



Institut für Schicht- und Ionentechnik

***Transportuntersuchungen und
quantenmechanische Beschreibung
von Einelektronenstrukturen
in Halbleiterheterostrukturen***

Klaus Michael Indlekofer

***Transportuntersuchungen und
quantenmechanische Beschreibung
von Einelektronenstrukturen
in Halbleiterheterostrukturen***

Klaus Michael Indlekofer

Berichte des Forschungszentrums Jülich ; 3705
ISSN 0944-2952
Institut für Schicht- und Ionentechnik Jül-3705
D 82 (Diss. RWTH Aachen, 1999)

Zu beziehen durch: Forschungszentrum Jülich GmbH · Zentralbibliothek
D-52425 Jülich · Bundesrepublik Deutschland
☎ 02461/61-6102 · Telefax: 02461/61-6103 · e-mail: zb-publikation@fz-juelich.de

Transportuntersuchungen und quantenmechanische Beschreibung von Eielektronenstrukturen in Halbleiterheterostrukturen

Die vorliegende Arbeit behandelt das System einer Resonanten Tunneldiode im Eielektronenbereich innerhalb einer Halbleiterheterostruktur mit vollständiger lateraler Einschnürung. Schwerpunkt der sowohl theoretischen als auch experimentellen Untersuchungen stellt die Betrachtung des Eielektronentransportes und der elektronischen Struktur unter dem Einfluß eines äußeren Magnetfeldes dar. Der Quantendot ist dabei über Tunnelbarrieren an zwei Elektronenreservoirs angekoppelt. Im theoretischen Teil der Arbeit wird unter Zuhilfenahme von Realtime-Greenfunktionen der Magnetotransport modellmäßig beschrieben. Desweiteren gelingt durch die Betrachtung einer genäherten projizierten Dichtematrix eine weiterführende Klassifikation und Simulation der elektronischen Struktur typischer Quantendotsysteme, insbesondere die Definition eines kapazitiven Regimes. Im experimentellen Teil wird die Realisierung eines vertikalen Feldeffekttransistors mit lateralem Schottkygate (MESFET) und eingebetteter Doppelbarrierenstruktur vorgestellt. Das so hergestellte Quantendotsystem mit variabler lateraler Quantisierung wird mit Hilfe von Tieftemperatur-Magnetotransportmessungen charakterisiert. Ein Vergleich der so gewonnenen Eielektronen-Stufenkennlinien als Funktion der äußeren Parameter gestattet einen direkten Vergleich mit dem theoretisch simulierten System des ersten Teils bei geeigneter Wahl der Strukturparameter. Es zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung im Rahmen der anzusetzenden Fehlerquellen.

Investigation of Electronic Transport and Quantum Mechanical Description of Single-Electron Structures in Semiconductor Heterostructures

In this thesis the system of a laterally confined resonant tunneling diode in the single-electron transport regime is considered. Here the double barrier system is embedded in a semiconductor heterostructure. The following investigations focus mainly on the electronic transport and electronic structure inside such a quantum dot system, which is coupled to the two electron reservoirs via tunnel barriers. Experimental as well as theoretical results are presented. In particular the influence of an external magnetic field on this system is discussed. The theoretical part gives a description of the magneto-transport by use of a quantum dot model system based on realtime Green's functions. Furthermore the consideration of a projected density matrix provides insight into the electronic structure of the quantum dot. As a result a capacitive quantum dot regime is defined employing the results of the numerical simulations. In the experimental part of the thesis a vertical field effect transistor with a lateral Schottky-Gate (MESFET) and an embedded double barrier structure is presented. Magneto-transport measurements in the sub-Kelvin regime are performed on such a quantum dot system with variable lateral quantization energy controlled by the applied gate voltage. The analysis of the observed typical step-current-voltage characteristics yields information about the electronic structure of the system for the given boundary conditions. A direct comparison of the simulated characteristics of the structure with the measurements shows a very good agreement within the error boundaries for a suitable choice of open structure parameters in the theoretical quantum dot model.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Theorie	3
2.1	Quantentransport	3
2.2	Tight-Binding-Transportmodelle	7
2.2.1	Resonante Tunneldiode	8
2.2.2	Einelektronentunneln	15
2.2.3	Gekoppelte Strukturen	24
2.3	Künstliche Atome	29
2.3.1	Dichtematrix-Näherung	29
2.3.2	Modell-Hamiltonoperator	30
2.3.3	Projektion	34
2.3.4	Algorithmus	37
2.3.5	Reservoirs	45
2.3.6	Beispiele	49
2.4	Hysterese-Effekte	56
3	Technologie	61
3.1	Strukturüberblick	61
3.2	Probenpräparation	65
3.2.1	Elektronenstrahl-Lithographie und Mesa-Ätzung	65
3.2.2	SiO ₂ -Isolation	71
3.2.3	Gate-Bedampfung	72
3.2.4	Polyimid-Planarisierung	76
3.2.5	Bond-Pads	80
3.2.6	Einlegieren, Bonden	80
4	Meßtechnik	83
4.1	Randbedingungen	83
4.2	Meßkreis	84

4.3	Datenaufnahme- und Verarbeitung	87
5	Experiment	91
5.1	RTD-Transistor	91
5.1.1	Raumtemperatur	92
5.1.2	1,4K-Messungen	95
5.2	Einelektronentunneln	103
5.2.1	Temperatur-Einfluß	103
5.2.2	Magnetotransport	106
5.2.3	Variables laterales Potential	109
6	Zusammenfassung	115
A	Details zum Meßsystem	117
A.1	Echtzeitsystem	117
A.2	Client-Server-Architektur	117
	Literaturverzeichnis	121
	Abbildungsverzeichnis	126
	Tabellenverzeichnis	128

Kapitel 1

Einleitung

Die wohl entscheidensten Experimente zur Entwicklung der Quantentheorie zu Beginn dieses Jahrhunderts stellten spektroskopische Untersuchungen an Atomen und Molekülen dar. Dabei lieferten optische Emissions-Spektren einen direkten Einblick in Zustandsänderungen im wahrsten Sinne des Wortes. Das Versagen klassischer Theorien zur Stabilität und energetischen Struktur eines Atoms, geschweige denn eines Moleküls, führte zwangsläufig zur Entwicklung der Grundideen zur heutigen Quantentheorie [1]. Im Lichte der neuen Beschreibungsweise dieser Experimente stellt das elektromagnetische Feld sozusagen die Schnittstelle zwischen dem Experimentator und dem untersuchten Atom dar. Dieses Feld spielt die Rolle einer Sonde, die an das Materiesystem koppelt. Interessanterweise werden dadurch die Zustandsänderungen, die zur Emission und Absorption von Licht führen, aber überhaupt erst ermöglicht. Die Materie besteht dabei aus einem Vielelektronensystem in einem oder mehreren Coulombpotentialen der Atomkerne. Im einfachsten Fall basiert die Anregung des Systems auf Teilchenstoß in einer elektrischen Gasentladung [2].

Mit den Methoden der heutigen III/V-Halbleitertechnologie erlebt das vorgestellte Konzept eine Renaissance, es wird sogar erheblich erweitert. Die Grundidee der vorliegenden Arbeit ist die experimentelle Realisierung und die theoretische Beschreibung eines "künstlichen Atoms" oder "Quantendots", eingebettet in einer Halbleiterheterostruktur [3]. Es wurde unter Ausnutzung der Halbleitertechnologie ein neuartiges mesoskopisches Bauelement konstruiert, in dem das bindende Einteilchenpotential extern variiert werden kann mit typischen Bindungslängen im Bereich von einigen 10 bis 100 nm [4, 5, 6, 7, 8, 9]. Im wesentlichen sind dabei zwei interessante Ansätze enthalten. Zum einen bietet die Doppelbarrierenstruktur einer Resonanten Tunneldiode [10] einen Potentialtopf für Elektronen mit einer Ankopplung zur Außenwelt über zwei Tunnelbarrieren. Zum anderen liefert das Prinzip eines Feldeffekttransistors mit allumschließender Schottky-Gateelektrode über seine steuerbare Verarmungszone ein variables, bindendes Potential. Zu einer dreidimensionalen Struktur vereinigt, erhält man eine maßgeschneiderte Quantenbox für Elektronen, eingebettet im Kanal eines vertikalen MESFETs mit sub-mikrometer Abmessungen.

Der in dieser Arbeit verfolgte Ansatz zur Spektroskopie innerhalb einer derartigen Struktur ba-

siert nicht auf der Detektion emittierter Lichtquanten sondern auf dem direkten Elektronentransport durch das künstliche Atom hindurch. Zwei Elektronenreservoir, die über die beiden Tunnelbarrieren an den Quantentopf der Resonanten Tunneldiode gekoppelt sind, dienen nun als Sonde. Offensichtlich befindet sich das gebundene Vielelektronensystem bei Stromfluß, das heißt bei Elektroneninjektion von einem Reservoir durch das künstliche Atom hindurch zum zweiten Reservoir, in einem Nichtgleichgewichts-Zustand. Dem Experimentator stehen hier als Schnittstelle zwei Elektronenreservoir in der Gestalt zweier elektrischer Zuleitungen zur Verfügung. In gewisser Weise stellt die Differenz der chemischen Potentiale in den Zuleitungen das Analogon zum Detektions-Energiefenster der optischen Spektroskopie dar. Ein äußeres Magnetfeld beeinflußt dabei die elektronische Struktur innerhalb des künstlichen Atoms in gezielter Weise und gibt, in Analogie zum historischen Zeeman- und Paschen-Back-Effekt, ein nützliches experimentelles Hilfsmittel zur Hand [11, 12, 13].

Der Zustand des Systems wird quantenfeldtheoretisch beschrieben unter Zuhilfenahme von Methoden der Nichtgleichgewichts-Thermodynamik. Unter Verwendung des Konzepts der Green-Funktionen [14, 15, 16, 17] wird der elektronische Transport formuliert. Ein Ansatz zur direkten Berechnung einer Vielteilchen-Dichtematrix eines projizierten Systems [18] gestattet dabei die genauere Betrachtung der elektronischen Struktur innerhalb des Systems. Ein wesentlicher Aspekt der theoretischen Untersuchungen stellt die Elektron-Elektron-Wechselwirkung dar, welche im hier untersuchten Regime im allgemeinen nicht mehr durch Meanfield-Näherungen beschreibbar ist.

Vom Standpunkt der Grundlagenphysik bietet sich beim vorgestellten System also sowohl eine Möglichkeit zur Prüfung grundlegender Annahmen der Quantenstatistik von wechselwirkenden Vielelektronen-Systemen in Nichtgleichgewichts-Zuständen als auch ein Zugang zu Transportgrößen der untersuchten Halbleiter. So gelingt es im Rahmen dieser Arbeit, den Kreis zwischen den aufgestellten theoretischen Modellen und den dazu durchgeführten experimentellen Untersuchungen zu schließen.

Anders betrachtet liefert die vorliegende Untersuchung allerdings auch weitreichende Einblicke in Effekte, die unweigerlich auftreten bei dem fortschreitenden "downscaling" der anwendungsorientierten Halbleitertechnologie. Im wesentlichen treten hier typisch quantenmechanisch bedingte Phänomene wie das Elektronen-Tunneln und die Möglichkeit von Resonanzen bei Vielfachstreuung auf. Letzteres wird in der Resonanten Tunneldiode sogar direkt ausgenutzt. Ein wesentlicher Aspekt ist auch das Zusammenbrechen vieler Meanfield-Näherungen für Ladung, Teilchenzahl und Wechselwirkungsterme, welche nun quantenmechanisch korrekt als Observablen behandelt werden müssen. Sicherlich ist der Einfluß einzelner Störstellen ebenfalls von zunehmender Bedeutung bei kleiner werdenden Längenskalen.

Kapitel 2

Theorie

Voraussetzung für die Beschreibung von elektronischem Transport in wechselwirkenden Vielelektronensystemen ist die Nichtgleichgewichts-Thermodynamik. So wird im folgenden der Transport mit Hilfe von Greenfunktionen mit verallgemeinerten Selbstenergie-Randbedingungen im Rahmen eines Tight-Binding-Modells beschrieben. Bei Beschränkung auf spezielle Einteilchen-Observablen, wie Teilchenzahl und Gesamtspin, wird anschließend eine genauere Formulierung dieser Größen durch die Betrachtung der Dichtematrix eines projizierten Systems gegeben.

Das Hauptaugenmerk der vorliegenden Arbeit liegt auf elektronischen Systemen in mesoskopischen Halbleiterheterostrukturen, die über Tunnelbarrieren an Reservoirs angekoppelt sind, welche als Quelle und Senke für Teilchentransport dienen. Sowohl theoretisch als auch experimentell ist die Resonante Tunneldiode mit sub- μm Abmessungen prädestiniert für Untersuchungen an Eielektronensystemen einiger wechselwirkender Elektronen.

In diesem Kapitel sollen theoretische Ansätze zum elektronischen Transport und zur Elektronenstruktur innerhalb derartiger Systeme vorgestellt werden. Insbesondere gelingt der Brückenschlag zum Experiment im Kapitel 5 durch die Vorhersage und den anschließenden Vergleich der experimentell zugänglichen Strom-Spannungs-Kennlinien.

2.1 Quantentransport

Gegenstand aller Untersuchungen dieser Arbeit ist das Elektronenfeld mit Erzeuger- und Vernichtoperatoren $\Psi^\dagger(\vec{x}, t, \sigma)$ und $\Psi(\vec{x}, t, \sigma)$. Ein reiner Zustand dieses Systems wird beschrieben durch einen Vektor des Fockraumes (d.h. dem Raum der Vielteilchenzustände). Die Zeitentwicklung eines Operators X geschieht gemäß dem Heisenbergbild zum Hamiltonoperator H des Systems:

$$\frac{d}{dt}X = \frac{i}{\hbar} [H, X] + (\partial_t X). \quad (2.1)$$

Bei Transportuntersuchungen befindet sich das System allerdings im allgemeinen nicht in einem reinen Zustand. Man muß hier ein thermodynamisches Ensemble betrachten, dessen Zustand

(oder “Präparation”) durch eine zeitunabhängige Dichtematrix ρ beschrieben wird [19]. Der Erwartungswert einer Observablen X lautet dann

$$\langle X \rangle = \text{Tr}(\rho X). \quad (2.2)$$

Bei der Betrachtung eines elektronischen Bauelementes hat man es mit einem offenen System zu tun, welches an mehrere Elektronenreservoirs gekoppelt ist. Man muß daher mathematisch von einem abgeschlossenen Gesamtsystem, bestehend aus dem eigentlichen Bauelementsystem und allen Reservoirs (dem “Rest der Welt” oder “Umgebung”), in einem Nichtgleichgewichtszustand ρ ausgehen. Man beachte, daß die Nichtdiagonalelemente von ρ bezüglich Bauelement und Reservoir gerade den Transport zwischen den Teilsystemen beschreiben. Die Formulierung des gekoppelten Systems geht, unter der Annahme einer beliebig großen Umgebung im Vergleich zum Bauelementsystem, von einer ungestörten Umgebung aus. Im Schrödingerbild läßt sich dieser Näherungsansatz in der Zeitentwicklung der projizierten Dichtematrizen $\rho_i \equiv \text{Tr}_i(\rho)$ der Reservoirs i als

$$\rho_i(t) \simeq \rho_i^{geg}(t) \quad (2.3)$$

schreiben, wobei die Zeitentwicklung ρ_i^{geg} für jedes Reservoir i einzeln fest vorgegeben ist. Typischerweise ist jedes Reservoir für sich betrachtet jeweils in einem thermodynamischen Gleichgewichtszustand zur Temperatur T_i und zum chemischen Potential μ_i :

$$\rho_i = \frac{1}{Z_i} \exp \left(-\frac{1}{k_B T_i} (H_i - \mu_i \hat{N}_i) \right), \quad (2.4)$$

wobei $\hat{N}_i$ der Teilchenzahloperator und H_i der Hamiltonoperator des Reservoirs i ist. (Z_i ist die großkanonische Zustandssumme zur Normierung von ρ_i .) Man denke hier anschaulich an einen “angelegten” Spannungsverlauf. Diese Bedingung impliziert dann im allgemeinen eine irreversible Zeitentwicklung des Gesamtsystems. (Zur Diskussion von Irreversibilität offener Systeme siehe [19, 20].) In diesem Sinne liefert die Umgebung “Randbedingungen” an das Bauelement. Die mathematische Formulierung der Bedingungen an die Reservoirs und die Auswirkungen auf das Bauelement gestaltet sich im Rahmen der nun folgenden Formulierungen durch Greenfunktionen recht elegant.

Alle Meßgrößen des Systems, wie Teilchendichte oder Stromdichte, lassen sich als Erwartungswerte von Observablen schreiben. Das heißt, bei der Messung einer Strom-Spannungs-Kennlinie eines Bauelementes werden die chemischen Potentiale der angekoppelten Reservoirs i vorgegeben und der sich dabei einstellende Strom-Erwartungswert gemessen. Wir wollen davon ausgehen, daß es sich selbst bei Hochfrequenz-Spannungen immer noch um quasistatische Veränderungen der Reservoirs handelt, wenn man dies mit den internen Relaxationszeiten der Reservoirs vergleicht.

Zur Beschreibung von Korrelationen (räumlicher und zeitlicher Art) in Nichtgleichgewichtssystemen, definiert man dazu im allgemeinen vier (Realtime-)Greenfunktionen [21, 22]. (Die zeitgeordneten Funktionen kann man aus diesen dann durch Linearkombination erhalten.) Die

Korrelations-Greenfunktionen $G^<$ und $G^>$ beschreiben die Kinetik, das heißt den Teilchentransport, innerhalb des Systems:

$$\begin{aligned} G^<(x_1, x_2) &= i \langle \Psi^\dagger(x_2) \Psi(x_1) \rangle, \\ G^>(x_1, x_2) &= -i \langle \Psi(x_1) \Psi^\dagger(x_2) \rangle, \end{aligned} \quad (2.5)$$

Zur Beschreibung der Dynamik, das heißt der energetischen Aspekte, dienen die retardierte und avancierte Greenfunktion G^{ret} und G^{av} :

$$\begin{aligned} G^{\text{ret}}(x_1, x_2) &= -i\Theta(t_1 - t_2) \langle \{ \Psi(x_1), \Psi^\dagger(x_2) \} \rangle, \\ G^{\text{av}}(x_1, x_2) &= i\Theta(t_2 - t_1) \langle \{ \Psi(x_1), \Psi^\dagger(x_2) \} \rangle. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Dabei haben wir die Heaviside-Stufenfunktion Θ , den Antikommutator $\{, \}$ und die Abkürzung $x \equiv (\vec{x}, t, \sigma)$ benutzt.

Viele Einteilchen-Observablen (wie Teilchenzahl oder Stromstärke) lassen sich dann durch solche Funktionen ausdrücken. Der Vorteil dieser Vorgehensweise liegt darin, nicht mehr die volle Dichtematrix zu benötigen, sondern nur noch die Zeitentwicklung einiger Greenfunktionen zu betrachten. In den folgenden Abschnitten werden wir darauf noch ausführlicher eingehen.

Um zu einer Bewegungsgleichung der Greenfunktionen zu gelangen, benötigt man eine Beschreibung der Zustandsentwicklung des Bauelementes unter dem Einfluß der angekoppelten Reservoirs im Rahmen der obigen Ansätze. Dazu ist es sinnvoll, das Wechselwirkungsbild zu benutzen, bei dem sich die Operatoren durch den ungekoppelten Hamiltonoperator H_0 zeitlich entwickeln, die Dichtematrix ρ dagegen unter dem Einfluß des adiabatisch zugeschalteten Kopplungsterms H_1 zwischen Umgebung und Bauelement. (Der Kopplungsterm stellt in diesem Sinne die "Störung" dar.) Die oben definierten Greenfunktionen G (ebenso auch zeitgeordnete) lassen sich dann als Zeitintegral über eine Schleife von $t = -\infty \rightarrow +\infty \rightarrow -\infty$ (siehe dazu den Keldysh-Formalismus [23]) schreiben. Dies liefert dann sogenannte Dyson-Gleichungen [23, 21, 22], welche die einzelnen Greenfunktionen untereinander räumlich und zeitlich verbinden. Als Kopplungsterme treten dort sogenannte Selbstenergien Σ auf, welche dem Störoperator des Wechselwirkungsbildes entstammen und mathematisch nichts anderes als komplexe Funktionen sind. (Im obigen Fall handelt es sich dann also um eine Kopplungs-Selbstenergie vom Bauelement zum Reservoir.) In den folgenden Abschnitten zum Transport durch Halbleiterstrukturen werden wir einige Dyson-Gleichungen benutzen und die zugehörigen Selbstenergien herleiten.

Die oben definierten Reservoirs i , welche an das Bauelement ankoppeln, werden im Rahmen der Formulierung des Transportes mittels Greenfunktionen in ihrem Einfluß auf das Bauelement durch Selbstenergien beschrieben. In diesen Kopplungs-Selbstenergien kommt der Einfluß der Reservoirs auf das Bauelement mathematisch zum Ausdruck. (Man spricht hier von verallgemeinerten Randbedingungen [15].) Dies ist zum einen der kinetische Teil der "Teilcheninjektion" (in $\Sigma^<$)

und zum anderen der dynamische Teil der “Dissipation+Shift” (in Σ^{ret}). Bei den Greenfunktionen der Reservoirs i selber nimmt man dabei mathematisch eine Gleichgewichtsform an, was genau den anfangs geforderten Bedingungen an die Reservoirs entspricht.

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich ausschließlich mit zeitlich (quasi)stationärem Transport. Liegt der untersuchte Frequenzbereich der äußeren angelegten Felder bei einer Photonenergie $\hbar\omega$, welche in die Größenordnung der typischen Anregungsenergien innerhalb des Bauelement-Systems kommt, so wird die quasistatische Beschreibung inadäquat. Phänomene, die in diesem Transportregime auftreten werden in [24] betrachtet. (Es kommt dann zu “photonassistiertem” Transport, der in der Quantenmischer-Theorie zur Berechnung von Kennlinien behandelt wird.)

2.2 Tight-Binding-Transportmodelle

Das experimentell untersuchte (siehe Kap. 3 und Kap. 5) Materialsystem, in dem Transportuntersuchungen durchgeführt wurden, besteht aus III/V-Halbleiterlegierungen (hier AlGaAs). Offensichtlich benötigt man zur theoretischen Beschreibung des Elektronensystems innerhalb einer Halbleiterheterostruktur (d.h. einkristallin aufeinander folgende Schichten verschiedener Halbleitermaterialien) ein Modell zur Bandstruktur des betrachteten Festkörpers, um die einzelnen elektronischen Transporteigenschaften vorhersagen zu können.

Die folgenden Transport-Modelle gehen von einem empirischen Tight-Binding-Modell zur elektronischen Struktur aus, bei dem als Einteilchenbasis ein Satz von korrigierten Atomorbitalen dient. Seien $\vec{R}_i$ die Positionen der Gitterplätze im Festkörper mit dem Index i zur Durchnumerierung und $\vec{v}_b$ die relativen Positionen der einzelnen Atome innerhalb einer Elementarzelle, wobei der Index b die Zahl der Atome pro Elementarzelle durchläuft. (Im Falle einer Zinkblendestruktur sind die $\vec{R}_i$ also die fcc-Plätze und $\vec{v}_b$ die Orte der zwei Atome innerhalb einer primitiven fcc-Zelle.) Wir betrachten nun $n = 1, \dots, N$ Orbitale pro Atom, so daß ein Orbital im Halbleiter eindeutig durch das Tupel (i, b, n) indiziert wird. Für die Zahl der Orbitale pro Atom gibt es verschiedene empirische Ansätze. Im folgenden haben wir es zum einen mit dem einfachen 1-Band-Modell mit $n = 1$ (und hier sogar nur einem Atom pro Zelle) und dem 10-Band-Modell (mit den Orbitalen s, p_x, p_y, p_z, s^*) der Zinkblendestruktur [25] zu tun. Korrigiert man diese Atom-Orbitale symmetrisch auf Überlapp, so erhält man ein Orthonormal (ON) System von sogenannten Löwdin-Orbitalen [26] ϕ_{ibn} . Wir wollen in den folgenden Betrachtungen dieses Abschnittes den Spin nicht explizit aufführen und die Spin-Bahn-Kopplung vernachlässigen. (Eine Hinzunahme der Spin-Bahn-Kopplung und die daraus resultierenden Korrekturen zur Bandstruktur sind in [27] diskutiert. In den Betrachtungen zum Einelektronentunneln der nächsten Abschnitte wird der Spin jedoch wieder explizit in die Indizes einbezogen.) Zur Aufstellung des Einteilchen-Hamiltonoperators benötigt man noch die Transfer-Matrixelemente $t_{(i_1 b_1 n_1)(i_2 b_2 n_2)}$ zwischen allen Orbitalen. All diese Transfer-Matrixelemente und die Diagonalterme d_{ibn} des Hamiltonoperators werden empirisch bestimmt (meist mit Nächster-Nachbar-Näherung) [25]. Diagonalisiert man diesen Hamiltonoperator unter Benutzung des Blochschen Theorems, so erhält man die Blochzustände $\phi_{\vec{k}\lambda}$ mit der zugehörigen Bandstruktur $\epsilon_\lambda(\vec{k})$, wobei der Bandindex gerade dieselbe Zahl an Werten durchläuft, wie insgesamt Orbitale in der Einheitszelle der Struktur enthalten sind.

Für Transportuntersuchungen an monolayerweise definierten Heterostrukturen ist es sinnvoll nur innerhalb eines Monolayers den Bloch-Ansatz durchzuführen und die Layerposition als eigenen Index beizubehalten [28, 29, 15]. Diese transformierten Basiszustände seien im folgenden mit $\phi_{bnL\vec{K}}$ bezeichnet, wobei b das Atom in der Zelle (z.B. Ga oder As im GaAs), n das Orbital, L den Monolayer und $\vec{K}$ den lateralen (in der Layerebene liegenden) Wellenzahlvektor bezeichnet. Mit den in dieser Basis entwickelten Feldoperatoren mit Erzeugern und Vernichtern $c_{bnL\vec{K}}^\dagger$ und $c_{bnL\vec{K}}$ lauten dann die im weiteren benötigten Greenfunktionen

$$\begin{aligned} G^<(x_1, x_2, \vec{K}) &= i \langle c^\dagger(x_2, \vec{K}) c(x_1, \vec{K}) \rangle, \\ G^>(x_1, x_2, \vec{K}) &= -i \langle c(x_1, \vec{K}) c^\dagger(x_2, \vec{K}) \rangle, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
G^{\text{ret}}(x_1, x_2, \vec{K}) &= -i\Theta(t_1 - t_2) \langle \{c(x_1, \vec{K}), c^\dagger(x_2, \vec{K})\} \rangle, \\
G^{\text{av}}(x_1, x_2, \vec{K}) &= i\Theta(t_2 - t_1) \langle \{c(x_1, \vec{K}), c^\dagger(x_2, \vec{K})\} \rangle.
\end{aligned} \tag{2.7}$$

mit der Abkürzung $x = (b, n, L, t)$. Im zeitlich stationären Fall hängen diese Funktionen nur von $t = t_1 - t_2$ ab, so daß eine Fouriertransformation in t energieabhängige (E) Greenfunktionen liefert. (Zur Beschreibung inelastischer Streuung oder hochfrequenter Anregung, die wir hier nicht betrachten wollen, ist diese Variable entscheidend [15].)

