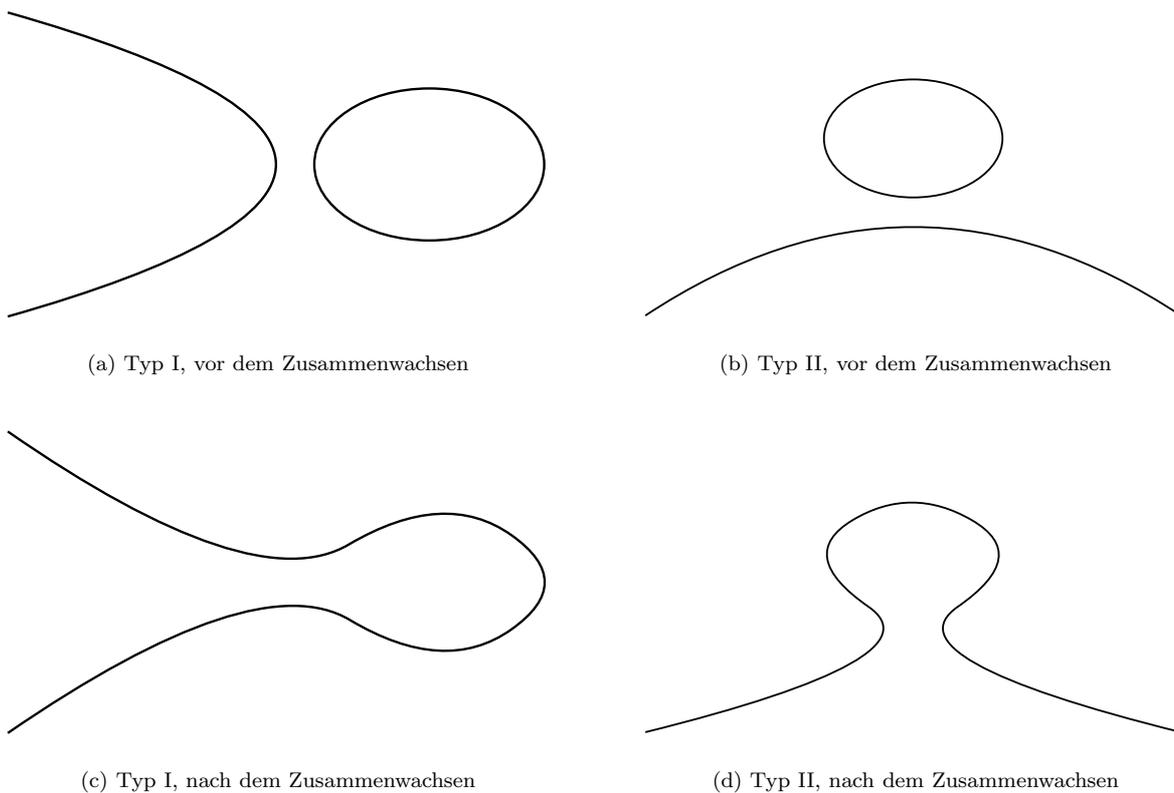


Abbildung 2.4: Zusammenwachsen zweier getrennter Lösungen in einer Isola-Bifurkation (horizontal: Parameterachse). Vor dem Zusammenwachsen existiert eine durchgehende Lösung und eine Isola, die dann in die durchgehende Lösung integriert wird. In den Abbildungen ist nicht gekennzeichnet, welche Zustände stabil und welche instabil sind.

die Verbindungen von Lösungsästen verändern können. Wird nun der Störparameter ϵ als ein weiterer Kontrollparameter betrachtet, so erhält man eine Bifurkationen, bei der für $\epsilon < 0$ die beiden Zustände mit $\mu < 0$ und die beiden mit $\mu > 0$ verbunden sind (Abbildung 2.2(c)), während es für $\epsilon > 0$ die beiden mit $x > 0$ und die mit $x < 0$ sind (Abbildung 2.2(a)).

Im Abschnitt 2.4 wurde dargelegt, daß es geschlossene Lösungskurven („Isolas“) geben kann, die bei Variation eines Parameters entstehen oder verschwinden können. Durch eine gestörte transkritische Bifurkation ist es nun möglich, daß eine geschlossene Lösungskurve sich mit einer anderen Lösungskurve verbindet bzw. von ihr absplattet. In Anlehnung an [Dra92] soll dieses als Isola-Bifurkation bezeichnet werden⁵,

2.6 Cusp-Punkt

Im Vorgriff auf den Abschnitt 2.6.4 soll in diesem Abschnitt die Gleichung inklusiv der Störparameter an den Anfang gestellt werden. Um alle möglichen Szenarien zu erhalten, sind zwei Störparameter notwendig. Die entsprechende Gleichung lautet dann:

$$\dot{x} = f(x) \quad \text{mit} \quad f(x) = -x^3 + \mu x - \lambda$$

Der Cusp-Punkt liegt hierbei im Punkt $(x, \mu, \lambda) = (0, 0, 0)$. Die Gesamtheit der Lösungen der stationären Gleichung $\dot{x} = 0$ ist in Abbildung 2.5 in Abhängigkeit von λ und μ dargestellt.

Es sollen zunächst eine Reihe von Sonderfällen behandelt werden, um zu zeigen, welches Ver-

wobei sicherlich auch die Bezeichnung „Insel-Bifurkation“ sinnvoll ist.

Für eine solche Bifurkation sind nun verschiedene zwei Fälle möglich, die sich darin unterscheiden, welche beiden der insgesamt vier an einer transkritischen Bifurkation beteiligten Lösungsäste zu einer Isola gehören. Dementsprechend unterscheiden sich diese beiden Fälle darin, ob bei der Isola-Bifurkation zwei Sattel-Knoten-Bifurkationen entstehen oder aber verschwinden. Die beiden Fälle sind in Abbildung 2.4 dargestellt. Beim Typ I existieren in der Nähe des späteren Isola-Bifurkationspunkt bereits vor dem Zusammenwachsen zwei Sattel-Knoten-Bifurkationspunkte, während diese beim Typ II im Augenblick des Zusammenwachsens entstehen.

halten in der Nähe eines Cusp-Punktes möglich ist. Wird $\lambda = 0$ oder $\mu = 0$ gesetzt, so erhält man Schnitte, die durch den Cusp-Punkt gehen. Die bei diesen Schnitten erhaltenen Bifurkationen müssen sämtlich strukturell instabil sein⁶, da sich bei einer beliebigen Störung der Cusp-Punkt im allgemeinen aus der Schnittebene heraus bewegt und sich dann das durch den Schnitt bestimmte Bifurkationsszenario verändern muß. Im ersten Fall, $\lambda = 0$, enthält man die Gleichung

$$0 = g(x) \quad \text{mit} \quad g(x) = -x^3 + \mu x$$

Diese besitzt die drei Lösungen

$$x_0^{(1)} = 0 \quad \forall \mu \quad \text{und} \quad x_0^{(2)/(3)}(\mu) = \pm \sqrt{\mu},$$

⁵Strenggenommen wird in [Dra92] (auch) das Absplatteln einer geschlossenen Lösungskurve zusammen mit deren anschließendem Verschwinden als Isola-Bifurkation bezeichnet. Diese Sprachregelung wurde hier nicht übernommen, da a priori das eine nichts mit dem anderen zu tun hat. Ein Beispiel für eine Funktion, die dieses Verhalten zeigt, ist $f(x) = \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{3}\mu^3 - \mu - \frac{2}{3} + \epsilon$.

⁶Durch Nebenbedingungen, die die erlaubten Störungen erfüllen müssen, insbesondere Symmetrien des betrachteten Systems, können die im folgenden analytisch berechneten Bifurkationen durchaus beobachtet werden. Wird zum Beispiel $f(-x) = -f(x)$ gefordert, muß f also auch unter Störung eine ungerade Funktion bleiben, so ist gerade $\lambda \neq 0$ verboten.

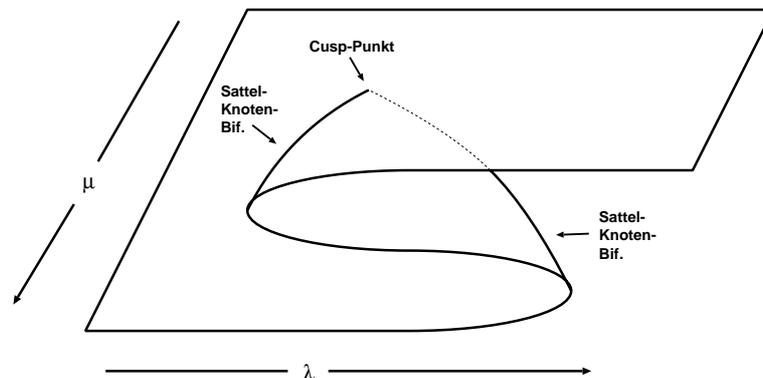


Abbildung 2.5: Cusp-Punkt. Dargestellt sind die Lösungen der Gleichung $0 = -x^3 + \mu x - \lambda$ in Abhängigkeit von λ und μ . Der Cusp-Punkt hat die Koordinaten $(x, \lambda, \mu) = (0, 0, 0)$.

wobei die beiden letzteren nur für $\mu \geq 0$ existieren. Mit

$$\frac{\partial g}{\partial x} = -3x^2 + \mu$$

ergibt sich $\frac{\partial g}{\partial x}|_{x_0^{(2)/(3)}(\mu)} = -2\mu < 0$ und damit die Stabilität dieser beiden Lösungen überall dort, wo sie existieren. Für die durchgehende Lösung $x_0^{(1)}$ ergibt sich $\frac{\partial g}{\partial x}|_{x_0^{(1)}(\mu)} = \mu$, d. h., sie ist stabil für $\mu < 0$ und instabil für $\mu > 0$. Dieses Verhalten ist in Abbildung 2.6(e) zusammengefasst und wird als Pitchfork-Bifurkation bezeichnet.

Der andere Sonderfall, $\mu = 0$, ergibt die Gleichung

$$0 = h(x) \quad \text{mit} \quad h(x) = -x^3 - \lambda$$

Als eindeutige Lösung ergibt sich unmittelbar $x_0(\lambda) = -\lambda^{1/3}$, wobei diese Kurve an der Stelle $\lambda = 0$ eine senkrechte Tangente besitzt. Ein solcher Punkt, der kein Bifurkationspunkt ist⁷, wird als Hysterisis-Punkt bezeichnet und ist in Abbildung 2.6(b) dargestellt.

⁷Er ist kein Bifurkationspunkt, da sich die Anzahl der Lösungskurven in einer Umgebung von ihm nicht verändert. Weiterhin ist er auch kein singulärer Punkt, da $\frac{\partial h}{\partial \lambda} \neq 0$ ist.

2.6.1 Gestörter Hysterisis-Punkt

Ist nun μ fest, aber ungleich Null, so sind die Lösungen der Gleichung $-x^3 + \mu x - \lambda = 0$ in Abhängigkeit von λ zu bestimmen. Im folgenden ist es sinnvoller, umgekehrt vorzugehen und statt dessen $\lambda_0(x)$ zu berechnen, wo unmittelbar

$$\lambda_0(x) = -x^3 + \mu x$$

abgelesen werden kann. Die gesuchte Lösung $x_0(\lambda)$ ist genau dann eindeutig, wenn $\lambda_0(x)$ (streng) monoton ist. Es ist

$$\frac{\partial \lambda_0}{\partial x} = -3x^2 + \mu,$$

$\lambda_0(x)$ ist also genau dann umkehrbar, wenn $\mu < 0$ ist. Weiterhin ist dann

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial \lambda_0}{\partial x} = -3x^2 + \mu < 0,$$

d. h., für $\mu < 0$ ist die Lösung für alle λ stabil und streng monoton fallend. Dies ist in Abbildung 2.6(a) dargestellt. Ist dagegen $\mu > 0$, so ist $\lambda_0(x)$ für $-\sqrt{\frac{\mu}{3}} < x < \sqrt{\frac{\mu}{3}}$ streng monoton steigend, während es außerhalb dieses Bereiches streng monoton fallend ist. Dies bedeutet,

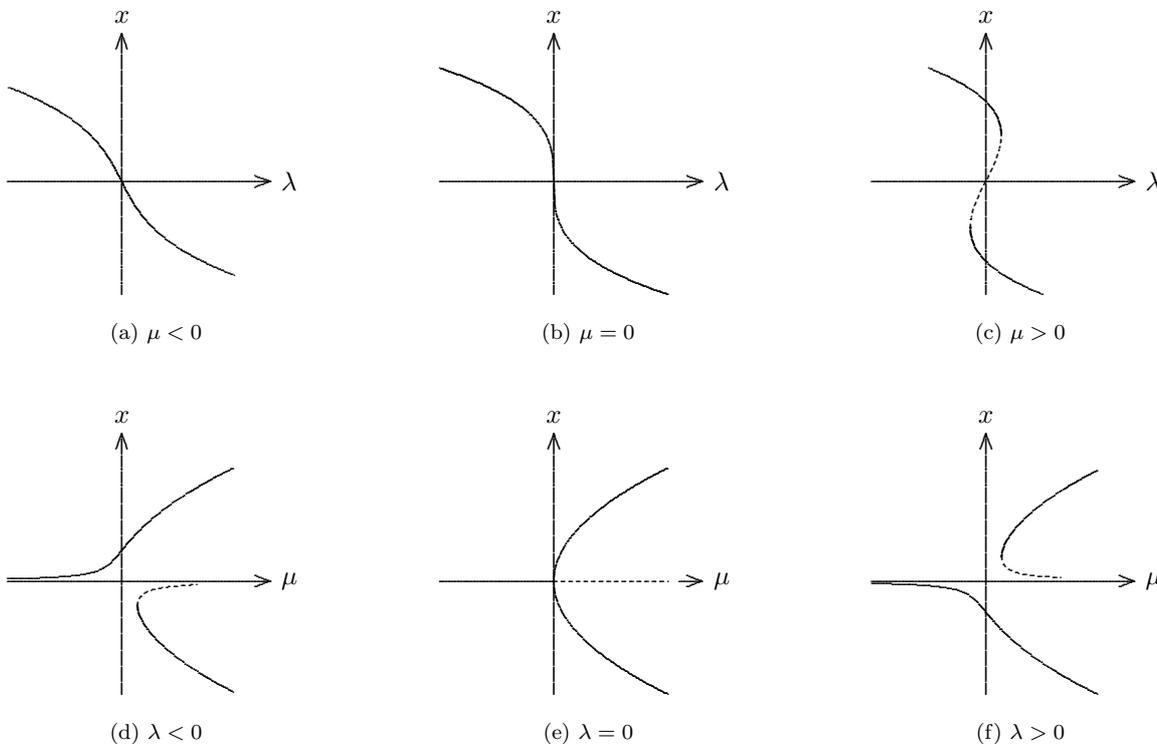


Abbildung 2.6: Schnitte durch einen Cusp-Punkt. Dargestellt sind die Lösungen der Gleichung $0 = -x^3 + \mu x - \lambda$, wobei in den Teilbildern jeweils einer der beiden Parameter μ und λ auf einem konstanten Wert gehalten wurde.

daß in einem gewissen Bereich für λ drei Lösungen existieren, während außerhalb nur jeweils eine Lösung existiert. Der mittlere Ast, für den $\frac{\partial \lambda_0}{\partial x} > 0$ war, ist instabil, während die beiden anderen Äste dementsprechend stabil sind. Die Verbindung des instabilen Astes mit den beiden stabilen erfolgt durch Sattel-Knoten-Bifurkationen. Dies ist in Abbildung 2.6(c) dargestellt.

2.6.2 Gestörte Pitchfork-Bifurkation

Ist dagegen λ fest, aber ungleich Null, so sind die Lösungen von $-x^3 + \mu x = \lambda$ in Abhängigkeit von μ zu bestimmen. Betrachtet man wieder die Umkehrfunktion $\mu_0(x)$, so ergibt sich

$$\mu_0(x) = \frac{\lambda + x^3}{x}.$$

Hieraus sieht man unmittelbar, daß es für endliches μ keine Lösung mit $x_0 = 0$ geben kann, sondern vielmehr $x_0 = 0$ eine Polstelle mit Vorzeichenwechsel ist. Damit muß die Lösung $x_0(\mu)$ in mindestens zwei Äste $x_0^{(1)}(\mu)$ und $x_0^{(2)}(\mu)$ zerfallen, für die $x_0^{(1)}(\mu) > 0$ bzw. $x_0^{(2)}(\mu) < 0$ gilt. Vom Vorzeichen von λ hängt es ab, ob $\lim_{x \downarrow 0} \mu_0(x) = +\infty$ (für $\lambda > 0$) oder $\lim_{x \downarrow 0} \mu_0(x) = -\infty$ (für $\lambda < 0$) gelten muß. Weiterhin gilt

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} \mu_0(x) = +\infty \quad \text{und} \quad \lim_{x \rightarrow -\infty} \mu_0(x) = -\infty$$

unabhängig von λ . Weiterhin besitzt $\mu_0(x)$ genau ein Extremum, das wegen

$$\frac{\partial \mu_0}{\partial x} = \frac{2x^3 - \lambda}{x^2}$$

für $\lambda > 0$ bei einem $x > 0$ liegen muß und umgekehrt. Hieraus folgt, daß es zwei Lösungsäste geben muß: Einen durchgehenden, der für $\lambda > 0$ innerhalb des Gebietes $x < 0$ bleibt und umgekehrt, sowie zwei Äste, die in einer Sattel-Knoten-Bifurkation zusammenlaufen. Da wegen $\frac{\partial f}{\partial x} = -x^2 + \mu$ für hinreichend große x der Zustand stabil sein muß, ist genau der mittlere Ast instabil und die beiden äußeren, insbesondere also die durchgehende Lösung, stabil. Dies ist in Abbildung 2.6(d) bzw. 2.6(f) dargestellt.

Durch geeignete Störungen können aus der Pitchfork-Bifurkation noch weitere Bifurkationsszenarien erhalten werden. Hierauf wird kurz im Abschnitt 2.6.4 eingegangen; ein mögliches Szenario ist in Abbildung 2.8(a) dargestellt.

2.6.3 Cusp-Kurve

Oben ergab sich, daß bei festen $\mu > 0$ die Lösungskurve $\lambda_0(x) = -x^3 + \mu x$ lautete. Weiter-

hin gab es zwei Sattel-Knoten-Bifurkationen bei $x = \pm \sqrt{\frac{\mu}{3}}$. Setzt man diese beiden Gleichungen ineinander ein, so enthält man einen Zusammenhang für die Werte von λ und μ , bei denen Sattel-Knoten-Bifurkationen liegen. Es ergibt sich

$$27\lambda^2 = 8\mu^3.$$

Diese Kurve wird als Cusp-Kurve bezeichnet und kann geometrisch als Projektion aller Bifurkationspunkte aus Abbildung 2.5 auf die λ - μ -Ebene interpretiert werden.⁸ Dargestellt ist sie in Abbildung 2.7(a). Im Innern der Cusp-Kurve besitzt die Gleichung $\dot{x} = 0$ für jeden Wert der beiden Parameter drei Lösungen, außerhalb von ihr nur eine. Ihre Ableitung beträgt

$$\frac{\partial \mu}{\partial \lambda} = \frac{8}{27} \lambda^{-\frac{1}{3}},$$

damit ist die Steigung im Ursprung, d. h. im Cusp-Punkt, unendlich groß, und die beiden Äste für $\lambda < 0$ bzw. $\lambda > 0$ schneiden sich dort nicht, sondern berühren sich nur. Dies ergibt eine etwas anschaulichere Erklärung für einen Cusp-Punkt: In ihm laufen bei Veränderung eines zweiten Parameters zwei Äste von Sattel-Knoten-Bifurkationspunkten zusammen. Dieses sieht man auch in Abbildung 2.6(c): Geht μ von oben gegen Null, so wird der Abstand der Sattel-Knoten-Bifurkationen, die die Äste begrenzen, bis er schließlich für $\mu = 0$ ebenfalls Null wird.

2.6.4 Kodimension

Neben den bei den berechneten Schnitten austretenden Bifurkationen können noch weitere auftreten, wenn auf komplizierteren Wegen eine Kurve in der λ - μ -Ebene durchlaufen wird (vergleiche zum Beispiel [Gol85]). In der Ausgangsgleichung

$$\dot{x} = f(x) \quad \text{mit} \quad f(x) = -x^3 + \mu x - \lambda$$

befanden sich zwei Parameter μ und λ , von denen in den vorhergehenden Abschnitten immer einer auf einem festen Wert gehalten wurde, während der andere variiert wurde. Der allgemeine Ansatz ist dagegen die Parametrisierung einer Kurve in der μ - λ -Ebene durch einen Parameter τ :

$$\mu = \mu(\tau) \quad \text{und} \quad \lambda = \lambda(\tau)$$

⁸Mit Ausnahme des Cusp-Punktes selber handelt es sich bei allen Punkten auf der Cusp-Kurve um Sattel-Knoten-Bifurkationen.

Die spezielle Wahl der Funktionen $\mu(\tau)$ und $\lambda(\tau)$ bestimmt das Bifurkationsszenario, das beobachtet werden kann, z. B. beschreibt $\mu(\tau) = \tau$ und $\lambda(\tau) = 0 \forall \tau$ die Pitchfork-Bifurkation. Sind nun zwei Funktionen $\mu(\tau)$ und $\lambda(\tau)$ ausgewählt worden, stellt sich die Frage, wie sich das Bifurkationsszenario ändert, wenn kleine Störungen p_μ und p_λ hinzugefügt werden, die von Störparametern α_1, α_2 usw. abhängen sollen. Zu betrachten sind dann die Funktionen

$$\begin{aligned}\mu(\tau; \alpha_1, \alpha_2, \dots) &:= \mu(\tau) + p_\mu(\alpha_1, \alpha_2, \dots) \\ \lambda(\tau; \alpha_1, \alpha_2, \dots) &:= \lambda(\tau) + p_\lambda(\alpha_1, \alpha_2, \dots).\end{aligned}$$

Man fordert für die Störparameter α_i , daß $p(0, 0, \dots) = 0$ gelten soll.

Das Bifurkationsszenario, das sich für $(\alpha_1, \alpha_2, \dots) \neq (0, 0, \dots)$ ergibt, wird sich fast immer von dem unterscheiden, das sich für $(\alpha_1, \alpha_2, \dots) = (0, 0, \dots)$ ergibt. Diese Unterschiede werden häufig unbedeutend sein: Der Bifurkationspunkt ist etwas verschoben, die verschiedenen Äste sind etwas länger oder kürzer usw. Die Unterschiede können aber auch prinzipieller Natur sein, zum Beispiel findet eine bestimmte Bifurkation unter Umständen gar nicht mehr statt. Was genau ein prinzipieller Unterschied ist, ist schwer zu definieren und wird deshalb in der Literatur sehr unterschiedlich gehandhabt. Eine genaue Definition ist für die hier behandelten Probleme aber auch nicht notwendig, da bei diesen die Antwort sofort anschaulich ist. Es soll aus diesem Grund nur ein Beispiel gegeben werden: In Abbildung 2.6(d) war eine Lösungskurve für $\mu < 0$ dargestellt.

Der genaue Wert für μ ist unwichtig, da bei einer Veränderung von μ — solange nicht die λ -Achse überquert wird — keine prinzipiellen Veränderungen geschehen. Prinzipielle Veränderungen geschehen aber, wenn μ bis nach $\mu = 0$ oder $\mu > 0$ verändert wird.

Mit diesen Vorbemerkungen ist es nun möglich, den Begriff der Kodimension einzuführen. Hierzu können zwei verschiedene Fragestellungen dienen:

- Wieviele verschiedene Parameter α_i müssen die die Störung beschreibenden Funktionen $p_{\mu/\lambda}(\alpha_1, \alpha_2, \dots)$ mindestens besitzen, damit man in der Lage ist, alle durch kleine Störungen erreichbaren, sich prinzipiell unterscheidenden Bifurkationsszenarien zu erreichen? Anders ausgedrückt: Wann führt das Betrachten weiterer Störparameter nicht mehr zu einem prinzipiell anderen Verhalten? Dies ist der „mathematische“ Ansatz, der hier verwendet wurde.
- Werden durch irgendeinen nicht näher bestimmbareren Einfluß die Funktion $\lambda(\tau)$ und $\mu(\tau)$ verändert, an wievielen (Stör-)Parameter muß man mindestens „herumdrehen“ können, damit in jedem Fall wieder das ursprüngliche Verhalten beobachtet kann. Dies ist für experimentellen Beobachtungen eine wichtige Frage.⁹
- Häufig wird als Definition der Kodimension auch direkt die Anzahl der Parameter genommen, die variiert werden muß,

⁹Besitzt ein Modell nicht so viele (Stör-)Parameter (und führen nicht Besonderheiten wie Symmetrien des Systems zu einer Verringerung der Kodimension), und ergibt sich aus dem Modellgleichungen ein Bifurkationsszenario mit einer höheren Kodimension, so ist es zumindest sehr zweifelhaft, ob dieses experimentell beobachtet werden kann. Ein solches Modell muß also sehr kritisch hinterfragt werden.

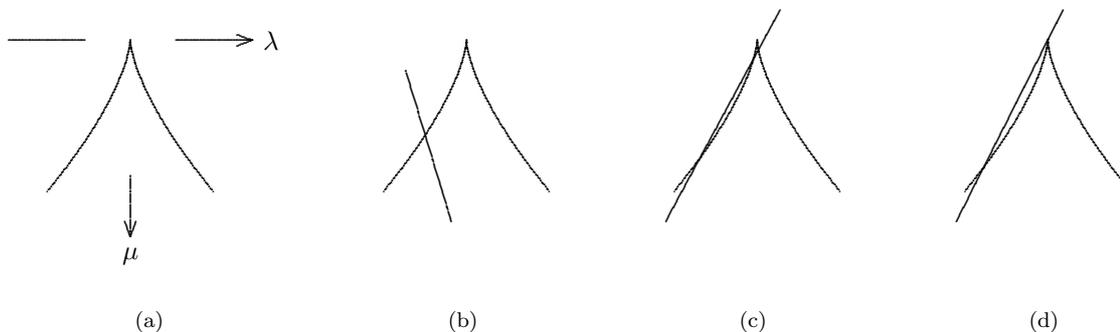


Abbildung 2.7: Cusp-Kurve und verschiedene Schnitte in der λ - μ -Ebene. Die den Schnitten entsprechenden Bifurkationsszenarien sind in Abbildung 2.8 dargestellt. (a) Cusp-Kurve. (b) Schnitt mit einem Schnittpunkt. (c) Schnitt mit drei Schnittpunkten. (d) Schnitt durch Cusp-Punkt. Sofern der Schnitt nicht exakt horizontal ist, vertikal ist oder durch den Cusp-Punkt geht, ist es nicht möglich, daß es genau zwei Schnittpunkte gibt.

um eine bestimmte Bifurkation zu erhalten. Der Unterschied zur hier verwendeten Definition ist, daß der Wegparameter τ wegfällt. Dies macht sich allerdings nur in den Fällen bemerkbar, die Kodimension 0 haben (Sattel-Knoten-Bifurkation und Hopf-Bifurkation), da diese dann ebenfalls Kodimension 1 haben. (Ohne mindestens eine Größe, die variiert wird, kann kein Bifurkationsszenario erhalten werden).

Die so definierte Mindestzahl der Störparameter heißt Kodimension.

Von den beiden in einem Cuspoid zweiten Grades¹⁰ auftretenden Bifurkationen, nämlich dem Hysterisis-Punkt und der Pitchfork-Bifurkation, wurden in den Abschnitten 2.6.1 und 2.6.2 mögliche Störungen behandelt, indem Schnitte durch das Cuspoid betrachtet wurden, die

nicht genau durch den Cusp-Punkt gingen. Im Vergleich mit Tabelle 2.1 erkennt man, daß der gestörte Hysterisis-Punkt vollständig behandelt wurde, während für die Pitchfork-Bifurkation noch weitere Effekte zu erwarten sind.

Die verschiedenen Bifurkationen entsprachen Pfade in Abbildung 2.7(a). Bisher wurden nur Schnitte (=Geraden) betrachtet, die horizontal oder vertikal waren. Für die vollständige Beschreibung der gestörten Pitchfork-Bifurkation müssen auch „schiefe“ Schnitte betrachtet werden. Die drei Möglichkeiten sind in den Abbildungen 2.7(b) bis 2.7(d) dargestellt. Die dazugehörigen Bifurkationsszenarien sind in Abbildung 2.8 zu sehen. Sie entstehen letztendlich durch Zusammensetzen der Effekte, die bereits in den Abschnitten 2.6.1 und 2.6.2 berechnet wurden.

2.7 Hopf-Bifurkation

Durch eine Hopf-Bifurkation zweigt sich von einer stationären Lösung ein Grenzzyklus ab. Die Hopf-Bifurkation kann zum einen *superkritisch* sein; von einem stabilen Fixpunkt zweigt sich in diesem Fall ein stabiler Grenzzyklus ab, während der Fixpunkt instabil wird. Im *subkritischen* Fall zweigt sich von einem instabilen Fixpunkt ein instabiler Grenzzyklus ab, während der Fixpunkt stabil wird.

Notwendige Bedingung für das Auftreten einer Hopf-Bifurkation ist, daß bei Veränderung eines

Parameters der Realteil eines Paares konjugiert komplexer Eigenwerte sein Vorzeichen wechselt. Für die Unterscheidung zwischen dem superkritischen und dem subkritischen Fall müssen – genau wie zur Aufstellung hinreichender Bedingungen – höhere Ableitungen betrachtet werden [Khi92]. Wird auf die Betrachtung höherer Ableitungen verzichtet, so können aus dem Vorzeichenwechsel des Realteiles nur deutlich schwächere Aussagen abgeleitet werden [Gol85]. Ausnahmen, d. h. Fälle, in denen ein Vorzei-

¹⁰Das Cuspoid m -ten Grades ist gegeben durch x^{m+1} , seine vollständige Entfaltung lautet $x^{m+1} + a_{m-1}x^{m-1} + a_{m-2}x^{m-2} + \dots + a_1x + a_0$.

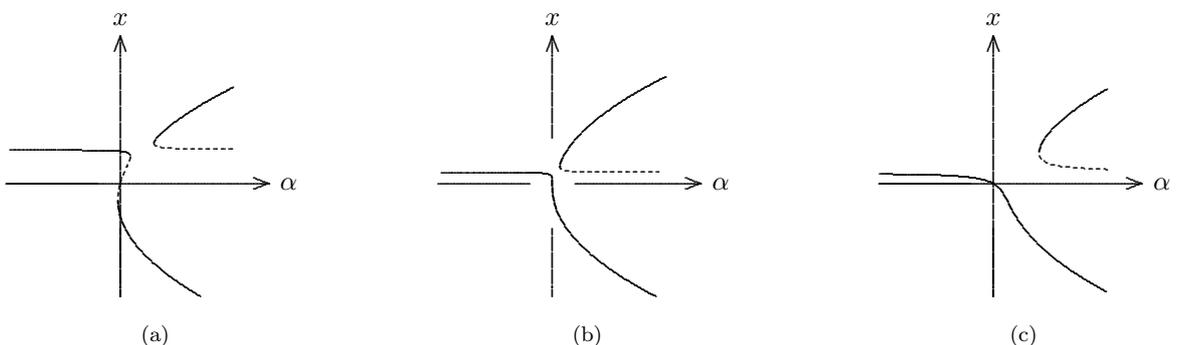


Abbildung 2.8: Schiefer Schnitt durch einen Cusp-Punkt. Dargestellt sind die Bifurkationsszenarien, die den Schnitten aus Abbildung 2.7 entsprechen. (a) Das Szenario besitzt drei Sattel-Knoten-Bifurkationen, es entspricht also dem Schnitt in Abbildung 2.7(c). Dieses Szenario kann auch durch geeignete Störung einer Pitchfork-Bifurkation erhalten werden. (b) Das Szenario besitzt eine Sattel-Knoten-Bifurkation und einen Hysterisis-Punkt, der zugehörige Schnitt muß also durch den Cusp-Punkt gehen und die Cusp-Kurve ein weiteres mal schneiden (Abbildung 2.7(d)). (c) Das Szenario besitzt nur eine Sattel-Knoten-Bifurkation, es entspricht also dem Schnitt in Abbildung 2.7(b).

Bifurkation	$f(x)$	Kodim.	Unfolding
Sattel-Knoten	$x^2 + \mu$	0	$x^2 + \mu$
Transkritische	$x^2 - \mu^2$	1	$x^2 - \mu^2 + \alpha_1$
Konjugierter Pkt.	$x^2 + \mu^2$	1	$x^2 + \mu^2 + \alpha_1$
Hysteresis-Punkt	$x^3 + \mu$	1	$x^3 + \alpha_1 x + \mu$
Pitchfork	$x^3 + \mu x$	2	$x^3 + \mu x + \alpha_1 + \alpha_2 \mu$

Tabelle 2.1: Übersicht über alle hier behandelten elementaren Bifurkationen (nach [Gol85]).

chenwechsel des Realteiles ohne Abzweigung eines Grenzzyklus stattfindet, sind jedoch extrem selten.

Besonderes Merkmal einer Hopf-Bifurkation ist der quadratische Anstieg der Amplitude des Grenzzyklus mit dem (Parameter-)Abstand vom Bifurkationspunkt. Weiterhin ist die Fre-

quenz in der Nähe des Bifurkationspunktes durch den Imaginärteil des betreffenden Eigenwerts gegeben und wird damit durch die Hopf-Bifurkation nicht beeinflusst. Da die Hopf-Bifurkation insbesondere auch außerhalb der „Nichtlinearen Dynamik“ der am weitesten bekannte Bifurkationstyp ist, soll hier auf weitere Erläuterungen verzichtet werden.

2.8 Instabile Mannigfaltigkeiten

Die Stabilität von Fixpunkten wird durch die Eigenwerte der dynamischen Matrix am Fixpunkt bestimmt. Zu jedem Eigenwert existiert dementsprechend ein Eigenvektor¹¹ und damit auch eine Mode, deren Dynamik in Fixpunktnähe durch den Eigenwert bestimmt wird. Die Mannigfaltigkeit zu einem Eigenvektor ist die Trajektorie, die vom Fixpunkt in Richtung des Eigenvektors startet (instabile Mannigfaltigkeit) bzw. in Richtung des Eigenvektors in den Fixpunkt läuft (stabile). Für eine formale

Definition siehe zum Beispiel [Par89]. Ein Beispiel für einen Sattelpunkt zeigt Abbildung 2.9.

Liegt nicht ein rein reeller Eigenwert, sondern ein Paar konjugiert komplexer Eigenwerte vor, so ist es nicht möglich, von einzelnen Trajektorien zu sprechen. Vielmehr ergibt sich in diesem Fall eine Hyperebene. Eine sehr schöne graphisch umgesetzte Darstellung dieser Thematik, wie auch der des folgenden Abschnittes, kann in [Abr83] gefunden werden.

2.9 Homokliner Orbit

Gelangt eine Trajektorie, die sich entlang einer instabilen Mannigfaltigkeit aus einem Fixpunkt heraus bewegt, wieder in den Fixpunkt zurück, so bildet diese Trajektorie einen homoklinen Orbit. Der beteiligte Fixpunkt muß da-

mit notwendigerweise ein Sattelpunkt sein, und das System benötigt für einen eben beschriebenen „Umlauf“ unendlich lange. In der Ausdrucksweise des letzten Abschnitts müssen also eine instabile und eine stabile Mannigfaltigkeit

¹¹In Bifurkationspunkten muß nicht zu jedem Eigenwert auch ein Eigenvektor existieren, bei den „Standardbifurkationen“ ist dieses jedoch der Fall. Ein Gegenbeispiel ist der Takens-Bogdanov-Punkt.

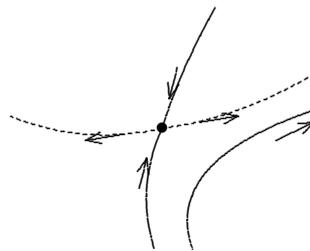


Abbildung 2.9: Stabile (durchgezogen) und instabile Mannigfaltigkeiten (gestrichelt) eines Fixpunktes (Sattelpunkt). Die Pfeile geben die Bewegungsrichtung entlang der Mannigfaltigkeit an. Die stabile Mannigfaltigkeit ist die einzige Trajektorie, die den Fixpunkt erreichen kann. Alle anderen, von denen beispielhaft eine eingezeichnet ist, werden vorher abgelenkt. Das Verlassen des Fixpunktes wiederum kann nur entlang der instabilen Mannigfaltigkeit erfolgen.

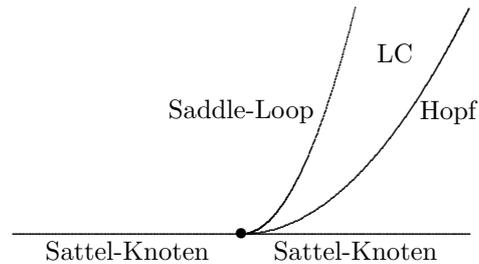


Abbildung 2.10: Lage der Bifurkationspunkte („Phasendiagramm“) in der Umgebung eines Takens-Bogdanov-Punktes. Kennzeichnend ist das Zusammenlaufen einer Kurve von Hopf-Bifurkationspunkten mit zwei Kurven von Sattel-Knoten-Bifurkationspunkten. Die sich an der Hopf-Bifurkation abzweigenden Grenzzyklen existieren nur in dem mit „LC“ bezeichneten Gebiet, da diese durch eine Saddle-Loop-Bifurkation vernichtet werden.

übereinstimmen oder sich zumindest schneiden. Sind die beiden beteiligten Mannigfaltigkeiten eindimensional (sind die beiden relevanten Eigenwerte also rein reell), so muß der homokline Orbit strukturell instabil sein.¹² Bereits kleinste Veränderungen am System führen dazu, daß sich die stabile und die instabile Mannigfaltig-

keit nicht mehr „treffen“. Bei Beteiligung von Hyperebenen ist es möglich, daß der entstehende homokline Orbit strukturell stabil ist. Diese Struktur ist einer der wichtigsten zur Entstehung von Chaos. Ein Beispiel ist der Rössler-Attraktor, der in wahrscheinlich jedem Buch über Chaos beschrieben wird.

2.10 Saddle-Loop-Bifurkation

Der im Abschnitt 2.9 beschriebene homokline Orbit besitzt bereits gewisse Eigenschaften eines Grenzzyklus, insbesondere kehrt er an seinen Ausgangspunkt zurück. Allerdings benötigt er für eine Periode unendlich lange, so daß er in gewisser Hinsicht als Grenzzyklus mit Frequenz Null angesehen werden kann.¹³ Es ist daher vorstellbar, daß ein Grenzzyklus bei Veränderung eines Parameters sich derart verändert, daß er

mit einem homoklinen Orbit verschmilzt. Nach diesem Vorgang ist der Grenzzyklus nicht mehr existent, während kurz vorher die Frequenz des Grenzzyklus immer kleiner wird. Dies dient numerisch auch zur Bestimmung dieser Bifurkation zusammen mit der Tatsache, daß durch eine Saddle-Loop-Bifurkation die Amplitude des Grenzzyklus nicht beeinflusst wird.

2.11 Takens-Bogdanov-Punkt

Wird die Lage von Hopf-Bifurkationen in Abhängigkeit von einem weiteren Parameter bestimmt, so gibt es für ein auf ein endliches Gebiet (bezüglich der Parameter) beschränktes System prinzipiell zwei Möglichkeiten: Entweder liegen alle so bestimmten Hopf-Bifurkationspunkte auf einer geschlossenen Kurve oder die Kurve hat zwei Enden. Die wichtigste Bifurkation, die eine Kurve aus Hopf-Bifurkationspunkten beendet kann, ist ein Takens-Bogdanov-Punkt.

In einem Takens-Bogdanov-Punkt läuft die Hopf-Kurve gegen eine durchgehende Kurve aus

Sattel-Knoten-Bifurkationspunkten; im Berührungspunkt sind die Tangenten der beiden Kurven parallel (siehe Abbildung 2.10). Am Takens-Bogdanov-Punkt müssen die Eigenwertbedingungen beider Bifurkationstypen erfüllt sein, womit zwei Eigenwerte Null sein müssen. Zusätzliche Bedingung ist, daß nur ein Eigenvektor zum Eigenwert Null existiert. Ein Takens-Bogdanov-Punkt kann daher gefunden werden, indem entweder eine Kurve von Hopf-Bifurkationspunkten oder eine von Sattel-Knoten-Bifurkationspunkten verfolgt wird.¹⁴

¹²Diese Aussage gilt nur für kontinuierliche Systeme. Die selbe Begriffsbildung wird auch für Maps verwendet, insbesondere für Poincaré-Maps bei Grenzzyklen.

¹³Man darf dieses Bild natürlich nicht überstrapazieren. Ein Grenzzyklus unterscheidet sich von einer beliebigen periodischen Trajektorie dadurch, daß er ein Attraktor ist. Im allgemeinen ist ein homokliner Orbit kein Attraktor.

¹⁴Die hierfür notwendige Bifurkationsfunktion wechselt bei der Verfolgung entlang der Hopf-Bifurkationen ihr Vorzeichen im Takens-Bogdanov-Punkt, während sie entlang der Sattel-Knoten-Bifurkationen nur eine Nullstelle ohne Vorzeichen-

An der Hopf-Bifurkationskurve entstehen Grenzzyklen, die jedoch nur auf ein bestimmtes Gebiet beschränkt sein müssen. Es muß daher eine weitere Bifurkationslinie geben, entlang derer Saddle-Loop-Bifurkationen stattfinden müssen [Guc83]. Bei einer Saddle-Loop-Bifurkation handelt es sich um eine globale Bifurkationen, während alle anderen bisher behandelten Bifurkationstypen – auch der Takens-Bogdanov-Punkt – lokale Bifurkationen sind. Der Takens-

Bogdanov-Punkt erzwingt damit das Vorhandensein einer globalen Bifurkation, obwohl er selber nur eine lokale Bifurkation ist.

Auf weitere Eigenschaften des Takens-Bogdanov-Punktes kann hier nicht eingegangen werden. Es sei hierfür, insbesondere auch für die Frage der Verlängerung der Hopf-Bifurkation durch den Takens-Bogdanov-Punkt hindurch zu einer imaginären Hopf-Bifurkation¹⁵, auf [Wer91, Roo87, Die90, Guc86] verwiesen.

2.12 Zweigverfolgung

Betrachtet werden die Lösungen der Gleichung

$$0 = f(\mathbf{x}, \lambda)$$

mit $f : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$. Da f für die betrachteten Werte von \mathbf{x} und λ identisch Null ist, gilt dies auch für das Differential¹⁶:

$$0 = df_j = \sum_{i=1}^n \frac{\partial f_j}{\partial x_i} dx_i + \frac{\partial f_j}{\partial \lambda} d\lambda \quad j = 1, \dots, n$$

Dividiert man formal durch $d\lambda$, so erhält man:

$$\sum_{i=1}^n A_{ji} \frac{dx_i}{d\lambda} = -\frac{\partial f_j}{\partial \lambda}$$

Dies ist ein lineares Gleichungssystem für die Variablen $\left\{ \frac{dx_i}{d\lambda} \right\}$. Es besitzt genau dann eine eindeutige Lösung, wenn die Matrix A vollen Rang besitzt. Dies ist gleichbedeutend damit, daß keiner ihrer Eigenwerte Null ist. Die eindeutige Lösung führt dann zu einer gewöhnlichen Differentialgleichung:

$$\frac{dx_i}{d\lambda} = c_i(\mathbf{x}, \lambda)$$

Auf diese Weise kann die Lage von Fixpunkten einer Funktion f in Abhängigkeit von einem Parameter λ dadurch verfolgt werden, daß eine einfache Differentialgleichung aufintegriert wird. Diese Integration ist von den Genauigkeitsanforderungen her sehr unkritisch, da durch die Überprüfung des Betrags von f ein sicheres Kriterium für den Integrationsfehler vorliegt. Wird dieser zu groß, so kann durch eine Nullstellenbestimmung von f der Ausgangswert für die weiteren Integration verbessert werden.

Wie die obige kurze Herleitung gezeigt hat, ist es einfach, die Positionen von Fixpunkten zu verfolgen, solange keine Bifurkation auftritt.¹⁷ Aufgabe einer Zweigverfolgung ist es jedoch auch, durch Betrachtung der Vorzeichen geeigneter gewählter Bifurkationsfunktionen das Auftreten von Bifurkationen entlang der berechneten Fixpunkte zu erkennen und sich dort abspaltende Äste von Fixpunkten zu finden. Dieses Thema muß jedoch spezieller Literatur vorbehalten bleiben [Khi90, Par89, All90].

wechsel besitzt. Bei der Verfolgung von Sattel-Knoten-Bifurkationspunkten kann ein vorhandener Takens-Bogdanov-Punkt nicht mit Sicherheit gefunden werden [Khi90].

¹⁵Eine „reale“ Hopf-Bifurkation ist durch zwei rein imaginäre Eigenwerte x und $-x$ gekennzeichnet, eine „imaginäre“ dementsprechend durch zwei reelle Eigenwerte x und $-x$.

¹⁶Eine ähnliche Argumentation wird zum Beispiel auch in der klassischen Mechanik bei der Einführung von Zwangsbedingungen nach d'Alembert benutzt.

¹⁷Die Hopf-Bifurkation ist in diesem Zusammenhang konzeptionell schwer zu fassen, da der sich abzweigende Grenzzyklus nicht als Fixpunkt von f darstellbar ist. Alle Bifurkationen, die nur die Abzweigung von Fixpunkten behandeln, setzen jedoch voraus, daß mindestens ein Eigenwert Null ist.

Kapitel 3

Modell

Diese Arbeit beschäftigt sich mit dem vertikalen (Elektronen-)Transport in Halbleiterübergittern und baut auf anderen am Institut angefertigten Arbeiten auf. Das im folgenden vorgestellte Modell wurde von F. PRENGEL entwickelt und in [Pre94a, Pre94b] dargestellt.

3.1 Einleitung

Halbleiterübergitter sind Heterostrukturen aus zwei verschiedenen Halbleitermaterialien, zum Beispiel *GaAs* und *AlAs*. Auf einen Wafer werden abwechselnd Schichten aus den beiden Materialien aufgewachsen (siehe Abbildung 3.1). An beiden Ende sind Kontakte angebracht, die aus technischen Gründen meist verschiedenartig sind [Gra92, Sch96c, Gra95a]. Die einzelnen Schichten jedes Materials haben idealerweise die gleiche Dicke, die für die beiden Materialien jedoch meistens verschieden gewählt wird. Die Wachstumsrichtung wird im folgenden meist als z -Richtung bezeichnet.

Die beiden verwendeten Halbleitermaterialien, hier also *AlAs* und *GaAs*, besitzen eine unterschiedliche Bandlücke. Dies führt zu Diskonti-

nuitäten im Leitungs- und im Valenzband. Die Verteilung des Bandlückensprungs auf Leitungs- und Valenzband ist nicht ohne weiteres zu berechnen, so daß hierfür zweckmäßigerweise experimentelle Werte als Ausgangsdaten genommen werden. Im PRENGELschen Modell tragen Löcher wegen ihrer erheblich größeren effektiven Masse und ihrer im Vergleich zu den durch die starke n -Dotierung vorhandenen Elektronen kleinen Zahl nicht zum (Ladungs-)Transport frei, weswegen im folgenden nur das Leitungsband betrachtet zu werden braucht. Es ergibt sich dann eine Situation, wie sie in Abbildung 3.2 skizziert ist:

AlAs besitzt ein um V_0 höheres Leitungsbandniveau als *GaAs*. Für nicht zu hohe Elektro-

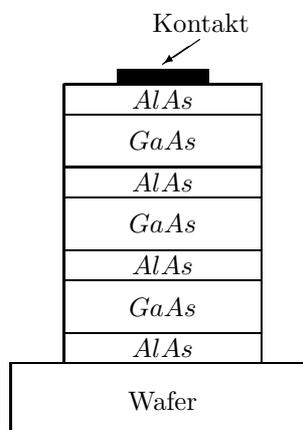


Abbildung 3.1: Prinzipieller Aufbau eines Halbleiterübergitters. Er besteht aus zwei verschiedenen Halbleitermaterialien, hier *AlAs* und *GaAs*, die abwechselnd auf einen Wafer aufgewachsen werden. Die beiden verschiedenen Schichten haben jeweils die gleiche Dicke (bzw. sollten sie haben).

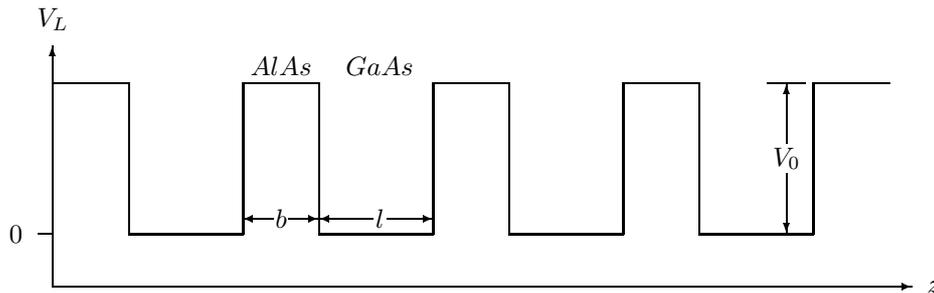


Abbildung 3.2: Leitungsbandverlauf in einem Halbleiterübergitter. Das Leitungsband liegt in *AlAs* höher als in *GaAs*, so daß in einem gewissen Energiebereich die Bewegung von Elektronen im *AlAs* nicht, wohl aber im *GaAs* möglich ist. Die *AlAs*-Schichten wirken daher als Barrieren, während in den *GaAs*-„Quantentöpfen“ in z -Richtung gebundene Zustände bei diskreten Energieniveaus existieren.

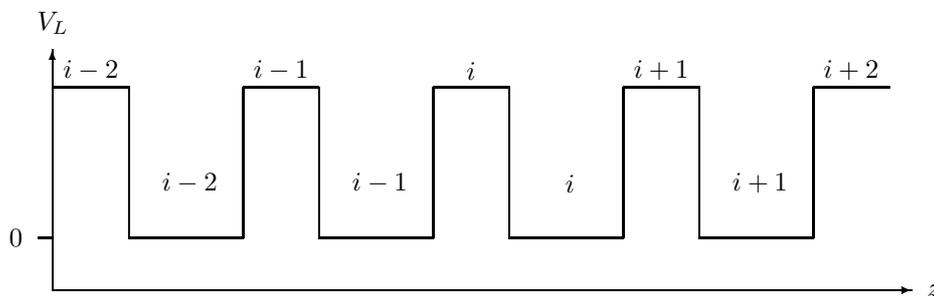


Abbildung 3.3: Nummerierung der Quantentöpfe und Barrieren. Dies geschieht so, daß die Barriere i zwischen den Quantentöpfen $i - 1$ und i liegt.

nenenergien ist daher keine freie Bewegung der Elektronen in *AlAs*, wohl aber in *GaAs* möglich. Die Elektronenwellenfunktion in den *AlAs*-Schichten (Breite b) fällt exponentiell ab, weswegen diese als *Barrieren* bezeichnet werden.

In den *GaAs*-Schichten (Breite l) können sich die Elektronen quer zur Wachstumsrichtung frei bewegen („quasi-freies zweidimensionales Elektronengas“). Diese Bewegung ist für ein Modell, das den vertikalen Transport beschreiben soll, nicht weiter von Interesse.¹ In z -Richtung ist die Bewegung dagegen durch die Barrieren auf ein kleines Gebiet eingeschränkt, daß wegen der Form des Leitungsbandes als *Quantentopf* bezeichnet wird.

Stellt man sich vor, daß die Barrieren unendlich dick wären, dann hätte man in z -Richtung den Fall von „Teilchen im endlich hohen Kasten“. In z -Richtung sind also nur bestimmte Energien er-

laubt, die zu gebundenen Zuständen führen. Die Anzahl dieser Niveaus hängt neben der Tiefe V_0 des Topfes vor allem von dessen Breite ab. Bei typischen Werten ergeben sich zwischen etwa 2 und 6 gebundene Zustände. Auch bei nur endlich dicken Barrieren ist der Transport durch die Barrieren so stark behindert, daß es immer noch sinnvoll ist, von gebundenen Zuständen oder zumindest von lokalisierten Elektronenwellenfunktionen zu sprechen².

Das betrachtete Übergitter soll aus insgesamt N Quantentöpfen bestehen; diese werden mit Zahlen von 1 bis N durchnummeriert. Die zwischen den Quantentöpfen liegenden Barrieren werden nach folgender Vereinbarung durchgezählt: Die i -te Barriere liege zwischen den Quantentöpfen $i - 1$ und i . Bei N Quantentöpfen gibt es also Barrieren mit den Nummern 1 bis $N + 1$, wenn man auch die am Rand des Übergitters liegenden Barrieren mitzählt (siehe Abbildung 3.3).

¹Die hierfür notwendig Aufspaltung des Hamilton-Operators des Systems in einen Teil in Longitudinalrichtung und einen in Transversalrichtung in strenggenommen nur dann erlaubt, wenn zwischen beiden keine Streuvorgänge erlaubt sind. Diese Bedingung ist selbstverständlich nicht erfüllt. Es muß jedoch pragmatisch vorgegangen werden, da auf diese Aufteilung nicht verzichtet werden kann.

²Dies widerspricht auf den ersten Blick der Ausbildung von Minibändern im ideal periodischen Übergitter. Bei geeigneter Präparierung der Wellenfunktion dauert es jedoch im Vergleich zu typischen Streuzeiten sehr lange, bis sich die Wellenfunktion über das gesamte Übergitter ausgebreitet hat.

3.2 Übergangsraten

Wie im letzten Abschnitt bereits angesprochen, ist es sinnvoll, von gebundenen Zuständen in den Quantentöpfen zu sprechen. Die Grundidee des PRENGELschen Modells ist daher, daß sich alle Elektronen in einem gebundenen Energieniveau eines Quantentopfs aufhalten. Transporteffekte werden dann dadurch beschrieben, daß störungstheoretisch Übergänge von einem gebundenen Zustand in einen anderen ausgerechnet werden. Für die Beschreibung des Systems ist es damit ausreichend, die Besetzungsdichte der einzelnen gebundenen Zustände anzugeben³.

Im PRENGELschen Modell werden nur die beiden untersten Energieniveaus betrachtet,⁴ da höhere Energieniveaus nur schwach besetzt sind, nur ein Energieniveau den notwendigen Bereich negativer differentieller Leitungsfähigkeit aber nicht liefern kann. Die Besetzungsdichte im untersten Energieniveau des i -ten Quantentopfs wird mit $n_1^{(i)}$ bezeichnet, die des oberen der beiden betrachteten mit $n_2^{(i)}$.

Durch eine von außen an das Übergitter angelegte Spannung U sowie durch Ladungsträgeransammlung in dessen Innern bilden sich über die einzelnen Barrieren Feldstärken $\{F^{(i)}\}$ aus, die dann zu Transport von einem Quantentopf zu einem anderen führen. Da sich in den Barrieren keine freie Elektronen befinden, ändert sich innerhalb einer Barriere die Feldstärke nicht. Wegen der starken Streuung in dotierten Halbleitern braucht nur der Transport zu benachbarten Quantentöpfen betrachtet zu werden. Die einzelnen Transportprozesse sind in Abbildung 3.4 zusammengefaßt.

Bei der Berechnung der Übergangsraten wird davon ausgegangen, daß der Halbleiter nicht entartet ist.⁵ Damit kann die Übergangsrate als Produkt aus einem Übergangskoeffizienten mit der Besetzungsdichte des Ausgangszustands geschrieben werden. Der Übergangskoeffizient darf, abgesehen von der Geometrie der Schichten und anderen Materialkonstanten, nur von der Feldstärke in der betreffenden Barriere abhängen. Im folgenden Text wird der Übergangs-

koeffizient mit dem gleichen Symbol bezeichnet wie der entsprechende Übergangsprozeß, d. h., $R_2^{(i)}$ steht sowohl für den Übergangskoeffizienten wie auch für den Übergangsprozeß. Die Transportprozesse R_1 und R_2 (also zwischen „gleichartigen“ Energieniveaus) werden durch Minibandleitung beschrieben, die Prozesse X und Y („verschiedenartige“ Energieniveaus) durch resonantes Tunneln.

Wegen der angenommenen Nichtentartung wird damit zum Beispiel der Transportprozeß $R_2^{(i+1)}$ in den Differentialgleichungen, die die Dynamik der $\{n_1^{(i)}\}$ und $\{n_2^{(i)}\}$ beschreiben, zu folgenden Termen führen (analog für R_1):

$$\begin{aligned}\dot{n}_2^{(i)} &= \dots - R_2^{(i+1)} n_2^{(i)} \\ \dot{n}_2^{(i+1)} &= \dots + R_2^{(i+1)} n_2^{(i)}\end{aligned}$$

Die i -Abhängigkeit der Übergangskoeffizienten $R_2^{(i)}$ wird nur durch die unterschiedlichen Werte der Feldstärken $F^{(i)}$ über die einzelnen Barrieren bestimmt. Man kann daher $R_2^{(i)} := R_2(F^{(i)})$ schreiben, wenn $R_2(F)$ die Stärke der Minibandleitung als Funktion der Feldstärke beschreibt.

Berücksichtigt werden muß nun noch, daß Minibandtransport immer in Feldrichtung erfolgt. Die oben angegebene Formel gilt daher nur für den Fall positiver Feldstärken, d. h., das Feld ist nach „rechts“ gerichtet. Ist das Feld umgedreht, so muß der Übergangskoeffizient statt mit $n_2^{(i)}$ jetzt mit $n_2^{(i+1)}$ multipliziert werden, da die Ausgangs- und Zielniveaus vertauscht wurden. Weil es im Übergitter keine Vorzugsrichtung gibt, dürfen sich bei einer Vorzeichenumkehr von F die Koeffizienten $R_2(F)$ nicht verändern. Fordert man aus Bequemlichkeitsgründen, daß das Argument von $R_2(F)$ immer positiv sein soll, so muß in letzterem Fall also einfach $-F$ eingesetzt werden. Nach Einführung der Θ -Funktion, die für positives Argument 1 und ansonsten 0 ergibt, kann obiger Ausschnitt der Übergangsgleichungen also „korrekter“ geschrieben werden als:

³Der gegenteilige Ansatz ist die Berechnung von Elektronenwellenfunktionen, die durch das gesamte Übergitter gehen (vergleiche zum Beispiel das Double Barrier Resonant Tunnelling Device). Es gibt zwei Gründe, warum dies hier nicht sinnvoll bzw. notwendig ist: Zum einen betrachten wir nur schwachgekoppelte Übergitter, d. h. Übergitter mit breiten Barrieren. Zum anderen führt die starke Dotierung der hier untersuchten Übergitter zu vielen Streuvorgängen, die (auch wenn Energieerhaltung gilt) die Phasenkorrelation zerstören und damit die Ausbildung einer Wellenfunktion über das gesamte Übergitter verhindern.

⁴Wie in [Sch95b, Anhang F] ausgeführt wird, gibt es gewisse Probleme bei der Erweiterung des Modells auf höhere Energieniveaus: Bei hohen Spannungen kommt es zu negativen Strömen. Dies dürfte zum einen daran liegen, daß die Näherungen des verwendeten Modells bei der Betrachtung höherer Energieniveaus problematischer werden, zum anderen enthält es keinen Mechanismus, der einen mit der Spannung ansteigenden Untergrund liefert.

⁵Diese Voraussetzung ist nicht allzu gut erfüllt, wobei die Nichtentartung für das resonante Tunneln nicht vorausgesetzt werden muß. Allerdings sind die Fehler, die diese Annahme verursacht, deutlich kleiner als die vieler anderer benutzter Näherungen.

$$\dot{n}_1^{(i+1)} = \dots - X(-F^{(i+1)})n_1^{(i+1)} + Y(-F^{(i+1)})n_2^{(i+1)}$$

Die Berechnung von $R_1(F)$, $R_2(F)$, $X(F)$ und $Y(F)$, also der Feldstärkeabhängigkeit und damit der Physik der Übergangskoeffizienten, findet sich im Anhang G. Der Übergangskoeffizient $A^{(i)}$, der der Intersubbandrelaxation entspricht,

wird einfach durch eine konstante Relaxationszeit τ modelliert. Fügt man alle Teile zusammen, so erhält man als vollständige Gleichung für die Elektronendynamik:

$$\begin{aligned} \dot{n}_1^{(i)} &= \frac{1}{\tau}n_2^{(i)} \\ &\quad - X(-F^{(i)})n_1^{(i)} + Y(-F^{(i)})n_2^{(i-1)} + Y(F^{(i+1)})n_2^{(i+1)} - X(F^{(i+1)})n_1^{(i+1)} \\ &\quad - R_1(F^{(i+1)})n_1^{(i)}\Theta(F^{(i+1)}) + R_1(-F^{(i+1)})n_1^{(i+1)}\Theta(-F^{(i+1)}) \\ &\quad + R_1(F^{(i)})n_1^{(i-1)}\Theta(F^{(i)}) - R_1(-F^{(i)})n_1^{(i)}\Theta(-F^{(i)}) \\ \dot{n}_2^{(i)} &= -\frac{1}{\tau}n_2^{(i)} \\ &\quad - Y(F^{(i)})n_2^{(i)} + X(F^{(i)})n_1^{(i-1)} + X(-F^{(i+1)})n_1^{(i+1)} - Y(-F^{(i+1)})n_2^{(i+1)} \\ &\quad - R_2(F^{(i+1)})n_2^{(i)}\Theta(F^{(i+1)}) + R_2(-F^{(i+1)})n_2^{(i+1)}\Theta(-F^{(i+1)}) \\ &\quad + R_2(F^{(i)})n_2^{(i-1)}\Theta(F^{(i)}) - R_2(-F^{(i)})n_2^{(i)}\Theta(-F^{(i)}) \end{aligned}$$

In den folgenden Kapiteln werden die Elektronendichten $\{n_1^{(i)}\}$ und $\{n_2^{(i)}\}$ häufig zu einem einzigen Vektor \mathbf{n} zusammengefaßt und die obigen Ratengleichungen formell als Multiplikation von \mathbf{n} mit einer Matrix f geschrieben:

$$\dot{\mathbf{n}} = f(\mathbf{n}) \cdot \mathbf{n}$$

$f(\mathbf{n})$ ist von den Elektronendichten \mathbf{n} nur über die Poisson-Gleichung und die Feldstärken \mathbf{F} abhängig, so daß man auch $f(\mathbf{F})$ mit $\mathbf{F} = \mathbf{F}(\mathbf{n})$

schreiben kann. Die Abhängigkeit von der angelegten Spannung wurde hierbei unterdrückt.

Wenn die Auftrennung der Übergangsraten in ein Produkt aus Übergangskoeffizienten und Elektronendichten nicht notwendig ist, wird in dieser Arbeit auch nur kurz $\mathbf{n} = f(\mathbf{n})$ mit einer Funktion $f: \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$ geschrieben (im Gegensatz zum letzten Absatz, wo $f: \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^{2N}$ war).

3.3 Feldverteilung

Durch die Dotierung des Übergitters stehen in den Quantentöpfen ortsfeste Donatoren und bewegliche Elektronen als Ladungsträger zur Verfügung. Im verwendeten Modell wird angenommen, daß die Dotierungsatome und die Elektronen sich jeweils in der Mitte eines Quantentopfs befinden;⁷ es muß also nicht mit Volumenladungsdichten ρ , sondern mit Flächenladungsdichten σ gerechnet werden, wobei die

Umrechnung unmittelbar durch $\sigma = l\rho$ gegeben ist. Durch diese speziellen Annahmen kann es also nur in der Mitte eines Quantentopfs einen Feldstärkesprung geben, während die Feldstärke innerhalb einer Barriere immer konstant bleibt.

Die Feldstärken $\{F^{(i)}\}$ können mittels der diskreten Poisson-Gleichung berechnet werden:

$$\epsilon(F^{(i+1)} - F^{(i)}) = \sigma_i = l\rho_i$$

⁷Für die Dotierungsatome ist dieses auch experimentell meistens erfüllt, da häufig nicht der gesamte Quantentopf beim Aufwachsen dotiert wird, sondern nur ein kleiner Bereich in dessen Mitte („ δ -dotiert“) [Gra92]. Wird in dieser Arbeit die Dotierung einer experimentell untersuchten Probe angegeben, so ist darunter immer die über den gesamten Quantentopf gemittelte 3D-Dotierung zu verstehen. Für die Elektronen ist diese Näherung sicherlich nicht so gut, da Bandverbiegungen, wie sie am Übergang zweier verschiedener Materialien zu erwarten sind, so nicht beschrieben werden können. Da das betrachtete Übergitter im Gegensatz etwa zu einem einzelnen p - n -Übergang spiegelsymmetrisch ist, gibt es in einem Übergitter allerdings kein intrinsisches Potential zwischen den beiden Kontakten. Diese Näherung führt allerdings auch dazu, daß sich beim Anlegen einer Spannung das Fermi-Niveau nicht verändert (außer der expliziten Verschiebung mit der angelegten Spannung).

Die durch die Ladungsträger erzeugten Felder führen zu einem inneren Potential, das gleich der angelegten äußeren Spannung U sein muß⁸:

$$\sum_{i=1}^{N+1} F^{(i)}(N+1-i)l = U \quad (3.1)$$

Die Ladungsdichte ρ_i errechnet sich aus der Differenz zwischen den Elektronen in einem Quantentopf und den dort vorhandenen Dotierungs-

atomen, also aus

$$\rho_i = n_1^{(i)} + n_2^{(i)} - N_D$$

mit der Dotierungsdichte N_D . Sie tritt nur in dieser einzigen Gleichung auf, ist aber der für das Verhalten des Systems wichtigste Parameter. Dies zeigt, wie wichtig die durch Gleichung 3.1 gegebene globale Kopplung für das Verhalten des Systems ist.

3.4 Stromdichte

Mit den bisher angegebenen Gleichungen ist die Elektronendynamik vollständig beschrieben. Für den Vergleich mit experimentellen Ergebnissen ist jedoch nicht primär die Elektronenverteilung bzw. die Feldverteilung relevant, sondern der durch das Übergitter fließende Strom.

Im Rahmen eines eindimensionalen Modells kann selbstverständlich nur eine Aussage über die Stromdichte j gemacht werden. Wird zum Beispiel die i -te Barriere betrachtet, so ergibt sich für die Stromdichte $j^{(i)}$ über diese Barriere:

$$\begin{aligned} \frac{1}{e}j^{(i)} = & + \left[R_1 \left(F^{(i)} \right) n_1^{(i-1)} + R_2 \left(F^{(i)} \right) n_2^{(i-1)} \right] \Theta \left(F^{(i)} \right) \\ & - \left[R_1 \left(-F^{(i)} \right) n_1^{(i)} + R_2 \left(-F^{(i)} \right) n_2^{(i)} \right] \Theta \left(-F^{(i)} \right) \\ & + \left[X \left(F^{(i)} \right) n_1^{(i-1)} + Y \left(-F^{(i)} \right) n_2^{(i-1)} \right] - \left[X \left(-F^{(i)} \right) n_1^{(i)} + Y \left(F^{(i)} \right) n_2^{(i)} \right] \end{aligned}$$

Die vier eckigen Klammern haben folgende Bedeutung: Die ersten beiden beschreiben die Teilchenstromdichte auf Grund der Minibandleitung. Bei positiver Feldstärke erfolgt der Transport von „links“ nach „rechts“ und die Teilchenstromdichte wird positiv gezählt. Die beiden anderen Klammern beinhalten die Teilchenstromdichte auf Grund resonanten Tunnelns. Teilchen, die von „links“ nach „rechts“ transportiert werden, werden positiv gezählt, die in der

„falschen“ Richtung transportierten negativ.

Die Stromdichten dürfen über verschiedene Barrieren durchaus unterschiedlich groß sein, da sich bei nichtstationären Vorgängen Ladungsträger in bestimmten Teilen ansammeln und damit nicht durch das gesamte Übergitter bewegen können. Wird zusätzlich die Verschiebungsstromdichte berücksichtigt, so ist auch in diesem Fall die Gesamtstromdichte über alle Barrieren gleich groß [Wac93, Sch95a].

3.5 Felddomänen

Zum Abschluß soll noch ein kurzer Ausblick auf das prinzipielle Verhalten eines Übergitters gegeben werden:

Es ist unmittelbar einsichtig, daß die Elektronen aus einem bestimmten Energieniveau eines Quantentopfs besonders gut in den Nachbarquantentopf gelangen können, wenn es bei der gleichen Energie viele freie Zustände im Nachbarquantentopf, d. h. ebenfalls ein Energieniveau, gibt. Dies ist zum einen bei sehr kleinen Feldstärken der Fall, wo die Minibandleitung

sehr stark ist, zum anderen bei der Resonanzfeldstärke F_{res} , bei der das untere Energieniveau eines Quantentopfs auf der gleichen Höhe liegt wie das obere im Nachbarquantentopf.

Umgangssprachlich ausgedrückt, kann man das „Verhalten“ eines Übergitters so zusammenfassen, daß es einen Zustand erreichen „will“, bei dem alle Übergangsraten möglichst groß sind. Die Folge davon soll mit Hilfe der Abbildung 3.5 erläutert werden. Dargestellt sind zwei mögliche Konfigurationen der Feldverteilung

⁸Die Frage, inwiefern auch über die Barrieren am Rand des Übergitters summiert werden muß, ist nicht einfach zu beantworten, für die Ergebnisse aber auch nicht weiter entscheidend. Wie auch im nächsten Abschnitt dargestellt wird, ist die Frage der Randbedingungen noch weitgehend unverstanden, so daß das „Ergebnis“ die „Annahmen“ rechtfertigt.

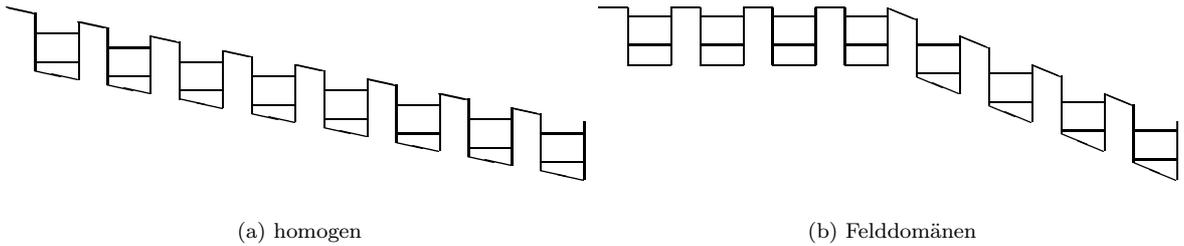


Abbildung 3.5: Prinzipielle Feldverteilung im Übergitter. Die gesamte „Höhendifferenz“ ist durch die angelegte Spannung bestimmt. Für den Abfall dieser Spannung über dem Übergitter gibt es zwei Möglichkeiten: **(a)** Im homogenen Fall ist die Feldstärke im gesamten Übergitter gleich. Resonante Übergänge zwischen benachbarten Quantentöpfen sind nicht möglich. **(b)** Bei der Bildung einer Felddomäne herrscht in einem Teil des Übergitters eine Feldstärke, die resonante Übergänge zwischen verschiedenen Energieniveaus benachbarter Quantentöpfe erlaubt, während der Rest des Übergitters praktisch feldfrei ist, so daß dort resonante Übergänge zwischen gleichartigen Energieniveaus möglich sind.

lung in einem Übergitter. Die Verschiebung des Leitungsbandes zwischen den beiden Enden des Übergitters ist durch die angelegte Spannung vorgegeben und in beiden Teilbildern gleich. In Abbildung 3.5(b) ist die Feldstärke im gesamten Übergitter konstant. Dies bedingt, daß es (im allgemeinen) keine Resonanzen von der im vorherigen Absatz beschriebenen Form gibt. Bei der anderen Möglichkeit, der in Abbildung 3.5(b) dargestellten Ausbil-

dung einer Felddomäne⁹, herrscht in einem Teil des Übergitters ungefähr die Resonanzfeldstärke F_{res} (Hochfelddomäne), während der Rest beinahe feldfrei ist (Niederfelddomäne). Im homogenen Fall ist die Feldstärke proportional zur angelegten Spannung, während bei einer Felddomäne eine Veränderung der Spannung primär zu einer Verschiebung der Domänengrenze und nicht zu einer signifikanten Veränderung der Feldstärken in den beiden Domänen führt.

3.6 Randbedingungen

Bisher noch nicht behandelt wurde die Wahl von geeigneten Randbedingungen. Bei vielen Berechnungen von Halbleiterbauelementen ist es sinnvoll, den Einfall einer ebenen Welle in das Gebiet des eigentlichen Bauelements zu betrachten. Dieses ist hier nicht möglich, da nicht mit Wellenfunktionen, sondern mit Elektronendichten gerechnet wird. Benötigt wird also eine Vorschrift, wie die dynamischen Gleichungen für den ersten und den N -ten Quantentopf abgeändert werden müssen.

Die theoretische Beschreibung von Kontakten ist häufig komplizierter als die Beschreibung des Bauelementes selber. Auch experimentell ist die Kontaktierung mit deutlich mehr „Alchimie“ verbunden als das Wachsen des eigentlichen Übergitters. Aus diesem Grund wird gar nicht versucht, eine direkte physikalische Begründung für die Kontaktmodellierung zu geben. „Gute Kontakte“ sind also solche, bei denen die Berechnungen „vernünftige“ Ergebnisse liefern. Dies geht selbstverständlich nur, wenn man bereits die Ergebnisse des nächsten Kapi-

tels über die ungestörte Kennlinie als Vergleich hat.

Die Modellierung der Kontakte soll wie folgt geschehen: An beiden Rändern des Übergitters wird jeweils ein zusätzlicher Quantentopf angefügt (Index also 0 bzw. $N+1$). Die Übergangsraten über die erste bzw. $(N+1)$ -te Barriere werden mittels der normalen Transportgleichungen berechnet. Die Besetzungsdichten der Energieniveaus in den zusätzlichen „virtuellen“ Quantentöpfen ändern sich jedoch nicht entsprechend der Transportraten, sondern werden durch spezielle Gleichungen bestimmt.

Es ist eine sinnvolle Annahme, daß die Besetzungsdichten in den beiden virtuellen Quantentöpfen nur von den Besetzungsdichten in den jeweils angrenzenden „realen“ Quantentöpfen abhängen sollen. In Ermangelung einer physikalischen Beschreibung wird angenommen, daß dieser Zusammenhang linear ist. Damit kann für die Besetzungsdichten in den virtuellen Quantentöpfen geschrieben werden:

⁹Auf die Frage, an welcher Seite des Übergitters die Hochfelddomäne liegt, soll hier nicht eingegangen werden. Die hier gemachte Argumentation gilt für beide Fälle.