Die Teilchendichte $\tilde{n}$ in einem Layer L bei einer Querschnittsfläche S und einem Monolayerabstand a lautet dann [15]

$$\tilde{n}_L = -\frac{i}{\pi\hbar a S} \sum_{b,n,\vec{K}} \int dE G^<(b, n, L, b, n, L, E, \vec{K}). \tag{2.8}$$

(Einen analogen Ausdruck für den Fall des 1-Band-Einelektronentunnels repräsentiert die Gl.(2.24) im Kap. 2.2.2.)

Die Stromdichte im Layer L ergibt sich dann aus den Kopplungs-Matrixelementen $t_{b_1, n_1, L_1}^{b_2, n_2, L_2}(\vec{K})$ zu [15]

$$I_L = -\frac{2e}{\pi\hbar^2 S} \sum_{\substack{b_1, n_1 \\ b_2, n_2}} \sum_{\vec{K}} \int dE \sum_{\substack{L_1 \leq L \\ L_2 > L}} \text{Re} \left(t_{b_1, n_1, L_1}^{b_2, n_2, L_2}(\vec{K}) G^<(b_2, n_2, L_2, b_1, n_1, L_1, E, \vec{K}) \right). \tag{2.9}$$

(Einen analogen Ausdruck für den Fall des 1-Band-Einelektronentunnels repräsentiert die Gl.(2.22) im Kap. 2.2.2.)

2.2.1 Resonante Tunneldiode

Ein großer Teil der theoretischen und experimentellen Untersuchungen dieser Arbeit basiert auf dem Konzept der Resonanten Tunneldiode. Historisch wurde das Resonante Tunneln in Halbleiterheterostrukturen zum erstenmal in [10] vorgestellt. Das wesentliche Element besteht aus einer Doppelbarrierenstruktur, welche einen Potentialtopf mit beidseitig über Tunnelbarrieren angekoppelten Zuleitungsgebieten darstellt. Die Abb. 2.1 zeigt schematisch den Potentialverlauf innerhalb einer Resonanten Tunneldiode. Experimentell läßt sich ein solches Konzept in Form einer Halbleiterheterostruktur (z.B. im III/V Halbleitersystem AlGaAs/GaAs) realisieren, siehe dazu Kap. 3.

Die beiden senkrechten Raumrichtungen zur im Potentialverlauf dargestellten Transportrichtung können im einfachsten Fall ein konstantes Potential aufweisen, so daß innerhalb einer Ebene (im folgenden als laterale Richtung bezeichnet) das Quasiteilchen frei beweglich ist. Diesen Fall einer Resonanten Tunneldiode wollen wir als "makroskopische" Tunneldiode bezeichnen und in diesem Abschnitt als Grundlage für alle weiteren Überlegungen kurz vorstellen. Demgegenüber liegt

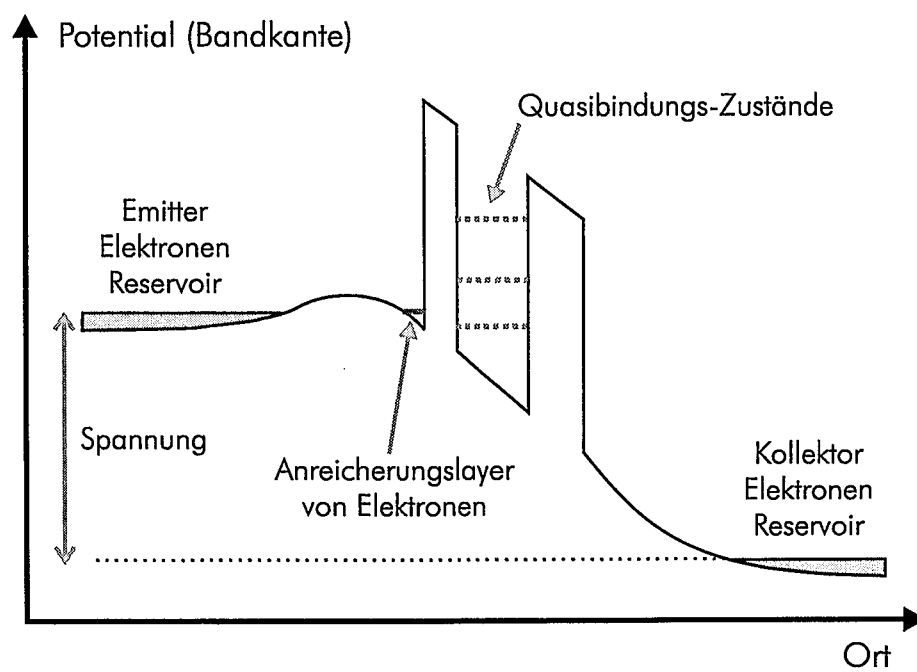


Abb.2.1: Potentialverlauf in einer Resonanten Tunneldiode in Transportrichtung bei angelegter äußerer Spannung.

das Hauptaugenmerk der vorliegenden Arbeit auf Dioden mit einem lateralen bindenden Potential. Insgesamt erhält man dadurch ein in allen Raumrichtungen quasigebundenes Teilchen, das zwischen den beiden Doppelbarrieren im Potentialtopf und seitlich durch das lateral bindende Potential lokalisiert ist. Letzterer Fall wird in den anschließenden Abschnitten detailliert betrachtet und führt zum System eines Quantendots (oder auch künstliches Atom genannt). In allen Fällen wollen wir jedoch immer von einer Separation des Potentials der lateralen Richtungen von der Transportrichtung im Einteilchen-Hamiltonoperator ausgehen.

Am Transport innerhalb einer Halbleiterheterostruktur sind im allgemeinen mehrere Bänder beteiligt. Für den allgemeinen Fall reicht es daher nicht aus, von einem einzigen Band mit konstanter effektiver Masse m^* (d.h. also einem parabolischen Band) auszugehen. Charakteristisch für eine Tunnelstruktur ist nämlich das Durchdringen von Barrierengebieten durch Elektronen (und Löchern, je nach Band). Dieser "Aufenthalt" innerhalb des Bandgaps kann im allgemeinen nur korrekt mittels eines Mehrbandmodells beschrieben werden, da dort eine Superposition vieler Bänder erforderlich wird. In vielen Fällen kann jedoch eine Barriere innerhalb einer 1-Band-Rechnung durch effektive Parameter (wie Dicke, Höhe und Tunnelmasse) in erster Näherung beschrieben werden, falls man sich auf einen kleinen Energiebereich beschränkt. (Dieses Zusammenspiel mehrerer Bänder für den Bandgap-Bereich wird anschaulich mit dem Namen "Bandwrapping" bezeichnet.) Desweiteren berücksichtigt die Einbeziehung mehrerer Bänder (d.h. mehrerer Orbitale pro Einheitszelle in der Tight-Binding-Basis mit atomaren Kopplungs-Matrixelementen zwischen den einzelnen Monolayern) Effekte, welche an idealen Heterogrenzflächen auftreten, wie zum Beispiel Interband- und Intervalleleytransfer (hier zu nennen der $\Gamma-X$, $\Gamma-L$ Transfer [28, 29]).

In diesem Abschnitt wollen wir daher zunächst kurz eine fortgeschrittene Mehrbandtheorie makroskopischer Dioden vorstellen, die auf [15] zurückgeht. (Basis für die Betrachtung von Tunnelstrukturen im Rahmen von Tight-Binding-Greenfunktionen bildet [14].) Grundlage für diese Theorie ist eine Einteilchen-Beschreibung des Systems mit Hartree-Näherung der Elektron-Elektron-Wechselwirkung. Ein solcher Ansatz ist gerechtfertigt für makroskopische Tunneldioden. Die dann folgenden Abschnitte behandeln demgegenüber den Transport innerhalb mesoskopisch kleiner Resonanter Tunneldioden mit vollständiger lateraler Einschränkung. Wie noch diskutiert wird, kann man in diesem Spezialfall auf die 1-Band-Näherung zurückgreifen, die von einem Leitungsbandelektron mit effektiven Parametern (wie konstanter effektiver Masse und Tunnelbarrierenparametern) ausgeht. Allerdings liegt dann der Schwerpunkt auf der möglichst vollständigen Beschreibung der Elektron-Elektron-Wechselwirkung, die in diesem Transportregime maßgeblich wird.

Zunächst müssen die beiden Reservoirs links und rechts von den beiden Barrieren der Resonanten Tunneldiode (s. Abb. 2.1) ungekoppelt vom Quantentopf betrachtet werden. In einer Matrixschreibweise (die Indizes n, b werden also hier weggelassen) erhält man mit Hilfe einer Dyson-Gleichung [15] für die ungekoppelte retardierte Greenfunktion $g^{\text{ret}R}$ des Reservoirs R und L

$$g_{L,L}^{\text{ret}R}(E) = \frac{1}{E - d_L - t_{L,L+1} g_{L+1,L+1}^{\text{ret}R}(E) t_{L+1,L}},$$

$$g_{L,L}^{\text{ret}L}(E) = \frac{1}{E - d_L - t_{L,L-1}g_{L-1,L-1}^{\text{ret}L}(E)t_{L-1,L}}. \quad (2.10)$$

Die Blockmatrizen d_L beschreiben also die Diagonalterme und Kopplungen innerhalb des Layers L und die Matrizen $t_{X,Y}$ die Kopplung zwischen Layer X und Y . Man beachte Terme der Form $t_{L,L-1}g_{L-1,L-1}^{\text{ret}L}(E)t_{L-1,L}$, welche die Kopplungs-Selbstenergie von einem Layer zum nächsten darstellen. Dies definiert einen rekursiven Greenfunktion-Algorithmus, wobei am äußersten linken und rechten Ende die Greenfunktion des Endes eines unendlichen Halbraumes angesetzt werden [15]. Zur Berücksichtigung von Streuung innerhalb der Reservoirs kann man pauschal einen dissipativen imaginären Term ("optisches Potential") zur Einteilchenenergie d_L hinzunehmen. Diese Vorgehensweise wird im Kap. 2.3.5 noch erläutert. (Man beachte, daß gerade im Rahmen der Greenfunktionsformulierung des Transportes die Streuung explizit in korrekter Form einbezogen werden kann.) Mit diesen ungekoppelten Greenfunktionen der Reservoirs ließe sich nun über eine weitere Dyson-Gleichung die Ankopplung des Doppelbarrieren-Gebietes (das "Bauelement") vornehmen zur Bestimmung der Gesamt-Greenfunktion G^{ret} innerhalb dieses Bereiches. Die Ankopplung der Reservoirs geschähe dabei über Kopplungs-Selbstenergien obiger Gestalt. Numerisch sinnvoller ist es jedoch [15] hier beispielsweise die Rekursion in $g^{\text{ret}R}$ vom rechten Ende des Reservoirs R aus durch das Bauelement hindurch bis zum ersten Layer des Bauelementes hinter dem Reservoir L (o.B.d.A. sei hier $L = 1$) durchzuführen. Aus Dyson-Gleichungen folgen weiterhin die Beziehungen

$$\begin{aligned} G_{1,1}^{\text{ret}}(E) &= \frac{1}{E - d_1 - t_{1,1+1}g_{1+1,1+1}^{\text{ret}R}(E)t_{1+1,1} - t_{1,1-1}g_{1-1,1-1}^{\text{ret}L}(E)t_{1-1,1}}, \\ G_{L,L}^{\text{ret}}(E) &= g_{L,L}^{\text{ret}R}(E) + g_{L,L}^{\text{ret}R}(E)t_{L,L-1}G_{L-1,L-1}^{\text{ret}}(E)t_{L-1,L}g_{L,L}^{\text{ret}R}(E), \\ G_{L,1}^{\text{ret}}(E) &= g_{L,L}^{\text{ret}R}(E)t_{L,L-1}G_{L-1,1}^{\text{ret}}(E), \end{aligned} \quad (2.11)$$

aus denen man die (hier benötigten) Elemente der gesuchten Greenfunktion G^{ret} innerhalb des Bauelementes dann ebenfalls rekursiv für $L = 2, 3, \dots$ bestimmt. Aus der Spektralfunktion $A = i[G^{\text{ret}} - G^{\text{av}}]$ folgt dann unmittelbar die lokale Zustandsdichte $\rho_L \equiv A_{LL}/(2\pi)$. (Man verwechsle dies nicht mit der Dichtematrix. Im folgenden ist die Bedeutung von ρ immer eindeutig aus dem Kontext ersichtlich.) Falls man auch die Diagonalelemente von G^{ret} innerhalb der Reservoirs benötigt, muß man hierzu sinngemäß die obige Rekursion für $g^{\text{ret}R}$ sogar bis zum Beginn von Reservoir L durchführen und dann die Rekursion für $G_{L,L}^{\text{ret}}$ ab dieser Stelle bis zum Ende von Reservoir R auswerten.

Die Bestimmung der Elemente von $G^<$ zur Berechnung der Erwartungswerte von Observablen (Teilchendichte, Stromdichte) geschieht mit Hilfe analoger Dyson-Gleichungen aus obigen Elementen von G^{ret} [15]. Innerhalb der Reservoirs nimmt man jedoch eine Gleichgewichtsform $G_0^< = i f A$ [22] für $G^<$ zum jeweils herrschenden chemischen Potential zur äußeren Spannung U an (vgl. Kap. 2.1). Die Reservoirs unterliegen im Rahmen dieser Beschreibung nicht der Einschränkung, Gebiete konstanten Potentials sein zu müssen, wie dies üblicherweise in einfacheren Modellen der Elektroneninjektion angenommen wird (siehe z.B. [10, 30]).

Man beachte, daß durch die hier vorgenommene Vernachlässigung von expliziten Streu- und Wechselwirkungstermen, welche im allgemeinen zu einer Abhängigkeit der retardierten Greenfunktion G^{ret} von $G^<$ führen, ein geschlossenes Gleichungssystem für G^{ret} folgt. Nur über den selbstkonsistenten Potentialverlauf hängt hier G^{ret} von der Elektronendichte $\tilde{n}$ und damit von der Greenfunktion $G^<$ ab, welche aber wiederum mittels einer Dysongleichung aus G^{ret} bestimmt wird.

Beispiel

Ausgangspunkt für die nun vorgestellten selbstkonsistenten 1-Band-Simulationen makroskopischer Dioden [31] stellt die experimentell untersuchte Heterostruktur (s. Kap. 3) dar, allerdings ohne laterale Einschränkung. Wir betrachten hierbei eine Resonante Tunneldiode im AlGaAs/GaAs Materialsystem mit einer GaAs Topfbreite von 49 Monolagen (1ML entspricht 0,2833 nm), einer dünnen $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ Emitterbarriere von 270 meV bei einer Dicke von 14 ML, einer $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ Kollektorbarriere von 270 meV bei einer Dicke von 22 ML und zwei undotierten GaAs Spacern von jeweils 25 ML. Die angrenzenden GaAs Bahngebiete besitzen eine n-Dotierung mit einer Elektronenkonzentration von $n^- = 2,0 \cdot 10^{16} \text{cm}^{-3}$. Bei den effektiven Massen wurde in GaAs $0,067 m_e$ und im $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ $0,074 m_e$ angesetzt. Man beachte, daß die hier gewählte Barrierenhöhe und Tunnelmasse effektive Transportgrößen des untersten Leitungsbandes in der Nähe des Γ -Punktes sind [32].

Zunächst ist in der Abb. 2.2 die simulierte Strom-Spannungs-Kennlinie dieser Diode dargestellt ($T=1,4 \text{ K}$). Die Asymmetrie der Barrierendicken spiegelt sich in der Kennlinie in Form zweier unterschiedlicher Transportbereiche wider. Im einen Fall ($U > 0$) ist der Emitter stärker mit dem Quantentopf gekoppelt und es kommt zu einer Elektronenanreicherung innerhalb des Topfes, welche über das selbstkonsistente Potential zur Ausbildung einer langgestreckten Kennlinie führt. Desweiteren erkennt man für die Rückrichtung der Kennlinie eine Hystereseschleife, welche hier nur eine theoretische Grenzkurve darstellt. Es handelt sich hierbei um eine intrinsische Bistabilität aufgrund der Quantentopf-Aufladung. (Zur Diskussion von Meanfield-Näherungen zur Beschreibung von Wechselwirkung in Systemen großer Teilchenzahl siehe Kap. 2.4.). Im anderen Fall ($U < 0$) ist der Kollektor stärker an den Quantentopf gekoppelt. Hier ist der Topf fast vollständig geleert und die Ladungsanhäufung findet nicht statt. Man sieht ferner einen Unterschied von einem Faktor 3 in den Peak-Stromdichten für beide Spannungsrichtungen, welcher auf die stärkere Verkipfung und Absenkung der dickeren, und damit strombestimmenden, Barriere im Fall $U > 0$ zurückzuführen ist.

Weiterhin ist in der Abb. 2.2 im unteren Teil noch die Abhängigkeit der energetischen Lage des Quantentopfes von der anliegenden Spannung U dargestellt. Der Faktor

$$\alpha_{U_0}(U) = \frac{1}{e} \left| \frac{E_{\text{Topf}}(U) - E_{\text{Topf}}(U_0)}{U - U_0} \right| \quad (2.12)$$

ist dabei die relative Verschiebung des Quantentopfes zur Verschiebung des Kollektorpotentials bezüglich einer Referenzspannung U_0 , die in der Abb. 2.2 zu $U_0 = 0$ gewählt wurde. Durch die elektrostatische Potentialverbiegung im Anreicherungsfall kommt es daher zu einer starken

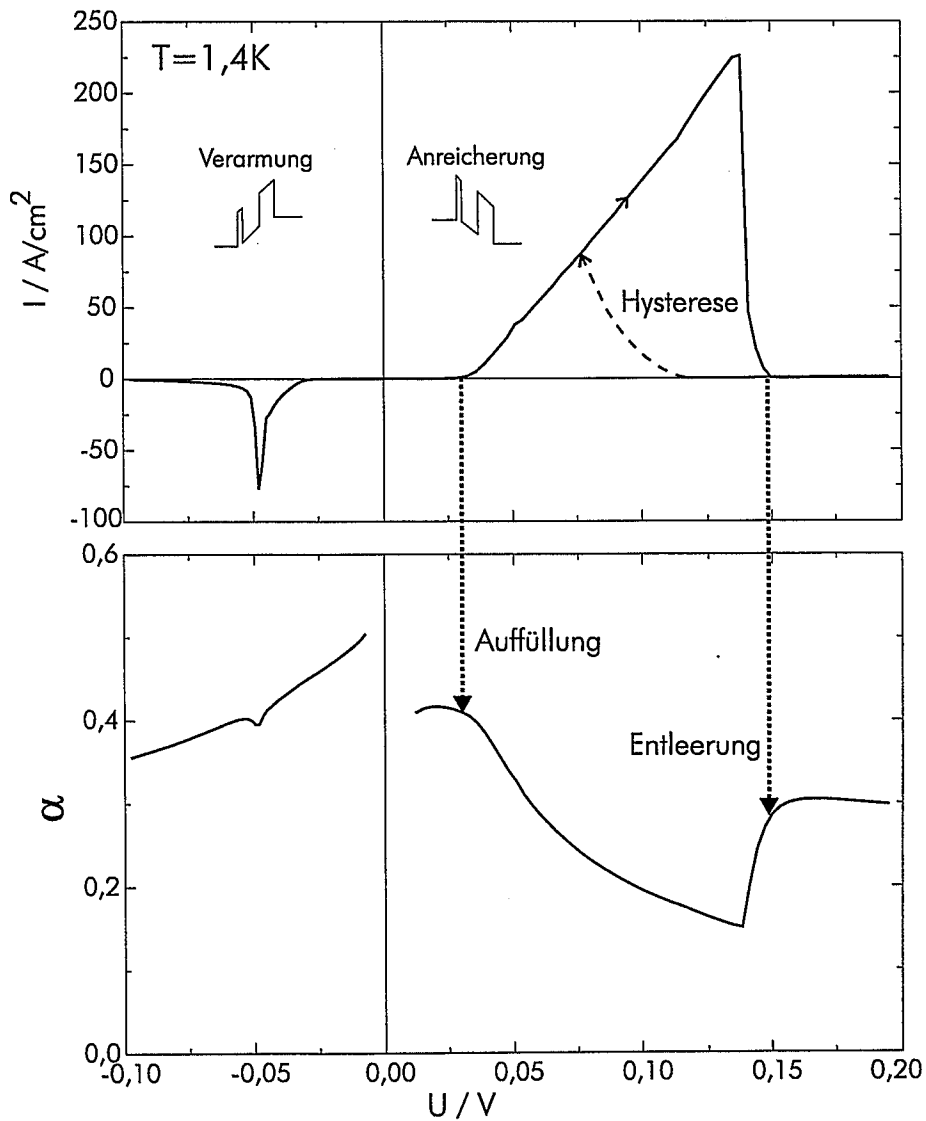


Abb.2.2: Strom-Spannungs-Kennlinie einer stark asymmetrischen, makroskopischen Resonanten Tunneldiode. Man erkennt deutlich die beiden Fälle starker Anreicherung im Quantentopf (positive Spannung) und nahezu leeren Quantentopf (negative Spannung). Der eingezeichnete Verlauf einer Hystereseschleife (gestrichelte Rückrichtung) ist nur die theoretische Grenzkurve. Im unteren Teil ist der Verkipfungsfaktor α für die Quantendot-Quasibindungszustände als Funktion der anliegenden Spannung U dargestellt. $T = 1,4\text{ K}$.

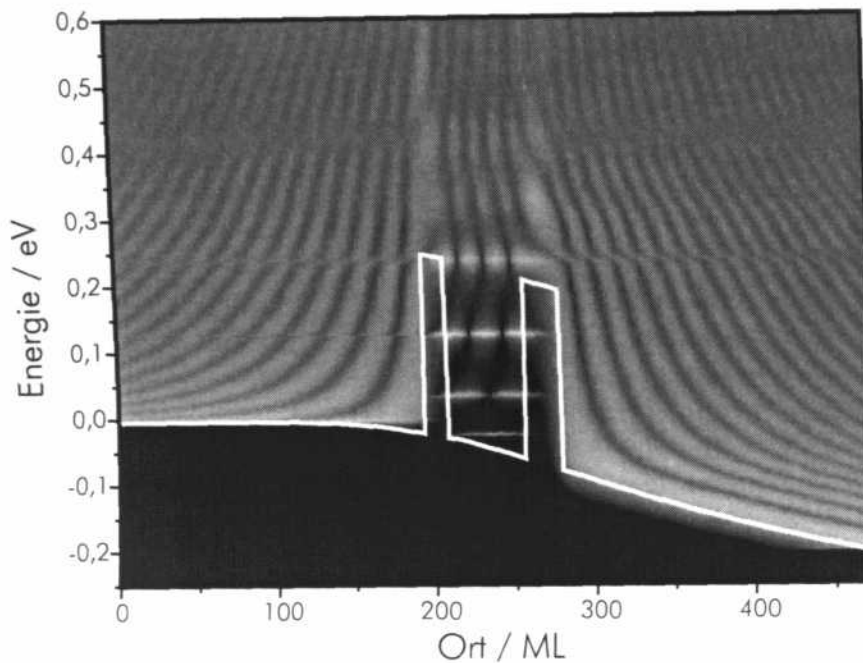


Abb.2.3: Lokale Zustandsdichte (logarithmisch als Helligkeit) in einer Resonanten Tunneldiode bei angelegter äußerer Spannung (selbstkonsistente 1-Band-Simulation). Man erkennt die Quasibindungszustände, den dreieckigen Emitterpotentialtopf und die Verarmungszone des Kollektors. Vor den Barrieren bilden sich stehende Wellen aus. $T=10$ K, $U=0,195$ V.

“Abschirmung” durch die Ladungen im Quantentopf, was sich in einem kleinen Wert von α niederschlägt. Wählt man in diesem Bereich die Referenzspannung U_0 gleich der Einsatzspannung, so ist dort sogar $\alpha \approx 1/20$. Die Entleerung nach der Resonanz führt dann zu einem Wiederanstieg von α .

Die Abb. 2.3 zeigt nun exemplarisch den Verlauf der lokalen Zustandsdichte und den Potentialverlauf für eine anliegende Spannung. Im Quantentopf sind einzelne Quasibindungszustände zu erkennen, wobei sich emitterseitig (links) ein dreiecksförmiger Topf vor der ersten Barriere ausbildet. In der Kollektorzone (rechts) kommt es zu einer Verarmung. Weiterhin erkennt man stehende Wellen innerhalb der beiden Reservoirs. Bei einem chemischen Potential von 4,6 meV (gegen die Bandkante) und dem ersten Quasibindungszustand bei 19,7 meV (gegen Bandkante) ergibt sich eine Einsatzspannung von ≈ 30 mV, was in der Kennlinie (Abb. 2.2) zu sehen ist. Die nächsten Quasibindungszustände liegen bei 71,8 meV, 164,3 meV und 278,1 meV (gegen Bandkante).

Um die Entwicklung des Potentials und der Elektronendichte mit der Kennlinie vergleichen zu

können, ist in der Abb. 2.4 der Verlauf beider Größen für den Fall der Anreicherung ($U > 0$) dargestellt.

Wie anhand der Strom-Spannungs-Kennlinie schon zu erkennen war, kommt es bei steigender Spannung zu einer Befüllung des Quantentopfes. Ebenfalls gut zu sehen ist die Anreicherung von Elektronen im emitterseitigen Dreieckstopf (links), wogegen der Kollektor fast vollständig verarmt ist. Nach dem Abfall des Stromes hinter der Resonanz kommt es zu einer Potential-Umverteilung und der Quantentopf leert sich, wobei sich im Emitter nun die Elektronen vor der Barriere sammeln.

Wesentlich an der Ausbildung der Hystereseschleife ist der Emittertopf beteiligt. Aufgrund der angenommenen konstanten effektiven Masse (lateral und in Transportrichtung) des hier verwendeten 1-Band-Modells kommt es zu einer starken Verkopplung zwischen Emittertopf und Quantentopf (Resonanz für alle lateralen Wellenvektoren gleichzeitig). Dies ist sicherlich unrealistisch. Wie Mehrband-Simulationen zeigen [15], führt die Einbeziehung realistischer Bandstrukturen in vielen Fällen zu einer Reduktion der Hysterese.

2.2.2 Einelektronentunneln

Ausgangspunkt stellt eine Resonante Tunneldiode mit allseitiger (d.h. auch lateraler) Einschränkung der Elektronen im Quantentopf dar. Da die untersuchten Energiebereiche in einem solchen System in der Größenordnung der lateralen Quantisierungsenergie (typisch einige meV) liegen, können wir von nun an das Effektiv-Massenmodell eines einzigen Bandes zu Grunde legen. Im Falle des hier untersuchten AlGaAs/GaAs-Systems hat man es also mit dem untersten Leitungsband in der Nähe des Γ -Punktes zu tun. Tunnelbarrieren werden in diesem Sinne beschrieben durch effektive 1-Band-Größen: Dazu zählt die Barrierendicke, -höhe und die Tunnelmasse. Im Gegensatz zur makroskopischen Tunneldiode, die im Rahmen einer Einteilchen-Theorie behandelt werden kann (s. vorheriger Abschnitt), legen wir nun eine Vielteilchen-Beschreibung der Elektron-Elektron-Wechselwirkung zu Grunde. Die typische Wechselwirkungsenergie zweier Elektronen beträgt hierbei von einem zehntel bis zum zehnfachen der lateralen Quantisierungsenergie, abhängig von der Geometrie. Der betrachtete Spannungsbereich für den Transport liegt in diesem sogenannten “Einelektronentunnelbereich” in derselben Größenordnung wie die auftretenden Quantisierungsenergien. Wie wir sehen werden, treten für dieses Transportregime Vielteilcheneffekte weniger Elektronen (typischerweise 0 bis einige 10) deutlich in Erscheinung. (Der Name “Einelektronentunneln” ist also hier irreführend.) Die historisch ersten Untersuchungen zum Einelektronentunneln in Resonanten Tunneldioden sind in [33] zu finden, dabei bezeichnet der in diesem Zusammenhang benutzte Begriff der “Coulomb-Blockade” anschaulich die Auswirkungen der Elektron-Elektron-Abstoßung, der in den folgenden theoretischen Betrachtungen noch besondere Aufmerksamkeit geschenkt wird.

In diesem Abschnitt wird ein einfaches Vielteilchen-Modell zur Beschreibung des Einelektronentunnelns vorgestellt (wobei die Details in [17, 34] zu finden sind). Es handelt sich um eine Verallgemeinerung der Beschreibung eines Zweielektronensystems basierend auf dem Anderson-Hamiltonoperator (siehe dazu [35, 16]). Basierend auf den nun folgenden Überlegungen wird dann im Kap. 2.3 ein Grenzfall des vorliegenden Systems in seiner elektronischen Struktur im

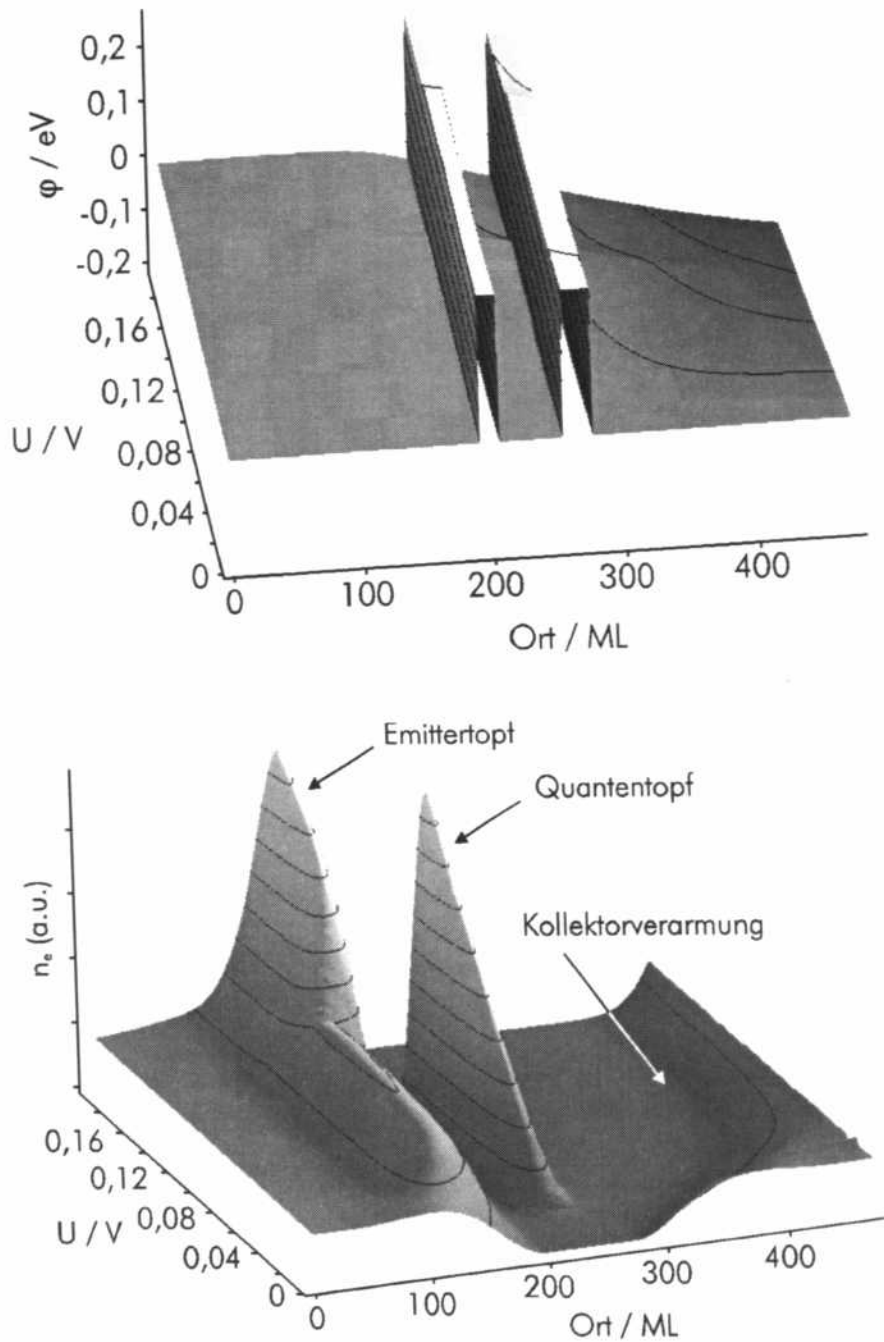


Abb.2.4: Potentielle Energie φ (oben) und Elektronendichte n_e (unten) in einer Resonanten Tunneldiode bei variierender äußerer Spannung U . Die Ortsangaben (in Transportrichtung z) sind in Monolagen. Deutlich zu erkennen ist die Elektronenanreicherung im Emittentialtopf (linke Seite) und die Verarmung im Kollektorgebiet (rechte Seite), weiterhin auch die Befüllung des Quantentopfes und die Entleerung nach der Resonanz. $T = 10$ K.

Detail betrachtet. Dort wird der Schwerpunkt nicht wie hier im Transport liegen, sondern in einer Erweiterung der Vielteilchen-Beschreibung.

Wir unterteilen die Resonante Tunneldiode in drei Gebiete: Den Quantendot (das ist der Potentialtopfbereich) und die beiden Reservoirs L und R (das sind die Zuleitungen links und rechts vom Doppelbarrierensystem). Die laterale Quantisierung sei in allen drei Gebieten identisch, und die zugehörige Quantenzahl n sein eine Erhaltungsgröße, das heißt, wir haben kein Subband-Mixing. Es handelt sich hierbei also um ein sogenanntes "1D-0D-1D" Modell. (In [36] sind demgegenüber die Auswirkungen von Subband-Übergängen näher diskutiert, welche bei variierendem lateralem Potentialverlauf längs der Transportrichtung auftreten. Man spricht in diesem Fall auch von einem "Mode-Mismatch". Alternativ zum im folgenden betrachteten 1D-0D-1D Ansatz wird in [37] unter Benutzung einer räumlich zweidimensionalen Tight-Binding-Basis eine Formulierung ohne Annahme der Subband-Erhaltung dargestellt. Die Behandlung der Elektron-Elektron-Wechselwirkung geschieht dort allerdings, im Gegensatz zu dem in dieser Arbeit vorgestellten Modell, durch einer Näherung zur Wechselwirkungs-Selbstenergie in 1. Ordnung.)

Innerhalb der beiden Reservoirs ist das Elektron in Transportrichtung (d.h. senkrecht zu den Barrieren) frei beweglich. Unter der Annahme eines Nächste-Nachbar-Hoppingmodells für ein Reservoir mit Atomabstand a innerhalb einer Kette von M Atomen (s. Gl. (A18) in [37]) erhält man die Bandstruktur

$$\begin{aligned}\epsilon_{kn\sigma}^L &= \frac{\hbar^2}{m^*a^2}(1 - \cos ka) + E_n + E_\sigma \\ \epsilon_{kn\sigma}^R &= \frac{\hbar^2}{m^*a^2}(1 - \cos ka) + E_n + E_\sigma - eU\end{aligned}\quad (2.13)$$

mit der Wellenzahl k ($0 < k < \frac{\pi}{a}$), effektiver Masse m^* , dem Spinindex σ und der anliegenden Spannung U . Das Energiespektrum aufgrund der lateralen Quantisierung ist dabei E_n .

Für den Quantendot ist in Transportrichtung nur ein Spektrum diskreter Energieniveaus möglich. Da wir davon ausgehen, daß die laterale Einschränkung schwächer sein soll als die Einschränkung zwischen beiden Barrieren, ist die Quantisierungsenergie in Transportrichtung wesentlich größer. Somit reicht es, nur den Grundzustand bezüglich des Potentialtopfes zu betrachten. Das Energiespektrum des Quantendots lautet demnach

$$\epsilon_{n\sigma}^{dot} = E_0^{dot} + E_n + E_\sigma - e\alpha U. \quad (2.14)$$

Der Konversionsfaktor α beschreibt dabei empirisch den Bruchteil der Spannung U , der zwischen Emitter-Reservoir und Quantendot abfällt.

Die Kopplung zwischen den Reservoirs L , R und dem Quantendot wird nun modellmäßig durch ein Transfermatrizelement t_k^L, t_k^R beschrieben. Diese (o.B.d.A. reellen) Matrizelemente folgen aus

$$t_k^{L/R} = \sqrt{\frac{2}{M+1}} \sin(ka) T^{L/R} \quad (2.15)$$

mit dem Hopping-Matrixelement $T^{L/R}$ zwischen dem Quantendot und dem letzten Atom der Zuleitungskette L bzw. R . Der Wurzelterm ist ein Normierungsfaktor mit der Zahl M an Atomen in der Kette. (Es wird später der Limes $M \rightarrow \infty$ betrachtet.) Zur Bestimmung des Matrixelementes $T^{L/R}$ aus dem Imaginärteil $-\Gamma^{L/R}/2$ der Kopplungs-Selbstenergie der Gl.(2.29) siehe [17]. (Eine Berechnung der Tunnelrate durch die Barriere zu L bzw. R hindurch liefert dabei über eine Art Zeit-Energie-Unschärfebeziehung den Wert von $\Gamma^{L/R}$, siehe Gln. (1) und (21) in [38].)

Mit den Elektronen-Vernichtoperatoren a , b und c für L , Quantendot und R läßt sich der Einteilchenanteil des Hamiltonoperators nun schreiben als:

$$\begin{aligned}
 H_0 = & \sum_{kn\sigma} \epsilon_{kn\sigma}^L a_{kn\sigma}^\dagger a_{kn\sigma} \\
 & + \sum_{n\sigma} \epsilon_{n\sigma}^{dot} b_{n\sigma}^\dagger b_{n\sigma} \\
 & + \sum_{kn\sigma} \epsilon_{kn\sigma}^R c_{kn\sigma}^\dagger c_{kn\sigma} \\
 & + \sum_{kn\sigma} t_k^L \left(a_{kn\sigma}^\dagger b_{n\sigma} + b_{n\sigma}^\dagger a_{kn\sigma} \right) \\
 & + \sum_{kn\sigma} t_k^R \left(c_{kn\sigma}^\dagger b_{n\sigma} + b_{n\sigma}^\dagger c_{kn\sigma} \right)
 \end{aligned} \tag{2.16}$$

Man kann hier nun in einem empirischen Ansatz elastische Streuung innerhalb des Systems einbeziehen durch die Kopplung eines dritten fiktiven Reservoirs S an den Quantendot analog zu L und R . Das Kopplungselement T^S führt dann zu einer Lebensdauer-Verringerung durch Streuverbreiterung der Quasibindungszustände im Dot, analog zum Ansatz in [39]. Wie man zeigen kann, führt dies zu einem additiven, dissipativen Term Γ^S in der Selbstenergie in Gl.(2.29). Eine solche Vorgehensweise ist äquivalent zur Einführung eines optischen Potentials oder des Breit-Wigner-Modells in der Eielektronen-Transporttheorie Resonanter Tunneldioden [40, 38, 30].

Als weiterer Term im Hamiltonoperator $H = H_0 + H_{WW}$ soll nun die Elektron-Elektron-Wechselwirkung in Vielteilchen-Form betrachtet werden. Eine ausführliche Diskussion des Wechselwirkungstermes ist im Kap. 2.3 zu finden. Wir wollen hier zunächst die Intradot-Wechselwirkung in einer Hartree-Fock-Vielteilchen-Formulierung betrachten und die klassischen (kapazitiven) Wechselwirkungsterme zwischen Dot und Reservoir pauschal im Faktor α berücksichtigen. (Für ein präziseres Modell siehe Kap. 2.3.) Damit lautet der Wechselwirkungsterm

$$H_{WW} = \frac{1}{2} \sum_{n,m,\sigma,\tau} V_{nm\sigma\tau} b_{n\sigma}^\dagger b_{n\sigma} b_{m\tau}^\dagger b_{m\tau} \tag{2.17}$$

mit den Hartree-Fock-genäherten Coulombmatrixelementen

$$V_{nm\sigma\tau} = C_{n\sigma,m\tau,m\tau,n\sigma} - \delta_{\sigma\tau} C_{n\sigma,m\tau,n\sigma,m\tau}, \tag{2.18}$$

wobei C der Coulombtensor aus Gl.(2.47) ist und $\delta_{\sigma\tau}$ das Kronecker- δ bezeichnet. Zur numerischen Bestimmung der Coulombmatrix benötigt man die Einteilchen-Wellenfunktionen innerhalb des Quantendots. Dazu verweisen wir auf Kap. 2.3 für eine Darstellung der Vorgehensweise. Im einfachsten Fall kann man ein laterales harmonisches Potential annehmen mit einem unendlichen Kastenpotential in Transportrichtung.

Zur Berechnung des Stromes durch die Struktur und der Teilchenzahl im Quantendot benötigen wir zwei Greenfunktionen. Es soll hier nur der zeitlich stationäre Fall interessieren, weshalb wir im folgenden o.B.d.A. $t_1 = t$ und $t_2 = 0$ wählen. Zum einen die retardierte Greenfunktion

$$\langle X(t), Y(0) \rangle^{\text{ret}} := -i \Theta(t) \langle \{X(t), Y(0)\} \rangle \quad (2.19)$$

und eine spezielle Korrelations-Greenfunktion

$$\langle X(t), Y(0) \rangle^- := -i \langle [X(t), Y(0)] \rangle \quad (2.20)$$

mit der Stufenfunktion Θ , dem Kommutator $[,]$ und dem Antikommutator $\{, \}$. Für die Operatoren X und Y im Heisenbergbild werden später Erzeuger- und Vernichterooperatoren eingesetzt. Die Klammern $\langle \dots \rangle$ sollen den Erwartungswert bezüglich der Nichtgleichgewichts-Dichtematrix des Systems bezeichnen. Im folgenden sei

$$\langle X, Y \rangle_\omega := \int dt e^{i\omega t} \langle X(t), Y(0) \rangle \quad (2.21)$$

die komplexe, energieabhängige Fouriertransformierte. (Für die retardierte Funktion muß $\text{Im}(\omega) > 0$ gewählt werden. Wir werden dies im folgenden mit $\omega + i\delta$ bezeichnen. Der Einfachheit halber setzen wir noch $\hbar \equiv 1$.)

Damit erhält man [17] für den stationären Strom

$$I = -\frac{e}{\hbar} \sum_{k,n,\sigma} t_k^L \int d\omega \text{Re} \langle a_{kn\sigma}, b_{n\sigma}^\dagger \rangle_\omega^- \quad (2.22)$$

und die Teilchenzahl im Dot

$$N = \sum_{n\sigma} N_{n\sigma} \quad (2.23)$$

mit den Teilchenzahlen der einzelnen Subbänder

$$N_{n\sigma} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{i}{2\pi} \int d\omega \langle b_{n\sigma}, b_{n\sigma}^\dagger \rangle_\omega^- \right). \quad (2.24)$$

Man beachte, daß der Erwartungswert der Teilchenzahl im allgemeinen nicht ganzzahlig zu sein braucht [17].

Zunächst soll die retardierte Greenfunktion $\langle b_{n\sigma}, b_{n\sigma}^\dagger \rangle^{\text{ret}}$ mit Hilfe der Bewegungsgleichungsmethode (EOM) bestimmt werden. Für die einzelnen Rechenschritte sei auf [17, 34] verwiesen. Ein wesentlicher Aspekt der Rechnung ist die Reduktion der 4-Punkt- und 6-Punkt-Greenfunktionen, die sich aus dem Wechselwirkungsterm H_{WW} ergeben. Hier wird eine Meanfield-Näherung durchgeführt, welche auf eine 2-Punkt- bzw. 4-Punkt-Funktion zurückführt. (Man beachte, daß dies nur für den Fall kleiner Wechselwirkungsenergien im Vergleich zu den lateralen Quantisierungsenergien oder den Fall schwacher Befüllung adäquat ist, für eine verbesserte theoretische Beschreibung der elektronischen Struktur im allgemeinen Fall siehe Kap. 2.3.) Beispielsweise:

$$\langle b_{n\sigma}^\dagger(t) b_{n\sigma}(t) a_{km\tau}(t), b_{m\tau}^\dagger(0) \rangle^{\text{ret}} \simeq N_{n\sigma} \langle a_{km\tau}(t), b_{m\tau}^\dagger(0) \rangle^{\text{ret}}. \quad (2.25)$$

Die retardierte Greenfunktion lautet somit schließlich

$$\langle b_{n\sigma}, b_{n\sigma}^\dagger \rangle_\omega^{\text{ret}} = \frac{K_{n\sigma}(\omega)}{\omega - \epsilon_{n\sigma}^{\text{dot}} - [\Lambda_{n\sigma}^L(\omega) + \Lambda_{n\sigma}^R(\omega)] K_{n\sigma}(\omega) + i\delta} \quad (2.26)$$

mit dem Korrekturfaktor

$$K_{n\sigma}(\omega) = 1 + \sum_{m\tau} V_{mn\tau\sigma} N_{m\tau} \frac{1}{\omega - \left[\epsilon_{n\sigma}^{\text{dot}} + V_{mn\tau\sigma} + \sum_{\substack{m'\tau' \\ (m'\tau') \neq (m\tau)}} V_{m'n'\tau'\sigma} N_{m'\tau'} \right] + i\delta}. \quad (2.27)$$

Die Kopplungs-Selbstenergie $\Lambda^{L/R}$ ergibt sich dabei aus

$$\Lambda_{n\sigma}^{L/R}(\omega) = \sum_k \frac{|t_k^{L/R}|^2}{\omega - \epsilon_{kn\sigma}^{L/R} + i\delta} \quad (2.28)$$

schließlich zu

$$\begin{aligned} \Lambda_{n\sigma}^{L/R}(\omega) &= \Delta E_{n\sigma}^{L/R}(\omega) - \frac{i}{2} \Gamma_{n\sigma}^{L/R}(\omega) \\ \text{mit} \\ \Delta E_{n\sigma}^{L/R}(\omega) &= \frac{|T^{L/R}|^2}{2W^2} \left[\Delta\omega - \Theta(|\Delta\omega| - |2W|) \text{sign}(\Delta\omega) \sqrt{\Delta\omega^2 - (2W)^2} \right] \\ \Gamma_{n\sigma}^{L/R}(\omega) &= \frac{|T^{L/R}|^2}{W^2} \Theta(|2W| - |\Delta\omega|) \sqrt{(2W)^2 - \Delta\omega^2} \\ \Delta\omega &:= \omega - \epsilon_{n\sigma}^{L/R}(k=0) - 2W \end{aligned} \quad (2.29)$$

wobei $W = \hbar^2/(2m^*a^2)$. Die Ausführung der Summen (über M k -Werte) in der Selbstenergie geschieht durch Übergang zum Integral mit $M \rightarrow \infty$.

Man beachte, daß in der retardierten Greenfunktion die zu bestimmenden Teilchenzahlen $N_{m\tau}$ eingehen. Dies wird später zu einem iterativen Lösungsverfahren führen. Mathematisch kommt die Wechselwirkung hier also in Form zusätzlicher, höherenergetischer Terme in der Greenfunktion (s. Gl.(2.27)) zum Ausdruck [17] und nicht einfach als kapazitive Verschiebung der Einteilchen-Niveaus.

Unter Zuhilfenahme einer Dyson-Gleichung [17] lassen sich die Korrelations-Greenfunktionen ausdrücken durch die retardierte Greenfunktion $\langle b_{n\sigma}, b_{n\sigma}^\dagger \rangle_\omega^{\text{ret}}$ und die Gleichgewichts-Greenfunktionen innerhalb der Reservoirs. (Wie im ersten Abschnitt von Kap. 2.1 erläutert, seien die Reservoirs jeweils für sich im Gleichgewicht zu eigenen chemischen Potentialen bei anliegender Spannung U .) Für die Teilchenzahl erhält man somit

$$N = \sum_{n,\sigma} \int d\omega F_{n\sigma}(\omega) \rho_{n\sigma}(\omega) \quad (2.30)$$

mit der lokalen Zustandsdichte $\rho_{n\sigma}$ im Dot

$$\rho_{n\sigma}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle b_{n\sigma}, b_{n\sigma}^\dagger \rangle_\omega^{\text{ret}} \quad (2.31)$$

und der Nichtgleichgewichts-Verteilung

$$F_{n\sigma}(\omega) = \frac{\Gamma_{n\sigma}^L(\omega) f_L(\omega) + \Gamma_{n\sigma}^R(\omega) f_R(\omega)}{\Gamma_{n\sigma}^L(\omega) + \Gamma_{n\sigma}^R(\omega)} \quad (2.32)$$

wobei f_L und f_R die Fermiverteilungen des linken und rechten Reservoirs L und R bezeichnen.

Man erhält dann schließlich für den Strom

$$I = \frac{e}{h} \sum_{n,\sigma} \int d\omega P_{n\sigma}(\omega) [f_L(\omega) - f_R(\omega)] \quad (2.33)$$

mit der Transmissionswahrscheinlichkeit

$$P_{n\sigma} = -2 \frac{\Gamma_{n\sigma}^L(\omega) \Gamma_{n\sigma}^R(\omega)}{\Gamma_{n\sigma}^L(\omega) + \Gamma_{n\sigma}^R(\omega)} \text{Im} \langle b_{n\sigma}, b_{n\sigma}^\dagger \rangle_\omega^{\text{ret}}. \quad (2.34)$$

Numerisch werden die einzelnen Teilchzahlen $N_{n\sigma}$ iterativ bestimmt, als Startwerte können dabei z.B. Gleichgewichtsbesetzungen angenommen werden.

Beispiel

In der Abb. 2.5 ist nun eine mit obigem Modell simulierte Kennlinie der Elektronenzahl und des Stromes als Funktion der anliegenden Spannung dargestellt [41]. Die Parameter zur Barrierenstruktur wurden dabei dem experimentellen Teil (s. Kap. 3) entnommen, wie sie im Beispiel

in Kap. 2.2.1 angegeben sind. Für den Bindungszustand im Quantentopf erhält man aus der Zustandsdichte der Simulation des Kap. 2.2.1 $E_0^{dot}=19,7$ meV (s. Abb. 2.3). Die Barrieren sind dabei stark asymmetrisch in ihren Dicken mit $\Gamma_L = 42 \mu\text{eV}$ und $\Gamma_R = 1,8 \mu\text{eV}$ gewählt, was nach [38] über die Tunnelrate wie oben erläutert bestimmt wurde aus einer effektiven Barrierenhöhe von $260 \text{ meV} \pm 10\%$ und einer Tunnelmasse von $0,074 m_e \pm 10\%$ [32]. Für die lateralen Bindungszustände wurde exemplarisch ein konstanter Niveauabstand von 2 meV angenommen bei einer Wechselwirkungsenergie von 1 meV. (Dazu siehe die Bemerkung zur Meanfield-Näherung für Greenfunktionen höherer Ordnung.) Weiterhin wurde $\alpha = 0,5$ und $\mu_L = 11$ meV gesetzt.

Man erkennt deutlich die starke Barrieren-Asymmetrie in den Kennlinien, die sich in zwei Transportbereichen äußert. Zum einen der Fall positiver Spannungen, bei dem die Emitterbarriere weniger transparent ist als die Kollektorbarriere. Die Elektronenzahl ist in diesem Regime wesentlich kleiner als eins und es kommt zu keiner Elektron-Elektron-Abstoßung im Quantentopf. In der Strom-Spannungs-Kennlinie zeigen sich an den Spannungspositionen, die energetisch den Einteilchenniveaus entsprechen, Stromerhöhungen. Zum anderen ist im Fall negativer Spannungen die Emitterbarriere transparenter als die Kollektorbarriere. Es kommt nun zu einer Akkumulation von Elektronen im Quantentopf mit sukzessiver ganzzahliger Auffüllung. Erst bei höheren Spannungen weicht die Elektronenzahl zunehmend von einer ganzen Zahl ab, da dort die Asymmetrie Γ_L/Γ_R durch Barrierenverkipfung abnimmt. Die spannungsmäßigen Positionen der sich ergebenden Stromstufen sind nun durch die laterale Quantisierungsenergie zuzüglich der Wechselwirkungsenergie zu den bereits im Topf vorhandenen Elektronen bestimmt. Dieses "verzögerte" Auffüllen des Quantentopfes wird auch als "Coulomb-Blockade" bezeichnet. Die klassische Streckung der Kennlinie durch die Elektron-Elektron-Wechselwirkung (siehe Beispiel im Kap. 2.2.1) kommt nun in Form von wechselwirkungsverbreiterten Stufen zum Ausdruck.