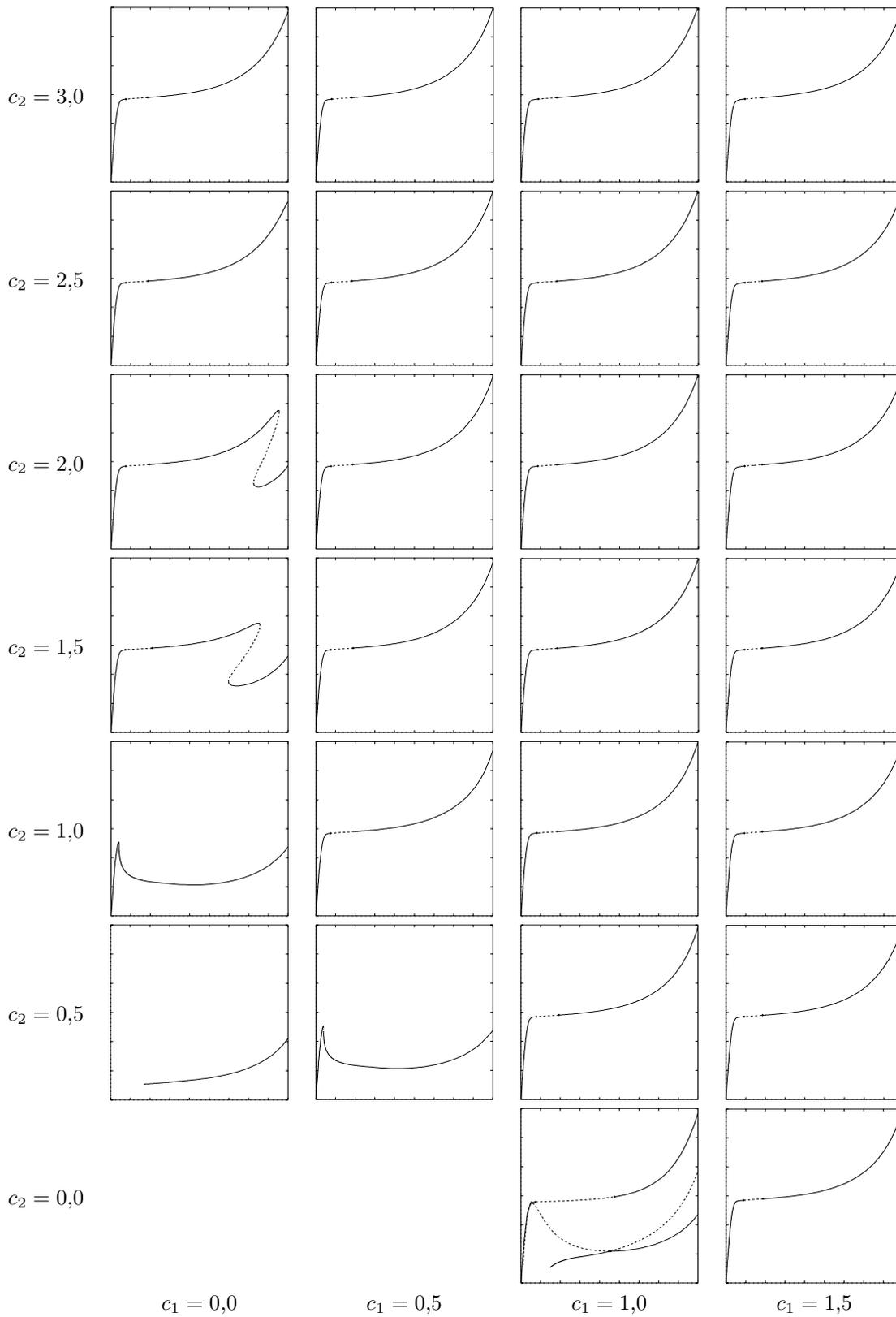


Abbildung 3.6: Kennlinien für verschiedene Randbedingungen bei einer Dotierung von $N_D = 3 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. c_1 und c_2 sind im Text erklärt. X-Achse: U [V], ein Teilstrich gleich 0,5 V; y-Achse: j [kA/cm²], ein Teilstrich gleich 0,05 kA/cm².

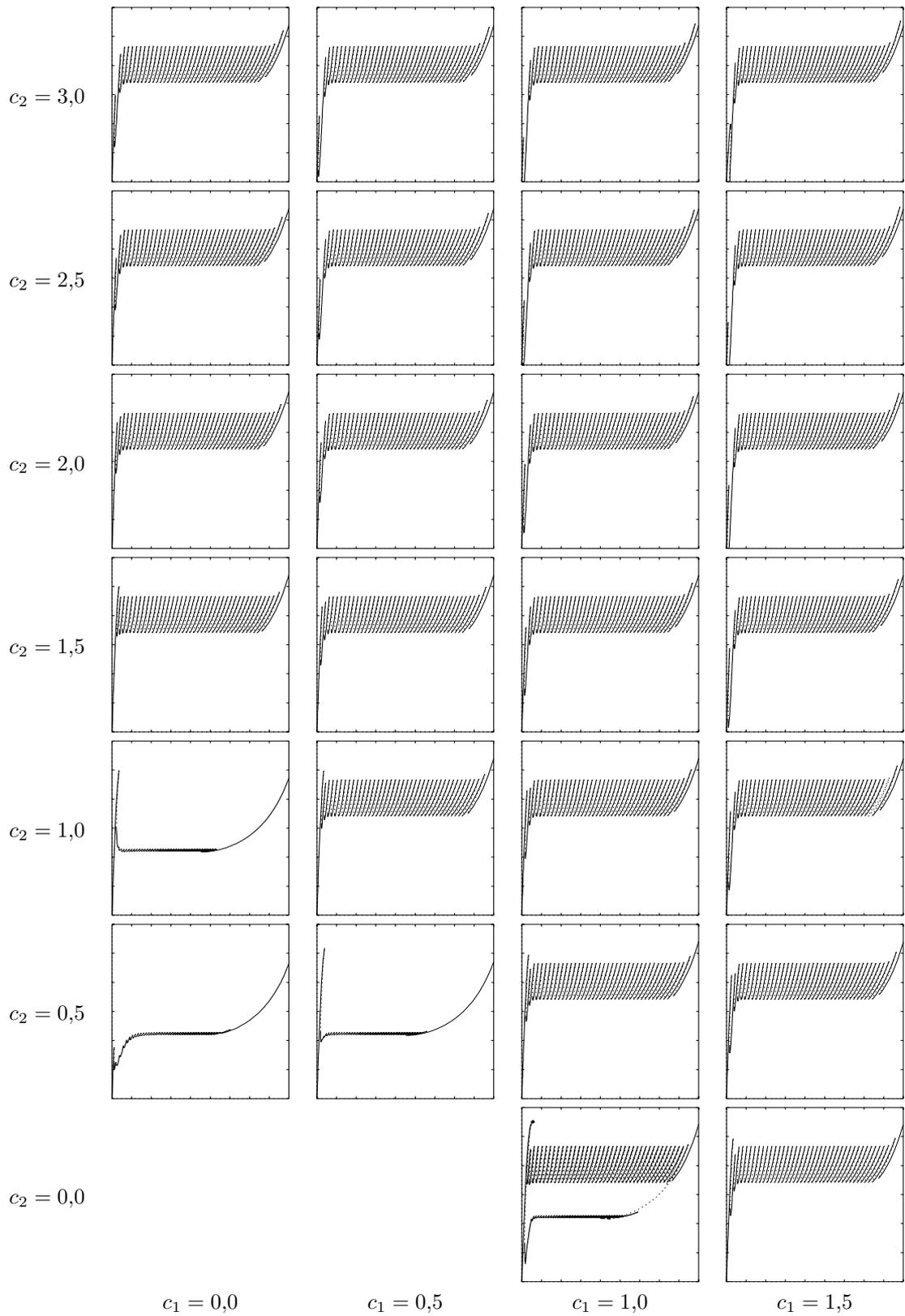


Abbildung 3.7: Kennlinien für verschiedene Randbedingungen bei einer Dotierung von $N_D = 6 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. c_1 und c_2 sind im Text erklärt. X-Achse: U [V], ein Teilstrich gleich 0,5 V; y-Achse: j [kA/cm²], ein Teilstrich gleich 1 kA/cm².

$$\begin{aligned} n_1^{(0)} &= c_1 \cdot n_1^{(1)} + c_2 \cdot N_D & n_1^{(N+1)} &= c_1 \cdot n_1^{(N)} + c_2 \cdot N_D \\ n_2^{(0)} &= c_1 \cdot n_2^{(1)} + c_3 \cdot N_D & n_2^{(N+1)} &= c_1 \cdot n_2^{(N+1)} + c_3 \cdot N_D \end{aligned}$$

Durch Veränderung der drei Konstanten c_1 , c_2 und c_3 können alle (bzgl. der beiden Kontakte symmetrischen¹⁰) linearen Funktionen erhalten werden. Die Konstante c_3 darf mit folgender Begründung weggelassen werden: Die Elektronen, die sich am Rand im oberen Energieniveau befinden, werden sehr schnell (zeitlich und damit auch örtlich, d. h., nachdem sie nur wenige Quantentöpfe weit gewandert sind) in das erste Energieniveau relaxieren, so daß man sie gleich in das erste Energieniveau hätte packen können. Hat sich eine Hochfelddomäne ausgebildet, so ist vor einem Transport aus dem zweiten Energieniveau ein vorheriger Relaxationsvorgang sogar zwingend.

Die Wahl einer geeigneten linearen Funktion ist damit auf die Veränderung der beiden Konstanten c_1 und c_2 reduziert. Es müssen jetzt Simulationen oder andere numerische Berechnungen¹¹ für verschiedene Wertepaare durchgeführt werden. Dies wurde für zwei verschiedene Dotierung gemacht. In Abbildung 3.7 sind die Ergebnisse für hohe Dotierungen, bei denen voll ausgeprägte Äste erwartet werden, dargestellt, während in Abbildung 3.6 die Dotierung im Bereich, in dem Oszillationen auftreten, liegt. Die Oszillationen selber sind nicht eingezeichnet, wohl aber der instabile Ast, um den herum die Oszillation stattfindet.

Die Ergebnisse bei verschiedenen Wertepaaren lassen sich in vier Gruppen einteilen: Bei zu kleinen Werten für c_1 und c_2 kann sich überhaupt kein stationären Zustand ausbilden, da alle Elektronen im Übergitter mehr oder weniger schnell über die Kontakte aus dem Übergitter „herauslaufen“. Deswegen konnte in den Abbildungen für diese Wertepaare keine Grafik eingezeichnet werden. Bei etwas größeren Werten kann sich zwar stationärer Zustand ausbilden, die für eine Ausbildung einer Aststruktur notwendige Ladungsträgeransammlung (die an einem Rand beginnen muß) ist jedoch nicht mög-

lich. Ansonsten gibt es noch einen weiteren Sonderfall, nämlich $c_1 = 1$ und $c_2 = 0$. Dieser wurde zum Beispiel in [Pre94a, Pre94b] als Randbedingungen verwendet. Ein paar Bemerkungen zu dieser speziellen Randbedingung erfolgen im Kapitel 7.

Die Kurven für die meisten Wertepaare unterscheiden sich jedoch nur unwesentlich. Die Tatsache, daß manche bei hohen Spannungen einen zusätzlichen Ast zeigen, hat keine physikalische Begründung: Die dargestellten Kennlinien werden bis zu einer maximalen Spannung von 4,5 V berechnet. Wenn dieser Ast erst bei einer höheren Spannung beginnt, ist er in den Abbildungen nicht zu sehen, auch wenn ein Teil vom ihm bei einer Spannung unter 4,5 V liegt. Welche Werte für c_1 und c_2 genau gewählt werden, ist ziemlich willkürlich. Im folgenden wird $c_1 = 0$ und $c_2 = 2$ gewählt, wie dieses bereits in [Pat95] geschah. Diese Wahl kann dadurch motiviert werden, daß ohmsche Kontakte, wie sie zum Beispiel durch Ionenimplantation hergestellt werden, wegen ihrer hohen Dotierung ein Ladungsträgerreservoir darstellen.

Bei diesen beiden Randbedingungen handelt es sich mathematisch um diskrete Versionen von Dirichlet- bzw. Neumann-Randbedingungen. Für einige Aspekte ist der mathematische Charakter der Neumann-Randbedingung wichtig (zum Beispiel für die Existenz eines homogenen Feldzustandes). Die anderen Randbedingungen könnte man jedoch besser als „feste“ Randbedingungen bezeichnen: Eine Wahl wie $c_1 = 1$ und $c_2 = 2$ führt zu den prinzipiell gleichen Ergebnissen wie $c_1 = 0$ und $c_2 = 2$, obwohl erstere keine Dirichlet-Randbedingung mehr darstellt.

In dieser Arbeit wurden beinahe ausschließlich die „festen“ Randbedingungen $c_1 = 0$ und $c_2 = 2$ verwendet. Bei Verwendung anderer Randbedingungen wird darauf ausdrücklich hingewiesen.

¹⁰Man könnte auf die Idee kommen, an den beiden Rändern verschiedene Randbedingungen zu verwenden. Dies würde auch dem Experiment entsprechen, bei dem die beiden Kontakten meist völlig verschieden sind [Gra92, Sch96c, Gra95a]. Eine solche Verkomplizierung ist jedoch überflüssig. Beim Anlegen einer Spannung „fließen“ die Elektronen an einer Seite in das Übergitter hinein und an der anderen wieder heraus. Geht man davon aus, daß Transportvorgänge in Rückwärtsrichtung nur von untergeordneter Bedeutung sind, so ist die gewählte Randbedingung an der „Abflußseite“ wegen der angenommenen Nichtentartung irrelevant.

¹¹Wenn in dieser Arbeit von Simulation die Rede ist, so ist damit immer ein „Computer-Experiment“ gemeint. Mit einer Simulation können also nur Effekte beobachtet werden, die zumindest prinzipiell auch im Experiment beobachtet werden können. Als numerischen Berechnungen werden dagegen alle Verfahren bezeichnet, auch wenn sie zum Beispiel instabile Zustände verfolgen.

Kapitel 4

Ungestörtes Übergitter

Die Kennlinie eines Halbleiterübergitters unterscheidet sich deutlich von der Durchlaßcharakteristik einer einzelnen Barriere (wie zum Beispiel durch die $v(F)$ -Kurve beschrieben). Ursache hierfür ist die Möglichkeiten, daß es – wie im Abschnitt 3.5 bereits angesprochen – zur Ansammlung von Ladungsträgern in bestimmten Quantentöpfen und damit zur Ausbildung einer räumlichen Struktur kommt. Damit die dazu notwendigen Elektronen zur Verfügung stehen, muß allerdings die Dotierungskonzentration N_D hinreichend hoch sein.

Bei hohen Dotierungen (einige 10^{17} cm^{-3}) ergibt sich die „typische Kennlinie“ (Abbildung 4.2 auf Seite 27). Sie besteht bei einem Übergitter mit N Quantentöpfen aus ungefähr N Ästen, die durch instabile stationäre Zustände verbunden sind. Der Übergang zwischen dem stabilen und instabilen Bereich geschieht durch Sattel-Knoten-Bifurkationen.

Kennlinien für andere Dotierungen sind in Abbildung 4.1 dargestellt. Auf die Beschreibung dieser Kennlinien wird im Abschnitt 4.3 zurückgekommen. Zuerst sollen jedoch die beiden selbstorganisierten Strukturen behandelt werden, die in den Kennlinien bereits zu sehen sind: zum einen die Ausbildung von Ästen¹ bei starkdotierten Übergittern, zum anderen ungedämpfte Oszillationen im mittleren Dotierungsbereich.

4.1 Kennlinie mit ausgebildeter Aststruktur

Wie eben bereits gesagt, besteht die „Kennlinie“ eines Übergitters aus ungefähr so vielen Ästen, wie das Übergitter Quantentöpfe besitzt.² Die stabilen und damit durch Simulation oder Experiment erreichbaren Äste sind durch instabile stationäre Zustände („instabile Äste“) verbunden. Damit besteht die gesamte Kennlinie aus einer einzigen Kurve. Beim Abfahren dieser Kurve führen Sattel-Knoten-Bifurkationen dazu, daß Äste instabil bzw. wieder stabil werden. Auf die Sattel-Knoten-Bifurkation als solches wird hier nicht weiter eingegangen, da dies

bereits im Abschnitt 2.2 geschehen ist.

Wegen der Umkehrung der „Spannungsrichtung“ in den Bifurkationspunkten zeigt die Kennlinie Multistabilität. Die Angabe der Spannung ist also nicht ausreichend, um den Zustand zu beschreiben. Auch verändern sich die meisten Größen unstetig, wenn die Spannung monoton verändert wird, da am Ende eines Astes dann auf einen anderen gesprungen wird. Diese Probleme können dadurch gelöst werden, daß nicht mit der Spannung, sondern einer Größe wie der

¹Mit Aststruktur wird in dieser Arbeit das „Sägeblattemuster“ in der Kennlinie bezeichnet. Dieses tritt nur bei hinreichend hohen Dotierungen auf. Wird mit einer geringen Dotierung begonnen und diese dann erhöht, so bildet sich oberhalb einer Grenze die Aststruktur aus. Diese Astbildung ist nicht in dem Sinne ein plötzlich einsetzender Prozeß, daß bei Erhöhung von N_D alle Äste gleichzeitig entstehen würden; wie später noch gezeigt wird, entstehen die bei verschiedenen Spannungen liegenden Äste bei leicht unterschiedlichen Werten für N_D .

Von der Astbildung zu unterscheiden ist die Ausbildung von Domänen. Für letztere ist nur das Vorhandensein einer N-förmigen Kennlinie notwendig (siehe zum Beispiel [Sch87, Sha92]), während für eine Aststruktur zusätzlich die diskrete Struktur des Übergitters notwendig ist. Felddomänen sind eine notwendige Voraussetzung für die Ausbildung einer Aststruktur; im streng mathematischen Sinne gibt es jedoch bereits für beliebig kleine Dotierungen eine Felddomäne. Astbildung setzt die Multistabilität von Felddomänen voraus, die hier dadurch ermöglicht wird, daß Felddomänen nur an diskreten Position liegen dürfen.

²Es stellt sich zum Beispiel die Frage, ob der „große Ast“ bei hohen Spannungen mitzuzählen ist. Er führt wie ein „normaler Ast“ zu einem Sprung in der Kennlinie, hat jedoch eine etwas andere Ursache als die anderen Äste.

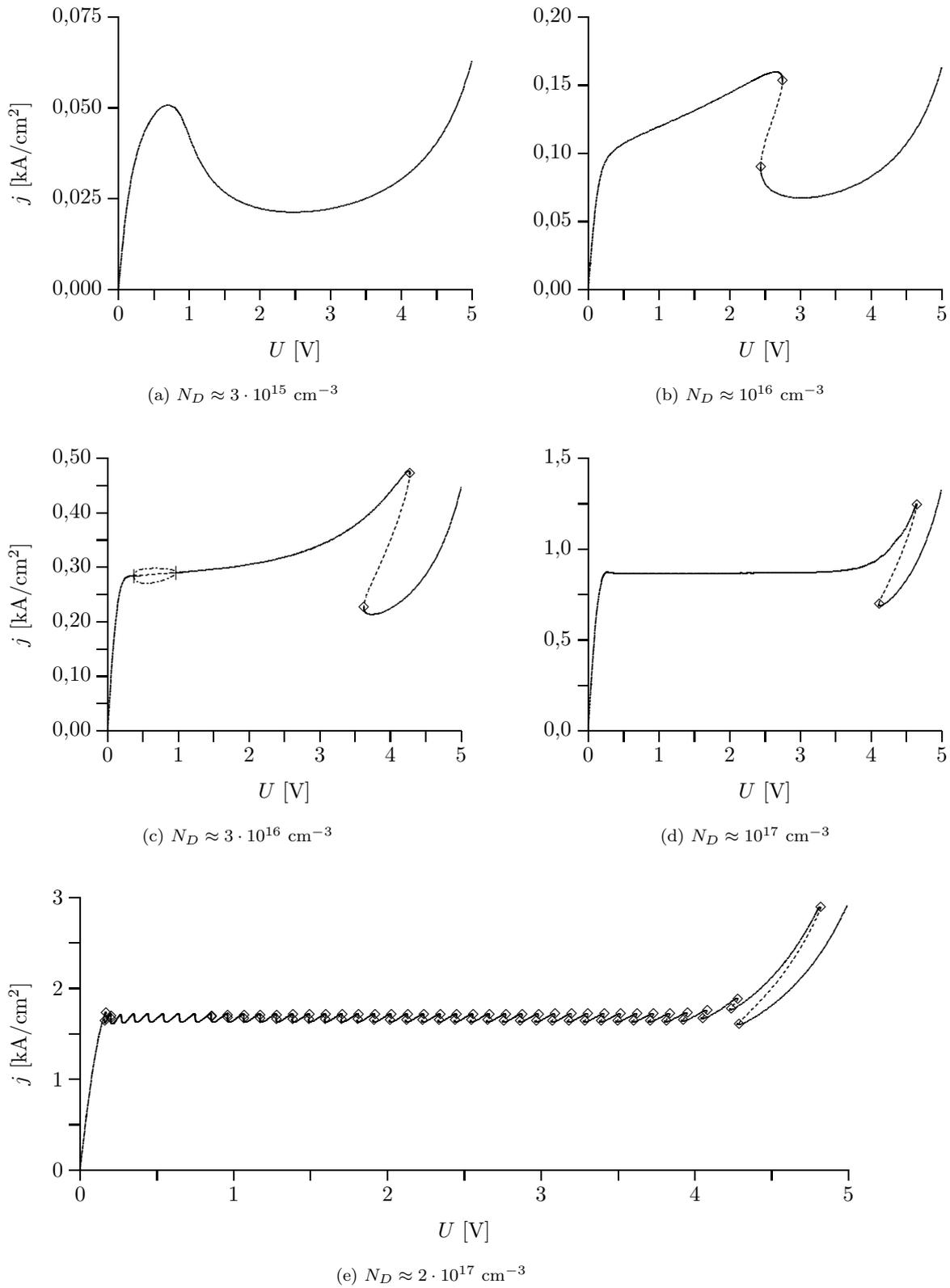


Abbildung 4.1: Kennlinien bei verschiedenen Dotierungen. Eine Kennlinie mit voll ausgeprägten Ästen (=höherer Dotierung) ist in Abbildung 4.2 dargestellt.

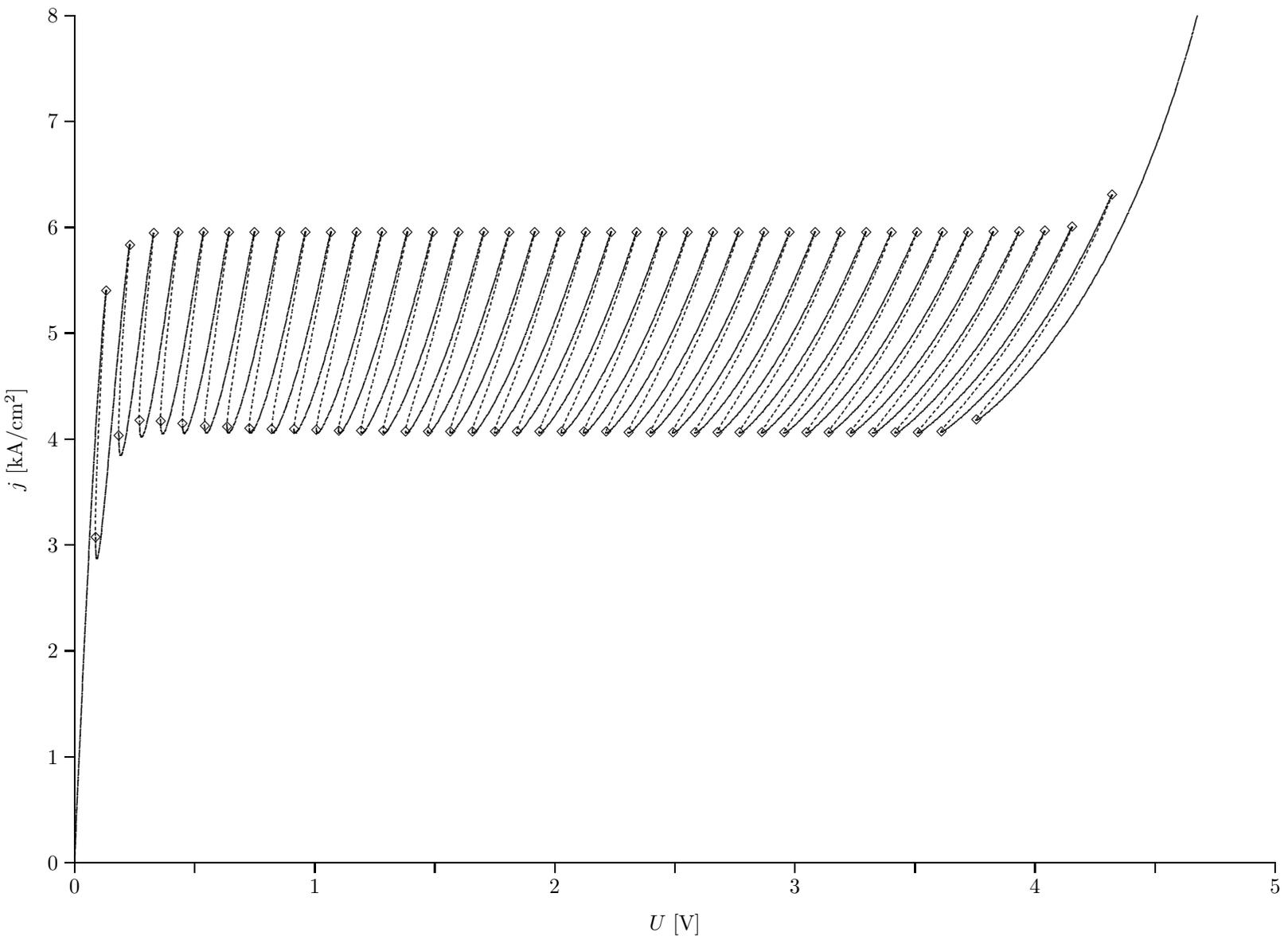


Abbildung 4.2: Durchgehende Kennlinie für hohe Dotierung

Bogenlänge parametrisiert wird. Dies wird im folgenden mehrfach gemacht, so daß gleich hier die hier verwendete Definition für die Bogenlänge angegeben werden soll:

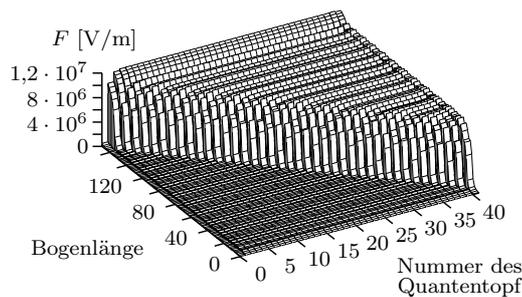
Wenn in dieser Arbeit von Bogenlänge die Rede ist, so ist immer diejenige im j - U -Diagramm gemeint, d. h. in der „normale“ Darstellung einer Kennlinie. Als Einheiten wurden kA/cm^2 und V gewählt. Wenn man dies mit der Auftragung in Abbildung 4.2 vergleicht, so erkennt man, daß die Abweichung der so definierten Bogenlänge von der Kurve auf dem „Papier“ relativ klein (ungefähr ein Faktor 2) ist. Das einfache „Ansehen“ der Kennlinie gibt also einen guten Eindruck von der Bogenlänge in den Berechnungen. Oftmals wird nicht die gesamte Kennlinie gezeichnet, sondern nur ein bestimmtes Spannungsintervall. In diesem Fällen ist die Über-

einstimmung noch besser.

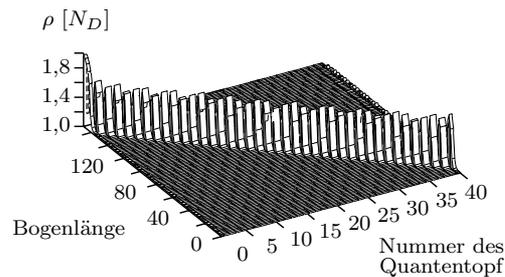
Wie bereits seit längerem bekannt ist, ist bei hinreichend hoher Dotierung die Feldverteilung im Übergitter nicht mehr homogen, sondern es bilden sich Felddomänen aus (vergleiche Abschnitt 3.5): In der Niederfelddomäne ist die Feldstärke beinahe Null³, in der Hochfelddomäne liegt die Feldstärke knapp unterhalb des Wertes für die 1-2-Resonanz [Pre94a], d. h. der Feldstärke, bei der das erste (=untere) Energieniveau eines Quantentopfes auf der selben Höhe liegt wie das zweite (=obere) im Nachbartopf.

Die Feldverteilung ist in Abbildung 4.3(a) in Bogenlängenparametrisierung aufgetragen. Die gleichmäßige Ausbreitung der Hochfelddomäne ist sehr gut zu erkennen. Bei den zusätzlich vorhandenen Unregelmäßigkeiten, insbesondere den „Spitzen“ der Elektronendichten (Ab-

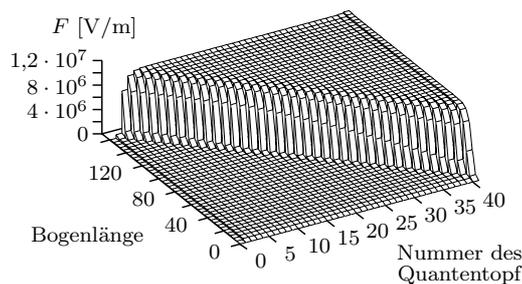
³Sie liegt tatsächlich etwas darüber. Ihr Wert orientiert sich an dem des Maximums für den Minibandtransport.



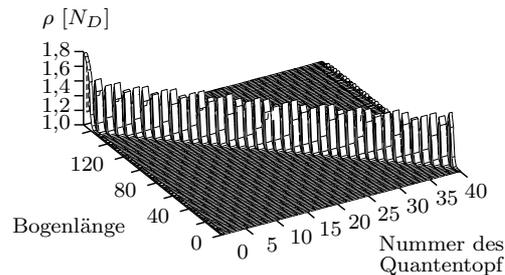
(a) Feldverteilung



(b) Elektronendichten

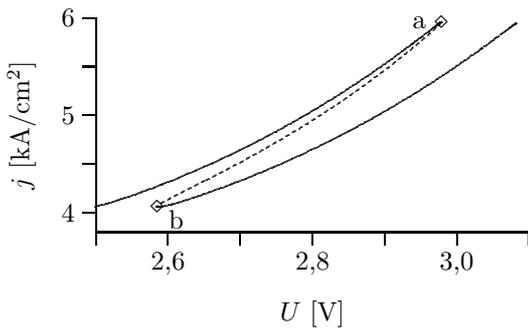


(c) Feldstärkeverteilung (nur obere Bifurkationspunkte)

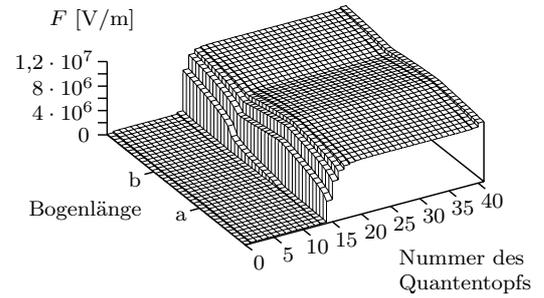


(d) Elektronendichten (nur obere Bifurkationspunkte)

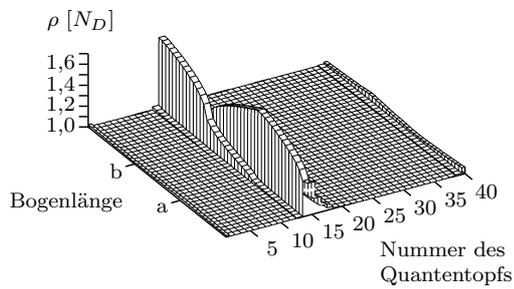
Abbildung 4.3: Zustände entlang der Kennlinie. Dargestellt sind Feldstärke- und Elektronendichteverteilung entlang der Kennlinie aus Abbildung 4.2 in Bogenlängenparametrisierung. **(a)**, **(b)** Die einzelnen dargestellten Datenpunkte sind gleichmäßig über die gesamte Bogenlänge der Kennlinie verteilt. Da die Länge eines Astes nicht ein ganzzahliges Vielfaches dieses Abstandes ist – dies ist auch nicht möglich, da die Äste mit höheren Spannungen länger werden –, entsprechen die dargestellten Daten verschiedenen Positionen auf den Ästen. Als Ergebnis kann man in beiden Abbildungen feine Strukturen erkennen, die jedoch keinerlei physikalische Bedeutung haben. **(c)**, **(d)** Diese Artefakte können vermieden werden, wenn nur die Daten des jeweils oberen Sattel-Knoten-Bifurkationspunktes zur Auftragung verwendet werden.



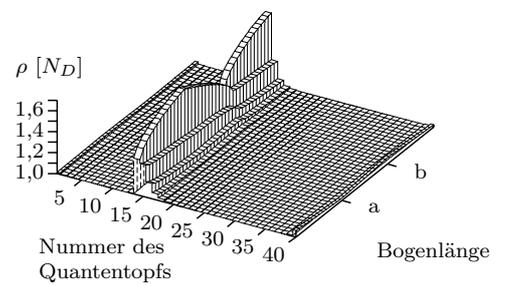
(a) Ausschnitt der Kennlinie



(b) Feldstärkeverteilung

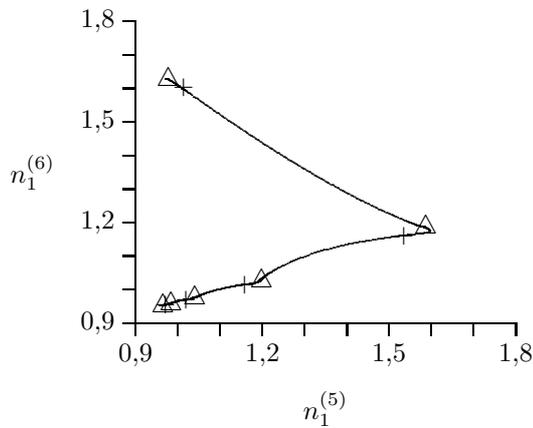


(c) Elektronendichten

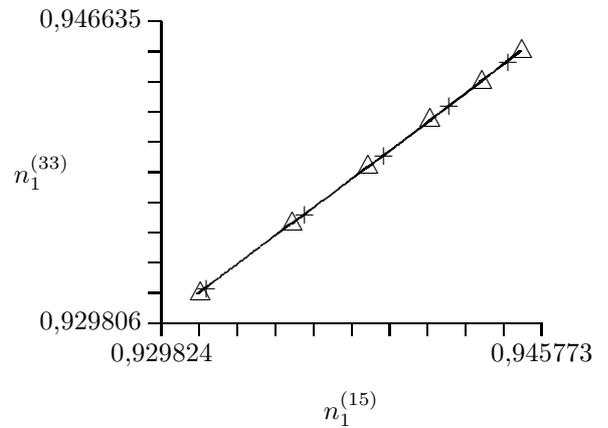


(d) Elektronendichten

Abbildung 4.4: Veränderungen beim Erreichen eines neuen Astes. **(a)** Ausschnitt aus der Kennlinie in Abbildung 4.2. Die beiden Sattel-Knoten-Bifurkationen sind mit den Buchstaben „a“ und „b“ gekennzeichnet. **(b)** Feldstärkeverteilung entlang des in Teilbild a gezeichneten Abschnitts der Kennlinie. Die Position der beiden Sattel-Knoten-Bifurkationen sind durch „a“ und „b“ markiert. **(c), (d)** Desgleichen die Elektronendichten. In beiden Teilbildern werden die selben Daten dargestellt, nur mit einer verschiedenen Ansicht.



(a)



(b)

Abbildung 4.5: Instabile Mannigfaltigkeiten bei $U = 3,8$ V. Aufgetragen sind die Projektionen der instabilen Mannigfaltigkeiten der instabilen Fixpunkte auf zwei verschiedene Koordinatenebenen.

bildung 4.3(b)), handelt es sich um Artefakte des Auftragungsverfahrens. Die einzelnen Datenpunkte, die in der Abbildung eingezeichnet wurde, sind (bezüglich der Bogenlänge) gleichmäßig über die gesamte Kennlinie verteilt. Der Abstand der Datenpunkte stimmt aber nicht mit der Länge der Äste überein, kann es auch nicht, da die Äste bei höheren Spannung länger sind. Als Ergebnis nimmt man die Daten von Punkten, die relativ zu dem Ast, auf dem sie liegen, an einer anderen Position liegen. Dies führt dann zu kleinen Schwankungen der Feldstärke und der Elektronendichten.

Will man trotzdem eine „schöne“ Grafik erhalten, so muß man Datenpunkte wählen, die relativ zum Ast immer an der gleichen Stelle liegen. Das einzige Problem ist, daß man auf diese Weise nur $N = 40$ Datenpunkte erhält und von diesen ausgehend interpolieren muß. Welche Position auf dem Ast man wählt, ist relativ willkürlich, hier wurde der obere Sattel-Knoten-Bifurkationspunkt genommen. Die betreffenden Daten sind in den Abbildungen 4.3(c) und 4.3(d) aufgetragen und erheblich gleichmäßiger. Man kann insbesondere den Anstieg der Feldstärke besser erkennen, sobald die Hochfelddomäne das gesamte Übergitter ausfüllt.

Wie bereits beschrieben, muß sich die Hochfelddomäne mit steigender Spannung ausdehnen, damit weiterhin die durch die Feldstärkeverteilung bestimmte innere Spannung mit der angelegten äußeren Spannung übereinstimmt. Die damit verbundene Bewegung der Ladungsträgeransammlung kann wegen der diskreten Struktur des Übergitters jedoch nicht gleichmäßig geschehen: Die Bewegung der Ladungsträger in den nächsten Quantentopf führt zum „Betreten“ eines neuen Astes. Dies ist vergrößert in Abbildung 4.4 zu sehen.

Die Abbildung zeigt den Übergang von einem Ast zum anderen. Die beiden beteiligten Sattel-Knoten-Bifurkationen sind mit „a“ bzw. „b“ markiert. Zwischen diesen beiden Buchstaben ist der Ast also instabil, außerhalb davon stabil. Diese beiden Markierungen befinden sich auch an den anderen drei Abbildungen, um die Bogenlängenachse etwas „anschaulicher“ zu machen. Man erkennt folgendes: Die Feldprofile sind im stabilen Bereich sehr scharf, die Ladungsträgeransammlung ist in einem einzigen Quantentopf lokalisiert. In der Mitte des instabilen Bereichs verschmieren Feld- und Ladungsverteilung etwas.⁴ Der Übergang von einem Ast

zum anderen ist am besten in den Teilabbildungen 4.4(c) und 4.4(d) zu erkennen. Die Ladungsdichte im Übergitter ist bezüglich des Ortes diskret und nicht etwa kontinuierlich, wie dies die Auftragung suggerieren könnte. Die Veränderung der Ladungsdichte in einem Quantentopf beim Übergang von einem Ast zum anderen erhält man, wenn man eine der von vorn nach hinten verlaufenden Linien verfolgt. In den Abbildungen 4.4(c) und 4.4(d) sind die selben Daten dargestellt, nur aus einem unterschiedlichen Blickwinkel. Verfolgt man nun geeignete Linien, so sieht man, wie die Ladungsdichte in einem Quantentopf ab- und im benachbarten Quantentopf zunimmt: Die Ladung hat sich also tatsächlich einen Quantentopf weiter geschoben.

Zwischen zwei stabilen Ästen der Kennlinie liegt genau ein instabiler Ast, was durch eine „normale“ Sattel-Knoten-Bifurkation verursacht wird. Dies bedeutet, daß auf dem instabilen Ast genau ein Eigenwert instabil ist, d. h., es gibt genau eine instabile Mode, auf der das System vom instabilen Ast wegläuft. Die Bewegung dieser Mode wird durch die instabile Mannigfaltigkeit beschrieben. Für die Darstellung in Abbildung 4.5 wurde eine relativ hohe Spannung von $U = 3,8$ V gewählt, da bei höheren Spannungen die Äste flacher werden und damit mehr stabile Zustände bei der gleichen Spannung existieren.

Aus der Abbildung kann nun entnommen werden, daß die instabilen Mannigfaltigkeiten der instabilen Fixpunkte zu den beiden „benachbarten“ stabilen Fixpunkten führen. Das bedeutet insbesondere, daß jeder Startwert, der in der „Umgebung der Kennlinie“ startet, auf einem der stabilen Äste der Kennlinie „landen“ wird. Die Lage der Fixpunkte und die Form der instabilen Mannigfaltigkeiten in Abbildung 4.5(a) mag auf den ersten Blick etwas seltsam erscheinen, ist es aber (natürlich) nicht: Jeder Ast entspricht einer bestimmten Position der Ansammlung von Elektronen im Übergitter. Wählt man für eine Darstellung nur (die Ebene aus) zwei Koordinaten (greift also die Elektronenkonzentrationen in zwei bestimmten Quantentöpfen und Energieniveaus heraus), so wird man „Ausschläge“ nur für diejenigen Äste sehen, bei denen die Ladungsträgeransammlung gerade im betreffenden Quantentopf ist. Alle anderen Äste werden im Diagramm mehr oder weniger an der gleichen Stelle liegen. Will man alle Fixpunkte auf einer Geraden haben, so muß man

⁴Wird in Bogenlängenparametrisierung ein Bifurkationspunkt durchlaufen, so sind trotzdem alle Größen weiterhin stetig. Die Feldverteilung am Bifurkationspunkt hat also kein besonderes Aussehen, genauso wie die stabilen und instabilen in der Nähe eines Bifurkationspunktes gleich aussehen. Man kann einer Feldverteilung also unter Umständen (nämlich wenn diese aus der Mitte des instabilen Bereich stammt) ansehen, daß diese zu einem instabilen Zustand gehört. Man kann sich aber bei einer Feldverteilung nie sicher sein, ob der zugehörige Zustand stabil ist.

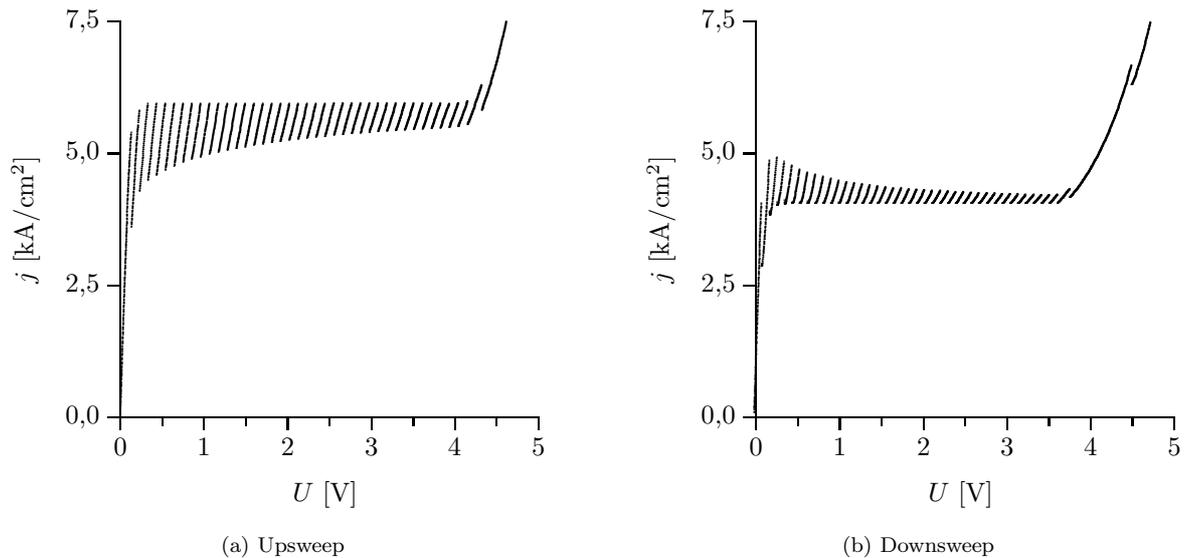


Abbildung 4.6: Upsweep und Downsweep. Bei einer Simulation oder einer experimentellen Messung wird von den verschiedenen multistabilen Zuständen bei gegebener Spannung immer nur einer erhalten. Welcher dies ist, hängt von der „Vorgeschichte“ ab. Im Teilbild (a) ist das Ergebnis für eine monoton steigende, im Teilbild (b) für eine monoton fallende Spannung U dargestellt.

zur Darstellung die Besetzungsdichten in Quantentöpfen wählen, die weit von der Domänen­grenze entfernt liegen. Dieses wurde in Abbildung 4.5(b) getan. Nachteil dieses Verfahrens ist, daß die Werte für die Elektronendichten in diesen Quantentöpfen keine so direkte physikalische Bedeutung wie die in Domänenwandnähe mehr haben.

Die Tatsache, daß die instabilen Mannigfaltigkeiten immer zum „benachbarten“ Ast führen, ist physikalisch beinahe schon trivial: Die einzelnen Äste unterscheiden sich genau durch die Länge der Hochfeld­domäne und damit durch die Position der Ladungsträgeransammlung, die diese hervorruft. Wenn sich das System von einem instabilen Ast zu einem stabilen Ast bewegen würde, der „weit“ entfernt ist, müßte die La-

dungsträgeransammlung über mehrere Quantentöpfe transportiert werden und dabei auch einen Zustand durchlaufen, der zum Nachbarast gehört.

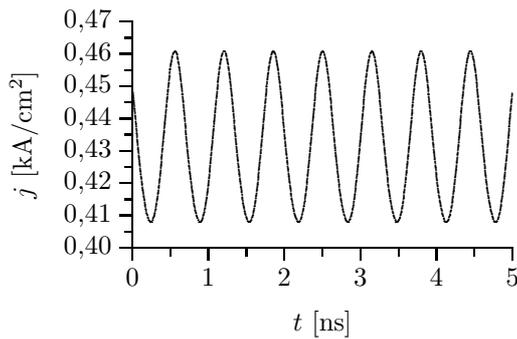
Das Springen auf den Nachbarast, wenn der Ast, auf dem sich das System gerade befindet, zum Beispiel durch eine Veränderung der angelegten Spannung instabil wird, sieht man auch in der simulierten Kennlinie. Wie Abbildung 4.6 zeigt, wird bei einer monotonen Erhöhung („Upsweep“, Teilbild 4.6(a)) bzw. monotonen Verringerung („Downsweep“, Teilbild 4.6(b)) der angelegten Spannung nur ein Teil jedes Astes erreicht. Wie auch unmittelbar einsichtig ist, liegt die Stromdichte beim Upsweep über der beim Downsweep.

4.2 Oszillationen

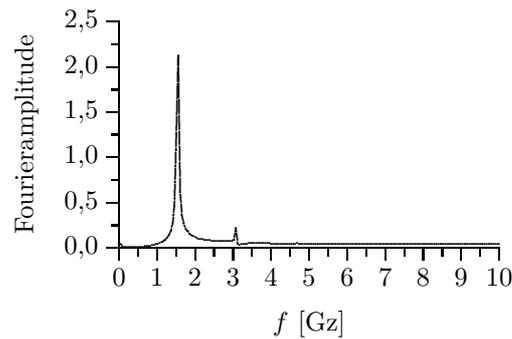
Neben der bereits besprochenen Bildung von Felddomänen kann sich eine weitere selbstorganisierte Struktur ausbilden, nämlich Grenzyklus-Oszillationen. Eine typische Oszillation ist in Abbildung 4.7(a) dargestellt. Es handelt sich um harmonische Schwingungen im Gigahertz-Bereich⁵, wobei das Fourierspektrum in Abbildung 4.7(b) zeigt, daß die Oberwellenanteile nur sehr schwach ausgeprägt sind.

Die Oszillationen entstehen durch das Wandern von Ladungsträgern im Übergitter. Dies kann in der zeitlichen Veränderung der Feldverteilung (Abbildung 4.7(c)), besser aber noch in der der Ladungsträgerdichte in Abbildung 4.7(d) gesehen werden. Am „vorderen“ Ende des Übergitters bildet sich eine kleine Ladungsträgeransammlung, die dann durch das Übergitter wan-

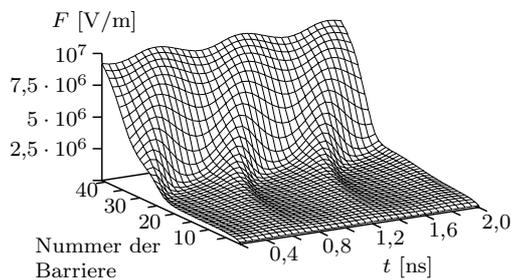
⁵Die schlechte Übereinstimmung der durch Simulation erhaltenen Frequenzen mit den deutlich kleineren Werten, die in Experimenten gemessen werden, muß als einer der größten Kritikpunkte des verwendeten Modells angesehen werden. Im Gegensatz zu anderen Modellen wie zum Beispiel [Bon94] werden hier allerdings keine Systemparameter gezielt so angepaßt, daß die Oszillationsfrequenzen in der gleichen Größenordnung liegen.



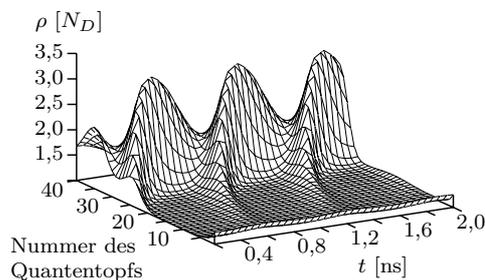
(a) Stromoszillation



(b) Spektraldarstellung



(c) Feldverteilung



(d) Ladungsverteilung

Abbildung 4.7: Typische Stromoszillation. **(b)** Aufgetragen ist der Betrag der komplexen Fourieramplitude.

dert. Von der Position der Ladungsträgeransammlung bis zum „hinteren“ Ende des Übergitters wird dadurch das elektrische Feld größer. Sobald diese Ansammlung zu einer Feldstärke führt, die im NDC-Bereich der $v(F)$ -Kurve liegt, können Elektronen schneller in das Übergitter und damit auch zur Position der Ladungsträgeransammlung fließen, als sie von der Ladungsträgeransammlung nach „hinten“ abfließen können. Als Ergebnis wird die Ladungsträgeransammlung immer größer, während sie sich durch das Übergitter bewegt. Sie löst sich erst dann wieder auf, wenn die Feldstärke oberhalb des NDC-Bereichs liegt.

Bei den ungedämpften Oszillationen handelt es sich um Grenzzyklus-Oszillationen. Abbildung 4.8 zeigt beispielhaft die Projektion eines solchen Grenzzyklus auf eine willkürlich herausgegriffene von zwei Elektronendichten aufgespannte Ebene. Neben dem Grenzzyklus sind auch einige Trajektorien eingezeichnet. Die Trajektorien, die „außerhalb“ des interessanten Gebietes starten, laufen relativ schnell auf den Grenzzyklus zu. Es sind allerdings auch zwei andere Trajektorien eingezeichnet: Für die mit „b“ bezeichnete wurde der instabile Fixpunkt in der

„Mitte“ des Grenzzyklus als Startwert genommen, allerdings wurde der Anfang der Trajektorie nicht eingezeichnet, da sie sich in der Nähe des Fixpunktes nur langsam von ihm entfernt. Diese Trajektorie verläuft also in der Ebene (Zentrumsmanigfaltigkeit), in der (näherungsweise) sowohl der Grenzzyklus als auch der Fixpunkt liegen; dementsprechend „schraubt“ sie sich langsam, aber gleichmäßig, dem Grenzzyklus entgegen. Dagegen liegt der Startwert der Trajektorie „b“ außerhalb der Ebene, aber ungefähr „über“ dem Fixpunkt. Sie wird deshalb schnell in die Ebene gezogen, um sich danach im Vergleich dazu relativ langsam dem Grenzzyklus anzunähern.

Die Grenzzyklen entstehen durch eine superkritische Hopf-Bifurkation. Erste Anzeichen hierfür können bereits durch Simulation gewonnen werden. Abbildung 4.9(a) zeigt die Entwicklung der Schwingungsamplitude in der Nähe der Bifurkation. Die durch Simulation gewonnenen Daten sind durch Kreuze dargestellt, die durchgezogene Linie ist eine Wurzelfunktion, die per „Augenmaß“ an die ersten circa zehn Datenpunkte angepaßt wurde. Die Amplitude steigt in der Nähe des Bifurkationspunktes also in sehr guter

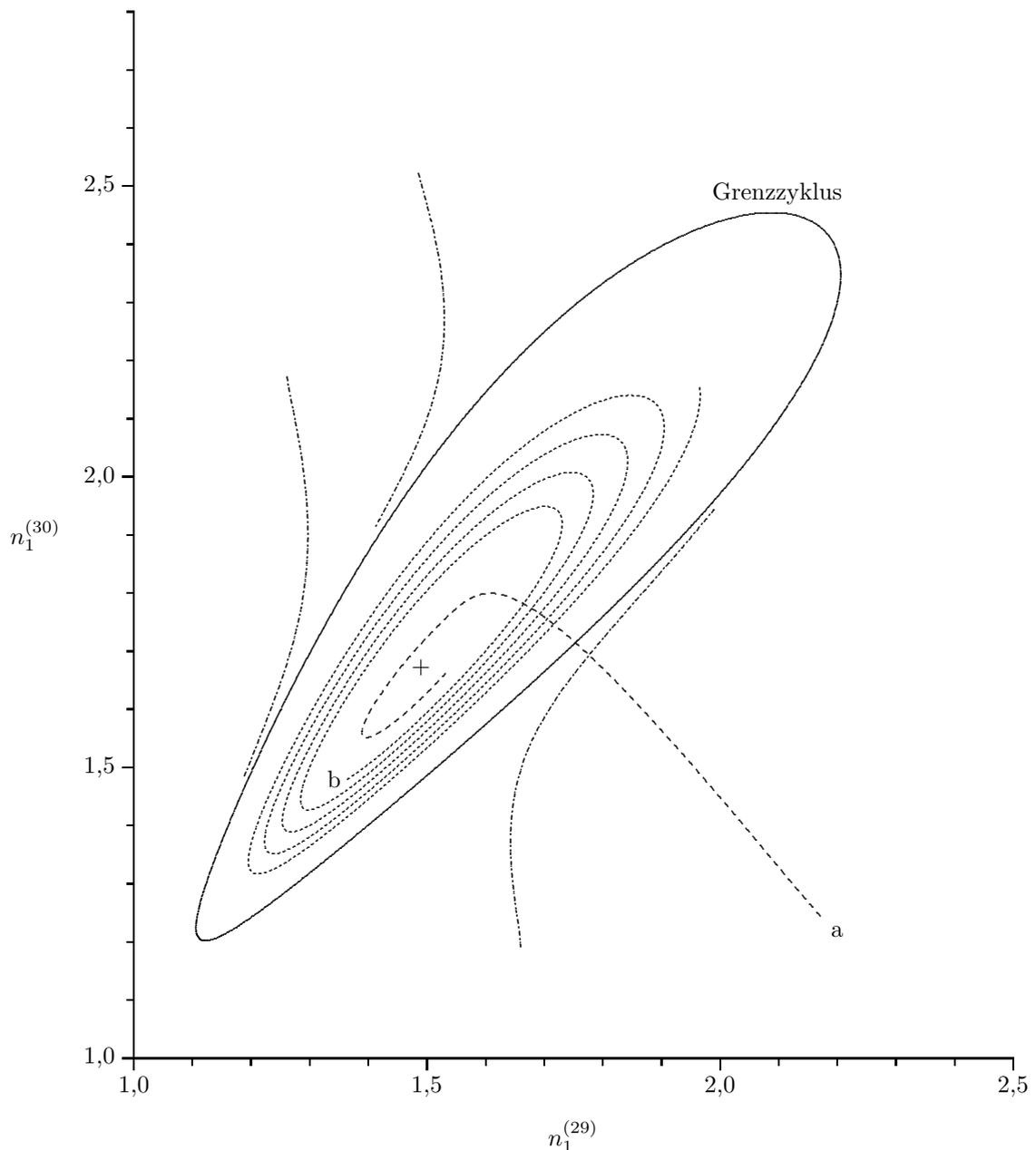


Abbildung 4.8: Grenzzzyklus um instabilen Fixpunkt. Die nicht gesondert bezeichneten Trajektorien starten in der Nähe des Grenzzzyklus und laufen auf diesen zu. Mit „a“ ist eine Trajektorie bezeichnet, die außerhalb der Ebene, in der der Grenzzzyklus liegt, beginnt, während „b“ eine Trajektorie ist, die ursprünglich im instabilen Fixpunkt gestartet wurde.

Näherung wurzelförmig an. In Abbildung 4.9(b) ist (durchgezogene Linie) zu sehen, daß sich die Frequenz bei Veränderung der Spannung nur schwach verändert; insbesondere setzt die Oszillation mit endlicher Frequenz ein.

Das meistens verwendete Verfahren zur Erkennung einer Hopf-Bifurkation geht jedoch von einer Untersuchung der Eigenwerte der dynamischen Matrix aus. Abbildung 4.10 zeigt aus diesem Grund die Abhängigkeit des Realteils des bezüglich des Realteils größten Eigenwertes von den Parametern Spannung U und Dotierung

N_D . Für genügend hohe Dotierungen, bei denen das System bereits Multistabilität zeigt, wurde der Zustand ausgewählt, der durch einen Upsweep erreicht wird. Das Teilbild 4.10(c) zeigt diese Daten für den gesamten untersuchten Parameterbereich, während in den beiden anderen Teilbildern nur die Umgebung des Bereichs mit Oszillationen dargestellt ist.

Man erkennt, daß bei kleinen und mittleren Dotierungen die Eigenwerte tendenziell kleiner sind als bei höheren Dotierungen, weswegen für eine bessere Darstellung alle Eigenwerte, die

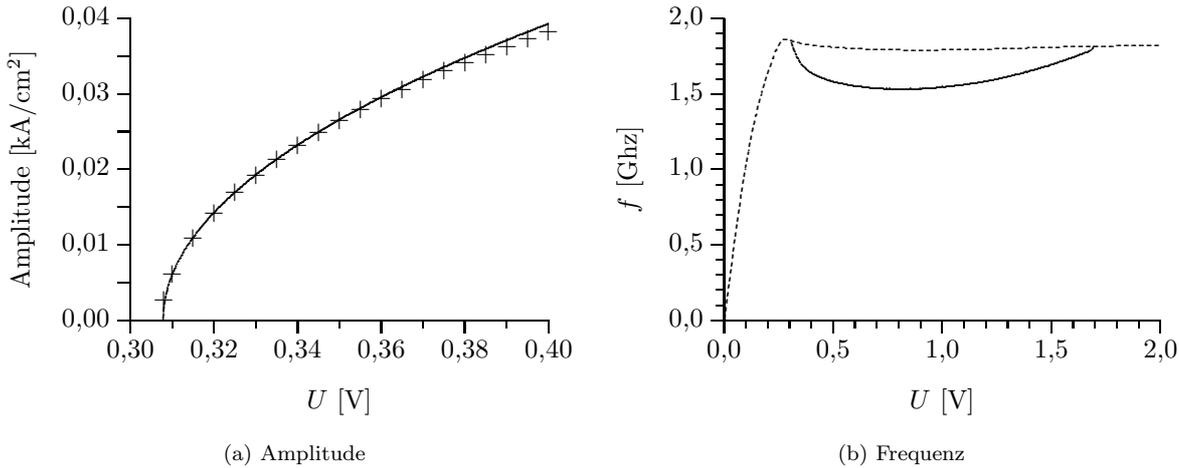


Abbildung 4.9: Entwicklung von Frequenz und Amplitude in der Nähe der Hopf-Bifurkation. **(a)** Die durch Simulation bestimmte Oszillationsamplitude ist durch kleine Kreuze (+) dargestellt. Zusätzlich ist eine Wurzelfunktion eingezeichnet, die an die ersten rund 10 Punkte angepaßt ist. **(b)** Oszillationsfrequenzen sowohl durch Simulation bestimmt (durchgezogene Linie) als auch durch Division des Imaginärteils der Eigenwerte durch 2π (gestrichelte Linie).

kleiner als -1 sind, abgeschnitten wurden. Die „Spitzen“, die bei höheren Dotierungen zu sehen sind, gehören zu Zuständen am Rande von Ästen. Diese werden – wie im vorherigen Abschnitt behandelt – durch eine Sattel-Knoten-Bifurkation instabil, so daß am Rand des Astes der Eigenwert Null werden muß. Die Zustände in der „Mitte“ des Astes sind „so stabil“, daß der betreffende Eigenwert bereits abgeschnitten wurde. Das Gitter, über dem die Daten aufgetragen sind, ist allerdings bei weitem nicht fein genug, um die einzelnen Äste auflösen zu können. Als Ergebnis erhält man an „zufälligen“ Positionen Spitzen, die als Sampling-Effekt eingestuft werden müssen.

In den beiden Teilbildern 4.10(a) und 4.10(b) ist ein Ausschnitt der Parameterebene dargestellt, der den oszillationsfähigen Bereich enthält. Im Teilbild 4.10(b) sind Konturlinien eingezeichnet; die äußerste entspricht dem Eigenwert 0. Die prinzipiell gleichen Daten sind auch im Teilbild 4.10(a) dargestellt, allerdings sind alle Eigenwerte kleiner als Null, die also zu stabilen Zuständen gehören, unterdrückt. Nimmt man beide Teilbilder zusammen, so kann gesagt werden, daß sich der Realteil der Eigenwerte als Funktion der Parameter sehr gleichmäßig ändert, und dort, wo er größer als Null wird, zu Oszillationen führt. Insbesondere Abbildung 4.10(a) gibt zu folgendem Vergleich Anlaß: Das schon irgendwie schwingungsveranlagte System ist wie ein Eisberg. Der größte Teil liegt unter Wasser und nur der kleine Teil, der über Wasser liegt, kann deutlich (durch Oszillationen) wahrgenommen werden. Dieses Analogon

zeigt insbesondere, daß sich bei Veränderungen am System (Fluktuationen usw.) der schwingungsfähige Bereich nicht sprunghaft, sondern gleichmäßig verändern wird.

In Abbildung 4.11 ist der dazugehörige Wert für den Imaginärteil abgebildet. Dieser verändert sich nur sehr leicht mit den Parametern, wie es für eine Hopf-Bifurkationen auch zu erwarten ist. In Abbildung 4.9(b) ist für einen Wert der Dotierung sowohl die durch Simulation bestimmte Oszillationsfrequenz als auch die Frequenz dargestellt, die sich ergibt, wenn man den Imaginärteil des Eigenwertes durch 2π dividiert, um von Winkelfrequenz in Oszillationsfrequenz umzurechnen.

Daß es sich um eine superkritische Hopf-Bifurkation handelt, kann auf drei Arten begründet werden: Die Auftragung der Oszillationsamplitude als Funktion des Abstands vom Bifurkationspunkt steigt wurzelförmig an (Abbildung 4.9(a)). Ferner gibt keine Hysterese beim Übergang zwischen stationärem und oszillatorischem Verhalten. Direktestes Verfahren ist die Berechnung höherer Koeffizienten in der Taylor-Entwicklung der dynamischen Gleichung am Bifurkationspunkt [Khi92], was ebenfalls durchgeführt wurde. Beim Eintritt in das oszillationsfähige Gebiet erfolgt immer eine superkritische Hopf-Bifurkation, unabhängig davon, an welcher Stelle oder durch Veränderung welchen Parameters dies geschieht. Darauf wird gleich noch einmal zurückzukommen sein.

Unterteilt man die Dynamik des Systems nur in „oszillierend“ und „nichtoszillierend“, so ist dies

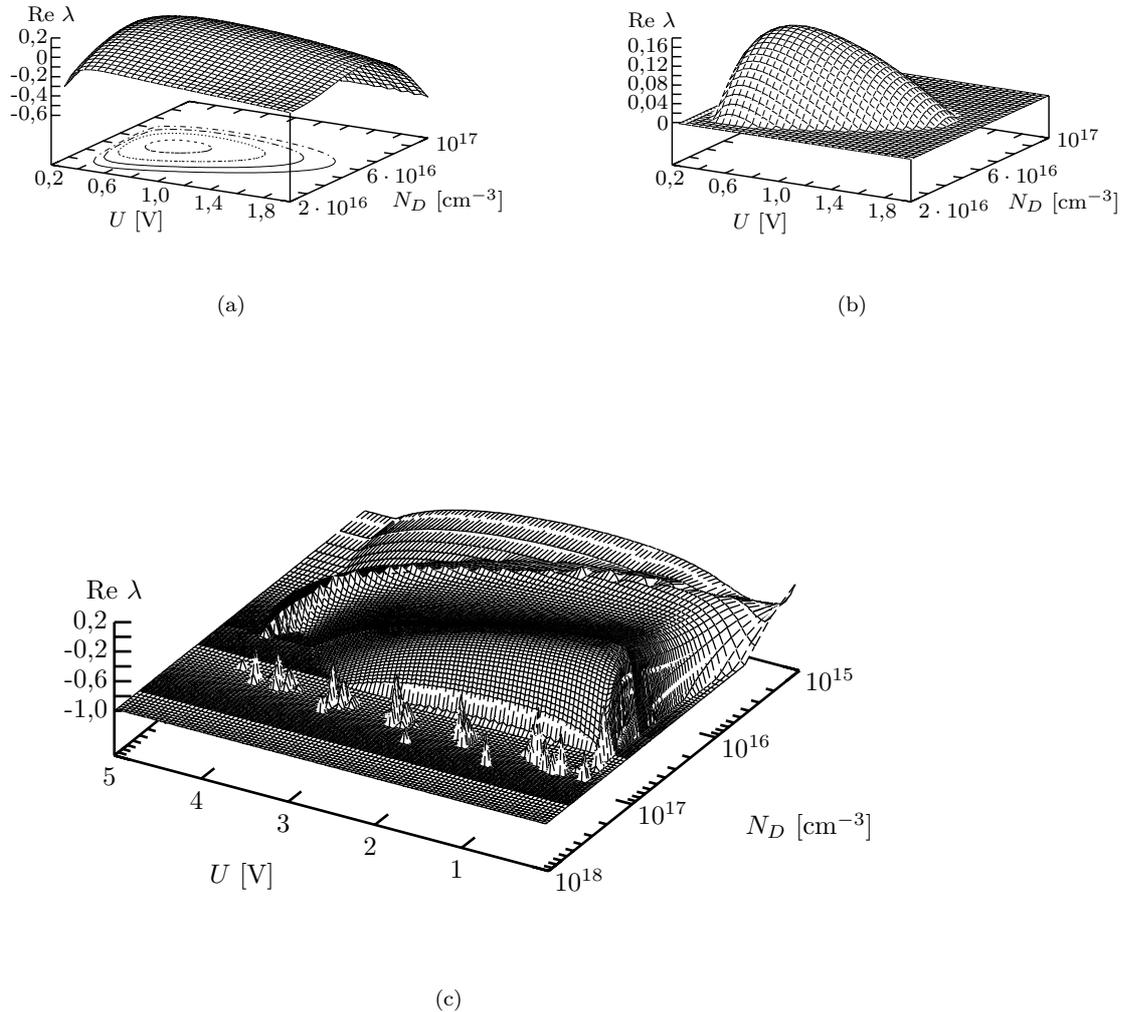


Abbildung 4.10: Realteil des größten Eigenwertes in Abhängigkeit von Spannung U und Dotierung N_D . **(a)** Ausschnitt der Umgebung des Bereichs, in dem Oszillationen auftreten. Die äußerste Konturlinie steht für den Wert 0, die innerste für den Wert 0,25. **(b)** Wie in (a), nur wurden Eigenwerte kleiner 0 abgeschnitten. **(c)** Darstellung des gesamten untersuchten Parameterbereichs. Bei Multistabilität wurden die Daten des beim Upsweep erreichten Zustands genommen. Eigenwerte kleiner als -1 wurden abgeschnitten.

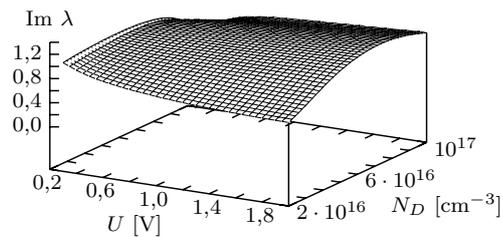


Abbildung 4.11: Imaginärteil des größten Eigenwertes in Abhängigkeit von Dotierung und Spannung. Es ist der gleiche Ausschnitt wie in Abbildung 4.10(a) und 4.10(b) dargestellt.

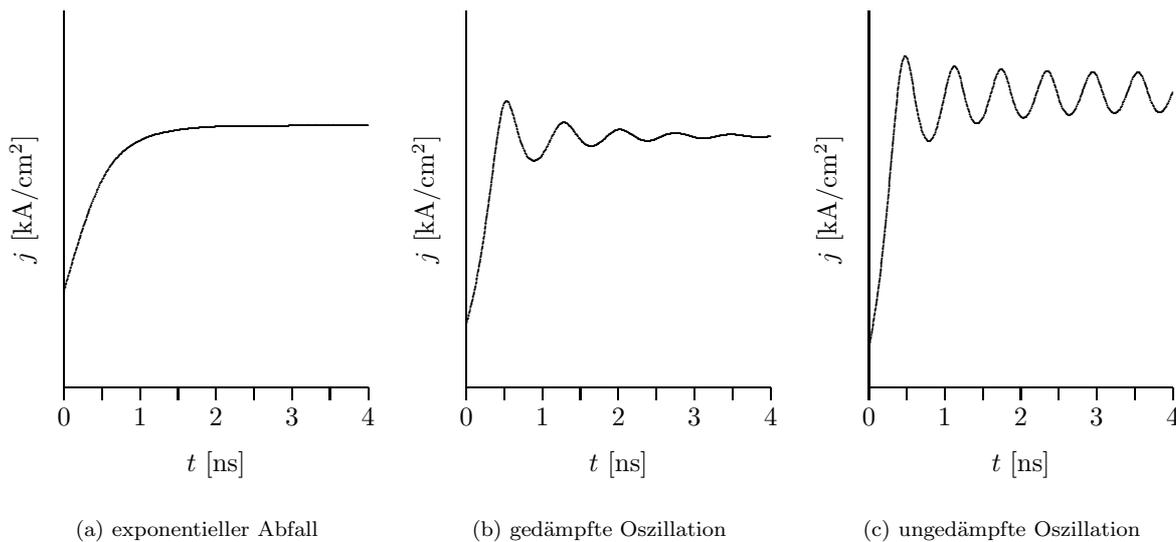


Abbildung 4.12: Dynamik in der Nähe eines Fixpunktes. Es gibt drei prinzipiell verschiedene Verhaltensweisen, wenn der Startwert nicht zu weit vom Attraktor entfernt liegt. Die drei Teilbilder wurden bei verschiedenen Dotierungen berechnet, weswegen die Stromdichten so skaliert werden mußten, daß sich vergleichbare Graphen ergeben. **(a)** Die Entfernung zum Fixpunkt fällt exponentiell ab. **(b)** Der Fixpunkt wird mit gedämpften Oszillationen angelaufen. **(c)** Das System endet nicht auf einem Fixpunkt, sondern auf einem Grenzzyklus.

eine zu grobe Unterscheidung. Vielmehr ist es sinnvoll, den „nichtoszillierenden“ Fall dahingehend zu unterscheiden, wie der stationäre Zustand erreicht wird: Zum einen kann der stationäre Zustand durch eine gedämpfte Oszillation erreicht werden (Abbildung 4.12(b)), zum anderen kann sich das System direkt exponentiell dem Fixpunkt annähern (Abbildung 4.12(a)), ohne überzuschwingen.⁶ Der oszillierende Fall ist in Abbildung 4.12(c) dargestellt.

Diese drei Fälle sind durch bestimmte Konfigurationen der Eigenwerte charakterisiert.⁷ Diese und die Übergänge zwischen ihnen sind in Abbildung 4.13 als Prinzipskizze zu sehen. Oszillationen sind durch ein Paar konjugiert komplexer Eigenwerte mit positivem Realteil gekennzeichnet (rechter Teil der Abbildung), gedämpfte Oszillationen durch ein Paar konjugiert komplexer Eigenwerte mit negativem Realteil (Mitte). Die Trennung zwischen beiden ist genau die Hopf-Bifurkation, in der der Realteil sein Vorzeichen wechselt. Im linken Teil der Abbildung ist die Situation bei einer direkten exponentiellen Annäherung an den Fixpunkt dargestellt: Es gibt

statt eines Paares konjugiert komplexer Eigenwerte zwei rein reelle Eigenwerte. Der Übergang zwischen diesem Verhalten und dem Auftreten gedämpfter Schwingungen findet an dem Punkt statt, an dem die beiden Eigenwerte gleich sind.

Die Unterscheidung zwischen den Fällen aus Abbildung 4.12(a) und 4.12(b) hat zwar keine Auswirkung auf die Kennlinie, ist für das Verständnis des Systems trotzdem wesentlich: Im Bereich einer ausgebildeten Aststruktur muß der größte Eigenwert rein reell sein, da ansonsten keine Sattel-Knoten-Bifurkation in der Kennlinie beobachtet werden müssen. Auch zeigen die instabilen Mannigfaltigkeiten (Abbildung 4.5) keinerlei Tendenz zu einer „Drehbewegung“ bei der Annäherung an die stabilen Fixpunkte⁸. Die Oszillationen andererseits sind mit einem paar konjugiert komplexer Eigenwerte verbunden.

Auf diese Weise kann das Verhalten des Systems in zwei Bereiche eingeteilt werden: einen „astdominierten“ (exponentieller Abfall) und einen „oszillationsdominierten“ (gedämpfte oder ungedämpfte Oszillationen). Das System ist „ast-

⁶Diese Unterteilung ergibt sich zum Beispiel auch beim gedämpften Oszillator. Der Fall gedämpfter Oszillation bzw. des exponentiellen Abfalls werden dort als „Schwingfall“ bzw. „Kriechfall“ bezeichnet, die Grenze bildet der „aperiodische Grenzfall“.

⁷Es wird hierbei davon ausgegangen, daß die Oszillationen durch eine superkritische Hopf-Bifurkationen entstehen und keine zusätzlichen Bifurkationen auftreten.

⁸Abbildung 4.17 zeigt den Fall, wo der „obere“ der beiden stabilen Fixpunkte diese „Drehbewegung“ zeigt. Man beachte insbesondere die Krümmung innerhalb des Dreiecks – es handelt sich hierbei um keine numerischen Artefakte. Allerdings befindet sich in der Nähe eine Sattel-Knoten-Bifurkation, so daß der Imaginärteil bereits relativ klein und die Drehbewegung damit nicht allzu stark ausgeprägt ist.

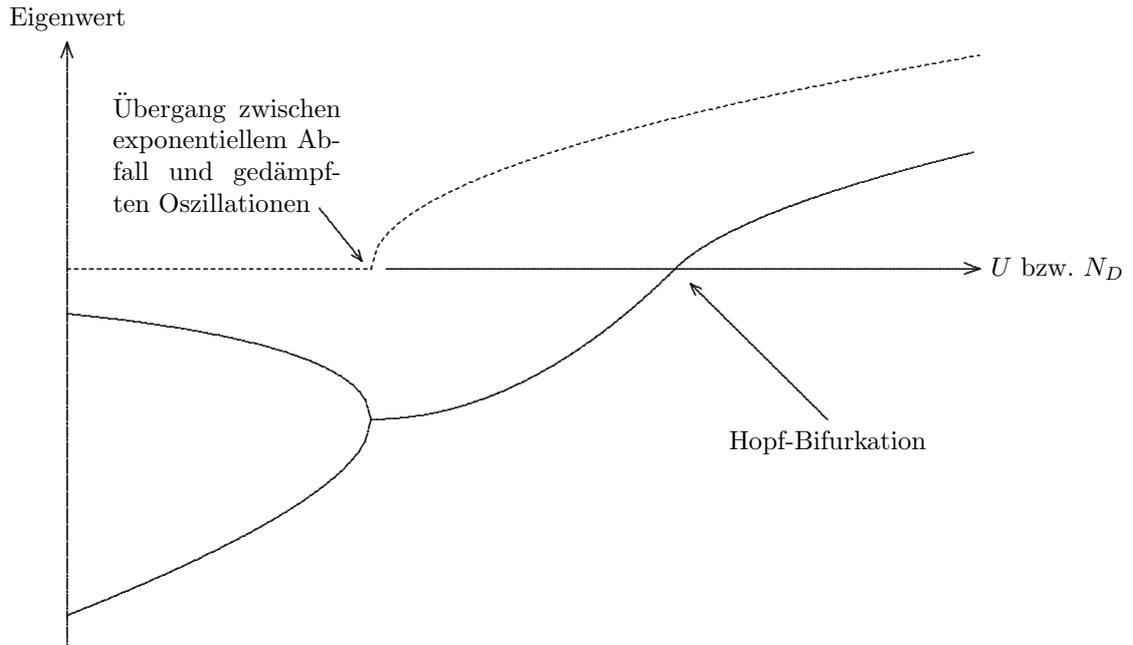


Abbildung 4.13: Prinzipieller Verlauf der Eigenwerte in der Nähe oszillatorischen Verhaltens. Der Realteil ist durchgezogen eingezeichnet, der Imaginärteil gestrichelt. Im linken Bereich liegen zwei getrennte, rein reelle Eigenwerte vor; der Fixpunkt wird direkt angelaufen. Im mittleren Bereich haben sich die beiden reellen Eigenwerte zu einem Paar konjugiert komplexer Eigenwerte vereinigt (es ist nur der positive Imaginärteil eingezeichnet), die Dynamik ergibt gedämpfte Oszillationen. Im rechten Bereich sind in einer superkritischen Hopf-Bifurkation die Realteile positiv geworden; es können ungedämpfte Oszillationen beobachtet werden.

dominiert“, falls der größte Eigenwert rein reell ist, auch wenn die Dotierung noch etwas zu klein ist, um die Ausbildung von Ästen zu erlauben. Analog ist das System „oszillationsdominiert“, wenn ein paar konjugiert komplexer Eigenwerte vorliegt. Die Trennung zwischen den beiden Regimen kann bestimmt werden, indem alle Punkte bestimmt werden, an denen die beiden größten Eigenwerte gleich sind.