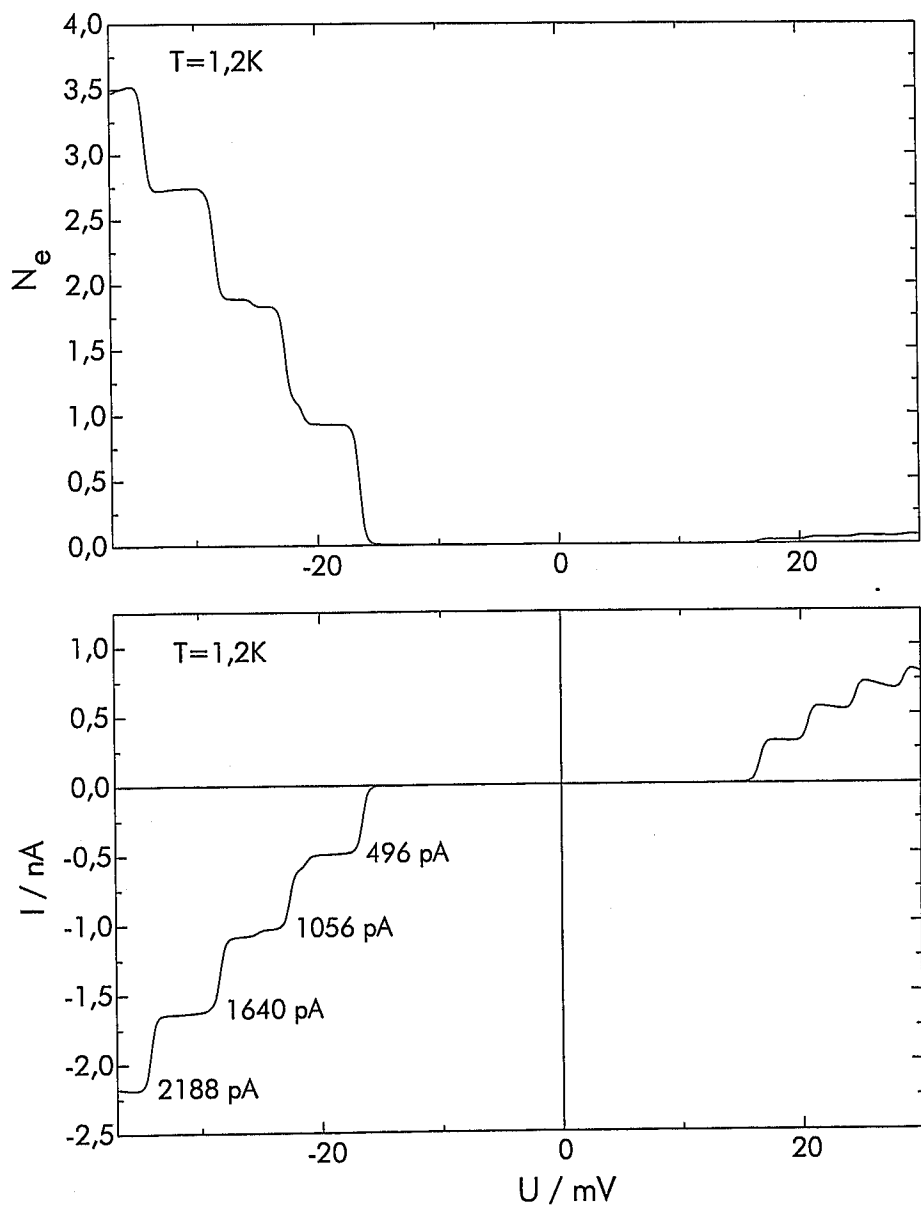


Abb.2.5: Simulierte Elektronenzahl- und Strom-Spannungs-Kennlinien im Einelektronenbereich.

2.2.3 Gekoppelte Strukturen

Ein wichtiges System, das durch die Methode der Greenfunktionen in einer Tight-Binding-Basis empirisch beschrieben werden kann, stellt die Kopplung zweier zweidimensionaler Elektronengase (2DEG) durch eine Tunnelbarriere dar. Jedes einzelne 2DEG besitzt dabei in einer festen Raumrichtung ein bindendes Potential. Realisiert werden kann ein derartiges System zum Beispiel in der Form eines Doppeltopfes in einer Halbleiterheterostruktur [42, 43]. Anhand dieses Systems werden wir zeigen, welche Rolle die Dissipation für den Transport in niedrigdimensionalen Systemen spielt.

Ein 2DEG besitzt noch zwei kontinuierliche Freiheitsgrade, so daß sich die Einteilchen-Energien in den 2DEGs (L =links, R =rechts) schreiben lassen als

$$\begin{aligned} E_{j,\vec{k}_{\parallel}}^L &= \epsilon_j^L + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} \\ E_{j,\vec{k}_{\parallel}}^R &= \epsilon_j^R + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} - eU \end{aligned} \quad (2.35)$$

wobei j den diskreten Subbandindex und $\hbar\vec{k}_{\parallel}$ den Impuls parallel zum 2DEG bezeichnet. U ist eine anliegende Spannung. Wir wollen im folgenden annehmen, daß nur der Leitungsband Γ -Punkt zu berücksichtigen ist und, daß die effektiven Massen in beiden 2DEGs isotrop und identisch sind. (Das ist sicher gerechtfertigt im Falle der III/V-Halbleiterlegierungen wie AlGaAs/GaAs oder InGaAs/InAlAs/InP.)

Das Besondere an diesem System aus gekoppelten 2DEGs ist, daß ein Teilchentransport lokalisierter Zustände von einem Potentialtopf in den anderen stattfinden kann. Wenn man die Erhaltung des lateralen Impulses $\hbar\vec{k}_{\parallel}$ annimmt, so findet ein Übergang von einem diskreten Niveau j_1 im Topf L zu einem diskreten Niveau j_2 im Topf R statt und die Parallelkomponente kann absepariert werden, so daß das Problem eindimensional wird. Im Gegensatz zur Resonanten Tunneldiode (s.o.) gibt es hier also keine freien Reservoirs, aus denen, anschaulich gesprochen, propagierende Elektronen in das System injiziert werden. Man muß hier einen mathematischen Ansatz finden, der zum einen die Kopplung der beiden 2DEGs beschreibt, zum anderen aber auch die Rolle jedes einzelnen Topfes als "Reservoir" berücksichtigt.

Der Ansatz einer Störungsrechnung 1. Ordnung, mit dem Absolutquadrat des Kopplungs-Matrixelementes als Größe für die Übergangsrate zwischen den ungestörten Zustandsdichten der beiden Töpfe, bietet sich als einfache Näherung an. Eine solche Vorgehensweise berücksichtigt jedoch nicht den Einfluß der beiden Töpfe aufeinander. Wir wollen im folgenden zeigen, wie die Einbeziehung dieses Aspektes im Rahmen eines einfachen Ansatzes möglich ist.

Bei der Betrachtung eines Potentialtopfes als Reservoir bietet sich folgende Überlegung an: Damit im Falle eines Teilchentransportes, d.h. Stromflusses, ein kontinuierlicher "Nachschub" an Elektronen gewährleistet ist, betrachte man den Potentialtopf als Ende einer schwach gekoppelten, unendlichen Kette, d.h. eines freien, wenn auch fiktiven, Reservoirs. Diese zusätzliche leichte Ankopplung stellt propagierende Elektronenzustände in das Doppeltopfsystem hinein zur

Verfügung. (Sicherlich wird ein solcher “Nachschub” von den parallelen Raumrichtungen vom 2DEG aus stattfinden.)

$$\cdots \odot \xleftrightarrow{W} \odot \xleftrightarrow{W} \odot \xleftrightarrow{L} \xleftrightarrow{t} \otimes_R \quad (2.36)$$

Die Kreise $\odot$ und $\otimes$ stellen die beiden Töpfe dar, die über die Tunnelbarriere (Matrizelement t) gekoppelt sind. Bei den links weitergehenden Töpfen $\odot$ handelt es sich um die schwach gekoppelte (Matrizelement W) Kette von Töpfen zur Darstellung eines freien Reservoirs. Als Senke für Elektronen läßt sich analog an das zweite 2DEG rechts ebenfalls ein solches fiktives Reservoir betrachten. Der Einfachheit halber wollen wir uns hier auf ein einziges Reservoir beschränken, die Verallgemeinerung ist einfach durchzuführen.

Es gibt jedoch einen weiteren gravierenden Grund, eine solche Ankopplung an ein System mit kontinuierlichem Freiheitsgrad (“freies” Reservoir) anzusetzen: Durch die Berücksichtigung der Kopplung beider Potentialtöpfe im Rahmen der im folgenden dargestellten mathematischen Beschreibung führt dies lediglich zu einer Aufspaltung der Energieniveaus der beiden Töpfe (analog zum gekoppelten Pendel der klassischen Mechanik). Diese Aufspaltung der Niveaus ist nichts anderes als der Realteil der Kopplungs-Selbstenergie. Allerdings kommt kein Elektronentransport zwischen den Potentialtöpfen zustande, es bildet sich lediglich ein Zustand periodisch oszillierender Elektronendichte zwischen beiden Töpfen aus. Von diesem Gesichtspunkt aus stellt das fiktive freie Reservoir eine Dämpfung und damit die nötige Dissipation zur Verfügung. Interessanterweise kommt dies in der Transporttheorie der Resonanten Tunneldiode (s.o.) in Form von verallgemeinerten Randbedingungen für die Teilchenreservoir zum Ausdruck. Diese Selbstenergie-Randbedingung kann hier im Falle der gekoppelten 2DEGs wiedererkannt werden, und zwar in Form des Imaginärteils der Kopplungs-Selbstenergie innerhalb des fiktiven freien Reservoirs. (Man beachte, daß es sich hier nicht um die Kopplung der beiden Töpfe, sondern um die Kopplung innerhalb der fiktiven Kette handelt.) Um dies quantitativ zu fassen, betrachten wir nun kurz die retardierte Greenfunktion g_R^{ret} ($\delta > 0$) des rechten Potentialtopfes R :

$$g_R^{\text{ret}}(\omega + i\delta) = \frac{1}{\omega - \epsilon^R + eU - \Delta E(\omega) + \frac{i}{2}\Gamma(\omega) + i\delta} \quad (2.37)$$

wobei $\epsilon^R - eU$ die Energie des betrachteten rechten Bindungszustandes bei der Spannung U (es wurde o.B.d.A. $\epsilon_L \equiv 0$ gesetzt) und $\Delta E - \frac{i}{2}\Gamma$ die Kopplungs-Selbstenergie zum linken Topf ist (siehe Gl.(2.29) und [17]):

$$\begin{aligned} \Delta E(\omega) &= \frac{t^2}{2W^2} \left[\omega - \Theta(|\omega| - |2W|) \text{sign}(\omega) \sqrt{\omega^2 - (2W)^2} \right] \\ \Gamma(\omega) &= \frac{t^2}{W^2} \Theta(|2W| - |\omega|) \sqrt{(2W)^2 - \omega^2}. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Dabei ist t das reelle Nichtdiagonal-Matrizelement im Hamiltonoperator (“Transfermatrizelement” zwischen beiden Töpfen, bei dem der eine Topf als Störung des anderen betrachtet wird

beim Übergang zwischen Wellenfunktionen ψ_L nach ψ_R) und W die dagegen schwache Kopplung innerhalb der fiktiven Kette zum linken Topf ($4W$ ist dann sozusagen die Bandbreite). Θ bezeichnet die Stufenfunktion (0 für Argument < 0 und 1 für Argument > 0).

Damit erhält man einen einfachen Ausdruck zur numerischen Bestimmung der Strom-Spannung-Kennlinien für den Elektronentransport (s. [17]) zwischen den beiden 2DEGs bei Betrachtung eines Überganges:

$$I_{LR} = \frac{e}{\hbar} \sum_{\vec{k}_{\parallel}, \text{spin}} \int d\omega (f_L(\omega + E_{\parallel}) - f_R(\omega + E_{\parallel})) \Gamma(\omega) \text{DOS}_R(\omega) \quad (2.39)$$

mit der Fermiverteilung f und der lokalen Zustandsdichte im Topf R

$$\text{DOS}_R = -\frac{1}{\pi} \text{Im } g_R^{\text{ret}}. \quad (2.40)$$

Die Summe über den abseparierten parallelen Freiheitsgrad $\vec{k}_{\parallel}$ mit der Differenz der Fermifunktionen $f_L - f_R$ als Summand läßt sich analytisch ausführen und liefert die sogenannte Supplyfunction [44, 30, 10].

Da die Funktion Γ an der Stelle $\omega = 0$ eine scharfe Resonanz (mit einer typischen Breite von $2W$) aufweist und ebenso die Zustandsdichte DOS_R an der Stelle $\epsilon_R - eU$, ergibt sich ein Peak im Strom als Funktion der Potentialdifferenz U zwischen beiden Töpfen jedesmal, wenn zwei Energieniveaus der ungestörten Töpfe energetisch in Resonanz geraten. Man beachte, daß ein solches Verhalten von Resonantem Transport hier, im Gegensatz zur Resonanten Tunneldiode, nicht aufgrund von Transmissionsresonanzen zustande kommt, sondern die lokalen Zustandsdichten widerspiegelt. Qualitativ entspricht dies interessanterweise aber genau dem Verhalten der 1. Ordnung Störungsrechnung ohne Berücksichtigung der Kopplung zwischen den beiden 2DEGs.

Die Betrachtung der beiden Potentialtöpfe mit einer dissipativen Komponente, die wir hier als freie Reservoirs mathematisch eingeführt haben als empirischen Parameter W , hat eine physikalische Motivation in Form einer endlichen Lebensdauer verbreiterung der im Potentialtopf gebundenen Zustände.

Beispiel: 2D-2D-HEMT

Obige Überlegungen zum System von gekoppelten 2DEGs findet eine Anwendung in der theoretischen Beschreibung eines neuartigen Transistorkonzepts. In einem klassischen HEMT (high-electron-mobility-transistor) dient ein 2DEG als Kanal eines Feldeffekt-Transistors [45]. Betrachtet man anstelle dessen als Kanal ein Doppel-2DEG, wie oben untersucht, so erhält man zusätzlich zum Transport innerhalb eines jeden 2DEGs ($\vec{k}_{\parallel}$) an den Orten einen Tunnelstrom (eine Art "Bypass") zwischen den beiden 2DEGs, wo die oben hergeleitete Tunnelkennlinie eine scharfe Resonanz aufweist für die lokal zwischen den beiden 2DEGs abfallende Spannung $U(\vec{x}_{\parallel} \equiv (x, y))$. Dieser Vorstellung liegt eine semiklassische Betrachtungsweise des Systems zu Grunde: Senkrecht

zu beiden 2DEGs betrachten wir lokal die oben aufgeführte quantenmechanische Beschreibungsweise und innerhalb eines jeden 2DEGs eine klassische Formulierung (Boltzmann-Gleichung) unter Zuhilfenahme einer differentiellen Ersatzschaltung.

Wir wollen uns im folgenden auf eine eindimensionale Betrachtung beschränken, bei der alle Größen o.B.d.A. von x nur abhängen und die y -Richtung homogen ist. Seien $U^L(x)$ und $U^R(x)$ die lokalen Potentiale innerhalb der beiden 2DEGs (L und R). Analog sollen $I^L(x)$, $I^R(x)$ die lokalen Ströme innerhalb der 2DEGs darstellen. Offensichtlich stellt am Ort x die Änderung

$$dI(x) := dI^R(x) = -dI^L(x) \quad (2.41)$$

gerade den differentiellen Tunnelstromanteil der Kennlinie j_{LR} (I_{LR} hier ausgedrückt pro Länge)

$$dI(x) = j_{LR} (U^L(x) - U^R(x)) dx \quad (2.42)$$

dar (Kontinuitätsgleichung für den Strom). Für die lateralen Spannungsabfälle im Kanal gilt weiterhin:

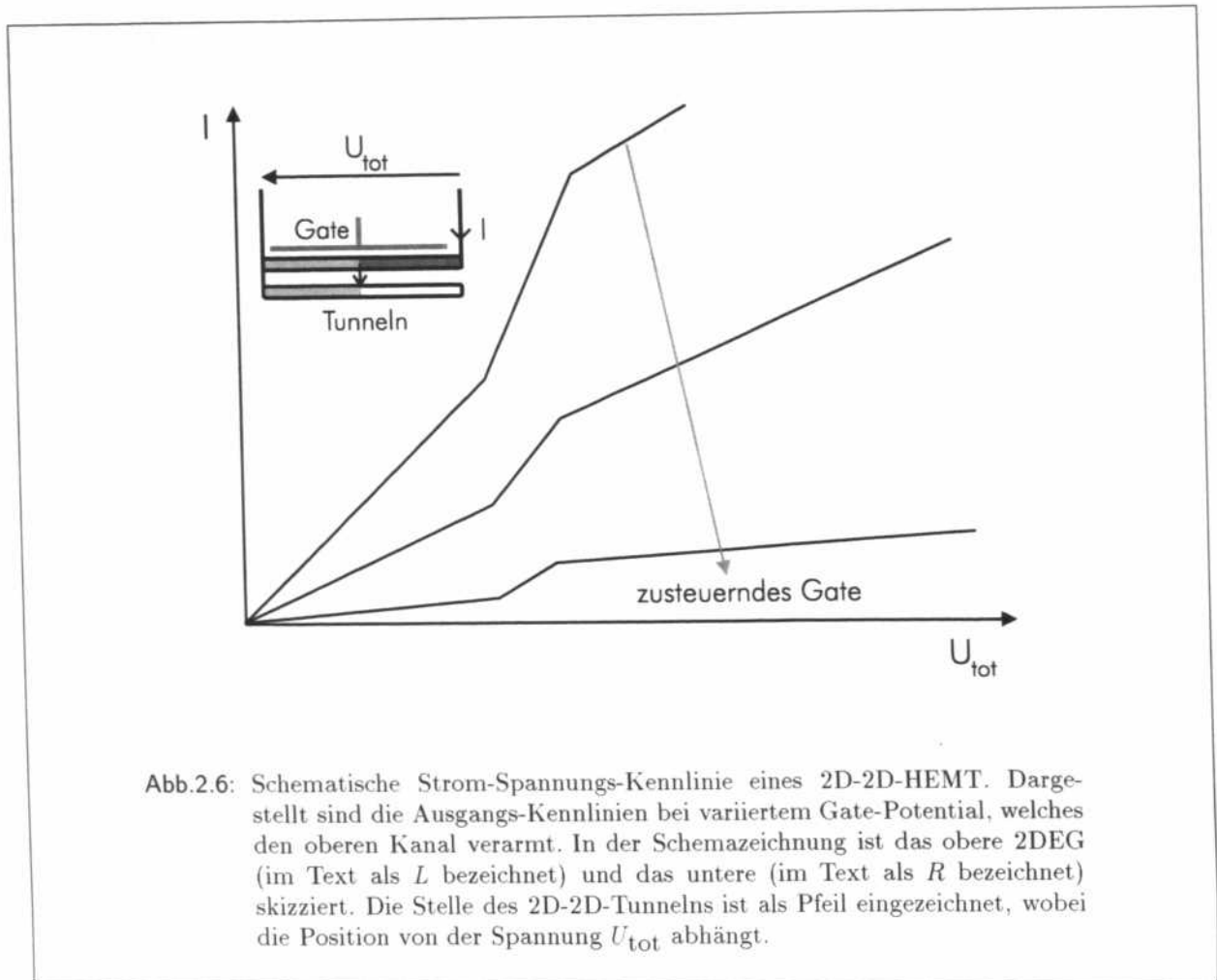
$$\begin{aligned} dU^L(x) &= -I^L(x)r^L dx \\ dU^R(x) &= -I^R(x)r^R dx \end{aligned} \quad (2.43)$$

mit r als Kanalwiderstand pro Länge. Insgesamt erhält man dann ein Differentialgleichungssystem

$$\begin{aligned} \frac{dI^L}{dx} &= -j_{LR}(U^L - U^R) & \frac{dI^R}{dx} &= j_{LR}(U^L - U^R) \\ \frac{dU^L}{dx} &= -r^L I^L & \frac{dU^R}{dx} &= -r^R I^R \end{aligned} \quad (2.44)$$

Man beachte die Nichtlinearität durch die Tunnelkennlinie j_{LR} . Zur numerischen Lösung eines solchen Systems kann man näherungsweise die Tunnelkennlinie ersetzen durch eine Kastenfunktion ($\neq 0$ nur innerhalb eines schmalen Spannungsintervalls). Unter der Randbedingung, daß beide 2DEGs an einem Ende des Kanals ($x = 0$) kurzgeschlossen sind ($U^L(0) = U^R(0) = 0$) und weiterhin am anderen Ende ($x = l$) nur das eine 2DEG L ankontaktiert ist ($I^R(l) = 0$, $U^L(l) = U_{\text{tot}}$), kann man das Differentialgleichungssystem für $U := U^L - U^R$ stückweise durch einen quadratischen Polynomansatz (stetig differenzierbar an den Anschlußstellen) lösen. Die offenen Koeffizienten der Lösungsfunktion können dabei mittels eines Newtonverfahrens zur Erreichung der Bedingungen $I^R(l) = 0$ und $U^L(l) = U_{\text{tot}}$ iterativ bestimmt werden.

Ein typisches Ausgangs-Kennlinienfeld (s. Abb. 2.6) eines solchen Tunnel-HEMTs weist einen linearen Stromanstieg von $U_{\text{tot}} = 0$ an auf. An der Resonanzspannung zwischen beiden 2DEGs ergibt sich dann ein steiler Stromanstieg, gefolgt von einem asymptotisch linearen Anstieg des Stromes für große Spannungen. Der erste lineare Teil entspricht dem Stromfluß allein durch das



L -2DEG. Im zweiten linearen Teil fließt immer ein Teil des Gesamtstromes über das zweite R -2DEG parallel zu L . Die örtliche Lage des Tunnelstrombereichs ist stark lokalisiert und wandert bei wachsender äußerer Spannung U_{tot} vom freien Ende zum kurzgeschlossenen Ende ($x = 0$) des Kanals, daher die asymptotische Rückkehr zum linearen Verlauf der Kennlinie. Der Einfluß einer Gate-Elektrode über den Kanälen kann in einfacher Weise als Modulation der Kanalwiderstände r^L und r^R beschrieben werden, wobei der untere Kanal R vom Gate wegen der Abschirmung durch das zwischenliegende obere 2DEG L kaum beeinflusst wird. (Für eine ausführliche Diskussion der Kennlinien verweisen wir hier auf [43], dessen Simulationen auf dem hier entwickelten Modell und numerischen Verfahren basieren.)

Die in diesem Abschnitt vorgestellten Modelle zum Tunneln zwischen zwei gekoppelten 2DEGs passen qualitativ und quantitativ (unter geeigneter Wahl der freien empirischen Parameter) zu den experimentellen Ergebnissen in [42, 43]. Sowohl die Tunnelkennlinien, die sich durch Stromresonanzen auszeichnen, als auch die Stufen-Kennlinienfelder der Transistoren können mit dem hier entwickelten Modell zwanglos erklärt werden.

2.3 Künstliche Atome

Die vorherigen Abschnitte lagen in ihrem Schwerpunkt auf der Beschreibung des Transportes in Tunnelstrukturen. In diesem Abschnitt soll demgegenüber das Hauptaugenmerk auf die elektronische Struktur innerhalb eines Quantendots gerichtet sein. Wir wollen die Ergebnisse des Kap. 2.2.2 zum Transport durch solche Strukturen hindurch als Basis für eine verbesserte Beschreibung der Wechselwirkung des Elektronensystems innerhalb des Quantendots unter gewissen Bedingungen nehmen. Das im folgenden präsentierte Modell formuliert den Zustand auf der Grundlage der Dichtematrix ρ eines projizierten Quantendotsystems allein. (Ansätze, die auf einer Hartree-Fock-Näherung des gleichen Systems beruhen, sind beispielsweise in [46, 47] zu finden.)

2.3.1 Dichtematrix-Näherung

Zur vollständigen Beschreibung des Zustandes beim Transportes innerhalb des gekoppelten Systems aus Quantendot und zwei Elektronenreservoirien wird die Gesamtdichtematrix ρ benötigt (s. Kap. 2.1). Wir beschäftigen uns allerdings in den folgenden Betrachtungen mit der projizierten Dichtematrix $\rho^{dot} \equiv \text{Tr}_{dot}(\rho)$ des Quantendots. Dies schränkt natürlich auch die Menge der betrachteten Observablen auf solche ein, die allein Größen innerhalb des Quantendots beschreiben. Bei der Betrachtung der Teilchenzahl Gl.(2.30) mit der Nichtgleichgewichtsverteilung Gl.(2.32) und des Stromes Gl.(2.33) erkennt man mathematisch die Grundidee zu einer wesentlichen Vereinfachung für den Fall stark asymmetrischer Barrieren. Das sind also die beiden Fälle $\Gamma^L/\Gamma^R \rightarrow 0$ und $\Gamma^R/\Gamma^L \rightarrow 0$. Man kann diese Grenzfälle physikalisch interpretieren als einen Quantendot, der zum stärker gekoppelten Reservoir (Γ größer) im thermodynamischen Gleichgewicht ρ_0^{dot} steht. Das zweite Reservoir stellt in diesem Sinne dann eine schwach gekoppelte "Meßsonde" zur transportmäßigen "Beobachtung" des Systems dar. (Man beachte die Wortwahl in Analogie zur Formulierung eines Experimentes in der Quantentheorie, bei dem der Beobachter beim Meßvorgang im System involviert ist.) Durch diese Meßsonde wird sich der Quantendot dann jedoch in einem leicht vom Gleichgewicht abweichenden Zustand $\rho^{dot} = \rho_0^{dot} + \delta\rho^{dot}$ befinden. Offensichtlich ist diese Abweichung $\delta\rho^{dot}$ mathematisch nichts anderes als die Auswirkung des durch den Quantendot fließenden Stromes. Wir werden im folgenden einen gemischten Gleichgewichtsansatz für ρ^{dot} machen [18], der dann offenbar nur für spezielle Observablen geeignet ist:

$$\rho^{dot} \simeq \alpha_L \rho_{L0}^{dot} + \alpha_R \rho_{R0}^{dot} \quad \text{mit} \quad \alpha_X = \frac{\Gamma_X}{\Gamma_L + \Gamma_R}, \quad (2.45)$$

wobei ρ_{X0}^{dot} die Gleichgewichts-Dichtematrix des Quantendots bezüglich des Reservoirs $X = L, R$ ist. Als Kriterium darf der Erwartungswert einer solchen Observablen in 1. Ordnung nicht von $\delta\rho^{dot}$ abhängen. Die Teilchenzahl, Teilchendichte und der Gesamtspin beispielsweise gehören zu dieser Klasse von Observablen, die wir im folgenden untersuchen werden. (Wir wollen bei den weiteren Betrachtungen kurz ρ anstelle von ρ^{dot} schreiben.)

In Abhängigkeit der Polarität der anliegenden äußeren Spannung U kann man demnach zwei Fälle unterscheiden:

- Anreicherung:

Das Emitter-Reservoir (energetisch höher) ist stärker an den Dot gekoppelt. Für den in dieser Arbeit untersuchten Fall eines Quantendots mit lateralen Abmessungen, für die die Wechselwirkungsenergie-Terme größer sind als die laterale Quantisierungsenergie (siehe Kap. 2.3.6), sind in einem Vielteilchenzustand immer eine größere Zahl an Subbändern beteiligt. Unter der Voraussetzung eines in guter Näherung konstanten Kopplungs-Matrixelementes t_k für alle Subbänder, erkennt man aus Gl.(2.30), Gl.(2.32) und Gl.(2.33), daß in erster Näherung $I \propto N$ gilt. Diese Überlegung gilt ebenso für den Fall von Subband-Mixing und anderer Dimensionalität der Reservoirs (d.h. xD-0D-yD Tunneln). Die Elektron-Elektron-Wechselwirkung muß in diesem Fall offenbar vollständig in die Berechnung der Dichtematrix einbezogen werden. Insgesamt erhält man ein sukzessives, ganzzahliges Ansteigen der Dot-Elektronenzahl und dementsprechend eine stufenförmige Strom-Spannungs-Kennlinie mit annähernd konstanten Stromstufen. (Im experimentellen Kap. 5 werden wir genau dieses Verhalten wiedererkennen können.)

- Verarmung:

Das Kollektor-Reservoir (energetisch tiefer) ist stärker an den Dot gekoppelt. Die Teilchenzahl im Quantendot ist nun $N \simeq 0$. Man kann hier von einer vernachlässigbaren Wechselwirkung ausgehen und erhält somit eine Einteilchenbetrachtung des Quantendots. Der Teilchenstrom ergibt sich dann aus den lokalen Zustandsdichten der Reservoirs, der Einteilchenzustandsdichte im Quantendot und den Transfermatrixelementen der einzelnen Subbänder. Falls Subbandmixing vorhanden ist, bedeutet dies eine Vielzahl von Transportmöglichkeiten durch ein und denselben Quantendot-Einteilchenzustand, insbesondere auch durch Moden, die im Reservoir keine korrespondierenden besetzten Moden besitzen [36]. Die Strom-Spannungskennlinie wird jetzt nicht mehr aus Stufen gleichbleibender Höhe bestehen. Das einfache Modell aus Kap. 2.2.2 zeigt die Entstehung einer peakartigen Struktur im Strom für jede einzelne Transport-Mode, wobei die Stromstärken jeweils unterschiedlich ausfallen können.

Falls die Temperatur-Aufweichung $k_B T$ deutlich kleiner ist als die Kopplungs-Selbstenergie (als Maß dient hier der Imaginärteil $-\Gamma/2$) zu den Reservoirs, muß in das Modell eine dissipative Komponente noch zusätzlich eingeführt werden. Im einfachsten Fall kann dies im Rahmen eines Breit-Wigner-Ansatzes durch eine Faltung der Kennlinien mit einer Lorentz-Kurve geschehen [40, 38, 30]. Die Berücksichtigung elastischer Streuung geschieht in derselben Weise. Zur Beschreibung dieser typisch "offenen" Eigenschaft des Systems ist der Gleichgewichts-Dichtematrixansatz nicht geeignet. (Bei der Betrachtung eines imaginären Potentialbeitrages $-\Gamma/2$ im Einteilchenterm zum Hamiltonoperator wird letzterer jedoch nicht mehr selbstadjungiert bleiben. Einen solchen Ansatz wollen wir hier nicht weiterverfolgen.)

2.3.2 Modell-Hamiltonoperator

Für die theoretischen Untersuchungen zur elektronischen Struktur in Quantendots legen wir den folgenden Vielteilchen-Hamiltonoperator zu Grunde (es handelt sich hierbei um eine Verallgemeinerung des gebräuchlichen Hamiltonoperators zu Quantendot-Systemen [46, 48, 47, 49]):

$$H = \sum_{i,j} \epsilon_{ij} b_i^\dagger b_j + \gamma_1 \hat{N} + \gamma_2 \hat{N}^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} C_{ijkl} b_i^\dagger b_j^\dagger b_k b_l \quad (2.46)$$

wobei i, j, k, l Indizes zu den Basis-Einteilchenzuständen im Quantendot und $b_i, b_i^\dagger$ die zugehörigen Vernichter- und Erzeugeroperatoren sind, der Teilchenzahloperator ist dabei mit $\hat{N}$ bezeichnet. Die Einteilchenwellenfunktion zum Index i seien im folgenden mit ϕ_i bezeichnet (wir betrachten hier also die Envelopefunktion eines Leitungsband-Elektrons [48]). Wir wollen ferner annehmen, daß die Menge dieser Wellenfunktionen $\{\phi_i\}$ ein vollständiges Orthonormalsystem bilden. Man beachte, daß wir hier den Spin- und Ortsfreiheitsgrad in einem Index zusammengefaßt haben, insbesondere ist die Wellenfunktion $\phi(\vec{x}, \sigma)$ also ein zweidimensionales, komplexes Feld. Bei den ϵ_{ij} handelt es sich um die Einteilchen-Matrixelemente zum Hamiltonoperator, die folgende Terme enthalten sollen:

- Einteilchenpotential, gegeben durch das äußere elektrische Feld des Gates und der übrigen anliegenden Spannungen
- Spin- und Bahnsterme
- Magnetfeldsterme (in Coulombbeichung).

Der Polynomansatz in $\hat{N}$ enthält klassische (d.h. kapazitive) Wechselwirkungsterme zu Reservoiren (Anreicherungs-Layer) und geladenen Ionenrümpfen (Verarmungszone), wobei die reellen Koeffizienten γ_1 und γ_2 im folgenden noch näher bestimmt werden sollen.

Daneben enthält der Tensor C_{ijkl} die Vielteilchen-Wechselwirkung der Elektronen untereinander im Quantendot. In Coulombbeichung erhält man demnach:

$$C_{ijkl} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \sum_{\sigma,\sigma'} \int d^3x \int d^3x' \phi_i^*(\vec{x}, \sigma) \phi_j^*(\vec{x}', \sigma') \frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \phi_k(\vec{x}', \sigma') \phi_l(\vec{x}, \sigma) \quad (2.47)$$

mit dem Orts- und Spinfreiheitsgrad $\vec{x}, \sigma$. Man beachte, daß es sich hierbei um das Skalarprodukt im Spinfreiheitsgrad handelt und somit für den Tensor C gilt:

$$C_{ijkl} \propto \delta_{\text{spin}(i)\text{spin}(l)} \delta_{\text{spin}(j)\text{spin}(k)} \quad (2.48)$$

mit dem Kronecker-Delta δ . Die Materialkonstante ϵ_r spiegelt die Polarisation der Atomrümpfe wider.

Als wesentlicher Aspekt soll nun die Physik der einzelnen Wechselwirkungsterme des Hamiltonoperators näher betrachtet werden. Die Wechselwirkungsterme aller Ladungen im System untereinander werden in zwei Kategorien eingeteilt:

- Zum einen die klassischen Einteilchen-Anteile in $\gamma_1 \hat{N} + \gamma_2 \hat{N}^2$, die einer kapazitiven Beschreibung entsprechen, und

- die Vielteilchenterme, die im Rahmen einer vollständigen Beschreibung in der Form des Coulombtensors C auftauchen.

Typischerweise befindet sich der untersuchte Quantendot (eingebettet in einem Doppelbarrierensystem einer Resonanten Tunneldiode beispielsweise) zwischen zwei Elektronenreservoirien. Ein solches Elektronenreservoir kann in erster Näherung durch ein Jellium-Modell beschrieben werden, bei dem sich viele Elektronen in einem homogen positiv geladenen Untergrund bewegen, so daß das Reservoir insgesamt neutral bleibt. Also ergeben sich drei Gruppen von Ladungen:

- positiv geladenes "Jellium",
- negativ geladene Reservoir-Elektronen und
- negativ geladene Elektronen im Quantendot.

Die Beschreibung der einzelnen Wechselwirkungsterme wird nun folgendermaßen aufgeteilt in klassische (d.h. Einteilchen) Terme und Vielteilchenterme, siehe dazu die Tab. 2.1. Dabei bezeichnet n die Zahl an Elektronen im Quantendot, N die Anzahl aller Elektronen, V die Wechselwirkungsenergie innerhalb des Reservoirs und $\tilde{V}$ die Wechselwirkungsenergie zwischen einem Elektron im Reservoir und im Dot. Es wurde dabei jeweils die Summe aller Paarungen zweier Ladungen (ohne Doppeltzählung bei Vertauschung) betrachtet. Man beachte, daß dieser Ansatz auf einer einfachen klassischen Vorstellung beruht, die jedoch die vorliegende Situation sehr gut beschreibt. Die hohe Elektronendichte im Reservoir rechtfertigt dabei diese Vorgehensweise. Wie in der Tab. 2.1 zu sehen ist, wurde die Intradot-Wechselwirkung im Gegensatz dazu durch einen Vielteilchenterm einbezogen (von der Form des zweiten Summanden in Gl.(2.46)).

Tab.2.1: Wechselwirkungsterme n = Zahl an Dot-Elektronen N = Gesamtzahl an Elektronen bzw. Jelliumionen $N - n$ = Zahl an Reservoir-Elektronen		
Ladungen	Ansatz	Modell-Term
Jellium $\leftrightarrow$ Jellium	Einteilchen	$V \frac{N(N-1)}{2}$
Reservoir $\leftrightarrow$ Reservoir	Einteilchen	$V \frac{(N-n)(N-n-1)}{2}$
Jellium $\leftrightarrow$ Reservoir	Einteilchen	$-VN(N-n)$
Dot $\leftrightarrow$ Dot	Vielteilchen	$Q(n)$
Dot $\leftrightarrow$ Jellium	Einteilchen	$-\tilde{V}nN$
Dot $\leftrightarrow$ Reservoir	Einteilchen	$\tilde{V}n(N-n)$

Wir wollen nun die gesamte Wechselwirkungsenergie als Summe all dieser Terme schreiben (mit einer additiven Konstanten, so daß $E_{WW}(n=0) = 0$):

$$E_{WW} = \underbrace{\frac{1}{2}V}_{=\gamma_1} n + \underbrace{\left(\frac{1}{2}V - \tilde{V}\right)}_{=\gamma_2} n^2 + \underbrace{Q(n)}_{\rightarrow C}. \quad (2.49)$$

Die Zuordnung der klassischen Ausdrücke und Vielteilchenterme ist dabei symbolisch durch γ bzw. C angegeben. (Der Übergang zum Einteilchoperator im γ -Term ist einfach die Ersetzung von n bzw. n^2 durch den Teilchenzahloperator $\hat{N}$ bzw. $\hat{N}^2$.)

Kapazität

Wir wollen nun zeigen, wie sich durch eine klassische, kapazitive Näherung des Vielteilchenterms zur Intradot-Wechselwirkung der bekannte Ausdruck einer kapazitiven Wechselwirkungs-Energie herleiten läßt. Mit dem Ansatz

$$Q_{cap}(n) = V_{Dot} \frac{n(n-1)}{2} \quad (2.50)$$

also

$$n V_{Dot} = Q_{cap}(n+1) - Q_{cap}(n) \quad (2.51)$$

erhält man dann im Limes $n \rightarrow \infty$

$$E_{WW}(n) \simeq \frac{1}{2} \frac{(ne)^2}{\hat{C}} \quad \text{mit} \quad \hat{C} := \frac{e^2}{V + V_{Dot} - 2\tilde{V}}. \quad (2.52)$$

Man erhält hier im Grenzfall also die klassische Kapazität $\hat{C}$ des Quantendots. Es handelt sich hierbei um die Definition der Kapazität des Systems, die nicht im klassischen Sinne als Kapazität zweier metallischer Oberflächen zu verstehen ist, da die Festlegung von "Metallelektroden" hier ohne weiteres nicht möglich ist aufgrund der Delokalisierung der Elektronen im Quantendot. Im Kap. 2.3.6 gelangen wir zu einer quantenmechanisch korrekten Bestimmung von V_{Dot} aus Gl.(2.50) (und damit der Kapazität) über die Definition eines Quantendots im "kapazitiven Regime" und der Betrachtung seiner effektiven Wechselwirkungsenergien.

Wir wollen nun die Diskussion der Wechselwirkungsterme schließen mit einem Beispiel zur Abschätzung der Energie V . Als Beispiel dient ein System zweier konzentrischer, metallischer Kugelflächen der Radien $R_1 < R_2$. Identifiziert man die innere Kugelfläche R_1 mit dem Quantendot, so erhält man bekannterweise

$$V = \frac{K}{R_2}, \quad V_{Dot} = \frac{K}{R_1} \quad \text{mit} \quad K = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r}. \quad (2.53)$$

Da in diesem Beispiel das Reservoir R_2 den Quantendot R_1 umschließt, gilt hier für den Betrag der Wechselwirkungsenergie zwischen einer Ladung $-e$ auf dem Dot und einer Ladung e auf der Reservoir-Kugelschale als Spezialfall

$$\tilde{V} = V \quad (2.54)$$

und erhält damit den bekannten Ausdruck

$$E_{WW} \simeq \frac{1}{2} K n^2 \left(\frac{1}{R_1} - \frac{1}{R_2} \right). \quad (2.55)$$

Für eine allgemein gegebene geometrische Formen von idealisierten Metalloberflächen für die Reservoirs und den Quantendot könnte man nun klassische Ausdrücke obiger Gestalt herleiten, die Beziehung der Terme V , $\tilde{V}$ und V_{Dot} wäre jedoch nicht mehr von der einfachen Form. Wir werden diese klassische Vorgehensweise zur Bestimmung der Kapazität nicht weiter verfolgen.

2.3.3 Projektion

Als Vorbereitung zur Formulierung einer numerisch praktikablen Methode zur Berechnung der thermodynamischen Eigenschaften (insbesondere der Dichtematrix) des Modellsystems sollen in diesem Abschnitt einige mathematische Grundlagen erklärt werden. Basierend auf dem vorgestellten Vielteilchen-Hamiltonoperator im vorherigen Abschnitt wird als wesentlicher Schritt nun eine (zweistufige) Projektion (s.u.) des Systems auf einen endlich dimensionalen Unterraum des gesamten Fockraums der reinen Vielteilchenzustände vorgenommen. Im nächsten Abschnitt wird die Auswahl des Unterraumes dargestellt, und es werden weiterhin die Einzelheiten zur Numerik geklärt. Zunächst einige Betrachtungen zur Projektion:

Voraussetzung:

Sei F der Hilbertraum aller Vielteilchenzustände ("Fockraum"), H der gegebene Hamiltonoperator auf F und P der orthogonale Projektionsoperator zu einem Unterraum U_P von F . Dann gilt per definitionem

$$P^2 = P, \quad P^\dagger = P. \quad (2.56)$$

Weiterhin sei $Q := 1 - P$, der dann offensichtlich der Projektionsoperator zum orthogonalen Komplement von U_P in F ist. (Man beachte, daß U_P kein Unterraum eines Eigenraumes oder eine Summe von Eigenräumen zu sein braucht.)

Sei ψ ein "stationärer Zustand" zum "Energieeigenwert" $E \in \mathbb{R}$:

$$H\psi = E\psi. \quad (2.57)$$

Definition:

$$H_0 := PHP \quad (2.58)$$

ist die "Projektion" von H auf U_P .

Betrachte nun die Projektion $P\psi$. Offensichtlich folgt aus Gl.(2.57):

$$\begin{aligned} PH\psi &= PE\psi \\ \Leftrightarrow PHP\psi + PH \underbrace{Q\psi}_{\text{"stört"}} &= EP\psi \end{aligned} \quad (2.59)$$

und

$$\begin{aligned} QH\psi &= QE\psi \\ \Leftrightarrow QHQ\psi + QHP\psi &= EQ\psi \\ \Leftrightarrow QHP\psi &= (E - QH) \underbrace{Q}_{Q^2=Q} \psi = (E - QHQ)Q\psi. \end{aligned} \quad (2.60)$$

Falls $E \in \mathbb{R}$ mit

$$E - QHQ \text{ ist invertierbar,} \quad (2.61)$$

folgt somit aus Gl.(2.60)

$$\begin{aligned} Q\psi &= \frac{1}{E - QHQ} QHP\psi \\ \Leftrightarrow_{Q^2=Q} Q\psi &= Q \frac{1}{E - QHQ} QHP\psi. \end{aligned} \quad (2.62)$$

Bemerkung:

QHQ hat immer den Eigenwert 0, der Raum U_P ist (Unterraum zum) Eigenraum.

Mit

$$PHP\psi = PHPP\psi = H_0P\psi \quad (2.63)$$

und Gl.(2.59), Gl.(2.62) folgt somit:

Folgerung:

Für alle Eigenvektoren ψ von H zum Eigenwert E mit Gl.(2.61) gilt

$$\begin{aligned} H_0(P\psi) + W(E)(P\psi) &= E(P\psi) \\ \text{mit } W(E) &:= PHQ \frac{1}{E - QHQ} QHP. \end{aligned} \quad (2.64)$$

Wir wollen dies nun allgemeiner formulieren:

Definition:

$$H_{\text{eff}}(E) := H_0 + W(E) \quad \text{für } E \in \mathbb{R} \text{ mit Gl.(2.61)} \quad (2.65)$$

ist der "effektive" Hamiltonoperator zur Projektion P . Hat $H_{\text{eff}}(E)$ den Eigenwert E , so heißt E "spezieller Eigenwert" der Schar H_{eff} .

(Man beachte, daß es sich hierbei um eine Operatorenschar handelt. Offensichtlich ist $H_{\text{eff}}(E)$ hermitesch für alle E mit Gl.(2.61). Das "spezielle" ist hier, daß der Parameter E auch Eigenwert ist.)

Es soll nun die Beziehung der Eigenräume und Eigenwerte von H und $H_{\text{eff}}(E)$ untersucht werden. (Bei $H_{\text{eff}}(E)$ ist sinngemäß "spezieller Eigenwert" gemeint.)

Definition:

$$L := \{\phi \in U_P \mid \phi \neq 0, \exists \psi \in F, E \in \mathbb{R} (H\psi = E\psi \wedge \phi = P\psi \wedge \text{Gl.}(2.61))\} \quad (2.66)$$

und

$$\hat{E} : L \longrightarrow \text{Pot}(\mathbb{R}) : \phi \in L \longmapsto \{E \in \mathbb{R} \mid \exists \psi \in F, (H\psi = E\psi \wedge \phi = P\psi \wedge \text{Gl.}(2.61))\} \quad (2.67)$$

(Man beachte, daß E in der Definition von L im allgemeinen nicht eindeutig zu sein braucht, daher die Menge der E .)

Analog definieren wir:

Definition:

$$L_{\text{eff}} := \{\phi \in U_P \mid \phi \neq 0, \exists E \in \mathbb{R} (H_{\text{eff}}(E)\phi = E\phi \wedge \text{Gl.}(2.61))\} \quad (2.68)$$

und

$$\hat{E}_{\text{eff}} : L_{\text{eff}} \longrightarrow \text{Pot}(\mathbb{R}) : \phi \in L_{\text{eff}} \longmapsto \{E \in \mathbb{R} \mid H_{\text{eff}}(E)\phi = E\phi \wedge \text{Gl.}(2.61)\} \quad (2.69)$$

(Die Vereinigung aller Bilder unter $\hat{E}_{\text{eff}}$ ist also die Menge aller speziellen Eigenwerte von H_{eff} .)

Bemerkung:

Sei

$$M := \{\psi \in F \mid \psi \neq 0, \exists E \in \mathbb{R} (H\psi = E\psi \wedge \text{Gl.}(2.61))\}, \quad (2.70)$$

so folgt direkt

$$PM \setminus \{0\} = L. \quad (2.71)$$

Das heißt, L ist die Projektion aller Eigenvektoren von H auf U_P , bei der die zugehörigen Eigenwerte Gl.(2.61) erfüllen.

Folgerung:

Sei $\phi \in L$. Dann existiert per definitionem ein Eigenvektor ψ mit Eigenwert E zu H mit Gl.(2.61) und $\phi = P\psi$. Mit Gl.(2.64) folgt dann $H_{\text{eff}}(E)\phi = E\phi$, also insgesamt $\phi \in L_{\text{eff}}$. Weiterhin sei $\tilde{E} \in \hat{E}(\phi)$. Dann existiert ein Eigenvektor $\tilde{\psi}$ mit Eigenwert $\tilde{E}$ zu H mit Gl.(2.61) und $\phi = P\tilde{\psi}$. Mit Gl.(2.64) folgt dann $H_{\text{eff}}(\tilde{E})\phi = \tilde{E}\phi$, also insgesamt $\tilde{E} \in \hat{E}_{\text{eff}}(\phi)$. Das heißt also

$$L \subseteq L_{\text{eff}}, \quad \hat{E}(\phi) \subseteq \hat{E}_{\text{eff}}(\phi) \quad (\forall \phi \in L). \quad (2.72)$$

Definition:

Ein Hamiltonoperator, für den $\langle L \rangle = U_P$ gilt, heißt "vollständig" bezüglich P . (Anschaulich

gesprochen heißt dies, daß es eine Basis von U_P gibt, die aus P -projizierten Eigenvektoren von H besteht, bei denen die zugehörigen Eigenwerte zu H die Gl.(2.61) erfüllen.)

Bemerkung:

Offensichtlich ist $\langle L_{\text{eff}} \rangle \leq U_P$. Aus Gl.(2.72) folgt, daß $\langle L \rangle \leq \langle L_{\text{eff}} \rangle$. Dann folgt für einen vollständigen Hamiltonoperator $\langle L \rangle = \langle L_{\text{eff}} \rangle = U_P$.

Damit haben wir den Hauptzusammenhang zwischen L und L_{eff} gezeigt. Es soll nun noch eine Abschätzung des Fehlers zwischen L_0 und L_{eff} folgen.

Voraussetzung:

Wir wollen uns im folgenden beschränken auf Systeme, bei denen die Eigenwerte von QHQ alle $\geq \tilde{E} > 0$ sind für ein geeignetes $\tilde{E}$, ausgenommen der Eigenwert 0 (zum Unterraum U_P). Seien weiterhin die Eigenwerte von $H_0 \equiv PHP$ alle $< \tilde{E}$ und $\geq E_{\text{min}}$. Dann ist sicherlich für alle Eigenwerte von H_0 die Gl.(2.61) erfüllt.

Zur Fehlerabschätzung bei der Betrachtung von H_0 anstelle von H_{eff} läßt sich größenordnungsmäßig folgender Übergang zu Erwartungswerten betrachten:

$$\begin{aligned} PHQ &\longrightarrow (\psi_0, H\psi_Q) \\ QHP &\longrightarrow (\psi_Q, H\psi_0) \\ \frac{1}{E - QHQ} &\longrightarrow \frac{1}{E - E_Q} \end{aligned} \quad (2.73)$$

mit einem Eigenvektor ψ_0 von H_0 , bzw. ψ_Q von QHQ zur Energie E_Q . Man erhält dann als Abschätzung:

$$\|W(E)\| \longrightarrow \frac{|(\psi_0, H\psi_Q)|^2}{|E - E_Q|} \quad (2.74)$$

und damit

$$\|W(E)\| \leq \frac{\max |(\psi_0, H\psi_Q)|^2}{|E - \tilde{E}|} \quad (2.75)$$

als Abschätzung der Größenordnung des Fehlers. Der Term $|(\psi_0, H\psi_Q)|^2$ resultiert dabei aus dem Übergang von Zuständen aus U_P nach U_Q . Man beachte die Ähnlichkeit des Ausdrucks mit typischen Termen aus der Störungsrechnung 1. Ordnung.

2.3.4 Algorithmus

Im folgenden Abschnitt wird ein Algorithmus vorgestellt, der es gestattet, wesentliche thermodynamische Eigenschaften des vorgestellten Modellsystems numerisch zu behandeln. Insbesondere bietet die Bestimmung der Dichtematrix eine Berechnung sämtlicher interessierender Meßgrößen.

Einteilchen-Basis

Ausgangspunkt stellt der Hamiltonoperator aus Gl.(2.46) dar. Als ON-Einteilchenbasis $\{\phi_i\}$ wird eine Menge von Eigenfunktionen des zweidimensionalen (2D) harmonischen Oszillators gewählt [50]. In der senkrechten Raumrichtung setzen wir die Eigenfunktion eines Kastenpotentials an:

$$\begin{aligned}
\phi_{n_x, n_y, n_z=0, s}(x, y, z, \sigma) = & \delta_{\sigma s} \frac{1}{\sqrt{2(n_x + n_y) n_x! n_y! \pi x_0 y_0}} \\
& \times \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[\left(\frac{x}{x_0} \right)^2 + \left(\frac{y}{y_0} \right)^2 \right] \right\} H_{n_x} \left(\frac{x}{x_0} \right) H_{n_y} \left(\frac{y}{y_0} \right) \\
& \times \sqrt{\frac{2}{z_0}} \sin \left(\frac{\pi z}{z_0} \right), \tag{2.76}
\end{aligned}$$

wobei H_n das Hermite-Polynom n -ten Grades ist. Weiterhin bezeichnen $\hbar\omega_{x0}$, $\hbar\omega_{y0}$ die lateralen Quantisierungsenergien des 2D-harmonischen Oszillators (in der x, y -Ebene), $x_0 = \sqrt{\hbar/(\omega_{x0}m^*)}$, $y_0 = \sqrt{\hbar/(\omega_{y0}m^*)}$ die zugehörigen charakteristischen Längen und z_0 die Topfbreite in senkrechter Richtung (z). Der Spinindex s nimmt dabei die Werte ± 1 an.

Die Wahl dieser Einteilchenbasis ist zunächst vom mathematischen Standpunkt nicht wichtig, für die numerische Behandlung ist es jedoch von großem Vorteil, einen Satz von Wellenfunktionen zu wählen, die den Einteilchen-Eigenfunktionen (d.h. zum Einteilchenterm ϵ_{ij} im Hamiltonoperator) möglichst nahe kommen, um die Nichtdiagonal-Elemente der Matrix ϵ klein zu halten. Ein Blick auf die typischen geometrischen Verhältnisse innerhalb der experimentell untersuchten Strukturen (s. Kap. 3) rechtfertigt obige Wahl. Der Potentialtopf der Breite z_0 entspricht der extrapolierten Ausdehnung der Wellenfunktion zwischen den beiden Barrieren der Resonanten Tunneldiode, und das laterale harmonische Potential entspricht dem lateralen Potential der Verarmungszone und des Schottky-Gates um die Mesa der Tunneldiode herum (s. Kap. 3).