Dies führt unmittelbar zu einer wichtigen Folgerung: Solange keine komplexeren Bifurkationen auftreten, sind der Bereich der Astbildung und der der Oszillationen getrennt. Diese Trennung könnte nur durch das gleichzeitige Auftreten einer Sattel-Knoten-Bifurkation und einer Hopf-Bifurkation, also eines Takens-Bogdanov-Punktes, aufgehoben werden. Für das ungestörte Übergitter liegt der generische Fall vor. Die Orte der Hopf-Bifurkationen (gleichmäßig gerasterte Linie) sowie der Punkte, an denen die

beiden größten Eigenwerte gleich sind (abwechselnd mit Strichen und Punkten gerasterte Linie), sind in Abbildung 4.14 eingezeichnet.

Wie bereits festgestellt, sind alle auftretenden Hopf-Bifurkationen vom superkritischen Typ. Damit treten genau im Innern des von Hopf-Bifurkationen umrandeten Gebietes Oszillationen auf. Um dieses Gebiet liegt das Gebiet mit gedämpften Oszillationen. Bei kleinen Dotierungen ist es wegen auftretender numerischer Probleme nicht mehr sinnvoll, letztere Kurve noch weiter fortzusetzen.⁹

Zum Abschluß sei noch auf die Abbildung 4.15 verwiesen. In ihr sind Frequenz und Amplitude als Funktion von Spannung und Dotierung dargestellt. Dort sieht man, daß Spannung und Dotierung in diesem Zusammenhang weitgehend gleichberechtigt sind, und daß die bisher gezeigten Schnitte für feste Dotierung repräsentativ für das Gesamtverhalten sind.

⁹Eine zufällig gewählte reelle Matrix mit geradzahlig vielen Elementen wird im allgemeinen keine rein reellen Eigenwerte haben. Numerische Fehler, die in diesem Zusammenhang als Zufallsgröße angesehen werden können, haben also die Tendenz, aus zwei rein reellen Eigenwerten ein Paar konjugiert komplexer Eigenwerte mit einem relativ kleinen Imaginärteil zu machen. Solche Paare von konjugiert komplexen Eigenwerten beobachtet man allerdings bei kleinen Dotierungen. In diesem Bereich müßte man also auf relativ zeitaufwendige Simulationen zurückgreifen, bei denen sich zusätzlich das Problem stellt, daß die Dynamik nicht nur in der unmittelbaren Umgebung des Fixpunkts berücksichtigt wird und es kein „hartes“ Kriterium für die Unterscheidung gibt. Da die Dynamik bei solch kleinen Dotierungen nur selten relevant ist, wurde auf diese Berechnungen verzichtet.

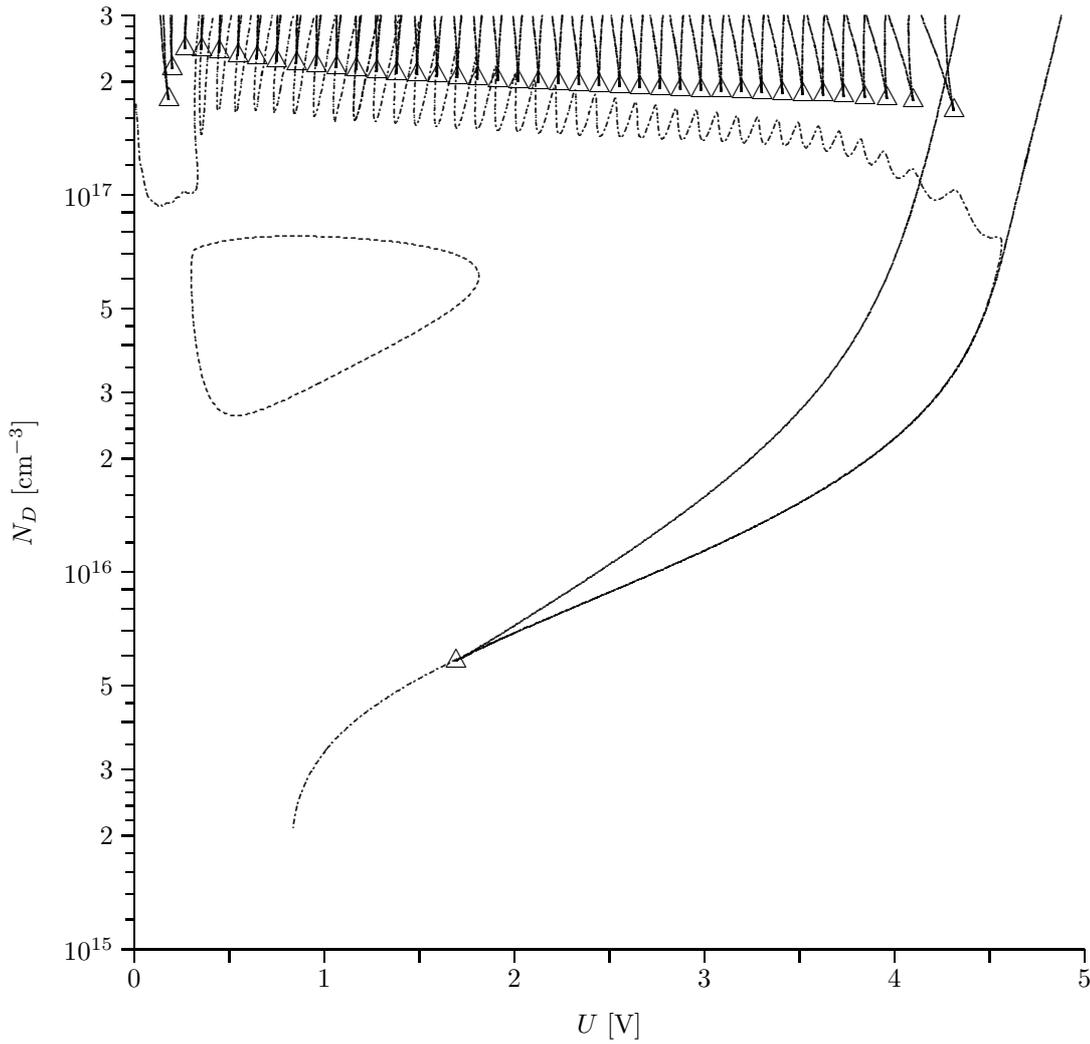
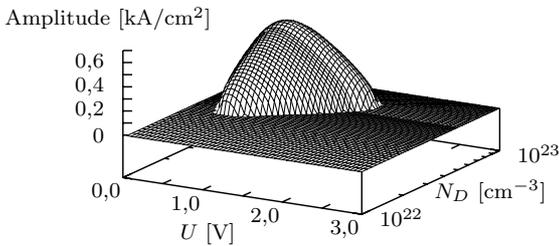
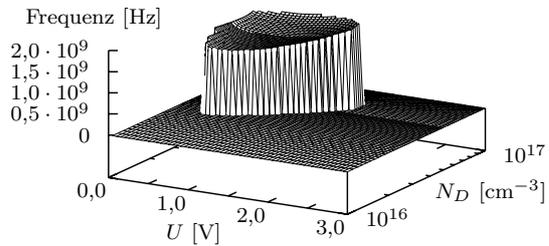


Abbildung 4.14: Lage der oszillationsfähigen Bereiche im Parameterraum. Der Übergang zwischen gedämpften Oszillationen und exponentiellem Abfall zum Fixpunkt ist durch die abwechselnd gestrichelte und gepunktete Linie markiert. Neben der Lage der Hopf-Bifurkation ist auch die der zu den Ästen gehörenden Sattel-Knoten-Bifurkationen eingezeichnet. Beim Auftreten von Ästen ist zu beachten, daß dort für den gleichen Parameterwert mehrere Fixpunkte existieren und aus der Abbildung nicht direkt erkennbar ist, an welchem dieser Fixpunkte der eben beschriebene Übergang auftritt.



(a) Amplitude



(b) Frequenz

Abbildung 4.15: Abhängigkeit der Schwingungsamplitude und Schwingungsfrequenz von Dotierung und Spannung.

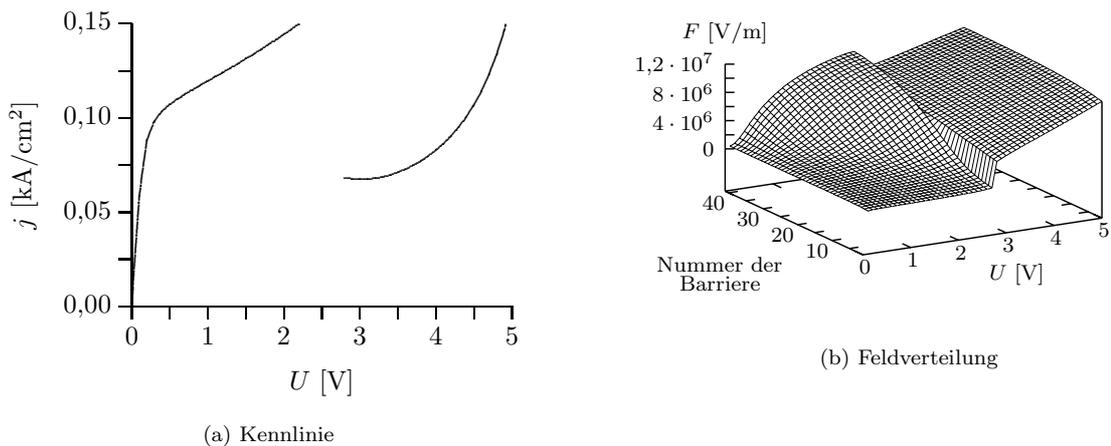


Abbildung 4.16: Simulierte Kennlinie und dazugehörige Feldverteilung einer Kennlinie, bei der sich genau ein Ast herausgebildet hat. Der sich ergebende Sprung wird durch den Übergang von einer verwaschenden Domänenstruktur zu einer homogenen Feldverteilung hervorgerufen.

4.3 Kennlinien bei verschiedenen Dotierungen

Jetzt kann auf die Kennlinien aus den Abbildungen 4.1 und 4.2 (Seiten 26 bzw. 27) zurückgekommen werden. Bei kleinen Dotierungen (Abbildung 4.1(a)) ist die Form der Kennlinie durch die der $v(F)$ -Kurve gegeben; es sind nicht genügend Ladungsträger für die Ausbildung räumlicher Strukturen vorhanden, so daß die Feldverteilung praktisch homogen ist (siehe auch nächster Abschnitt).

Bereits bei einer Dotierung von $N_D \approx 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ hat sich jedoch schon ein Ast herausgebildet. Der hinter diesem Ast stehende Mechanismus ist jedoch ein anderer als der für die N Äste bei hinreichend hoher Dotierung¹⁰ verantwortliche. Abbildung 4.16(a) zeigt noch einmal die entsprechende Kennlinie, allerdings wurde aus Gründen der Übersichtlichkeit nur der Upsweep eingezeichnet. In Abbildung 4.16(b) ist die dazugehörige Veränderung der Feldverteilung aufgetragen. Man erkennt, daß der Sprung vom oberen auf den unteren Ast mit einer qualitativen Veränderung der Feldverteilung verbunden ist: Bis zu einer gewissen Spannung gibt es eine allerdings sehr stark verwaschene Domänenstruktur, während nach dem Sprung die Feldverteilung in etwa homogen ist. Bei höheren Dotierungen gibt es auch eine unmittelbar einsichtige physikalische Begründung für diesen Sprung: Sobald die Hochfelddomäne das gesamte Übergitter erfaßt hat, führt ei-

ne weitere Erhöhung der angelegten Spannung zu einer Erhöhung der Feldstärke im gesamten Übergitter. Damit wird die Resonanzfeldstärke überschritten, was zu einem Absinken der Stromdichte führen muß.

Dieser Ast unterscheidet sich noch in einer anderen Hinsicht von den bisher behandelten. Wie Abbildung 4.17 zeigt, ist die Dynamik in der Nähe des „oberen“ Fixpunktes von gedämpften Oszillationen bestimmt (siehe vorheriger Abschnitt). Die instabile Mannigfaltigkeit, die in der Nähe des instabilen Fixpunktes die Entweichrichtung und in der Nähe des Zielzustands in etwa die Richtung der langsamsten Annäherung anzeigt,¹¹ läuft nicht direkt auf den Fixpunkt zu, sondern in Form einer Spirale. Das kann besonders gut innerhalb des kleinen Dreiecks gesehen werden.

Abbildung 4.1(c) zeigt eine Kennlinie, bei der die bereits beschriebenen Oszillationen auftreten. In der Abbildung ist die während der Oszillation erreichte minimale und maximale Stromdichte markiert. Bei einer weiteren Erhöhung der Dotierung verschwinden die Oszillationen wieder (Abbildung 4.1(d)).

Wird die Dotierung weiter erhöht, so beginnen sich Äste auszubilden. Abbildung 4.1(e) zeigt eine Kennlinie, bei der sich für höhere Spannungen bereits Äste gebildet haben, für kleinere Spannungen jedoch noch ein „Wellenmuster“

¹⁰Dieser „besondere“ Ast ist auch bei höheren Dotierungen noch vorhanden. Es handelt sich um den besonders weit nach unten gehenden Ast ganz rechts in der Kennlinie.

¹¹Für die Dynamik ist nicht die Richtung der schnellsten, sondern der langsamsten Annäherung relevant. Die schnellen Freiheitsgrade passen sich adiabatisch an die Lage der langsameren an, so daß nur letztere die beobachtbare Dynamik bestimmen.

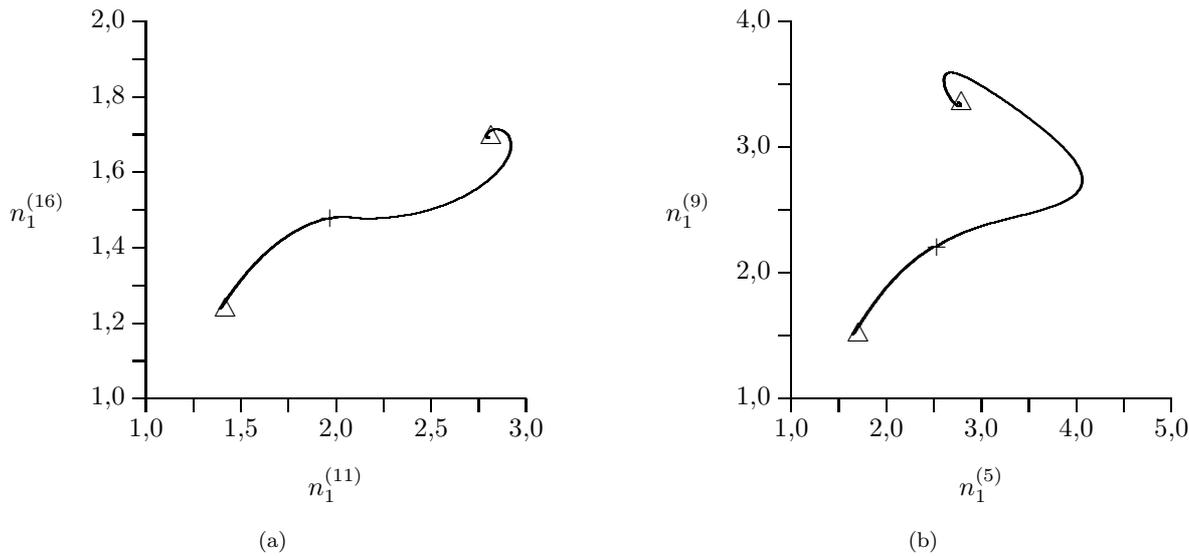


Abbildung 4.17: Dynamik (Phasenportrait der instabile Mannigfaltigkeiten) in der Nähe des im Text beschriebenen Astes. Der Schnitt erfolgte bei einer Spannung von $U = 3,8$ V.

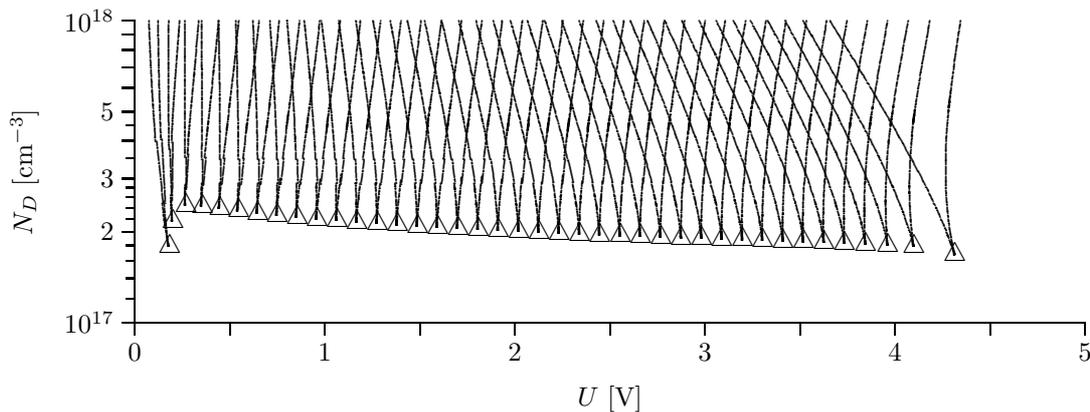


Abbildung 4.18: Lage der Sattel-Knoten-Bifurkationen, die zu den Ästen der Kennlinie bei hohen Dotierungen gehören, im Parameterraum. Die Sattel-Knoten-Bifurkationen sind als durchgezogene Linien dargestellt. Jeweils zwei Äste von ihnen laufen in einem Cusp-Punkt zusammen.

ohne Äste vorliegt. Zusätzlich haben sich ganz links bereits die ersten beiden Äste gebildet.

Schon diese Form der Astbildung läßt im Vergleich mit dem Abschnitt 2.6 vermuten, daß sich die Äste jeweils in einem Cusp-Punkt bilden. Dies kann durch Auftragen der Parameterpaare (Spannung U und Dotierung N_D), an denen

eine Sattel-Knoten-Bifurkation liegt, unmittelbar bestätigt werden. Das Ergebnis ist in Abbildung 4.18 dargestellt. Man sieht, daß sich die einzelnen Äste nicht alle bei der gleichen Dotierung bilden. Vielmehr liegen die Cusp-Punkte – abgesehen von den beiden durch Randeffekten beeinflussten Ästen bei kleinen Spannungen – auf einer Geraden in der U - N_D -Ebene.

4.4 Dotierungsabhängigkeit

In den beiden vorherigen Abschnitten wurden exemplarisch für bestimmte Werte der Dotierung N_D Kennlinien berechnet, d. h., bei festgehaltenem Parameter N_D wurde die Spannung U variiert. Selbstverständlich ist auch der umgekehrte Weg denkbar. Abbildung 4.19 zeigt die

„Kennlinie“ für festes $U = 1$ V. In erster Näherung skaliert die Stromdichte j linear mit der Dotierung N_D , so daß eine direkte Auftragung von j nicht sinnvoll ist. Nur wenn statt dessen j/N_D betrachtet wird, sind sinnvolle Aussagen über die Struktur der „Kennlinie“ möglich.

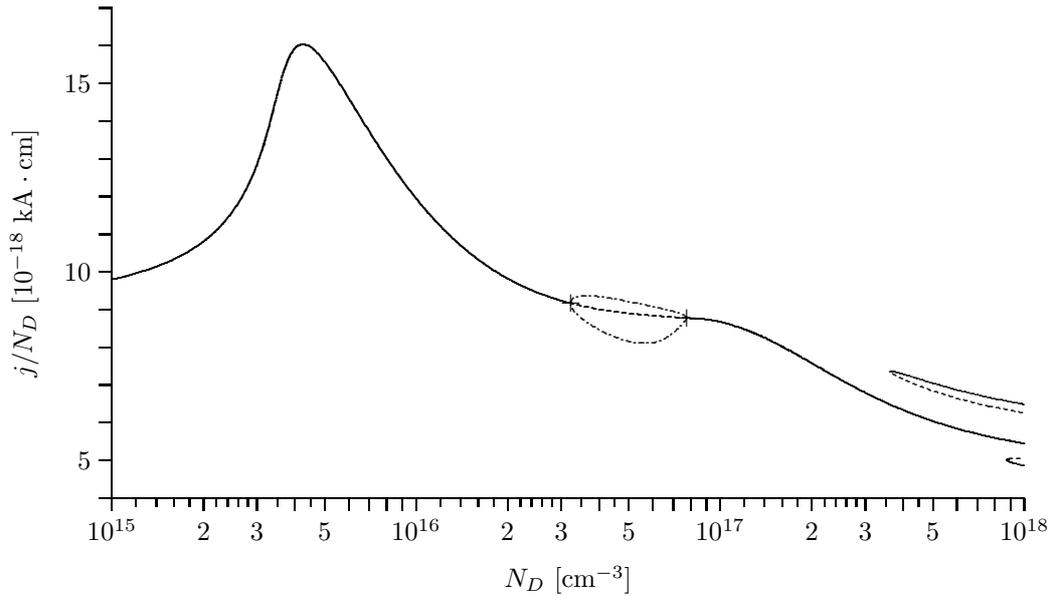


Abbildung 4.19: Dotierungsabhängigkeit der Stromdichte. Da j in erster Näherung proportional zu N_D ist, wurde j/N_D aufgetragen. Bei höherer Dotierung gibt es wegen der bereits besprochenen Ausbildung von Ästen mehrere Zustände, deren Grundlagen im Abschnitt 2.6 behandelt worden sind.

In Abbildung 4.19 sieht man bei hohen Dotierungen getrennte Äste. Bei diesen handelt es sich um die „Seitenansicht“ der aus der normalen Kennlinie bekannten Äste. Wie bereits festgehalten, entstehen die Äste in einem Cusp-Punkt, wie er bereits im Abschnitt 2.6 behandelt wurde. Abbildung 2.6 auf Seite 8 zeigte verschiedene Schnitte in der Umgebung eines Cusp-Punktes. Teilbild 2.6(c) zeigt (prinzipiell) den Schnitt, der in der normalen Kennlinie bei hinreichend hohen Dotierungen gesehen wird, während bei Dotierungsveränderung und fester Spannung die Situation der in den Teilbildern 2.6(d) bzw. 2.6(f) entspricht.

Weiterhin ist festzuhalten, daß bei kleinen Dotierungen die skalierte Stromdichte deutlich größer ist als bei großen Dotierungen. Dies ist darauf zurückzuführen, daß bei kleinen Dotierungen Ladungsträgeransammlungen – bezogen auf die Dotierungsdichte N_D – deutlich größer sind. Bei hohen Dotierungen ist keine Ladungsträgeransammlung möglich, die mehr als ca. 50% über der Dotierungsdichte liegt, da sie bereits ausreicht, um einen Feldstärkesprung von Null auf die Resonanzfeldstärke auszulösen. Vergleicht man zum Beispiel die Teilbilder in Abbildung 4.1, so sieht man, daß die Kennlinie für die kleinste Dotierung (Abbildung 4.1(a)) die relativ größten Abweichungen zwischen „Berg“ und „Tal“ hat. Dies wird auch durch Abbildung 4.20 bestätigt, in der

die normierte Stromdichte j/N_D als Funktion von Spannung und Dotierung aufgetragen ist. Bei kleinen Dotierungen bewegt sich ein „Berg“ von links nach rechts, während die durch die Äste der „richtigen“ Kennlinie hervorgerufenen Stromsprünge im Vergleich dazu kaum erkennbar sind.

Abschließend soll noch die Abhängigkeit der Feldverteilung von der Dotierung diskutiert werden. Diese ist in Abbildung 4.21 dargestellt. Das Problem der Multistabilität bei höheren Dotierungen wurde hier so gelöst, daß die Daten der durchgehenden Kurve in Abbildung 4.19 genommen werden; auch ist so gewährleistet, daß sich alle Feldstärken stetig mit dem Parameter N_D ändern.

Man kann in der Abbildung sehr gut erkennen, wie mit steigender Dotierung das Feldprofil immer steiler wird, d. h., wie die Trennung des Übergitters in eine Hochfeld- und eine Niederfelddomäne immer ausgeprägter wird. Bei kleinen Dotierungen ist diese Trennung praktisch verschwunden. Dies macht sich daran bemerkbar, daß die Feldstärke in der „Niederfelddomäne“ dort ansteigt. Die Spannung, bei der die Abbildung berechnet wurde, betrug 1 V, die Resonanzfeldstärke wird im homogenen Fall bei etwa 4 V erreicht. Bei sehr kleinen Dotierungen muß die Feldverteilung also ungefähr homogen mit einer Feldstärke von einem Viertel der Resonanzfeldstärke sein.

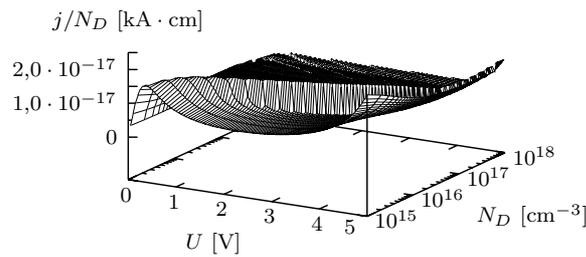


Abbildung 4.20: Normierte Stromdichte j/N_D in Abhängigkeit von Spannung U und Dotierung N_D . Bei Multistabilität wurde der Zustand dargestellt, der durch einen Upsweep erreicht wird.

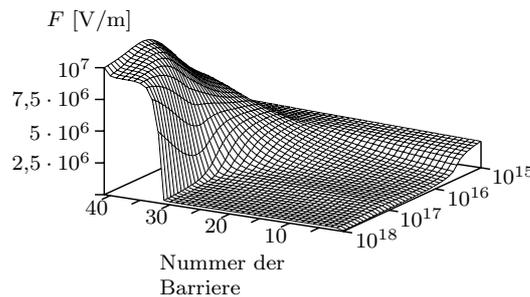


Abbildung 4.21: Feldverteilung in Abhängigkeit von der Dotierung. Es sind die Zustände entlang der durchgehenden Kurve aus Abbildung 4.19 aufgetragen.

4.5 Lage der Bifurkationspunkte

In den ersten Abschnitten dieses Kapitels wurden exemplarisch einige Werte für die Dotierungen N_D herausgegriffen und für diese die Spannung U variiert („Kennlinie“). Im vorherigen Abschnitt wurde ähnliches durchgeführt, wobei allerdings die Rolle von U und N_D vertauscht war. Ist man nicht an den exakten Werten für die Stromdichte oder anderer Größen interessiert, so ist es hinreichend, die Parameterwerte (Spannung *und* Dotierung) aufzutragen, an denen gewisse „Ereignisse“, in unserem Fall also Bifurkationen, geschehen. In dieser Arbeit wird diese Darstellungsweise meist nur kurz als *Phasendiagramm* bezeichnet, auch wenn diese Bezeichnung streng genommen nicht zutrifft, da die verschiedenen Phasen selber nicht bezeichnet sind, sondern nur die Übergänge zwischen diesen.

Diese Auftragung wurde für die verschiedenen Teilaspekte wie Ausbildung von Ästen oder Oszillationen bereits in den entsprechenden Abschnitten dieses Kapitels durchgeführt, so daß an dieser Stelle nur noch zusammengefaßt werden muß, um das „globale“ Verhalten eines ungestörten Übergitters zu erklären. Das vollständige „Phasendiagramm“ ist in Abbildung 4.22 zu sehen.

Zuerst soll – da schneller abzuhandeln – auf die Hopf-Bifurkationen eingegangen werden. Da alle Hopf-Bifurkationen vom superkritischen Typ sind, gibt es im Innern des vom Hopf-Bifurkationspunkten eingeschlossenen Bereichs einen instabilen Fixpunkt und einen stabilen Grenzzyklus. In der Simulation werden also genau im Innern dieses Bereich selbsterregte Oszillationen beobachtet. Weitere Bifurkation, die dieses Verhalten auch ändern könnten, gibt es im Innern der „Hopf-Kurve“ nicht.

Im oberen Teil des Phasendiagramms sieht man die zu den Ästen gehörenden Sattel-Knoten-Bifurkationspunkte. Die Phasendiagramme sind im Bereich ausgebildeter Äste sehr aufschlußreich, da man mit ihrer Hilfe bereits bestimmen kann, wie eine Kennlinie bei einer bestimmten Dotierung aussehen wird. Dies soll kurz beschrieben werden:

Bei $U = 0$ V gibt es unabhängig von der Dotierung nur einen einzigen stabilen Zustand. Man startet also in der entsprechenden Höhe in Abbildung 4.22 am linken Rand. Man geht jetzt in Gedanken nach rechts, bis man auf eine Sattel-Knoten-Bifurkation trifft, die von den beiden von einem Cusp-Punkt ausgehenden Sattel-Knoten-Bifurkationslinien die *rech-*

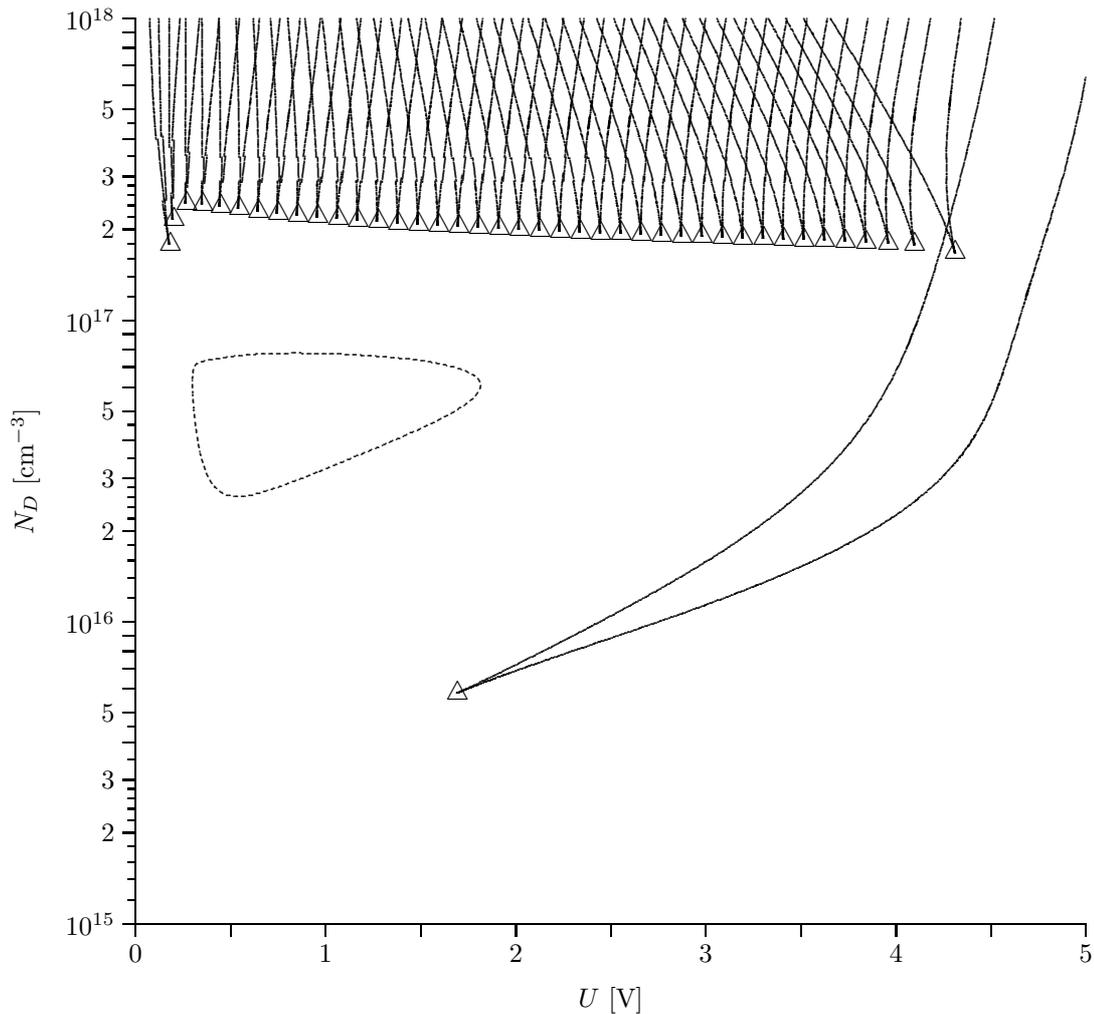


Abbildung 4.22: Lage der Bifurkationspunkte im Parameterraum

te ist. In diesem Punkt tritt also eine Sattel-Knoten-Bifurkation auf, in der der Ast instabil wird. Gleichzeitig kehrt sich die Richtung der Spannungsveränderung um. Es muß nun also nach links gelaufen werden, bis man die andere zum eben betrachteten Cusp-Punkt gehörende Sattel-Knoten-Bifurkation, also die *linke*, gefunden hat. In diesem Punkt wird der Ast wieder stabil und die Richtung der Spannungsvariation kehrt sich erneut um. Nun wird wieder nach rechts gelaufen bis zur nächsten *rechten* Sattel-Knoten-Bifurkation eines Cusp-Punktes, die noch nicht erreicht wurde usw.

Auf diese Weise kann die gesamte Kennlinie bezüglich der Spannung konstruiert werden. Aussagen über die Stromdichte als Funktion der Spannung sind selbstverständlich nicht möglich. Die „wirklich“ wichtigen Erkenntnisse sind aber davon unabhängig. Liegen bei einer bestimmten

Dotierung zum Beispiel zwischen der rechten und linken von einem Cusp-Punkt ausgehenden Sattel-Knoten-Bifurkation weitere Sattel-Knoten-Bifurkationspunkte, so gibt es in dem betreffenden Spannungsintervall nicht nur zwei, sondern drei oder mehr stabile Zustände. Man sieht mit einem Blick sofort, daß mit höherer Spannung und mit höherer Dotierung die Anzahl der multistabilen Zustände tendenziell zunimmt.

Ein ungestörtes Übergitter kann (im verwendeten Modell) also als selbstorganisierte Strukturen Äste (Multistabilität von Felddomänen, die nur an diskreten Orten liegen können) und Grenzzyklus-Oszillationen zeigen. Diese beiden Effekte sind jedoch nicht miteinander verknüpft. Wie schon die Abbildungen 4.22 und 4.14 zeigten, gibt es eine „Pufferzone“ zwischen Ästen und Oszillation.

4.6 Verschieden lange Übergitter

Abbildung 4.23 zeigt die Lage der Bifurkationspunkte, während die Größe des Übergitters,

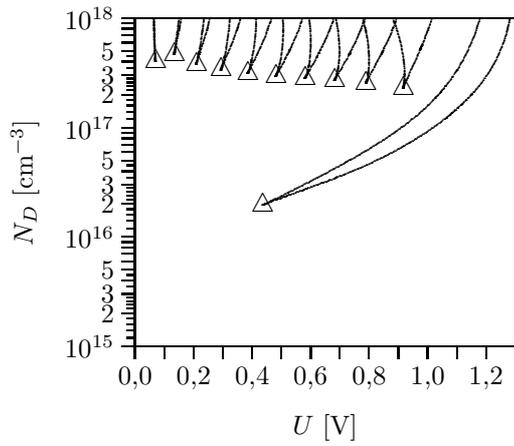
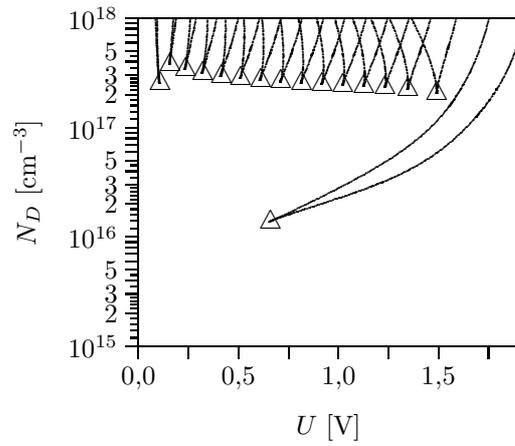
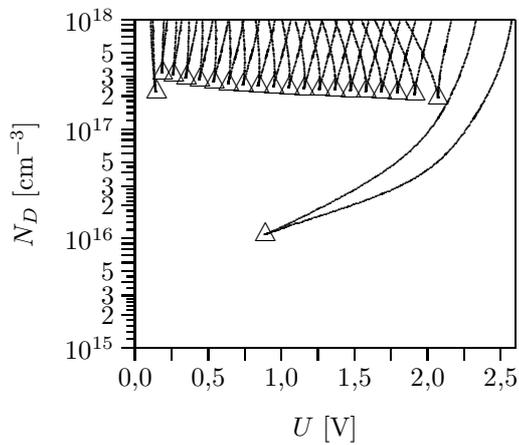
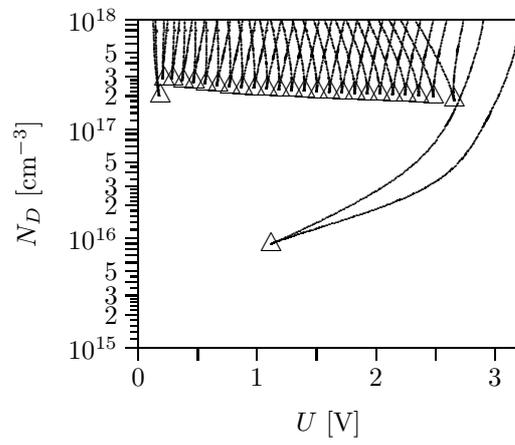
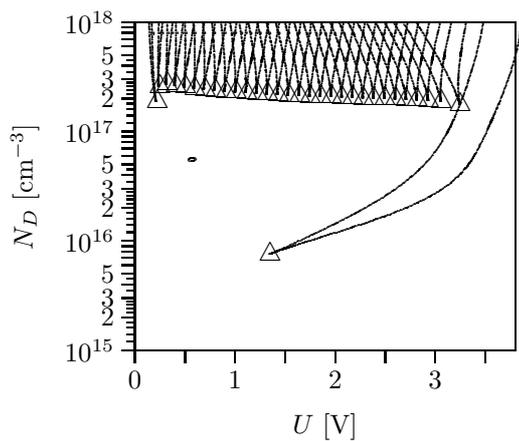
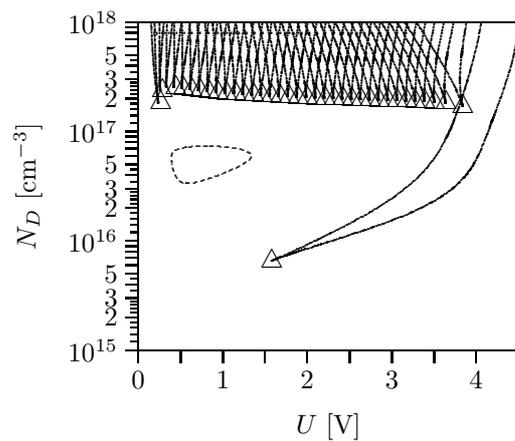
(a) $N = 10$ (b) $N = 15$ (c) $N = 20$ (d) $N = 25$ (e) $N = 30$ (f) $N = 35$

Abbildung 4.23: Lage der Bifurkationspunkte („Phasendiagramm“) bei Übergittern aus verschiedenen vielen Quantentöpfen. Man erkennt unmittelbar, daß die Bildung von Ästen bereits bei sehr kleinen Übergittern möglich ist, während Oszillationen nur bei den längeren Übergittern auftreten.

d. h. die Anzahl N der Quantentöpfe, verändert wird. Die mit der Astbildung verknüpften Cusp-Punkte und Sattel-Knoten-Bifurkationslinien ändern dabei nur ihre Zahl, die Äste als solches bleiben aber erhalten. Dies war auch nicht anders zu erwarten: Die Äste entstehen nur bei Dotierungen, bei denen die Ladungsträgeransammlung in einem einzelnen Quantentopf lokalisiert ist. Der einzelne Ast „bemerkt“ also nur wenig davon, daß bereits in der Nähe der Rand des Übergitters liegt. Ist man nur an bereits voll ausgeprägten Ästen interessiert, so könnte man also durchaus das Übergitter kleiner wählen, um Arbeit (Rechenzeit bzw. Dauer und Kosten des Wachstumsvorgangs) zu sparen.

Dies ist bei Oszillationen nicht der Fall. Wie schon in Abbildung 4.7(c) (Seite 32) zu sehen war, sind die damit verbundenen Feldstrukturen über einen großen Bereich des Übergitters ausgedehnt. Dementsprechend muß das Über-

gitter eine gewisse Mindestanzahl von Quantentöpfen besitzen, damit eine Oszillationmode überhaupt „hineinpaßt“. Diese beträgt im vorliegenden Fall $N = 27$. Die Mindestlänge des Übergitters kann in zwei Teile aufgeteilt werden: zum einen die Länge der eigentlichen Oszillationsmode, zum anderen ein Mindestabstand zum Rand, der durch die Randbedingungen vorgegeben wird. Für den größten Teil dieser Arbeit, insbesondere auch für diesen Abschnitt, wurden die „festen“ verwendet. Im Kapitel 7 werden im Vergleich hierzu Neumann-Randbedingungen, wobei man letztere eher als „freie“ oder „lose“ Randbedingungen bezeichnen sollte, da sie weniger Zwang auf das System auswirken damit die Entstehung selbstorganisierter Strukturen erleichtern. Bei diesen ist die für Oszillationen nötige Mindestlänge deutlich kleiner (Seite 106); die Differenz ist die (doppelte) Länge, die das System benötigt, um die Randbedingungen zu „vergessen“.

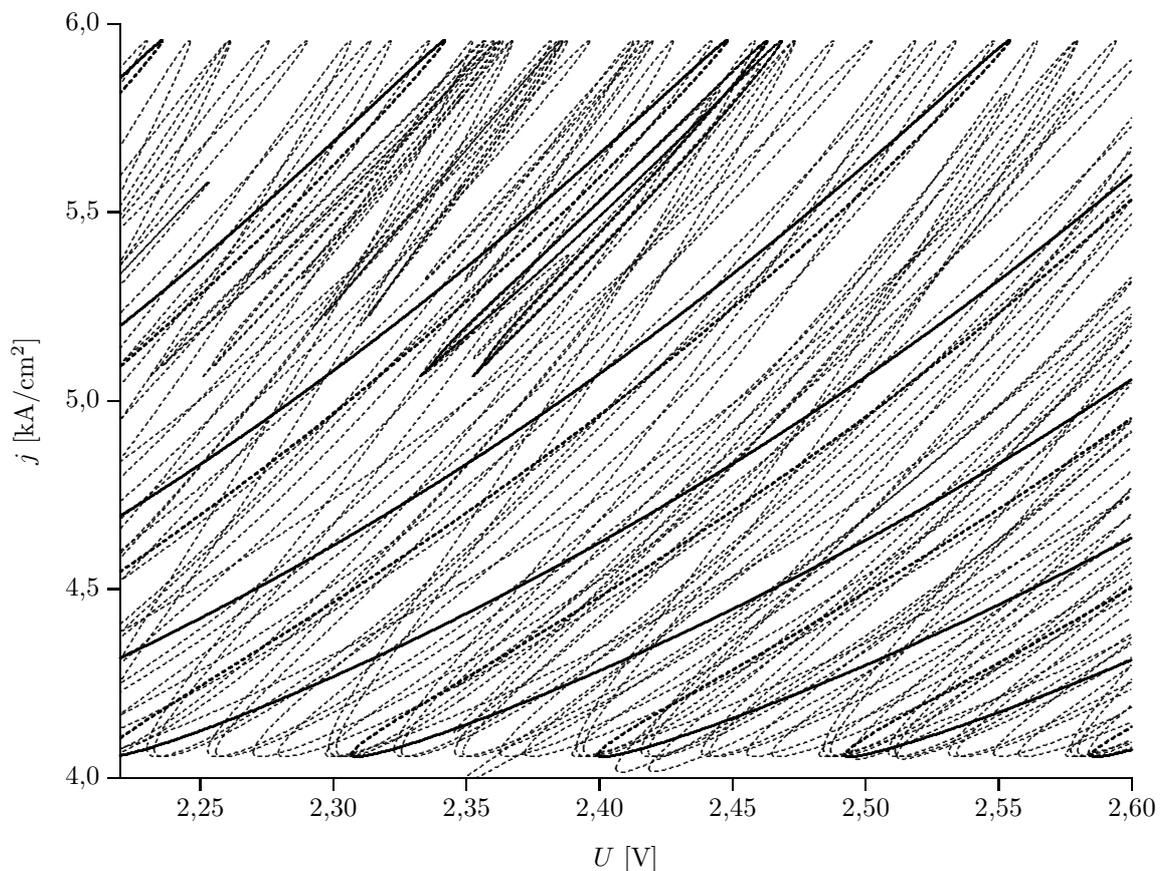


Abbildung 4.24: „Seltsame Zustände“, ausgehend von der Spannung $U = 2,348$ V. Die verschiedenen, hier nur schlecht erkennbaren Kurven, sind im Text erläutert. Die wichtigste Aussage dieser Abbildung ist, daß die „normale“ Kennlinie (fett eingezeichnet) nur eine von vielen Kurven aus stationären Zuständen ist.

4.7 „Seltsame Zustände“

Bisher wurde die „normale“ Kennlinie betrachtet, d. h., durch Simulation wurde ein stabiler Fixpunkt der Ratengleichungen bestimmt und von diesem ausgehend mittels Zweigverfolgung die mit ihm verbundenen Äste. Es ergab sich, daß man unabhängig von der Wahl des Startpunktes immer die selbe Kurve erhält, eben die „normale“ Kennlinie. An dieser Stelle soll aber einmal gefragt werden, welche weiteren Lösungen die Übergangsgleichungen besitzen, d. h. Fixpunkte, die auch instabil sein können oder aber einen zu kleinen Einzugsbereich besitzen, um durch eine Simulation erreicht zu werden.

Das Mittel der Wahl für diese Aufgabe ist eine Nullstellensuche nach Newton-Raphson. Jede Nullstellensuche in einem mehr als eindimensionalen Raum ist schon prinzipiell eine „fast unmögliche“ Aufgabe [Pre92, Kapitel 9.6], die nur bei einschränkenden Annahmen wie zum Beispiel der Gültigkeit der linearen Näherung lösbar wird. Dieses bedeutet insbesondere, daß ein „vernünftiger“ Anfangswert vorgegeben werden muß, wobei es für „vernünftig“ leider keine

bessere Definition gibt, als daß der Algorithmus dann konvergiert. Bei einem hochdimensionalen Problem wie dem hier behandelten wird die Wahl des Anfangswertes um so komplizierter.

Deswegen soll zuerst überlegt werden, welche Voraussetzungen ein solcher Startwert eigentlich erfüllen sollte: Er soll ähnlich wie die Zustände aussehen, die bereits von der „normalen“ Kennlinie bekannt sind. Die einzige praktikable Möglichkeit, dieses zu erreichen, ist, einfach einen Zustand der „normalen“ Kennlinie zu nehmen. Als nächstes möchte man gerne einen anderen Zustand als Ergebnis erhalten, als man am Anfang hineingesteckt hat. Man könnte nun auf die Idee kommen, den gewählten Startzustand einfach ein wenig zu verändern. Dies führt jedoch nicht zum Ziel: Ist die Veränderung zu klein, wird der Algorithmus wieder auf den Ausgangszustand konvergieren. Ist sie zu groß, wird er im allgemeinen nicht auf einen anderen, sondern überhaupt nicht konvergieren. An dieser Stelle hilft der folgende Trick: Man nehme als Ausgangszustand die Werte eines Sattel-

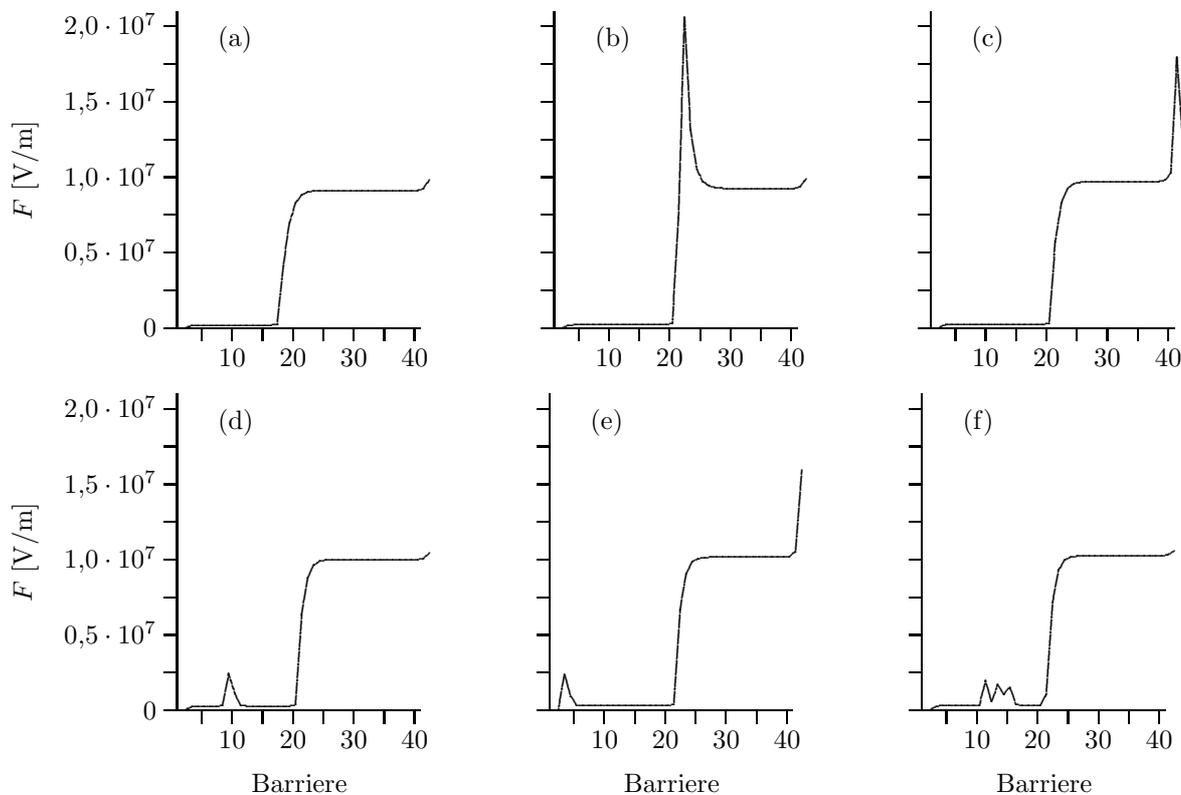


Abbildung 4.25: Verschiedene Typen von Feldverteilungen. Die gefundenen stationären Zustände lassen sich in sechs Gruppen einteilen. Die Feldverteilung (a) tritt nur bei der „normalen“ Kennlinie auf. Die Feldverteilungen (b), (c) und (e) haben Feldstärkepeaks, die deutlich über der Resonanzfeldstärke von etwa 10^7 V/m liegen, und müssen daher als unphysikalisch angesehen werden. Die Feldverteilungen (d) und (f) besitzen eine „normale“ Hochfelddomäne, haben in der Niederfelddomäne jedoch einen Bereich erhöhter Feldstärke von einem bzw. einigen Quantentöpfen Breite.

Knoten-Bifurkationspunktes, im folgenden wurden „rechts oben“ liegende Bifurkationspunkte gewählt. Verringert man bei diesen die Spannung geringfügig, so gibt es in der Nähe zwei stationäre Zustände; erhöht man sie dagegen, so gibt es keinen solchen mehr. Auf diese Weise erhält man einen Zustand, der „fast“ ein Zustand der „normalen“ Kennlinie, ohne daß der Nullstellen-Algorithmus auf diesen zurückfallen könnte.

Da man natürlich nicht nur einen neuen Zustand, sondern möglichst viele finden möchte, muß man den Ausgangszustand noch etwas zufällig variieren. Hierbei ist es nicht sinnvoll, jede Zustandsvariable getrennt zu verändern, sondern besser, „großräumiger“ vorzugehen: Man würfelt zum Beispiel aus, in wievielen Quantentöpfen man die Besetzungsdichten in einem bestimmten Energieniveau verändern möchte, und verändert dann in diesen Quantentöpfen die Besetzungsdichten alle um den gleichen Wert. Dieser Vorgang kann dann mehrfach wiederholt werden.

Das Ergebnis ist in Abbildung 4.24 dargestellt. Man „erkennt“ eine Vielzahl instabiler Zustände, zum Vergleich ist auch die „normale“ Kennlinie eingezeichnet. Die instabilen Zustände lassen sich nach zwei Kriterien klassifizieren: Zum einen gibt es welche, die genau wie die „normale“ Kennlinie durchgehend sind, d. h., sie existieren in einem großen Spannungsintervall, während andere nur die Breite von ungefähr einem Ast der Kennlinie haben (Diese werden im folgenden als „geschlossen“ bezeichnet). Zum anderen lassen sich sechs verschiedene Typen von Feldstärkeverteilungen unterscheiden. Diese sind in Abbildung 4.25 aufgeführt.

Die Verteilung in 4.25a ist diejenige, die genau bei der „normalen“ Kennlinie auftritt (zumindest in dem Spannungsbereich, bei dem es zur Ausbildung von Ästen kommt). Die Feldstärke in der Hochfelddomäne ist etwa gleich der Resonanzfeldstärke, bei der resonantes Tunneln zwischen zwei benachbarten Quantentöpfen möglich wird. Dieser Transportmechanismus ist so effektiv, daß eine weitere Erhöhung der Resonanzfeldstärke aus Sicht des Systems nicht mehr

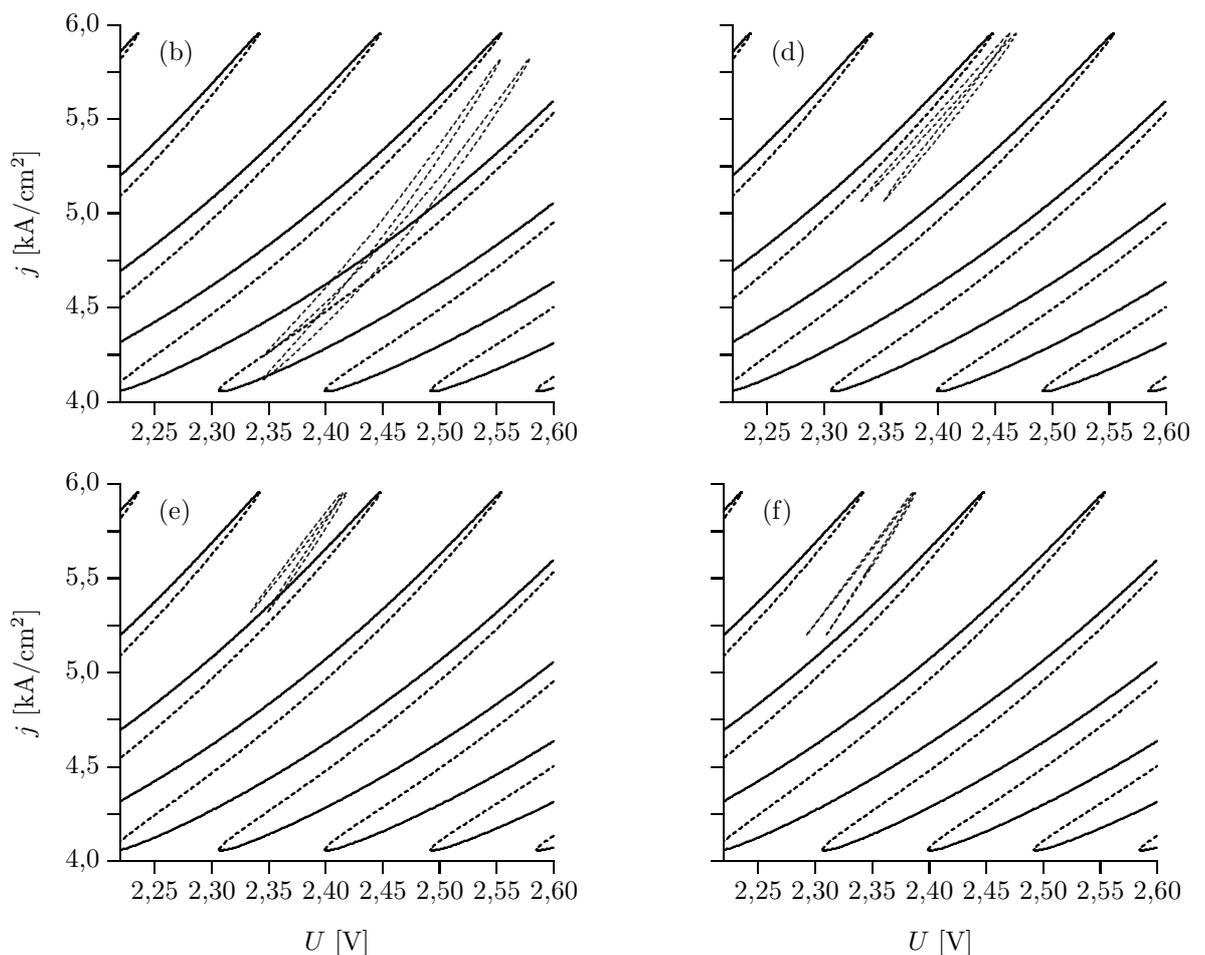


Abbildung 4.26: Kennlinien geschlossener Zustände. Es sind die Kennlinien für die Zustände aus Abbildung 4.25 dargestellt. Die Teilbilder sind wie dort bezeichnet.

„sinnvoll“ ist. Diese Bedingung wird in den Teilbildern (b), (c) und (e) von Abbildung 4.25 verletzt, womit die physikalische Relevanz dieser Zustände sehr fraglich ist^{12,13}. In den Teilbildern (d) und (f) ist die Hochfelddomäne gleich aufgebaut wie bei der „normalen“ Kennlinie; in der Niederfelddomäne ist jedoch lokal die Feldstärke erhöht, liegt jedoch weit unter der Resonanzfeldstärke. Der Unterschied zwischen diesen beiden Typen liegt darin, daß bei der ersten nur in einem einzigen Quantentopf eine erhöhte Feldstärke vorliegt – was bedeutet, daß in einem Quantentopf die Ladungsträgerkonzentration erhöht ist, während sie in dessen Nachbartopf verringert ist – während bei der zweiten sich dieser Bereich über einige Quantentöpfe ausdehnt. Der Grund für diese Unterscheidung wird am Ende dieses Abschnitts etwas klarer werden.

Die beiden eben eingeführten Klassifizierungen sind nicht unabhängig voneinander: Zustände mit Feldverteilungen der Typen (b), (d), (e) und (f) gehören (mit einer einzigen Ausnahme) zu geschlossenen Kurven, während Feldverteilungen der Typen (a) und (c) durchgehende Kurven implizieren. Zur Veranschaulichung sind in Abbildung 4.26 die zu den Feldverteilungen in Abbildung 4.25 gehörenden geschlossenen Kennlinien dargestellt. Die Feldverteilungen der verschiedenen Zustände auf einer geschlossenen Kurve unterscheiden sich nur geringfügig – letztendlich beträgt deren Breite ja nur ungefähr die eines Kennlinienastes, womit das für das Erreichen eines neuen Astes charakteristische Wandern der Elektronen von einem Quantentopf in den nächsten nicht zu erwarten ist. Die Feldverteilungen auf den geschlossenen Kurven, die zu den Abbildungen 4.25 und 4.26 gehören, sind in Abbildung 4.27 in Bogenlängenparametrisierung dargestellt. Da es sich hierbei um einen geschlossenen Zustand handelt, sind die beiden Endpunkte miteinander verbunden zu denken.

Als nächstes seien kurz noch die durchgehenden Lösungskurven erwähnt. Eine solche „Kennlinie“ ist in Abbildung 4.28 dargestellt. Man erkennt, daß die praktisch rein instabile Kurve von höheren Spannungen kommend bis unge-

fähr zur Spannung $U = 0,5$ V geht, dort ein kurzes Stück stabil ist und dann wieder zurückläuft. In Abbildung 4.29 ist die zugehörige Feldverteilung in Bodenlängenparametrisierung dargestellt. Die beiden Enden entsprechen den beiden Enden der Kennlinie bei $U = 5$ V.

Zum Abschluß sei noch einmal auf die Unterscheidung zwischen den Feldverteilungen in den Abbildungen 4.25(d) und 4.25(g) zurückgekommen. Bei anderen Parametern, insbesondere einer Spannung von nur knapp einem Volt, findet man einen Zustand, der in Abbildung 4.30 dargestellt ist. Im Teilbild (a) ist die Kennlinie zu sehen und im Teilbild (b) die bogenlängenparametrisierte Feldverteilung. Das besondere an dieser Kurve ist, daß ein – wenngleich kleiner – Teil von ihr stabil ist. Da bei der im restlichen Teil dieses Abschnitts betrachteten Spannung keine solchen Zustände gefunden wurden, wurde folgendes Verfahren durchgeführt, um „neue“ Zustände zu konstruieren:

Jeder Ast der normalen Kennlinie entspricht einem gewissen Spannungsschub, der durch einfaches Ausmessen und Abzählen bestimmt werden kann. Weiterhin ist aus dem Abschnitt 4 bereits bekannt, daß das „Betreten“ eines neuen Astes mit der Verschiebung der Ladungsträger um genau einen Quantentopf verbunden ist. Wie sich in Abbildung 4.29 ergeben hat, gilt dieses auch für „seltsame“ Zustände. Genau dieses wird nun per Hand durchgeführt. Wenn man sich Abbildung 4.30(b) ansieht, erkennt man wieder die gewohnten Nieder- und Hochfelddomäne, wobei in der Niederfelddomäne ein zusätzlicher Peak liegt. Man „schneidet“ nun aus der Niederfelddomäne einen Quantentopf aus und dupliziert dafür einen der Hochfelddomäne, so daß als Ergebnis der Prozedur das gesamte Feldstärkenprofil um einen Quantentopf verschoben wurde. Man muß nun nur noch ausprobieren, auf welcher Seite des zusätzlichen Peaks das Ausschneiden geschehen muß – es ergibt sich, daß dieses auf der Außenseite geschehen muß. Auf diese Weise konnten eine Reihe weiterer Kurven erzeugt werden, die genau wie die aus Abbildung 4.30 aussehen – nur um grob 0,1 V verschoben.

¹²Im Vorgriff auf die folgenden Kapitel so schon erwähnt, daß letztere Zustände nicht mehr „auftauchen“ werden, während es ein Wiedersehen mit anderen hier besprochen „seltsamen“ Zuständen geben wird.

¹³Man könnte auf folgende Idee kommen, um zu überprüfen, ob ein Zustand „physikalisch“ ist: Man postuliert, daß die stabilen Teile der „normalen“ Kennlinie „physikalisch“ sind, und daß stabile stationäre Zustände mit negativer Stromdichte „unphysikalisch“ sind. Dann nehme man einen zu identifizierenden instabilen stationären Zustand und starte eine Simulation mit diesem als Startwert, bis man zu einem stabilen stationären Zustand gerät. Es ergibt sich, daß die eben gemachten Postulate ausreichend sind, d. h., für die hier besprochenen Zustände gelangt man immer zu einem der beiden oben erwähnten Endzustände. Leider hängt die Art des Ziels nicht vom Typ der Feldverteilung des Startzustandes ab, vielmehr gelangen sogar Zustände mit gleicher Spannung, die auf der selben geschlossenen Kurve liegen, an verschiedene Ziele.

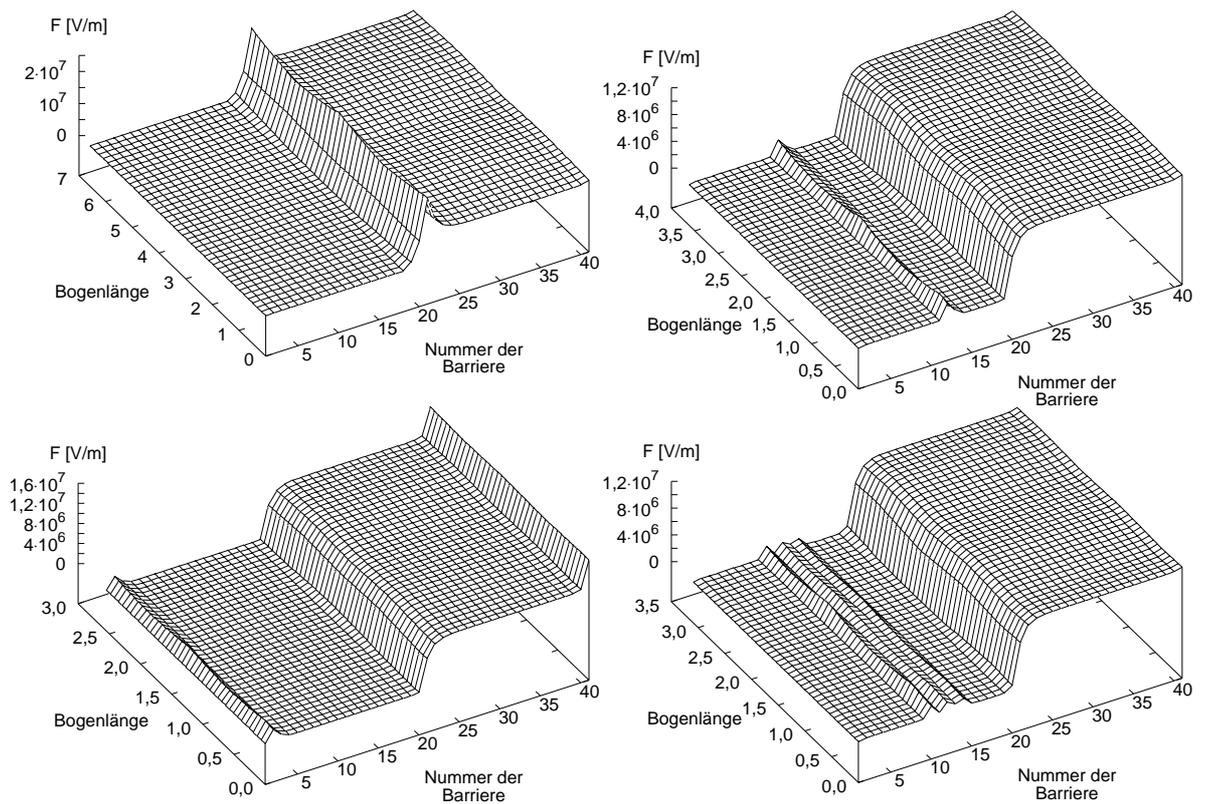


Abbildung 4.27: Feldstärkeverteilungen für die Kennlinien aus Abbildung 4.26. Die Anordnung der Teilbilder entspricht der aus eben erwähnter Abbildung. Nähere Erläuterungen siehe Text.

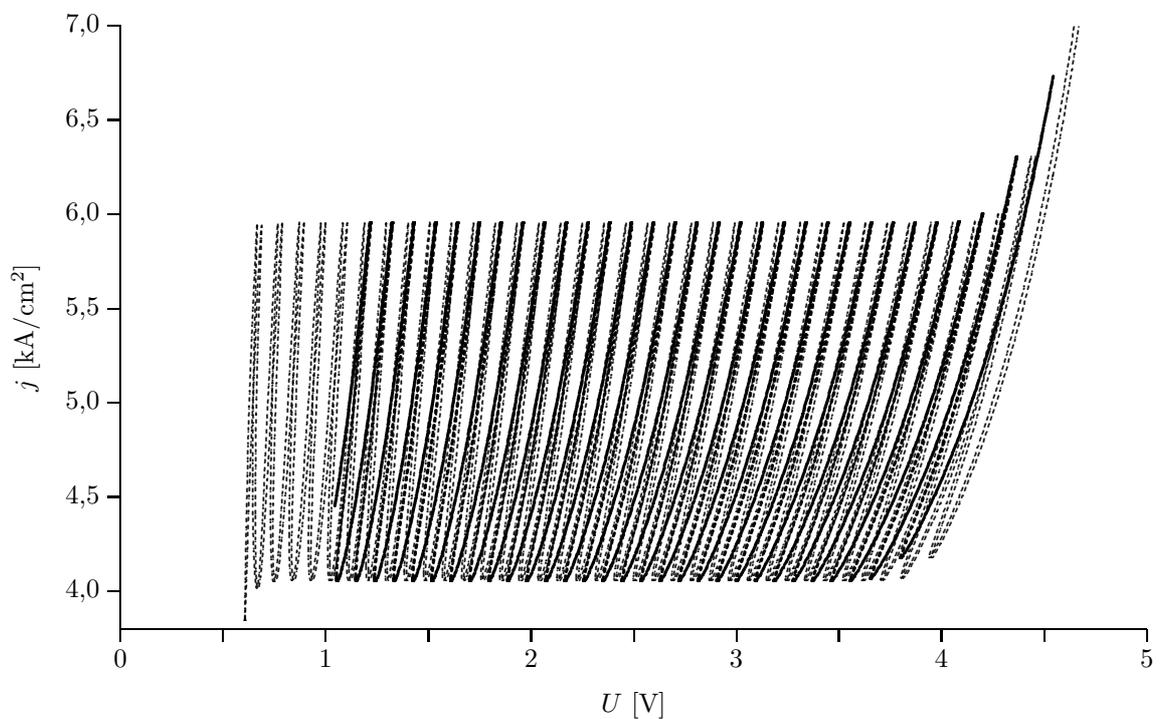


Abbildung 4.28: Beispiel für eine durchgehende „seltene“ Kennlinie. Der Zustand aus Abbildung 4.25(c) liegt auf dieser Kurve. Zum Vergleich ist die „normale“ Kennlinie ebenfalls eingezeichnet.

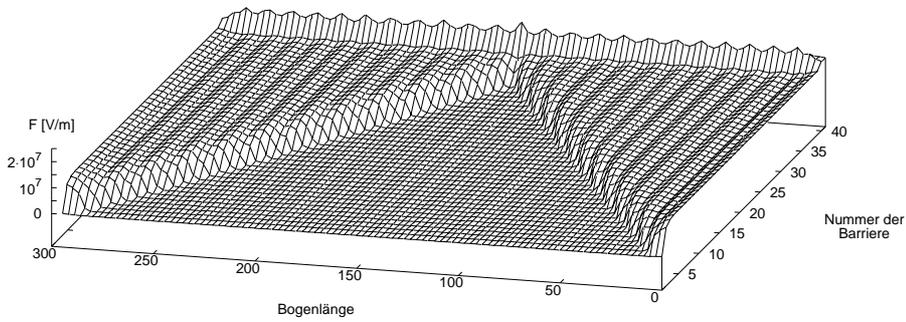


Abbildung 4.29: Feldverteilung der durchgehenden „Kennlinie“ aus Abbildung 4.28.

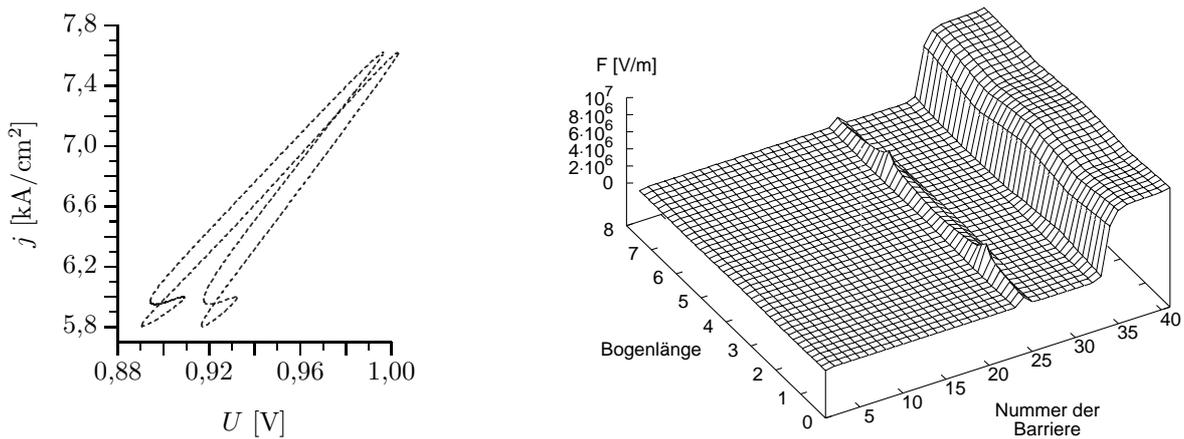


Abbildung 4.30: Teilweise stabiler seltsamer Zustand. (a) „Kennlinie“. (b) Feldverteilung, parametrisiert über die Bogenlänge.

Kapitel 5

Leicht gestörte Kennlinie

Bisher wurde ein Übergitter durch die Dotierungsdichte N_D , die Barrierenbreite d und die Quantentopfbreite l beschrieben. Das bedeutet, daß das Übergitter exakt periodisch ist und keine lokalen Fluktuationen dieser Größen auftreten. Diese sehr idealisierten Annahmen sind in experimentell gewachsenen Übergittern selbstverständlich nicht erfüllt. Eine bessere Anpassung der mit diesem Modell berechneten Kennlinien an experimentelle Daten kann nur dann gelingen, wenn diese Störungen berücksichtigt werden.

Das verwendete Modell zum vertikalen Transport von Elektronen in einem Halbleiterübergitter ist eindimensional, d. h., es wird nur der Transport in Wachstumsrichtung (z -Richtung) betrachtet. Dementsprechend dürfen auch alle Bestimmungsgrößen des Übergitters nur von der z -Komponente des Ortes abhängen, Fluktuationen innerhalb einer Schicht sind in diesem Modell also nicht darstellbar. Die Frage, ob letztere experimentell relevant sind, kann dadurch beantwortet werden, daß man verschiedene Übergitter vom selben Wafer untersucht und ihre Kennlinien vergleicht [Hel90, Wac95b]. Hierbei ergab sich, daß die Kennlinien fast exakt übereinstimmen.¹ Die Beschränkung auf Fluktuationen nur in z -Richtung ist also keine signifikante Einschränkung.