Der erste Schritt im Algorithmus besteht nun darin, sich auf einen endlich dimensionalen Einteilchenraum zu beschränken, also den Hamiltonoperator auf diesen Unterraum zu projizieren. Da wir die energetisch niedrigsten Anregungen des Systems untersuchen wollen, ist es sinnvoll, die Auswahl der Basisfunktion in einem Kriterium der Form $n_x, n_y < n_{max}$ zu formulieren. Da wir uns hier auf den Fall eines Quantendots mit starker Einschränkung in z -Richtung im Vergleich zu den x, y -Richtungen beschränken wollen, reicht es, nur den Grundzustand des Potentialtopfes zu betrachten (d.h. $n_z = 0$). Die Wahl des Parameters $\hbar\omega_0$ ist dabei (abhängig vom Einteilchenpotential und dem Magnetfeld) so zu wählen, daß die Hauptkomponenten der exakten Einteilchen-eigenzustände von H im Unterraum zur Basis B liegen. (In der Simulation kann man hier grob den Verlauf des lateralen Potentials aus der Geometrie abschätzen, die Wahl ist jedoch relativ unkritisch bei einem hochdimensionalen Unterraum.) Man beachte, daß die Basiswahl hier auf die Resonante Tunneldiode angepaßt ist, die folgenden Methoden bei einer Übertragung auf ein anderes System jedoch unberührt bleiben. Die Basis lautet demnach

$$B := \{\phi_{n_x, n_y, n_z, s} \mid n_x, n_y < n_{max}, n_z = 0\}. \tag{2.77}$$

(Typischerweise beträgt die Dimension des so gewonnenen Unterraumes 18 bis 50 bei den folgenden Simulationen, s. nächster Abschnitt).

Matrixelemente

Bezüglich dieser Basis werden nun die Matrixelemente ϵ_{ij} durch numerische Integration bestimmt. Wir wollen annehmen, daß innerhalb des Quantendots ein konstantes äußeres Magnetfeld B in z -Richtung anliegt. Dies entspricht genau der experimentellen Situation mit einem Magnetfeld parallel zur Transportrichtung, d.h. senkrecht zu den Barrieren. Ferner sei ein laterales bindendes Einteilchenpotential $V(x, y)$ vorgegeben. Im Rahmen der Simulation wird dieses stückweise durch Polynome zweiten Grades definiert. Dies bietet die Möglichkeit zur realistischen Vorgabe eines Gate-variablen, im allgemeinen nicht harmonischen, lateralen Potentials.

$$\begin{aligned} \epsilon_{ij} = \langle \phi_i, [& -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta - i\hbar\omega_c x \frac{d}{dy} + \frac{1}{2}m^*\omega_c^2 x^2 + V(x, y) \\ & + \frac{1}{\hbar} \vec{\alpha} \cdot (\vec{S} \times \vec{\pi}) + \frac{g^*m^*\hbar\omega_c}{2m_e} S_z] \phi_j \rangle \end{aligned} \quad (2.78)$$

mit den abgekürzten Indizes $i = (n_x, n_y, s)$, $j = (m_x, m_y, t)$ und der Zyklotronfrequenz $\omega_c = \frac{eB}{m^*}$. Die letzten beiden Terme stellen die Spin-Bahn-Kopplung und den Spinterm im Magnetfeld dar [51], wobei $\vec{S}$ den Spinoperator, $\vec{\pi} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} + e\vec{A}$ den kinetischen Impuls und $\vec{\alpha}$ den Rashba-Kopplungskoeffizienten bezeichnet. (Das Vektorpotential wurde dabei zu $\vec{A} = Bx\vec{e}_y$ gewählt.) Offensichtlich ist ϵ hermitesch. Im folgenden werden die Spin-Bahn-Kopplungsterme vernachlässigt, was für die untersuchten Halbleitermaterialien (AlGaAs/GaAs) sicherlich gerechtfertigt ist [51]. (Durch die Zusammenfassung von Spin- und Bahnindizes in unserem Modell, ist die Einbeziehung dieser Terme vorgesehen und somit mathematisch trivial, der numerische Aufwand zur Berücksichtigung der dadurch nur leicht modifizierten Matrixelemente jedoch nicht sinnvoll.)

Des weiteren wird bezüglich derselben Basis B auch der Coulombtensor C aus Gl.(2.47) durch numerische Integration bestimmt. (Aufgrund der Dimension des Integrals bietet sich hier eine Monte-Carlo-Methode an.) Die große Zahl an Symmetrien dieses Tensors reduziert dabei die unabhängigen Komponenten erheblich, was den Rechenaufwand drastisch reduziert.

Diagonalisierung

Der nächste Schritt besteht darin, für ein gegebenes Magnetfeld, Gate-Potential, etc., die Einteilchenmatrix ϵ zu diagonalisieren. (Diese Methode zur Bestimmung der Einteilchenniveaus wurde vorab bereits in [52] verwendet.) Wir wollen die (nicht eindeutige) Menge von Basisvektoren aus Eigenzuständen mit

$$B' := \{\phi'_i\} \quad (2.79)$$

bezeichnen. Man beachte, daß dies ebenfalls ein ON-System darstellen soll. Der Basiswechsel geschieht mittels einer unitären Matrix P ($P^{-1} = P^\dagger$):

$$\phi'_i = \sum_j P_{ji} \phi_j. \quad (2.80)$$

(Die Spaltenvektoren in P sind also die Koordinatenvektoren von B' bezüglich B .) Die Vernichtungsoperatoren transformieren sich dann gemäß

$$b_j = \sum_i P_{ji} b'_i. \quad (2.81)$$

Sei ferner ϵ' die Diagonalmatrix zu ϵ , so gilt

$$\epsilon = P \epsilon' P^{-1} \quad \text{mit Diagonalform} \quad \epsilon'_{pq} = \delta_{pq} \epsilon'_p. \quad (2.82)$$

Man beachte, daß der Teilchenzahloperator $\hat{N}$ unter einer solchen Transformation invariant ist, so daß sich die kapazitiven Wechselwirkungsterme zu γ_1, γ_2 nicht ändern in ihrer Form.

Die Transformation des Coulombtensors geschieht analog:

$$C'_{pqrt} = \sum_{i,j,k,l} P_{ip}^* P_{jq}^* P_{kr} P_{lt} C_{ijkl}, \quad (2.83)$$

wobei die Indizes bezüglich B als durchnummerierte Tupel (n_x, n_y, s) zu verstehen sind.

Der nächste Schritt besteht nun darin, eine weitere Einteilchen-Projektion vorzunehmen. Der Sinn dieser zweiten Reduktion des Zustandsraumes liegt darin, für die spätere numerische Behandlung im Fockraum (d.h. im Vielteilchenraum) die Dimension zu reduzieren. Es werden hierbei nur die energetisch niedrigsten Einteilchenzustände aus B' mitgenommen zur reduzierten Basis B'' :

$$B'' = \{\phi'_i \in B' \mid \epsilon'_i < E_{\max}\} \subseteq B'. \quad (2.84)$$

(Typischerweise ist in der Simulation die Dimension des erzeugten Unterraumes 2 bis 11, so daß der zugehörige Fockraum 4 bis 2048 dimensional ist.)

Vielteilchen-Operator

Der nun folgende Schritt besteht darin, die Matrixelemente des Vielteilchen-Hamiltonoperators H aus Gl.(2.46) bezüglich aller Vielteilchenzustände, die mittels B'' erzeugt werden können, zu berechnen. Wir wollen im folgenden die Basiszustände im Fockraum (d.h. dem Vielteilchen-Zustandsraum) durch große Indizes bezeichnen, die zu verstehen sind als Tupel von Besetzungszahlen der Eielektronenzustände aus B'' . Seien also $i = 0, \dots, N-1$ die Indizes der Einteilchenzustände, so wird ein Basiszustand Φ_I beschrieben durch das Tupel $I = (n_0, \dots, n_{N-1})$ mit $n_i = 0, 1$. Die Dimension des betrachteten Unterraumes im Fockraum ist demnach 2^N bei

N -dimensionalem Unterraum zur Einteilchenbasis B'' . Wir können somit den Basiszustand Φ_I schreiben als

$$\Phi_I = \left(b_{N-1}^\dagger\right)^{n_{N-1}} \cdots \left(b_1^\dagger\right)^{n_1} \left(b_0^\dagger\right)^{n_0} \Phi_{vac} \quad (2.85)$$

mit dem Vakuumzustand Φ_{vac} .

Zur Berechnung der Matrixelemente von H aus Gl.(2.46) wissen wir bereits, daß der Einteilchen-Term zu ϵ' bereits diagonal ist. Die zugehörigen Matrixelemente sind von der Form

$$M_{JI} = \left(\Phi_J, b_x^\dagger b'_x \Phi_I\right) \quad (2.86)$$

mit $J = (m_0, \dots, m_{N-1})$ und $I = (n_0, \dots, n_{N-1})$. Offensichtlich kann $M_{JI} \neq 0$ nur sein, wenn alle Besetzungszahlen von I und J identisch sind, wofür dann $M_{JI} = m_x$ folgt.

Es bleibt noch der Vielteilchen-Wechselwirkungsterm zum Coulomb-Tensor C' explizit zu berechnen. Zur Vereinfachung wollen wir diesen Term umformen in:

$$\frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} C'_{ijkl} b_i^\dagger b_j^\dagger b'_k b'_l = \sum_{x < y, w < z} (C'_{xyzw} - C'_{xywz}) b_x^\dagger b_y^\dagger b'_z b'_w \quad (2.87)$$

Typischerweise treten hier Matrixelemente der Form

$$M_{JI} = \left(\Phi_J, b_x^\dagger b_y^\dagger b'_z b'_w \Phi_I\right) \quad (2.88)$$

auf, die sich durch einfache Klassifikation der zugehörigen Diagramme angeben lassen. Offensichtlich kann M_{JI} nur von 0 verschieden sein, wenn alle Besetzungszahlen in I und J identisch sind, bis auf die der vier Einteilchenindizes x, y, z, w :

$$n_i = m_i \quad (\forall i \neq x, y, z, w). \quad (2.89)$$

Wir wollen annehmen, daß $x < y$ und $w < z$ gilt. Für das Vorzeichen vereinbaren wir noch folgende Abkürzung:

$$S := (-1)^{M(x)+M(y)+N(z)+N(w)} \quad \text{mit} \quad N(x) := \sum_{i>x} n_i, \quad M(x) := \sum_{j>x} m_j \quad (2.90)$$

mit $N(x)$ "Anzahl der Operatoren vor dem Erzeuger $b_x^\dagger$ im Zustand Φ_I " und analog $M(x)$ "Anzahl der Operatoren vor dem Erzeuger $b_x^\dagger$ im Zustand Φ_J ". (Man beachte dazu, daß für Fermionen $b_i^\dagger b_j^\dagger = -b_j^\dagger b_i^\dagger$, $b'_i b'_j = -b'_j b'_i$ und $b_i^\dagger b'_j + b'_j b_i^\dagger = \delta_{ij}$ gilt.) Man kann dann folgende Klassen bezüglich x, y, z, w bilden (wir lassen die Indizes J, I an M weg):

J	I
•	•

alle vier identisch

Das widerspricht der Voraussetzung.

J	I
•	•
•	•

zwei Paare jeweils gleich

Nach Voraussetzung kommt nur $x = w \wedge y = z$ in Frage. Dann gilt $M = S m_x m_y n_x n_y$ (hier $S \equiv 1$).

J	I
•	•
○	•
•	○

ein Paar gleich

Nach Voraussetzung gibt es folgende Fälle:

- $x = z$:

$$M = S m_x m_y (1 - m_w) n_z n_w (1 - n_y)$$
- $x = w$:

$$M = S m_x m_y (1 - m_z) n_z n_w (1 - n_y)$$
- $y = z$:

$$M = S m_x m_y (1 - m_w) n_z n_w (1 - n_x)$$
- $y = w$:

$$M = S m_x m_y (1 - m_z) n_z n_w (1 - n_x)$$

J	I
○	•
•	○
○	•
•	○

alle verschieden

Dann folgt $M = S m_x m_y (1 - m_z) (1 - m_w) n_z n_w (1 - n_x) (1 - n_y)$.

Mit Hilfe dieser Grundmatrixelemente wird die Matrix zu H bestimmt.

Dichtematrix, Observablen

Es soll nun die Vielteilchen-Dichtematrix ρ zur Temperatur T (mit $\beta := \frac{1}{k_B T}$) und zum chemischen Potential μ errechnet werden:

$$\rho = \frac{1}{Z_{gr}} \exp \left(-\beta \left(H - \mu \hat{N} \right) \right), \quad (2.91)$$

wobei

$$\hat{N} = \sum_i b_i^\dagger b_i \quad (2.92)$$

der Teilchenzahloperator und

$$Z_{gr} = \text{Tr}(\exp \left(-\beta \left(H - \mu \hat{N} \right) \right)) \quad (2.93)$$

die großkanonische Zustandssumme ist. Im folgenden sei $\hat{H} := -\beta \left(H - \mu \hat{N} \right)$ der effektive Hamiltonoperator. Zur Berechnung der Exponentialfunktion wird die Vielteilchen-Hamiltonoperator-Matrix zu $\hat{H}$ diagonalisiert. Sei Q die dazu benötigte unitäre Transformation, so gilt:

$$\hat{H}_{diag} = Q^{-1} \hat{H}_{B''} Q \quad (2.94)$$

mit $\hat{H}_{diag}$ der Diagonalmatrix und $\hat{H}_{B''}$ der Matrix bezüglich der Vielteilchenbasis zu B'' . Dann folgt sofort:

$$\exp(\hat{H}_{B''}) = Q \exp(\hat{H}_{diag}) Q^{-1} \quad \text{mit} \quad \left(\exp(\hat{H}_{diag}) \right)_{IJ} = \delta_{IJ} \exp \left((\hat{H}_{diag})_{II} \right). \quad (2.95)$$

(Man beachte, daß $\exp \left((\hat{H}_{diag})_{II} \right)$ eine reelle Zahl ist.) Die Zustandssumme Z_{gr} ist dann einfach

$$Z_{gr} = \sum_I \exp \left((\hat{H}_{diag})_{II} \right) \quad (2.96)$$

und die Dichtematrix ρ

$$\rho_{B''} = \frac{1}{Z_{gr}} Q \exp(\hat{H}_{diag}) Q^{-1}. \quad (2.97)$$

Mit dieser numerisch bestimmten Dichtematrix ρ läßt sich nun der Erwartungswert einer beliebigen Observablen bestimmen. Wir interessieren uns hier für die Teilchenzahl $\hat{N}$ und den Gesamtspin $\hat{S}$. Wie man leicht sehen kann, ist $\hat{N}$ in der Vielteilchenbasis zu B'' diagonal und $\hat{S}$ bei Vernachlässigung der Spin-Bahn-Kopplung ebenfalls. (Die Matrizen sind im Spinindex für letzteren Fall immer diagonal.) Die Matrix einer beliebigen Einteilchen-Observablen A_B (in der Basis B) läßt sich mittels der Transformation P auf die Basis B'' umrechnen gemäß $A_{B''} = P^{-1} A_B P$. Die zugehörige Vielteilchen-Observable lautet dann

$$\hat{A} = \sum_{i,j} (A_{B''})_{ij} b_i^{\dagger} b_j. \quad (2.98)$$

Matrizelemente der Form $M_{JI} = (\Phi_J, b_x^{\dagger} b_y' \Phi_I)$ können analog zu obiger Methode einfach bestimmt werden mit $S := (-1)^{M(x)+N(y)}$ und $n_i = m_i$ ($\forall i \neq x, y$):

J	I
•	•

beide identisch

$$M = S m_x n_x \text{ (hier } S \equiv 1\text{)}.$$

J	I
•	○
○	•

verschieden

$$M = S m_x (1 - m_y) n_y (1 - n_x).$$

Offensichtlich reicht es für den Fall, daß nur die Teilchenzahl ermittelt werden muß, die Ableitung der Zustandssumme nach dem chemischen Potential μ zu betrachten, ohne die volle Dichtematrix zu ermitteln (und damit die vollständige Transformation Q).

Konsistenz-Überprüfungen

Es gibt eine Reihe wichtiger "physikalischer" Tests, denen das obige Modell (und sicherlich die numerischen Implementierung) unterzogen wurde:

- Zur Bestimmung der Einteilchen-Matrix ϵ : Die sich ergebenden Einteilchenenergien nach der Diagonalisierung zu ϵ' müssen im Falle eines harmonischen Potentials und eines variablen Magnetfeldes die bekannten Einteilchen-Niveaus liefern (siehe dazu [53, 4, 5]). Insbesondere muß die bekannte lineare Aufspaltung in $\hbar\omega_c$ mit der richtigen Entartung für $B \rightarrow 0$ zu sehen sein [53]. Weiterhin dient ein 2D-Kastenpotential dazu, die Richtigkeit der Energieniveaus für stückweise vorgegebene Potentiale zu testen.

- Ein wichtiger Test der Vielteilchensimulation liegt darin, einen Coulombtensor $C \equiv 0$ (d.h. keine Wechselwirkung) anzusetzen. Die Vielteilchenbesetzung als Funktion des chemischen Potentials muß dann trivialerweise die Einteilchenenergien liefern bei Widerspiegelung des Pauliprinzips.
- Eine Überprüfung der numerischen Integration zur Bestimmung des Coulombtensors besteht darin, zwei stark lokalisierte Gaußpakete im Abstand r zu betrachten. Dann muß das zugehörige Element $C_{0000} \simeq \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r r}$ liefern.
- Unitäre Einteilchen-Transformationen, die die Einteilchen-Energie-Unterräume invariant lassen, müssen die Vielteilchenergebnisse (z.B. zu sehen an der Gesamt-Teilchenzahl) auch im Falle der Wechselwirkung unverändert lassen. (Dies ist offensichtlich ein Test der Tensor-Transformation.) Hierzu bietet sich der Vergleich des Falles $B = 0$ eines 2D-harmonischen Potentials und der Fall $B \rightarrow 0+$ in demselben Potential an. Im einen Fall ist die Basis $B' \equiv B$ ($P \equiv 1$), d.h. die Menge der Produktfunktionen aus 1D-harmonischen Oszillator Eigenfunktionen (siehe Gl.(2.76)). Im anderen Fall ist B' eine Basis aus Drehimpuls-Eigenfunktionen.
- $\text{Tr}(\rho) = 1$
- Unter der Voraussetzung, daß genügend Einteilchen-Zustände in der Basis B' enthalten sind (überprüfbar beispielsweise mit dem ersten Test), und mit der Feststellung, daß der Vielteilchen-Wechselwirkungsterm nur zu einer energetischen Anhebung (gegenüber $C = 0$) im Spektrum (Zustandsdichte) führen kann, sind sicher für die $\mu < E_{max}$ (siehe Gl.(2.84)) die durchgeführten Projektionen von vernachlässigbarem Einfluß. (Das maßgebliche Energiefenster, innerhalb dessen höhere Niveaus eine Rolle spielen können, ist durch $k_B T$ gegeben.)

2.3.5 Reservoir

Dieser Abschnitt soll einer Betrachtung zu den Randbedingungen innerhalb der Elektronenreservoir dienen. Wie in den vorherigen Abschnitten immer wieder deutlich wurde, spielen Elektronenreservoir (in Form von dotierten Zuleitungsgebieten im Fall einer Halbleiterheterostruktur) die Rolle des Elektronen-Injektors und -auffängers (Emitter und Kollektor) für den Transport. Außerdem bilden sie im Experiment die Schnittstelle zwischen dem Experimentator und dem untersuchten Quantensystem. Sie prägen ihre Verteilungsfunktion dem zwischenliegenden Quantendot ein, der sich dann in einem Nichtgleichgewichts-Zustand zu einer gemittelten Verteilung der Gl.(2.32) befindet. Im Fall extrem unterschiedlicher Kopplungen zu Emitter und Kollektor, befindet sich der Quantendot sogar (in erster Näherung) im Gleichgewicht zum stärker gekoppelten Reservoir (s. Kap. 2.3.1). Entscheidend für die Kinetik (d.h. die Teilchenzahl-Entwicklung) ist dabei das chemische Potential μ und die Temperatur T innerhalb des Reservoirs. Für den Vergleich der theoretischen Elektronenstruktur- und Transportmodelle mit dem Experiment (s. Kap. 5), ist es wichtig zu wissen, inwieweit die extern veränderlichen Größen wie Elektroden-Spannungen und Magnetfelder B diese beiden Größen beeinflussen.

Die erste Größe, nämlich die äußere Spannung (d.h. Potentialdifferenz) zwischen zwei Elektroden, ist genau der Unterschied zwischen den chemischen Potentialen innerhalb der beiden Reservoirs.

Für $T \rightarrow 0$ gibt das chemische Potential μ die obere energetische Grenze an, unterhalb derer eine Injektion stattfindet. Somit erzeugt die anliegende Spannung ein "Energiefenster" für den Transport durch die untersuchte Struktur hindurch, was in der Differenz der Verteilungen $f_L - f_R$ der Stromformel in Gl.(2.33) mathematisch zum Ausdruck kommt. Wir wollen davon ausgehen, daß eine Veränderung der Spannung keinen Einfluß auf die relative energetische Lage der chemischen Potentiale innerhalb eines jeden Reservoir-Gebietes hat, solange keine Temperaturerhöhung durch sogenannte "heiße" Elektronen erfolgt. (Inwieweit wieder eingefangene Nichtgleichgewichts-Elektronen das Reservoir im Experiment "aufheizen", hängt von der Elektronen-Gitter-Kopplung und der thermischen Leitfähigkeit zum Kryostaten ab [54].)

Dagegen hat das äußere Magnetfeld B im allgemeinen einen Einfluß auf den Wert des chemischen Potentials in einem Reservoir bei konstanten äußeren Spannungen. Ein solcher Effekt ist in dreidimensionalen Elektronengasen bekannt, bei denen die sich umbesetzenden "Landauzyylinder" zu einer Oszillation im chemischen Potential (und anderen Eigenschaften [55]) bei steigendem Magnetfeld führen. Wir wollen hier dagegen den Fall eines eindimensionalen Elektronengases (1DEG) mit parallel ausgerichtem äußeren Magnetfeld betrachten. (Im Fall der Resonanten Tunneldiode handelt es sich also um ein Magnetfeld parallel zur Transportrichtung z .) In den beiden senkrechten Raumrichtungen (x, y) nehmen wir ein symmetrisches, zweidimensionales (2D), harmonisches Potential an. Als Randbedingung ist die Zahl der Elektronen n' pro Länge konstant gehalten. Die zu dieser Frage vorliegenden experimentellen Befunde [4, 5, 52] legen eine solche Annahme nahe. (Die in diesen Arbeiten durchgeführten Untersuchungen stehen in engem Zusammenhang mit den nun folgenden Formulierungen.)

Innerhalb des 1DEG sei eine parabolische Bandstruktur

$$E_{n,l}(k_z, B) = \frac{\hbar^2}{2m^*} k_z^2 + \epsilon_{n,l}(B)$$

$$\text{mit } \epsilon_{n,l}(B) = (2n + |l| + 1) \frac{\hbar}{2} \sqrt{\omega_c^2 + 4\omega_0^2} - \frac{\hbar}{2} l \omega_c \quad (2.99)$$

mit effektiver Masse m^* und Subbandenergien $\epsilon_{n,l}(B)$ [53]. Die Quantenzahl $n = 0, 1, 2, \dots$ ist die Hauptquantenzahl und $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ die Quantenzahl des Drehimpulses in z -Richtung, das heißt parallel zum Magnetfeld. $\omega_c = eB/m^*$ bezeichnet die Zyklotronfrequenz und $\hbar\omega_0$ ist die Quantisierungsenergie des 2D harmonischen Oszillators.

Die Zahl der Zustände n'_z pro k_z -Intervall, Länge und Subband lautet dann

$$\frac{dn'_z}{dk_z} = \underbrace{2}_{\text{Spin}} \frac{1}{2\pi}. \quad (2.100)$$

Wir wollen hier den Spin in seiner Magnetfeld-Aufspaltung vernachlässigen. Für die Gesamtzahl der Zustände pro Länge

$$n'(\mu) = \sum_{n,l} \int_{-\infty}^{+\infty} dk_z \frac{dn'_z}{dk_z} f(E_{n,l}(k_z) - \mu) \quad (2.101)$$

mit der Fermifunktion f zur Temperatur T folgt schließlich

$$n'(\mu) = \frac{1}{\pi} \sum_{n,l} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_z}{\exp \left[\frac{1}{k_B T} \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} k_z^2 + \epsilon_{n,l}(B) - \mu \right) \right] + 1} \quad (2.102)$$

und damit n' als Funktion von μ bei gegebenem B . Diese Funktion muß numerisch invertiert werden zum gesuchten Zusammenhang $\mu(n', B)$. Die Abb. 2.7 zeigt den so ermittelten Verlauf des chemischen Potentials μ exemplarisch als Funktion des Magnetfeldes B bei einer vorgegebenen Zahl an Elektronen pro Länge. Man erkennt deutlich den linearen Anstieg für große Magnetfelder, bei denen nur noch ein Subband gefüllt ist. Eine experimentelle Bestätigung dieses Verhaltens ist in [4, 5] zu finden.

Eine allgemeine Diskussion des Einflusses der Elektron-Elektron-Wechselwirkung innerhalb eines 1D-Reservoirs im Rahmen einer Meanfield-Näherung ist in [56] zu finden. Als wesentliche Korrektur zum lateralen Potential ist dabei eine Abflachung des Potentialverlaufes in der Nähe des Minimums (das heißt eine Korrektur um r^4 -Terme zusätzlich zum harmonischen r^2 -Potential) zu nennen.

Da in den hier betrachteten Systemen die spannungsmäßige Lage von Strukturen in der experimentell zugänglichen Strom-Spannungs-Kennlinie funktional von der Lage der chemischen Potentiale relativ zu Quasibindungszuständen (genauer: zu Peaks in der lokalen Zustandsdichte) abhängt, impliziert eine Verschiebung des chemischen Potentials bei konstanter Spannung somit eine spannungsmäßige Verschiebung der Kennlinie. Diesen Sachverhalt erkennt man in der Gl.(2.33): Mit dem chemischen Potential μ_L im Emitter und einer Resonanz bei E_0 in der Transmissions-Wahrscheinlichkeit $P(E)$ ist die Erfüllung der Bedingung $E_0 - \mu_L = 0$ gleichbedeutend mit dem Auftreten einer Stufen-Struktur in der Strom-Spannungs-Kennlinie. Sei also $E_0 - \mu_L = f(U)$ der bijektive funktionale Zusammenhang, so machen sich Abhängigkeiten $E_0(B)$ und $\mu_L(B)$ von B spannungsmäßig in entgegengesetzter Richtung bemerkbar.