In [Sch94, Sch95b] wurden die Auswirkungen von Fluktuationen der drei Größen Dotierung N_D , Quantentopfbreite l und Barrierenbreite d verglichen. Hierbei ergab sich, daß die Verbreiterung einer einzelnen Barriere um nur eine einzelne Monolage bereits zu einer starken Änderung der Kennlinie führt. Diese Veränderung hat ein charakteristisches Aussehen und kann nur bei wenigen gewachsenen Übergittern gefunden werden. Durch absichtlich mit einer breiteren Barriere gewachsene Übergitter konnte dieser Zusammenhang mittlerweile auch experimentell verifiziert werden [Kas95a]. Da es beim Wachstumsprozeß keinen Unterschied zwischen dem Aufwachsen von Barrieren und dem von Quantentöpfen gibt und auch Abweichungen nach oben und nach unten gleich häufig sein sollten, kann gefolgert werden, daß auch Fluktuationen der Quantentopfbreiten nur relativ selten auftreten. Als einzige fluktuierende Größe muß daher die Dotierung N_D berücksichtigt werden, die jetzt in jedem Quantentopf einen etwas anderen Wert annehmen kann.

Im folgenden werden daher Dotierungsfluktuationen behandelt. Zunächst wird an Hand eines vereinfachten Modells analytisch abgeschätzt, welche Phänomene zu erwarten sind. Anschließend werden diese Voraussagen am „vollständigen“ Modell durch numerische Berechnungen überprüft. Nachdem dies geschehen ist, werden die Ergebnisse für verschiedene Fluktuationsstärken vorgestellt.

Die in diesem Kapitel behandelten Phänomene gelten unabhängig von der Stärke der Fluktuationen. Für nicht zu stark gestörte Übergitter gibt es jedoch keine weiteren Effekte, weshalb dieses Kapitel „Leicht gestörte Kennlinie“ heißt.

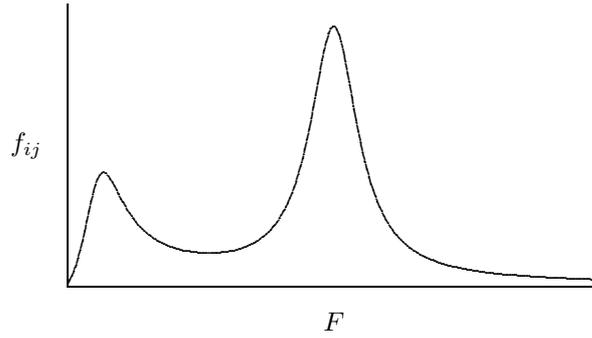


Abbildung 5.1: Prinzipieller Verlauf der $f_{ij}(F)$ -Kurve. Der Übergangskoeffizient besitzt zwei Maxima, deren Positionen ungefähr die Feldstärken in der Niederfeld- bzw. Hochfelddomäne angeben. Bei typischen Dotierungskonzentration für Kennlinien mit ausgeprägter Aststruktur ist ein Ladungsträgerüberschuß von etwa der halben bis einfachen Dotierungsdichte notwendig, um den Feldstärkesprung zwischen Niederfeld- und Hochfelddomäne zu bewirken.

5.1 Analytische Abschätzung

Für die folgenden Ableitungen soll ein vereinfachtes Modell mit nur einem Energieniveau pro Quantentopf betrachtet werden. Die zeitliche Änderung der Besetzungsdichte n_i im i -ten Quantentopf kann dann geschrieben werden als

$$\dot{n}_i = \sum_j f_{ij} n_j. \quad (5.1)$$

Über die Vorzeichen der Übergangskoeffizienten f_{ij} kann folgende Aussage gemacht werden: f_{ii} ist kleiner als Null, da dieser Term das Verlassen von Elektronen aus dem Quantentopf, in dem diese sich gerade befinden, beschreibt. Alle anderen Übergangskoeffizienten sind größer oder gleich Null, wobei die Anzahl der Übergangskoeffizienten mit einem Wert ungleich Null davon abhängt, ob nur Transport zwischen benachbarten oder auch zwischen weiter entfernten Quantentöpfen erlaubt ist.

Der exakte Wert der f_{ij} wird nur durch die Feldstärken im Übergitter bestimmt. Diese hängen über die Poissongleichung von der Nettoladungsdichte, also von der Differenz zwischen n_k und der Dotierung ab. Wird nun für jeden Quantentopf eine eigene Dotierungsdichte N_k eingeführt, so ist unmittelbar einsichtig, daß für die Feldstärken eine Erhöhung von n_k mit einer Erniedrigung von N_k gleichwertig ist. Damit kann unmittelbar folgende Aussage gewonnen werden:

$$\frac{\partial f_{ij}}{\partial n_k} = -\frac{\partial f_{ij}}{\partial N_k} \quad (5.2)$$

Im folgenden wird ein beliebiger stationärer Zustand betrachtet. Es gilt also:

$$0 \equiv \dot{n}_i = \sum_j f_{ij} n_j.$$

Die Übergangsraten \dot{n}_i hängen direkt oder indirekt über die Poissongleichung von den $\{n_k\}$ und den $\{N_k\}$ ab. Die obige Gleichung ist also als Aufforderung zu verstehen, alle Werte für die $\{n_k\}$ und die $\{N_k\}$ zu bestimmen, bei denen das Funktional $\dot{n}_i[\{n_k, N_k\}]$ identisch verschwindet. Damit muß dann aber auch dessen lineare Approximation, also das Differential, verschwinden:

$$0 = d(\dot{n}_i) = \sum_k \frac{\partial \dot{n}_i}{\partial n_k} dn_k + \sum_k \frac{\partial \dot{n}_i}{\partial N_k} dN_k$$

¹Dies war auch zu erwarten: Die untersuchten Proben besitzen eine Querschnittsfläche, die sehr groß gegen die Dicke der einzelnen Schichten ist. Fluktuationen mit sehr kurzen Korrelationslängen, die als „interface roughness“ zusammengefaßt werden, mitteln sich über die Querschnittsfläche heraus und können nur dann zu Effekten führen, wenn sich die Grenzflächenrauigkeiten während des Wachstumsprozesses verändern [Dev86, Gra92, Ete93, Sch96c]. Effekte auf größeren Längenskalen wie Verwerfungen sind auch nicht allzu wahrscheinlich, da die Dicken der einzelnen Schichten – wie im nächsten Absatz dargelegt werden wird – nur selten fluktuieren.

Durch Einsetzen von 5.1 ergibt sich

$$0 = \sum_{k,j} \frac{\partial f_{ij}}{\partial n_k} n_j dn_k + \sum_{k,j} f_{ij} \underbrace{\frac{\partial n_j}{\partial n_k}}_{\delta_{jk}} dn_k + \sum_{k,j} \frac{\partial f_{ij}}{\partial N_k} n_j dN_k + \sum_{k,j} f_{ij} \underbrace{\frac{\partial n_j}{\partial N_k}}_0 dN_k$$

Berücksichtigt man dann noch 5.2, so kann man diese Formel zusammenfassen zu:

$$\boxed{0 = \sum_{k,j} \frac{\partial f_{ij}}{\partial n_k} n_j (dn_k - dN_k) + \sum_k f_{ik} dn_k} \quad (5.3)$$

Hiermit hat man eine, allerdings implizite, Vorschrift, die es zum Beispiel erlaubt, bei vorgegebenen infinitesimalen Veränderungen $\{dN_k\}$ der Dotierungskonzentrationen die notwendigen infinitesimalen Änderungen $\{dn_k\}$ der Elektronendichten zu berechnen, so daß trotz der Änderungen das System weiterhin stationär bleibt. Durch Aufintegration dieser infinitesimalen Größen ist es zumindest prinzipiell möglich, auch bei endlichen Störungen die exakte Lösung zu bestimmen. Während des Integrationsvorgangs müssen über die Poissongleichung die Feldstärken und damit auch die Übergangskoeffizienten f_{ij} sowie $\frac{\partial f_{ij}}{\partial n_k}$ angepaßt werden.

Um die Auswirkungen analytisch abschätzen zu können, muß obige Gleichung noch weiter vereinfacht werden. Im folgenden soll daher die „normale“ Kennlinie betrachtet werden, d. h. die Dotierung ist so groß, daß die Aststruktur bereits vollständig ausgebildet ist. Dies bedingt, daß die Feldstärkeverteilung im Übergitter in eine Hochfeld- und eine Niederfelddomäne zerfällt. Die Feldstärken in den beiden Domänen sind etwas kleiner als die Maxima der Übergangskoeffizienten f_{ij} [Pre94a], deren prinzipieller Verlauf in Abbildung 5.1 dargestellt ist. Wie im vorherigen Kapitel gezeigt wurde, ist für die Ausbildung der Hochfelddomäne ein Elektronenüberschuß von etwa der halben bis der einfachen Dotierungsdichte notwendig. Eine relativ kleine Änderung einer Elektronenkonzentration n_i verändert daher die Übergangskoeffizienten relativ stark.² Damit ist die folgende Bedingung erfüllt,³ wobei im folgenden der Einfachheit halber die Gleichungen dadurch einheitenlos gemacht werden, daß die Dotierungsdichte bzw. die Resonanzfeldstärke als „natürliche“ Einheiten angesehen werden:

$$\left| \frac{\partial f_{ij}}{\partial n_k} \right| \gg |f_{ik}|$$

Der Term f_{ij} steht in Gleichung 5.3 als Teil einer Summe über j ; die Summierung über k ist unkritisch, da die dn_k als unabhängig angesehen werden. Der Übergangskoeffizient f_{ii} ist kleiner als Null, zeigt betragsmäßig aber das prinzipiell gleiche Verhalten wie die Übergangskoeffizienten f_{ij} für $i \neq j$. Damit ist auch das Vorzeichen von $\frac{\partial f_{ii}}{\partial n_k}$ entgegengesetzt dem von $\frac{\partial f_{ij}}{\partial n_k}$ für $i \neq j$, so daß es prinzipiell denkbar wäre, daß sich diese Terme weitgehend aufheben und aus der obigen Aussage nicht

$$\left| \sum_j \frac{\partial f_{ij}}{\partial n_k} n_j \right| \gg |f_{ik}|$$

gefolgert werden dürfte. Dieser Einwand kann nicht durch ein einfaches Argument widerlegt werden, muß hier aber unberücksichtigt bleiben.⁴ Damit kann 5.3 vereinfacht werden zu:

$$0 = \sum_{k,j} \frac{\partial f_{ij}}{\partial n_k} n_j (dn_k - dN_k) \quad (5.4)$$

²Wenn man die Steigung der $f_{ij}(F)$ -Kurve betrachtet, so nimmt man zweckmäßigerweise eine normierte Größe wie etwa $\frac{1}{f_{ij}} \frac{\partial f_{ij}}{\partial F}$. Diese ist betragsmäßig fast überall größer als 1, wie man aus der Abbildung 5.1 unmittelbar erkennen kann: Wenn man die Feldstärke nur um 5% verändert, so verdoppelt oder halbiert sich meistens schon der Übergangskoeffizient f_{ij} . Ausgenommen hiervon ist der Bereich unmittelbar um die Extrema herum. Die Feldstärken in den Hochfeld- und Niederfelddomänen sind zwar ungefähr durch die Positionen der Maxima gegeben, tatsächlich aber etwas geringer und gehen nur asymptotisch gegen eben erwähnte Werte [Pre94a]. Damit erfüllen auch die für uns relevanten Zustände die Bedingung $\left| \frac{1}{f_{ij}} \frac{\partial f_{ij}}{\partial F} \right| \gg 1$, die im Text verwendet wird.

³Die Bedingung gilt natürlich nicht, wenn man für f_{ij} einen der Übergangskoeffizienten wählt, der verschwindet, weil keine Elektronen direkt vom j -ten Quantentopf in den i -ten übergehen können (wenn zum Beispiel nur Transport zwischen benachbarten Quantentöpfen erlaubt ist).

⁴Eine „sichere“ Begründung dieser Aussage ist nicht möglich, da die Frage, in wie weit sich die einzelnen Terme wegheben können, stark von den Details des Modells abhängt. Die Ergebnisse der numerischen Berechnungen aus dem Abschnitt 5.2 zeigen jedoch, daß die im Text verwendete Annahme zumindest für das in dieser Arbeit untersuchte Modell zutrifft. Der Fehler, der durch diese Näherung gemacht wird, wird in Aussage 3 abgeschätzt und im Abschnitt 5.2 auch numerisch berechnet. Wie sich dort ergeben wird, ist er vernachlässigbar klein.

Dies kann mit Vektoren geschrieben werden als

$$0 = A(\mathrm{d}\mathbf{n} - \mathrm{d}\mathbf{N}), \quad (5.5)$$

wobei die Matrix A gegeben ist durch $A_{ik} = \sum_j \frac{\partial f_{ij}}{\partial n_k} n_j$. Ist A nun eine reguläre Matrix, so besitzt das Gleichungssystem 5.5 nur den Nullvektor als Lösung. Dies bedeutet in Komponenten geschrieben:

$$\boxed{\mathrm{d}n_k = \mathrm{d}N_k}$$

Da die Feldstärken nur von der Differenz von n_k und N_k abhängen, ergibt sich unmittelbar die folgende

Aussage 1 *Die Feldstärkeverteilung wird von Dotierungsveränderungen in erster Näherung nicht beeinflusst.*

Weiterhin sind $\mathrm{d}n_i$ und $\mathrm{d}n_j$ für $i \neq j$ nicht miteinander verknüpft. Damit wird von $\mathrm{d}N_i$ nur $\mathrm{d}n_i$ und kein anderes $\mathrm{d}n_k$ beeinflusst.

Aussage 2 *Der Einfluß von Dotierungsveränderungen ist in erster Näherung nur lokal.*

An dieser Stelle muß nun abgeschätzt werden, welchen Einfluß die Vernachlässigung des Terms $\sum_k f_{ik} \mathrm{d}n_k$ beim Übergang von 5.3 auf 5.4 hat. Dies ist formell mathematisch schwer zu ergründen, wird durch folgende Überlegung aber schnell klar: In der ersten Näherung blieb die Feldstärkeverteilung unverändert, dementsprechend auch alle Übergangskoeffizienten f_{ij} . Gleichzeitig wurden aber die Elektronendichten n_j verändert, so daß die Stationaritätsbedingung 5.1 im allgemeinen nicht mehr gelten wird. Die Übergangskoeffizienten f_{ij} müssen daher etwas geändert werden, um die Effekte durch die Veränderung der Elektronendichten auszugleichen.

Wird dieses nicht gemacht, so befinden sich in den Quantentöpfen mit lokal erhöhter Dotierungskonzentration „zu viele“ Elektronen. Ein Teil von diesen wird dann in die benachbarten Quantentöpfe wandern, primär in Richtung des elektrischen Feldes (vom i -ten in den $(i+1)$ -ten Quantentopf, also nach „rechts“).

Aussage 3 *Die Elektronendichten werden bei lokaler Erhöhung der Dotierungskonzentration nicht ganz so stark ansteigen wie die Dotierungskonzentration. Dafür wird die Konzentration in den Nachbaröpfen, insbesondere dem in Feldrichtung, ansteigen. Umgekehrt gilt dieses für eine lokale Verringerung der Dotierungsdichte.*

Dies führt zu einer Veränderung der Feldstärkeverteilung: Die Elektronen, die in der ersten Näherung bereits im i -ten Quantentopf zu einer Erhöhung der Feldstärke führten, tun dies jetzt erst im $(i+1)$ -ten Quantentopf. Die Feldstärke in der Barriere zwischen dem i -ten und dem $(i+1)$ -ten Quantentopf wird also verringert. Will man erreichen, daß diese Feldstärke wieder den alten Wert erreicht, muß die Spannung etwas erhöht werden. Dies gilt insbesondere für den Punkt, an dem der betreffende Ast instabil wird.

Aussage 4 *Eine Erhöhung der Dotierungsdichte in einem Quantentopf führt dazu, daß der entsprechende Ast der Kennlinie erst bei einer höheren Spannung stabil bzw. instabil wird. Umgekehrt gilt dieses für eine Verringerung der Dotierungsdichte.*

Verschiebt sich der Ast, so wird auch das Teilstück des Astes, das bei der Simulation eines einfachen Upsweeps erreicht wird, dementsprechend länger oder kürzer. Da bei einem Upsweep aber nur ein kleiner Teil jedes Astes überstrichen wird, sind die dort auftretenden relativen Änderung sehr groß.

Die bereits gemachten Aussagen 1 und 2 bezogen sich auf die Feldstärken bzw. Elektronendichten, die einer experimentellen Untersuchung nicht ohne weiteres zugänglich sind. Daher soll im folgenden noch eine Aussage über die Stromdichte hergeleitet werden. Für diese ist es ausreichend, nur die erste Näherung zu betrachten, in der sich die Feldstärkeverteilung nicht verändert. Damit bleiben auch alle Koeffizienten, aus denen sich die Stromdichte berechnen läßt, unverändert und die Stromdichten hängen nur noch linear von den Elektronendichten ab⁵. Dies gilt insbesondere sowohl die für die Strommaxima der einzelnen Äste als auch für die Werte an den Abbruchpunkten der Äste.

⁵Die Stromdichte j läßt sich als Linearkombination der Übergangskoeffizienten f_{ij} und der Elektronendichten n_k berechnen. Wie genau dies zu geschehen hat, hängt von den Details des verwendeten Modells ab. Nimmt man an, daß der Elektronentransport nur in Feldrichtung und nur in den benachbarten Quantentopf erfolgt, so ist die Teilchenstromdichte, die durch die Barriere zwischen dem i -ten und dem $(i+1)$ -ten Quantentopf geht, gleich $|f_{i+1,i} n_i|$.

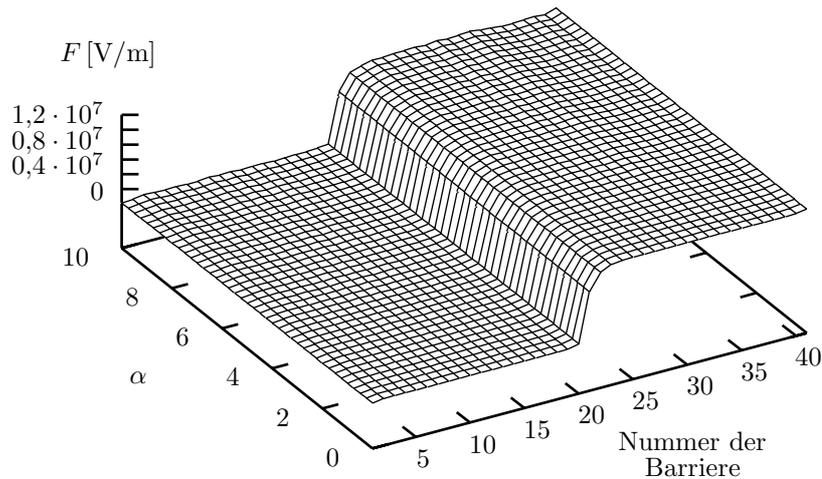


Abbildung 5.2: Störungsabhängigkeit der Feldstärke. Dargestellt ist die Veränderung der Feldstärkeverteilung, wenn der Störungsgrad α von 0% auf 10% erhöht wird. Die Daten sind die eines Sattel-Knoten-Bifurkationspunktes; bei der Veränderung von α wurde die Spannung U derart angepaßt, daß der Bifurkationspunkt nicht verlassen wurde (Dieser Punkt hat sich um insgesamt ca. 20 meV bewegt). Wie sofort zu erkennen ist, verändert sich die Feldverteilung praktisch überhaupt nicht.

Aussage 5 Die Stromdichte, die in einem Ast erreicht wird, skaliert linear mit der lokalen Dotierungsdichte.

5.2 Numerische Überprüfung der Aussagen

Im letzten Abschnitt wurden an Hand eines vereinfachten Modells verschiedene Aussagen – nach geeigneten Näherungen – analytisch abgeleitet. Hierbei konnten nicht alle Annahmen exakt und allgemein gültig begründet werden; sicherlich sind auch Situationen vorstellbar, in denen diese nicht mehr gelten. Daher sollen die Aussagen jetzt am „vollen“ Modell verifiziert werden.

Im Gegensatz zu den analytischen Herleitungen aus dem letzten Kapitel ist es hier nicht sinnvoll, die Fluktuation der Dotierungsdichten $\{N_k\}$ in den einzelnen Quantentöpfen unabhängig voneinander zu betrachten. Insbesondere für den Vergleich mit dem Experiment ist es viel sinnvoller, den Grad der Störung des Übergitters „global“ anzugeben. Dies geschieht durch die Einführung des *Störungsgrades* α . Die Dotierungsfluktuationen in den einzelnen Quantentöpfen errechnen sich durch die Multiplikation von α mit „Störungsrealisierung“ $\{e_i\}$. Die Dotierungen $\{N_i\}$ können damit wie folgt berechnet werden:

$$N_i = N_D \cdot (1 + \alpha \cdot e_i)$$

Die Störungsrealisationen werden einmalig „ausgewürfelt“, innerhalb einer Berechnung

dann aber nicht mehr verändert. Die in dieser Arbeit verwendeten Störungsrealisationen sind im Anhang H aufgeführt. Bis auf wenige Ausnahmen, die dann auch ausdrücklich darauf hinweisen, wird in dieser Arbeit die in Tabelle H.2 angegebene Realisierung benutzt. Durch die Rückführung der Variation von N Dotierungsdichten $\{N_i\}$ auf die Variation einer einzigen Größen, nämlich α , wird die Frage sinnvoll, was bei einer „Veränderung der Störung“ geschieht.

Die erste und wahrscheinlich auch wichtigste Aussage war, daß sich die Feldverteilung bei Dotierungsfluktuationen nicht verändert (Aussage 1). Für diesen Zweck wurde in Abbildung 5.2 aufgetragen, wie sich die Feldverteilung ändert, wenn der Fluktuationsgrad α erhöht wird. Wie bereits in Aussage 4 festgehalten wurde, muß die Spannung dabei etwas verändert werden, da sich der Ast als ganzes verschiebt. Da die Frage, um wieviel die Spannung erhöht oder erniedrigt werden muß, nicht so leicht beantwortet werden kann, wurde folgendes Verfahren ausgenutzt: Als Ausgangszustand wird ein Sattel-Knoten-Bifurkationspunkt genommen, in dem der stabile Teil eines Astes instabil wird. Nun

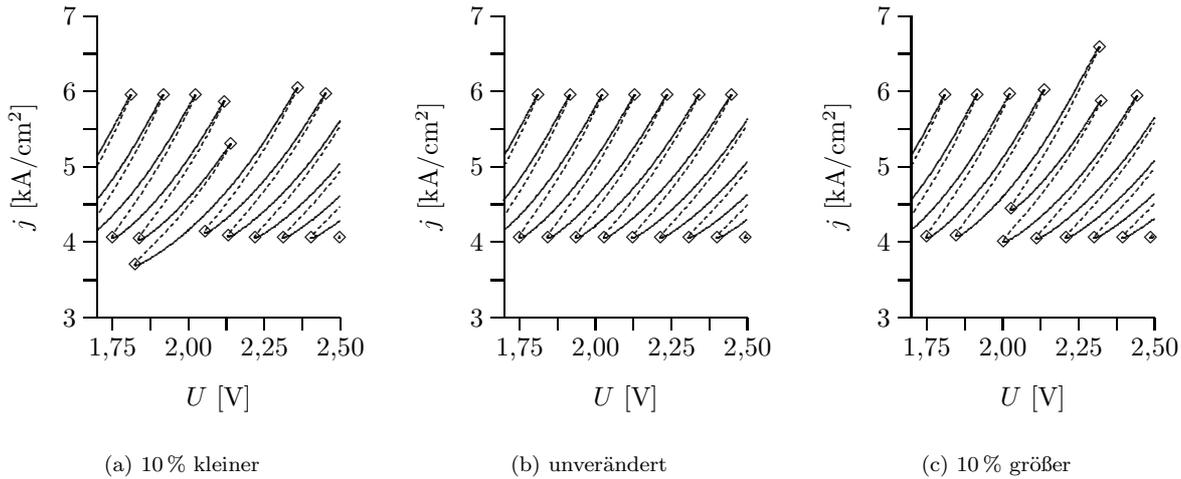


Abbildung 5.3: Kennlinien bei Veränderung der Dotierung in einem einzelnen Quantentopf. Die Dotierung in diesem wurde um 10% erhöht bzw. verringert. Zum Vergleich ist der entsprechende Ausschnitt der ungestörten Kennlinie ebenfalls abgebildet.

wird α derart erhöht, daß die Bifurkationsbedingungen weiterhin gilt. Diese zusätzliche Bedingungsgleichung ermöglicht es, einen weiteren Parameter wie zum Beispiel die Spannung U anzupassen. Auf diese Weise wird gewährleistet, daß immer der gleiche Punkt, relativ zum ganzen Ast gesehen, betrachtet wird.⁶ Eine Veränderung der Feldverteilung ist kaum erkennbar, womit diese Vorhersage bestätigt ist.

Die für praktische Anwendungen wichtige Aussage 5 besagte, daß die Stromdichte, die auf einen Ast erreicht wird⁷, proportional zur lokalen Dotierungsdichte ist. Zu diesem Zweck wurde die Kennlinie eines Übergitters berechnet, in dem in genau einem einzelnen Übergitter die Dotierung anders als an den übrigen ist, und zwar um 10% größer bzw. kleiner. Das Ergebnis ist in Abbildung 5.3 zusammen mit einer ungestörten Kennlinie dargestellt. In guter Näherung ist auch die Stromdichte, bei der der relevante Ast abbricht, 10% größer bzw. kleiner als bei den übrigen Ästen oder dem ungestörten Gitter. Hier sieht man auch gut die Verschiebung (Aussage 4), die gestörte Äste erfahren. Weiterhin erkennt man, daß die benachbarten Äste in den gestörten Kennlinien nur unwesentlich von der Störung betroffen sind.

Die Aussage, daß sich die Feldstärkeverteilung

gen bei Dotierungsfluktuationen nicht verändern, wurde durch Aussage 3 eingeschränkt. Dieser Effekt ist allerdings so klein, daß man ihn nur sehen kann, wenn die Hochfelddomäne weit entfernt vom Ort der Störung beginnt. Abbildung 5.4 zeigt die Ladungsdichteverteilung in einem Übergitter, in dem die Dotierungsdichte in einem Quantentopf (dem 20-ten) um α erhöht ist. In Abbildung 5.4(b) ist die Ladungsdichte für $\alpha = 10\%$ eingezeichnet; in Abbildung 5.4(c) wurde die Elektronendichte im 20-ten Quantentopf um α verringert, um die Effekte von Aussage 1 zu berücksichtigen. Vergleicht man nun diese Kurve mit der ungestörten aus Abbildung 5.4(a), so sieht man, daß die Elektronendichte im gestörten Quantentopf leicht verringert und dafür in den beiden Nachbartöpfen – hauptsächlich dem in Feldrichtung – etwas erhöht ist. Der Effekt ist allerdings so klein, daß er bedeutungslos ist.

Die nur lokale Auswirkung von Störungen soll jetzt an einem Übergitter mit „realistischen“ Fluktuationen überprüft werden. Ein vergrößerter Kennlinienausschnitt ist in Abbildung 5.5 zu sehen. Die dort verwendete Fluktuationsrealisierung wird auch für beinahe alle anderen gestörte Übergitter in dieser Arbeit verwendet.

⁶Für die Frage der Feldverteilung ist dieses eigentlich nicht notwendig: Auf dem gesamten stabilen Ast gibt es eine Hochfeld- und eine Niederfelddomäne mit einer Ladungsträgeransammlung in einem einzelnen Quantentopf (bei hinreichend hoher Dotierung). Eine Spannungsveränderung auf einem Ast hat nur geringe Auswirkungen. Probleme treten vor allen Dingen dann auf, wenn sich der Ast soweit (bezüglich der Spannung) verschiebt, daß bei der gewählten Spannung der Ast über einem bestimmten Wert für α gar nicht mehr existiert. Man beobachtet dann bei dem Wert von α , an dem die Sattel-Knoten-Bifurkation am „Ende“ des Astes genau an der gewählten Spannung liegt, ebenfalls eine Sattel-Knoten-Bifurkation. Anschließend kehrt sich die Richtung der α -Änderung um, und man „wandert“ auf dem instabilen Ast wieder zurück.

⁷Es wird im folgenden nicht zwischen dem Extremum der Stromdichte und dem Wert am Ende des Astes unterschieden, da der Unterschied der beiden Werte minimal ist.

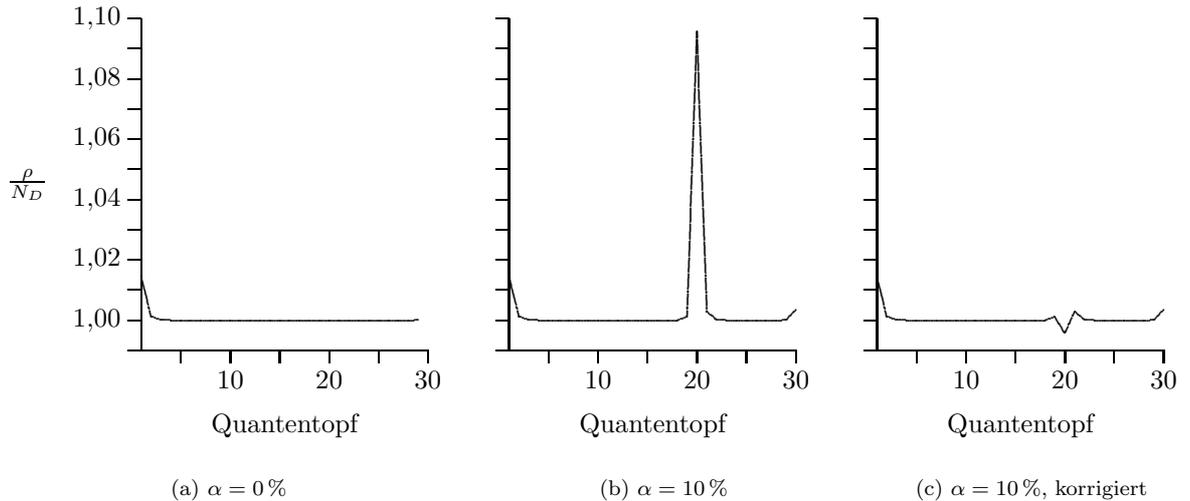


Abbildung 5.4: Veränderung der Elektronendichten bei Erhöhung der Störung. Es sind nur die Elektronendichten in den ersten 30 Quantentöpfe aufgetragen, da sich die Ladungsträgeransammlung im 32-ten Quantentopf befindet und die kleinen Effekte verdecken würde. **(a)** Ungestörtes Übergitter. **(b)** Gestörtes Übergitter mit $\alpha = 10\%$. **(c)** Wie Teilbild a, allerdings wurde von ρ die Dotierungsfluktuation im jeweiligen Quantentopf abgezogen. Man kann dann die Effekte sehen, die durch Aussage 3 beschrieben werden.

Über jedem Ast steht eine Zahl, die die normierte Abweichung der Dotierung in dem Quantentopf angibt, in dem sich für den betreffenden Ast die Ladungsträgeransammlung befindet⁸. Die ersten und letzten zwei Quantentöpfe wurden ausgelassen, da bereits bei einem ungestörten Übergitter (vergleiche Abbildung 4.2) die betreffenden Äste nicht beim „normalen“ Wert für die Stromdichte abbrechen.

Auch beim Zusammenspiel von Störungen in allen Quantentöpfen bleibt der lokale Zusammenhang von Stromdichte und Dotierung erhalten, wenngleich es einige Ausnahmen gibt, bei denen von einem Ast zum nächsten zum Beispiel die Dotierungsdichte etwas kleiner wird, die erreichte Stromdichte aber geringfügig steigt. Die Aussage 2 kann also als bestätigt angesehen werden.

Mit diesem Wissen ist auch möglich, aus der berechneten (vollständigen) Kennlinie eines Übergitters quantitativ das Ausmaß der Unordnung zu bestimmen. Zu diesem Zweck müssen nur die minimale und die maximale Stromdichte bestimmt werden, bei denen Äste abbrechen. Die betreffenden Werte können aus der Abbildung zu $j_{max} = 3,95 \text{ kA/cm}^2$ und $j_{min} = 3,39 \text{ kA/cm}^2$ abgelesen werden. Die Werte für die Stromdichte schwanken also um den Mittelwert $j_0 = 3,67 \text{ kA/cm}^2$ um $\Delta j = 0,28 \text{ kA/cm}^2$ oder umgerechnet 7,7%. Dieser Wert ist in sehr guter Übereinstimmung mit dem für die Berechnung verwendeten Wert von $\alpha = 8\%$ – durch eine einfache Korrektur⁹ ergibt sich sogar ein fast perfekt übereinstimmender Wert von $\alpha = 8,06\%$.

⁸In Wirklichkeit befindet sich die Ladungsträgeransammlung im „rechten“ Nachbartopf. Ob der Quantentopf, in dem sich die Ladungsträgeransammlung befindet, oder dessen Nachbartopf genommen werden muß, hängt davon ab, welcher Transportprozeß den Stromfluß durch das Übergitter letztendlich begrenzt. Um diese Frage beantworten zu können, muß man unter anderem wissen, ob der Transport in der Hochfeld- oder in der Niederfelddomäne effektiver ist, sowie an welcher Seite des Übergitters sich die Hochfelddomäne ausbildet. Diese Faktoren können im Rahmen einer allgemeinen, analytischen Herleitung selbstverständlich nicht berücksichtigt werden.

Will man auch für das hier verwendete Modell die Stromdichte eines Astes direkt mit dem Quantentopf verknüpfen, in dem sich für den betreffenden Ast die Ladungsträgeransammlung befindet, so muß statt des oberen Abbruchpunktes der untere betrachtet werden. Wie schon Abbildung 5.3 zeigte, ist die Verschiebung (sowohl Spannung als auch Stromdichte) des oberen Abbruchpunktes eines Astes gleich groß wie des unteren Punktes am rechts daneben liegenden Ast. Nicht zuletzt aus Darstellungsgründen werden im Text jedoch die oberen Abbruchpunkte untersucht.

⁹Eine Angabe eines bestimmten Wertes für α bedeutet nicht, daß es wirklich einen Quantentopf gibt, in dem die Dotierung um α größer ist, und einem, in dem diese um α kleiner ist. Vielmehr bedeutet dies, daß die Dotierungen in den einzelnen Quantentöpfen im Bereich von α kleiner bis α größer mehr oder weniger gleich verteilt sind. Wie schon Abbildung 5.5 zeigt, ist die größte Dotierung nur um $0,936\alpha$ größer als die Standarddotierung, und die kleinste nur um $0,958\alpha$ kleiner. Der „graphisch“ ermittelte Wert für α muß daher noch mit einem Faktor $2/(0,936 + 0,958)$ multipliziert werden. Im Normalfall werden die genauen Angaben über die Realisierung der Fluktuation nicht zur Verfügung stehen, womit dann statistische Verfahren zur Korrektur angewendet werden müssen.

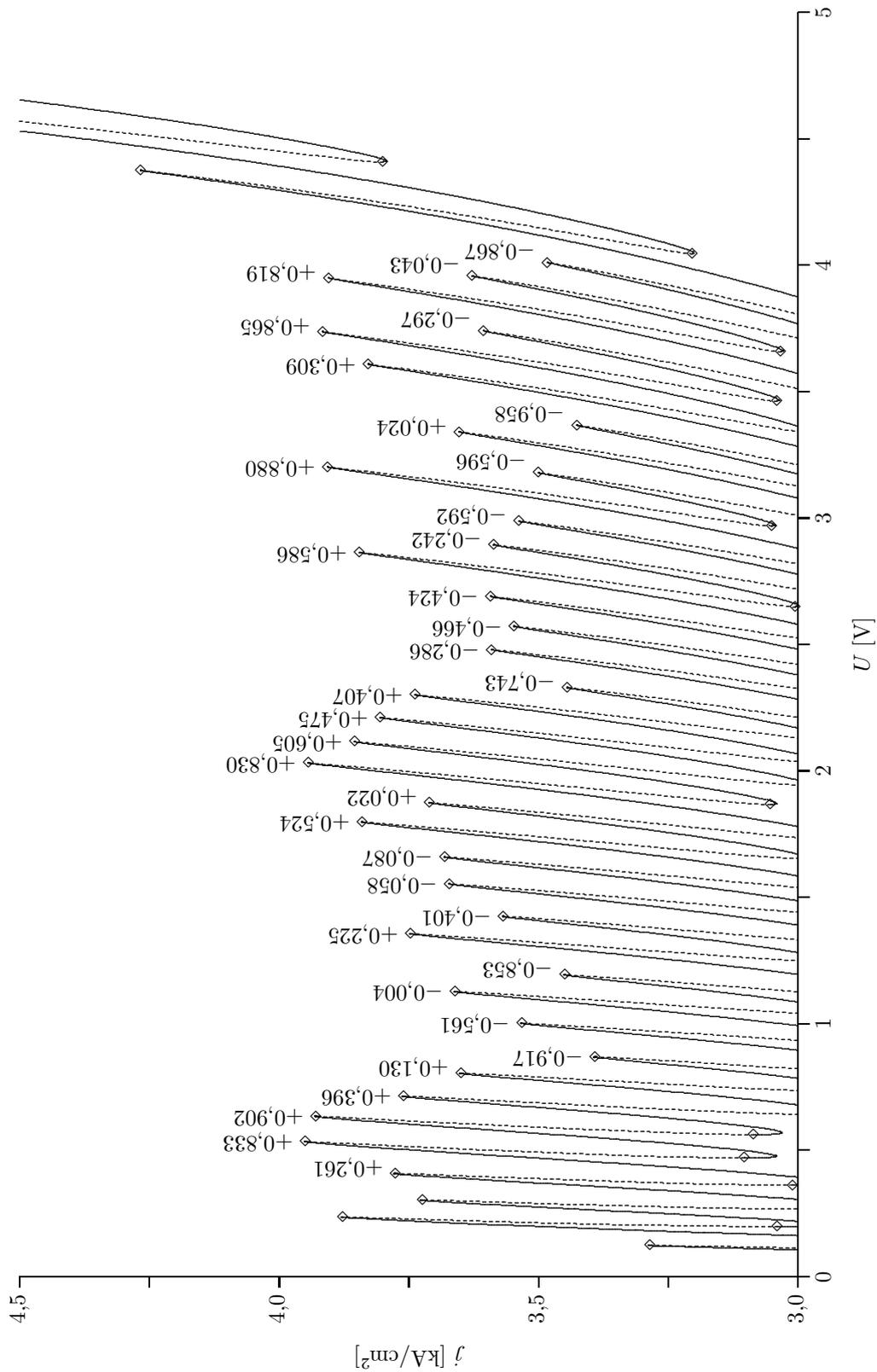


Abbildung 5.5: Kennlinie mit Dotierungsfluktuationen. Für jeden Ast ist eingezeichnet, wie die lokale Dotierung im betreffenden Quantentopf vom Durchschnittswert abweicht. Die Zahl muß mit dem Störungsgrad $\alpha = 8\%$ multipliziert werden, um die relative Abweichung nach oben bzw. nach unten zu erhalten.

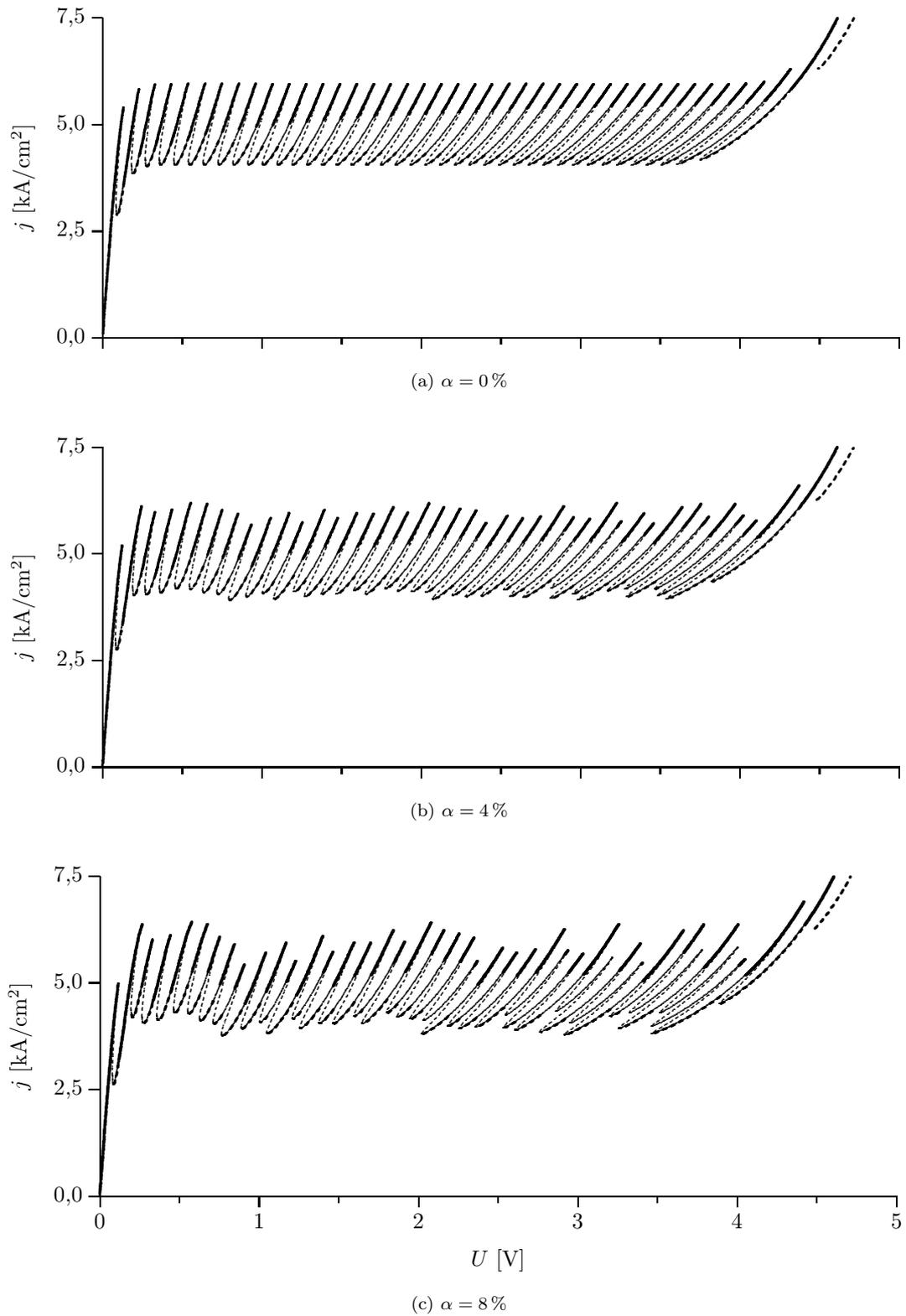


Abbildung 5.6: Gestörte Kennlinien mit eingezeichnetem Upsweep und Downsweep. Der Upsweep ist durch eine etwas dickere Linie markiert, der Downsweep zusätzlich durch Stricheln. Im Teilbild (c) erkennt man, daß einige Äste (bei höherer Spannung) weder vom Upsweep noch vom Downsweep erreicht werden.

5.3 Vergleich verschiedener Störungsstärken

In Abbildung 5.6 sind Kennlinien für drei verschiedene Werte von α dargestellt. Wie in den vorherigen Abschnitten bereits dargelegt, gibt es keinen qualitativen Unterschied der vollständigen Kennlinien (in normaler Strichdicke gezeichnet). Zusätzlich ist in den Abbildungen jedoch auch markiert, welche Kennlinie sich in der Simulation bzw. im Experiment ergibt. Der Upsweep und der Downsweep sind jeweils fetter eingezeichnet, zusätzlich wurde zur Unterscheidung zwischen Upsweep und Downsweep letzterer gestrichelt.

Vergleicht man die mit $\alpha = 4\%$ gestörte Kennlinie in Abbildung 5.6(b) mit der ungestörten in Abbildung 5.6(a), so sieht man, daß die beim Upsweep bzw. Downsweep erreichten Äste deutlich länger oder kürzer werden, obwohl sich die Gesamtlänge des Astes nur geringfügig verändert hat. Durch geeignetes Hin- und Herunterfahren der angelegten Spannung können jedoch weiterhin alle stabilen Äste auch in der Simulation vollständig erhalten werden.

Auch bei der Kennlinie mit $\alpha = 8\%$ hat sich die Struktur der vollständigen Kennlinie nicht qualitativ verändert. Bestimmte Äste können allerdings sowohl durch einen Upsweep als auch durch einen Downsweep nicht mehr erreicht werden, dies gilt auch für eine noch so geschickte Kombination von Upsweep- und Downsweep. Im Experiment wird dieser Ast damit nicht mehr beobachtet. Es ist allerdings durchaus denkbar, daß ein Ast nur bei einem Upsweep oder bei einem Downsweep ausgelassen wird, bei der anderen Richtung der Spannungsvariation jedoch erreicht wird.

Die Bedingung dafür, daß ein Ast beim Upsweep ausgelassen wird, ist, daß der rechte Abbruchpunkt (Sattel-Knoten-Bifurkation) bei einer kleineren Spannung liegt als der des links angrenzenden Astes. Analog wird ein Ast beim Downsweep ausgelassen, wenn dessen linker Abbruchpunkt bei einer größeren Spannung liegt als der des rechts angrenzenden Astes. Um zu überprüfen, ob bei einem bestimmten Störungsgrad α bereits Äste ausgelassen werden, ist es damit nicht notwendig, die Kennlinie für den betreffenden Wert von α tatsächlich zu berechnen. Ausreichend ist vielmehr eine Auftragung der Lage (Spannung U) der Sattel-Knoten-Bifurkationen in Abhängigkeit von α . Für praktische Zwecke ist dieses Verfahren jedoch wenig sinnvoll, da man wissen muß, welche Sattel-Knoten-

Bifurkationspunkten in einem Cusp-Punkt zusammenlaufen. Bei einer Auftragung in der $U-N_D$ -Ebene mit festem α ist diese Information vorhanden, weil dort der Cusp-Punkt erreicht wird. Bei einer Auftragung in der $U-\alpha$ -Ebene bei festem N_D ist dies jedoch nur dann Fall, wenn N_D gerade an der Grenze zur Astbildung liegt und α entscheidet, ob sich Äste bilden können oder nicht.

Aus diesem Grund wurde in Abbildung 5.7 die Darstellung in der $U-N_D$ -Ebene gewählt und die Lage der Bifurkationspunkte für zwei verschiedene Werte von α aufgetragen. Mittels dieser Diagramme kann geprüft werden, ob für den betreffenden Wert von α bei einer bestimmten Dotierung bereits Äste ausgelassen werden. Es ist unmittelbar einsichtig und wird auch durch Abbildung 5.6 bestätigt, daß Äste zuerst bei höheren Spannungen übersprungen werden. Da die Äste dann flacher sind, reichen kleinere relative Änderungen der Astlängen aus.

In Abbildung 5.7 sind auch die Positionen der Hopf-Bifurkationen eingezeichnet. Wie auch beim ungestörten Übergitter sind diese superkritisch. Damit gibt es genau im Innern der Hopf-Kurve ungedämpfte Oszillationen. Für diese wurden die Schwingungsfrequenzen und Amplituden in Abhängigkeit von den Parametern berechnet und in Abbildung 5.10 dargestellt. Wenn sich der oszillationsfähige Bereich verschiebt und verformt, so wird auch der Bereich, in dem Amplitude und Frequenz in der Darstellung ungleich Null sind, verschoben und verformt. Wenn man davon absieht, so verändern sich die Frequenzen und Amplituden bei Störung des Übergitters allerdings nur unwesentlich (vergleiche Abbildung 4.15 auf Seite 38).

Die Abbildungen 5.9 und 5.8 zeigen abschließend die Veränderung von Kennlinien bei verschiedenen Dotierungen mit wachsender Störung. Dargestellt sind jeweils die simulierte Kennlinie sowie der stabile Teil der durch Zweigverfolgung bestimmten. Wie man dort sehen kann, sind die prinzipiellen Effekte (Verschiebung der Äste usw.) bei allen untersuchten Dotierungen die selben. Zu Effekten wie dem Auslassen von Ästen bei der Simulation von Kennlinien sind – wie eben schon erwähnt – bei höheren Dotierungen jedoch kleine Werte für α ausreichend.¹⁰

¹⁰Dies ist der Grund, warum in dieser Arbeit durchgehend etwas höhere Dotierungen als zum Beispiel in [Sch95b] verwendet wurden. Diese Arbeit hat im Gegensatz zur eben erwähnten nicht das primäre Ziel, möglichst gute Übereinstimmung mit einer bestimmten experimentellen Probe zu erzielen, sondern allgemein die Auswirkungen von Störungen auf die Domänedynamik zu untersuchen.

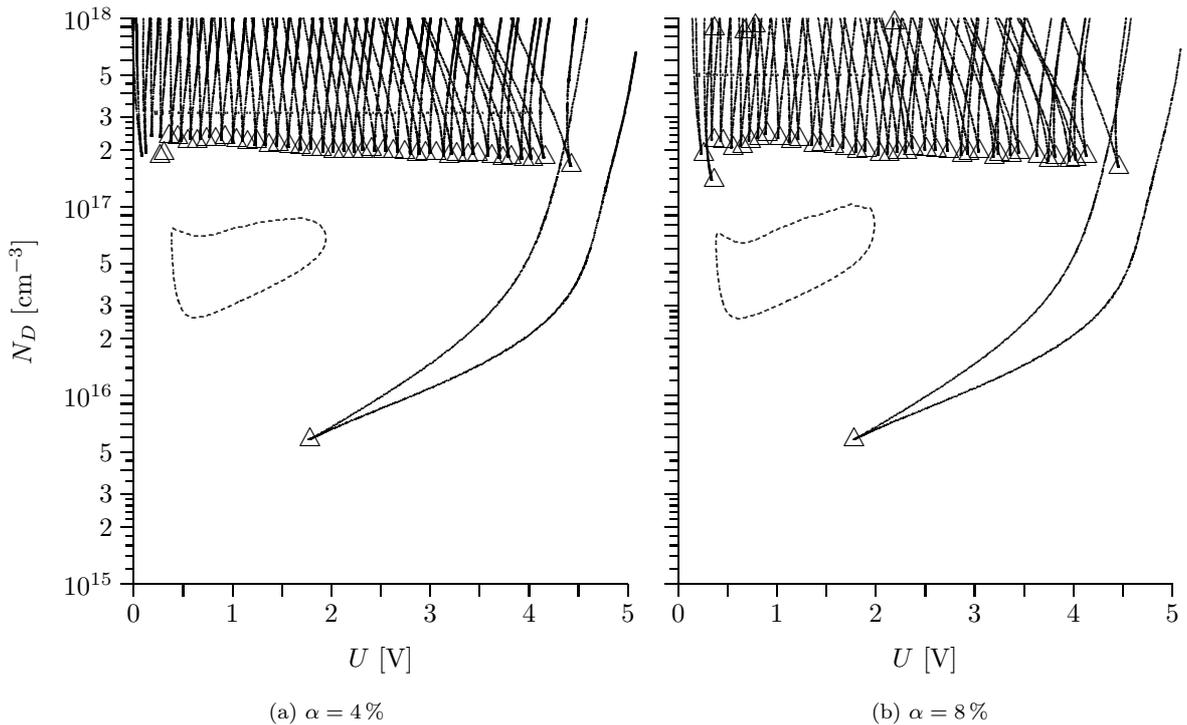


Abbildung 5.7: Lage der Bifurkationspunkte („Phasendiagramm“) für verschiedene Werte von α . Eine entsprechende Grafik für das ungestörte Übergitter befindet sich in Abbildung 4.22 auf Seite 43.

5.4 Vergleich verschiedener Fluktuationsrealisierungen

Im den Abschnitten 5.1 und 5.2 wurde gezeigt, daß es eine direkte Korrespondenz zwischen der lokalen Dotierung und den Ästen der Kennlinie gibt. Für hinreichend hohe Dotierung ist ein Vergleich verschiedener Fluktuationsrealisierungen damit trivial. Wichtig dagegen ist dieses für das Auftreten von Oszillationen.

Wie im vorgehenden Abschnitt gezeigt wurde, ändern sich die Schwingungsfrequenzen nur unwesentlich, wenn Übergitter mit verschiedenem Störungsgrad α verglichen werden. Auch die Amplituden ändern sich hauptsächlich dadurch, daß das Gebiet, in dem Oszillationen auftreten, verschoben und verformt wird. Die wichtige Frage ist also, wie sich dieses Gebiet ändert. Zweckmäßigerweise wird hierfür direkt die Lage der Hopf-Bifurkationen untersucht.

Um möglichst große Effekte zu erhalten, wird im folgenden $\alpha = 12\%$ gewählt. Bei dieser Störung ist die Aststruktur nicht mehr nur „leicht gestört“. Bei den hier betrachteten kleineren Dotierungen kann das Übergitter aber für die meisten untersuchten Fluktuationsrealisierungen noch als leicht gestört angesehen werden; insbesondere gilt dieses für die „Standardrealisierung“, die für die meisten Berechnungen in dieser Arbeit verwendet wurde.

Abbildung 5.11 zeigt das Phasendiagramm für vier verschiedene Fluktuationsrealisierungen. Die genauen Daten können im Anhang H gefunden werden. Gestrichelt ist in jede der Abbildungen die Kurve für das ungestörte Übergitter eingezeichnet. Wie man sofort sieht, unterscheiden sich die Auswirkungen der Störung für jeden der vier Fälle sehr stark. Dies betrifft zum einen die Form, zum anderen bereits das Ausmaß, indem überhaupt eine Veränderung stattfindet. So ändert sich die Kurve im Teilbild 5.11(c) beinahe überhaupt nicht.

Eine Zuordnung von Eigenschaften der Hopf-Kurve zu lokalen Werten der Dotierung ist im Gegensatz zu der Betrachtung von Kennlinien mit Ästen jedoch nicht möglich. Wie bereits im Abschnitt 4.6 festgestellt wurde, umfaßt eine Oszillation einen Bereich von etwa 15 Übergitterperioden. Durch Betrachtung von Oszillationen können daher nur gemittelte Informationen erhalten werden.

Trotzdem soll zunächst untersucht werden, welche Effekte einzelne Quantentöpfe haben, wenn in ihnen die Dotierung erhöht ist. Abbildung 5.12 zeigt dies für verschiedene Quantentöpfe. Mit steigender Spannung dehnt sich die Hochfelddomäne, die bei den hier betrach-

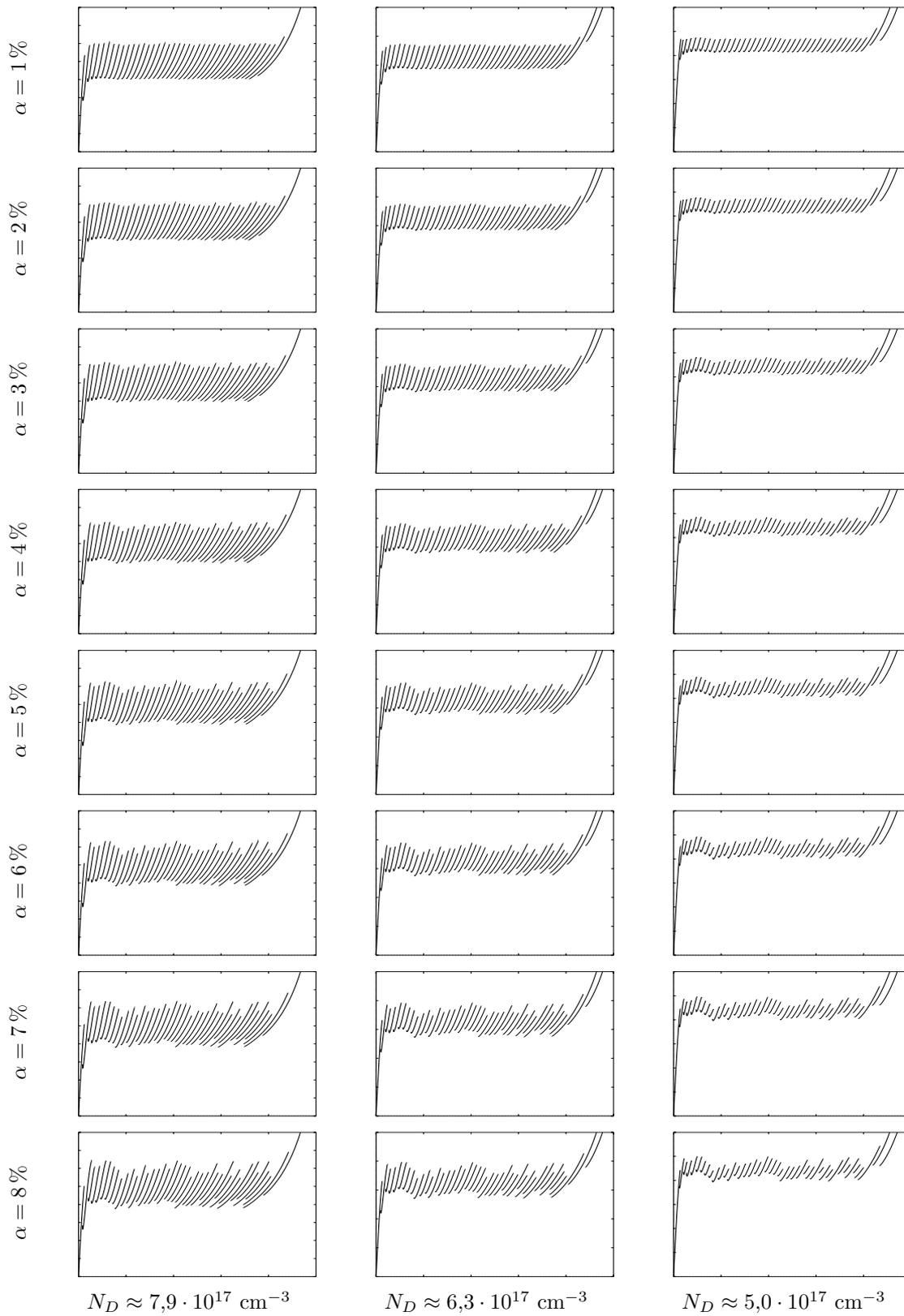


Abbildung 5.8: Stabile Teile der durchgehenden Kennlinien für verschiedene α bei unterschiedlichen Dotierungen. x-Achse: U [V] (0 – 5), y-Achse: j [kA/cm²] (0 – 8/0 – 5/0 – 3). Die Länge der Äste verändert sich mit der Dotierung, nicht aber die „Unregelmäßigkeit“ der oberen und unteren Abbruchpunkte.

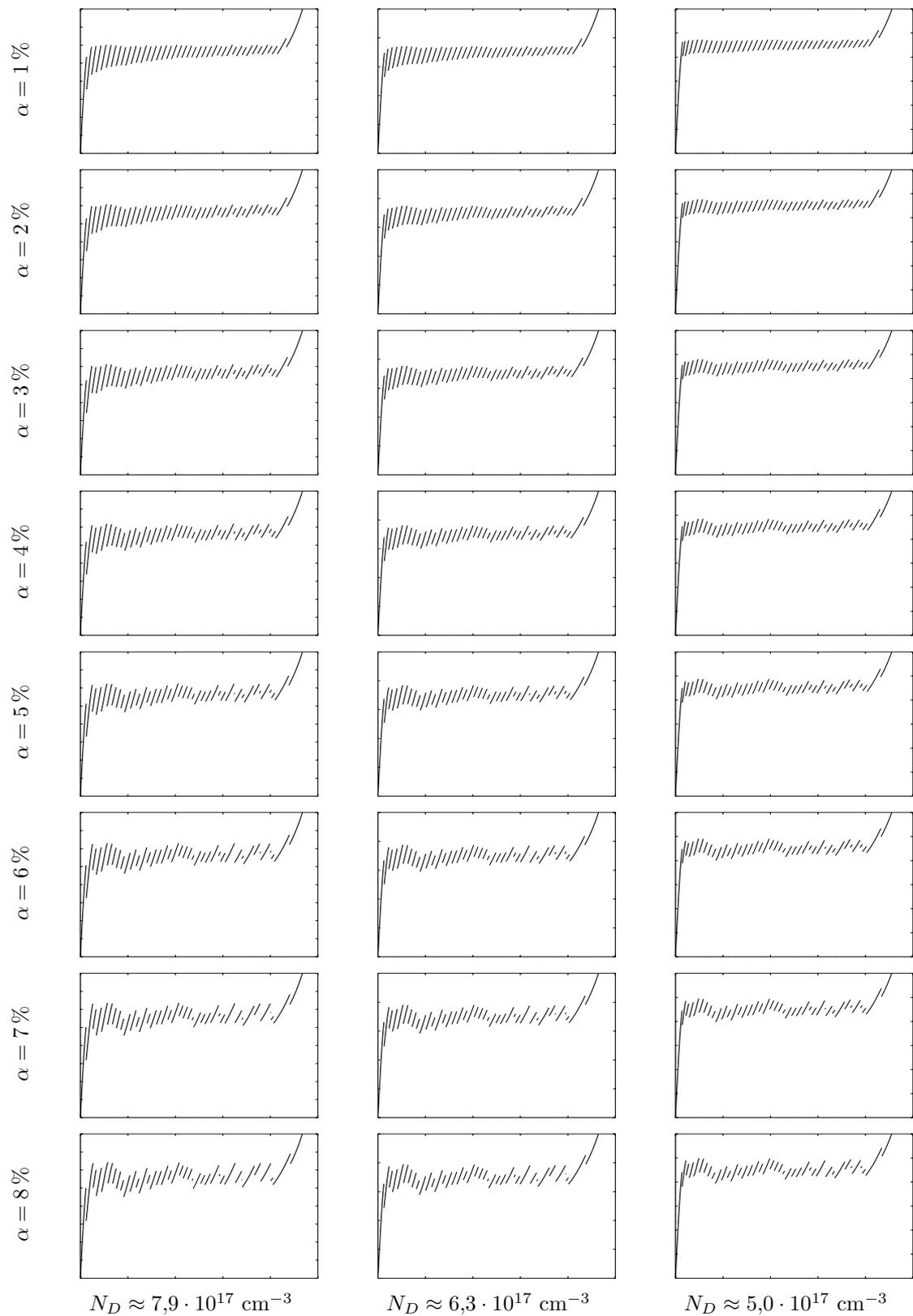


Abbildung 5.9: Simulierter Upsweep der Kennlinie für verschiedene α bei unterschiedlichen Dotierungen, ansonsten wie Abbildung 5.8. Im Gegensatz zur durchgehenden Kennlinie ist hier die Dotierung insbesondere für das Überspringen einzelner Äste sehr bedeutsam.

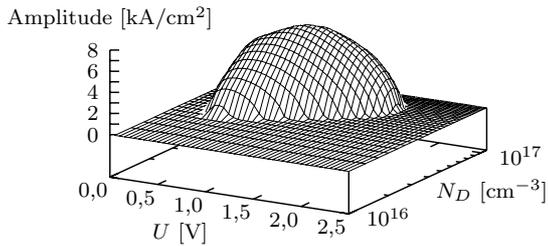
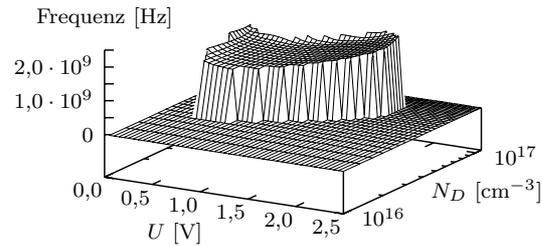
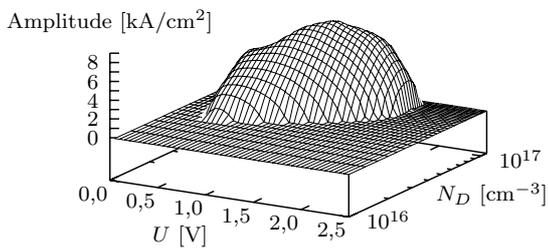
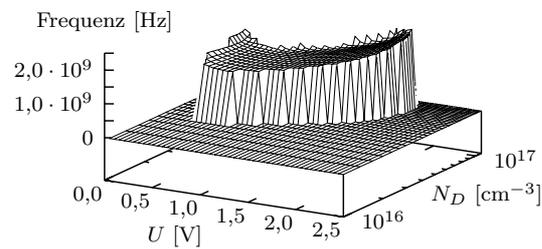
(a) Amplitude für $\alpha = 4\%$ (b) Frequenz für $\alpha = 4\%$ (c) Amplitude für $\alpha = 8\%$ (d) Frequenz für $\alpha = 8\%$

Abbildung 5.10: Abhängigkeit der Schwingungsamplitude und Schwingungsfrequenz von Dotierung und Spannung.

teten Dotierungen allerdings sehr „verwaschen“ ist (siehe Abbildung 4.21 auf Seite 42), von der Anode startend aus. Damit ist zu erwarten, daß Quantentöpfe mit großen Nummern primär Auswirkungen bei kleinen Spannungen haben, und umgekehrt Quantentöpfe mit kleinen Nummern primär Auswirkungen bei großen Spannungen. Tendenziell wird dies auch durch die Abbildung bestätigt. Bei Quantentopfnummern kleiner als etwa 15 gibt es jedoch einen überlagerten Effekt: Wie schon Abbildung 4.7(d) auf Seite 32 zeigte, entstehen Oszillationen dadurch, daß sich an der Kathodenseite eine kleine Ladungsträgeransammlung bildet, die zur Anodenseite wandert und dabei immer stärker wird. Störungen nahe an der Kathodenseite (kleine Quantentopfnummern) machen sich also weniger bemerkbar, weil die Ladungsträgeransammlung in diesem Quantentopf nur schwach ausgeprägt ist. Damit ergibt sich, daß es einen bestimmten Quantentopf gibt, dessen Störung dazu führt, daß sich das oszillationsfähige Gebiet am meisten zu hohen Spannungen hin ausdehnt. Bei kleineren Quantentopfnummern kommt es weiterhin zu einer Verschiebung in Richtung höhere Spannungen, die aber nicht so stark ist. Diese Grenze liegt etwa zwischen

dem 17-ten und dem 18-ten Quantentopf (siehe auch Abbildung 5.14).

Vergleichbares ergibt sich auch für den Fall, daß die Dotierung lokal verringert wird (Abbildung 5.13). Betrachtet man die Folge für den 35-ten bis zum 20-ten Quantentopf, so ergibt sich eine monotone Veränderung. Etwa ab dem 15-ten Quantentopf wird der Effekt wieder kleiner. Die Details der Abbildung sind allerdings schwerer zu erklären als für den Fall der lokal erhöhten Dotierung. Tendenziell sind die Effekte der lokalen Verringerung der Dotierung in einem Quantentopf allerdings entgegengesetzt denjenigen bei einer Erhöhung der Dotierung.

Abbildung 5.14 zeigt den Effekt, wenn nicht nur die Dotierung in einem Übergitter, sondern gleichzeitig in zwei benachbarten erhöht ist. Gewählt wurden der 17-te und der 18-te Quantentopf. Bei diesen führt die Erhöhung der Dotierung zu einem weiteren Ausdehnen der Hopf-Kurve zu höheren Spannungen hin als bei allen anderen Quantentöpfen. Durch die Überlagerung der beiden Störungen kommt es zu einer weiteren Ausdehnung zu höheren Spannungen, als es durch eine Störung alleine geschieht. Al-

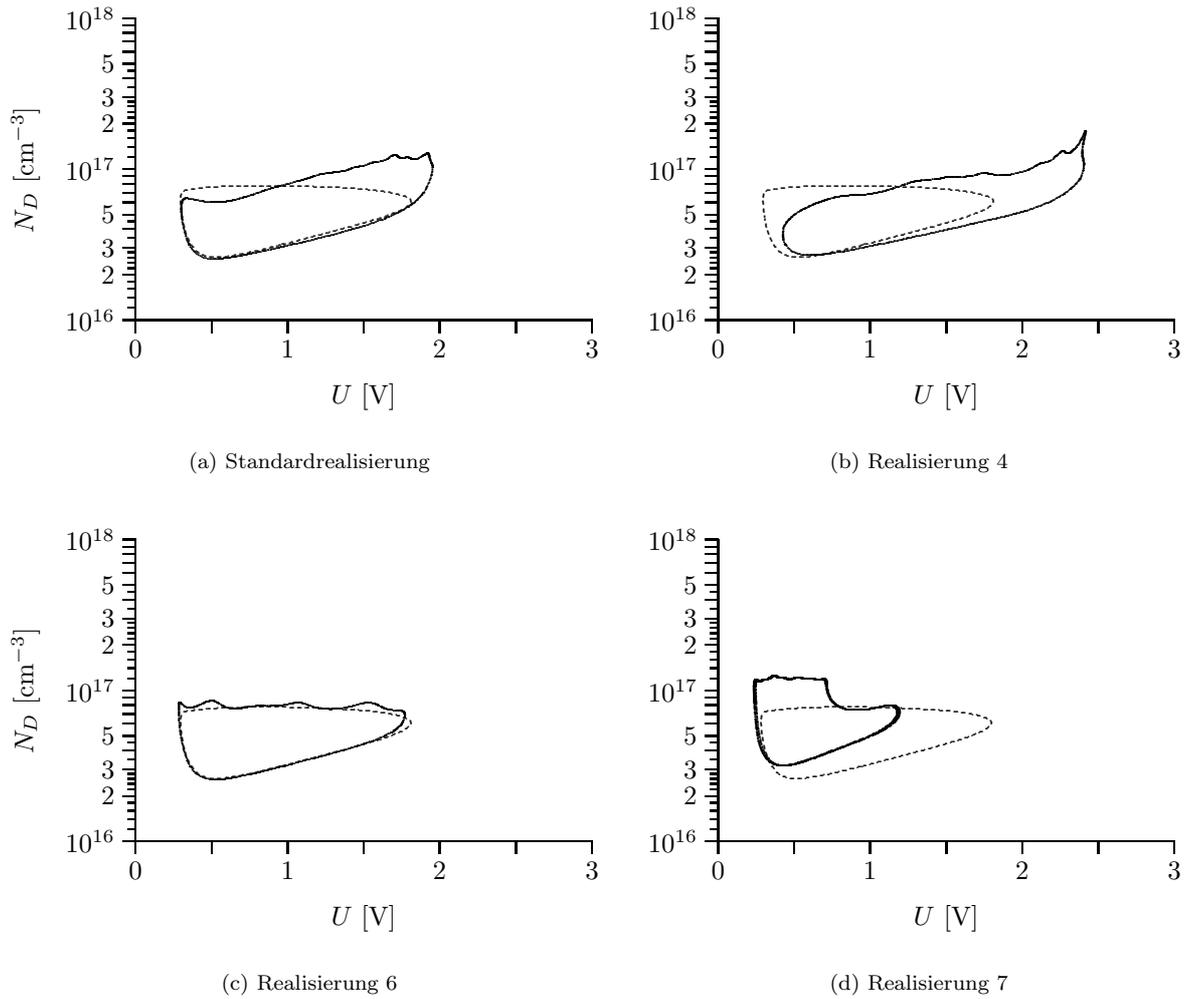


Abbildung 5.11: Vergleich der Oszillationsbereiche bei verschiedenen Fluktuationsrealisierungen. Die Lage der Hopf-Bifurkationen bei $\alpha = 12\%$ ist mit durchgezogenen Linien eingezeichnet; die gestrichelte Linie stellt die Lage für das ungestörte Übergitter dar. **(a)** Standardrealisierung, die für die meisten Abbildungen in dieser Arbeit verwendet wurde. **(b)-(d)** Andere Realierungen, genaue Daten siehe Anhang H.

lerdings verformt sich die neue Kurve deutlich und erreicht höhere Werte für N_D . Dieser Effekt ist bei den beiden Einzelstörungen nicht vorhanden.

Durch die Untersuchung einzelner Störung können zwar gewisse Eigenschaften der Kurven aus Abbildung 5.11 wie zum Beispiel das Plateau aus Teilbild 5.11(d) erklärt werden. Durch das Zusammenwirken entstehen jedoch weitere Verformungen, außerdem können sich die Auswirkungen lokal zu großer und zu kleiner Dotierung aufheben. Wie das Teilbild 5.11(c) zeigt, ist neben einer Aussage über lokale Eigenschaften der Dotierung auch eine über einen „globalen“ Wert

für α unmöglich. Die Untersuchung von Oszillationen zwecks Bestimmung von α ist daher auf dem momentanen Stand der Theorie nur wenig hilfreich.

Dies wird sich auch mit einem „perfekten“ Modell nicht ändern: Oszillationen sind im Übergitter nicht in einem oder zwei Quantentöpfen lokalisiert, sondern werden von vielen Quantentöpfen gleichzeitig beeinflusst. Hierdurch wird sich der größte Teil der Effekte, die von den einzelnen Quantentöpfen verursacht werden, herausmitteln. Eine Untersuchung der Aststruktur hat diese prinzipiellen Probleme nicht.

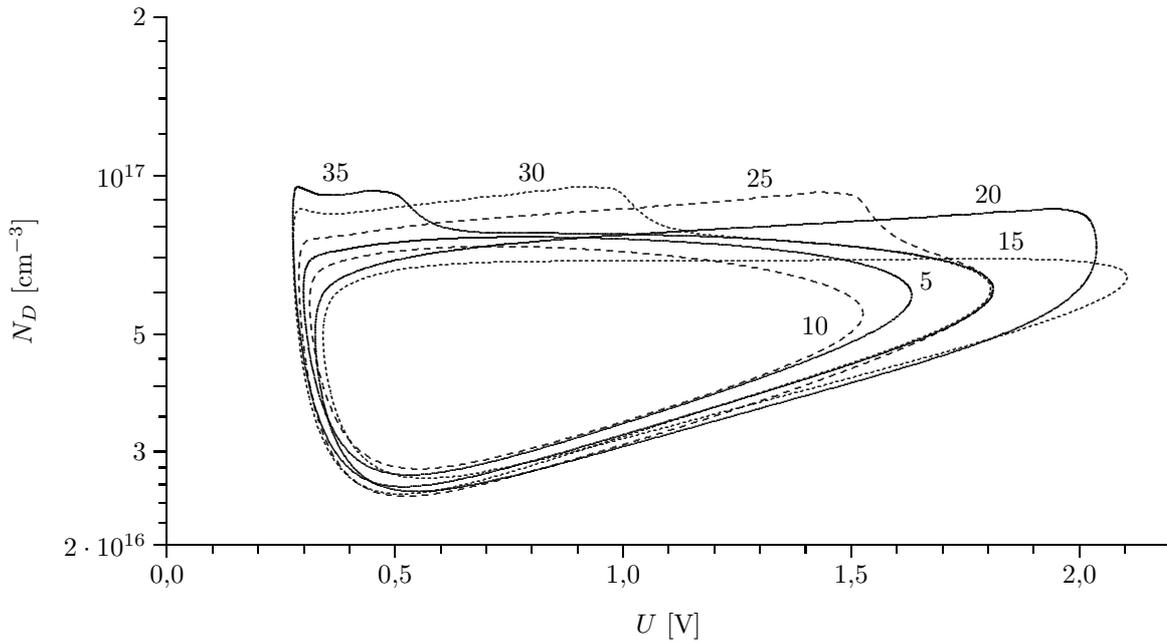


Abbildung 5.12: Lage der Hopf-Bifurkationspunkte („Phasendiagramm“) für verschiedene Übergitter, bei denen in jeweils einem Quantentopf die Dotierung um 12% erhöht ist. Die Zahlen an den Kurven geben die Nummer des betreffenden Quantentopfs an.

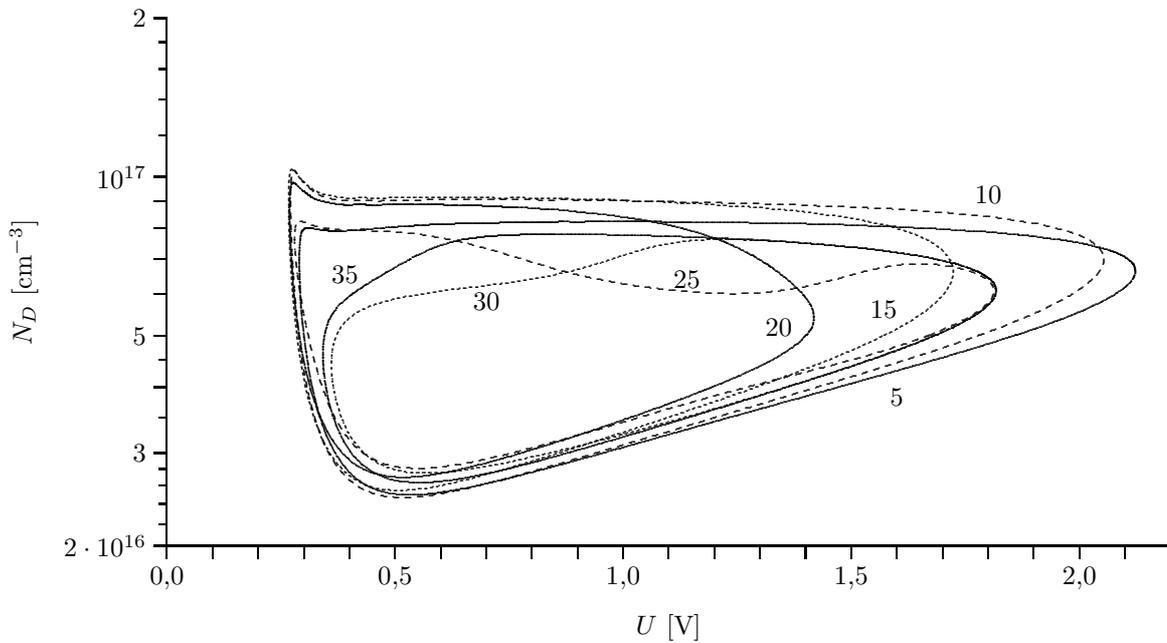


Abbildung 5.13: Lage der Hopf-Bifurkationspunkte („Phasendiagramm“) für verschiedene Übergitter, bei denen in jeweils einem Quantentopf die Dotierung um 12% verringert ist. Die Zahlen an den Kurven geben die Nummer des betreffenden Quantentopfs an.

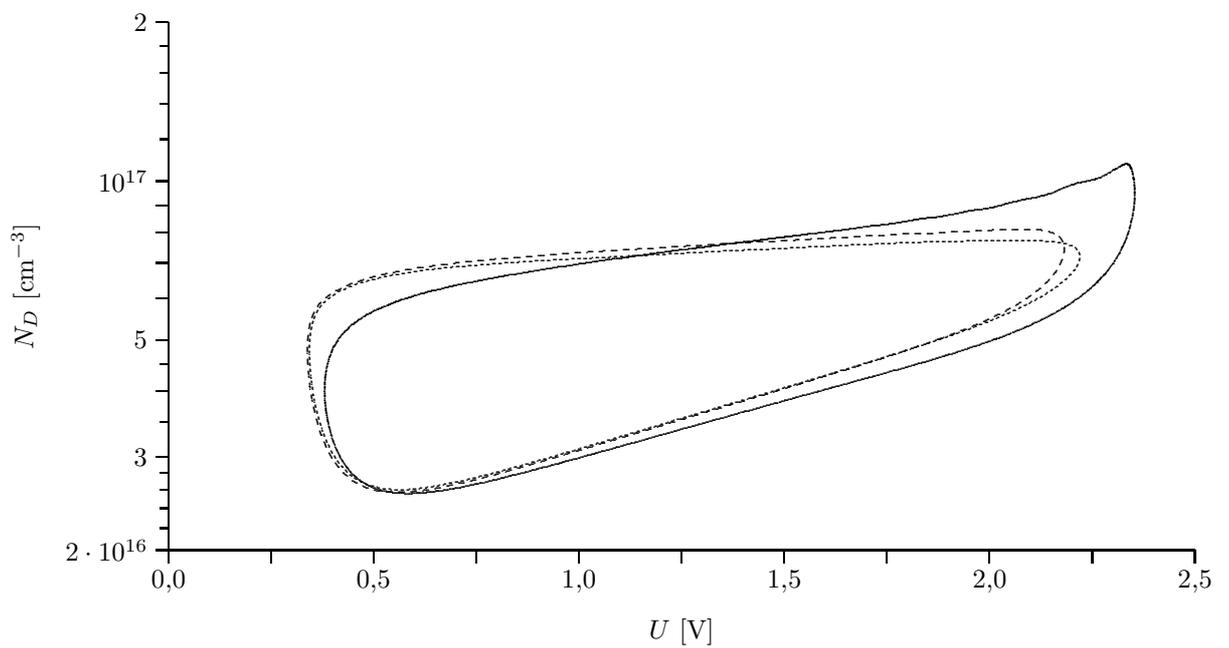


Abbildung 5.14: Lage der Hopf-Bifurkationspunkte („Phasendiagramm“) für ein Übergitter, bei dem die Dotierung in zwei Quantentöpfen verändert ist. Bei der mit kurzen Strichen markierten Kurve ist die Dotierung im 17-ten Quantentopf um 12% erhöht, bei der mit langen Strichen markierten die im 18-ten Quantentopf. Die durchgezogene Kurve ist die für ein Übergitter, bei dem die beiden eben erwähnten Störungen gleichzeitig vorhanden sind.

Kapitel 6

Stark gestörte Kennlinie

Wie bereits im Kapitel über die „Leicht gestörte Kennlinie“ angedeutet wurde, kommt es bei Erhöhung des Störungsgrades α über einen gewissen Wert hinaus zu einer *qualitativen* Veränderung der Struktur der Kennlinie. Diese soll jetzt untersucht werden.

Betrachtet man eine gestörte Kennlinie, so stellt sich unmittelbar die Frage, wie deren einzelnen Teile (stabile Äste, instabile Äste, Bifurkationspunkte) mit denen der ungestörten Kennlinie zusammenhängen. Für leicht gestörte Kennlinien ist dieser Zusammenhang sehr einfach und wird durch die analytisch hergeleiteten Aussagen des Abschnitts 5.1 beschreiben.

Bei stärkeren Störungen ist dieser Zusammenhang nicht mehr so direkt zu beschreiben. Die Frage, welche „ungestörten Teile“ zu den entsprechenden der gestörten Kennlinie gehören, und die Frage, welche „gestörten Teile“ zu den entsprechenden der ungestörten Kennlinie gehören, sind jetzt nicht mehr äquivalent und sollen auch getrennt behandelt werden.

6.1 Ungestörte Kennlinie als Ausgangspunkt

Will man bestimmen, wie ein Zustand für einen Wert von α mit dem für einen anderen Wert von α zusammenhängt ist, so ist es meistens nicht sinnvoll, einfach α „hochzufahren“. Bereits im Kapitel 5 wurden deshalb nur Bifurkationspunkte betrachtet, bei denen nicht nur α , sondern auch die Spannung U derart verändert wurden, daß die Bifurkationsbedingung weiterhin erfüllt wurde. Dieses gilt für stark gestörte Übergitter erst recht.

Für die Untersuchungen in diesem Abschnitt wird von einer ungestörten Kennlinie (bzw. von einem Ausschnitt von ihr) ausgegangen. Die Sattel-Knoten-Bifurkationspunkte wurden der Reihenfolge ihrer Berechnung (d. h. in der Reihenfolge, wie sie auf der durchgehenden Kennlinie liegen) durchnummeriert. Auf eine entsprechende Abbildung soll hier verzichtet werden. Für diese Bifurkationspunkte wird nun α unter Anpassung von U von 0 % auf 10 % erhöht.

Als nächstes wird ein entsprechender Ausschnitt der gestörten Kennlinie (für $\alpha = 10\%$) berechnet. Nun kann verglichen werden, inwieweit die eben berechneten Bifurkationspunkte für $\alpha = 10\%$ mit denen der gestörten Kennlinie für $\alpha = 10\%$ übereinstimmen. Das Ergebnis

ist in Abbildung 6.1 dargestellt, Abbildung 6.2 zeigt eine Vergrößerung des interessanten Bereichs.

Zuerst einmal erkennt man, daß der größere Teil des Kennlinienausschnitts denen aus dem Kapitel über leicht gestörte Übergitter ähnelt. Auch läßt sich jedem Bifurkationspunkt der ungestörten Kennlinie einer der gestörten zuordnen. Die Mitte des Kennlinienausschnitts zeigt jedoch das Vorhandensein weiterer Zustände, die nicht durch Zustände der ungestörten Kennlinie erklärbar sind. Es sei daran erinnert, daß die gesamte dargestellte Kurve eine *einzig*e durchgezogene Linie ist. Das „Gewirr“ in der Mitte des Ausschnitts liegt zwischen den mit „12“ und „13“ bezeichneten Bifurkationspunkten. Wenn man also rechts startet, durchläuft man bis zur „13“ Zustände, die zur ungestörten Kennlinie gehören, danach das Gewirr, gelangt zur „12“ und läuft dann wieder auf zur ungestörten Kennlinie gehörenden Zustände weiter bis zum linken Rand.

Insbesondere der vergrößerte Ausschnitt in Abbildung 6.2 zeigt, daß es eine Vielzahl weiterer Äste – nur ein kleiner Teil von ihnen ist stabil – gibt, die nicht durch die ungestörte Kennlinie

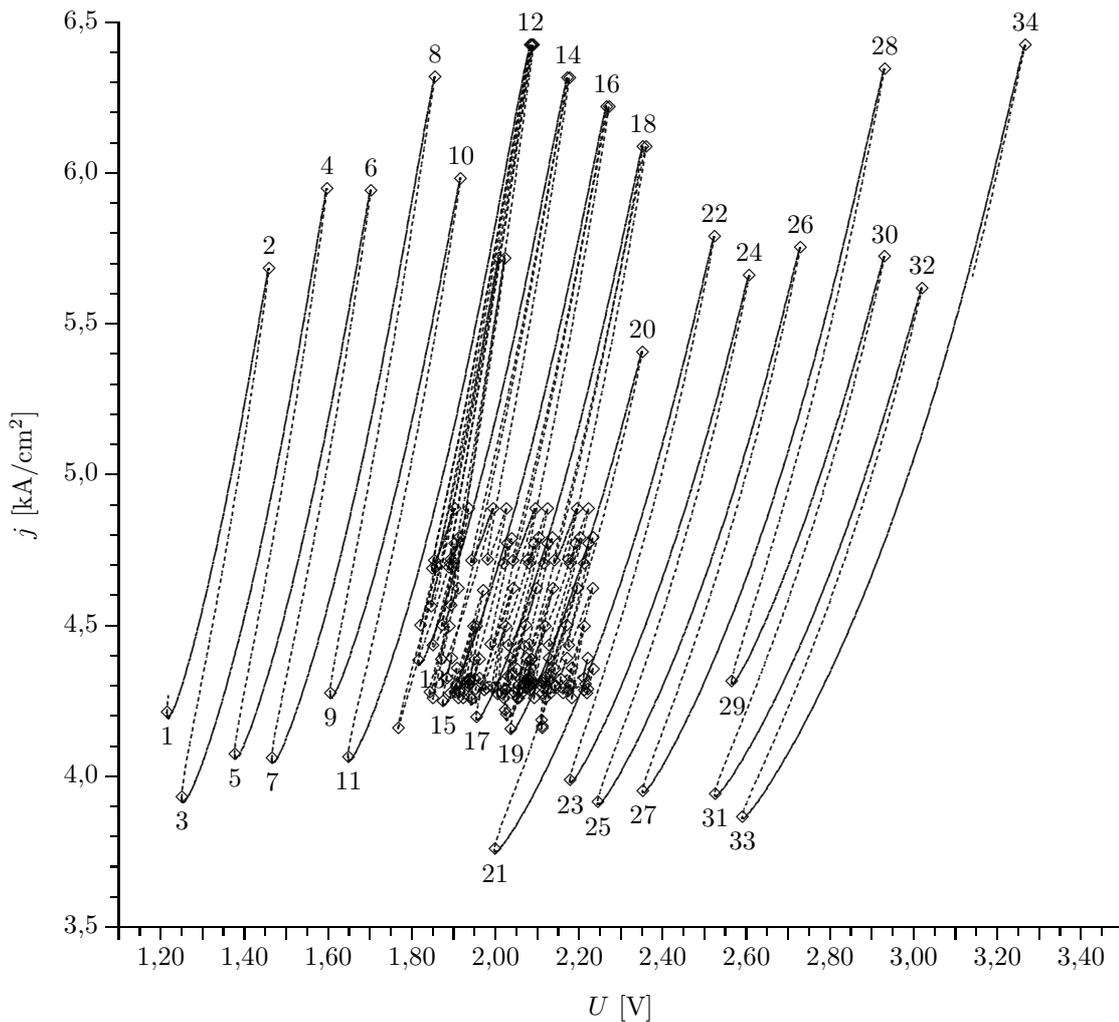


Abbildung 6.1: Gestörte Kennlinie bei $\alpha = 10\%$. Die Sattel-Knoten-Bifurkationspunkte des zugehörigen Ausschnitts der ungestörten Kennlinie werden durchnummeriert und die entsprechenden Bifurkationspunkte der gestörten Kennlinie mit der gleichen Zahl bezeichnet. Der dargestellte Kennlinienausschnitt besteht aus einer einzigen durchgehenden Kurve; das eingeschobene „Gewirr“ liegt zwischen den Bifurkationspunkten mit den Nummern „12“ und „13“. Letzterer Teil der Kennlinie ist in Abbildung 6.2 vergrößert dargestellt.

erklärbar sind. Es muß im folgenden Abschnitt damit untersucht werden, was mit diesen „zu-

sätzlichen“ Zuständen geschieht, wenn α kleiner gemacht wird.

6.2 Gestörte Kennlinie als Ausgangspunkt

Bisher wurde nur die Form der Kennlinien verglichen. Für eine „physikalische“ Interpretation müssen jedoch auch die Feldverteilungen betrachtet werden. Im folgenden soll daher zuerst die Veränderung der Feldverteilung mit α für zwei verschiedene Zustände untersucht werden, nämlich für einen, der mit der „normalen“ ungestörten Kennlinie verbunden ist, und für einen, für den das nicht der Fall ist. Damit man zwei nicht zu weit von einander „entfernte“ Zustände betrachtet, sollte man Zustände wählen, die möglichst dicht an der Übergangsstelle liegen, d. h., als mit der ungestörten Kennlinie ver-

bundenen Zustand sollte man einen der beiden Punkte „12“ oder „13“ aus Abbildung 6.2 untersuchen. Diese beiden Punkte haben jedoch den Nachteil, daß sie bei Verringerung von α nicht „direkt“ in den entsprechenden Punkt der ungestörten Kennlinie übergehen, sondern den „Umweg“ über einen Cusp-Punkt machen. Dies ist kein prinzipielles Problem, verhindert aber, daß direkt α zur Parametrisierung der berechneten Daten verwendet werden kann. Aus diesem Grund wurde der mit „10“ bezeichnete Bifurkationspunkt ausgewählt. Ähnliche Probleme gibt es bei der Auswahl eines Bifurkationspunkt, für

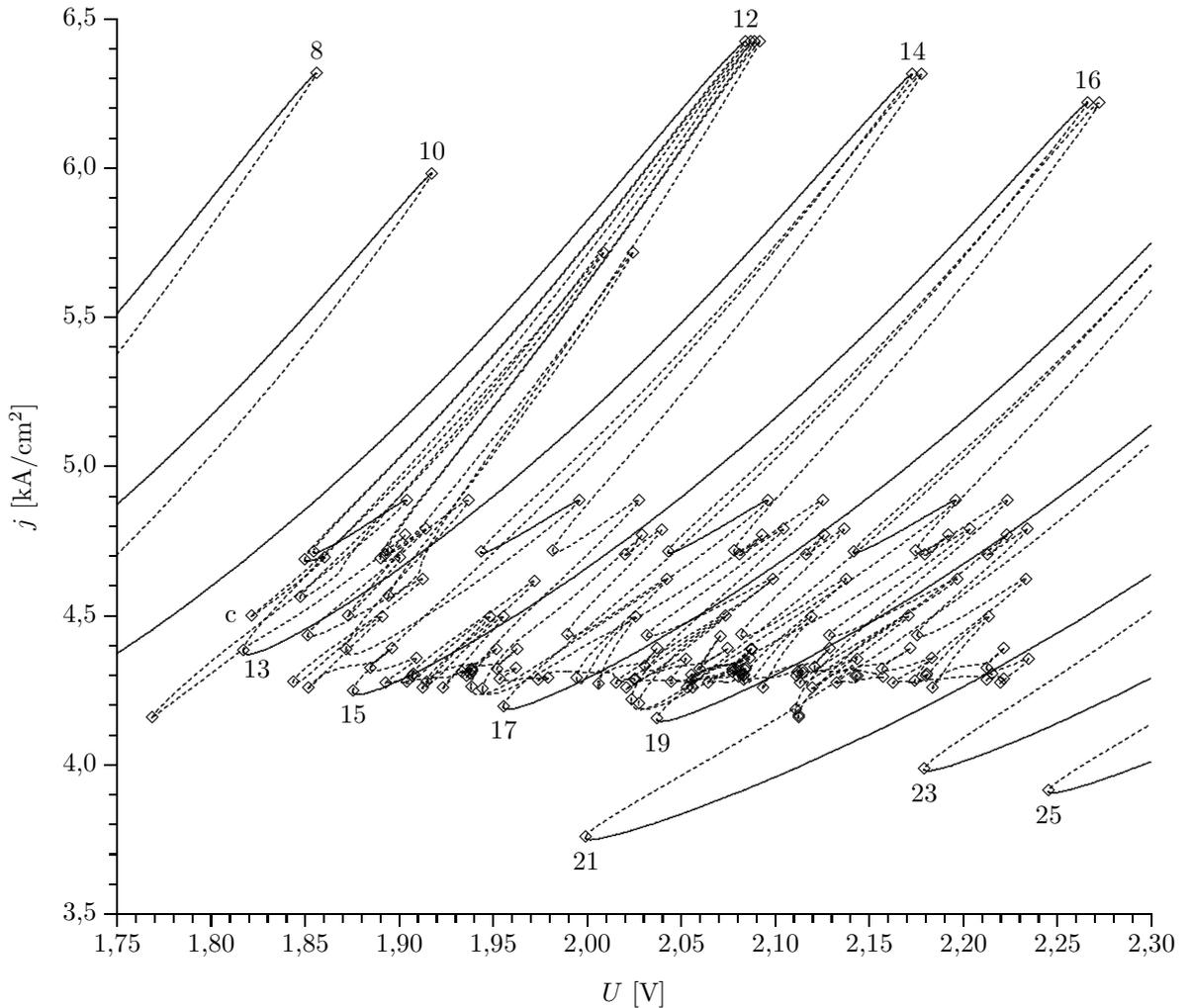


Abbildung 6.2: Gestörte Kennlinie (Vergrößerter Ausschnitt aus Abbildung 6.1).

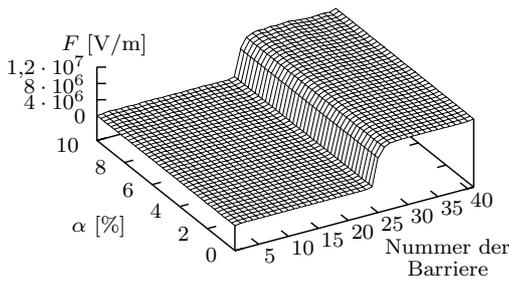
den es keinen Zusammenhang mit einem Bifurkationspunkt der ungestörten Kennlinie gibt. Hier fiel die Wahl auf den in Abbildung 6.2 mit einem „c“ bezeichneten Datenpunkt (zur Orientierung: Dieser Punkt liegt kurz über der „13“. Er ist der dritte Punkt von der „Grenze“ aus gesehen.).

Abbildung 6.3 zeigt das Ergebnis der Berechnung. Als erstes erkennt man, daß die Aussage 1 aus dem Abschnitt 5.1 für beide betrachteten Zustände gleichermaßen gilt: Die Veränderung der Elektronendichten mit steigender Störung ist also ein direktes Abbild der Störungsrealisierung. Die Feldverteilung im Teilbild 6.3(a) ist, genau wie erwartet, eine „normale“ Felddomäne, während die im Teilbild 6.3(b) stark an die „seltsamen“ Zustände aus dem Abschnitt 4.7 erinnert.

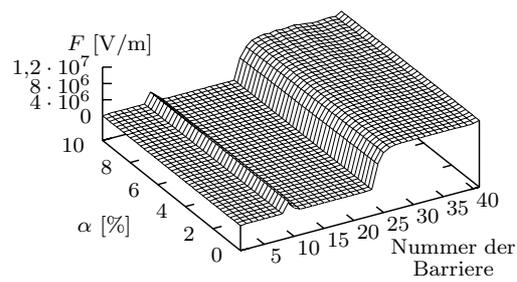
Es ist also zu vermuten, daß „seltsame“ stationäre (aber fast immer instabile) Lösungen des ungestörten Übergitters eine Rolle für die (durchgehende) Kennlinie des gestörten spielen.

Dies kann wie folgt bewiesen werden: Es wird von der gestörten Kennlinie ausgegangen und für jeden Bifurkationspunkt der entsprechende Punkt bei $\alpha = 0\%$ bestimmt. Auf Grund der hohen Zahl von Bifurkationspunkten muß man sich allerdings auf einen kleineren Ausschnitt der Kennlinie beschränken, als dieses im letzten Abschnitt geschehen ist.

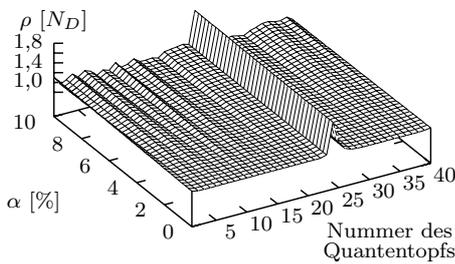
In Abbildung 6.4 ist ein solcher Ausschnitt für $\alpha = 10\%$ gezeichnet. Für jeden Bifurkationspunkt wurde α von 10% auf 0% gesenkt und der entsprechende Punkt bei $\alpha = 0\%$ bestimmt. Bei einigen Bifurkationspunkten war dieses nicht möglich, da sie mit einem anderen Bifurkationspunkt in einem Cusp-Punkt zusammenliefen. Die beiden Bifurkationspunkte wurden dann mit dem selben Buchstaben bezeichnet. Bei wieder einigen anderen konnte der Zusammenhang wegen numerischer Probleme nicht exakt bestimmt werden, es ist aber sehr wahrscheinlich, daß diese auch in einem Cusp-



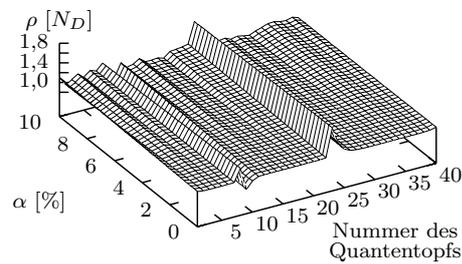
(a) Feldstärke von „10“



(b) Feldstärke von „c“



(c) Elektronendichte von „10“



(d) Elektronendichte von „c“

Abbildung 6.3: Veränderung von Feldstärken und Elektronendichten mit steigender Störung α . Oben sind die Feldstärken und unten die Elektronendichten dargestellt, links der für einen Zustand auf der „normalen“ Kennlinie (in Abbildung 6.2 als „10“ bezeichnet) und rechts der für ein „seltsames“ Stück der Kennlinie (in Abbildung 6.2 als „c“ bezeichnet).

Punkt zusammenlaufen¹ (zum Beispiel die kleinen Äste zwischen „D“ und „C“). Für die meisten Bifurkationspunkte bei $\alpha = 10\%$ existiert jedoch ein entsprechender Zustand bei $\alpha = 0\%$. Die betreffenden Zustände bei $\alpha = 10\%$ sind durchnummeriert (die Numerierung stimmt nicht mit der im vergangenen Abschnitt überein). In den nachfolgenden Abbildungen sind Kennlinienstücke dargestellt, die die entsprechenden Bifurkationspunkte bei $\alpha = 0\%$ enthalten, wobei die Bifurkationspunkte mit der selben Zahl wie in Abbildung 6.4 markiert sind.

In den Abbildungen 6.6 oder 6.5 sind die „Zielzustände“ für $\alpha = 0\%$ dargestellt. Bei der Kurve in Abbildung 6.6 handelt es sich – wie zu

erwarten war – um die „normale“ ungestörte Kennlinie. Die „Kennlinien“ in Abbildung 6.5 sind dagegen eindeutig „seltsame“ Kennlinienstücke, wie sie im Abschnitt 4.7 behandelt wurden. Das Aussehen und die Feldverteilung aus Abbildung 6.3(b) stimmen also exakt mit dem Typ (d) in den Abbildungen 4.25 und 4.26 auf Seite 46 ein. Die Feldverteilung in Abbildung 6.3(b) und die Form der Kennlinienstücke bei $\alpha = 0\%$ ist charakteristisch für die Zustände, die zum „Gewirr“ in der stark gestörten Kennlinie gehören. Insgesamt wurde dieser Vorgang für über 200 Datenpunkte durchgeführt, ohne daß auch nur einmal ein andersartiger Zustand erhalten wurde.

¹Ein Cusp-Punkt wird nicht durch eine einfache Eigenwertbedingung definiert wie zum Beispiel eine Hopf-Bifurkation oder eine Sattel-Knoten-Bifurkation. Bei letzteren werden neben der „bekannten“ Eigenwertbedingung nur Nichtentartungen höherer Koeffizienten gefordert. Für einen Cusp-Punkt ist das Verschwinden höherer Terme jedoch essentiell, da dies sein einziger Unterschied im Vergleich zu einer einfachen Sattel-Knoten-Bifurkation ist. Bei einem solch hochdimensionalen Problem lassen sich jedoch Konvergenzprobleme bei komplexen Bedingungen nicht vermeiden (vergleiche Anhang F).

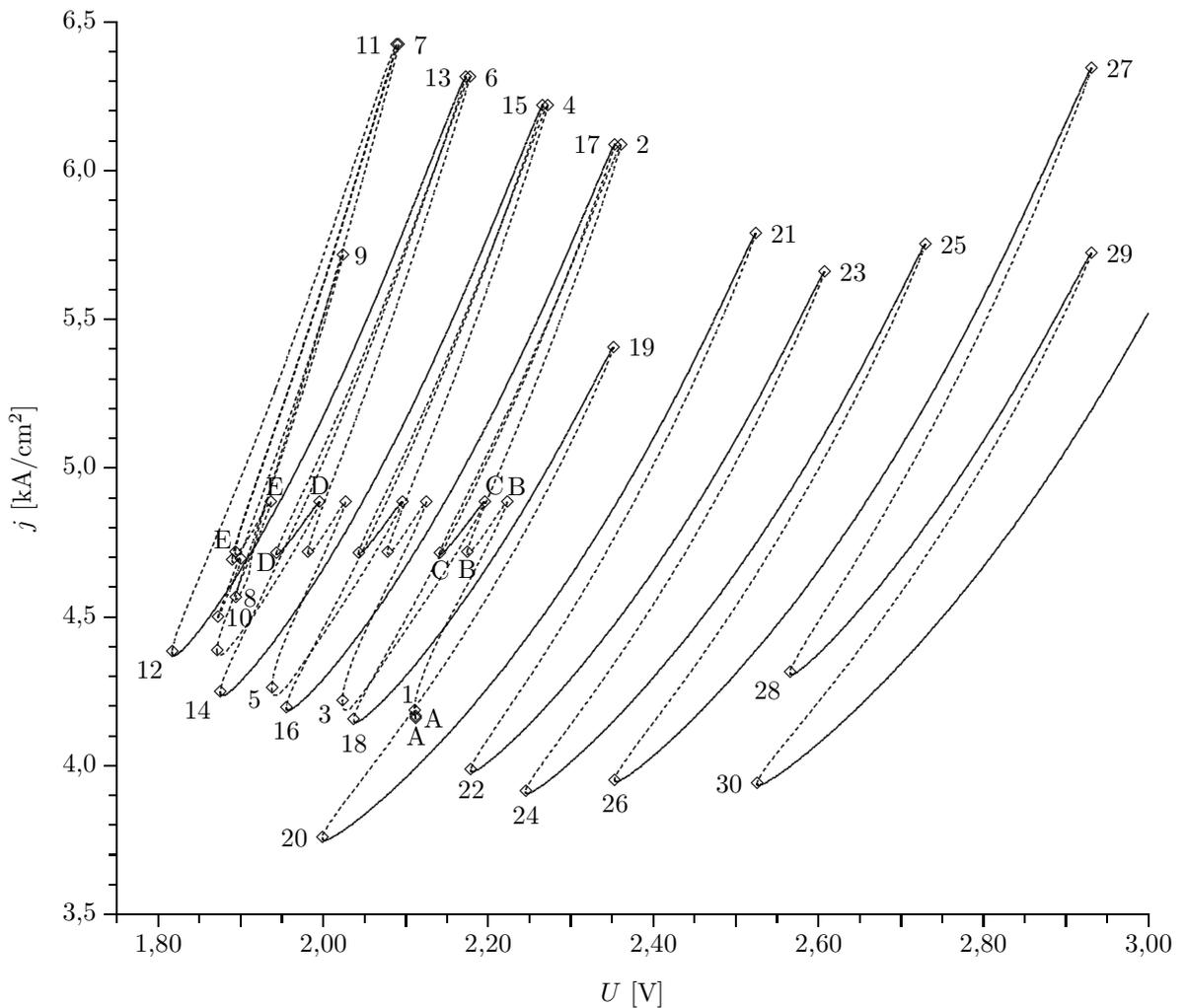


Abbildung 6.4: Gestörte Kennlinie mit bezeichneten Sattel-Knoten-Bifurkationen. Ist eine Sattel-Knoten-Bifurkation mit einer Zahl bezeichnet, so bedeutet dies, daß sie für $\alpha = 0\%$ in die gleichbezeichnete Bifurkation aus Abbildung 6.6 bzw. 6.5 übergeht. Eine Bezeichnung mit einem Großbuchstaben dagegen bedeutet, daß bei kleiner werdenden Störungen die gleich bezeichneten Bifurkationspunkte in einem Cusp-Punkt zusammenlaufen. Bei unbezeichneten Bifurkationen war eine Zuordnung wegen numerischer Probleme nicht möglich.

6.3 „Seltame“ Zustände

Im ersten Abschnitt dieses Kapitels wurden von der ungestörten Kennlinie ausgehend die betreffenden Punkte auf der gestörten Kennlinie und im zweiten Abschnitt von der gestörten Kennlinie ausgehend alle dazugehörigen Zustände bei $\alpha = 0\%$ bestimmt. Da die „seltamen“ Zustände im Kapitel 4.7 nur für das ungestörte Übergitter behandelt wurden, muß an dieser Stelle nun für diese untersucht werden, wie sie sich bei einer Erhöhung von α verhalten.

In Abbildung 6.7 ist dargestellt, wie sich das seltame Kennlinienstück aus Abbildung 6.5(d) verändert, wenn α erhöht wird. Die erste Aussage, die getroffen werden kann, ist diejenige, daß mit wachsendem α die Kurve immer komplizierter wird. Dies geschieht dadurch, daß in einem

Cusp-Punkt zwei Sattel-Knoten-Bifurkationspunkte und damit ein weiterer Ast entstehen. Dies ist vergleichbar der Entstehung der Äste der normalen Kennlinie, wenn vom schwach dotierten Übergitter ausgegangen und dann die Dotierung erhöht wird. Bei jeder Sattel-Knoten-Bifurkation muß ein Eigenwert der Jacobi-Matrix sein Vorzeichen wechseln, d. h., der neue, eingeschobene Ast unterscheidet sich in genau einem Vorzeichen vom ursprünglich einheitlichen Ast. War letzterer stabil, so muß der eingeschobene Ast instabil sein (genau wie bei der Astbildung bei Erhöhung der Dotierung). War er dagegen instabil, so ist der eingeschobene Ast entweder noch „instabiler“ oder er ist „stabiler“. Insbesondere bedeutet dies, daß, wenn der Ast

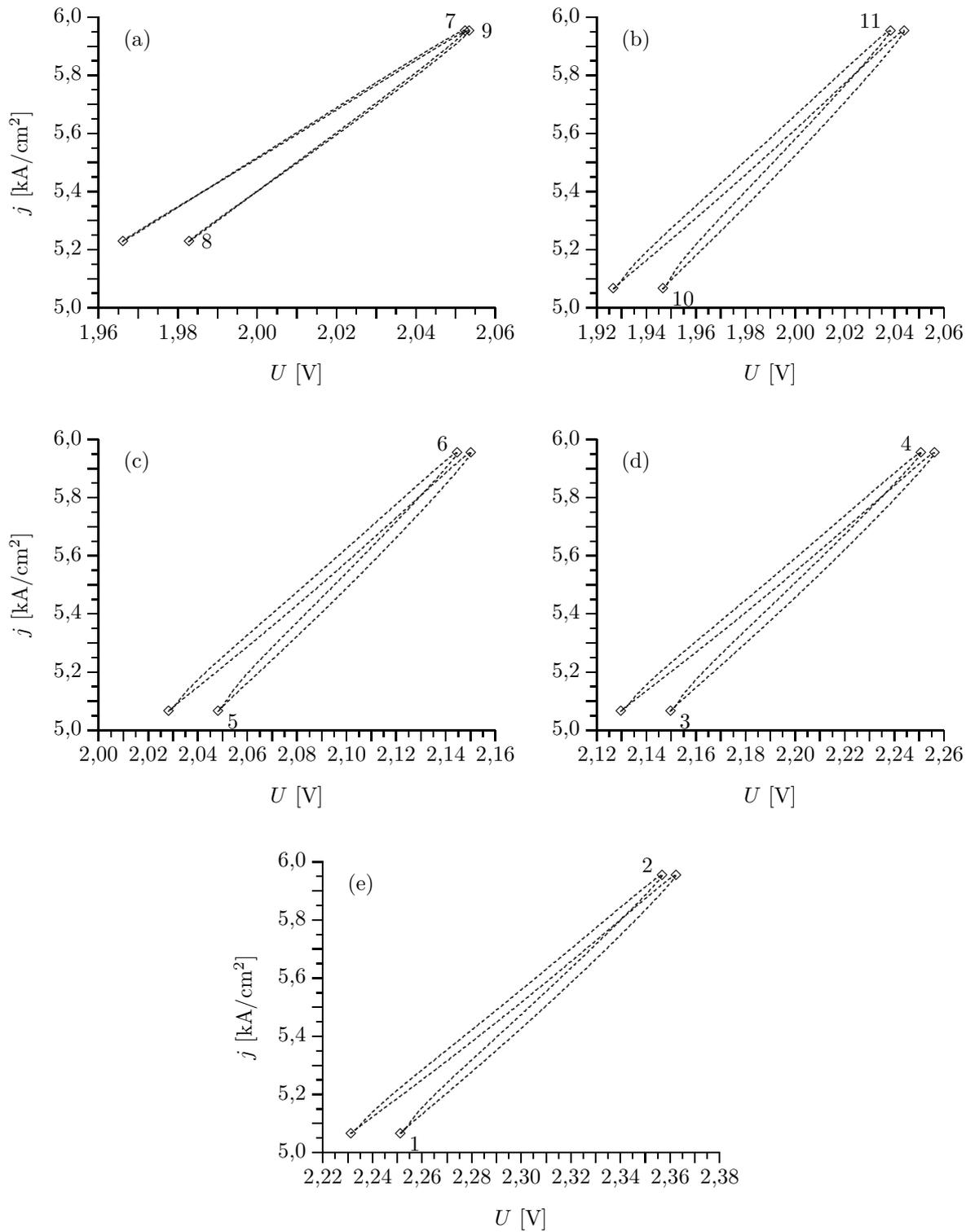


Abbildung 6.5: Ungestörte, instabile Kennlinienteile. Markiert sind die zu den Bifurkationspunkten aus Abbildung 6.4 gehörenden Punkte. Ist ein Bifurkationspunkt nicht mit einer Beschreibung versehen, so bedeutet dies nur, daß er nicht mit einem der Punkte aus Abbildung 6.4 verbunden ist; es ist also durchaus möglich, daß der entsprechende Punkt für $\alpha = 10\%$ ganz einfach außerhalb des für Abbildung 6.4 berechneten Bereichs liegt.

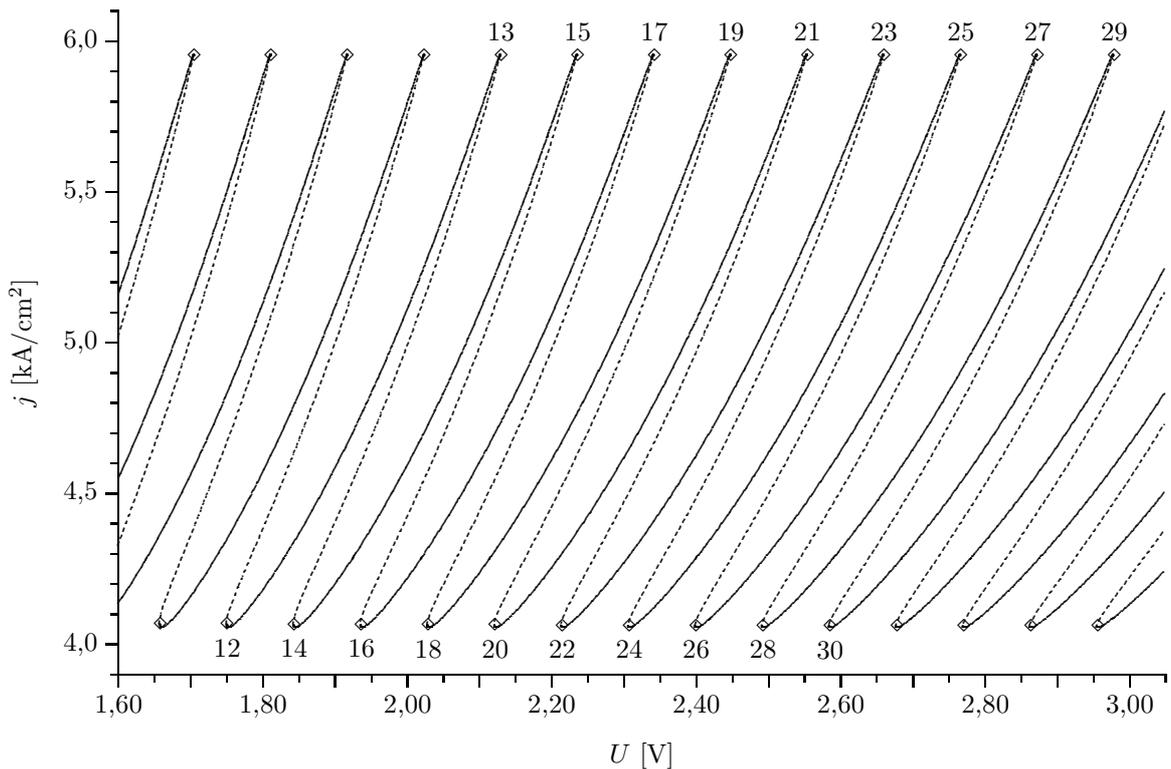


Abbildung 6.6: Ungestörte „normale“ Kennlinie. Erläuterungen siehe Abbildung 6.4.

vorher genau eine instabile Mode besaß, der eingeschobene Ast durchaus stabil sein kann.

In Abbildung 6.7 sind wegen der großen Anzahl instabiler Äste nur wenige Details zu erkennen. Deswegen sind die selben Daten noch einmal in Abbildung 6.8 aufgetragen worden, wobei allerdings alle instabile Äste weggelassen wurden. Man sieht jetzt, daß bei höheren α (kleine²) Teile der Kurve stabil werden. Wenn man genau hinsieht (und weiß, wonach man suchen muß), erkennt man, daß der stabile Ast bereits bei $\alpha = 2\%$ vorhanden ist und bei weiterer Erhöhung von α nur noch seine Größe ändert.

Die Kennlinienstücke, die in den Abbildungen 6.7 und 6.8 dargestellt sind, konnten nur für diskrete Werte von α gezeichnet werden. Eine andere Form der Darstellung ist für Kennlinien (mit Multistabilität) auch schwer vorstellbar. Interessiert man sich nicht für die exakten Werte der Stromdichte, sondern nur für die Lage (Spannung) der Bifurkationswerte, so können diese als Funktion von α aufgetragen werden. Bereits in den vorherigen Kapiteln wurde die prinzipiell gleiche Darstellungsweise verwendet, wenn die Lage von Bifurkationspunkten im N_D - U -Diagramm eingezeichnet wurde.

Eine solche Darstellung findet sich in den Abbil-

dungen 6.9(a) und 6.9(c). Letztere beruht wie die meisten Berechnungen auf der Kurve aus Abbildung 6.5(d), während die andere von Abbildung 6.5(e) ausgeht, um zu zeigen, daß für alle seltsamen Kennlinienstücke das prinzipielle Verhalten gleich ist. Die beiden Teilbilder unterscheiden sich jedoch noch einem weiteren Punkt: Für Abbildung 6.9(a) wurde vom ungestörten System ($\alpha = 0$) ausgegangen, während für Abbildung 6.9(a) die bereits mit $\alpha = 8\%$ gestörte Kennlinie als Ausgangspunkt genommen wurde. Startet man mit den Daten für $\alpha = 0\%$, so werden alle Paare von Sattel-Knoten-Bifurkationspunkten, die erst bei einem bestimmten Wert von α in einem Cusp-Punkt entstehen, nicht berücksichtigt. Dies erklärt, weshalb in den beiden Teilbildern unterschiedlich viele Linien zu sehen sind.

Zuerst soll die „einfachere“ Abbildung 6.9(a) untersucht werden: Es fällt auf, daß nicht – wie eigentlich vermutet werden kann – für $\alpha = 0\%$ und $\alpha = 10\%$ jeweils vier Sattel-Knoten-Bifurkationspunkte existieren. Vielmehr „dreht“ sich eine der von $\alpha = 0$ ausgehenden Linien um und läuft zurück. Als Ergebnis existieren für $\alpha = 0\%$ jetzt fünf Bifurkationspunkte, also einer „zuviel“. Dieser ist in der Abbildung mit einem „a“ markiert. Berechnet man jetzt das durch den

²Die Länge dieser Teile wächst mit steigendem α . Die Länge, die sie erreichen können, hängt also davon ab, wie groß α werden darf, bevor sich die Struktur wie im nächsten Abschnitt beschrieben qualitativ verändert. Für das hier dargestellte Kennlinienstück ist dieser Wert relativ klein.

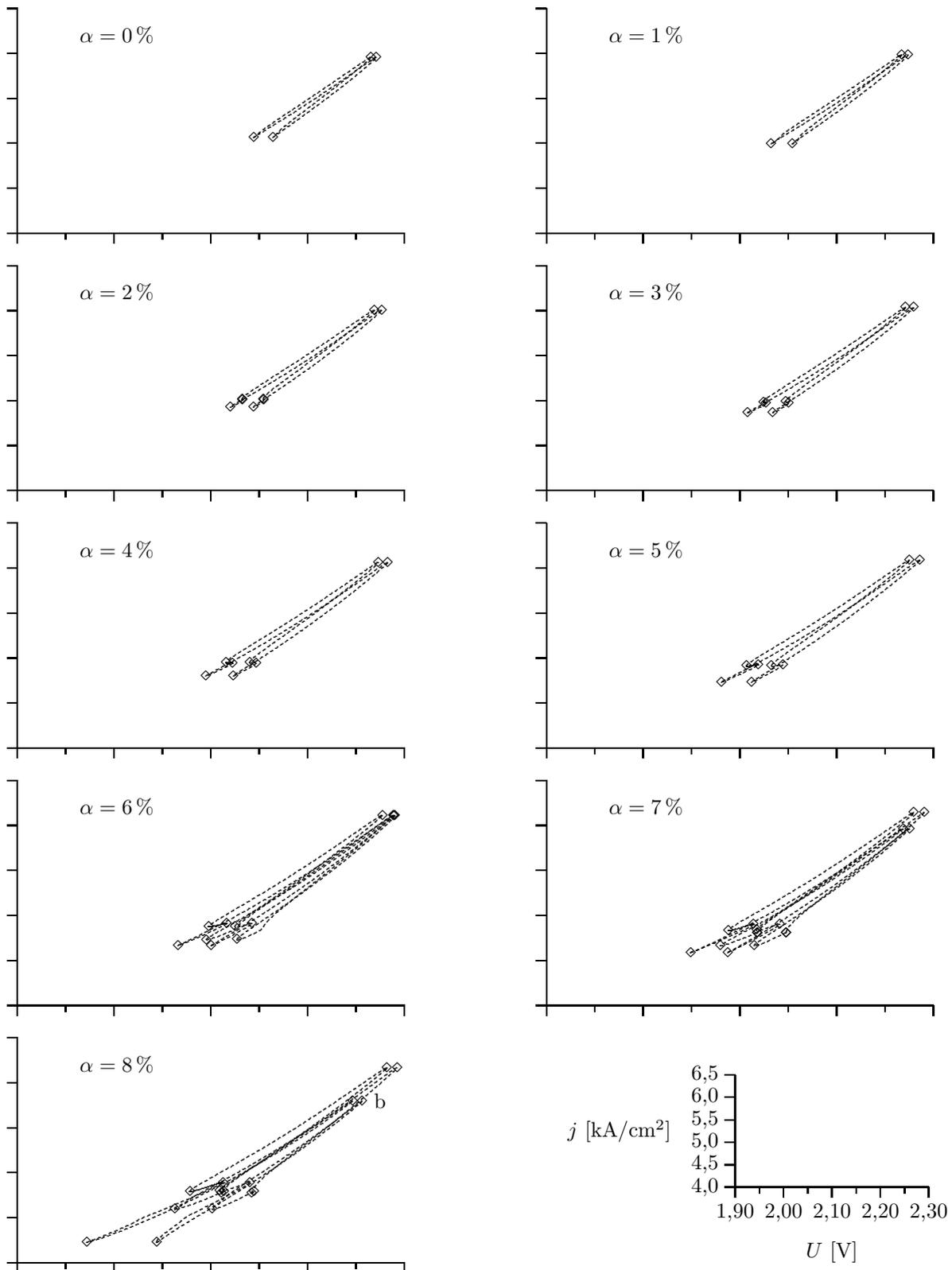


Abbildung 6.7: Seltsame Zustände bei wachsender Störung. Dargestellt ist die Veränderung des geschlossenen Kennlinienstücks aus Abbildung 6.5(d) bei wachsender Störung.

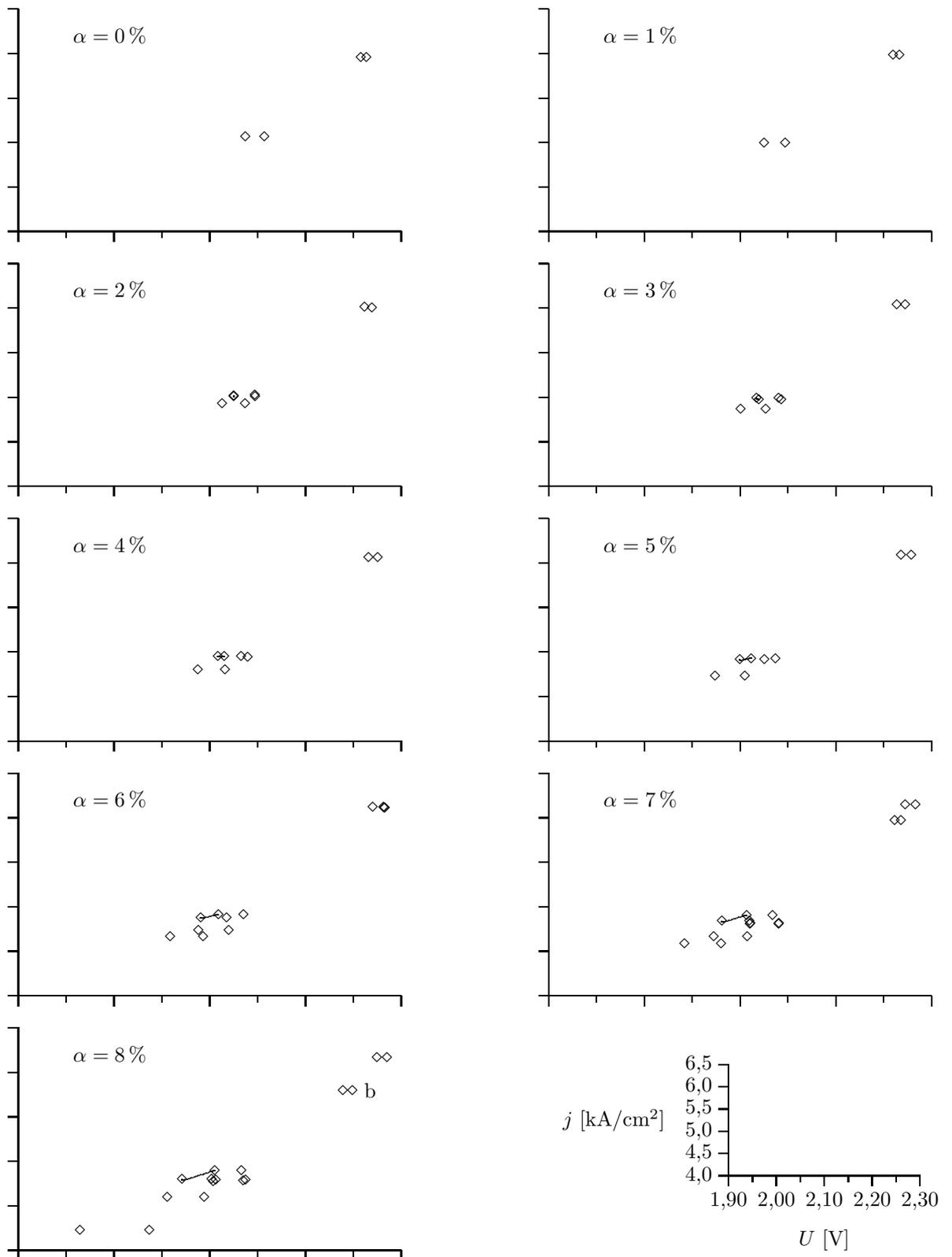
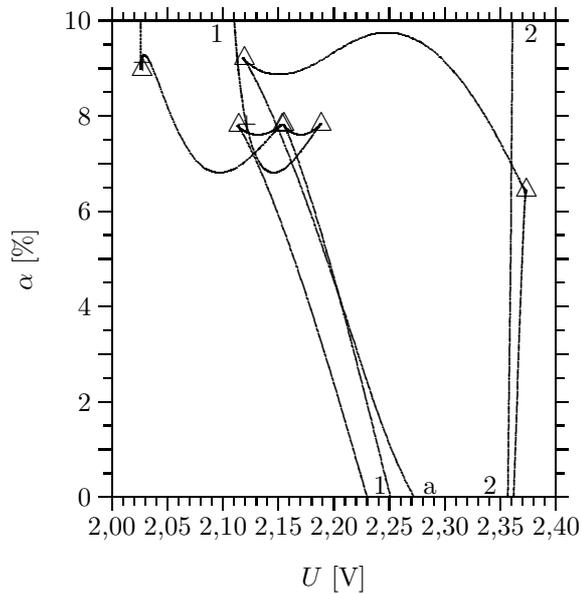
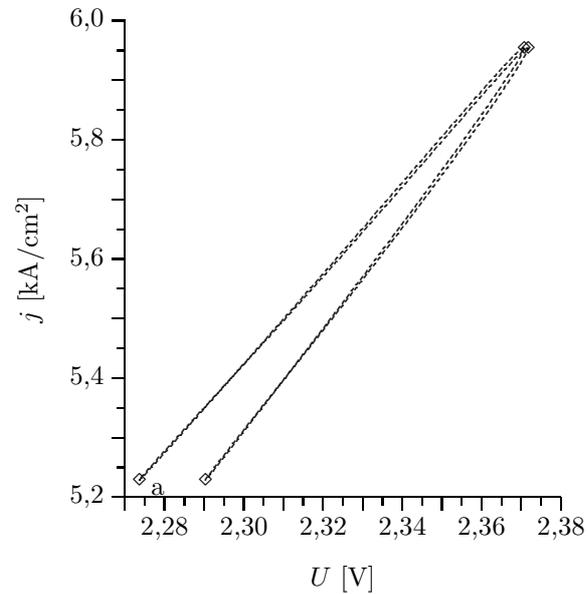
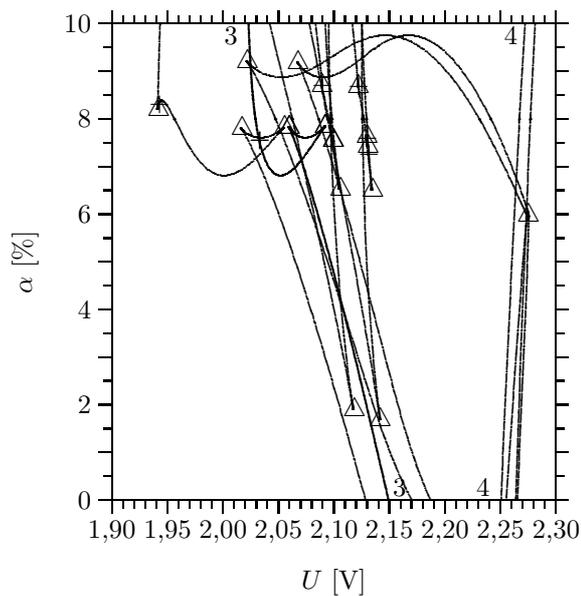


Abbildung 6.8: Seltsame Zustände bei wachsender Störung. Die dargestellten Daten sind die selben wie in Abbildung 6.7, allerdings sind aus Gründen der besseren Übersicht die instabilen Zustände weggelassen und nur die stabilen Zustände sowie die Sattel-Knoten-Bifurkation eingezeichnet.



(a) Portrait zu Abbildung 6.5(e)

(b) Kennlinie für $\alpha = 0$ durch „a“

(c) Portrait zu Abbildung 6.5(d)

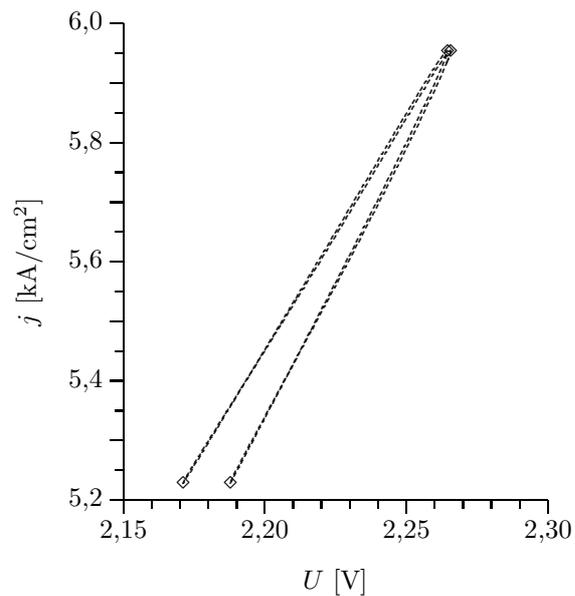
(d) Kennlinie für $\alpha = 0$ durch zusätzliche Zustände

Abbildung 6.9: Verbindungen zwischen gestörten und ungestörten Zuständen. Aufgetragen ist im Teilbild (a) die Lage (U) der Sattel-Knoten-Bifurkationen in Abhängigkeit vom Störungsparameter α , wobei von den Bifurkationspunkten aus Abbildung 6.5(e) ausgegangen wird. Die Bezeichnungen am Rand des Diagramms (d. h. bei $\alpha = 0\%$ bzw. $\alpha = 10\%$) entsprechen denjenigen aus Abbildung 6.5 bzw. Abbildung 6.4. Der Zustand, der mit „a“ bezeichnet ist, entspricht keinem der Bifurkationspunkte, die in Abbildung 6.5 oder 6.6 dargestellt sind. Die Kennlinie, die zu diesem Zustand gehört, ist im Teilbild (b) dargestellt. Analog für die Teilbilder (c) und (d), bei denen von Abbildung 6.5(d) ausgegangen wurde. Für die Beschreibung der weiteren Unterschiede siehe Text.

Punkt „a“ gehende Kennlinienstück, so ergibt sich ein weiteres geschlossenes Kennlinienstück (Abbildung 6.9(b)). Ähnliches kann auch für die Kurve in Abbildung 6.9(c) durchgeführt werden. Da mit den Daten für $\alpha = 8\%$ gestartet wurde, sind schon viel mehr Bifurkationspunkte entstanden. Obwohl diese Bifurkationspunkte erst bei höheren Werten für α entstanden sind, sind sie mit Zuständen bei $\alpha = 0$ verbunden. Insgesamt ergeben sich vier neue Bifurkationspunkte bei $\alpha = 0$, die alle auf dem Kennlinienstück aus Abbildung 6.9(d) liegen. Die Tatsache, daß man in Abbildung 6.9(b) nur einen von insgesamt vier Bifurkationspunkten durch α -Variation findet, liegt also nur daran, daß man mit „zu wenigen“ Zuständen begonnen hat.

In den Abbildungen wird nicht einfach nur der Parameter α variiert. Durch die Bifurkationsbedingung erhält man eine weitere Bestimmungsgleichung, so daß ein weiterer Parameter (z. B. U) gleichzeitig angepaßt werden kann und muß.

6.3.1 Zusammenwachsen von geschlossenen Kennlinienstücken

Ausgangspunkt des letzten Abschnitts war, daß die gestörte Kennlinie aus mehreren ursprünglich getrennten Teilen besteht: zum einen die „normale“ ungestörte Kennlinie, zum anderen „seltsame“ Kennlinienstücken. Beide müssen in einer bestimmten Weise, die im nächsten Abschnitt behandelt wird, in „Wechselwirkung“ treten. Die Frage ist jetzt, ob diese Wechselwirkung direkt geschieht oder ob die seltsamen Kennlinienstücke vorher untereinander „reagieren“. Die Antwort lautet „sowohl als auch“, es kommt beides vor.

In Abbildung 6.10 ist die Entwicklung von drei geschlossenen Kennlinienstücken mit wachsendem α dargestellt. Es handelt sich von links nach rechts um die bereits in den Abbildungen 6.5(b), 6.5(c) und 6.5(d) dargestellten Kurven. Mit wachsendem α werden die einzelnen Kurven immer komplizierter, wie dies bereits in Abbildung 6.7 gefunden wurde. Die eben erwähnte Abbildung zeigte die Entwicklung des isolierten Kennlinienstücks bis zum Wert $\alpha = 8\%$. Da es sich bei $\alpha = 9\%$ bereits mit seinen beiden Nachbarn verbunden hat, muß dieser Übergang also bei einem Wert für α zwischen 8% und 9% erfolgt sein. Der genaue Mechanismus, wie dieses Zusammenwachsen erfolgt, wurde nicht untersucht; es ist kann allerdings als sicher gelten, daß es sich um den selben handelt, wie er im nächsten Abschnitt erläutert wird.

Eine Ungereimtheit fällt einem bei genauerer Betrachtung von Abbildung 6.10 oder beim Vergleich der Kurve für $\alpha = 8\%$ in Abbildung

Als Ergebnis dieser zweiten Gleichung ist die Variation von α und U vollkommen gleichwertig. Insbesondere ist es also nicht zwingend, daß die gesamte Kurve durch eine dieser beiden Größen parametrisiert werden kann. Die Kurve darf also durchaus lokale Extrema bezüglich α besitzen. Wie im nächsten Abschnitt an einem anderen Beispiel gezeigt werden wird, führt das Durchlaufen solcher Extrema zum „Abschnüren“ von Teilen der Kennlinie, die dann als eigenständige geschlossene Kennlinienstücke weiterexistieren.

Diese Thematik soll jedoch nicht weiter vertieft werden, da hierdurch keine „praktisch“ verwendbare Aussagen über das Verhalten von Halbleiterübergittern gewonnen werden können. Man muß also leider feststellen, daß durch einfache U - α -Diagramme nur beschränkte Aussagen möglich sind und man häufig doch darauf angewiesen ist, die tatsächlichen Kennlinien(stücke) für verschiedene α zu berechnen.

6.7 mit dem entsprechenden Teil der Kurve für $\alpha = 9\%$ in Abbildung 6.10 auf: Im rechten oberen Teil jedes Kennlinienstücks befinden sich jeweils Paare von Sattel-Knoten-Bifurkationen, während bei der Kurve für $\alpha = 9\%$ immer nur ein Bifurkationspunkt zu sehen ist. Wo ist also der andere Punkt geblieben?

Setzt man sich auf einen der „verschwundenen“ Punkte und erhöht die Störung auf $\alpha = 9\%$, so ergibt sich, daß der Bifurkationspunkt dann auf einem Kennlinienstück, wie es in Abbildung 6.11(a) dargestellt ist, liegt. Es hat sich also ein Kennlinienstück „abgeschnürt“. Die Lage (Spannung) der beiden Sattel-Knoten-Bifurkationen in Abhängigkeit von α ist in Abbildung 6.11(b) aufgetragen.

Auf den ersten Blick mag die Auftragung der Bifurkationspunkte im α - U -Diagramm wenig aussagekräftig erscheinen. In Wirklichkeit kann man aus diesen jedoch die Kennlinien für alle Werte von α ermitteln. Dies soll an Hand der Prinzipskizze 6.11(c) einmal durchgeführt werden.

In einem Sattel-Knoten-Bifurkationspunkt „dreht“ sich die Kennlinie um und läuft wieder zurück. Nur an Hand der Bifurkationslinien kann man aber nicht ohne weiteres erkennen, auf welcher Seite des Bifurkationspunktes der betreffende Teil der Kennlinie liegt. An dieser Stelle hilft es, daß es einen Cusp-Punkt gibt. Wie bereits aus dem Abschnitt 2.6 bekannt ist, gibt es im „Innern“ der beiden von ihm ausgehenden Äste drei Lösungen, während es außer-

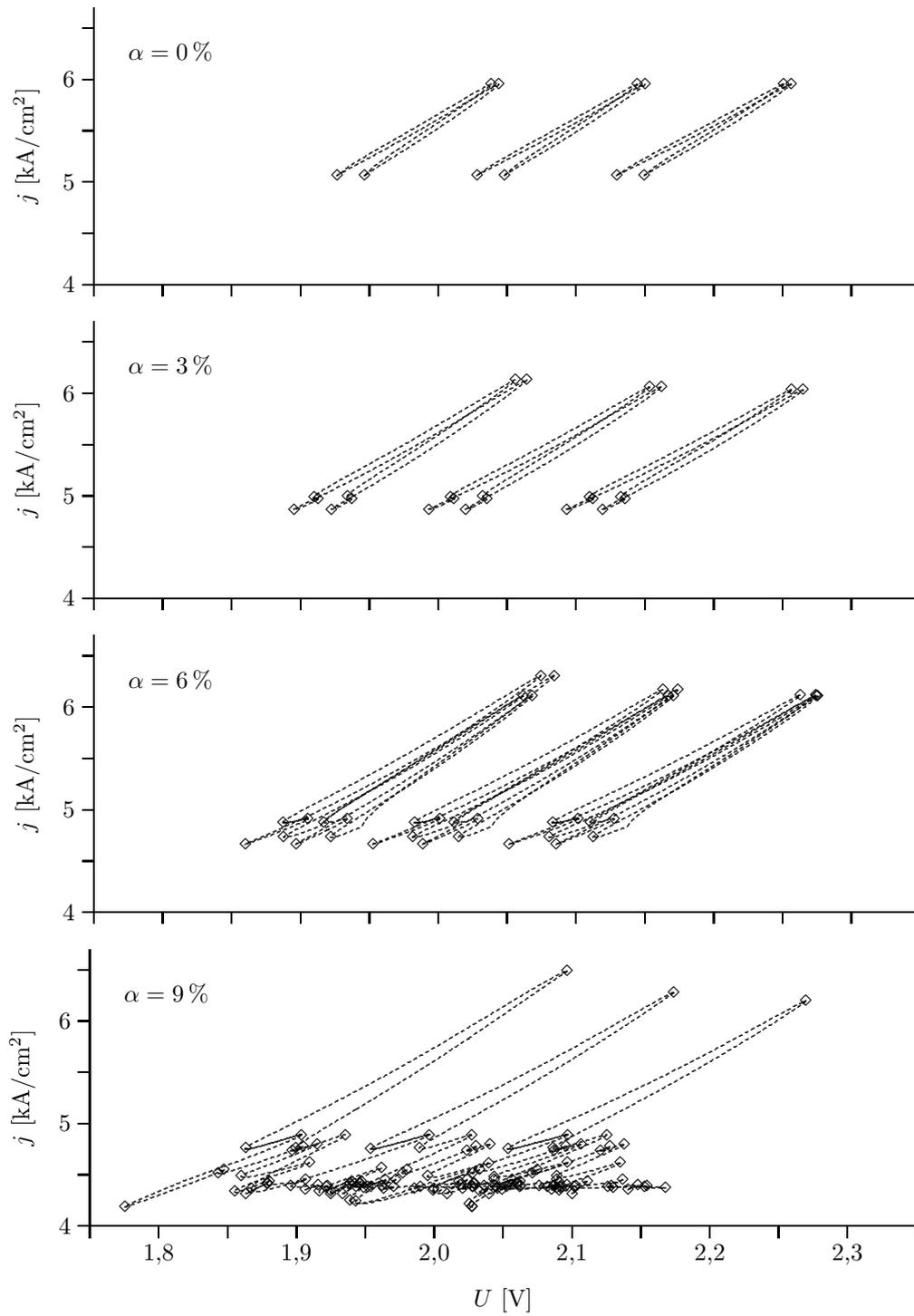
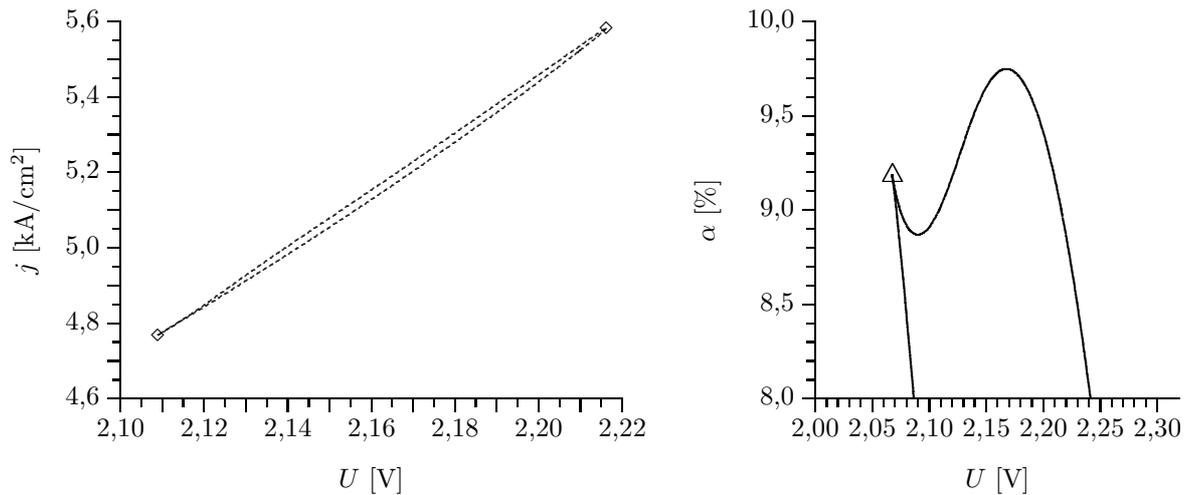
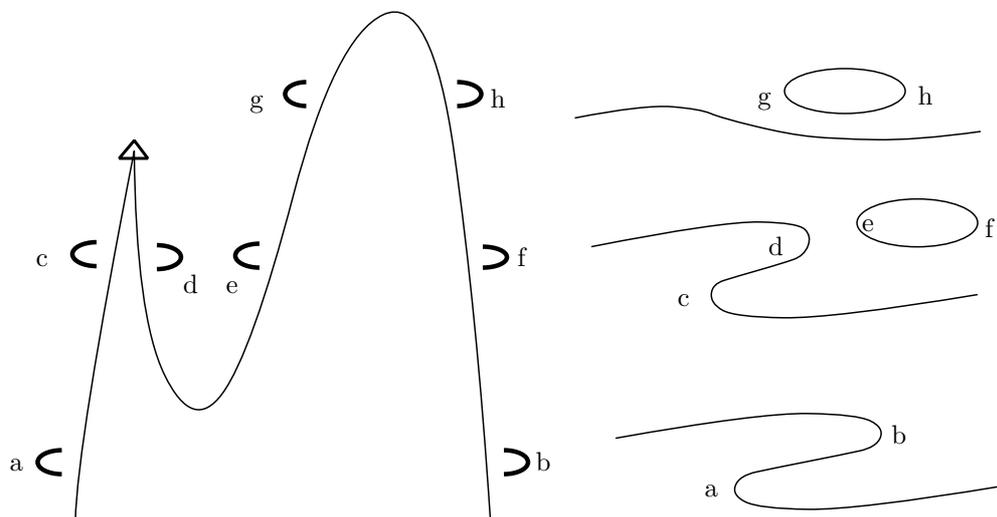


Abbildung 6.10: Zusammenwachsen „seltsamer“ Kennlinienstücke. Es wachsen drei kleinere Kennlinienstücke zu einem größeren zusammen. Eines dieser drei ist das aus Abbildung 6.7. Wie sich aus dem Vergleich dieser beiden Abbildungen ergibt, geschieht das Zusammenwachsen zwischen $\alpha = 8\%$ und $\alpha = 9\%$.



(a) Abgespaltenes Kennlinienstück

(b) Lage der Sattel-Knoten-Bifurkationen



(c) Prinzipielle Lage der Kennlinien und Bifurkationspunkte

Abbildung 6.11: Bei Erhöhung der Störung sich absplattendes Zustand. Der Bifurkationspunkt rechts oben im Teilbild (a) entsteht aus dem mit einem „b“ bezeichneten Bifurkationspunkt ($\alpha = 8\%$) in Abbildung 6.7. Im Teilbild (b) ist die Veränderung der Lage der Bifurkationspunkte bei Veränderung von α dargestellt. Die beiden Zustände für $\alpha = 8\%$ sind aufeinanderfolgende Bifurkationspunkte aus der Kurve in Abbildung 6.7 für $\alpha = 8\%$. Die beiden linken Zustände für $\alpha = 9\%$ sind ebenfalls aufeinanderfolgende Bifurkationspunkte, jedoch aus Abbildung 6.10. Die beiden rechten Bifurkationspunkte sind diejenigen aus Teilbild (a). (c) Prinzipskizze zur Konstruktion der Kennlinie, weitere Erläuterungen siehe Text.

halb nur eine gibt. Die Kennlinie muß in der Nähe der Punkte „c“ und „d“ also so verlaufen, wie es durch die kleinen Halbkreise angedeutet ist. Bei jeder Umkehrung der Richtung der Bifurkationslinie muß sich auch die Öffnung der Halbkreise umdrehen. Es kann damit die Orientierung der Halbkreise und damit auch die „lokale Kennlinie“ an jedem Punkt der Bifurkationslinie bestimmt werden. Zusätzlich darf das System in „großer Entfernung“ von dem hier beschriebenen Verhalten nichts bemerken.

Da oberhalb der Grafik keinerlei Bifurkationen mehr stattfinden (bzw. diese nichts mit dem hier untersuchten Verhalten zu tun haben), aber trotzdem noch eine Lösung existiert, muß dies auch für alle anderen „Höhen“ gelten: Es kommt von rechts eine Lösungskurve und es läuft eine nach links weiter.

Mit diesem Wissen können jetzt alle Kennlinien konstruiert werden, indem die Halbkreise („lokalen“ Kennlinienstücke) geeignet ver-

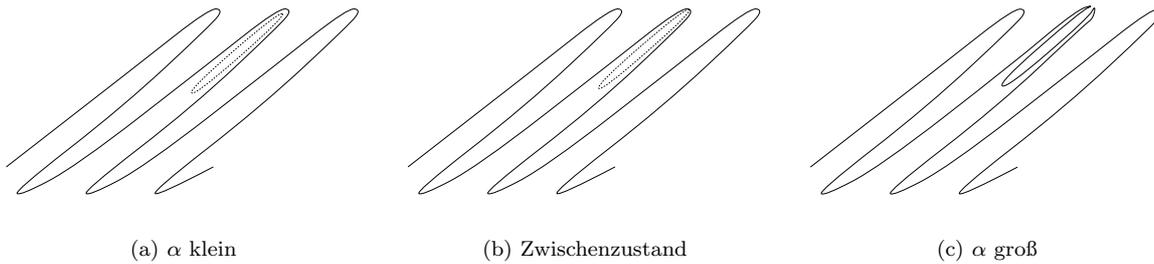


Abbildung 6.12: Prinzipielle Struktur der Kennlinie bei verschieden stark gestörtem Übergitter. **(a)** Bei kleinen Störungen ist die „normale“ Kennlinie (durchgezogene Kurve) im wesentlichen unverändert. Zusätzlich existieren isolierte, geschlossene Lösungskurven (gerastert eingezeichnet). **(c)** Bei höheren Störungen haben sich die beiden Strukturen vereinigt. Damit dieses möglich ist, muß es einen Zwischenzustand geben, bei „normale“ Kennlinie und Isola sich gerade berühren (Teilbild **(b)**).

bunden werden, wobei das Wissen über die von rechts kommenden Kennlinienstücke berücksichtigt werden muß. Für die Punkte im unteren Teil der Abbildung bedeutet dies, daß die Kennlinie von rechts kommend zum Punkt „a“ gehen, danach zum Punkt „b“ laufen und schließlich nach rechts weiterlaufen muß. Es ergibt sich damit notwendigerweise die rechts dargestellte Kennlinie.

Für die mittlere Kennlinie ergibt sich folgender Verlauf: Von rechts kommend geht die Kennlinie zum Punkt „c“. Sie muß bereits am Punkt „d“ wieder umkehren und nach links weiterlaufen. Würde sie nämlich bis zum Punkt „f“ gehen, so gäbe es keinerlei Möglichkeit, die beiden freien „Ausgänge“ des Punktes „d“ zu verschlie-

ßen, so daß nach links mindestens zwei Lösungen entweichen würden. Die beiden jetzt noch unbenutzten Punkte „e“ und „f“ müssen notwendigerweise eine Isola formen, da nur so keine Lösungsäste nach rechts oder nach links entweichen können. Die gesamte Kennlinienstruktur ist wiederum rechts davon dargestellt.

Im oberen Teil der Grafik schließlich müssen mit der gleichen Begründung „g“ und „h“ eine Isola bilden. Ein Verlauf der Kennlinien wie in der Nähe eines Cusp-Punktes ist nicht möglich, da dies die Existenz eines Cusp-Punktes erzwingen würde. Da dort keine weiteren Bifurkationen mehr stattfinden, zeigt der durchgehende Teil der Kennlinie kein besonderes Verhalten mehr.

6.4 Zusammenwachsen der Kennlinie

Wie in den vorherigen Abschnitten dargelegt wurde, liegt bei kleinen Störungen etwa eine Struktur vor, wie sie in Abbildung 6.12(a) dargestellt ist: Die „normale“ Kennlinie ist im wesentlichen unverändert, zusätzlich gibt es Isolas, von der „durchgehenden“ Kennlinie getrennte geschlossene Lösungskurven. Bei größeren Störungen, wie sie in diesem Kapitel behandelt wurden, liegt dagegen der Fall aus Abbildung 6.12(c) vor: Es gibt nur noch eine durchgehende Lösungskurve, die Teile enthält, die vorher getrennt waren. Damit muß es an einem bestimmten Punkt ein Stadium geben, wie es in Abbildung 6.12(b) gezeigt ist: Die beiden Teile, durchgehende Kennlinie und Isola, haben sich an genau einem Punkt verbunden.