Ein weiterer wichtiger Einfluß der Reservoirs auf die Strom-Spannungskennlinie läßt sich anhand des Imaginärteils $-\Gamma/2$ der Kopplungs-Selbstenergie der Gl.(2.28) ablesen. Bei der Herleitung der analytischen Ausdrücke zur Selbstenergie (Gl.(2.29)) wurde eine spezielle (vereinfachte) Bandstruktur ϵ_k mit zugehörigen Kopplungstermen t_k angenommen (siehe Gl.(2.14) und Gl.(2.15)). In realistischen Systemen bei der experimentellen Untersuchung werden jedoch sicherlich feinstrukturierte Abweichungen (aufgrund von Störstellen in Barrierennähe beispielsweise) in Γ zu Tage treten und sich über die Gl.(2.33) in der Strom-Spannungs-Kennlinie widerspiegeln. Wie man zeigen kann (s. Anhang A in [17]), handelt es sich bei dem Ausdruck Γ um das Produkt aus lokaler Zustandsdichte des letzten Elementes der Tight-Binding-Kette des Reservoirs und dem Quadrat des (reellen) Hopping-Matrixelementes zum Quantendot, so daß man, ausgehend von diesem einfachen Modell, in Γ im allgemeinen Zustandsdichte- und Kopplungsfluktuationen

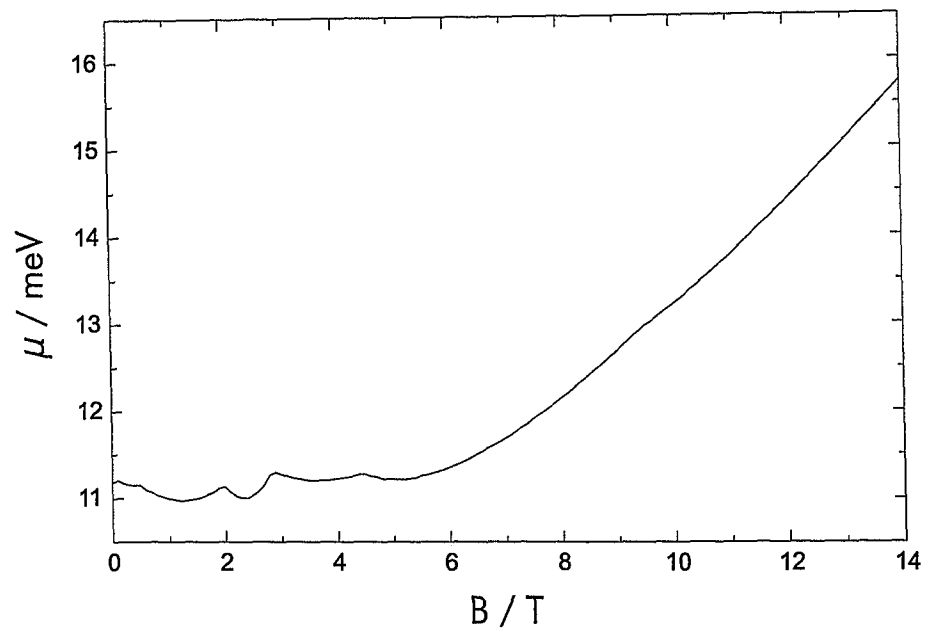


Abb.2.7: Abhängigkeit des chemischen Potentials μ vom äußeren, parallelen Magnetfeld in einem eindimensionalen Elektronengas. Die Zahl der Elektronen pro Länge und Spin wurde zu $n' = 100 \mu\text{m}^{-1}$ angenommen, die effektive Masse zu $m^* = 0,067m_e$ und die laterale Quantisierungsenergie zu $\hbar\omega_0 = 3,7 \text{ meV}$ ($T = 10\text{mK}$).

der Reservoirs beobachten kann. Tatsächlich wurden solche charakteristischen Strukturen experimentell in Kennlinien gefunden, dazu siehe die Einelektronen-Experimente im Kap. 5.2 (und beispielsweise [12]).

In vielen Fällen hochdotierter Zuleitungsgebiete als Reservoirs kommt es aufgrund der hohen Streuraten zu einer erheblichen Verbreiterung der diskreten Subbandniveaus in der Zustandsdichte. Dieser Situation kann Rechnung getragen werden in Form einer dissipativen Selbstenergie, wie sie im Kap. 2.2.2 zum Büttiker-Ansatz näher betrachtet wird.

2.3.6 Beispiele

In diesem Abschnitt sollen einige wichtige physikalische Aussagen über Quantendot-Systeme anhand von typischen Beispielen aufgezeigt werden. Es handelt sich dabei um Simulation auf der Basis der Modelle aus Kap. 2.3 mit dem dazu entwickelten Computerprogramm [57].

Zunächst zeigt die Abb. 2.8 (oben) eine simulierte Teilchenzahl-Kennlinie, bei der die Gesamtelektronenzahl als Funktion des chemischen Potentials berechnet wurde. Die Strukturparameter wurden dabei in Anlehnung an den experimentellen Teil (Kap. 3 und Kap. 5) gewählt. Die Ausdehnung der Einteilchen-Wellenfunktion zwischen den beiden Tunnelbarrieren wurde zu $z_0=17$ nm angenommen, was sich aus der nominellen Topfbreite von 14 nm und einer linear extrapolierten Eindringtiefe von 1,5 nm in die Barrieren hinein ergibt. Lateral nehmen wir hier ein 2D-harmonisches Potential an, in diesem Beispiel bei einer lateralen Quantisierungsenergie von $E_{lat} \equiv \hbar\omega_0=1$ meV. Die relative Dielektrizitätskonstante wurde zu $\epsilon_r=13,1$ angenommen, wobei die Temperatur mit $T=60$ mK eine vernachlässigbar kleine thermische Aufweitung ergibt. Bei der gewählten Emitter-Barrierendicke von 4,5 nm und einer Lokalisierung der Wellenfunktion in der Nähe der Topfmitte, beträgt die Wechselwirkungsenergie zu den Elektronenreservoirs bei einem Querschnitt von $(500 \text{ nm})^2$ ca. $30 \mu\text{eV}$, was wir hier vernachlässigen wollen. (Das Kollektor-Reservoir mit 6 nm Barriere ist dagegen sowieso über eine Länge von einigen 10 nm verarmt.) Bei einer Lage der Bindungszustände bezüglich der z-Richtung zwischen beiden Barrieren bei $E_0=19,7$ meV und $E_1=71,8$ meV (aus der Beispiel-Simulation in Kap. 2.2.1) ist die Betrachtung nur eines Quasibindungszustandes E_0 in einem energetischen Bereich von $\Delta\mu=52,1$ meV zulässig, was im folgenden berücksichtigt wird. Die Dimension des Einteilchen-Raumes betrug 18 und des projizierten Fockraumes 256 (512 bei kleinen E_{lat}) bei den Simulationen zur Abb. 2.8, so daß der Fehler bei kleiner Elektronenzahl unter 5% liegt.

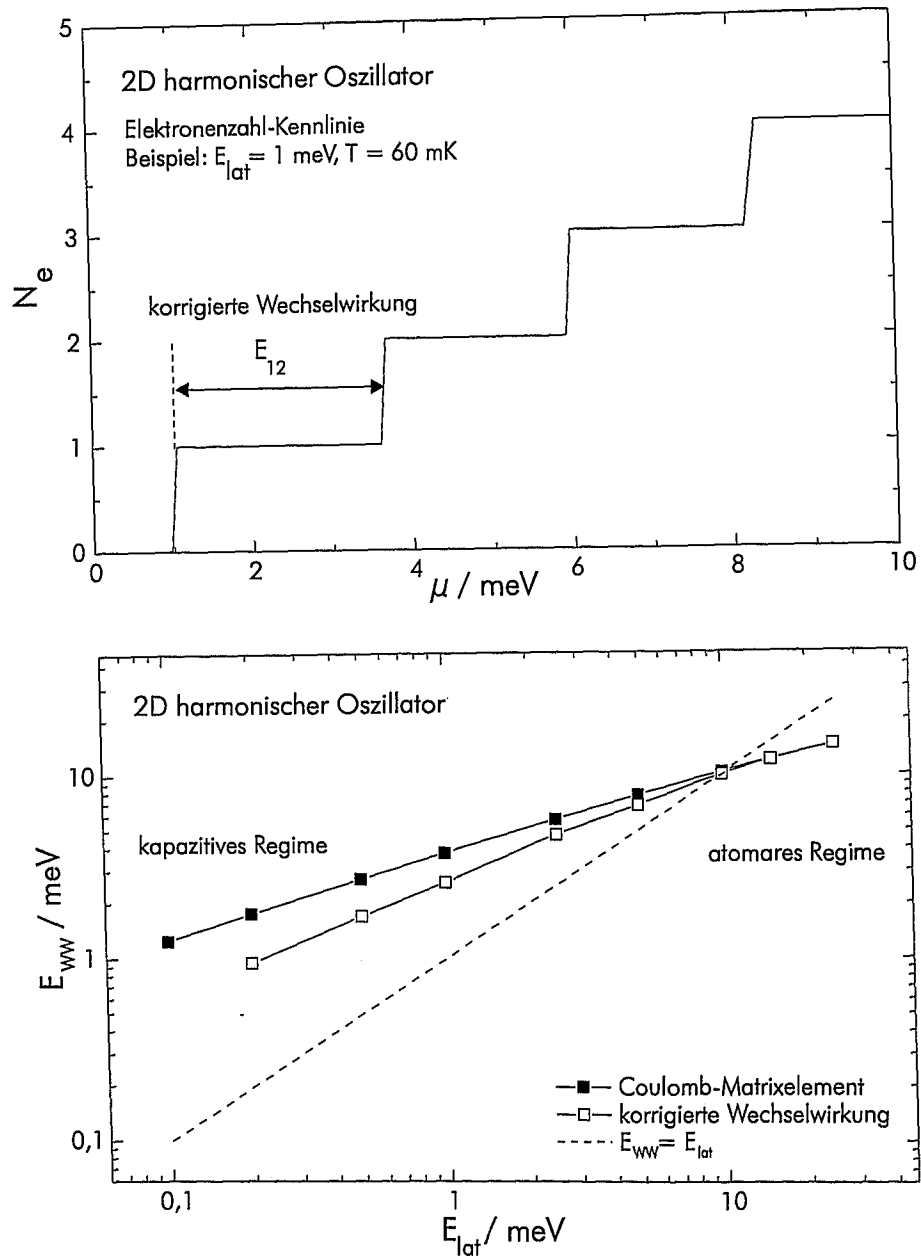


Abb.2.8: Oberes Diagramm: Exemplarische Teilchenzahl-Kennlinie in einem 2D harmonischen Oszillator und einer Potentialtopfbreite von $z_0 \approx 17 \text{ nm}$ bei $T = 60 \text{ mK}$. Unteres Diagramm: Wechselwirkungsenergien E_{WW} als Funktion der lateralen Quantisierungsenergie E_{lat} . Im "kapazitiven Regime" kleiner lateraler Quantisierungsenergien weicht die vielteilchen-korrigierte Wechselwirkung der ersten beiden Elektronen immer stärker vom Grundzustands-Coulomb-Matrixelement C_{0000} ab. Außerdem ist dort E_{WW} größer als E_{lat} im Gegensatz zum "atomaren Regime".

Tab.2.2: Wechselwirkungsenergien im 2D harmonischen Potential

z_0 =Potentialtopfbreite=17 nm (fest) E_{lat} =laterale Quantisierungsenergie ($\equiv \hbar\omega_0$) x_0 =laterale charakteristische Länge ($\equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m^*\omega_0}}$) C_{0000} =Grundzustands-Coulomb-Matrixelement E_{12} =korrigierte Wechselwirkungsenergie der ersten beiden Elektronen			
E_{lat}/meV	x_0/nm	C_{0000}/meV	E_{12}/meV
25,0	6,75	14,55	14,5
15,0	8,72	12,03	12,0
10,0	10,7	10,26	10,0
5,0	15,1	7,723	6,8
2,5	21,3	5,708	4,7
1,0	33,8	3,773	2,6
0,5	47,7	2,712	1,7
0,2	75,5	1,755	0,95

Aus der ersten Stufenbreite E_{12} der Abb. 2.8 beim Übergang von einem zu zwei Elektronen kann man die Wechselwirkung der ersten beiden Elektronen ablesen. Für verschiedene Werte von E_{lat} wurde nun diese Stufenbreite berechnet. Die sich so ergebenden Werte sind in der Tabelle Tab. 2.2 aufgeführt, wobei zusätzlich auch das Coulomb-Matrixelement C_{0000} für zwei Elektronen im Grundzustand mit entgegengesetztem Spin angegeben ist. In der Abb. 2.8 (unten) ist der funktionale Zusammenhang dieser Größen aufgetragen. Wie man augenscheinlich erkennen kann, liegt die Wechselwirkungsenergie E_{12} der beiden ersten Elektronen immer unterhalb von C_{0000} , und zwar umso mehr, je kleiner die Quantisierungsenergie E_{lat} ist, d.h. je größer die laterale Abmessung ist. Um dies verstehen zu können, betrachten wir nun zunächst den Zusammenhang zwischen E_{lat} und C_{0000} .

Oberhalb einer gewissen Quantisierungsenergie $E_{lat} \simeq 10$ meV liegt E_{lat} oberhalb von C_{0000} , für kleinere E_{lat} dagegen immer unterhalb von C_{0000} und E_{12} . Dies ist zu verstehen bei Betrachtung des Skalierungs-Verhaltens unter Veränderung der lateralen Längenausdehnung x_0 . Bekannterweise gilt $E_{lat} = \hbar^2/(m^*x_0^2)$, also $E_{lat} \propto x_0^{-2}$. Für große x_0 gilt ferner $C_{0000} \propto x_0^{-1}$ und somit $C_{0000} \propto E_{lat}^{1/2}$, was auch in der Steigung der doppeltlogarithmischen Darstellung in der Abb. 2.8 ablesbar ist. Offensichtlich ist im Bereich großer E_{lat} , wo die Wechselwirkungsenergie kleiner als der Niveauabstand E_{lat} ist, die energetisch günstigste Konfiguration zweier Elektronen die Besetzung des Einteilchen-Grundzustandes mit entgegengesetztem Spin, so daß dort $E_{12} = C_{0000}$ gilt. Wir wollen dies als "atomares Regime" bezeichnen. Im Gegensatz dazu ist im Bereich kleiner E_{lat} innerhalb eines Wechselwirkungsenergie-Intervalls immer eine Vielzahl von Einteilchenniveaus vorhanden. Da die Coulomb-Matrixelemente für höhere laterale Niveaus in ihrer Größe abnehmen, ist es hier energetisch günstiger, eine Konfiguration mehrerer höherer Einteilchenniveaus bei der Besetzung mit zwei (oder mehr) Elektronen einzunehmen. Daher ist die somit "vierteilchen-korrigierte" Wechselwirkungsenergie E_{12} kleiner als C_{0000} . Wir wollen dies

als "kapazitives Regime" bezeichnen, in Anlehnung an einen klassischen Kondensator, bei dem sich die Ladungen an der Oberfläche verteilen. Hier strebt es, anschaulich gesprochen, die Elektronen auch auseinander in Form einer Teilbesetzung höherer Einteilchen-Niveaus, die lateral weiter ausgedehnt sind ($x_j \propto \sqrt{2j+1}$). Diese höheren Niveaus haben daher kleinere Wechselwirkungsenergien, wobei die in Kauf genommene höhere Einteilchenenergie mehr als kompensiert wird. (Die Erwartungswerte der Besetzungszahl-Operatoren der einzelnen Einteilchen-Niveaus im Vielteilchen-Zustand sind hier nicht dargestellt, spiegeln dieses Verhalten aber quantitativ wider.)

Wir wollen die Charakteristika der beiden Quantendot-Regime an Hand zweier weiterer Beispiele jetzt näher betrachten.

Atomares Regime: $E_{lat} \geq C_{0000}$

In der Abb. 2.9 (oben) ist die Lage der Teilchenzahlstufen als Funktion des chemischen Potentials und eines äußeren Magnetfeldes für einen fiktiven Quantendot aufgetragen. Ein solches System im atomaren Regime bedarf experimentell einer extremen lateralen Einschnürung von unter 10 nm, damit die Wechselwirkungsenergie kleiner als die laterale Quantisierungsenergie wird. Die Parameter des Beispiels hier ($E_{lat}=10$ meV, $\epsilon_r=50$) sind daher fiktiv und dienen nur der Verdeutlichung von typischen Effekten des atomaren Regimes. Man erkennt deutlich den charakteristischen Verlauf der Einteilchen-Niveaus eines 2D-harmonischen Oszillators im Magnetfeld wieder (siehe hierzu die Gl.(2.99) und [53]), die im Spin um die Wechselwirkungsenergien aufgespalten sind. Der Spinsplit im Magnetfeld ist hier bei $g^*=0,44$ nicht sichtbar. Besonders interessant und typisch für dieses Regime ist das Verhalten am 4-Level-Anticrossingpunkt, der genauer in Abb. 2.9 (unten) dargestellt ist, in dieser Abbildung ist zusätzlich der Gesamtspin als Graustufen eingezeichnet. Es handelt sich hierbei um einen Entartungspunkt der Einteilchen-Niveaus. Durch die Wechselwirkung kommt es zu einem Aufspalten mit sukzessiver Elektronenauffüllung. Mit Hilfe eines einfachen Orbital-Bildes in Abb. 2.9 (unten) läßt sich die Abfolge der Spinwerte ablesen. In der Nähe des Crossingpunktes ist eine Spin-Parallelstellung bevorzugt, da dort der Austauschterm der Wechselwirkung eine energetische Absenkung hervorruft, die größer als der dortige Einteilchen-Niveauabstand ist.

Kapazitives Regime: $E_{lat} \ll C_{0000}$

Dieses Regime ist in quantenmechanischer Behandlung numerisch sehr aufwendig für kleiner werdende E_{lat} , da eine große Zahl an Einteilchen-Zuständen nötig wird bei der relativ großen Wechselwirkungsenergie C_{0000} . Wir wollen hier das realistische Beispiel der experimentell untersuchten Struktur unter der Annahme von $E_{lat}=1$ meV diskutieren. (Zur konsistenten Bestimmung dieses Wertes soll hier auf die experimentelle Auswertung im Kap. 5 verwiesen werden.) Bei den folgenden Simulationen betrug die Dimension des Einteilchen-Raumes 50 und die des projizierten Fockraumes 512 bis 1024. Die übrigen Parameter entsprechen denen des obigen Beispiels zur Abb. 2.8.

In der Abb. 2.10 (oben) sind wiederum die Magnetotransport-Stufen graphisch dargestellt. Typischerweise tritt hier für den Verlauf der ersten Stufe wieder die Einteilchen-Energie des 2D-

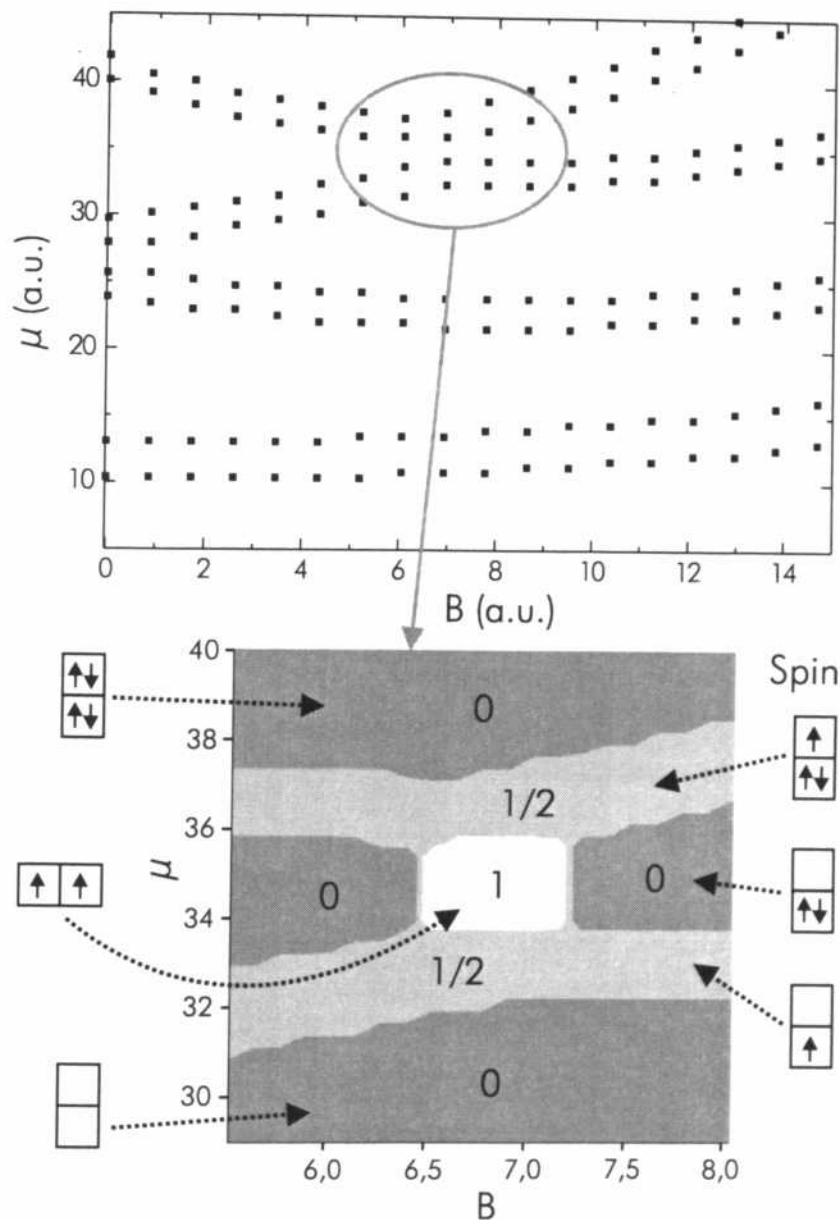


Abb.2.9: Magnetotransport im atomaren Regime. Oberes Diagramm: Position der simulierten Teilchenzahlstufen als Funktion des chemischen Potentials und des äußeren Magnetfeldes in einem 2D harmonischen Oszillator. (Die Einheiten sind exemplarisch.) Man erkennt die typischen Verläufe der Einteilchenenergien des 2D harmonischen Oszillators im Magnetfeld wieder, wobei die Spinentartung durch die kleine Wechselwirkung aufgehoben ist. Das "Anticrossing" von vier Stufen ist im unteren Diagramm im Detail dargestellt mit Gesamtspin als Graustufen. Die symbolischen Orbitalbilder geben sehr vereinfacht die Vielteilchen-Zustände an. Man beachte die Spin-Parallelstellung aufgrund von Austauschtermen in der Nähe des Einteilchen-Entartungspunktes.

harmonischen Oszillators im Magnetfeld auf. Alle weiteren Stufen folgen jedoch in einem näherungsweise parallelen Verlauf mit wachsendem Magnetfeld. Weiterhin sind die einzelnen Stufenabstände relativ ähnlich in ihren Werten. Diese beiden Eigenschaften charakterisieren das kapazitive Regime. Weiterhin ist in der Abb. 2.10 (unten) der zugehörige Spinverlauf in einem Graustufen-Diagramm dargestellt. Auffällig ist hier die vollständige Polarisierung der Elektronenspins im Magnetfeld, welche aufgrund der Austauschterme der Wechselwirkung, die hier wesentlich größer als die Einteilchenniveau-Abstände sind, energetisch bevorzugt ist. (Die Störung im oberen Bildrand bei 5 Elektronen ist ein Artefakt der Projektion im Fockraum.) Bei kleinerer Simulations-Schrittweite in E_{cycl} ist für $B \rightarrow 0$ in den ersten Stufen noch die monoton wachsende Ausrichtung des Spins mit dem Magnetfeld bis zur Sättigung gut zu erkennen.

Für einen realistischen Anreicherungs-Quantendot im kapazitiven Regime bietet sich aufgrund der hier mittels quantenmechanischer Vielteilchen-Simulation gezeigten Eigenschaften die klassische Beschreibung mit Hilfe eines Kapazitätsmodells [58] mit Ladungsquantisierung an. Die Kapazität wird dabei aus E_{12} der Vielteilchen-Simulation definiert über $V_{Dot} := E_{12}$ in der Gl.(2.50).

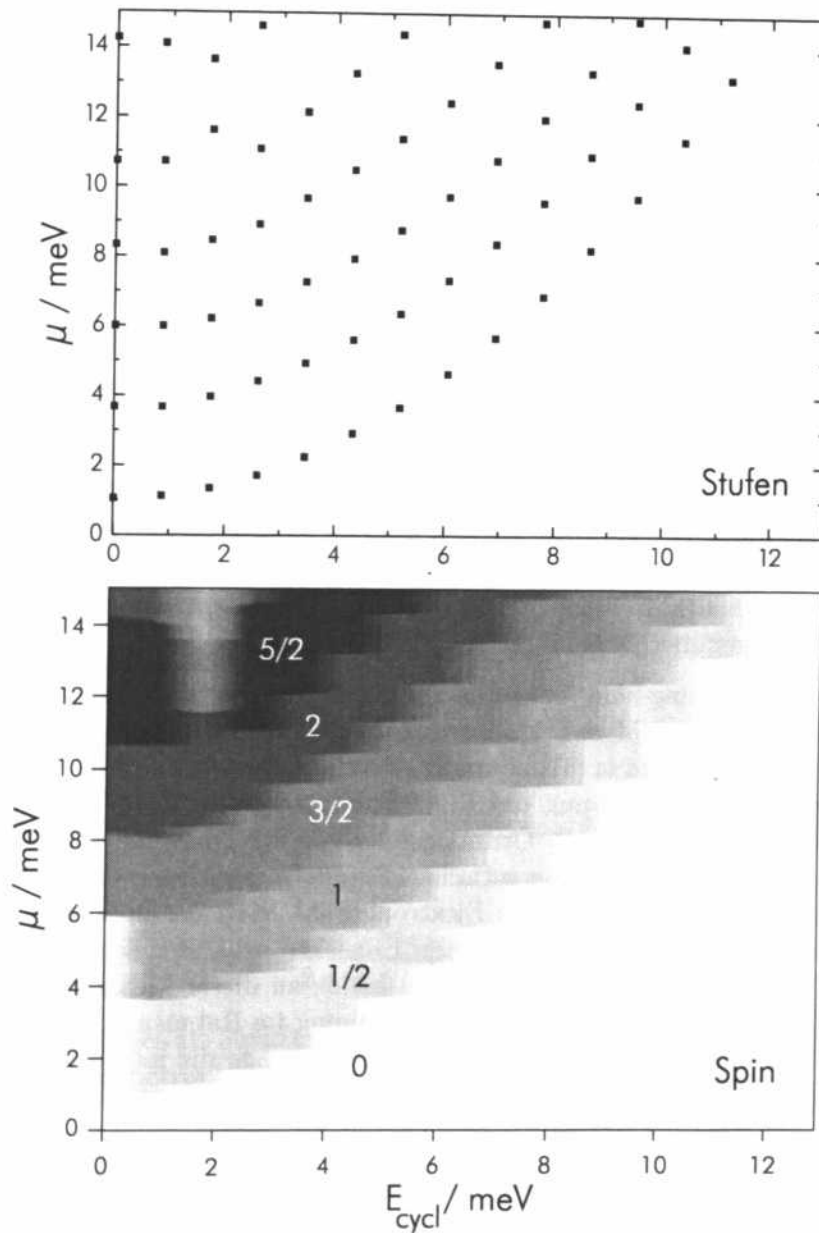


Abb.2.10: Magnetotransport im kapazitiven Regime. Oberes Diagramm: Position der simulierten Teilchenzahlstufen als Funktion des chemischen Potentials und des äußeren Magnetfeldes ($E_{cycl} = \hbar e B / m^*$) in einem 2D harmonischen Oszillator mit einer lateralen Quantisierungsenergie von $E_{lat} \equiv \hbar \omega_0 = 1$ meV. Unteres Diagramm: Gesamtspin als Graustufenplot. Aufgrund der Austauschterme und der kleinen lateralen Quantisierungsenergie im Vergleich zu den Wechselwirkungstermen dieses Regimes kommt es zu einer bevorzugten Spin-Parallelstellung im Magnetfeld. (Die unsauberen Kanten resultieren aus der Schrittweite der Simulation.)