Läßt man den ganzen Vorgang in umgekehrter Richtung verlaufen, also von hohem α hin zu kleinerem, so kann man diesen Vorhang mit dem Abschnüren eines Teils einer Amöbe vergleichen. Das Teilbild 6.12(b) entspricht dann

genau dem Moment, in dem das abgeschnürte Teil noch in genau einem Punkt mit der Zelle verbunden ist.

Die nötige Vorarbeit, um diesen Vorgang beschreiben zu können, wurde bereits bei der Behandlung der Isola-Bifurkation im Abschnitt 2.5 auf Seite 5 geleistet. Es müssen an dieser Stelle jedoch noch einige weiteren Vorbemerkungen gemacht, da im Abschnitt über die Sattel-Knoten-Bifurkation nur das „normale Aussehen“ behandelt wurde: Die beiden Lösungsäste, die sich im Bifurkationspunkt schneiden, verändern in ihm nur unwesentlich ihre Steigung. Hierdurch ist die Zuordnung der vier beteiligten Teilläste zu zwei durchgehenden Ästen leicht möglich.

Dies ist jetzt nicht mehr der Fall. Die Bifurkation geschieht nämlich (fast) genau in dem Punkt, in dem die Stromdichte bei der normalen Kenn-

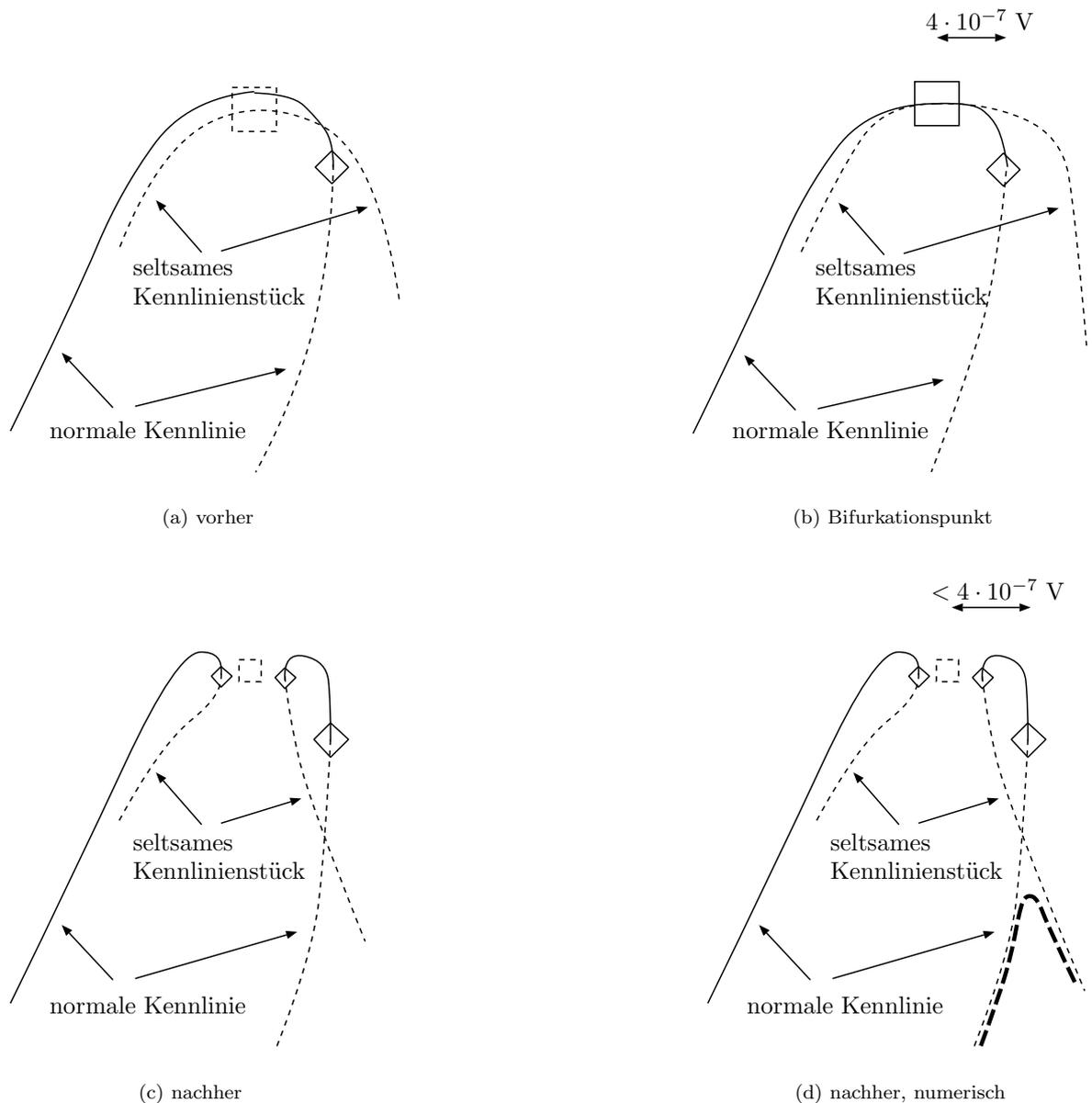


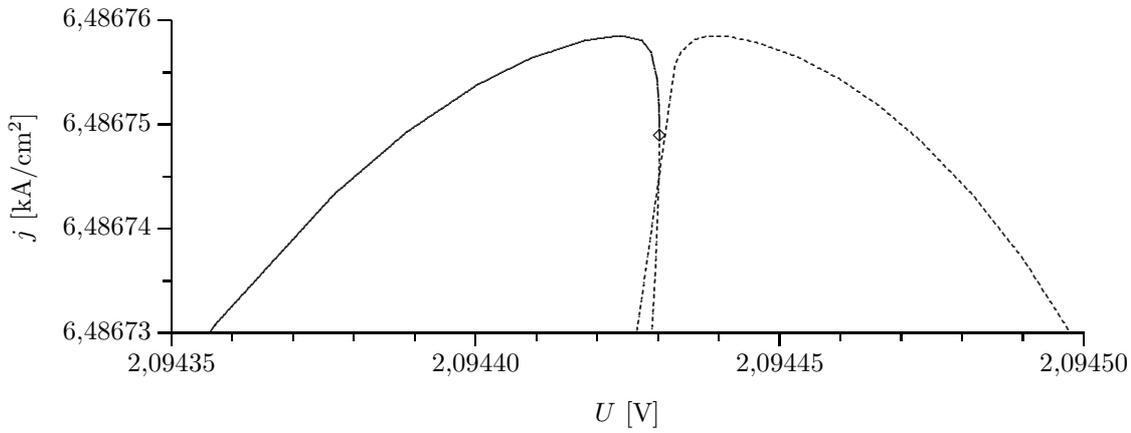
Abbildung 6.13: Zusammenwachsen eines seltsamen Kennlinienstücks mit der normalen Kennlinie. Dargestellt sind der prinzipielle Verlauf der normalen Kennlinie und eines seltsamen Kennlinienstücks vor dem Zusammenwachsen (Teilbild **(a)**), im Augenblick des Zusammenwachsens (Teilbild **(b)**) und nach dem Zusammenwachsen (Teilbild **(c)**). Die Lage der transkritischen Bifurkation ist in den Teilbildern, in denen diese nicht existiert, gestrichelt markiert. **(d)** Der Abstand zwischen den beiden Sattel-Knoten-Bifurkationen auf der rechten Seite ist zu klein, als daß sie durch eine numerische Berechnung gefunden werden könnten. Statt dessen wird eine Kurve mit der Form ermittelt, wie sie fett eingezeichnet ist.

linie maximal wird³; das gleiche gilt für das an der Bifurkation beteiligte geschlossene Kennlinienstück.

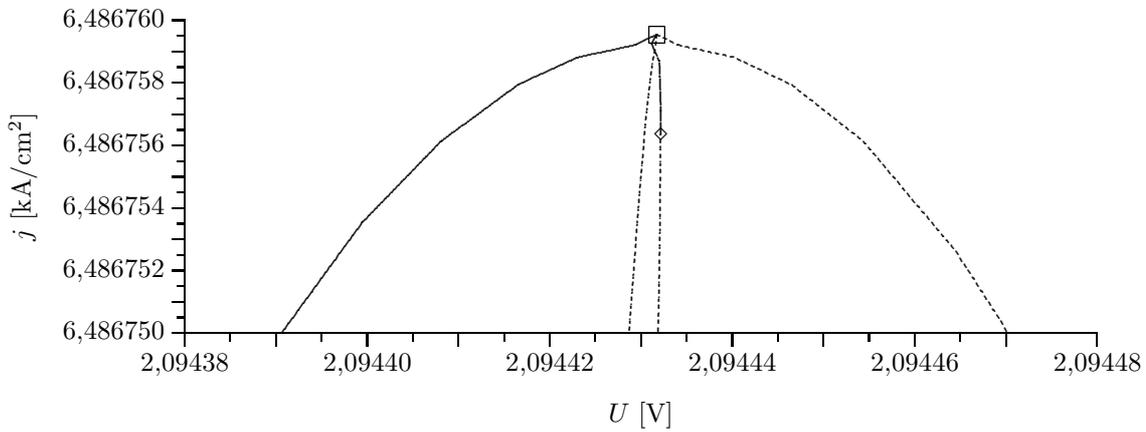
Es gibt jedoch noch ein weiteres Problem: Der Maximum der Stromdichte liegt dicht neben

der Sattel-Knoten-Bifurkation, durch die der betreffende Ast instabil wird. Im hier vorliegenden Fall beträgt der Abstand nur etwa $4 \cdot 10^{-7}$ V. Dies führt zu erheblichen numerischen Problemen. Notwendige Voraussetzung für ei-

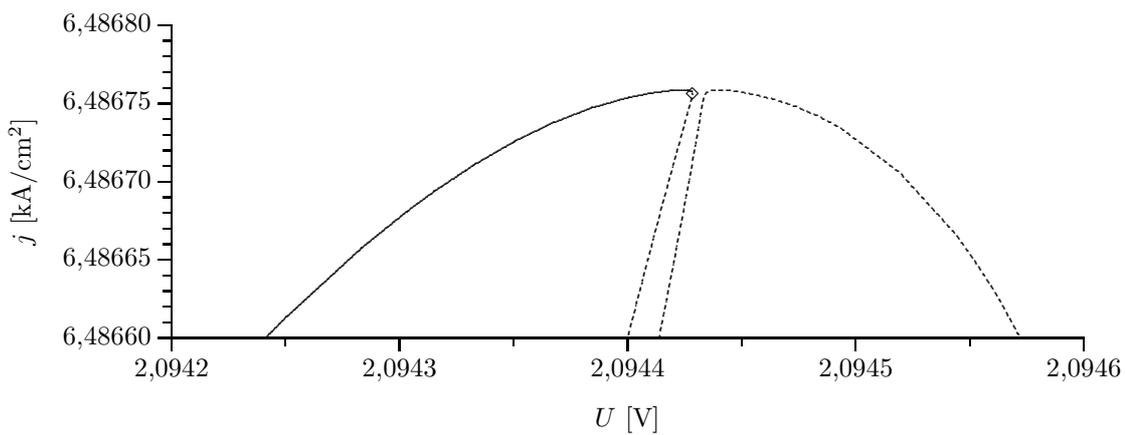
³Die Position des Strommaximas eines Astes und des oberen Abbruchpunktes unterscheiden sich im Gegensatz zu den unteren Punkten nur minimal (siehe Abbildung 4.2 auf Seite 27). An dem Punkt, wo die Stromdichte maximal wird, oder unmittelbar daneben, haben auch die Werte der Elektronendichten in den meisten Quantentöpfen ein Extremum. Für die hier gemachten Erläuterungen ist es also gleichgültig, ob man die Stromdichte oder eine beliebig herausgegriffene Elektronenkonzentration betrachtet.



(a) vorher



(b) Bifurkationspunkt



(c) nachher

Abbildung 6.14: Zusammenwachsen mit der normalen Kennlinie. Dargestellt sind die selben Kennlinien bzw. Kennlinienstücke wie in Abbildung 6.13, allerdings sind dieses die numerischen berechneten „realen“ Kurven. Zu beachten ist, daß der Maßstab bei allen drei Teilbildern verschieden ist.

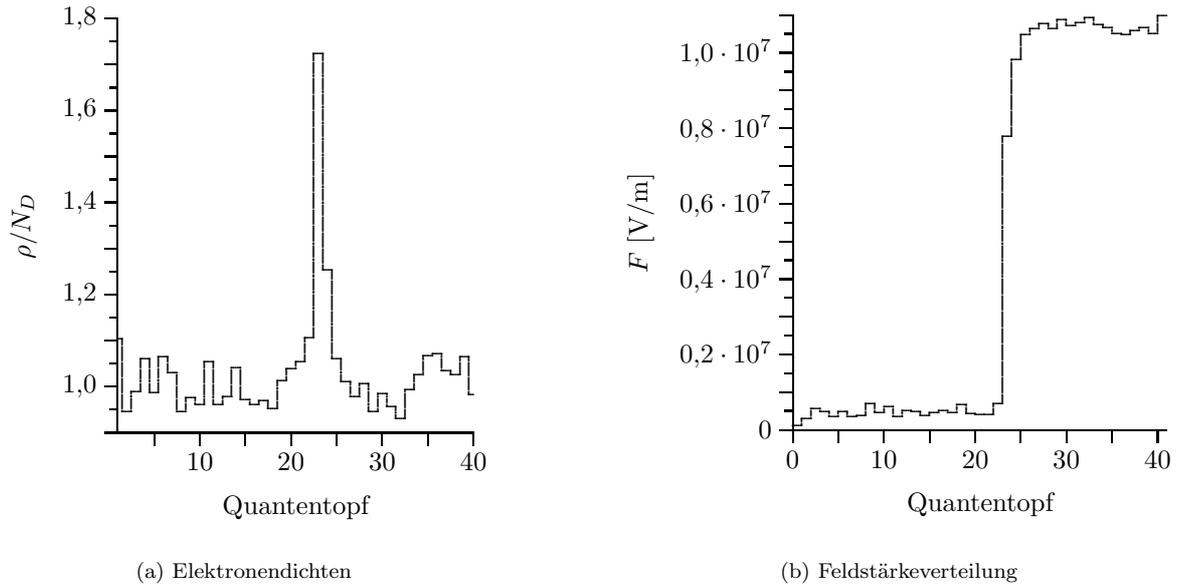


Abbildung 6.15: Bifurkationspunkt. Aufgetragen sind im Teilbild **(a)** die Elektronendichten des Punktes, an dem die normale Kennlinie und das erste geschlossene Kennlinienstück zusammenwachsen. Im Teilbild **(b)** ist die dazugehörige Feldverteilung dargestellt.

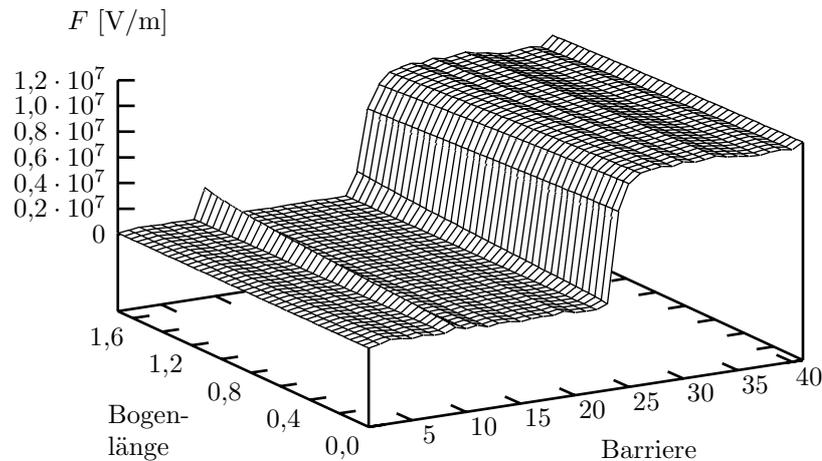


Abbildung 6.16: Feldverteilung auf einem „seltsamen“ Ast in der Nähe des Bifurkationspunktes. Parametrisiert ist diese durch die Bogenlänge (Einheiten V und kA/cm^2), wobei vom Bifurkationspunkt zu größeren Spannungen hin gestartet wurde.

nen Bifurkationspunkt⁴ ist bekanntlich, daß die Jacobi-Matrix in ihm singular ist. Damit versagen an ihm praktisch alle Algorithmen, insbesondere diejenigen zur Zweigverfolgung. Deswegen muß man, aus einem Bifurkationspunkt kommend, erst einen gewissen „Sicherheitsabstand“ zurücklegen, bevor man die Algorithmen wieder einsetzen kann. Umgekehrt muß man

bei der Annäherung an einen Bifurkationspunkt diesen bereits erkannt haben, bevor man den Sicherheitsabstand unterschreitet. Daher werden Algorithmen verwendet, die bereits viele Schritte vor diesem Sicherheitsabstand erkennen, daß eine Bifurkation von einem bestimmten Typ näher kommt und konvergieren schon von weit außerhalb des Sicherheitsabstands auf diese. Dar-

⁴Selbstverständlich gilt dies nur für lokale Bifurkationen. Weiterhin muß die Hopf-Bifurkation ausgenommen werden, die darin ein Sonderfall ist, daß sich die Zahl der Fixpunkte des Systems in ihr nicht ändert.

aus ergibt sich unmittelbar, daß zwei Bifurkationen von verschiedenem Typ, zum Beispiel eine Sattel-Knoten-Bifurkation und eine transkritische Bifurkation, einen kleineren Abstand haben dürfen, als zwei mit gleichem Typ. In letzterem Fall würde nämlich der Bifurkationserkennungsalgorithmus beim Verlassen des zuerst gefundenen Bifurkationspunkts – falls er überhaupt erkennt, daß es einen weiteren Bifurkationspunkt gibt – wieder auf den Ausgangspunkt konvergieren.

Nach diesen Vorbemerkungen kann nun das tatsächliche Verhalten beim Zusammenwachsen der Kennlinie behandelt werden. In Abbildung 6.13(a) ist der prinzipielle Verlauf der „normalen“ Kennlinie und des am Zusammenwachsen beteiligten seltsamen Kennlinienstücks eingezeichnet. Die Lage der transkritischen Bifurkation im Augenblick des Zusammenwachsens ist hier, genau wie im Teilbild (c), gestrichelt markiert. Die einzige Bifurkation, die zu diesem Zeitpunkt bereits existiert, ist die Sattel-Knoten-Bifurkation, in der der Ast der normalen Kennlinie instabil wird. In Abbildung 6.13(b) ist der Moment des Zusammenwachsens dargestellt. Es entsteht aus dem „Nichts“ ein weiterer Bifurkationspunkt, nämlich die transkritische Bifurkation. Bei weiterer Erhöhung der Störungsstärke zerfällt die transkritische Bifurkation, wie bereits im Abschnitt 2.3 auf Seite 4 hergeleitet, in zwei Sattel-Knoten-Bifurkationen. Die rechte dieser beiden Bifurkationspunkte hat von der bereits im Teilbild (a) vorhandenen einen Abstand von weniger als etwa $4 \cdot 10^{-7}$ V. Dieser ist, wie oben erläutert, zu klein, als daß diese beiden Bifurkationspunkte noch getrennt werden könnten. Das einzig mögliche ist es, den Algorithmus so zu steuern, daß er stattdessen den Weg nimmt, der in Abbildung 6.13(d) fett eingezeichnet ist. Für die Zweigverfolgung der beiden Äste links der ehemaligen transkritischen Bifurkation hat

dieses selbstverständlich keine Auswirkungen.

Nach diesen Vorbemerkungen und Prinzipskizzen können jetzt die „realen“ Kurven gezeigt werden. Das erste Zusammenwachsen⁵ eines geschlossenen Kennlinienstücks mit der normalen Kennlinie geschieht bei $\alpha = (9,042462 \pm 0,000003) \%$. Der „Augenblick“ des Zusammenwachsens ist in Abbildung 6.14(b) dargestellt, die beiden anderen Teilbilder von Abbildung 6.14 die Situationen für minimal kleinere bzw. größere Störung.

Nun stellt sich die Frage nach dem Bifurkationspunkt selber, d. h., wie sind an ihm die Elektronendichten und Feldstärken im Übergitter. Bisher konnte man vermuten, daß Zustände auf der „normalen“ Kennlinie und auf seltsamen Kennlinienstücken eindeutig durch das Feldstärkeprofil unterschieden werden könnten. Damit sich die beiden Kurven jedoch im Bifurkationspunkt treffen können, müssen sie sich aneinander anpassen. Der Daten für den Bifurkationspunkt sind in Abbildung 6.15 dargestellt. Die Feldverteilung besitzt eine eindeutig trennbare Hoch- und eine Niederfelddomäne. In der Niederfelddomäne gibt es kein Gebiet mit erhöhter Feldstärke, wie es für seltsame Kennlinienstücke typisch ist. Man kann daher feststellen, daß sich das seltsame Kennlinienstück der normalen Kennlinie anpaßt und nicht umgekehrt.

Als letzte Frage in diesem Zusammenhang bleibt nur noch diejenige offen, wie genau der Übergang zwischen der für seltsame Kennlinienstücke typischen Feldverteilung und derjenigen am Bifurkationspunkt geschieht. Am einfachsten kann diese Frage beantwortet werden, indem man die Feldverteilung in Bogenlängenparametrisierung, ausgehend vom Bifurkationspunkt, aufträgt. Genau dieses wurde in Abbildung 6.16 gemacht. Man erkennt, wie sie „zielstrebig“ in die typische Form übergeht.

6.5 Weitere Erhöhung von α

Wird der Störungsgrad α immer weiter erhöht, so können sich die in diesem Kapitel bisher beschriebenen Vorgänge wiederholen: Es können sich durch Cusp-Punkte weitere Paare von Sattel-Knoten-Bifurkationspunkten bilden, und es können sich weitere „seltsame“ Kennlinienstücke mit der durchgehenden Kennlinie verbinden. Es ist wenig sinnvoll, alle diese Vorgänge bis zu einer gewissen Obergrenze für α zu untersuchen. Stattdessen ist in Abbildung 6.17 nur

aufgetragen, wie viele Bifurkationspunkte die durchgehende Kennlinie in Abhängigkeit von α besitzt. Für das ungestörte und das leicht gestörte Übergitter ist diese Zahl gleich der (doppelten) Zahl der Äste, also gleich 80. Danach steigt die Zahl stark an, sobald die ersten „seltsamen“ Kennlinienstücke eingefügt werden. Oberhalb einer gewissen Schwelle für α nimmt die Zahl der Bifurkationspunkte jedoch wieder um ab.

⁵Tatsächlich gibt es bereits ein „früheres“ Zusammenwachsen. Dieses geschieht jedoch bei einer Spannung von nur wenigen Zehntel Volt, so daß dort Randeefekte nicht auszuschließen sind.

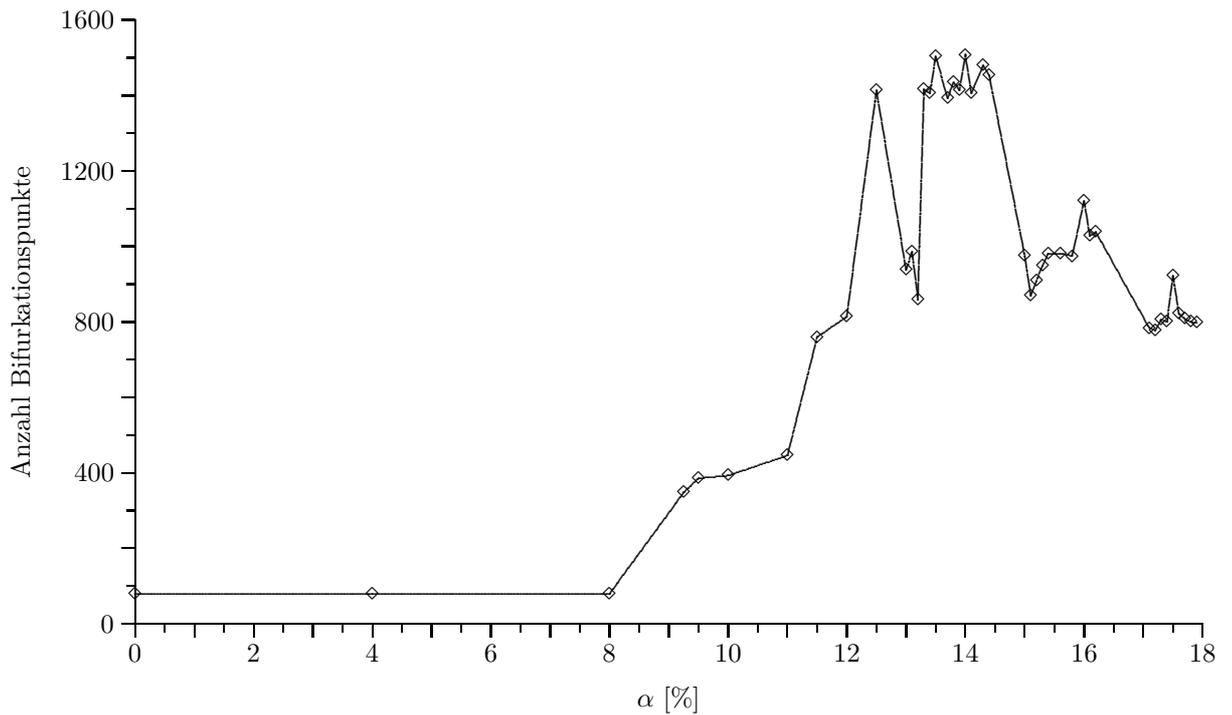


Abbildung 6.17: Anzahl der Sattel-Knoten-Bifurkationspunkte in Abhängigkeit vom Störungsgrad α . Die Rauten geben die Datenpunkte an, die durch Berechnung einer Kennlinien für den entsprechenden Wert von α ermittelt wurden. Die lineare Interpolation dieser Daten ist durch eine durchgezogene Linie dargestellt. Für $\alpha \leq 8\%$ gibt es genau 80 Bifurkationspunkte, d. h. 40 Äste, während danach die Anzahl der Äste stark ansteigt, aber auch wieder etwas abfällt.

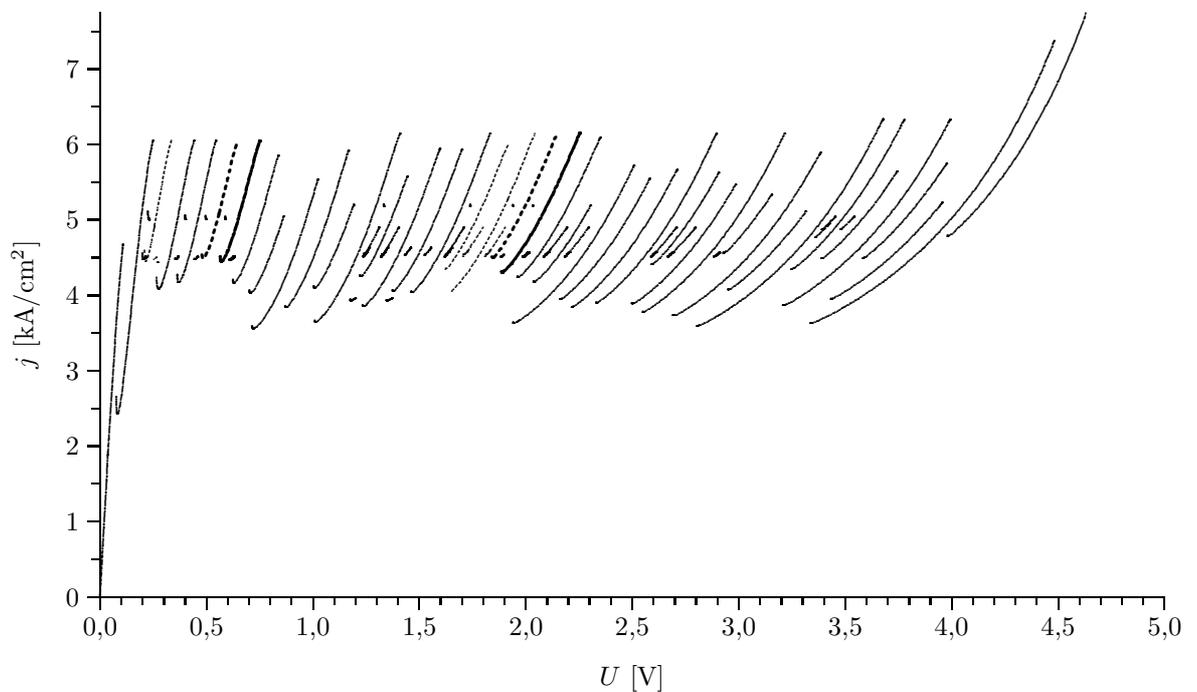


Abbildung 6.18: Auftrennen der Kennlinie bei sehr hohen Werten von α . Die dargestellten Daten gehören zu einem durchgehenden und sechs geschlossenen Kennlinienstücken, von denen jeweils nur die stabilen Teile eingezeichnet sind. Die zu verschiedenen Kennlinienstücken gehörenden Äste sind verschieden schraffiert.

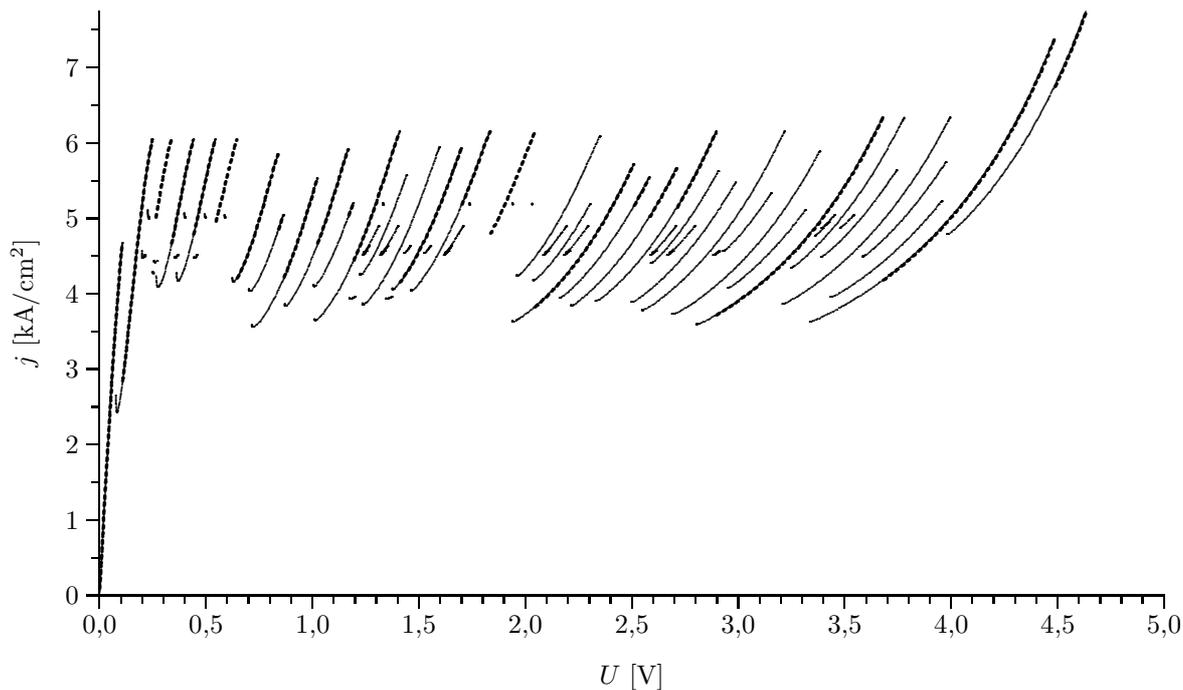


Abbildung 6.19: Vergleich der durchgehenden Kennlinie mit der durch Simulation erhalten. Aus Gründen der Übersichtlichkeit sind auch von der durchgehenden Kennlinie nur die stabilen Teile dargestellt. Letztere sind durch eine durchgezogene Linie markiert, der simulierte Upsweep durch eine etwas dickere, aber gestrichelte Linie.

Die Erklärung hierfür wird in Abbildung 6.18 gegeben: Genau so, wie sich geschlossene Kennlinienstücke mit der durchgehenden Kennlinie verbinden können, können sie sich auch von ihr abspalten. Im Gegensatz zum bisher untersuchten Fall, wo das beteiligte geschlossene Kennlinienstück ein rein „seltsames“ Kennlinienstück

war, werden beim Abspalten eines Kennlinienstücks ein oder mehrere Äste der „normalen“ Kennlinie mitgenommen. Da in Abbildung 6.18 nur stabile Zustände eingezeichnet sind, um nicht den Überblick zu verlieren, sieht man dort einzelne Äste, die anders gerastert sind als ihre Nachbarn.

6.6 Vergleich von Simulation und Zweigverfolgung

Die Frage, die sich noch stellt, ist, inwiefern die stabilen Zustände, die durch Zweigverfolgung gefunden worden sind, auch durch Simulation und damit im Experiment gefunden werden können. Dieses Problem ergab sich bereits bei leicht gestörten Übergittern, wo zwar alle Äste noch vorhanden waren, aber nicht unbedingt mehr erreicht werden können.

Zur Beantwortung dieser Frage sind in Abbildung 6.19 sowohl die durchgehende Kennlinie als auch ein simulierter Upsweep dargestellt. Zuerst einmal erkennt man, daß die Äste, die sich abgespalten haben, weiterhin erreicht werden. Dies war auch nicht anders zu erwarten. Zum anderen sieht man, daß durchaus einige der kürzeren stabilen Äste auch durch Simulationen erhalten werden können. Diese sind in der Abbildung wegen ihrer kurzen Länge bzw. des kleinen Teils, der von ihnen während des Upsweeps er-

reicht wird, nur als Punkte zu erkennen. Dies geschieht primär bei kleinen Spannungen, da dort die Äste steiler sind [Sch95b] und damit bei gegebener Spannung weniger Äste als „Konkurrenz“ auftreten.

Diese exakte Form der erhaltenen Kennlinie verändert sich etwas, wenn man berücksichtigt, daß in einem experimentell untersuchten Übergitter immer zeitliche Fluktuationen der Elektronendichten auftreten, zum Beispiel durch thermische Effekte. Diese können in der Simulation dadurch berücksichtigt werden, daß als Startwert für die Elektronendichten bei der Simulation für eine bestimmte Spannung nicht das stationäre Ergebnisse für den vorhergehenden Spannungsschritt genommen wird, sondern dieses etwas ausgelenkt wird. Diese Auslenkung ist unabhängig davon notwendig, da nur so garantiert werden kann, daß es instabiler Zustand

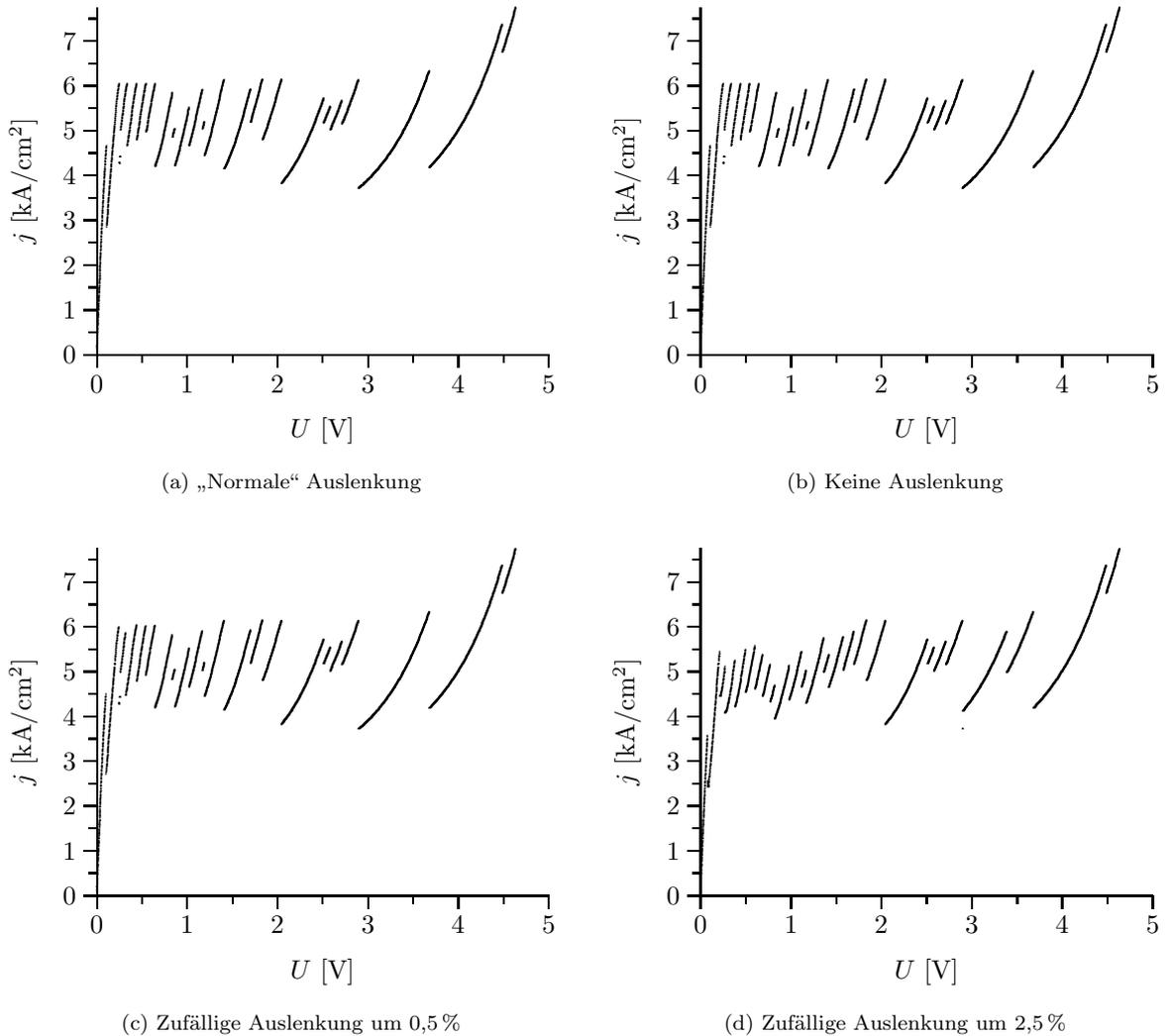


Abbildung 6.20: Auswirkung von Auslenkungen der Startwerte der Simulation auf die erhaltene Kennlinie. Erläuterungen zu den Kurven siehe Text.

auch verlassen wird. Deswegen wurde in allen in dieser Arbeit vorgestellten Simulationen die Elektronendichte in einem Quantentopf um 2% erhöht. Ähnliches wird auch von anderen Autoren mit unterschiedlichen Begründungen durchgeführt [Bon94, Sch95b]. Es ergibt sich dann die Kennlinie aus 6.20(a).

Alternativ kann man die Stärke und die Richtung der Auslenkung auch zufällig bestimmen. In den übrigen Teilbildern von Abbildung 6.20 wurden die Elektronendichten in allen Quantentöpfen ausgelenkt, wobei die Auslenkung für jeden Quantentopf getrennt „ausgewürfelt“ wurde. Bei sehr starker Auslenkung (Abbildung 6.20(d)) werden einige Äste erreicht, die vorher übersprungen wurden, da durch die Auslenkung stabile Äste bereits kurz vor dem Sattel-Knoten-Bifurkationspunkt verlassen werden. Andererseits ist in eben erwähnter Abbil-

dung auch zu erkennen, daß bei etwa $U = 3$ V ein weiterer kurzer Ast erreicht wird.

Bei Experimenten an gewachsenen Übergittern wird es immer solche zufälligen „Auslenkungen“ der Elektronendichten geben, die durch hier nicht betrachtete Störeffekte wahrscheinlich noch verstärkt werden. Es ist daher zumindest nicht auszuschließen, daß die kurzen stabilen Äste, die mit einer „seltsamen“ Feldstärkeverteilung verbunden sind, auch experimentell erhalten werden. Der Unterschied der Feldstärkeverteilung zu der eines „normalen“ Zustandes ist allerdings nicht so groß, daß er mit den momentan zur Verfügung stehenden Verfahren gemessen werden könnte. Wenn in einem Experiment diese „seltsamen“ Äste beim Aufnehmen einer Kennlinie erreicht werden würden, so würde man sie wahrscheinlich nicht identifizieren können.⁶

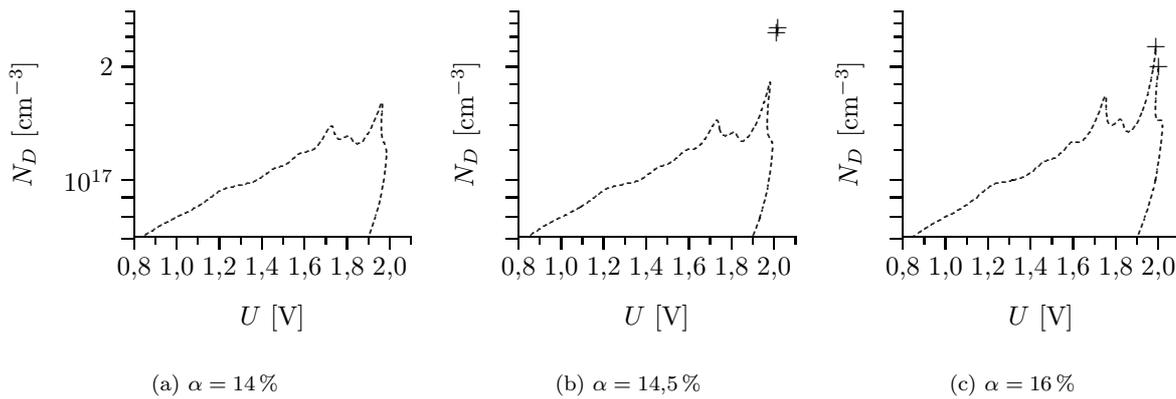


Abbildung 6.21: Lage der Hopf-Bifurkationen („Phasendiagramm“) für verschieden stark gestörte Übergitter. **(a)** Wie auch bei leicht gestörten Übergittern bilden die Hopf-Bifurkationspunkte eine Isola, in deren Innern oszillatorisches Verhalten auftritt. **(b)** Es bildet sich durch zwei Takens-Bogdanov-Punkte ein weiterer oszillatorischer Bereich. Die Linie aus Hopf-Bifurkationspunkten zwischen diesen ist in der Abbildung nur schwer zu erkennen (siehe auch Abbildung 6.22). **(c)** Die Isola ist mit dem durch die Takens-Bogdanov-Punkte entstandenen Bereich verschmolzen.

6.7 Oszillationen

Wie im Kapitel 5 gezeigt wurde, haben Dotierungsfuktuationen nur geringen Einfluß auf die Frequenzen und Amplituden auftretender Oszillationen. Einen starken Einfluß haben diese jedoch auf das Parametergebiet (U und N_D), in dem Oszillationen erhalten werden.

Abbildung 6.21 zeigt die Lage der Hopf-Bifurkationen für verschiedene Werte von α . Für $\alpha = 14\%$ ergibt sich noch das qualitativ gleiche Bild wie für leicht gestörte Übergitter. Erhöht man jedoch den Wert von α (Abbildung 6.21(b)), so bildet sich ein weiterer Ast von Hopf-Bifurkationspunkten. Dieser wird von zwei Takens-Bogdanov-Punkten begrenzt (siehe hierzu Abschnitt 2.11 auf Seite 13). Es ist damit ein weiteres Gebiet entstanden, indem Oszillationen existieren. Wie groß genau dieses Gebiet ist, kann nicht so einfach wie für die Hopf-Isola beantwortet werden. Es wird hierauf noch zurückgekommen. Wird α weiter erhöht, so verbindet sich dieses neue Oszillationsgebiet mit der Hopf-Isola. Zurück bleibt ein einziges großes Oszillationsgebiet, daß allerdings oben „offen“ ist.

Der Vorgang des Zusammenwachsens ist genauer in Abbildung 6.22 dargestellt. Dieses Zusammenwachsen ist mit keiner Bifurkation verbunden. Man muß sich die Hopf-Bifurkationspunkte als zweidimensionale Fläche im U - N_D - α -Raum vorstellen. Die bisher vorgestellten Phasendiagramme ergeben sich dann durch Schnitte mit

einer senkrecht zur α -Achse liegenden Schnittebene. Dies ist dann vergleichbar mit Höhenlinien auf einer Landkarte: Bei einem Gebirge gibt es eine Reihe kleiner geschlossener Höhenlinien, die um die höchsten Berggipfel herum verlaufen. Betrachtet man dagegen Höhenlinien, die tiefer liegen, so werden mehrere Gipfel von einer einzigen Höhenlinie eingeschlossen. Durch Veränderung der Höhe, an der man das Gebirge durchschneidet, um die Höhenlinien zu erhalten, kann man es erreichen, daß man eine einzige Kurve und mehrere getrennte Kurven erhält. Das Zusammenwachsen ist daher nicht mit einer Bifurkation verbunden.

Wie schon im Abschnitt 2.11 besprochen, ist ein Takens-Bogdanov-Punkt der Schnittpunkt einer Kurve von Hopf-Bifurkationspunkten mit einer durchgehenden Kurve von Sattel-Knoten-Bifurkationspunkten. Diese sind in Abbildung 6.23 eingezeichnet. Zur Auftragung wurden dort nicht U und N_D , sondern U und α verwendet. Dies ist für die Beschreibung des Takens-Bogdanov-Punktes kein prinzipieller Unterschied, erlaubt es aber, aus Abbildung 2.11 zu folgern, wie die Kennlinien für verschieden stark gestörte Übergitter aussehen werden.

Wie in Abbildung 6.23 zu erkennen ist, laufen die Hopf-Bifurkationspunkte weiter nach un-

⁶Man könnte höchstens überprüfen, ob die Anzahl der Äste größer ist als die Anzahl der Quantentöpfe. Bei den ganz kurzen Ästen, die in vielen experimentell aufgenommenen Kennlinien gesehen werden, ist fraglich, ob es sich hierbei nicht nur um Meßfehler handelt. Außerdem ist wegen Randeffecten für Übergitter mit N Quantentöpfen nicht ganz sicher, ob diese nun $N - 1$, N oder $N + 1$ Äste zeigen sollten. Deswegen kann man nicht durch einfaches Abzählen feststellen, ob „zusätzliche“ Äste in der aufgenommenen Kennlinie vorhanden sind.

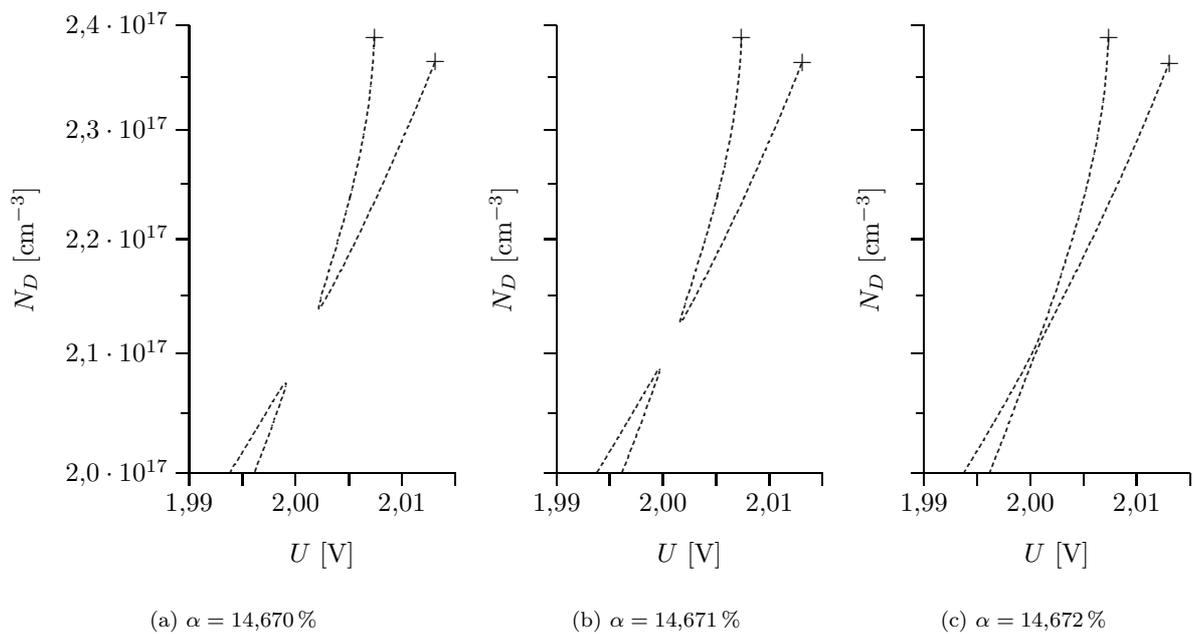


Abbildung 6.22: Zusammenwachsen der Bereiche, in denen Oszillationen möglich sind, bei Erhöhung von α . Die untere der beiden Kurven (Teilbilder **(a)** und **(b)**) gehört zur Hopf-Isola, die bereits beim ungestörten Übergitter existiert; von ihr ist nur ein sehr kleiner Ausschnitt gezeichnet.

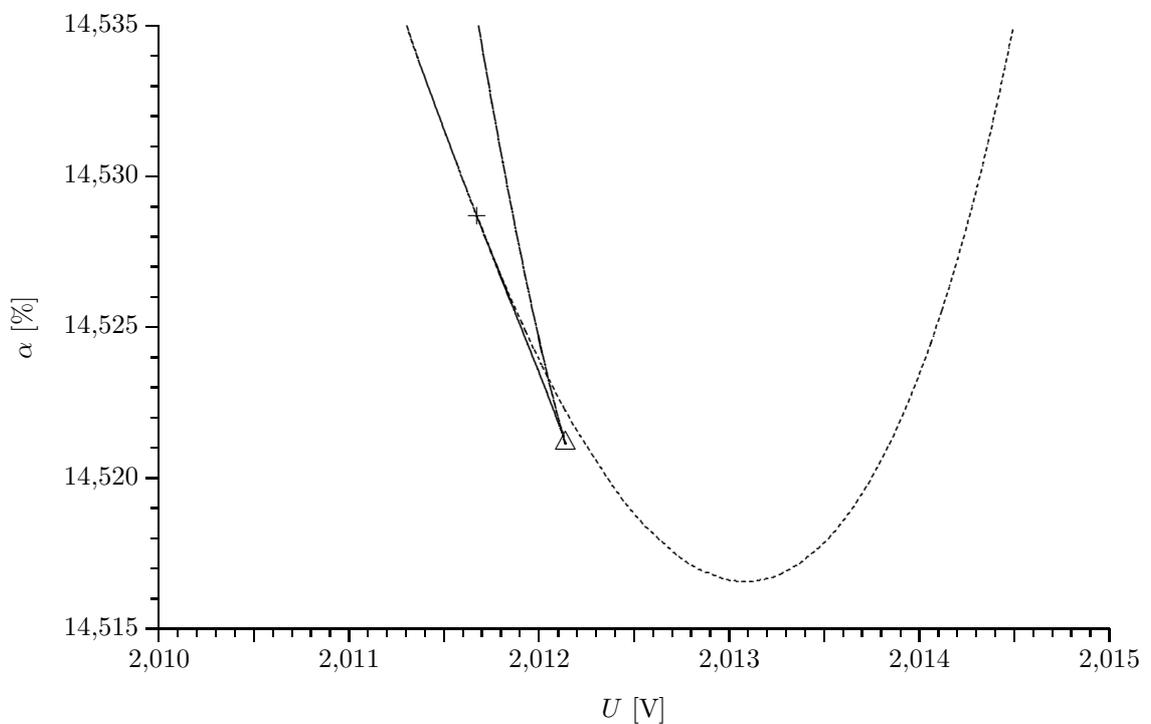


Abbildung 6.23: Umgebung eines Takens-Bogdanov-Punktes. Die Kurve aus Hopf-Bifurkationspunkten schmiegt sich an eine Kurve aus Sattel-Knoten-Bifurkationspunkten an. Letztere Kurve läuft in einen Cusp-Punkt und von dort aus wieder nach oben.

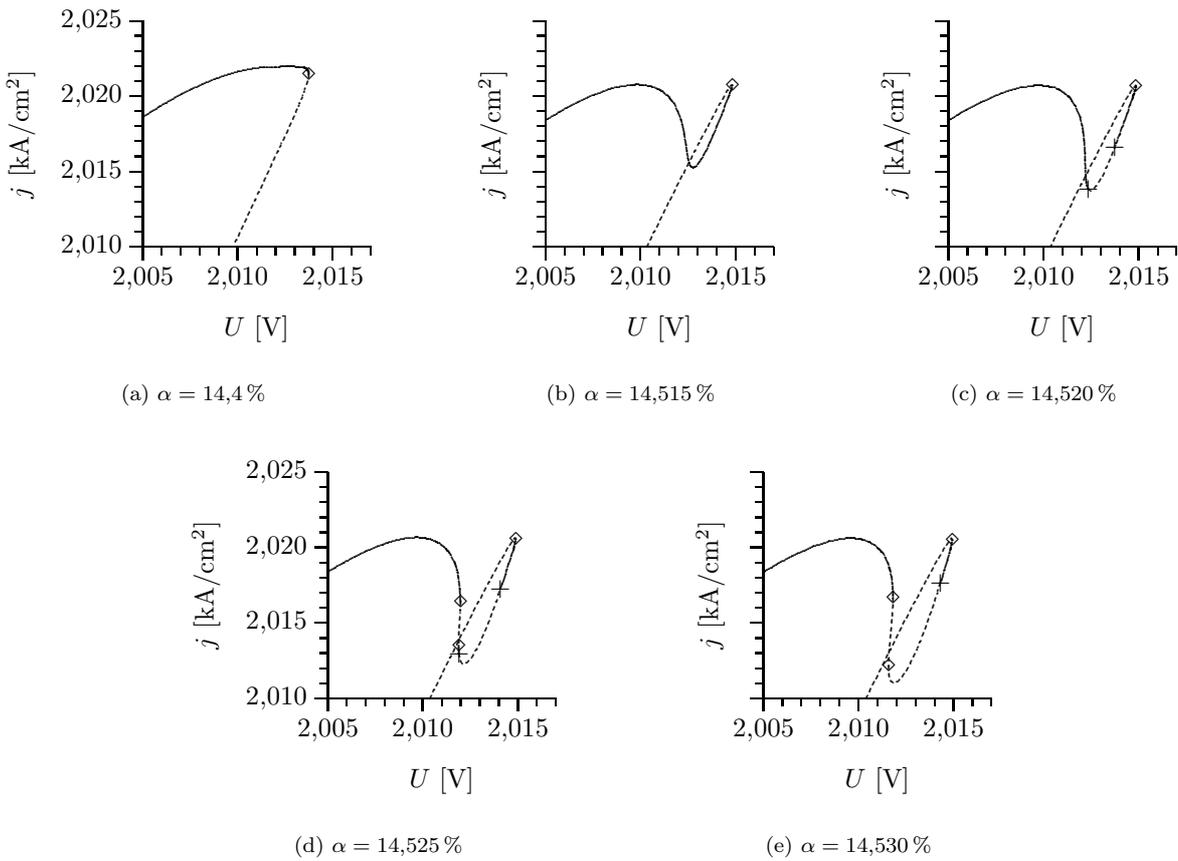


Abbildung 6.24: Kennlinien für verschieden stark gestörte Übergitter. Das qualitative Aussehen dieser Kennlinien kann bereits aus Abbildung 6.23 gefolgert werden.

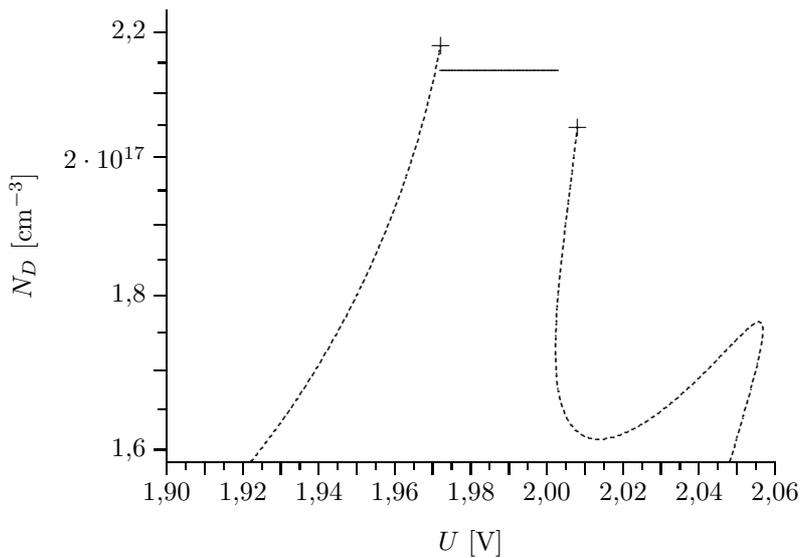


Abbildung 6.25: Lage der Hopf-Bifurkationspunkte in der Nähe der Takens-Bogdanov-Punkte für $\alpha = 17,5\%$. Die durchgezogene Linie ist diejenige, entlang derer im folgenden Oszillationen untersucht werden. An den Enden dieser Linie enden auch die Grenzzyklus-Oszillationen.

ten als die Sattel-Knoten-Bifurkationspunkte. Damit zeigt der Takens-Bogdanov-Punkt mit steigendem α zuerst dadurch Auswirkungen, daß es zusätzliches Paar von Hopf-Bifurkationspunkten auftritt (Abbildung 6.24(c)). Erst bei weiterer Erhöhung von α ergeben sich in der Kennlinie auch zwei Sattel-Knoten-Bifurkationen (Abbildung 6.24(d)). Wird α so weit erhöht, daß der Wert über dem des (bezüglich α zuerst auftretenden) Takens-Bogdanov-Punktes liegt, verschwindet eine der beiden Hopf-Bifurkationen (Abbildung 6.24(e)). In den Kennlinien sieht man das Durchlaufen des Takens-Bogdanov-Punktes dadurch, daß eine Hopf-Bifurkation mit einer Sattel-Knoten-Bifurkation zusammenläuft und nur die Sattel-Knoten-Bifurkation übrig bleibt. Für diese Aussagen war es eigentlich gar nicht notwendig, die Kennlinien tatsächlich zu berechnen, da alle Aussagen bereits aus Abbildung 6.23 abgeleitet werden können.

Mit dem Wegfall einer Hopf-Bifurkation muß das Oszillationsgebiet durch Saddle-Loop-Bifurkationen begrenzt werden. Die Auswirkung dieser Bifurkationen soll an einem stärker gestörten Übergitter untersucht werden. Abbildung 6.25 zeigt die Lage der Hopf-Bifurkationspunkte für dieses Übergitter. Im folgenden werden die Oszillationen entlang der Linie untersucht, die in dieser Abbildung durchgezogen eingezeichnet ist. Am rechten Ende dieser Linie befindet sich eine Saddle-Loop-Bifurkation, am linken eine Hopf-Bifurkation.

Abbildung 6.26 zeigt die Entwicklung von Oszillationsfrequenz und Oszillationsamplitude entlang dieser Linie. Für kleine Spannungen liegt eine Hopf-Bifurkation vor. Dies wird auch durch den Abfall der Amplitude bestätigt. Der gleichzeitig stattfindende Abfall der Frequenz ist auf den ersten Blick jedoch ungewöhnlich. Allerdings fällt die Frequenz nicht bis auf Null ab, sondern bleibt endlich. Außerdem muß berücksichtigt werden, daß mit wachsender Amplitude ein immer größerer Teil des Phasenraums durchlaufen wird, der somit Einfluß auf die Oszillationsfrequenz haben kann. Dies gilt insbesondere für die Umgebung eines Takens-Bogdanov-Punktes: Er ist durch den doppelten Eigenwert Null gekennzeichnet. Damit sind auch die in erster Näherung die Frequenz bestimmenden Imaginärteile der Eigenwerte Null. Mit wachsendem Abstand vom Takens-Bogdanov-Punkt ist al-

so zu erwarten, daß die Frequenz ansteigt. In der Nähe der Saddle-Loop-Bifurkation zeigen sowohl Amplitude als auch Frequenz das erwartete Verhalten.

Untersucht man nicht nur die Frequenz, sondern auch die Form der Oszillationen, so sieht man (Abbildung 6.27), daß mit Annäherung an die Saddle-Loop-Bifurkation immer längere ruhige Phasen auftreten. Dies ist nicht verwunderlich, da sich der Grenzyklus immer mehr der Form des homoklinen Orbits anpaßt, mit dem er bei geringfügiger weiterer Parameterveränderung verschmelzen wird. In der Nähe des Fixpunktes ist die Dynamik sehr langsam, was zu einer ruhigen Phase führt, die von einem „Ausbruch“ unterbrochen wird.⁷ Man könnte diese Oszillation daher als „Spiking“ bezeichnen.

Trägt man die Feldverteilung während einer solchen Oszillation auf, so ergibt sich ein Bild wie in Abbildung 6.28. Durch die großen Dotierungsfluktuationen sind jetzt auch Oszillationen bei deutlich höheren Dotierungsdichten möglich. Bei diesen haben sich bereits eine deutlich getrennte Hochfeld- und Niederfelddomäne ausgeprägt, während im ungestörten Übergitter Oszillationen immer mit einer stark verwaschenen Domänenstruktur verbunden waren. Die Oszillation führt nun zu einer kurzzeitigen Veränderung, bei der die Domänenstruktur nicht mehr ganz so stark getrennt ist. Es ist also ein „Spiking“ zwischen zwei Domänenzuständen, nicht eines zwischen einem Domänenzustand und einem homogenen Zustand.

Abschließend sei noch gezeigt, bei welchen Parameterwerten Takens-Bogdanov-Punkte vorhanden sind. Hierbei handelt es sich um eine Kurve im $U-N_D-\alpha$ -Raum. Für die graphische Darstellung müssen damit zwei dieser drei Parameter ausgewählt werden, auf die die Kurve projiziert wird. In Abbildung 6.29 wurden N_D und α ausgewählt, weil damit abgeschätzt werden kann, bis zu welchen Dotierungen oszillatorisches Verhalten auftreten kann und wie stark das Übergitter dafür gestört sein muß. Neben den beiden Takens-Bogdanov-Punkten ist auch die Lage des Cusp-Punktes eingetragen, der bereits in Abbildung 6.23 zu sehen war. Die beiden Takens-Bogdanov-Punkte laufen mit dem Cusp-Punkt zusammen und haben damit eine gemeinsame Ursache. Diese Bifurkation wurde bereits theoretisch untersucht [Dum92], jedoch nicht mit einem Namen versehen.

⁷Siehe hierzu auch die Ausführung im Abschnitt 7.2. Der dort vorhandene homokline Orbit beruht zwar auf vollkommen anderen Effekten, die Auswirkungen auf in der Nähe liegende Grenzyklen sind aber die selben.

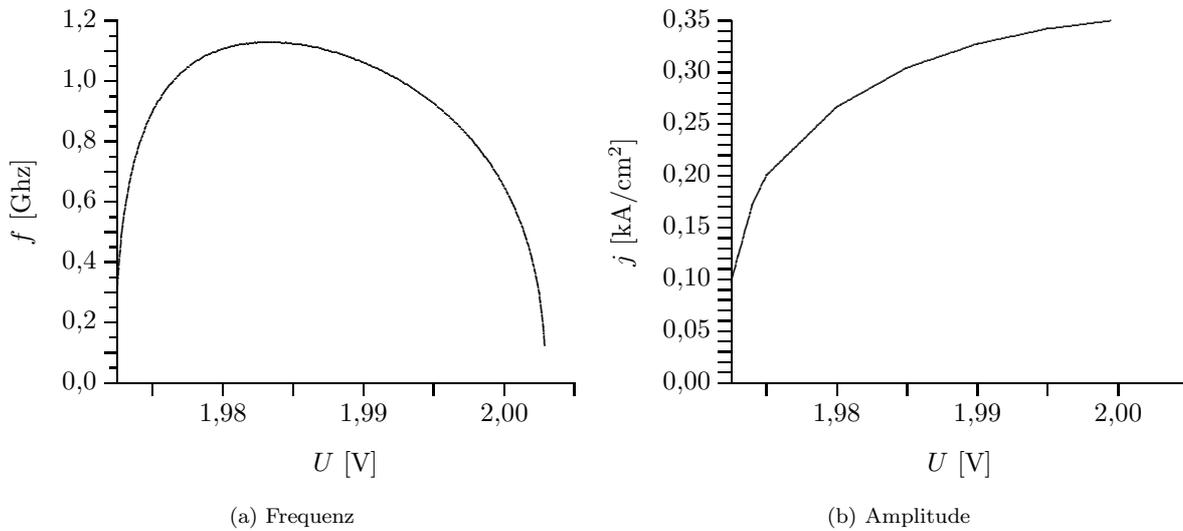


Abbildung 6.26: Oszillationsamplitude und Oszillationsfrequenz entlang der durchgezogenen Linie aus Abbildung 6.25. Bei hohen Spannungen erkennt man gut die Saddle-Loop-Bifurkation, die zu einem Absinken der Frequenz bis auf Null bei gleichzeitig unveränderter Amplitude führt. Das Absinken der Frequenz bei kleinen Spannungen ist für eine Hopf-Bifurkation eher untypisch, allerdings auch nicht verboten: Zum einen ist zu erkennen, daß die Frequenz nicht gegen Null sinkt, zum anderen ist es durch die komplizierte Dynamik in der Umgebung des Takens-Bogdanov-Punktes auch nicht weiter verwunderlich, daß sich die Frequenz verändert, wenn ein immer größerer Teil des Phasenraumes von der Trajektorie überstrichen wird.

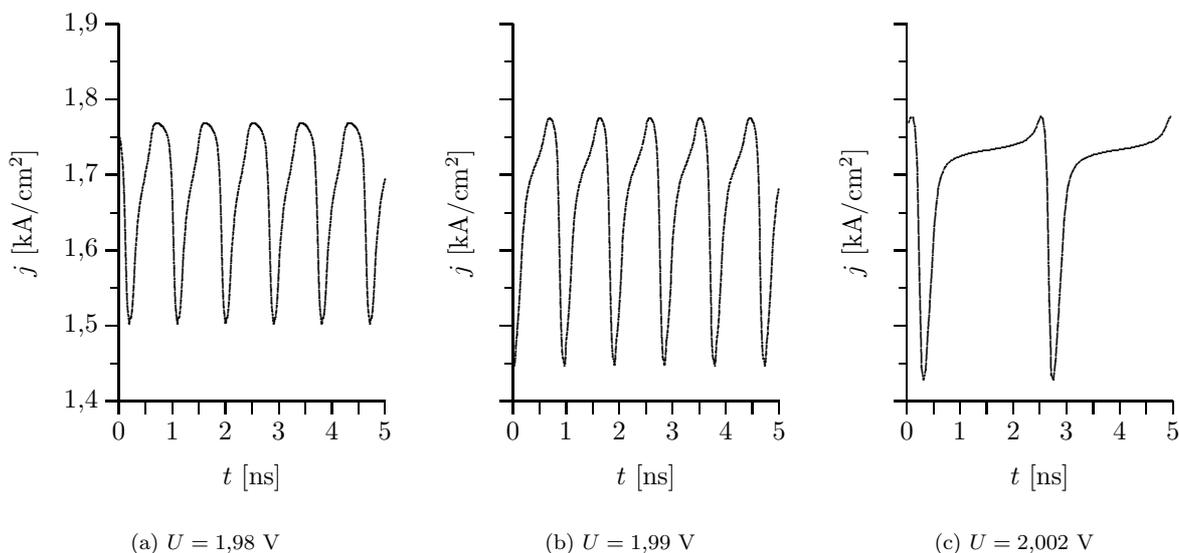


Abbildung 6.27: Oszillationen in der Nähe der Saddle-Loop-Bifurkation. Bei Erhöhung der Spannung nähert sich das System immer weiter der Saddle-Loop-Bifurkation, die bei etwa $U = 2,0029$ V liegt. Damit verringert sich die Frequenz und es gibt eine immer längere Phase, in denen die Stromdichte sich nur langsam verändert.

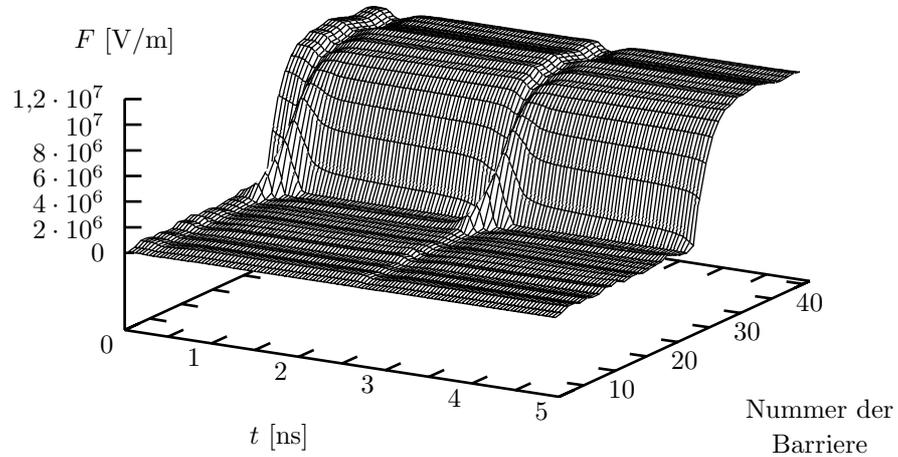


Abbildung 6.28: Feldverteilung während der Stromoszillation aus Abbildung 6.27(c). Die Aufteilung in eine Hochfeld- und eine Niederfelddomäne wird durch die hohe Dotierung bewirkt, die langen ruhigen Abschnitte durch die Nähe der Saddle-Loop-Bifurkation.

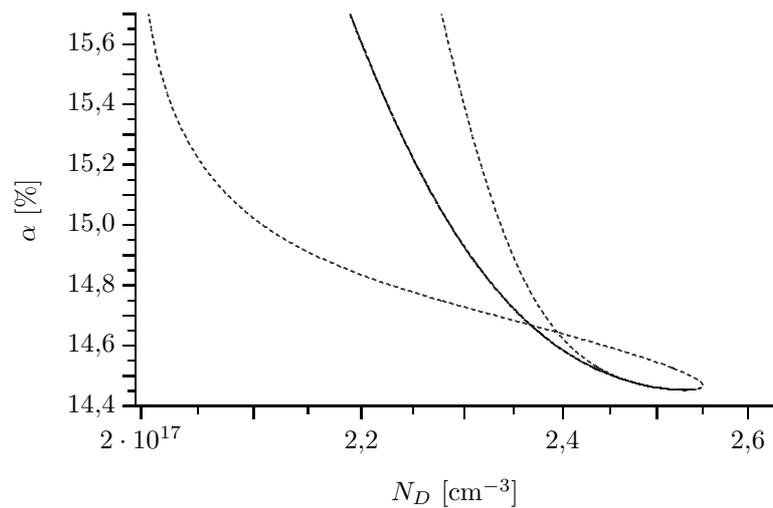


Abbildung 6.29: Lage der Takens-Bogdanov-Punkte. Diese liegen auf einer Kurve im U - N_D - α -Raum, so daß hier nur eine Projektion gezeigt werden kann. Die Takens-Bogdanov-Punkte sind gestrichelt dargestellt, Cusp-Punkte durchgezogen.

Kapitel 7

Neumann-Randbedingungen

oder

„Randbedingungen, die einen exakt homogenen Feldzustand erlauben“

Bereits im Abschnitt 3.6 wurde darauf hingewiesen, daß praktisch alle Randbedingungen zu den gleichen Ergebnissen führen – mit Ausnahme einer. Diese soll in diesem Kapitel behandelt werden. In der dortigen Notation ist diese „besondere“ Randbedingung durch $c_1 = 1$ und $c_2 = 0$ gekennzeichnet. Anschaulich bedeutet dies, daß die Elektronendichten aus den letzten „realen“ Quantentöpfen in die „virtuellen“ Randtöpfe kopiert werden, mathematisch gesehen handelt es sich um die diskrete Version der Neumann-Randbedingungen.

Die Untersuchung dieser Randbedingung ist aus zwei Gründen interessant: Zum einen führen diese Randbedingungen zu Entartungen des Systems, die in zusätzlich auftretenden Bifurkationen resultieren. Zum anderen wurden diese Randbedingungen in früheren Arbeiten wie zum Beispiel [Pre94a] oder [Pre94b] verwendet, in [Sch96b] auch zum Vergleich mit „festen“ Randbedingungen. Die dort durch Simulation erhaltenen Ergebnisse sollen in diesem Kapitel ebenfalls erklärt werden.

7.1 Kleine und mittlere Dotierungen

Nur bei Neumann-Randbedingungen gibt es einen stationären Zustand mit exakt homogener Feldverteilung. Hierfür muß in allen Quantentöpfen, auch in den virtuellen Randtöpfen, Ladungsneutralität gelten, womit alle Randbedingungen mit festgehaltener Dotierung in den Randtöpfen ausscheiden¹. Ein exakt homogener Zustand kann selbstverständlich keine Effekte wie Astbildung zeigen, so daß wegen der bekannten Merkmale der Kennlinie eines Übergitters weitere Zustände existieren müssen.

Abbildung 7.1 zeigt die Kennlinie eines Übergitters mit $N_D = 2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Bei dieser Dotie-

rung gibt es oszillatorisches Verhalten, wovon in diesem Abschnitt aber abstrahiert werden soll. In der Abbildung erkennt man drei Äste, die mit den Buchstaben „a“ bis „c“ bezeichnet sind. Der homogene Zustand ist mit einem „b“ markiert. Wie zu erwarten war, ist er genau im NDC-Bereich instabil und außerhalb stabil. Die Verbindung mit den beiden anderen Ästen erfolgt durch transkritische Bifurkationen.

Der Zustand „a“ bricht bei etwa 0,1 V ab, der Zustand „c“ schon bei etwa 1 V. Dies ist nicht so zu verstehen, daß die Äste nur bis zu diesen Punkten existieren. Vielmehr nehmen die Elek-

¹Betrachtet man nur ein Energieniveau, so würde das Festhalten der Dotierung in den Randtöpfen auf der einfachen Dotierungsdichte einen homogenen Zustand erlauben. Bei Betrachtung von zwei Energieniveaus müßte auch die Verteilung der Elektronen auf die beiden Subbänder korrekt gewählt werden, die aber spannungsabhängig ist. Das relevante ist nicht, daß für jeden Zustand am Rand des Übergitters der Gradient der Elektronendichten verschwindet, sondern nur, daß dieses für den homogenen Zustand der Fall ist. Es lassen sich beliebig komplizierte Randbedingungen angeben wie zum Beispiel $n_2^{(0)} = n_2^{(1)}$, $n_1^{(0)} = 3n_1^{(1)} + 2n_2^{(1)} - 2N_D$, die diese Bedingung ebenfalls erfüllen, ohne Neumann-Randbedingungen zu sein.

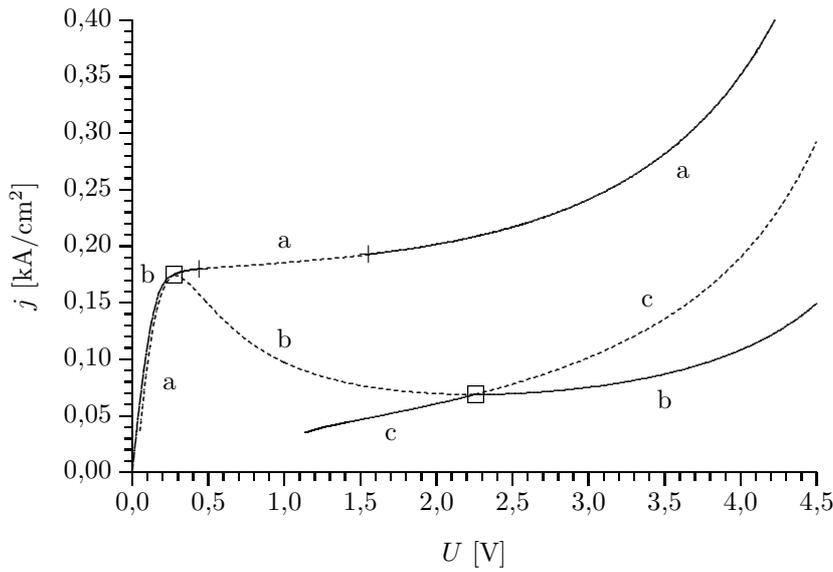
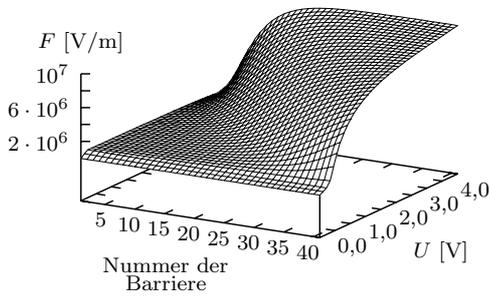
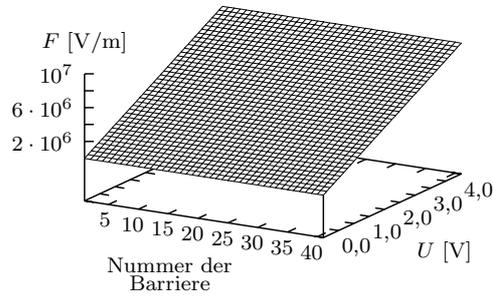


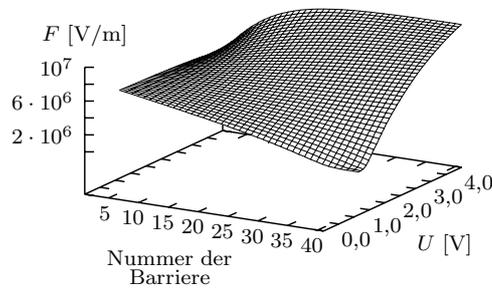
Abbildung 7.1: Kennlinie für $N_D = 2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Die in den Hopf-Bifurkationen entstehenden Grenzzyklen sind nicht eingezeichnet. Die Kennlinie besteht aus drei Ästen, die mit den Buchstaben „a“, „b“ und „c“ bezeichnet sind.



(a) „Domäne“



(b) Homogener Zustand



(c) „Falsche Domäne“

Abbildung 7.2: Feldprofile der drei Kennlinienäste aus Abbildung 7.1. Die Äste sind dort gleich bezeichnet wie die Teilbilder in dieser Abbildung.

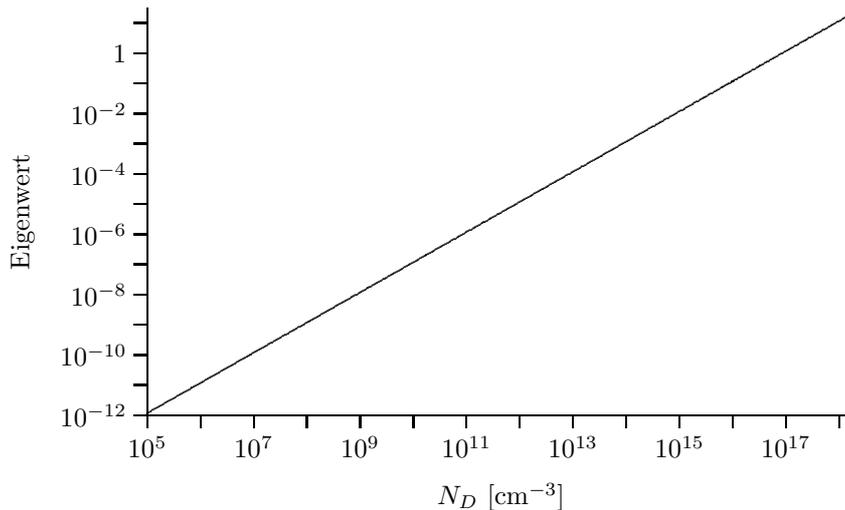


Abbildung 7.3: Größter Eigenwert des homogenen Zustands im NDC-Bereich in Abhängigkeit von der Dotierung. Wegen des großen überstrichenen Bereiches mußten die Daten doppeltlogarithmisch aufgetragen werden. Es ergibt sich, daß der Eigenwert direkt proportional zur Dotierung ist.

tronendichten entlang der betreffenden Äste immer mehr ab und gehen asymptotisch gegen Null. Unterhalb einer gewissen Grenze für die Elektronendichten sind die Zustände nicht mehr als physikalisch sinnvoll anzusehen, so daß eine weitere Verfolgung nicht sinnvoll ist².

Die Feldverteilungen der drei Äste sind in Abbildung 7.2 aufgetragen. Der besseren Darstellung wegen sind die Spannungs- und die „Quantentopf-Achse“ im Vergleich zu den bisherigen Abbildungen vertauscht. Wie bereits erwähnt, ist die Feldverteilung von Ast „b“ exakt homogen; die Feldstärke ist direkt proportional zur angelegten Spannung. Zum Ast „a“ gehört eine verwaschene Felddomäne, wie sie für diese Dotierung auch bei anderen Randbedingungen beobachtet wird (siehe zum Beispiel Abbildung 4.21). Wie schon die Hopf-Bifurkationen in Abbildung 7.1 zeigen, zweigen sich die Oszillationen von diesem Ast ab; bei höheren Dotierungen kommt es auf diesem Ast zur Ausbildung von Stromästen³. Der obere Ast ist also derjenige, der als einziger auch bei Dirichlet-Rand-

bedingungen existiert.

Die Feldverteilung entlang des Astes „c“ schließlich zeigt ebenfalls eine Domänenstruktur. Diese liegt aber auf der „falschen“ Seite. Die „normale“ Hochfelddomäne liegt auf der Anodenseite (also dort, wo die Elektronen hinfließen) und ist mit einer Ladungsträgeransammlung verbunden. Die „falsche“ Hochfelddomäne liegt auf der Kathodenseite und wird durch eine Ladungsträgerverarmung hervorgerufen. Es ist leicht einsichtig, daß letztere zu einem geringeren Stromfluß führt, da der fließende Strom proportional zur Anzahl der vorhandenen Ladungsträger ist. Damit führt die Ladungsträgerverarmung einer „falschen“ Domäne zu einer Reduzierung des Stroms. Ansonsten sei für die Diskussion der Lage der Hochfelddomäne auch auf den Anhang C (Seite 117) verwiesen.

In Arbeiten wie [Pre94a] oder [Sch95b] wird vermutet, daß der homogene Zustand unterhalb einer gewissen Dotierung für alle Spannungen stabil sei⁴. Aus diesem Grund ist in Abbildung 7.3

²Zusätzlich gibt es auch numerische Probleme. Die Elektronendichten dürfen nicht negativ werden, da die Übergangsrate von einem Quantentopf zum einem anderen proportional zur Elektronendichte im Ausgangsquantentopf ist. Der Integrationsalgorithmus paßt die Schrittweite so an, daß der relative Fehler jedes Integrationsschrittes unter einer vorgegebenen Grenze bleibt. Bei sehr kleinen Elektronendichten werden daher die Schrittweiten unter Umständen extrem klein. Irgendwann versagt der Integrationsalgorithmus, insbesondere weil er nur den Abschneide-, nicht aber den Integrationsfehler berücksichtigen kann. Dies zeigt sich dann daran, daß die numerisch bestimmten Elektronendichten auch negative Werte annehmen.

³Wenn in diesem Kapitel von „Ast“ die Rede ist, so ist damit eine Kurve von Fixpunkten gemeint. Wenn die bei der Simulation einer Kennlinie für hohe Dotierung auftretende Struktur gemeint ist, so wird diese ausdrücklich als „Stromast“ bezeichnet.

⁴Bei Simulationen tritt folgendes Problem auf: Entlang des homogenen Astes ist die Gesamtladungsdichte konstant, nämlich gleich der Dotierungsdichte. Bei Veränderung der Spannung ändert sich nur die Verteilung der Elektronen auf die beiden Subbänder. Diese Änderung ist zum einen nur gering, zum anderen ist die Dynamik innerhalb eines Quantentopfes deutlich schneller als die zwischen verschiedenen Quantentöpfen. Um den homogenen Zustand zu verlassen und einen Domänenzustand zu erreichen, müssen aber Elektronen in einen anderen Quantentopf bewegt und dort angesammelt werden. Wird der homogene Zustand bei Erhöhung der Spannung instabil, so werden sich die Elektronendichten in den beiden Subbändern sehr schnell derart anpassen, daß der sich ergebende Zustand „fast“ stationär ist. Bricht man jetzt

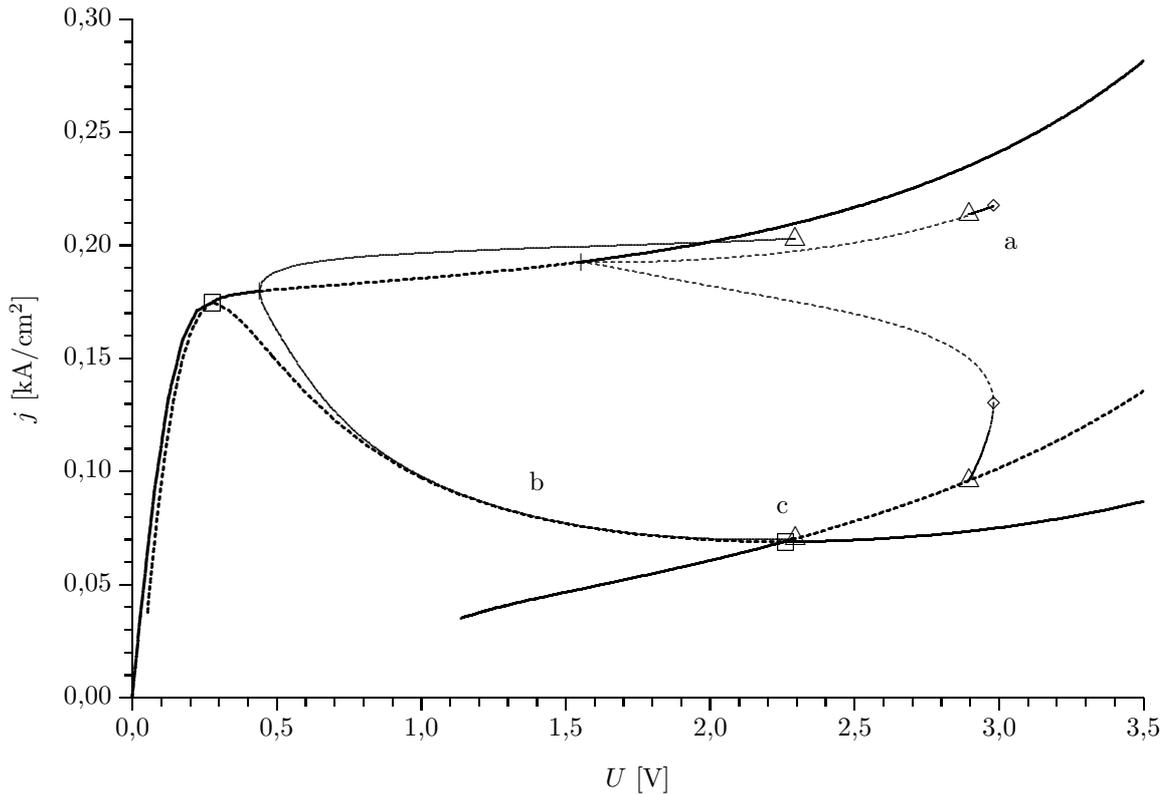


Abbildung 7.4: Bifurkationsdiagramm mit Oszillationen. Für diese Abbildung gilt eine besondere Darstellungsweise: Stabile „Objekte“, sowohl Fixpunkte als auch Grenzzyklen, sind durchgezogen gezeichnet, instabile gestrichelt. Die Linien für Fixpunkte sind hierbei etwas dicker als die für Grenzzyklen. Bei letzteren ist jeweils der größte und der kleinste Wert für die Stromdichte während der Oszillation eingezeichnet. Jede Bifurkation eines Grenzzyklus ist daher zweimal zu sehen – einmal an der oberen und einmal an der unteren Kurve. Die Buchstaben markieren Stellen im Diagramm, auf die im Text besonders eingegangen wird.

der größte Eigenwert (dieser ist rein reell) in Abhängigkeit von der Dotierung aufgetragen. Es ergibt sich, daß der Eigenwert direkt proportional zu N_D ist. Dies stimmt mit dem Ergebnis aus [Sch95b, Anhang E] überein, nur daß dort ein zusätzlicher (negativer) Offset angenommen wurde⁵. Dementsprechend existieren auch die beiden transkritischen Bifurkationen unabhängig von N_D . Da die Spannungen, bei denen der

NDC-Bereich beginnt bzw. endet, nicht von der Dotierung abhängen, verändern sie auch nicht ihre Lage.

Die Abbildung 7.1 ist daher für alle Dotierungen, bei denen noch keine Astbildung auftritt, typisch. Gegebenenfalls muß nur der durch die Hopf-Bifurkation instabile gewordene Teil des „Domänenastes“ weggelassen werden.

7.2 Oszillationen

Abbildung 7.4 zeigt wieder die Kennlinie für $N_D = 2 \cdot 10^{16}$. Dort sind jetzt auch die durch die Hopf-Bifurkationen entstehenden Grenzzyklen dargestellt. Für jeden Grenzzyklus sind jeweils der größte und der kleinste Wert für die Stromdichte j eingezeichnet, die auf ihm er-

reicht werden. Für jeden Grenzzyklus sind in der Grafik also zwei Kurven zu sehen, die im folgenden als „obere“ und als „untere“ Kurve bezeichnet werden.

Die linke Hopf-Bifurkation ist – genau wie die Hopf-Bifurkationen, die bei „neuen“ Randbedin-

den Integrationsvorgang ab, so erscheint der homogene Zustand fälschlicherweise weiterhin stabil zu sein. Im Vergleich zu dieser Zeit, bei der die Übergangsraten (zeitlich lokal gesehen) minimal werden, muß bei kleinen Dotierungen bis zu hundertmal länger ausintegriert, um das Verlassen des homogenen Zustands zu erkennen.

⁵Dieser Offset existiert für die anderen Eigenwerte. Oberhalb einer bestimmten Dotierung ist im NDC-Bereich nicht nur eine Mode instabil. Da sich die anderen $2N - 1$ Eigenwerte nur wenig unterscheiden, werden sie bei ungefähr der gleichen Dotierung instabil. Diese liegt bei etwa $2,3 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Diese hohe Entartung der auftretenden Bifurkation führt zum Versagen aller getesteten Algorithmen. Es ist ohne Probleme möglich, den homogenen Zustand unterhalb und oberhalb dieser Grenze zu berechnen und zu verfolgen, nicht jedoch die dazwischen liegenden Bifurkationen zu berechnen.

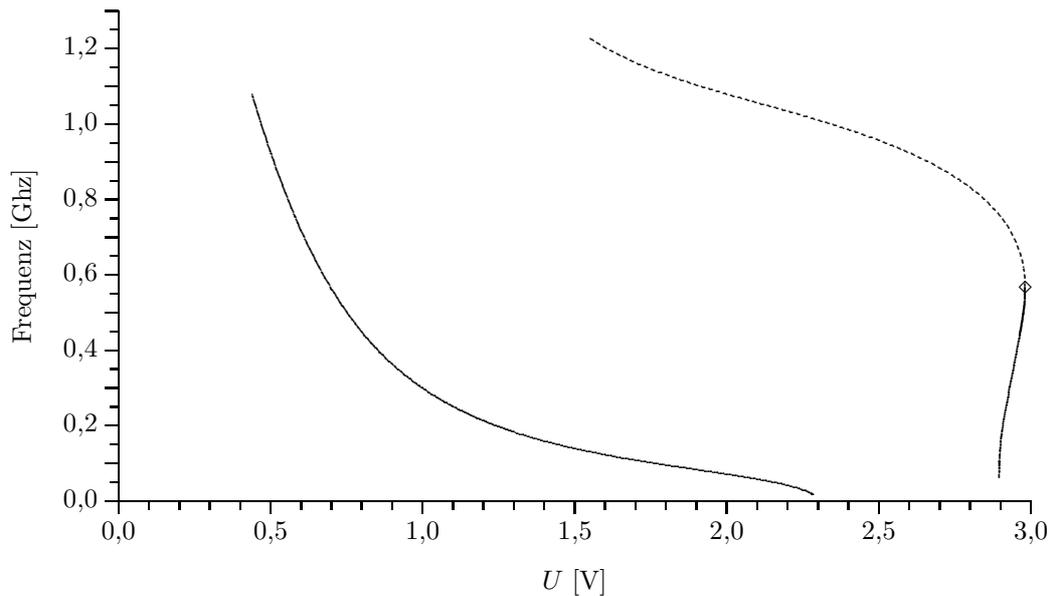


Abbildung 7.5: Veränderung der Oszillationsfrequenz mit der Spannung für die Grenzzyklen aus Abbildung 7.4. Die Frequenzen der stabilen Grenzzyklen sind durchgezogen eingezeichnet, die des instabilen Grenzzyklus gestrichelt. Das Absinken der Frequenz bis auf Null bei gleichzeitig endlicher Amplitude ist charakteristisch für eine Saddle-Loop-Bifurkation.

gungen auftreten – superkritisch, während im Gegensatz dazu die rechte subkritisch ist. Der sich in der subkritischen Hopf-Bifurkation abspaltende instabile Grenzzyklus läuft ungefähr bis zu einer Spannung von 3 V. Dort wird er in einer Sattel-Knoten-Bifurkation stabil. Der jetzt stabile Grenzzyklus läuft wieder in Richtung kleinere Spannungen. Dies ist in den unteren Kurven gut zu erkennen, während die oberen Kurven (siehe Punkt „a“ in der Abbildung) direkt nebeneinander laufen.

Der andere stabile Grenzzyklus (der, der sich in der superkritischen Hopf-Bifurkation abgespalten hat) erreicht mit wachsendem Abstand vom Bifurkationspunkt eine immer größere Amplitude, bis er schließlich in den Bereich des homogenen Fixpunktes gelangt (Punkt „b“). Wie weiter unten noch gezeigt wird, ist dem nicht nur bei der Auftragung der Stromdichte so, sondern auch im Phasenraum.

Beide stabilen Grenzzyklen enden jeweils in einer Saddle-Loop-Bifurkation. Charakteristisches Zeichen ist das Absinken der Frequenz bis auf Null, während die Oszillationsamplitude sich nicht verändert. Die Frequenzabhängigkeit aller Grenzzyklen ist in Abbildung 7.5 zu sehen. Die erste Saddle-Loop-Bifurkation geschieht in unmittelbarer Nähe einer transkritischen Bifurkation (Punkt „c“). Man könnte daher vermuten, daß diese beiden Bifurkation beim gleichen Spannungswert stattfinden und in der Berechnung nur durch numerische Ungenauigkeiten getrennt sind. Es muß allerdings berück-

sichtigt werden, daß die Position der transkritischen Bifurkation sehr genau bestimmt werden kann. Eine Saddle-Loop-Bifurkation dagegen wird meistens etwas zu „früh“ erkannt, d. h., der Grenzzyklus wird zu früh als nicht mehr existent erkannt, weil dessen Periodenlänge größer als eine vorgegebene Grenze geworden ist. Unter Berücksichtigung dieser Effekte müßte der Abstand der beiden Bifurkationen also eher etwas größer denn etwas kleiner sein als eingezeichnet.

Wie bereits erwähnt, beeinflußt der homogene Ast den Grenzzyklus, der von der superkritischen Hopf-Bifurkation ausgeht, und damit die Form der Oszillation. Abbildung 7.6 zeigt das entsprechende Phasenportrait. Vom Fixpunkt, der zum homogenen Ast gehört, geht ein homokliner Orbit aus. Die hier nicht eingezeichnete andere instabile Mannigfaltigkeit läuft auf den dritten Fixpunkt („falsche“ Domäne, bei dieser Spannung stabil) zu. Der Unterschied zwischen Grenzzyklus und homoklinen Orbit ist visuell kaum noch zu erkennen, aber groß genug, um eine Oszillation mit einer Periodenlänge von weniger als 10 ns zu erhalten; auch kleinste Abweichung des Grenzzyklus haben also noch Auswirkungen. Man kann also sagen, daß der Grenzzyklus in den homoklinen Orbit „eingesperrt“ ist. Auch in einem hochdimensionalen Phasenraum ist dieses möglich, wenn die Dynamik innerhalb einer bestimmten Ebene im Phasenraum langsam, orthogonal dazu aber schnell ist.

Der homogene Zustand beeinflußt damit nicht nur den Grenzzyklus, während letzterer exi-

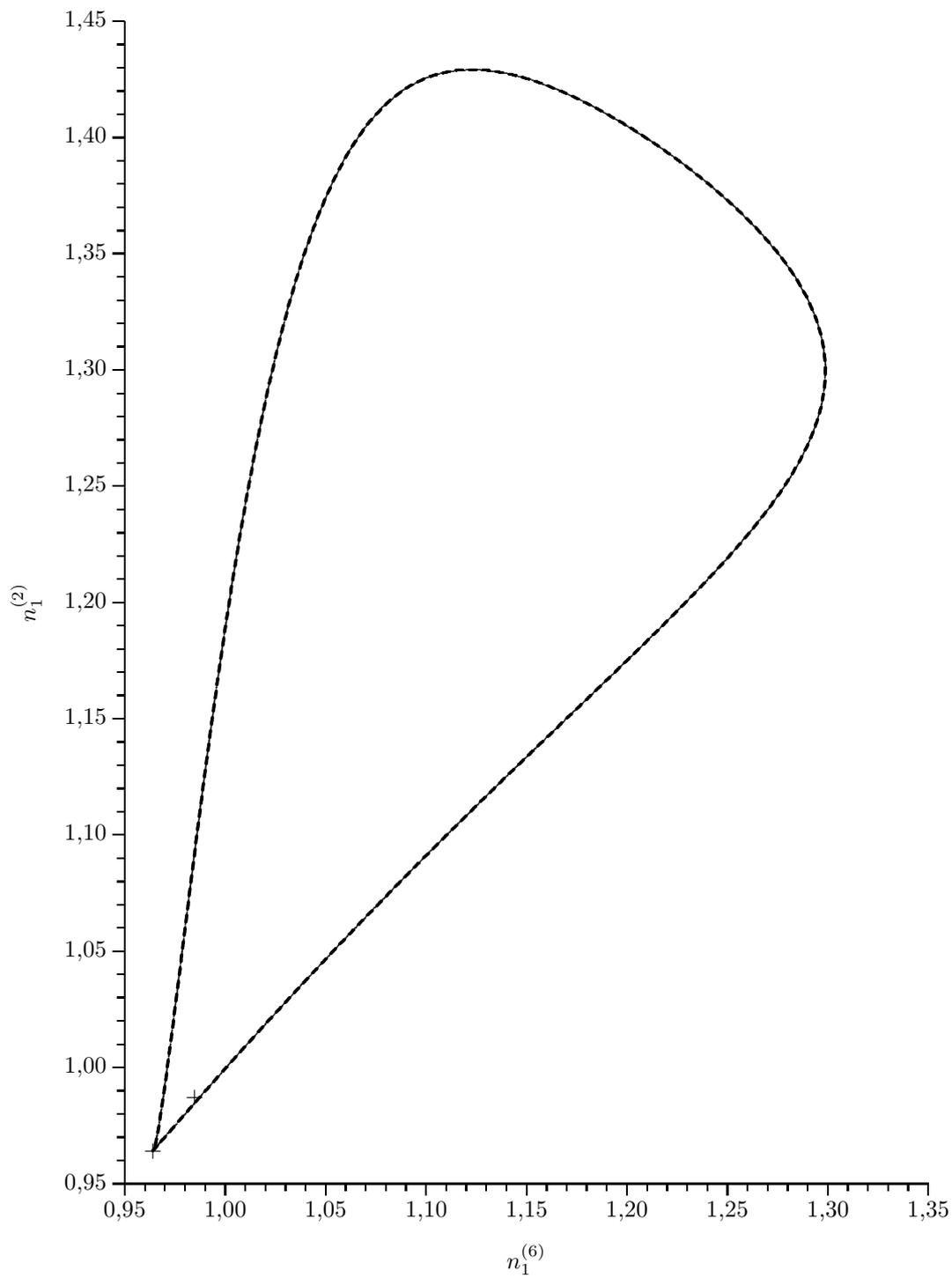


Abbildung 7.6: Homokliner Orbit und Grenzzyklus. Der homokline Orbit ist durch eine einfache durchgezogene Linie gekennzeichnet, der Grenzzyklus durch eine dickere, aber gestrichelte. Der näher am Ursprung liegende Fixpunkt gehört zum homogenen Ast, der weiter entfernte zum Domänenast.

stiert, sondern ist auch für dessen Abbruch in einer Saddle-Loop-Bifurkation verantwortlich. Daß in Abbildung 7.4 die Saddle-Loop-Bifurkationen auf den unteren Kurven genau an den Stellen liegen, wo diese auf den homogenen Zustand treffen, ist also kein Effekt der Projekt des Phasenraums auf die Stromdichtenachse.

Dies erklärt auch das Auftreten von Spiking-Oszillationen (Abbildung 7.7(e) und 7.7(f)), die ein Effekt sind, der als „besonderes Merkmal“ von Neumann-Randbedingungen gilt. Spiking-

Oszillationen sind durch zwei Merkmale gekennzeichnet: Zum einen besitzen sie eine lange Phase mit einer fast homogenen Feldverteilung, zum anderen kommt es periodisch zu schnellen „Ausbrüchen“. Dies kann durch das „Einsperren“ der Grenzzyklen in einen homoklinen Orbit erklärt werden: In der Nähe des Fixpunktes ist die Dynamik langsam. Weil dieser Fixpunkt eine homogene Feldverteilung besitzt, sieht man in der Simulation eine lange homogene Phase. Sobald das System genügend Abstand vom Fixpunkt gewonnen hat, beschreibt es eine „normale“ Os-

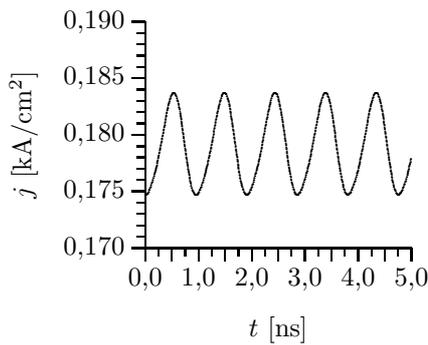
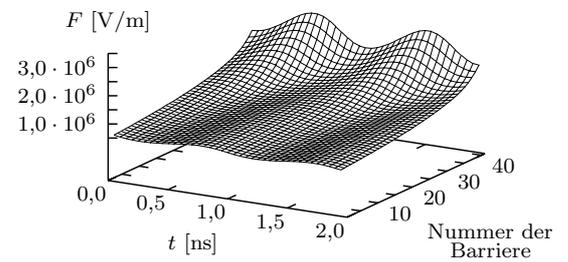
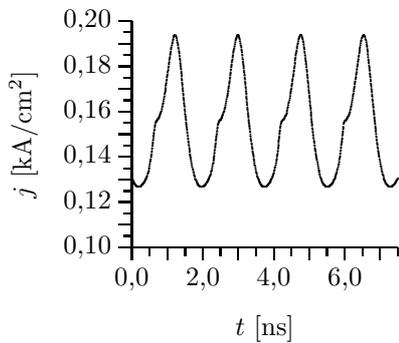
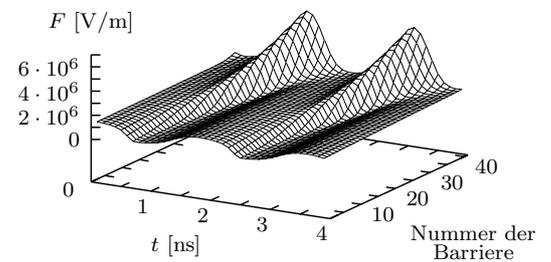
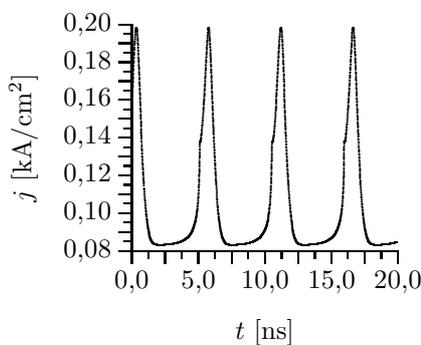
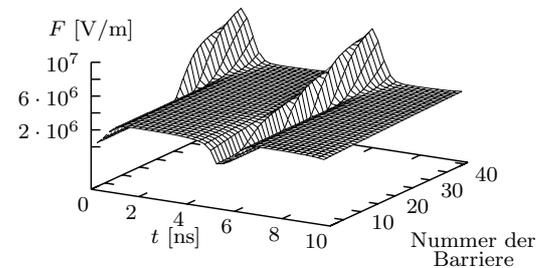
(a) Stromdichte, $U = 0,45$ V(b) Feldverteilung, $U = 0,45$ V(c) Stromdichte, $U = 0,7$ V(d) Feldverteilung, $U = 0,7$ V(e) Stromdichte, $U = 1,3$ V(f) Feldverteilung, $U = 1,3$ V

Abbildung 7.7: Oszillationen bei verschiedenen Spannungen. Mit wachsendem Abstand vom Hopf-Bifurkationspunkt wird aus der ungefähr harmonischen Oszillation eine Spiking-Schwingung.

zillation bis es wieder in den Bereich des Fixpunktes kommt.

Der sich in der superkritischen Hopf-Bifurkation abspaltende Grenzzyklus gerät nicht sofort unter den Einfluß des homoklinen Orbits. Dies ist schon deswegen nicht möglich, weil sich das System in der Nähe des Hopf-Bifurkationspunktes nur in der Nähe des Domänenastes aufhält.

7.3 Hochdotiertes Übergitter

Im Gegensatz zum Aufbau der Kennlinie bei kleinen Dotierungen ist derjenige bei hohen Dotierungen noch weitgehend unverstanden. Abbildung 7.8 zeigt eine bei weitem nicht vollständige Kennlinie. Eine Reihe von Ästen konnten aus numerischen Gründen nicht verfolgt werden, wie man zum Beispiel am homogenen Zustand sehen kann. Zum anderen gibt es eine Vielzahl von Bifurkationen. Zu Testzwecken wurde die Kennlinie eines Übergitters mit nur vier Quantentöpfen berechnet, die Berechnung aber abgebrochen, als bereits mehr als 1000 Bifurkationspunkte gefunden worden waren. Es ist daher zweifelhaft, ob die Anzahl der Bifurkationen überhaupt endlich ist.

Hauptursache hierfür dürfte der homogene Ast sein. Wie bereits im Abschnitt 7.1 erwähnt wurde, ist auf dem homogenen Ast im NDC-Bereich genau ein Eigenwert positiv, bei hinreichend hohen Dotierungen sind es aber alle Eigenwerte. Im Schnittpunkt des homogenen Astes mit dem Ast zur „falschen“ Domäne muß der homogene Zustand aber stabil werden. Es muß auf dem homogenen Ast also mehrere Bifurkationen geben, in denen jeweils ein Eigenwert sein Vorzeichen ändert. Dies ist auch in Abbildung 7.8 zu sehen. Bei einem Teil der Bifurkationen handelt es sich um Hopf-Bifurkationen. Dies ist höchstwahrscheinlich eine Auswirkung

Der Einfluß des homogenen Zustandes kann erst dann wirksam werden, wenn sich die Oszillation soweit vom Bifurkationspunkt entfernt hat, daß die Amplitude hinreichend groß geworden ist. Wie Abbildung 7.7 zeigt, wird dies auch unmittelbar durch Simulationen bestätigt. Auch bei Neumann-Randbedingungen erhält man harmonische Oszillationen, wenn man sich nicht zu weit vom Bifurkationspunkt entfernt.

numerischer Probleme.⁶ Ähnlich problematisch sind auch die transkritischen Bifurkationen. Es ist aus bifurkationstheoretischer Sicht eindeutig, daß es sie auf dem homogenen Ast geben muß. Die von ihnen ausgehenden zusätzlichen Äste führen jedoch sofort wieder zu weiteren transkritischen Bifurkationen, die wiederum zu weiteren Ästen und weiteren transkritischen Bifurkationen führen. Auf diese Weise kann eine große Zahl von Ästen und Bifurkationspunkten bestimmt werden, deren dynamischer Hintergrund stark bezweifelt werden muß.

Ansonsten kann in der Abbildung – wenn auch wegen der aus technischen Gründen schlechteren Qualität der Darstellung nicht besonders gut – erkannt werden, daß es sowohl im Domänenast als auch im Ast mit der „falschen“ Domäne eine stabile Aststruktur gibt. Die Hochfeld-domäne beginnt im Domänenast an der Anode, bei der falschen Domäne an der Kathode. Der „falsche“ Domäne ist kein Effekt, der nur durch Zweigverfolgung gefunden werden kann. Vielmehr erhält man in Simulationen oft – meistens ungewollt – einen Zustand mit einer „falschen“ Domäne. In diesem Fall muß die Simulation mit Anfangsbedingungen wiederholt werden, bei denen bereits der Anfangszustand eine kleine Ladungsträgeransammlung aufweist.

7.4 Unterschiedlich langes Übergitter

Das charakteristische Verhalten eines Übergitters kann nicht durch einen einzelnen Quantentopf erreicht werden. Dies gilt insbesondere für Oszillationen, die erst durch das Zusammenwirken einer größeren Anzahl von Quantentöpfen entstehen. In Abbildung 7.9 ist deswegen die Lage der Hopf-Bifurkationspunkte für verschiedene lange Übergitter aufgetragen. Entsprechende Untersuchungen für den Bereich der Bildung von Stromästen in hochdotierten Übergittern

sind wegen derer hohen Komplexität und zweifelhafter Relevanz nicht möglich bzw. nicht sinnvoll.

Vergleicht man die Lage der Bifurkationspunkte mit der entsprechenden Abbildung für neue („feste“) Randbedingungen auf Seite 44, so sieht man deutlich, daß Oszillationen jetzt bereits in deutlich kürzeren Übergittern möglich sind. Die exakte Grenze liegt bei $N = 17$. Wegen des Auftretens einer subkritischen Hopf-Bifurkation ist

⁶Es ist während der Berechnungen für diese Arbeit nie gelungen, einen Grenzzyklus in der Nähe einer solchen Hopf-Bifurkation zu bestimmen.

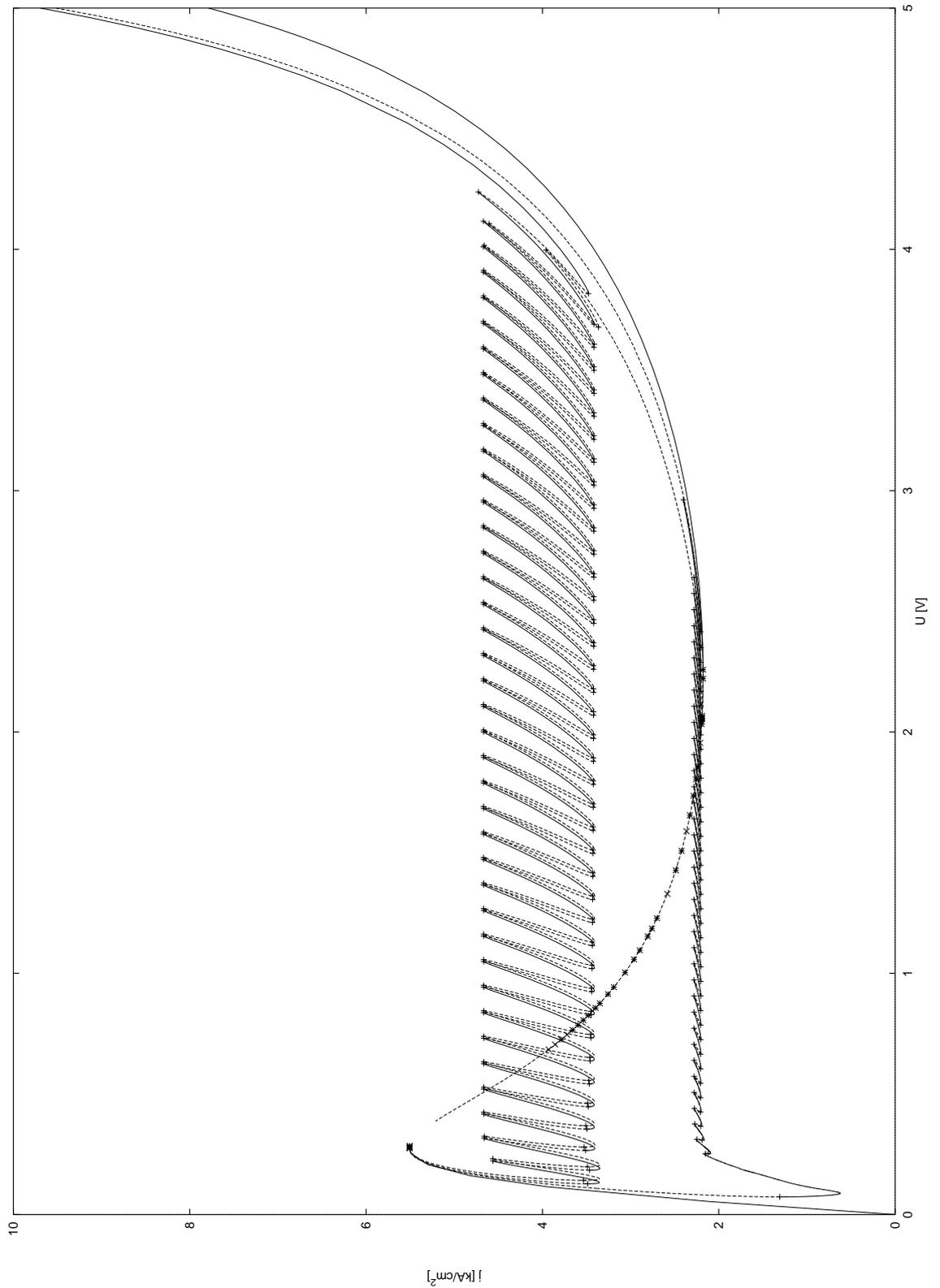


Abbildung 7.8: Kennlinie mit voll ausgeprägten Ästen. Es sind bei weitem nicht alle Äste der Kennlinie vollständig berechnet wurden, wie man am plötzlichen Abbrechen von Ästen und am Fehlen von abgehenden Ästen in transkritischen Bifurkationen sehen kann.

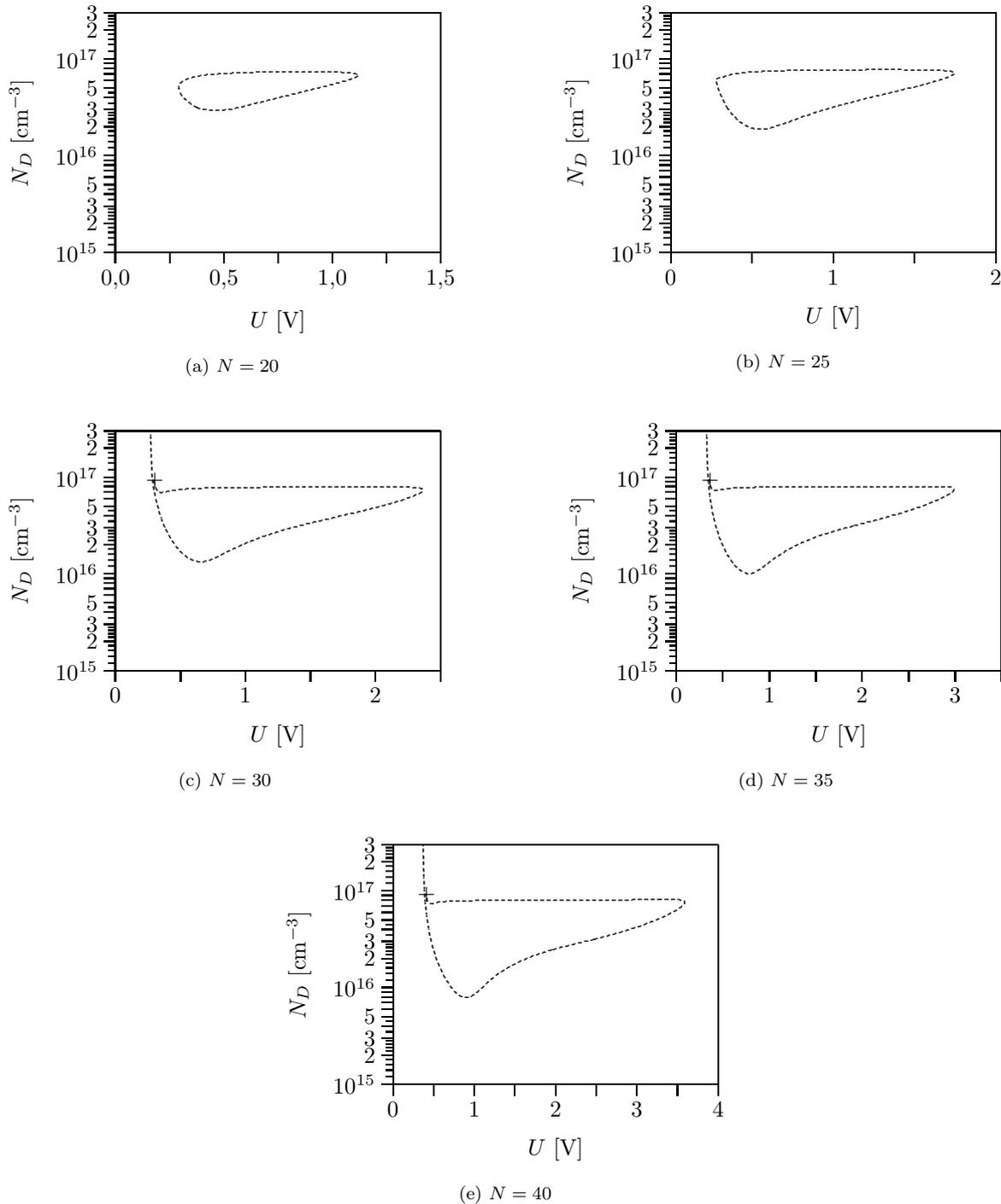


Abbildung 7.9: Lage der Bifurkationspunkte („Phasendiagramme“) bei Übergittern mit verschieden vielen Quantentöpfen. Wegen der großen Zahl der Bifurkationspunkte, die bei der Bildung von Stromästen auftreten, ist es nicht sinnvoll, diese einzuzichnen. Gleiches gilt für die Lage der transkritischen Bifurkationen, da diese nicht von der Dotierung abhängt und durch eine einfache Rechnung bestimmt werden kann. Dargestellt sind daher nur Hopf-Bifurkationen. Bei hinreichend langen Übergittern enden diese in Takens-Bogdanov-Punkten, von denen einer oberhalb des dargestellten Gebietes liegt.

das tatsächliche Oszillationsgebiet im Parameterraum größer als hier eingezeichnet. Für die Frage, ob es überhaupt Oszillationen gibt oder nicht, ist dies jedoch unerheblich.

Das Festhalten der Elektronendichten an den Rändern auf bestimmten Werten übt einen erheblichen Zwang auf das System aus. Im Ver-

gleich dazu hat das Duplizieren viel geringere Auswirkungen. Die Differenz zwischen den Mindestlängen für alte und für neue Randbedingungen entspricht daher ungefähr der (doppelten) Anzahl von Quantentöpfen, die an den Rändern des Übergitters noch so stark von den Randbedingungen beeinflusst werden, daß Oszillationen nicht möglich sind.

7.5 Gestörtes Übergitter

Nach den bisherigen Ergebnissen dieses Kapitels ist unmittelbar einsichtig, daß sich schon bei einer kleinen Störung des Übergitters dessen Eigenschaften erheblich verändern. Aus bifurkationstheoretischer Sicht ist dies sowohl für stark als auch schwach dotierte Übergitter der Fall: Bei einer beliebig kleinen generischen Störung ist der exakt homogene Zustand nicht mehr stationär. Damit fallen auch die transkritischen Bifurkationen weg, die den homogenen Zustand mit den beiden anderen Ästen verbinden⁷. In der Simulation macht sich das nur eingeschränkt bemerkbar, weil die Zustände mit „falscher“ Domäne weiterhin existieren und stabil sind.

Stärkere Auswirkungen zeigen sich für das Oszillationsregime. Die Form der Oszillationen wird maßgeblich durch den homoklinen Orbit bestimmt, der vom homogenen Zustand ausgeht. Bereits bei kleinsten Störungen fällt der homogene Zustand weg. Unabhängig davon ist auch der homokline Orbit strukturell instabil. Wie bereits Abbildung 7.6 gezeigt hat, sind selbst visuell gar nicht erkennbare Abweichung vom homoklinen Orbit bzw. Fixpunkt für die Oszillationsfrequenz sehr wichtig. Mit dem Wegfall des homoklinen Orbits ist der Grenzzyklus also sofort „frei“ und nicht mehr eingesperrt, die Oszillationsform wird harmonisch und die Frequenz steigt an.

7.6 Abschließende Bemerkungen

Bei der Wahl der Randbedingungen, die in dieser Arbeit verwendet wurden, war das Hauptkriterium, daß eine gewählt wird, die „typisch“ ist. Von den vielen untersuchten Randbedingungen haben sich fast alle gleich verhalten, so daß „willkürlich“ eine von diesen ausgewählt werden konnte. Die in diesem Kapitel behandelten Randbedingungen sind dagegen etwas „besonderes“.

Sowohl die Kennlinie, bei hoher wie auch bei niedriger Dotierung, wie auch der Mechanismus der Oszillationen ist deutlich komplizierter als bei den anderen Randbedingungen, ohne daß dies durch experimentelle Ergebnisse verlangt würde⁸. Zudem ist das System degeneriert. Die bei Störungen beobachteten Effekte sind auf die Aufhebung der Degeneration zurückzuführen, insbesondere gilt dies für die Form der Oszillationen.

Bei Verwendung der „alten“ Randbedingungen ist es möglich, bereits kleinste Störungen des

Übergitters über die Veränderung der Oszillationsform zu detektieren. Für experimentelle Anwendungen ist dieses aus zwei Gründen jedoch bedeutungslos: Durch hier nicht betrachtete Effekte wird das experimentelle Übergitter niemals degeneriert sein, so daß auch die Effekte durch die Aufhebung der Degeneration wegfallen. Zum anderen erlauben die alten Randbedingungen eine gute Unterscheidung zwischen $\alpha = 0\%$ und $\alpha = 0,001\%$. Bei der experimentell relevanten Unterscheidung zwischen $\alpha = 3\%$ und $\alpha = 6\%$ zeigen sie dagegen keine anderen Ergebnisse als die anderen untersuchten Randbedingungen. Wenn damit die „neuen“ Randbedingungen auch keine weitergehenden Erklärungen für experimentell beobachtbare Phänomene bieten können, so ist das durch sie bestimmte nichtlineare dynamische System trotzdem sehr interessant – aus Sicht der nichtlinearen Dynamik wahrscheinlich sogar viel interessanter als das für „alte“ Randbedingungen.

⁷Selbst wenn der homogene Ast noch existieren würden, gäbe es die transkritischen Bifurkationen nicht mehr, weil sie strukturell instabil sind.

⁸„Einfachheit ist das Kriterium für Richtigkeit.“ (frei nach „simplex sigillum veri“)

Kapitel 8

Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde die Dynamik in Halbleiter-Übergittern mit den Methoden der nichtlinearen Dynamik untersucht. Durch vorausgegangene Arbeiten anderer Autoren war bekannt, daß das verwendete, auf einfachen mikroskopischen Ratengleichungen beruhende Modell in Abhängigkeit von der Dotierung zu Felddomänen und ungedämpften Oszillationen führt. Die Multistabilität von Felddomänen macht sich dadurch bemerkbar, daß die Strom-Spannungs-Kennlinie in einzelne Äste zerfällt.

Diese selbstorganisierten Strukturen und insbesondere ihre Entstehung wurden in dieser Arbeit bifurkationstheoretisch untersucht. Durch Bestimmung auch der instabilen Äste der Kennlinie konnte gezeigt werden, daß die experimentell gemessene oder durch Simulation bestimmte Strom-Spannungs-Kennlinie aus einer einzigen, durchgehenden Kurve aus Fixpunkten besteht (Kapitel 4). Die stabilen und die instabilen Teile der Kennlinie sind durch Sattel-Knoten-Bifurkationen getrennt, die bei einer bestimmten Dotierungskonzentration in Cusp-Punkten gebildet werden. Weiterhin wurde gezeigt, daß die Entstehung von Oszillationen auf die Abzweigung stabiler Grenzzyklen in einer superkritischen Hopf-Bifurkation zurückgeführt werden kann.

Die Betrachtung gestörter Übergitter, bei denen sich die Dotierungsdichte in den einzelnen Quantentöpfen geringfügig unterscheidet, ist sowohl aus dynamischer als auch aus experimenteller Sicht eine wichtige Fragestellung. Im Kapitel 5 wurde sowohl analytisch als auch numerisch hergeleitet, daß aus den Höhen der einzelnen Äste der Kennlinie direkt die Dotierungsdichten in den einzelnen Quantentöpfen bestimmt werden können. Dies ermöglicht es, durch die relativ einfache Messung der Strom-Spannungs-Kennlinie quantitative Aussagen über die Güte einer experimentellen Pro-

be zu treffen, wie dies exemplarisch im Anhang A durchgeführt wurde.

Übersteigt das Ausmaß der Fluktuationen einen kritischen Wert, so verändert sich das Verhalten des Übergitters qualitativ. Wie im Kapitel 6 gezeigt wurde, betrifft dies sowohl die Aststruktur der Kennlinie hochdotierter Übergitter als auch die bei geringeren Dotierungen auftretenden Oszillationen. Das auftretende Verhalten ist zu kompliziert, als daß einfache Aussagen möglich wären.

Eine auch durch diese Arbeit nur angerissene Frage ist diejenige nach geeigneten Randbedingungen für das System, die bekanntlich eine wichtige Rolle in jedem selbstorganisierte Strukturen bildenden System spielen. Insbesondere die Verwendung von Neumann-Randbedingungen führt zu interessantem Verhalten, das im Kapitel 7 mit Methoden der nichtlinearen Dynamik untersucht wurde und eine Reihe von Beobachtungen erklären kann, die in anderen Arbeiten durch Simulation gewonnen worden sind.

Betrachtet man die gefundenen selbstorganisierten Strukturen, nämlich multistabile Felddomänen und Grenzzyklus-Oszillationen, so stellen diese für ein derart komplexes System ein doch relativ einfaches und stabiles Verhalten dar. Für das Auftreten weiterer Effekte wie der Bildung von Tori oder der Entstehung von Chaos sind Erweiterungen oder zumindest Änderungen am Modell bzw. den in das Modell einfließenden Parametern wie zum Beispiel den Materialkonstanten nötig. Weitergehende Untersuchungen dieses Systems aus Sicht der nichtlinearen Dynamik werden sich mit diesem Problem beschäftigen müssen.

Die in dieser Arbeit gewonnenen Aussagen über die Auswirkungen von Dotierungsfluktuationen sind jedoch auch experimentell relevant, auch wenn sie mit den momentan zur Verfügung stehenden Wachstumsverfahren nicht durch das

Wachsen speziell präparierter Proben bewiesen werden können. Sie ermöglichen nichtsdestoweniger schon jetzt eine erheblich bessere Charakterisierung der Güte experimentell untersuchter Halbleiter-Übergitter, als dies bisher möglich war.

Das Modell für den vertikalen Transport in Halbleiter-Übergittern, auf dem diese Arbeit beruht, weist unbestreitbar noch einige Mängel auf. Steht – hoffentlich in naher Zukunft – ein verbessertes Modell zur Verfügung, so wäre es durch Wiederholung der in dieser Arbeit vorgenommenen Untersuchungen möglich, die Aussagen über die Auswirkungen von Störungen so abzusichern, daß sie auch ohne die Möglichkeit eines direkten experimentellen Beweises durch

entsprechend präparierte Proben als allgemein gültig anzusehen wären.

Abschließend sei gesagt, daß sich die Verbindung von theoretischer Halbleiterphysik in Form eines nicht-trivialen „Bauelements“ und nichtlinearer Dynamik als außerordentlich fruchtbar erwiesen hat. Ohne die Methoden der nichtlinearen Dynamik hätte der größte Teil der Ergebnisse dieser Arbeit nicht oder nur mit einem inakzeptabel hohen Aufwand erhalten werden können. Auch wenn noch viele Fragen offen bleiben und viele interessante und wichtige Effekte noch nicht entdeckt sein mögen, so haben die Methoden der nichtlinearen Dynamik doch deutlich zu einem verbesserten Verständnis des Systems beigetragen.

Anhang A

Quantitative Bestimmung des Störungsgrades experimenteller Proben

Im Kapitel 5 wurden zuerst analytisch Aussagen darüber hergeleitet, wie sich die Kennlinie eines Übergitters mit wachsender Störung verändert. Diese Aussagen wurden dann auch im Abschnitt 5.2 an einer simulierten Kennlinie mit realistischen Fluktuationen (Abbildung 5.5 auf Seite 58) überprüft. Es ist daher sicherlich sinnvoll, dieses Verfahren probenhalber auch auf ge-

messene Kennlinien experimentell gewachsener Proben anzuwenden.

Abbildung A.1 zeigt eine solche Kennlinie. Wie in [Sch95b] gezeigt wurde, ist der starke Anstieg des Stroms bei etwa 1 V auf eine dickere Barriere zurückzuführen. Diese Störung ist im weiteren jedoch nicht relevant; Ziel ist es vielmehr, das Ausmaß der Dotierungsfluktua-

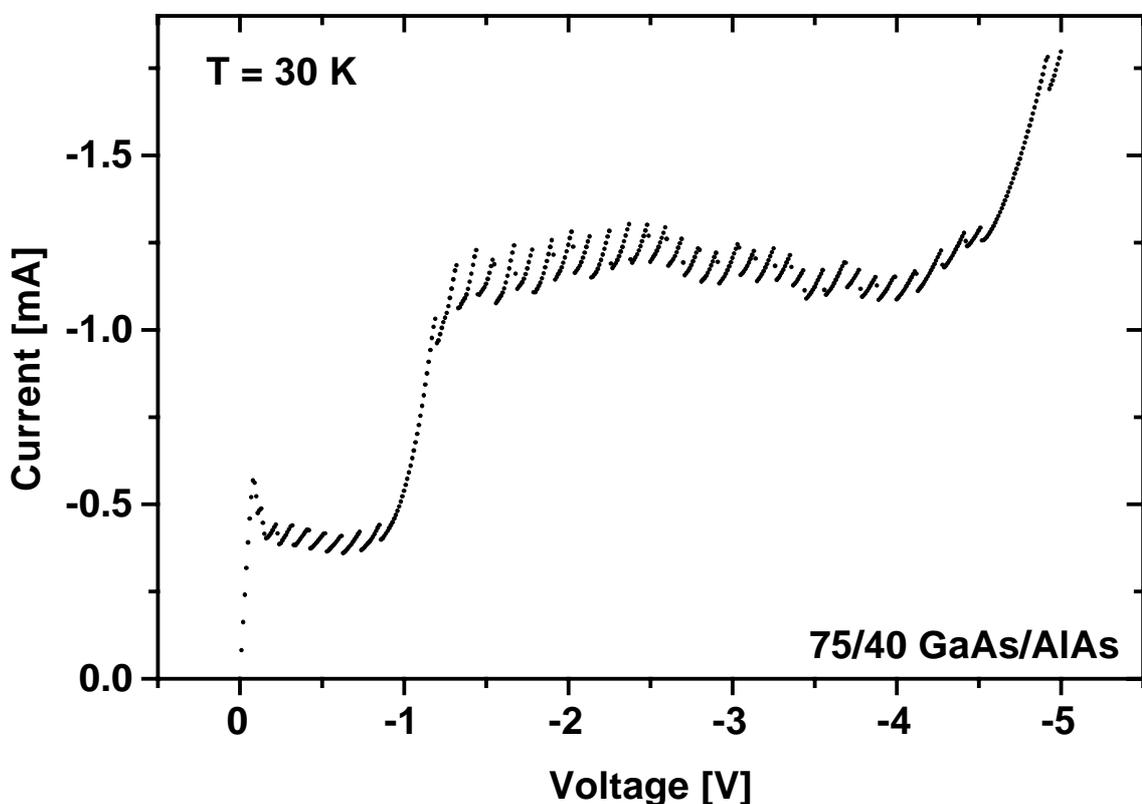


Abbildung A.1: Experimentell gemessene Kennlinie eines *GaAs-AlAs*-Übergitters (aus [Kas95a]). Für die Auswertung ist nur das „Plateau“ von etwa -1 V bis -4 V relevant.

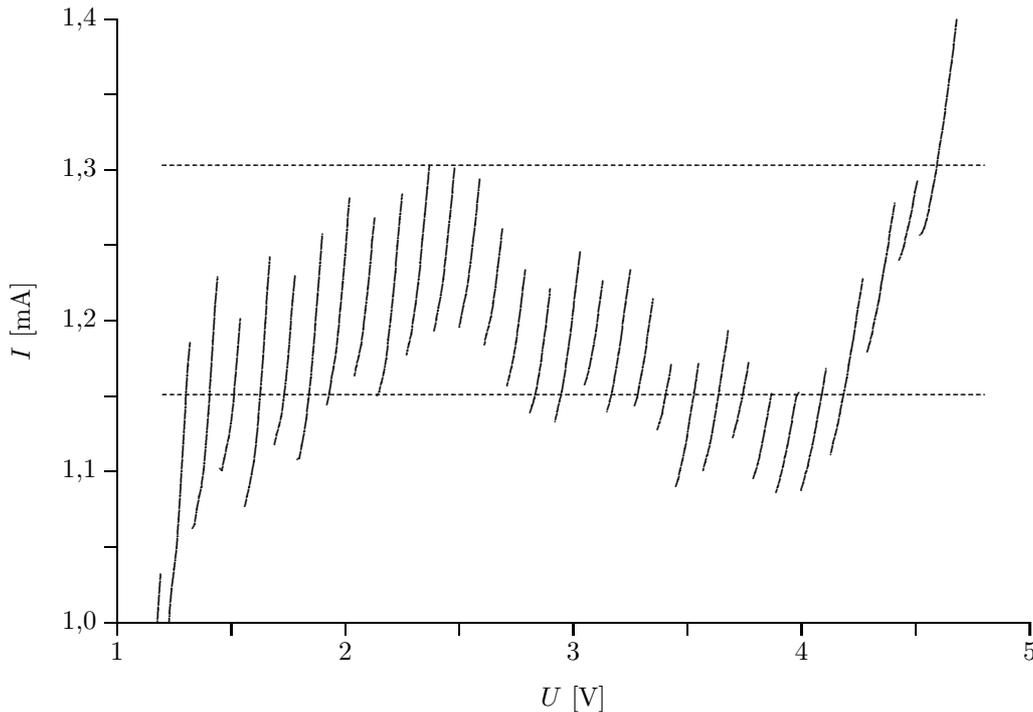


Abbildung A.2: Ausschnitt der experimentellen Kennlinie (Abbildung A.1). Durch die beiden gestrichelten Linien sind der größte und kleinste obere Abbruchpunkt der Stromäste markiert.

tionen abzuschätzen. Das Verfahren aus dem Kapitel 5.2 beruhte darauf, daß bei einer ungestörten Kennlinie die Äste (bis auf diejenigen, bei denen Randeffekte bereits relevant sind) alle die selbe Stromdichte erreichen, bevor sie abbrechen. Aus diesem Grund wird für die Untersuchung das „Hochplateau“ genommen, das etwa von 1 V bis knapp 5 V reicht.

Abbildung A.2 zeigt den im folgenden relevanten Ausschnitt.¹ Zu Bestimmen sind der größte und der kleinste Wert des Stroms I an den Punkten, bei denen Äste bei Erhöhung der Spannung abbrechen – mit anderen Worten, es interessieren nur die oberen Abbruchpunkte. Diese Werte lauten $I_{max} = 1,303$ mA bzw. $I_{min} = 1,151$ mA. Der Mittelwert aus diesen beiden Werten liegt also bei $I = 1,227$ mA, die Extrema haben eine Abweichung von $\Delta I = 0,076$ mA oder 6,2%. Berücksichtigt man, daß der untersuchte Bereich nur 27 Äste enthält, so muß noch mit einem Faktor 28/27 multipliziert werden, so daß man $\alpha = 6,4\%$ erhält.

Dieses Bestimmungsverfahren berücksichtigt allerdings nur die Daten von genau zwei Ästen und ist daher sehr empfindlich gegen Ausreißer. Es kann dadurch verbessert werden, daß

die Daten aller Äste des Plateaus berücksichtigt werden. Die Abbruchwerte der Stromstärke sind für alle Äste des Plateaus in Tabelle A.1 aufgeführt. Aus diesen ergibt sich als Mittelwert $I = 1,23$ mA. Um diesen schwanken die einzelnen Werte um durchschnittlich 0,036 mA, so daß sich ein „voller“ Ausschlag von $\Delta I = 0,073$ oder 5,91% ergibt. Nach der Korrektur mit dem Faktor 28/27 lautet das Endergebnis damit $\alpha = 6,1\%$.

Vergleicht man die beiden so erhaltenen Ergebnisse, so ist eine Abschätzung des „wirklichen“ Störungsgrades zu $\alpha = 6 \pm 1\%$ sicherlich nicht abwegig. Es soll an dieser Stelle jedoch ausdrücklich betont werden, daß soeben keine qualitative Berechnung von α mit einer fundierten Fehlerabschätzung durchgeführt wurde.

In [Sch95b] wurde auf Simulationen gestützt die Behauptung aufgestellt, daß eine um nur eine Monolage breitere Barriere bereits zu einer charakteristischen Veränderung der Kennlinie führt. Dies wurde dann experimentell bestätigt, indem ein Übergitter mit einer absichtlich dickeren Barriere gewachsen wurde. Will man das hier durchgeführte Verfahren zur Bestimmung

¹Wie man an diesem Ausschnitt sehr gut erkennen kann, ist die Höhe der einzelnen Äste nicht unkorreliert. Es gibt ansteigende und abfallende Bereiche. Dies bedeutet, daß in einem bestimmten Teil des Übergitters die Dotierdichte höher ist als in anderen, und daß der Übergang zwischen diesen Bereichen stetig ist. Während des Aufwachsens verändern sich Größen wie die Temperatur oder die lokale Zusammensetzung der Quellen mit den Dotierungsatomen. Wenn die entsprechenden Zeitskalen länger als die zum Wachsen einer Schicht benötigte Zeit sind, so muß man dieses Verhalten auch erwarten.

1,22886	1,20109	1,24215	1,23007	1,25725
1,28140	1,26812	1,28382	1,30314	1,30133
1,29408	1,26087	1,22947	1,22101	1,24577
1,22645	1,23370	1,21437	1,17089	1,17150
1,19324	1,17210	1,15157	1,15217	1,16787
1,22766	1,27778			

Tabelle A.1: Stromdichten (in mA), bei denen die einzelnen Äste im betrachteten Spannungsintervall abbrechen.

ähnlich absichern, so müßte man eine Probe mit gezielten Störungen der Dotierungsdichte wachsen. Für den relevanten Bereich von $\alpha < 10\%$ ist dieses jedoch (auf dem heutigen Stand der Technik) nicht möglich.

Der für α erhaltene Wert ist daher (zumindest) vorläufig eher als „educated guess“ zu verstehen, insbesondere was die Fehlerabschätzung betrifft. Andererseits muß aber berücksichtigt werden, daß die analytischen Abschätzungen aus dem Abschnitt 5.1 auf nur wenigen Voraussetzungen an das Modell bzw. an ein experimen-

tell gewachsenes Übergitter beruhen: schwache Kopplung, nur Dotierungs- und keine anderen Fluktuationen, Relevanz nur von Fluktuationen in z-Richtung und keine wesentliche Abhängigkeit von der Verteilung der Elektronen auf die Subbänder. Diese Annahmen sind jedoch entweder experimentell untermauert oder durch einfache Überlegungen als zumindest sehr wahrscheinlich anzusehen. Deswegen ist die hier durchgeführte Bestimmung von α aus einer gemessenen Kennlinie auf jeden Fall mehr als ein sinnloses „Spielchen“, sondern eine durch die Theorie sehr gut untermauerte Methode.

Anhang B

Laseranregung

Für Strukturbildung in Halbleiter-Übergittern ist es notwendig, daß sich in bestimmten Quantentöpfen Elektronen ansammeln können. Diese Elektronen werden von den Donatoratomen zur Verfügung gestellt. Es gibt jedoch auch andere Verfahren, für eine hinreichend große Zahl beweglicher Elektronen zu sorgen. Das am meisten verbreitete ist die Anregung mit Laserlicht. Diese kann entweder bei undotierten Übergittern erfolgen oder bei bereits dotierten, wenn die Dotierung für die Beobachtung eines bestimmten Effekts nicht ausreichend ist [Kas95b].

Die Übergangsgleichung aus dem Abschnitt 3.2 müssen hierfür nur durch wenige Terme ergänzt werden, wobei $p^{(i)}$ die Dichte von Löchern im i -ten Quantentopf ist:

$$\begin{aligned}\dot{n}_1^{(i)} &= \dots + \tau_1^a - \tau_1^e p^{(i)} n_1^{(i)} \\ \dot{n}_2^{(i)} &= \dots + \tau_2^a - \tau_2^e p^{(i)} n_2^{(i)} \\ \dot{p}^{(i)} &= \tau_1^a + \tau_2^a - \tau_1^e p^{(i)} n_1^{(i)} - \tau_2^e p^{(i)} n_2^{(i)}\end{aligned}$$

Die Gleichungen sind unmittelbar verständlich: Elektronen werden mit konstanter Rate τ_k^a vom Valenzband in das k -te Subband angehoben, wobei ein Loch entsteht. Die Rekombination setzt ein Loch im Valenzband sowie ein Elektron in einem der beiden Subbänder voraus, so daß die Rekombination proportional zum Produkt der beiden Werte ist. Neben den Übergangsgleichungen muß die Poisson-Gleichung derart angepaßt werden, daß die positive Ladung der Löcher berücksichtigt wird.

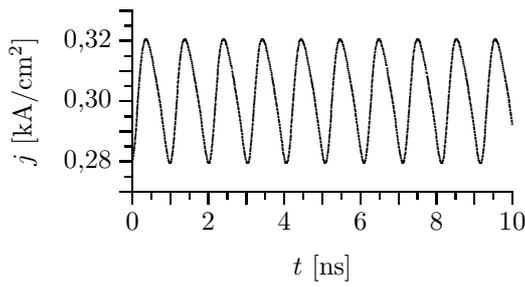
Betrachtet man ein undotiertes Übergitter, berücksichtigt nur das untere Energieniveau und nimmt an, daß die Feldverteilung homogen ist, so muß $p^{(i)} = n_1^{(i)}$ gelten. Hieraus ergibt sich unmittelbar der stationäre Wert für die Löcherdichte zu $l_0 = \sqrt{\tau_1^a/\tau_1^e}$. Die typische Zeit

bis zum Erreichen des stationären Zustandes ist dann $l_0/\tau_1^a = 1/\sqrt{\tau_1^a\tau_1^e}$. Es soll ausdrücklich betont werden, daß diese Zeitskala keinerlei Auswirkungen für den Transport der Elektronen zwischen verschiedenen Quantentöpfen hat, insbesondere also keine auf die Oszillationsfrequenzen.

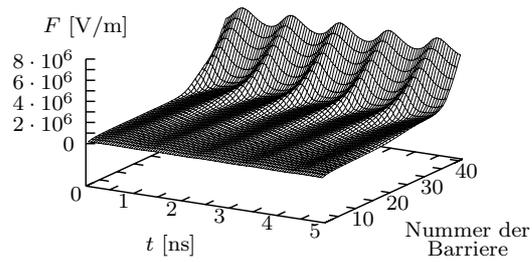
Da es keine zuverlässigen experimentelle Daten für die τ_k^a und τ_k^e gibt – wobei die τ_k^a von der Leistung des Lasers abhängen –, werden diese Parameter so gewählt, daß sich das gewünschte Verhalten ergibt. Für dotierte Übergitter ist aus den vorangegangenen Kapiteln bekannt, wie hoch die Dotierung N_D sein muß, um eine gewünschte Struktur (Oszillationen, Äste) zu erhalten. Wählt für l_0 diesen Wert, so erhält man damit eine Abschätzung für den ungefähren Wert des Quotienten τ_1^a/τ_1^e , bei dem ein ähnliches Verhalten unter Laseranregung in einem undotierten Übergitter beobachtet werden kann. Setzt man als typische Zeitskala Werte zwischen 1 ns und 10 ns an, wie sie bei dotierten Übergittern zum Einschwingen notwendig sein, so erhält man Ausgangswerte für τ_1^a und τ_1^e . Durch leichtes Verändern dieser Werte kann versucht werden, zum Beispiel die Amplitude von Oszillationen zu maximieren.

Bei den im folgenden vorgestellten Ergebnissen wird davon ausgegangen, daß keine Laseranregung in das zweite, sondern nur in das erste Energieniveau möglich ist. Wird auch Anregung in das zweite Energieniveau zugelassen, so gibt es allerdings keine relevanten Veränderung. Abbildung B.1(a) zeigt eine Stromoszillation, Abbildung B.1(b) die dazugehörige Feldverteilung. Als Parameter wurden $\tau_1^e = 2 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^6 \text{ s}^{-1}$ und $\tau_1^a = 2,4 \cdot 10^{25} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ gewählt.¹ Bei diesen Werten wird die Oszillationsamplitude für

¹Die Randbedingung wurde so gewählt, daß die Elektronendichte in den „virtuellen“ Randtöpfen gleich der in dem jeweils letzten „realen“ Quantentopf plus 10^{16} cm^{-3} ist. Auf diese Weise kann eine „vernünftige“ Elektronendichte in den Randtöpfen auch dann erreicht werden, wenn nicht bekannt ist, wie groß die Elektronendichte in den Subbändern ungefähr sein wird. Bei dotierten Übergittern steht eine Abschätzung in Form der Dotierungsdichte dagegen zur Verfügung. Durch das Addieren von 10^{16} cm^{-3} wird erreicht, daß keine Effekte durch „alte“ Randbedingungen auftreten können.

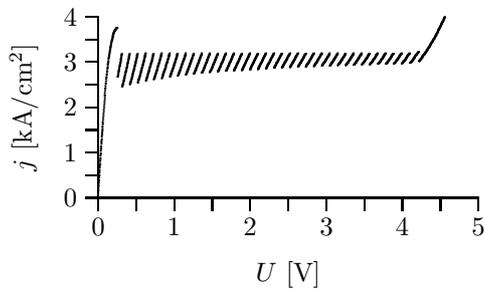


(a) Stromoszillation

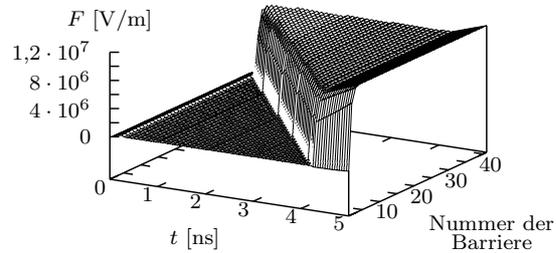


(b) Feldverteilung

Abbildung B.1: Oszillation in einem undotierten Übergitter bei Laseranregung. Es gibt praktisch keinen Unterschied zu Oszillationen bei dotierten Übergittern ohne Laseranregung.



(a) Kennlinie



(b) Feldverteilung

Abbildung B.2: Kennlinie bei Laseranregung. Parameter siehe Text.

die betrachtete Spannung $U = 0,5$ V maximal. Die Löcherdichte liegt während dieser Oszillation bei etwa $3,5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, was in etwa mit dem Wert von N_D übereinstimmt, für den in dotierten Übergittern Oszillationen beobachtet werden. Auch die Feldverteilung deutet darauf hin, daß sich die Oszillationsmechanismen nicht unterscheiden.

Desgleichen kann auch die Aststruktur hochdotierter Übergitter durch Laseranregung erreicht werden. Abbildung B.2(a) zeigt die so simulierte Kennlinie, Abbildung B.2(b) das dazugehörige Feldprofil ($\tau_1^e = 5 \cdot 10^{-8} \text{ cm}^6 \text{ s}^{-1}$ und $\tau_1^a = 9 \cdot 10^{27} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$). Beide Grafiken entsprechen denjenigen für dotierte Übergitter.

Dotierung und Laseranregung können auch kombiniert werden. Da beides die gleichen Aus-

wirkungen hat, dürfen allerdings keine neuen Effekte erwartet werden, was auch durch Simulationen bestätigt wurde. Hierbei wurden auch Veränderung der τ 's über mehrere Zehnerpotenzen untersucht. Gäbe es Veränderung, so sollten sie insbesondere bei Oszillationen mit Parametern wie in Abbildung B.1 auftreten, da dort die Zeitskalen für die Laseranregung und die für den Transport zwischen verschiedenen Quantentöpfen in den gleichen Größenordnung liegen. Es muß daher festgestellt werden, daß Dotierung und Laseranregung – wie es im Experiment schon lange benutzt wird – gegeneinander austauschbar sind und andere Fragen, wie zum Beispiel Streuung an den Dotierungsatomen, den Ausschlag für das eine oder das andere Verfahren geben.

Anhang C

Sehr stark dotiertes Übergitter

In dieser Arbeit wurden Übergitter mit einer Dotierung zwischen $N_D = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ und $N_D = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ untersucht. Eine Fortsetzen der Untersuchung bei kleineren Dotierungen ist wenig sinnvoll, da bereits bei $N_D = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ die Kennlinie durch die Form der Durchlaßcharakteristik der einzelnen Barriere bestimmt ist. Es soll daher an dieser Stelle noch kurz angerissen werden, wenn deutlich stärker dotierte Übergitter, hier $N_D = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ betrachtet werden.

Abbildung C.1 zeigt eine durch Simulation für diese Dotierung erhaltene Kennlinie. Hierbei wurde kein einfacher Upsweep oder Downsweep durchgeführt, sondern für jeden Datenpunkt das instantane Hochschalten von $U = 0 \text{ V}$ auf die betreffende Spannung simuliert. Eine ähnliche Kennlinie erhält man, wenn ein Upsweep simuliert wird, die Besetzungsdichten in den einzelnen Quantentöpfen nach jedem Schritt jedoch minimal verändert werden, wie es im Experiment durch Unregelmäßigkeiten im Material, thermische Einwirkungen oder leichtes Rau-

schen der Spannungsquelle auch geschieht.

Die simulierte Kennlinie zeigt im mittleren Bereich ein etwas anderes Verhalten als außerhalb. Dieses wird verständlich, wenn man die zugehörige Feldverteilung betrachtet, die in Abbildung C.2 dargestellt ist. Auch bei mittleren Spannung existiert eine Hochfelddomäne, diese liegt jedoch nicht an einem Ende des Übergitters. Der starke Anstieg der Feldstärke am hinteren Ende des Übergitters ist auf Randeffekte zurückzuführen.¹ Bei höheren Spannungen wächst die Hochfelddomäne und nimmt schließlich das gesamte Übergitter ein.

Das eben beschriebene Verhalten wird verständlich, wenn man bedenkt, daß sich am Beginn einer Hochfelddomäne eine Ladungsträgeransammlung befinden muß, während das Ende durch eine Ladungsträgerverarmung bestimmt wird. Das absolute Maß der Ansammlung bzw. Verarmung ist unabhängig von der Dotierung und damit relativ gesehen für große Dotierun-

¹In diesem Abschnitt wurden als Randbedingungen $c_1 = 0$ und $c_2 = 1,1$ verwendet. Auf diese Weise steht in den Randtöpfen ein Ladungsträgerüberschuß zur Verfügung, der in etwa gleich groß ist wie bei den Berechnungen mit kleinerer Dotierung.

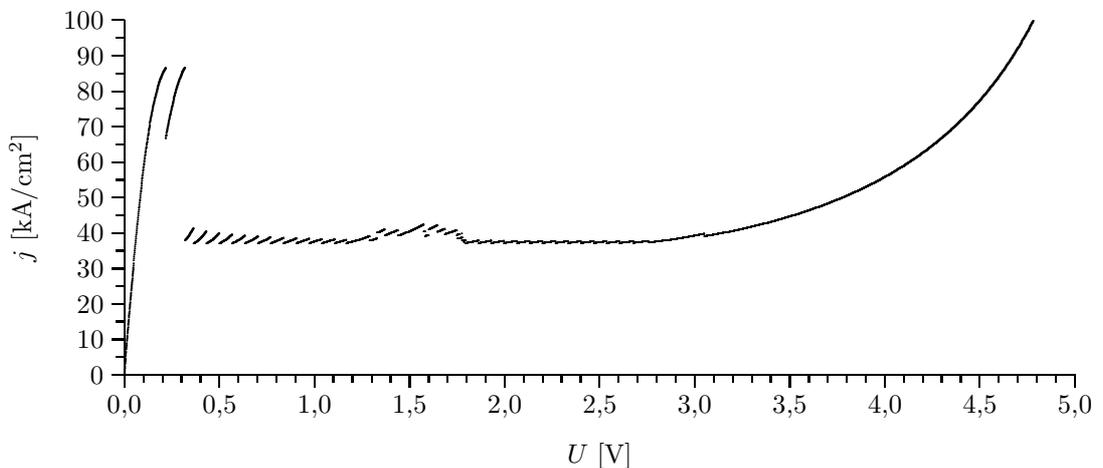


Abbildung C.1: Durch Simulation erhaltene Kennlinie.

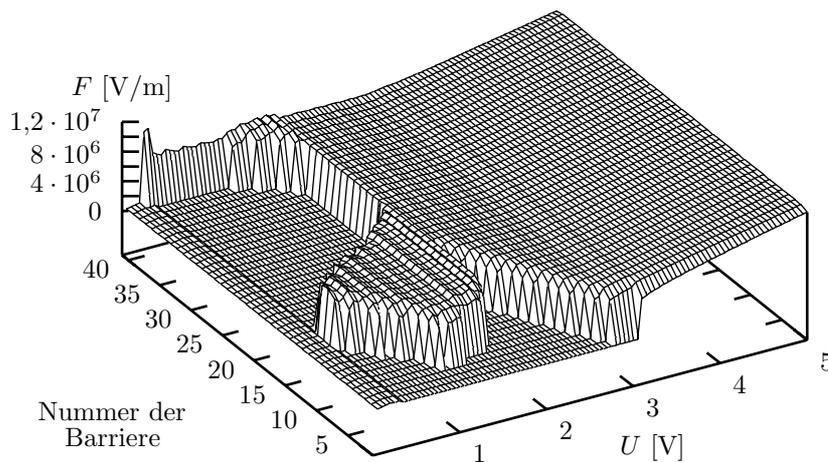


Abbildung C.2: Feldverteilung für die Kennlinie aus Abbildung C.1.

gen kleiner. Bei einer Dotierung von $N_D = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ beträgt der Ladungsträgerüberschuß, der den Sprung zwischen Hochfelddomäne und Niederfelddomäne verursacht, nur noch ungefähr 2% der Dotierungsdichte.

Eine Ladungsträgerverarmung führt zu einer Begrenzung des Stroms, da dieser proportional zur Anzahl der Ladungsträger ist. Bei hohen Dotierungen ist der „Malus“ einer Ladungsträgerverarmung daher geringer als bei kleineren Dotierungen. Bei sehr hoch dotierten Übergittern sind daher Ladungsträgerverarmung auch für Randbedingungen, die ein Ladungsträgerreservoir modellieren, erlaubt.

Die Frage, ob auch eine Ladungsträgerverarmung zu stabilen Domänenzuständen führen

kann, ist auch experimentell relevant. Geht man davon aus, daß sich eine Hochfelddomäne bildet, die an einem Rand des Übergitters sitzt, so ist die Frage zwischen Ladungsträgerverarmung und Ladungsträgeransammlung gleichbedeutend mit der Frage, ob sich die Hochfelddomäne an der Anoden- oder an der Kathodenseite des Übergitters bildet. Durch die hohe Dotierung können dann auch die Ergebnisse aus [Hel90] erklärt werden.

Die zusätzlichen stabilen Zustände, die parallel zur weiterhin vorhandenen „normalen“ Kennlinien existieren, gehören zu mehreren, teilweise miteinander verbundenen durchgehenden Kurven, die in ihrem Aussehen allerdings weitestgehend der normalen Kennlinie ähneln. Es wurde daher verzichtet, sie hier ebenfalls darzustellen.

Anhang D

Umskalierung der Variablen

Die Dynamik war durch eine Gleichung der Form $\dot{\mathbf{N}} = f(\mathbf{N}, U, N_D)$ gegeben, wobei die Elektronendichten in den einzelnen Quantentöpfen und Energieniveaus an dieser Stelle mit dem Großbuchstaben \mathbf{N} bezeichnet seien. Diese „physikalischen“ Variablen sind für eine Untersuchung der Bifurkationsphänomene jedoch nicht sonderlich zweckmäßig.

Um die Technik der Zweigverfolgung anwenden zu können oder allgemein jedes Verfahrens, das auf der Bogenlängenparametrisierung basiert, müssen die verschiedenen Variablen in der gleichen Größenordnung liegen.¹ Die Spannung U beträgt einige Volt, während sinnvolle Werte für die Dotierung N_D und damit auch für die Besetzungsdichten \mathbf{N} bis zu 10^{18} cm^{-3} betragen können.

Weiterhin ist es wenig sinnvoll, die Dotierung direkt als Kontrollparameter des Systems zu verwenden, da der z. B. für Oszillationen interessante Bereich von grob abgeschätzt 10^{15} cm^{-3} bis 10^{16} cm^{-3} dann nur 1 % des gesamten Variationsbereichs für diesen Parameter überstreichen würde.² Sinnvoll ist daher nur ein logarithmischer Zusammenhang der Dotierung N_D mit dem eigentlichen Kontrollparameter.

Als letzter Punkt sind noch numerische Probleme zu beachten, die bei der Auswertung der partiellen Ableitungen von f , d.h., von $A := \frac{\partial \dot{\mathbf{N}}}{\partial \mathbf{N}}$, entstehen können. Viele Algorithmen verlangen die Bildung von Produkten der Form $\prod_i A_{i\sigma(i)}$. Sind die Werte von A_{ij} zu groß, wird es bei der Berechnung des Produktes zu einem Bereichsüberlauf kommen.³ Da der Zusammenhang zwischen den Elektronendichten \mathbf{N} und eventuell einzuführenden neuen Variablen für die Elektronenkonzentration linear sein muß⁴, bleibt als einziger Ausweg eine Umskalierung der Zeit T .

Sinnvoll sind also folgende neue Variablen, die zur Unterscheidung mit Kleinbuchstaben geschrieben sind:

$$\begin{aligned} n_D &= \log_{10} \left(\frac{N_D}{N_0} \right) \\ \mathbf{N} &= N_D \cdot \mathbf{n} \\ t &= \lambda \cdot T \end{aligned} \tag{D.1}$$

Eine Umskalierung der Spannung U ist nicht erforderlich, da diese bereits „natürlich“ im Bereich zwischen 0 und etwa 5 Volt liegt. Wählt man z. B. $N_0 = 10^{15}$, so ergeben sich für n_D Werte zwischen 0 und 3. Die Werte für n liegen zwischen 0 und 1, wobei deutliche Unterschiede für die verschiedenen

¹Dies gilt zumindest dann, wenn die Variablen als einheitenlos angesehen werden. Sind die Variablen noch mit Einheiten versehen, so ist die Bestimmung der Bogenlänge sowieso nur dann möglich, wenn die verschiedenen Variablen durch Division mit einer geeigneten Größe alle auf die selbe Einheit (oder einheitenlos) gebracht wurden.

²Um z. B. eine Bifurkationen auf einen solch kleinen Bereich noch sicher zu erkennen, müßte man mit sehr hoher Auflösung rechnen – auch für die 99 %, bei denen es Verschwendung von Rechenzeit wäre.

³Auf gängigen Workstations sind nur Zahlen bis ungefähr 10^{310} darstellbar. Bei z. B. 80 Variablen bedeutet dies, daß die einzelnen Elemente von A durchschnittlich nicht größer als etwa 10^4 sein dürfen. Sind diese andererseits durchschnittlich kleiner als 10^{-4} , wird das Produkt zu 0 abgerundet. Der „erlaubte“ Bereich umfaßt also etwa acht Zehnerpotenzen.

⁴Ansonsten könnten keine normalen Integrationsverfahren für gewöhnliche Differentialgleichungen mehr benutzt werden.

Energieniveaus bestehen; eine weitere Umskalierung wäre möglich, wurde aber nicht durchgeführt⁵. Zur Zeitskalierung wurde $\lambda = 10^{-10}$ gewählt.

Aus (D.1) ergibt sich direkt

$$\dot{\mathbf{n}} = \frac{1}{N_D \cdot \lambda} \dot{\mathbf{N}},$$

wobei $\dot{\mathbf{n}}$ als $\frac{d\mathbf{n}}{dt}$ und $\dot{\mathbf{N}}$ als $\frac{d\mathbf{N}}{dT}$ zu verstehen ist. Als nächstes sind die partiellen Ableitungen von f umzurechnen⁶:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \dot{n}_i}{\partial n_j} &= \frac{\partial \dot{n}_i}{\partial \dot{N}_i} \cdot \frac{\partial \dot{N}_i}{\partial N_j} \cdot \frac{\partial N_j}{\partial n_j} = \frac{1}{\lambda} \cdot \frac{\partial \dot{N}_i}{\partial N_j} \\ \frac{\partial \dot{n}_i}{\partial U} &= \frac{\partial \dot{n}_i}{\partial \dot{N}_i} \cdot \frac{\partial \dot{N}_i}{\partial U} = \frac{1}{N_D \cdot \lambda} \cdot \frac{\partial \dot{N}_i}{\partial U} \end{aligned}$$

Bei der Berechnung der partiellen Ableitung nach der „neuen“ Dotierungskonzentration ist zu beachten, daß eine Veränderung von n_D zweierlei Auswirkungen hat: Zum einen ändert sich direkt die „physikalische“ Dotierungskonzentration N_D , zum anderen über (D.1) aber auch, bei festgehaltenem \mathbf{n} , die Elektronenkonzentrationen \mathbf{N} . In gewisser Hinsicht ist dieses sogar physikalisch sinnvoller: Wird die Dotierungskonzentrationen um einen gewissen Faktor geändert, so werden sich in erster Näherung die Elektronenkonzentrationen um den gleichen Faktor ändern. Dies bedeutet, daß elektrisch neutrale Bereiche des Übergitters weiterhin elektrisch neutral bleiben und daß der Beginn einer Hochfelddomäne sich nicht verschiebt. Es ergibt sich:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \dot{n}_i}{\partial n_D} &= \frac{\partial}{\partial n_D} \left[\frac{1}{N_D \cdot \lambda} \dot{N}_i \right] \\ &= \frac{1}{\lambda} \frac{\partial}{\partial n_D} \left[\frac{1}{N_D} \right] \cdot \dot{N}_i + \frac{1}{N_D \cdot \lambda} \cdot \frac{\partial \dot{N}_i}{\partial n_D} \\ &= -\frac{\ln 10}{N_D \cdot \lambda} \cdot \dot{N}_i + \frac{1}{N_D \cdot \lambda} \cdot \left[\frac{\partial \dot{N}_i}{\partial N_D} \cdot \frac{\partial N_D}{\partial n_D} + \sum_j \frac{\partial \dot{N}_i}{\partial N_j} \cdot \frac{\partial N_j}{\partial n_D} \right] \\ &= \frac{\ln 10}{\lambda} \cdot \left[-\frac{1}{N_D} \cdot \dot{N}_i + \frac{\partial \dot{N}_i}{\partial N_D} + \sum_j n_j \cdot \frac{\partial \dot{N}_i}{\partial N_j} \right] \end{aligned}$$

Weiterhin kann es unter Umständen notwendig sein, auch andere Größen umzurechnen. Für diese gilt dann (hier formuliert für die Stromdichte $j = j(\mathbf{N}, N_D, U)$):

$$\begin{aligned} \frac{\partial j}{\partial n_i} &= \frac{\partial j}{\partial N_i} \cdot \frac{\partial N_i}{\partial n_i} = N_D \cdot \frac{\partial j}{\partial N_i} \\ \frac{\partial j}{\partial n_D} &= \frac{\partial j}{\partial N_D} \cdot \frac{\partial N_D}{\partial n_D} + \sum_i \frac{\partial j}{\partial N_i} \cdot \frac{\partial N_i}{\partial n_D} \\ &= \ln 10 \cdot N_D \cdot \left[\frac{\partial j}{\partial N_D} + \sum_i n_i \cdot \frac{\partial j}{\partial N_i} \right] \end{aligned}$$

⁵Der Wert von λ ist hierbei irrelevant. Er skaliert nur die $\dot{\mathbf{N}}$, die für die Bestimmung der Bogenlänge gleichgültig sind. Geeignete Werte für λ ergeben sich aus der Tatsache, daß typische Werte für die Elemente der Jacobi-Matrix bei etwa 10^{10} s^{-1} liegen.

⁶Ableitungen nach Größen, die nicht umskaliert werden, transformieren sich genau wie die Ableitungen nach der Spannung U

$\frac{\partial \dot{\mathbf{n}}}{\partial \mathbf{n}} = \frac{1}{\lambda} \cdot \frac{\partial \dot{\mathbf{N}}}{\partial \mathbf{N}}$	$\frac{\partial j}{\partial \mathbf{n}} = N_D \cdot \frac{\partial \mathbf{j}}{\partial \mathbf{N}}$
$\frac{\partial \dot{\mathbf{n}}}{\partial U} = \frac{1}{N_D \cdot \lambda} \cdot \frac{\partial \dot{\mathbf{N}}}{\partial U}$	
$\frac{\partial \dot{\mathbf{n}}}{\partial n_D} = \frac{\ln 10}{\lambda} \cdot \left[-\frac{1}{N_D} \cdot \dot{\mathbf{N}} + \frac{\partial \dot{\mathbf{N}}}{\partial N_D} + \mathbf{n} \cdot \frac{\partial \dot{\mathbf{N}}}{\partial \mathbf{N}} \right]$	$\frac{\partial j}{\partial n_D} = \ln 10 \cdot N_D \cdot \left[\frac{\partial j}{\partial N_D} + \mathbf{n} \cdot \frac{\partial j}{\partial \mathbf{N}} \right]$

Tabelle D.1: Zusammenstellung der Transformationsformeln zwischen den „physikalischen“ Größen (Großbuchstaben) und den für die Zweigverfolgung verwendeten (Kleinbuchstaben); genauere Erläuterung siehe Text.

Anhang E

Anzahl notwendiger Energieniveaus

Das während der gesamten Untersuchung verwendete Modell für das Halbleiterübergitter betrachtet genau zwei Energiebänder. Es stellt sich nun die Frage, inwiefern bereits *ein* Energieband die Vorgänge hinreichend beschreiben kann oder ob die Hinzunahme weiterer Energiebänder zu einer Verbesserung führt. Die zweite Frage wurde bereits in [Sch95b, Anhang D] behandelt und soll hier nicht weiter untersucht werden. Die Frage, ob bereits ein Energieband ausreichend ist, ist besonders deswegen relevant, weil andere Modelle wie z. B. [Bon94] nur ein Energieniveau betrachten.

Die Quantentöpfe eines „realen“ Übergitters besitzen selbstverständlich mehr als nur ein gebundenes Energieniveau, die genaue Anzahl hängt primär von der Tiefe des Quantentopfes ab. Jede Theorie, die nur ein Energieniveau betrachtet und nicht nur unvollständige Ergebnisse liefern will, betrachtet daher in Wirklichkeit nicht die Ladungsdichte im ersten Energieniveau, sondern die Gesamtladungsdichte ρ . Die Übergangsgleichungen für dieses „fiktive erste“ Energieniveau enthalten also nicht nur die Effekte für das erste „reale“ Energieniveau, sondern berücksichtigen auch die Effekte der endlichen Besetzung der höher gelegenen Niveaus und der Transportvorgänge unter Mitwirkung dieser Niveaus. Das Hauptproblem bei der Erstellung solcher Übergangsgleichungen ist es,

zumindest näherungsweise aus anderen Größen zu bestimmen, wie sich die Gesamtladungsdichte auf die einzelnen realen Energieniveaus verteilt. Genau dieses soll nun durchgeführt werden.

Angenommen, die Ladungsdichte im ersten Energieniveau, d. h. genauer die Gesamtladungsdichte ρ , sei für ein Modell mit nur einem Energieniveau bekannt. Dann kann ein solches Modell auf das in dieser Arbeit verwendete zurückgeführt werden, wenn es möglich ist, die Gesamtladungsdichte eindeutig in die Besetzungsdichten n_1 und n_2 der beiden betrachteten Energieniveaus aufzuspalten. Dieses ist selbstverständlich nicht allgemein möglich, so daß hier nur *stationäre* Zustände betrachtet werden sollen oder, mit anderen Worten, die Kennlinie.

Wir betrachten also die Gleichungen für die Übergangsraten aus dem Abschnitt 3.2, wobei wir uns zuerst auf die für \dot{n}_1 beschränken wollen. Es soll der Übersichtlichkeit halber folgende Schreibweise gewählt werden: Die Größen im gerade betrachteten Quantentopf werden mit keinem weiteren Index versehen, während die im rechts angrenzenden Quantentopf ein + und die im links angrenzenden ein – erhalten. Ferner wollen wir eine „vernünftige“ Feldverteilung annehmen, d. h. alle Feldstärken sind positiv oder Null¹. Die Gleichung für die Übergangsrate lautet dann:

$$\dot{n}_1 = \frac{n_2}{\tau} + n_1^- R_1(F^-) - n_1 [R_1(F^+) + X(-F^-) + X(F^+)] + n_2^- Y(-F^-) + n_2^+ Y(F^+) \quad (\text{E.1})$$

Wie oben bereits vorausgesetzt, sei die Gesamtladungsdichte $\rho = n_1 + n_2$ für jeden Quantentopf bekannt sei. Dann ist (bei bekannter angelegter Spannung) für jeden Quantentopf (genauer: für jede Barriere) auch die entsprechende Feldstär-

ke bekannt. Damit sind in Gleichung E.1 sämtliche Koeffizienten wie R_1 usw. bekannt, wenn nur ρ bekannt ist. Im nächsten Schritt wird n_1 durch $n_1 = \rho - n_2$ eliminiert:

¹Die grundlegenden Aussagen werden nicht verändert, wenn eine „seltsame“ Feldverteilung vorliegt. Wie sich ergeben wird, ist die Verteilung von ρ auf n_1 und n_2 nur in Sonderfällen nicht eindeutig, und genau die Aussagen für diese Sonderfälle lassen sich dann nicht mehr so einfach formulieren.

dann einen mindestens eindimensionalen Unterraum, es ist also insbesondere nicht möglich, daß nur irgendwelche diskreten Werte Lösungen wären. Mindestens ein $n_2^{(i)}$ muß sich kontinuierlich verändern³.

Man gehe im folgenden in Gleichung (E.4) in die i -te Zeile des homogenen Gleichungssystems:

$$d_i = a_i \cdot n_2^{(i-1)} + b_i \cdot n_2^{(i)} + c_i \cdot n_2^{(i+1)} \quad (\text{E.5})$$

Da sich $n_2^{(i)}$ ändert und b_i ungleich Null ist, (E.5) aber weiterhin gültig sein muß, müssen sich $n_2^{(i-1)}$ oder $n_2^{(i+1)}$ oder beide ändern. Eine genauere Aussage kann durch Betrachtung der darüberliegenden Zeile erreicht werden:

$$d_{i-1} = a_{i-1} \cdot n_2^{(i-2)} + b_{i-1} \cdot n_2^{(i-1)} + c_{i-1} \cdot n_2^{(i)} \quad (\text{E.6})$$

Auch c_{i-1} ist ungleich Null, also müssen sich $n_2^{(i-1)}$ oder $n_2^{(i-2)}$ oder beide ändern. Im ersten Fall sei $j = i - 1$, ansonsten sei $j = i - 2$. Dann gehe man in die folgende Zeile:

$$d_{j-1} = a_{j-1} \cdot n_2^{(j-2)} + b_{j-1} \cdot n_2^{(j-1)} + c_{j-1} \cdot n_2^{(j)} \quad (\text{E.7})$$

Mit der gleichen Argumentation wie für (E.6) folgert man aus (E.7), daß wieder einer der beiden anderen in der Gleichung vertretenen $n_2^{(\cdot)}$ sich ebenfalls ändern muß.

Die Variation eines einzigen $n_2^{(i)}$ führt also dazu, daß in Richtung kleiner werdender Indizes min-

destens jeder zweiter Wert sich ebenfalls verändern muß. In Richtung steigender Indizes können sich die Werte ebenfalls verändern, müssen es aber nicht unbedingt tun.

Es sei noch der Rand des Übergitters betrachtet. Für den Rand lautet die Gleichung:

$$d_1 = b_1 \cdot n_2^{(1)} + c_1 \cdot n_2^{(2)}$$

Sobald sich also eine der beiden Elektronendichten $n_2^{(1)}$ oder $n_2^{(2)}$ ändert, was auf Grund der vorherigen Überlegungen garantiert ist, muß sich auch die andere ändern. Gibt es keine eindeutige Lösung, müssen sich also mindestens $n_2^{(1)}$ und $n_2^{(2)}$ ändern⁴.

Als Ergebnis läßt sich also feststellen, daß bis auf Sonderfälle für die Berechnung der stationären Zustände die Betrachtung *eines* Energieniveaus ausreichend ist. Die Sonderfälle führen zu physikalisch absurdem Verhalten, bei dem in einem großen Teil des Übergitters sich die Verteilung der Elektronen auf die einzelnen Energiebänder kontinuierlich verändern darf. Die Bedingungen für das Auftreten von Sonderfällen sind derart, daß zu vermuten ist, daß diese niemals auftreten. Dies hängt allerdings von der exakten Form der Übergangskoeffizienten im Anhang G ab, die im verwendeten Modell bei weitem zu kompliziert ist, um in diesem Zusammenhang definitive Ergebnisse bekommen zu können.

³Dies bedeutet insbesondere, daß auch physikalisch sinnlose Zustände wie zum Beispiel solche mit negativer Elektronendichte Lösungen sein müßten

⁴Womit gleichzeitig der Fall abgehandelt wäre, daß bereits in Gleichung (E.5) $i = 1$ oder $i = 2$ ist.

Anhang F

Numerik und Programme

In dieser Arbeit wurde das Verhalten von Halbleiterübergittern primär mit den Methoden der nichtlinearen Dynamik untersucht. Kernstück war dabei die Untersuchung lokaler Bifurkationen. Solche Untersuchungen werden jedoch meistens nur an „einfachen“ Systemen¹ durchgeführt, d. h. an Systemen, in denen die Dynamik einer kleinen Zahl von Variablen durch einfache Ratengleichungen bestimmt wird. Beides ist hier nicht mehr gegeben.

F.1 Numerische Genauigkeit

Bereits die dynamischen Gleichungen sind relativ kompliziert, was nicht nur Auswirkungen auf die zur Auswertung notwendige Rechenzeit hat. Auch die Rechengenauigkeit wird zu einem begrenzenden Faktor. Dies beruht darauf, daß die Veränderung der Elektronendichten in den Quantentöpfen durch die Differenz der zu- und der abfließenden Elektronen gegeben ist. Zum einen sind Hin- und Rückrate für das resonante Tunneln in der gleichen Größenordnung, zum anderen wird der größte Teil der Elektronen durch den betrachteten Quantentopf hindurchfließen, ohne daß sich die Anzahl der Elektronen im Quantentopf verändert. Endeffekt ist, daß $\dot{n}_k^{(i)}$ deutlich kleiner als die beteiligten Teilraten ist. Besonders einsichtig ist dies für den stationären Fall, wo sich die Elektronendichten nicht mehr verändern, sehr wohl aber ein Teilchenstrom fließt.²

Es seien hier einmal exemplarisch die Transportraten für zwei Fälle aufgeführt. Die Notation ist die aus Abbildung 3.4 (Seite 18). Beim ersten Fall handelt es sich um eine Oszillation ($N_D = 2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$). Die Teilraten sind dort:

$$\begin{aligned} A^{(i)} &= 7,61178 \cdot 10^{26} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1} \\ R_1^{(i)} &= 1,10215 \cdot 10^{27} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1} \\ R_1^{(i+1)} &= 1,10158 \cdot 10^{27} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} X_l^{(i)} &= 3,80998 \cdot 10^{26} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1} \\ X_r^{(i+1)} &= 4,01135 \cdot 10^{26} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1} \\ Y_r^{(i)} &= 9,89034 \cdot 10^{24} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1} \\ Y_l^{(i+1)} &= 1,11042 \cdot 10^{25} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1} \\ \dot{n}_1^{(i)} &= 6,04420 \cdot 10^{23} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1} \end{aligned}$$

Die sich ergebende Rate $\dot{n}_1^{(i)}$ ist also um etwa einen Faktor 100 kleiner als die Raten der beteiligten Transportprozesse. Bei Oszillationen beträgt der Genauigkeitsverlust durch die Addition bzw. Subtraktion der Teilraten etwa zwei Stellen und ist damit nicht weiter kritisch. Im Bereich ausgebildeter Äste ($N_D = 6,7 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$) ist dies anders. Dort lauten die Teilraten:

$$\begin{aligned} A^{(i)} &= 2,36163 \cdot 10^{28} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1} \\ R_1^{(i)} &= 2,17750 \cdot 10^{28} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1} \\ R_1^{(i+1)} &= 2,17750 \cdot 10^{28} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1} \\ X_l^{(i)} &= 1,20082 \cdot 10^{28} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1} \\ X_r^{(i+1)} &= 1,22569 \cdot 10^{28} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1} \\ Y_r^{(i)} &= 1,20082 \cdot 10^{28} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1} \\ Y_l^{(i+1)} &= 4,38733 \cdot 10^{26} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1} \end{aligned}$$

¹Eines der „wunderlichen“ Ergebnisse der nichtlinearen Dynamik ist bekanntlich, daß auch „einfache“ Systeme ein sehr komplexes Verhalten zeigen können.

²Ein Übergitter mit angelegter externer Spannung ist ein dynamisches System fernab vom thermodynamischen Gleichgewicht. Folgerichtig darf man nicht erwarten, daß etwa detailliertes Gleichgewicht gilt.

Der sich ergebende Wert für $\dot{n}_1^{(i)}$ sollte wegen der vorausgesetzten Stationarität 0 sein. Praktisch muß man selbstverständlich eine Abbruchbedingung vorgeben, die im vorliegenden Fall zu $10^{17} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ gewählt wurde. Dies bedeutet, daß die Teilraten um 10^{10} größer sind als die erlaubte effektive Rate. Bei der abschließenden Berechnung der effektiven Rate $\dot{n}_1^{(i)}$ entsteht also ein Genauigkeitsverlust von bis zu zehn Stellen – zusätzlich zu den Rundungsfehlern, die bereits bei der ebenfalls nicht trivialen Berechnung der Teilraten aufgetreten sind.

Eine 8 Byte lange Fließkommazahl („double“) besitzt eine Genauigkeit von etwa 15 bis 16 Stellen. Von diesen bleiben unter Umständen also effektiv nur fünf Stellen übrig. Für einige Berechnungen ist dieses deutlich zu wenig, so daß ein Ausweichen auf längere Datentypen notwendig ist. In diesen Fällen wurden die Berechnungen auf einem IBM-kompatiblen PC durchgeführt. Dessen numerischer Koprozessor rechnet intern immer mit einer Datenlänge von zehn Byte, so daß diese zusätzliche Genauigkeit nur noch ebenfalls in den Speicher geschrieben muß. Auf diese Weise bekommt man etwa vier Stellen

F.2 Anzahl der Variablen

Für viele Aufgaben aus der linearen Algebra gibt es eine Auswahl unter verschiedenen Algorithmen. Ein gewichtiger Bestandteil der Entscheidung ist die Größe (Anzahl der Variablen) der beteiligten Vektoren und Matrizen. Für die Berechnung der Determinante einer kleinen Matrix mag das direkte Aufstellen aller Permutationen der Indizes sinnvoll sein. Bei 80 Variablen, wie es bei $N = 40$ Quantentöpfen der Fall ist, ist es solches Unterfangen jedoch nicht nur wegen der sich anhäufenden Rundungsfehler sinnlos, sondern auch, weil die benötigte Rechenzeit ins Unermeßliche steigt. Leider haben die Verfahren, die auch für große Matrizen anwendbar sind, meist den Nachteil, daß sie sehr komplex sind. Sie werden daher in den meistens Programmen nicht verwendet.

Ähnliches gilt auch für das Bestimmen von Nullstellen, einem der Kernprobleme bei jeder Un-

zusätzliche Genauigkeit praktisch „geschenkt“, die nutzbare Genauigkeit hat sich also beinahe verdoppelt.

Benötigt man noch höhere Genauigkeit – dies war im Rahmen dieser Arbeit nur für einige wenige Kontrollrechnungen der Fall – so muß auf Workstations (zum Beispiel SUNs ab SunOS 5.4) ausgewichen werden, die softwareseitig 16 Byte lange Fließkommazahlen („long double“) bearbeiten können. Dies ist jedoch mit einem Geschwindigkeitseinbruch verbunden. Ein Pentium ist bei Berechnungen mit acht Byte langen Fließkommazahlen um etwa 40 % langsamer als die Referenzworkstation (siehe weiter unten). Wird die zusätzliche Genauigkeit des Koprozessors genutzt, so verlängern sich die Berechnungen nur um etwa 20 %.³ Eine Sun-10 dagegen ist bei Verwendung von „long double“ um den Faktor 1000 langsamer als bei Verwendung von „doubles“ (bei „doubles“ ist sie etwa so schnell wie die Referenzworkstation). Dementsprechend können auf einem PC durchaus umfangreichere Berechnungen in höherer Genauigkeit ausgeführt werden, während dies auf einer SUN nicht möglich ist.

tersuchung stationärer Zustände. Hierzu wird praktisch immer ein Newton-Raphson-Verfahren verwendet. Ist die Anzahl der Variablen nicht zu groß, so ist der Konvergenzbereich des Verfahrens durch die Gültigkeit der linearen Näherung um den Startpunkt begrenzt. Für eine große Zahl von Variablen werden jedoch auch die im Verfahren auftretenden Rundungsfehler immer wichtiger und sind bei 80 Variablen meist das begrenzende Element. Ein einfaches Verfahren wie zum Beispiel das aus [Pre92] konvergiert daher nur selten. Die Trennung zwischen diesem Abschnitt und dem vorhergehenden ist allerdings fließend. Auch bei guten Algorithmen ist die Rechengenauigkeit wichtig. Bei Verwendung von 8 Byte langen Fließkommatypen benötigen sie deutlich bessere Startwerte oder mehr Iterationsschritte, als wenn 10 Byte lange Datentypen verwendet werden.

³Die Verlängerung tritt genau dann ein, wenn Algorithmen die gleiche Anzahl von Iterationsschritten benötigen wie vorher. Manche Algorithmen passen sich an die Rechengenauigkeit an und führen mehr Iterationsschritte aus, um die zusätzliche Genauigkeit voll auszuschöpfen. In diesem Fall ist das dann erhaltene Ergebnis genauer als nur durch die zusätzliche Auflösung der Fließkommazahlen erklärbar wäre. Andererseits kann die zusätzliche Genauigkeit aber auch dazu führen, daß Algorithmen schneller konvergieren oder einen größeren Konvergenzradius haben. Bei gewissen Problemen kehrt sich der Geschwindigkeitsnachteil eines Pentium gegenüber einer Workstation daher in einen Geschwindigkeitsvorteil bis zu einem Faktor 5 um, wenn interne Parameter der Berechnung so angepaßt werden, daß der höhere Konvergenzradius auch ausgenutzt wird.

F.3 Verwendete Programme

Für die Durchführung von Simulationen wurden selbstgeschriebene Programme benutzt, deren Integrationsroutine auf der aus [Hei92] beruht. Die benötigte Genauigkeit beim Integrationsvorgang hängt davon ab, ob es sich um eine Oszillation oder um die Umgebung eines Fixpunktes handelt. Bei der Bestimmung eines stabilen Grenzyklus, d. h. bei einer selbsterregten ungedämpften Oszillation, sind kleine Abweichungen der numerisch bestimmten Trajektorie vom „richtigen“ Orbit unproblematisch. Ebenso sind die Genauigkeitsanforderungen bei der Berechnung des Einschwingverhaltens eher gering. Wichtig ist primär, daß bei Multistabilität der „richtige“ Attraktor angelaufen wird.

Bei der Bestimmung stationärer Zustände sind die Genauigkeitsanforderungen deutlich höher. Die Position des stationären Zustandes muß so genau gefunden werden, daß die vorgegebene Abbruchbedingung für die Veränderungen der Elektronendichten erfüllt werden kann. Ist die Genauigkeit des Integrationsalgorithmus nicht ausreichend, so würde das System in der Nähe des Fixpunktes quasi zufällig „herumirren“, ohne ihn jeweils zu erreichen. Wie Abschnitt F.1 aufgeführt wurde, sind typische Werte für $\dot{n}_1^{(i)}$ während einer Oszillation etwa um den Faktor 10^6 größer als die Abbruchbedingung. Es ist daher nicht sinnvoll, der Integrationsroutine in beiden Fällen die gleiche Fehlergrenze vorzugeben.

Dieses Problem wird dadurch gelöst, daß der erlaubte Integrationsfehler in Abhängigkeit von den Elektronenraten $\dot{n}_k^{(i)}$ während des Integrationsvorganges angepaßt wird. Durch diese Anpassung kann eine Geschwindigkeitssteigerung um bis zu einen Faktor 10 gegenüber einem festen erlaubten Fehler erreicht werden.

Die meisten Berechnungen in dieser Arbeit wurden mittels Zweigverfolgung durchgeführt. Dies geschah fast immer mit dem Programm CANDYS/QA [Feu92, Can95]. Durch die Verwaltung der berechneten Daten in Form eines Netzes, dessen Kanten Fixpunkte (bzw. Bifurkation) und dessen Knoten Bifurkation (bzw. Bifurkationen mit höherer Kodimension) sind, kann der Zusammenhang zwischen verschiedenen Zuständen gut dargestellt werden. Um dieses Programm auch für hochdimensionale Probleme einsetzen zu können, mußten einige Kriterien

bei der Nullstellensuche nach Newton-Raphson gelockert sowie die Eigenwertroutine durch die aus [Pre92] ersetzt werden.

Die Phasendiagramme sowie die instabilen Mannigfaltigkeiten wurden mittels des Programms DsTool [Guc95] bestimmt. Hierbei handelt es sich um numerisch relativ anspruchslose Verfahren, so daß nur das Verfahren zur Nullstellensuche ersetzt werden mußte. (Es wurde zu diesem Zweck das aus CANDYS/QA übernommene.)

Für eine Berechnung (Abbildung 4.14) wurde das Programm LOCBIF verwendet, das auch in DsTool eingebunden werden kann. Es kann eine deutlich größere Zahl von Bifurkationstypen als zum Beispiel CANDYS/QA verfolgen, darunter auch welche, die im engeren Sinne keine Bifurkation darstellen, wie zum Beispiel Punkte, an denen zwei Eigenwerte gleich sind. Das Programm ist allerdings für hochdimensionale Probleme denkbar ungeeignet. So mußte ein großer Teil der Algorithmen der linearen Algebra ausgetauscht werden. Bei diesen handelte es sich um Verfahren, deren Abhängigkeit von der Anzahl der Elemente bis zu $\mathcal{O}(N^5)$ gingen. Diese sind nicht nur wegen der benötigten Rechenzeit inakzeptabel; durch die hohe Anzahl der in das Ergebnis eingehenden Terme sind diese Algorithmen sehr empfindlich gegen Rundungsfehler. Meistens gab es daher keinerlei Zusammenhang zwischen den Eingangsdaten der Algorithmen und deren Ergebnissen.

Ähnliches gilt auch für die Bifurkationsfunktionen, die das Herzstück jedes Programms zur Zweigverfolgung bilden. Diese mußten komplett neu geschrieben werden. Da die vorliegende Arbeit sich primär mit der Untersuchung von Halbleiterübergittern und nicht mit der Erstellung von Software zur Zweigverfolgung beschäftigt, konnten die selbst geschriebenen Bifurkationsfunktionen allerdings nicht weiter optimiert werden. Zusätzlich benutzt DsTool zur Berechnung von partiellen Ableitungen, auch denen von Bifurkationsfunktionen, ein Differenzenverfahren⁴. Bei der Verfolgung von Bifurkationspunkten ist DsTool daher um einen Faktor 100 langsamer als CANDYS/QA. DsTool wurde daher nur eingesetzt, wenn der betreffende Bifurkationstyp von CANDYS/QA nicht unterstützt wird.

⁴Ein Differenzenverfahren benötigt einen Durchlauf pro Variable. Dies ist besonders für dieses Modell sehr unpraktisch. Der größte Teil des Aufwandes bei der Berechnung der Übergangsraten liegt in der Bestimmung der Übergangskoeffizienten. Dieser ist aber der gleiche wie bei der direkten „analytischen“ Berechnung der Jacobi-Matrix.

F.4 Rechenzeit

Im folgenden angegebene Rechenzeiten werden auf eine Referenzworkstation bezogen. Es handelt sich hierbei um eine IBM RS-6000/370. Zum Vergleich: Eine Sun-10/40 ist ungefähr gleich schnell, eine Cray X-MP besitzt eine ungefähr 150 % größere Rechenleistung.

Eine simulierte Kennlinie benötigt je nach Spannungsauflösung etwa ein bis zwei Stunden. Bei durch Zweigverfolgung bestimmten durchgehenden Kennlinien hängt der Rechenaufwand stark von der Zahl und der Länge instabiler Äste ab. Für die benötigte Rechenzeit ist primär die Bogenlänge der Kennlinie relevant. Diese beträgt bei einer Kennlinie mit voll ausgeprägten Ästen ein Vielfaches von der bei kleineren Dotierungen. Bei voll ausgeprägten Ästen wird etwa die gleiche Rechenzeit wie für eine Simulation benötigt, obwohl die Simulation deutlich weniger Daten berechnet. Bei kleineren Dotierungen ist die Berechnung der Kennlinie durch Zweigverfolgung um mehr als einen Faktor 10 schneller als die durch Simulation.

Extrem zeitaufwendig ist die Berechnung von Oszillationen, da jedesmal das Einschwingen abgewartet werden muß. Insbesondere bei „alten“ Randbedingungen steigt sowohl die Periodendauer der Oszillation als auch die Dauer des Einschwingverhaltens stark an. So benötigte allein die Abbildung 7.4 eine Rechenzeit von et-

wa 1500 Stunden. Ähnliches gilt, wenn statt der Simulation direkt Grenzyklen, die dann auch instabil sein können, bestimmt werden. Hierfür muß die Jacobi-Matrix entlang des Grenzyklus aufintegriert⁵ werden. Deswegen dauert jeder einzelne Schritte etwa 1 Stunde, bei längeren Periodendauern wie zum Beispiel bei „alten“ Randbedingungen auch bis zu 10 Stunden.

Es wird aus zwei Gründen keine „Gesamtverbrauch“ an Rechenzeit angegeben: Zum einen kann diese Zahl nur sehr grob geschätzt werden, da auf den meisten Maschinen die verbrauchte Rechenzeit nicht erfaßt wird. Zum anderen wurde der größte Teil der gesamten Rechenzeit für einige wenige Berechnungen verwendet, bei denen man sicherlich fragen kann, ob der Einsatz an Rechenzeit gerechtfertigt ist. Man muß aber bedenken, daß es viel Rechenzeit kostet, interessante Phänomene im Parameter- und Phasenraum aufzuspüren. Rechenzeit, die nicht zur Entdeckung solcher Phänomene führte, muß man als Verlust „verbuchen“. Es war aber selbstverständlich notwendig, diese Berechnungen durchzuführen, da man vorher nicht das Ergebnis kennt. So benötigten die Abbildungen im Abschnitt 6.1 nur einige Stunden Rechenzeit, die Vorarbeiten – das Bestimmen des relevanten Parameterbereichs – aber einige hundert Stunden.

⁵Genauer gesagt muß die Jacobi-Matrix potenziert werden. Dies ist vergleichbar mit der Bestimmung der Floquet-Exponenten.

Anhang G

Übergangskoeffizienten

Der Vollständigkeit halber sollen an dieser Stellen die exakten Ausdrücke für die Übergangskoeffizienten aus dem Kapitel 3 angegeben werden. Die Koeffizienten sind aus [Pre94a] übernommen.

Die Koeffizienten $R_1(F)$ bzw. $R_2(F)$ für Minibandleitung sind gegeben durch:

$$R_k(F) = \frac{2\lambda_k}{\hbar} \sqrt{\frac{\tau_m}{\tau_e}} \frac{F/\tilde{F}}{1 + (F/\tilde{F})^2}$$

Hierbei ist $\tilde{F} = \frac{\hbar}{\epsilon_0 d \tau_m \tau_e}$ die sogenannte kritische Feldstärke und λ_k das Überlappintegral der Wellenfunktionen des k -ten Energieniveaus in den beiden benachbarten Quantentöpfen. Letzteres hat folgende Werte:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= 2c_1^2 V_0 \frac{e^{-\kappa_1(d+L/2)}}{k_1^2 + \kappa_1^2} \left[k_1 \cosh\left(\frac{\kappa_1 L}{2}\right) \tan\left(\frac{k_1 L}{2}\right) + \kappa_1 \sinh\left(\frac{\kappa_1 L}{2}\right) \right] \\ \lambda_2 &= 2c_2^2 V_0 \frac{e^{-\kappa_2(d+L/2)}}{k_2^2 + \kappa_2^2} \left[\kappa_2 \cosh\left(\frac{\kappa_2 L}{2}\right) - k_2 \sinh\left(\frac{\kappa_2 L}{2}\right) \cot\left(\frac{k_2 L}{2}\right) \right] \end{aligned}$$

Die Koeffizienten für resonantes Tunneln sind gegeben durch:

$$\begin{aligned} X &= \left[\frac{S(b_- + b_+) + 2b_- b_+}{b_- - b_+} \right]^2 \cdot \frac{E_+ - E_-}{2\pi\hbar} \\ Y &= \left[\frac{S(b_- + b_+) + 2}{b_- - b_+} \right]^2 \cdot \frac{E_+ - E_-}{2\pi\hbar} \end{aligned}$$

Die verwendeten Abkürzungen lauten:

$$\begin{aligned} b_{\pm} &= -\frac{P}{2} \mp \sqrt{\frac{P^2}{4} + Q} \\ P &= \frac{(E_1 - E_2 + \delta)(1 - S^2) + (V_1^{12'} - V_2^{12'})S + V_2^{11} - V_1^{2'2'}}{V_1^{12'} - V_1^{2'2'}S} \\ Q &= \frac{V_2^{12'} - V_2^{11}S}{V_1^{12'} - V_1^{2'2'}S} \\ E_{\pm} &= \frac{(E_1 + \delta/2) + (E_2 - \delta/2)b_{\pm}S + b_{\pm}V_1^{12'} + V_2^{11}}{1 + b_{\pm}S} \end{aligned}$$

Die dort vorkommenden Überlappintegrale haben folgende Werte:

$$V_1^{12'} = \left(-V_0 + \frac{edF}{2} \right) \alpha_L$$

$$\begin{aligned}
V_2^{12'} &= \left(-V_0 - \frac{edF}{2}\right) \alpha_R \\
V_2^{11} &= \left(-V_0 - \frac{edF}{2}\right) \gamma_1 \\
V_2^{2'2'} &= \left(-V_0 + \frac{edF}{2}\right) \gamma_2 \\
S &= \alpha_L + \alpha_M + \alpha_R
\end{aligned}$$

mit den Abkürzungen

$$\begin{aligned}
\gamma_1 &= c_1^2 \frac{e^{(-2d+L)\kappa_1}}{2\kappa_1} \\
\gamma_2 &= c_2^2 \frac{e^{(-2d+L)\kappa_2}}{2\kappa_2} \\
\alpha_L &= 2c_1c_2 \frac{e^{-(\kappa_2d+\kappa_1L/2)}}{\kappa_1^2 + \kappa_2^2} \left[k_1 \cosh\left(\frac{\kappa_2L}{2}\right) \tan\left(\frac{k_1L}{2}\right) + \kappa_2 \sinh\left(\frac{\kappa_2L}{2}\right) \right] \\
\alpha_R &= 2c_1c_2 \frac{e^{-(\kappa_1d+\kappa_2L/2)}}{\kappa_1^2 + \kappa_2^2} \left[k_1 \cosh\left(\frac{\kappa_1L}{2}\right) - \kappa_2 \sinh\left(\frac{\kappa_1L}{2}\right) \cot\left(\frac{\kappa_2L}{2}\right) \right] \\
\alpha_M &= c_1c_2 \frac{e^{\kappa_1L+\kappa_2d} - e^{\kappa_2L+\kappa_1d}}{\kappa_2 - \kappa_1} e^{-(\kappa_1+\kappa_2)(d+L/2)} \\
c_1 &= \left[e^{-\kappa_1L} \left(\frac{1}{\kappa_1} + \frac{L}{2 \cos^2(k_1L/2)} + \frac{1}{\kappa_1} \tan(k_1L/2) \right) \right]^{-1/2} \\
c_2 &= \left[e^{-\kappa_2L} \left(\frac{1}{\kappa_2} + \frac{L}{2 \sin^2(k_2L/2)} + \frac{1}{\kappa_2} \cot(k_2L/2) \right) \right]^{-1/2}
\end{aligned}$$

In den obigen Formeln wurde abweichend vom Rest dieser Arbeit die Breite der Quantentöpfe mit L bezeichnet. Die Übergitterperiode, also die Summe aus der Breite eines Quantentopfs und einer Barriere, wurde d benannt. $\delta = edF$ ist die Verschiebung der Energieniveaus durch das lokale elektrische Feld F .

Einzusetzen sind noch die Ausbreitungsvektoren $k_j = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_j E_j}$ (für den Quantentopf) bzw. Dämpfungskonstanten $\kappa_j = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_j (V_0 - E_j)}$ (für die angrenzende Barriere) der beiden gebundenen Lösungen. Diese müssen numerisch bestimmt werden, indem die Energien E_j bestimmt werden, bei denen die Stetigkeitsforderung für Heterostrukturen [Pre94a]

$$\kappa_j = \frac{m_2}{m_1} \tan(kL/2)$$

erfüllt ist, die sich von der normalen Stetigkeitsanforderung durch das Verhältnis der effektiven Massen unterscheidet.

Anhang H

Daten der Berechnungen

Abb.	U	N_D	n_D	α	Fluk.
3.6	0,0-5,0		1,5		
3.7	0,0-5,0		2,8		
4.1(a)			0,5	0%	
4.1(b)			1,0	0%	
4.1(c)			1,5	0%	
4.1(d)			2,0	0%	
4.1(e)			2,35	0%	
4.2			2,9	0%	
4.3			2,9	0%	
4.4			2,9	0%	
4.5	3,8		2,9	0%	
4.6			2,9	0%	
4.7	1,0	$5 \cdot 10^{16}$		0%	
4.8	0,75		1,5	0%	
4.9		$5 \cdot 10^{16}$		0%	
4.10				0%	
4.11				0%	
4.12(a)	3,5	$2 \cdot 10^{16}$		0%	
4.12(b)	1,5	$3 \cdot 10^{16}$		0%	
4.12(c)	1,5	$5 \cdot 10^{16}$		0%	
4.14				0%	
4.15				0%	
4.16		$1 \cdot 10^{16}$		0%	
4.17	3,8		1,5	0%	
4.18				0%	
4.19	1,0			0%	
4.20				0%	
4.21	1,0			0%	
4.22				0%	
4.23				0%	
4.24			2,9	0%	
4.25	2,348		2,9	0%	
4.26			2,9	0%	
4.27			2,9	0%	
4.28			2,9	0%	
4.29			2,9	0%	
4.30			3,0	0%	
5.2	2,34182 - 2,35349		2,9		1
5.3			2,9		2
5.4(a)	0,915022518		2,9	0%	2
5.4(b)	0,9148		2,9	10%	2

Abb.	U	N_D	n_D	α	Fluk.
5.4(c)	0,9148		2,9	10 %	2
5.5			2,8	8 %	1
5.6			2,9		1
5.7					1
5.10					1
5.8, links			2,9		1
5.8, mitte			2,8		1
5.8, rechts			2,7		1
5.9, links			2,9		1
5.9, mitte			2,8		1
5.9, rechts			2,7		1
5.11(a)				12 %	1
5.11(b)				12 %	4
5.11(c)				12 %	6
5.11(d)				12 %	7
6.1			2,9	10 %	1
6.2			2,9	10 %	1
6.3			2,9		1
6.4			2,9	10 %	1
6.5			2,9	0 %	1
6.6			2,9	0 %	1
6.7			2,9		1
6.8			2,9		1
6.9(a)			2,9		1
6.9(b)			2,9	0 %	1
6.9(c)			2,9		1
6.9(d)			2,9	0 %	1
6.10			2,9		1
6.11(a)			2,9		1
6.11(b)			2,9	9 %	1
6.14(a)			2,9	9,04245 %	1
6.14(b)			2,9	9,042462 %	1
6.14(c)			2,9	9,04247 %	1
6.15	2,0944318		2,9	9,042462 %	1
6.16			2,9	9,042462 %	1
6.17			2,9		1
6.18			2,9	14 %	1
6.19			2,9	14 %	1
6.20			2,9	14 %	1
6.21					1
6.22					1
6.23			2,3868		1
6.24			2,3868		1
6.26			2,33	17,5 %	1
6.27			2,33	17,5 %	1
6.28	2,002		2,33	17,5 %	1
7.1		$2 \cdot 10^{16}$		0 %	
7.2		$2 \cdot 10^{16}$		0 %	
7.3	1,0			0 %	
7.4		$2 \cdot 10^{16}$		0 %	
7.5		$2 \cdot 10^{16}$		0 %	
7.6	1,0		1,5	0 %	
7.7		$2 \cdot 10^{16}$		0 %	
7.8			2,8	0 %	
7.9				0 %	
B.1	0,5	0		0 %	
B.2		0		0 %	
C.1		4,0		0 %	

Abb.	U	N_D	n_D	α	Fluk.
C.2		4,0		0%	

Tabelle H.1: Exakte Daten der Berechnungen für die verschiedenen Abbildungen. „Fluk.“ gibt die Nummer der Realisierung der Fluktuationen an, n_D ist auf Seite 119 definiert.

	+1	+2	+3	+4	+5
0	+0,936142	-0,866539	-0,0434378	+0,819069	-0,296615
5	+0,865067	+0,308872	-0,95786	+0,0244097	-0,595962
10	+0,879954	-0,591835	-0,242342	+0,586228	-0,423598
15	-0,465687	-0,286355	-0,743253	+0,406596	+0,474827
20	+0,605042	+0,830462	+0,0227633	+0,524115	-0,0872372
25	-0,057876	-0,400899	+0,225119	-0,853238	-0,00362927
30	-0,560825	-0,917096	+0,129832	+0,395737	+0,901973
35	+0,833217	+0,260804	+0,210844	+0,875357	-0,714786

Tabelle H.2: Normierte Fluktuationen für die Realisierung 1 („Standardrealisierung“).

	+1	+2	+3	+4	+5
0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
10	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
15	0,0	0,0	0,0	0,0	1,0
20	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
25	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
30	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
35	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0

Tabelle H.3: Normierte Fluktuationen für die Realisierung 2.

	+1	+2	+3	+4	+5
0	-0,7068	-0,473982	-0,0704654	+0,764672	-0,62663
5	+0,865073	+0,728941	+0,101892	-0,131348	-0,626173
10	-0,747873	-0,55129	+0,566449	+0,170055	-0,173973
15	+0,710723	+0,293483	+0,991452	+0,272798	-0,0282634
20	-0,358087	-0,118153	+0,457988	-0,481902	+0,372265
25	-0,470352	+0,446735	-0,762089	-0,360843	+0,337826
30	+0,394595	-0,228634	-0,548835	-0,0942771	-0,684055
35	+0,34623	+0,307642	-0,838937	+0,406451	-0,396039

Tabelle H.4: Normierte Fluktuationen für die Realisierung 4.

	+1	+2	+3	+4	+5
0	+0,0246972	-0,738236	+0,417337	+0,634606	-0,71217
5	-0,278348	+0,561903	+0,744417	-0,613879	+0,936042
10	-0,147552	+0,362828	-0,157157	-0,720546	+0,710416
15	+0,619223	-0,6383	-0,122326	-0,880627	+0,862695
20	+0,685764	+0,770533	-0,881519	+0,725448	+0,258207
25	-0,648086	+0,0290125	+0,18607	+0,830846	-0,833702
30	+0,54049	+0,00892775	-0,568183	+0,742135	+0,799399
35	-0,506282	-0,364789	+0,700417	+0,176976	-0,159355

Tabelle H.5: Normierte Fluktuationen für die Realisierung 6.

	+1	+2	+3	+4	+5
0	+0,764478	+0,606861	+0,00778312	-0,983954	+0,222996
5	+0,870308	+0,808331	+0,501767	-0,411232	+0,400809
10	-0,859965	-0,306265	-0,936468	+0,0382501	-0,466728
15	-0,0722249	-0,348991	-0,923974	-0,48468	-0,771004
20	+0,0934742	-0,863781	-0,994303	-0,0725615	-0,0226838
25	-0,654556	-0,000787315	-0,26547	-0,971405	-0,734324
30	-0,461664	+0,0316007	+0,88491	-0,36467	-0,00716537
35	-0,320504	+0,161428	-0,466008	-0,801841	+0,0297467

Tabelle H.6: Normierte Fluktuationen für die Realisierung 7.

Danksagung

Diese Arbeit entstand in der Arbeitsgruppe von Prof. E. Schöll unter dessen wissenschaftlicher Betreuung. Ihm und der gesamten Arbeitsgruppe sei an dieser Stelle Dank für die zuteil gewordene Unterstützung ausgesprochen.

Insbesondere gilt dies für G. Schwarz und F. Pregel, ohne deren Untersuchungen von Halbleiter-Übergittern diese Arbeit, die stark auf ihren Ergebnissen aufbaut, nicht möglich gewesen wäre. Ihre Bereitschaft, bei auftretenden Problemen zu helfen und ihre Erfahrung zu teilen, hat vieles vereinfacht.

Weiterhin gedankt sei S. Bose für dessen Hilfe bei Computerproblemen, D. Merbach für wertvolle Diskussionen über dynamische Systeme und Dr. A. Wacker für die Anleitung in der Anfangsphase dieser Arbeit.

Literaturverzeichnis

- [Abr83] R. H. Abraham and Ch. D. Shaw. *Dynamics: The Geometry of Behavior*. Aerial, Santa Cruz, 1983.
- [All90] E. L. Allgower and K. Georg. *Numerical Continuation Methods*, volume 13 of *Springer Series in Computational Mathematics*. Springer-Verlag, Berlin, 1990.
- [Bon94] L. L. Bonilla, J. Galán, J. A. Cuesta, F. C. Martínez, and J. M. Molera. Dynamics of electric field domains and oscillations of the photocurrent in a simple superlattice model. *Phys. Rev. B*, 50:8644, 1994.
- [Bon95] L. L. Bonilla. Dynamics of electric field domains in superlattices. In F. J. Niedernostheide, editor, *Nonlinear Dynamics and Pattern Formation in Semiconductors*, chapter 1, pages 1–20. Springer, Berlin, 1995.
- [Can95] *CANDYS/QA User's Manual*. Potsdam, 1995.
- [Cho87] K. K. Choi, B. F. Levine, R. J. Malik, J. Walker, and C. G. Bethea. Periodic negative conductance by sequential resonant tunneling through an expanding high-field superlattice domain. *Phys. Rev. B*, 35(8):4172, 1987.
- [Dev86] B. Deveaud, A. Regreny, J-Y. Emery, and A. Chomette. Photoluminescence study of interface defects in high-quality GaAs-GaAlAs superlattices. *J. Appl. Phys.*, 59:1633, 1986.
- [Die90] B. De Dier, D. Roose, and P. van Rompay. Interaction between fold and Hopf curves leads to new bifurcation phenomena. In H. D. Mittelmann and D. Roose, editors, *Continuation Techniques and Bifurcation Problems*, volume 92 of *International Series of Numerical Mathematics*, pages 171–186. Birkhäuser Verlag, Basel, 1990.
- [Dra92] P.G. Drazin. *Nonlinear Systems*. Cambridge texts in applied mathematics 10. Cambridge University Press, Cambridge, U.K., 1992.
- [Dum92] F. Dumortier, R. Roussarie, and J. Sotomayor. *Generic 3-parameter families of planar vector fields, unfolding of saddle, focus and elliptic singularities with nilpotent linear parts*. Lecture Notes in Mathematics 1480. Springer-Verlag, Berlin, 1992.
- [Esa70] L. Esaki and R. Tsu. Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors. *IBM J. Res. Develop.*, 14:61, 1970.
- [Esa74] L. Esaki and L. L. Chang. New transport phenomenon in a semiconductor superlattice. *Phys. Rev. Lett.*, 33(8):495, 1974.
- [Ete93] G. Etemadi and J. F. Palmier. Effect of interface roughness on non-linear vertical transport in GaAs/AlAs superlattices. *Sol. Stat. Comm.*, 86(11):739, 1993.
- [Feu92] U. Feudel and W. Jansen. CANDYS/QA - A software system for qualitative analysis of nonlinear dynamical systems. *International Journal of Bifurcation and Chaos*, 2:773–794, 1992.
- [Gol85] M. Golubitsky and D. G. Schaeffer. *Singularities and Groups in Bifurcation Theory*, volume I of *Applied mathematical sciences 51*. Springer-Verlag, Berlin, 1985.
- [Gra92] H. T. Grahn. Vertikaler Transport in GaAs-AlAs Übergitterstrukturen. Habilitationsschrift, 1992.

- [Gra95a] H. T. Grahn. Electric field domains. In H. T. Grahn, editor, *Semiconductor Superlattices, Growth and Electronic Properties*, chapter 5. World Scientific, Singapore, 1995.
- [Gra95b] H. T. Grahn, J. Kastrup, K. Ploog, L. L. Bonilla, J. Galán, M. Kindelan, and M. Moscoso. Self-oscillations of the current in doped semiconductor superlattices. *Jpn. J. Appl. Phys.*, 34:4526, 1995.
- [Guc83] J. Guckenheimer and P. Holmes. *Nonlinear Oscillations, Dynamical Systems, and Bifurcations of Vector Fields*. Applied mathematical sciences 42. Springer-Verlag, Berlin, 1983.
- [Guc86] J. Guckenheimer. Multiple bifurcation problems for chemical reactors. *Physica D*, 20:1–20, 1986.
- [Guc95] J. Guckenheimer, M. R. Myers, F. J. Wicklin, and P. A. Worfolk. *DsTool User's Manual*. Ithaca NY 14853, 1995.
- [Hei92] G. Heinzl. Beliebig genau - Moderne Runge-Kutta-Verfahren zur Lösung von Differentialgleichungen. *c't Magazin für Computertechnik*, 8:172–185, Aug 1992.
- [Hel90] P. Helgesen and T. G. Finstad. Sequential resonant and non-resonant tunneling in GaAs/AlGaAs multiple quantum well structures: High field domain formation. In O. Hansen, editor, *Proceedings of the 14th Nordic Semiconductor Meeting*, page 323. University of Århus, Århus, 1990.
- [Ign91] A. A. Ignatov, E. P. Dodin, and V. I. Shashkin. Transient response theory of semiconductor superlattices: Connection with Bloch oscillations. *Mod. Phys. Lett. B*, 5(16):1087, 1991.
- [Ioo90] G. Iooss and D. D. Joseph. *Elementary Stability and Bifurcation Theory*. Undergraduate texts in mathematics. Springer-Verlag, Berlin, second edition, 1990.
- [Kas94] J. Kastrup, H. T. Grahn, K. Ploog, F. Prengel, A. Wacker, and E. Schöll. Multistability of the current-voltage characteristics in doped GaAs-AlAs superlattices. *Appl. Phys. Lett.*, 65:1808, 1994.
- [Kas95a] J. Kastrup. Private Mitteilung, veröffentlicht in [Sch95b], 1995.
- [Kas95b] J. Kastrup, R. Klann, H. T. Grahn, K. Ploog, L. L. Bonilla, J. Galán, M. Kindelan, M. Moscoso, and R. Merlin. Self-oscillations of domains in doped GaAs-AlAs superlattices. *Phys. Rev. B*, 52:13761, 1995.
- [Kas96] J. Kastrup, F. Prengel, H. T. Grahn, K. Ploog, and E. Schöll. Formation times of electric field domains in doped GaAs-AlAs superlattices. *Phys. Rev. B*, 53:1502, 1996.
- [Kaw86] Y. Kawamura, K. Wakita, H. Asahi, and K. Kurumada. Observation of room temperature current oscillation in InGaAs/InAlAs MQW pin diodes. *Jpn. J. Appl. Phys.*, 25:L928, 1986.
- [Kaz72] R. F. Kazarinov and R. A. Suris. Electric and electromagnetic properties of semiconductors with a superlattice. *Sov. Phys. Semicond.*, 6(1):120, 1972.
- [Kea95] B. J. Keay, S. J. Allen Jr., J. P. Kaminski, K. L. Champman, A. C. Gossard, U. Bhattacharya, M. J. M. Rodwell, and J. Galán. Sequential resonant tunneling via photon virtual states in semiconductor superlattices. In D. J. Lockwood, editor, *Proc. 22nd Int. Conf. Phys. Semicond., Vancouver 1994*, volume 2, page 1055. World Scientific, Singapore, 1995.
- [Khi90] A. I. Khibnik. LINLBF: A program for continuation and bifurcation analysis of equilibria up to codimension three. In D. Roose, B. De Dier, and A. Spence, editors, *Continuation and Bifurcations: Numerical Techniques and Applications*, volume 313 of *NATO ASI series C: Mathematical and physical sciences*, pages 283–296. Kluwer Academic Publishers Group, Dordrecht, The Netherlands, 1990.
- [Khi92] A. I. Khibnik, Yu. A. Kuznetsov, V. V. Levitin, and E. V. Nikolaev. *Interactive Local BIFurcation Analyzer*, 1992.
- [Kla95] R. Klann, S. H. Kwok, H. T. Grahn, and R. Hey. Time-resolved photoluminescence investigations of electric-field domain formation in GaAs/AlAs superlattices. *Phys. Rev. B*, 52:8680, 1995.

- [Kor93] A. N. Korotkov, D. V. Averin, and K. K. Likharev. Single-electron quantization of electric field domains in slim semiconductor superlattices. *Appl. Phys. Lett.*, 62(25):3282, 1993.
- [Kwo94] S. H. Kwok, R. Merlin, H. T. Grahn, and K. Ploog. Electric field domains in semiconductor superlattices: Resonant or non-resonant tunneling? *Phys. Rev. B*, 50:2007, 1994.
- [Kwo95a] S. H. Kwok, H. T. Grahn, M. Ramsteiner, K. Ploog, F. Prengel, A. Wacker, E. Schöll, S. Murugkar, and R. Merlin. Non-resonant carrier transport through high-field domains in semiconductor superlattices. *Phys. Rev. B*, 51:9943, 1995.
- [Kwo95b] S. H. Kwok, T. B. Norris, L. L. Bonilla, J. Galán, J. A. Cuesta, F. C. Martínez, H. T. Grahn, K. Ploog, and R. Merlin. Domain wall kinetics and tunneling-induced instabilities in superlattices. *Phys. Rev. B*, 51:10171, 1995.
- [Lai93] B. Laikhtman and D. Miller. Theory of current-voltage instabilities in superlattices. *Phys. Rev. B*, 48(8):5395, 1993.
- [Mer95] R. Merlin, S. H. Kwok, T. B. Norris, H. T. Grahn, K. Ploog, L. L. Bonilla, J. Galán, J. A. Cuesta, F. C. Martínez, and J. M. Molera. Dynamics of resonant tunneling domains in superlattices: Theory and experiment. In D. J. Lockwood, editor, *Proc. 22nd Int. Conf. Phys. Semicond., Vancouver 1994*, page 1039. World Scientific, Singapore, 1995.
- [Mil94] D. Miller and B. Laikhtman. Theory of high-field-domain structures in superlattices. *Phys. Rev. B*, 50:18426, 1994.
- [Par89] T. S. Parker and L. O. Chua. *Practical Numerical Algorithms for Chaotic Systems*. Springer-Verlag, Berlin, 1989.
- [Pat95] M. Patra. Bifurkationsanalyse von Stromoszillationen in Halbleiterübergittern. Studienarbeit, Technische Universität Berlin, Berlin, 1995.
- [Pei92] J. Peinke, J. Parisi, O. E. Rössler, and R. Stoop. *Encounter with Chaos*. Springer-Verlag, Berlin, 1992.
- [Pre92] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery. *Numerical Recipes in C: The art of scientific computing*. Cambridge University Press, Cambridge, U.K., 1992.
- [Pre94a] F. Prengel. Nichtlinearer Transport in Halbleiter-Übergittern. Diplomarbeit, Technische Universität Berlin, 1994.
- [Pre94b] F. Prengel, A. Wacker, and E. Schöll. Simple model for multistability and domain formation in semiconductor superlattices. *Physical Review B*, 50:1705–1712, 1994.
- [Pre95] F. Prengel, A. Wacker, G. Schwarz, E. Schöll, J. Kastrup, and H. T. Grahn. Dynamics of domain formation in semiconductor superlattices. In *Proc. 9th Symposium on Ultrafast Phenomena in Semiconductors*, volume 35, pages 404–407, Vilnius, 1995. Lithuanian Journal of Physics.
- [Roo87] D. Roose. Numerical computation of origins for Hopf bifurcation in a two-parameter problem. In T. Küpper, R. Seydel, and H. Troger, editors, *Bifurcation: Analysis, Algorithms, Applications*, volume 79 of *International Series of Numerical Mathematics*, pages 268–276. Birkhäuser Verlag, Basel, 1987.
- [Sch87] E. Schöll. *Nonequilibrium Phase Transitions in Semiconductors*. Springer, Berlin, 1987.
- [Sch94] G. Schwarz. Vertikaler Transport in Übergittern mit Dickenfluktuationen. Studienarbeit, Technische Universität Berlin, September 1994.
- [Sch95a] E. Schöll and A. Wacker. Oscillatory transport instabilities and complex spatio-temporal dynamics in semiconductors. In F. J. Niedernostheide, editor, *Nonlinear Dynamics and Pattern Formation in Semiconductors and Devices*, pages 21–45. Springer, Berlin, 1995.
- [Sch95b] G. Schwarz. Felddomänen in imperfekten Übergitterstrukturen. Diplomarbeit, Technische Universität Berlin, 1995.

- [Sch96a] E. Schöll, G. Schwarz, M. Patra, F. Pregel, and A. Wacker. Oscillatory instabilities and field domain formation in imperfect superlattices. In K. Hess, J. P. Leburton, and U. Ravaioli, editors, *Proc. 9th Int. Conf. on Hot Carriers in Semiconductors, Chicago 1995*, New York, 1996. Plenum Press. in print.
- [Sch96b] G. Schwarz and E. Schöll. Field domains in semiconductor superlattices. *phys. status solidi (b)*, 194(1):351–369, 1996.
- [Sch96c] G. Schwarz, A. Wacker, F. Pregel, E. Schöll, J. Kastrup, H. T. Grahn, and K. Ploog. Influence of imperfections and weak disorder on domain formation in superlattices. *Semicond. Sci. Technol.*, 11(4):475–482, 1996.
- [Sha92] M. P. Shaw, V. V. Mitin, E. Schöll, and H. L. Grubin. *The Physics of Instabilities in Solid State Electron Devices*. Plenum Press, New York, 1992.
- [Wac] A. Wacker, M. Moscoso, M. Kindelan, and L. L. Bonilla. Current-voltage characteristic and stability in resonant-tunneling n-doped semiconductor superlattices. submitted to *Phys. Rev. B*.
- [Wac93] A. Wacker and E. Schöll. Spatio-temporal oscillations in the heterostructure hot-electron diode. In *Proc. 8th Vilnius Symposium on Ultrafast Phenomena in Semicond.*, page 37, Vilnius, 1993. Academia.
- [Wac95a] A. Wacker, F. Pregel, and E. Schöll. Theory of multistability and domain formation in semiconductor superlattices. In D. J. Lockwood, editor, *Proc. 22nd Int. Conf. Phys. Semicond., Vancouver 1994*, volume 2, page 1075. World Scientific, Singapore, 1995.
- [Wac95b] A. Wacker, G. Schwarz, F. Pregel, E. Schöll, J. Kastrup, and H. T. Grahn. Probing growth-related disorder by high-field transport in semiconductor superlattices. *Phys. Rev. B*, 52:13788, 1995.
- [Wer91] B. Werner and V. Janovsky. Computation of Hopf branches bifurcating from Takens-Bodganov-points for problems with symmetries. In R. Seydel, F. W. Schneider, T. Küpper, and H. Troger, editors, *Bifurcation and Chaos: Analysis, Algorithms, Applications*, volume 97 of *International Series of Numerical Mathematics*, pages 377–388. Birkhäuser Verlag, Basel, 1991.
- [Zha94] Y. Zhang, X. Yang, W. Liu, P. Zhang, and D. Jiang. New formation mechanism of electric field domain due to $\gamma-x$ sequential tunneling in GaAs/AlAs superlattices. *Appl. Phys. Lett.*, 65:1148, 1994.

Index

- α , 55
- Astbildung, 25
- Aststruktur, 25

- Barriere, 16
- Bifurcation
 - i.e.S., 5
 - simple, 5
- Bifurkation
 - Fold, 4
 - Hopf, 11
 - Isola, 7
 - isola center, 5
 - Pitchfork, 8
 - gestörte, 11
 - Saddle-Loop-, 13
 - Sattel-Knoten-, 3
 - transkritische, 4
 - Turning Point, 4
- Bogdanov
 - Takens-Bogdanov-Punkt, 13
- Bogenlänge, 28

- Center
 - isola, 5
- Continuation, 14
- Cusp-Kurve, 9

- Diagramm
 - Phasen-, 42
- Domäne, 21
- Dotierungsdichte, 20
- Dotierungskonzentration, 20
- Downsweep, 31

- $F^{(i)}$, 17
- Felddomäne, 21
- Feldstärke, 17
 - Resonanz-, 20
- Feldverteilung, 19
- Fixpunkt, 3
- Flächenladungsdichte, 19
- Fold, 4

- geschlossene Lösungskurve, 5
- Gestörte Pitchfork-Bifurkation, 11
- Grad
 - Störungs-, 55
- Grenzyklus, 3

- Hochfelddomäne, 21

- Homokliner Orbit, 12
- Hopf-Bifurkation, 11
- Hysteresis-Punkt, 8

- Insel, 5
- Insel-Bifurkation, 7
- instabil, 3
- Instabile Mannigfaltigkeit, 12
- Isola, 5
- Isola center, 5
- Isola-Bifurkation, 7

- j , 20

- Kodimension, 11
- Koeffizient
 - Übergangs-, 17, 131
- Konjugierter Punkt, 5

- Lösungskurve
 - geschlossene, 5
- Ladungsdichte, 19
- Leitfähigkeit
 - negative differentielle, 1
- Limit cycle, 3
- Limit point, 4

- Mannigfaltigkeit
 - instabile, 12
 - stabile, 12

- $n_1^{(i)}$, 17
- $n_2^{(i)}$, 17
- N_D , 20
- n_D , 119
- NDC, 1
- Niederfelddomäne, 21

- Orbit
 - homokliner, 12

- Parametrisierung
 - Bogenlängen-, 28
- Path-following, 14
- Phasendiagramm, 42
- Pitchfork-Bifurkation, 8
 - gestörte, 11
- Point
 - limit, 4
 - turning, 4
- Punkt

- konjugierter, 5
- Takens-Bogdanov-, 13
- Quantentopf, 16
- quantum well, 16
- Rate
 - Übergangs-, 17
- Resonanzfeldstärke, 20
- Saddle-Loop, 12
- Saddle-Loop-Bifurkation, 13
- Sattel-Knoten-Bifurkation, 3
- Sattelpunkt, 3
- Seltsamer Zustand, 46
- Simple bifurcation, 5
- Simulation, 24
- Spannung, 20
- Störungsgrad, 55
- stabil, 3
- Stabile Mannigfaltigkeit, 12
- Stabilität
 - strukturelle, 4
- Stromdichte, 20
- Strukturell stabil, 4
- Takens-Bogdanov-Punkt, 13
- Topf
 - Quanten-, 16
- Transkritische Bifurkation, 4
- Turning point, 4
- U , 20
- Übergangskoeffizient, 17, 131
- Übergangsrate, 17
- Upsweep, 31
- Verfolgung
 - Zweig-, 14
- Volumenladungsdichte, 19
- well
 - quantum, 16
- z -Richtung, 15
- Zustand
 - seltsamer, 46
- Zweigverfolgung, 14
- Zyklus
 - Grenz-, 3

Legende

Zeichen in Abbildungen

Ein variiertes Parameter (Bifurkationsdiagramm)	
Stabiler Fixpunkt	—————
Instabiler Fixpunkt	-----
Oszillation (Grenzzyklus)	-----
Sattel-Knoten-Bifurkation	◇
Hopf-Bifurkation	+
Transkritische Bifurkation	□

Zwei variierte Parameter („Phasendiagramm“)	
Sattel-Knoten-Bifurkation	—————
Hopf-Bifurkation	-----
Cusp-Punkt	△
Takens-Bogdanov-Punkt	+

Wichtige Größen

U	Spannung	(Seite 20)
N_D	Dotierungskonzentration	(Seite 20, meistens $7,9 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$)
α	Störungsgrad	(Seite 55)
$F^{(i)}$	Feldstärke über der i -ten Barriere	(Seite 17)
$n_k^{(i)}$	Elektronendichten im i -ten Quantentopf	(Seite 17)

Mit Methoden der nichtlinearen Dynamik wird das Verhalten eines einfachen mikroskopischen Modells für den vertikalen Ladungstransport in Halbleiter-Übergittern untersucht. Durch Bestimmung der relevanten Bifurkationen wird die auftretende Strukturbildung in Form von multistabilen Felddomänen und Grenzzyklusoszillationen erklärt. Weiterhin werden räumliche Dotierungsfluktuationen berücksichtigt und die daraus folgenden Veränderungen der Kennlinie und des oszillatorischen Regimes bestimmt.