2.4 Hysteresis-Effekte

In diesem Abschnitt soll die Wirkung einer Wechselwirkung im System einmal unter einem anderen Blickwinkel beleuchtet werden. Wie in den obigen Betrachtungen abgeleitet wurde, kommt es unter expliziter Einbeziehung der Elektron-Elektron-Wechselwirkung im Anreicherungsfall zu einem sukzessiven Auffüllen des Systems mit einzelnen Elektronen ("Single-electron-steps"). Mathematisch kommt die Wechselwirkung in Form einer Generation zusätzlicher, höherenergetischer Resonanzen in der Zustandsdichte zum Ausdruck [17]. Die mit obigen Methoden errechneten Kennlinien sind bei endlichen Temperaturen immer stetig und reversibel (d.h. keine Abhängigkeit von der "Vorgeschichte"). Wie im experimentellen Teil dieser Arbeit (Kap. 5) gezeigt wird, entspricht dieses Verhalten genau den Beobachtungen an einzelnen mesoskopischen Einelektronenstrukturen.

Das Verblüffende ist jedoch dem gegenüber die experimentelle Bestätigung von Hysteresis-Effekten (d.h. irreversiblen und unstetigen Kennlinien) aufgrund von Wechselwirkung in makroskopischen Tunneldioden (bekannt als "intrinsische Bistabilität") [59] oder Arrays wechselwirkender Einelektronenstrukturen [60]. Offensichtlich läßt sich der erste Fall makroskopischer Dioden (d.h. mit effektiven Flächen größer als einige μm^2) einfach auf den zweiten Fall eines Arrays zurückführen unter der plausiblen Annahme, daß es sich dabei um eine "inkohärente" Parallelschaltung einer Vielzahl kleinerer Dioden mit kapazitiver Wechselwirkung untereinander handelt. Wir wollen nun in einem Modell verdeutlichen, in welchen Fällen die Wechselwirkung zu stetigen Einelektronenstufen und wann demgegenüber Bistabilitäten auftreten sollten.

Eine wesentliche Voraussetzung zum Auftreten von Hysteresen in Simulationen von Quantensystemen ist die Einführung einer Meanfieldnäherung für die Wechselwirkungsterme (z.B. in Form der Hartree-Näherung). Dies wird in [61] besonders deutlich. Dort wurde eine Meanfieldnäherung schon in 1. Ordnung zur Beschreibung des Einelektronentunnels mit Wechselwirkung vorgenommen (im Gegensatz zur Theorie 2. Ordnung oder gar der Dichtematrix-Berechnung). Mathematisch äußert sich dies in einer energetischen Parallelverschiebung der Resonanzen in der Zustandsdichte, abhängig von der mittleren Elektronenzahl. Statt der in höherer Ordnung theoretisch ermittelten und experimentell verifizierten Einelektronenstufen sagt diese Näherung das Auftreten einer Hysteresis-Kennlinie voraus. Ganz analog zu dieser Meanfieldnäherung 1. Ordnung ist die selbstkonsistente Potentialverlaufs-Berechnung im Rahmen einer Hartree-Näherung in makroskopischen Tunneldioden zu sehen, welche aber gerade die intrinsischen Bistabilitäten vorhersagt. Wir wollen nun erläutern, welchen physikalischen Hintergrund eine Meanfieldnäherung hat.

Wie sich einfach zeigen läßt, können in endlichen Quantensystemen (beschrieben durch eine Dichtematrix) nur im thermodynamischen Limes (d.h. Teilchzahl $\rightarrow \infty$) Unstetigkeiten in Responsefunktionen (grob gesprochen: Phasenübergänge) auftreten. In diesem Sinne ist die Einführung obiger Meanfieldnäherungen zu verstehen, bei denen sich das Elektron, anschaulich gesprochen, in einem mittleren Feld der anderen aufhält. Charakteristisch für die Einführung dieses Feldes ist die Entfernung jeglicher Fluktuationen der korrespondierenden Observablen. Anschaulich läßt sich dies als Zwischenschaltung eines dämpfenden Reservoirs (unendlich vieler Teilchen) interpretieren. Die Meanfieldnäherung beschreibt also ein physikalisch erweitertes System. Ein einfaches

Modellsystem soll diese Überlegungen nun quantitativ untermauern.

Wir betrachten den Hamiltonoperator eines selbstwechselwirkenden Dipols, vorstellbar als System zweier Einelektronenzustände in einem positiven Jellium ("2 Elektronen-Flip-Flop").

$$H = -aP^2 + bP \quad (2.103)$$

mit $a, b > 0$. a gibt die Stärke der positiven Rückkopplung an, wobei b als externes Feld interpretiert werden kann. Der Dipoloperator P ist dabei definiert als

$$P = N_1 - N_2 \quad (2.104)$$

mit den Teilchenzahloperatoren N_1 und N_2 für zwei Einteilchenzustände 1 und 2. Wir haben also einen vierdimensionalen Zustandsraum, aufgespannt durch die Basis

$$\{|0, 0\rangle, |0, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, 1\rangle\} \quad (2.105)$$

mit den Besetzungszahlen als Indizes. Als Dichtematrix ρ haben wir im folgenden immer

$$\rho = \frac{1}{Z} \exp(-\beta H) \quad (2.106)$$

mit der Zustandssumme Z und $\beta = \frac{1}{k_B T}$.

Analytische Lösung

Für den Hamiltonoperator H läßt sich der Erwartungswert des Dipols $\langle P \rangle = \text{Tr}(\rho P)$ sofort angeben:

$$\langle P \rangle = \frac{\exp \beta(a - b) - \exp \beta(a + b)}{2 + \exp \beta(a - b) + \exp \beta(a + b)}. \quad (2.107)$$

Man sieht sofort, daß dies als Funktion des äußeren Feldes b stetig differenzierbar, streng monoton fallend und punktsymmetrisch ($\langle P \rangle(-b) = -\langle P \rangle(b)$) ist. Weiterhin gilt $|\langle P \rangle| < 1$ und im Limes $b \rightarrow \infty$ folgt $\langle P \rangle \rightarrow -1$. (Nur im Limes $T \rightarrow 0$ wird diese Funktion in $b = 0$ unstetig.) Wichtig hierbei ist, daß zu jedem b genau ein $\langle P \rangle$ existiert, insbesondere ist $\langle P \rangle(b = 0) = 0$. (Der qualitative Verlauf entspricht dem oberen Bild in Abb. 2.11.)

Meanfieldansatz

Wir wollen nun den meanfield-genäherten Hamiltonoperator

$$\tilde{H} = -a\langle P \rangle P + bP \quad (2.108)$$

betrachten. Man erhält analog zu oben:

$$p(x) := \langle P \rangle = \frac{\exp(x) - \exp(-x)}{2 + \exp(x) + \exp(-x)} \quad \text{mit} \quad x = \beta(ap - b). \quad (2.109)$$

Man beachte, daß x wiederum von p abhängt. Bei einem gegebenen äußeren Feld b kann man nun die Menge aller Lösungen p bestimmen. Im Gegensatz zur Lösung ohne Meanfielnnäherung (s.o.) ist p im allgemeinen nicht eindeutig. Uns interessiert nun die Stelle $b = 0$. Mit $\frac{dp(x)}{dx}(b = 0) = \frac{1}{2}$ muß man folgende Fälle unterscheiden:

- $\beta a < 2$ (große T):
Es existiert genau eine Lösung $p = 0$. Der Kurvenverlauf nähert sich der exakten Lösung (s.o.).
- $\beta a > 2$ (kleine T):
Es existieren 3 Lösungen: $p = 0, p = \pm p_0 \neq 0$

Der Verlauf der Lösungen ist in Abb. 2.11 dargestellt. Man beachte dabei, daß der innere Teil metastabil ist und daher experimentell eine äußere Hystereseschleife zu beobachten ist. Es tritt ein Phasenübergang auf, der bei $\beta a = 2$ liegt.

Man kann die obigen Überlegungen allgemeiner formulieren unter Zuhilfenahme des Fluktuationsoperators $\Delta P := P - \langle P \rangle$:

$$H_\alpha = -a(\langle P \rangle P + \alpha P \Delta P) + bP \quad \text{mit} \quad 0 \leq \alpha \leq 1. \quad (2.110)$$

Die obigen Grenzfälle (exakter Hamilton Operator H und vollständige Meanfielnnäherung $\tilde{H}$) ergeben sich dann als Spezialfälle $\alpha = 1$ und $\alpha = 0$. Eine Lösung für $\langle P \rangle$ liefert dann in Abhängigkeit der "Einbeziehung von Fluktuationen" α Resultate analog zu obigen.

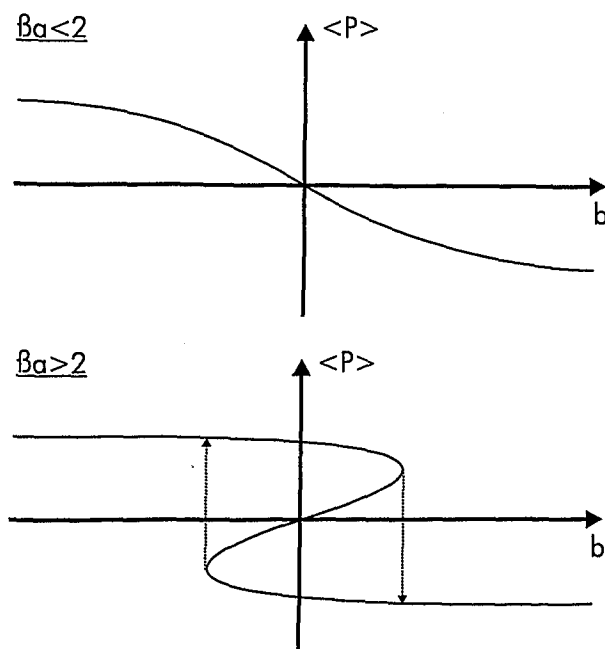


Abb.2.11: Lösungen zum Meanfield-Modellhamiltonoperator.

Kapitel 3

Technologie

Grundlage für die durchgeführten experimentellen Untersuchungen zum Einelektronentunneln bildet die Doppelbarrieren-Grundstruktur einer Resonanten Tunneldiode. Um eine dreidimensionale räumliche Einschränkung zu einem "Quantendot" oder "künstlichen Atom" zusätzlich zur Richtung senkrecht zu den beiden Barrieren zu erhalten, wird in dieser Arbeit ein Feldeffekt-Transistor mit einem allumschließenden lateralen Schottky-Gate (MESFET) in die Struktur mitintegriert. Die zweidimensionale Verarmungszone liefert somit das gewünschte bindende Einteilchenpotential.

Details eines solchen Bauelementkonzepts zur Grundlagenforschung werden nun in diesem Kapitel dargestellt. Die Diskussion der experimentellen Möglichkeiten und Ergebnisse folgt dann in den Kapiteln 4 und 5.

3.1 Strukturüberblick

Ausgangspunkt für die Präparation eines Einelektronen-Tunneltransistors bildet die in der Abb. 3.1 dargestellte Schichtabfolge der zu Grunde liegenden AlGaAs/GaAs Halbleiterheterostruktur. Die Grundlage für eine solche Struktur wurde in [62] gelegt, und in [4, 5] ist unter anderem eine Darstellung der in dieser Arbeit betrachteten Bauelemente zu finden.

Mittels Molekularstrahl-Epitaxie (MBE) auf III/V-Halbleiter-Basis wurde die Heterostruktur auf hoch n-dotiertem GaAs (100) Substrat epitaxiert ($n^+ = 1,25 \cdot 10^{18} \text{cm}^{-3}$). Zunächst befindet sich über dem Substrat eine Folge von n-dotierten Bereichen, welche das erste Elektronen-Reservoir darstellt: Eine 350 nm dicke hochdotierte $n^+ = 1,25 \cdot 10^{18} \text{cm}^{-3}$ Kontaktschicht, daran anschließend 28 nm $n = 1,0 \cdot 10^{17} \text{cm}^{-3}$ dotiertes Gebiet und schließlich die eigentliche Reservoir-Region mit einer Dotierung von $n^- = 2,0 \cdot 10^{16} \text{cm}^{-3}$ an der Grenze zum Barrieren-System.

Darauf folgend befindet sich nun die eigentliche Doppelbarrieren-Struktur der Resonanten Tunneldiode, die aus zwei $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ Barrieren mit einem eingeschlossenen Topf aus 14 nm GaAs besteht. Zwei 7 nm dicke, GaAs Spacerschichten umrahmen dieses Schichtpaket, das nominell undotiert ist. Ein solcher Spacer verhindert die Verschleppung von Dotierstoffatomen in die

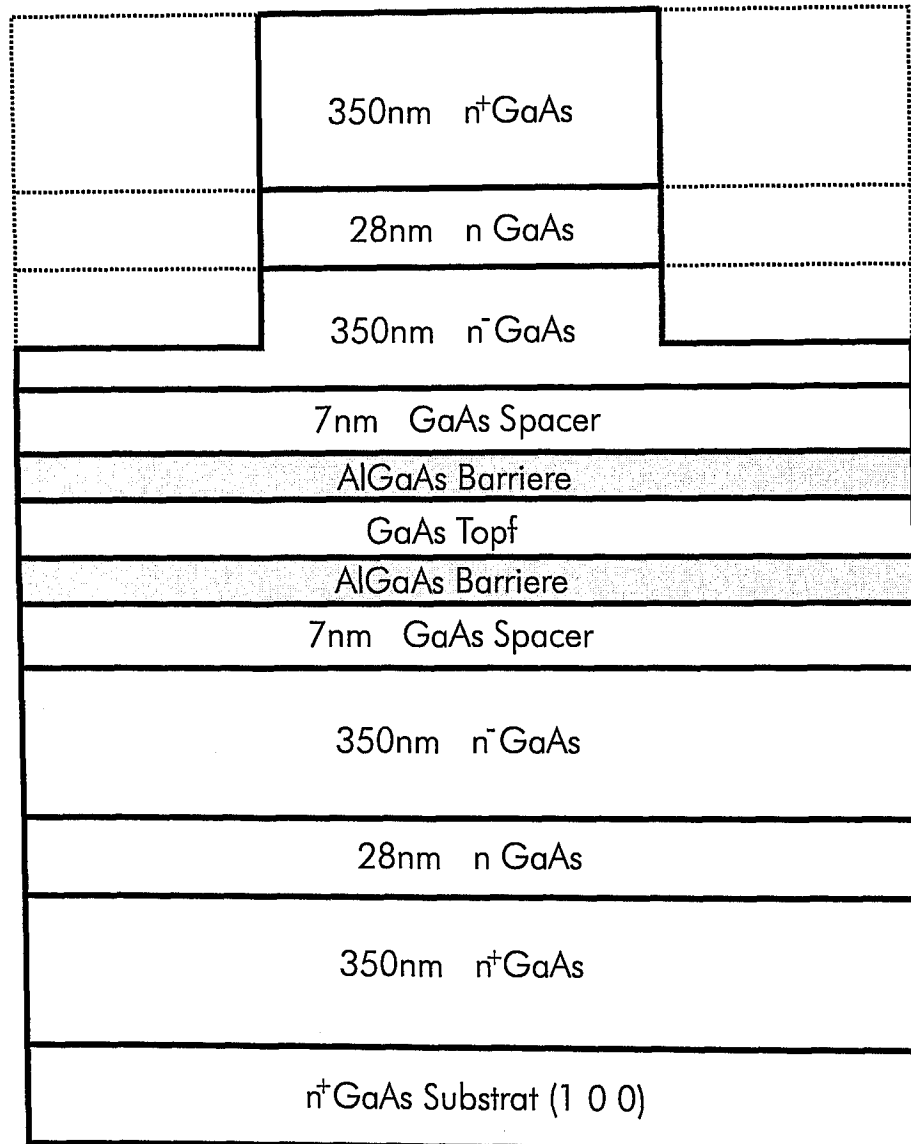


Abb.3.1: Die untersuchte Struktur: Epitaxie-Schichtabfolge. Die Lage der Flanken in der später durchzuführenden Mesa-Ätzung ist schon eingezeichnet. Die AlGaAs-Barrierenschichten sind 6,5 nm bzw. 4 nm dick und haben einen Al-Gehalt von 30% (zur Abfolge siehe Text). Der Quantentopf hat eine Dicke von 14 nm.

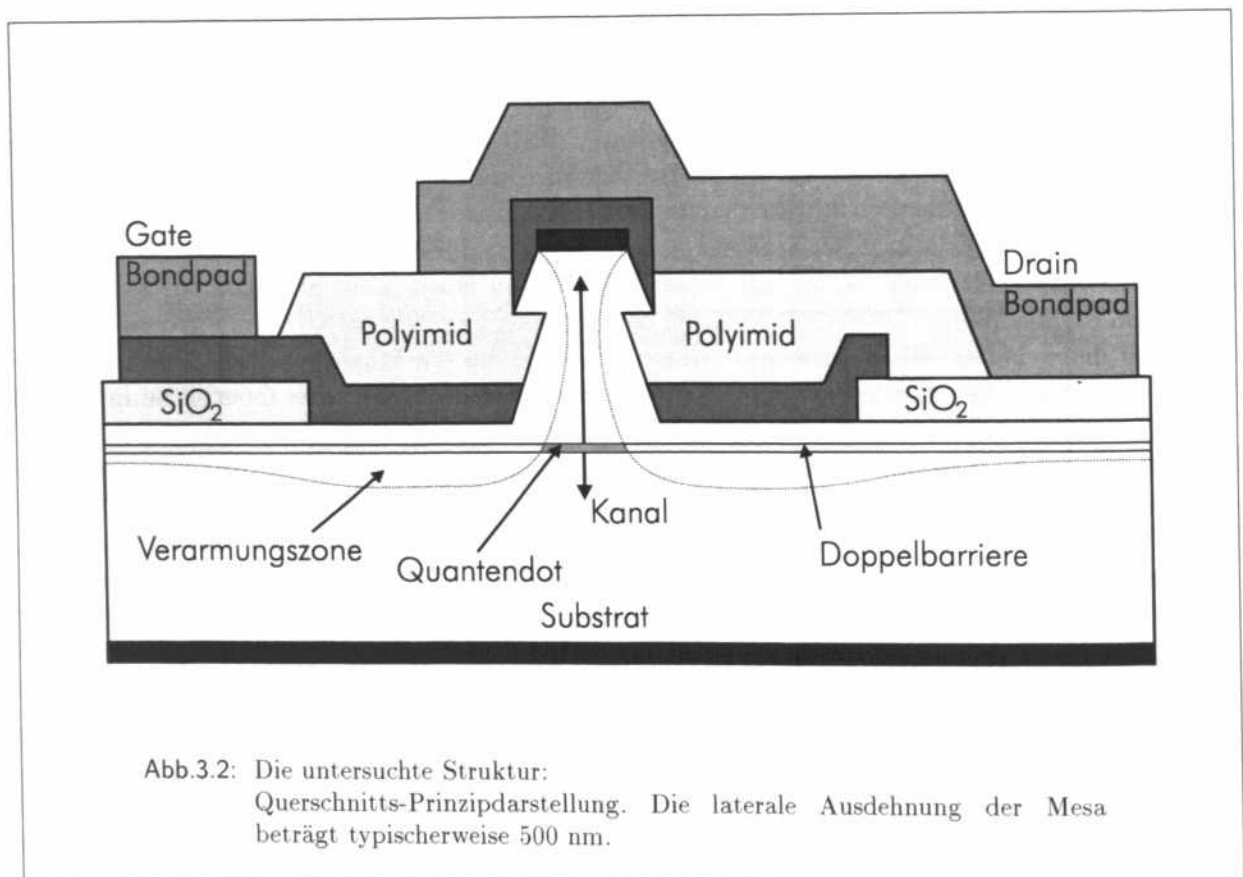
$$n^+ = 1,25 \cdot 10^{18} \text{cm}^{-3}, n = 1,0 \cdot 10^{17} \text{cm}^{-3}, n^- = 2,0 \cdot 10^{16} \text{cm}^{-3}.$$

Doppelbarrieren-Region von den angrenzenden, dotierten Reservoir-Regionen. Bei der Wahl der Barrierendicken wurde eine unsymmetrische Struktur zu Grunde gelegt, um den in dieser Arbeit untersuchten Fall der Elektronenanreicherung untersuchen zu können, wie dies im theoretischen Kap. 2 dargestellt wurde. Um bei einer positiven Spannung am Mesakontakt die Einelektronen-Messung (siehe Kap. 5) durchführen zu können, wurde die dickere Barriere obenliegend (d.h. kollektorseitig) gewählt.

Anschließend folgt nun dieselbe gespiegelte Reservoir-Schichtfolge. Die oberste Schicht ist also hochdotiert und bietet somit die Möglichkeit zum Einlegieren eines ohmschen Kontaktes.

Es handelt sich hier also im Prinzip um eine Resonante Tunneldiode. Um nun in einer solchen Struktur einen Quantendot zu realisieren, benötigt man zusätzlich zur räumlichen Einschränkung zwischen den beiden Tunnelbarrieren noch ein bindendes Potential in den beiden anderen Raumrichtungen, die wir im folgenden als laterale Richtung bezeichnen wollen. Eine solche laterale Einschränkung kann mittels einer Mesa-Ätzung durch die Barrieren hindurch erfolgen. Dieser Ansatz wurde entwickelt von [33, 63, 13, 64], er besitzt allerdings den Nachteil einer festen Geometrie nach Fertigstellung der Probe. Ein weitaus flexiblerer Ansatz, basierend auf einem zusätzlichen Schottky-Gate, wurde in [6, 7, 8, 9] vorgestellt. Darauf aufbauend wurde in dieser Arbeit eine Struktur entwickelt (siehe [4, 5]), die in der Abb. 3.2 im Querschnitt zu sehen ist. Man erkennt deutlich die Form einer geätzten Mesa, bei der allerdings die Doppelbarriere noch geschützt unterhalb der geätzten Oberfläche liegt. In der Abb. 3.1 ist die Lage der Ätzflanken genauer zu erkennen, wobei der Abstand zwischen oberer Barriere und der geätzten Oberfläche in unserem Fall 80 bis 100 nm beträgt. Die Hauptidee bei diesem Bauelement ist nun die selbstjustierende Deposition eines lateralen Schottky-Gates um die Mesa herum (siehe Abb. 3.2). Die sich ausbildende Verarmungszone führt zu einer allumschließenden lateralen Einschnürung im Bereich der Barrieren. Man erhält somit einen diskusförmigen Quantendot genau im Bereich der Doppelbarrieren, eingeschlossen von der Verarmungszone des Gates (siehe Abb. 3.2). Bei einem nominellen Durchmesser der Mesa von 500 nm und einem Barrierenabstand von 14 nm liegen die typischen Quantisierungsenergien der Einteilchenniveaus in der Größenordnung von 1 meV (siehe dazu die Kapitel 2 und 5).

Mit Hilfe des Schottky-Gates ist es nun möglich, den Potentialverlauf mittels einer anliegenden Gate-Spannung während des Experimentes zu variieren. Im Grundprinzip handelt es sich bei dem vorgestellten Bauelement um einen vertikalen MESFET (Metal-Semiconductor-Field-Effekt-Transistor) im Sub- μm Maßstab, denn der Elektronentransport bei einer anliegenden Spannung am Mesakontakt *Drain* findet im wesentlichen im Kanal senkrecht zur Wachstumsrichtung statt. Für die Abhängigkeit des Potentialverlaufes in der Verarmungszone von der Gate-Spannung ist die Dotierung n^- maßgeblich, wie aus der Abb. 3.1 ersichtlich ist. Der gewählte Wert von $n^- = 2,0 \cdot 10^{16} \text{cm}^{-3}$ stellt einen Kompromiß zwischen guter Steuerbarkeit (kleine Dotierung) durch das Schottky-Gate und kleinem Bahnwiderstand (große Dotierung) im unteren Mesabereich dar.



3.2 Probenpräparation

Nach dem Wachstum der im vorherigen Abschnitt angegebenen Schichten folgt nun die Strukturierung des GaAs-Wafers.

3.2.1 Elektronenstrahl-Lithographie und Mesa-Ätzung

Zunächst wird der Wafer in einem Standardschritt (Tab. 3.1) gereinigt. Dieser Schritt wird im folgenden immer wieder vor den einzelnen Lithographie-Abschnitten genutzt.

Tab.3.1: Reinigungsschritt
• 5 min in Aceton • 1 min in Propanol legen • mit N₂ trockenblasen

Für die Ätzung der Mesa mit einem nominellen Durchmesser von 500 nm wird die Elektronenstrahl-Lithographie benutzt. Nach dem Reinigungsschritt folgt nun also das Aufbringen eines Schichtsystems aus PMMA-Lack für die Elektronenstrahl-Lithographie. Alternativ stehen dabei ein Zweischichtsystem (Tab. 3.2) und ein Dreischichtsystem (Tab. 3.3) zur Verfügung.

Tab.3.2: PMMA Zweischichtlack
• 5 min auf der Heizplatte bei 115°C trocknen (zum Abdampfen von H₂O), • PMMA 200K mit 6000 rpm aufschleudern (ohne Vorbeschleunigung) • 90 min im Ofen bei 180°C tempern • PMMA 496K mit 6000 rpm aufschleudern (ohne Vorbeschleunigung) • 90 min im Ofen bei 180°C tempern • mit N₂ trockenblasen

Tab.3.3: PMMA Dreischichtlack

- 5 min auf der Heizplatte bei 115°C trocknen (zum Abdampfen von H₂O)
- PMMA 496K mit 6000 rpm aufschleudern (ohne Vorbeschleunigung)
- 10 min auf der Heizplatte bei 180°C tempern
- PMMA 200K mit 6000 rpm aufschleudern (ohne Vorbeschleunigung)
- 10 min auf der Heizplatte bei 180°C tempern
- PMMA 496K mit 6000 rpm aufschleudern (ohne Vorbeschleunigung)
- 10 min auf der Heizplatte bei 180°C tempern
- mit N₂ trockenblasen

Wegen der höheren Empfindlichkeit der tieferliegenden PMMA 200K-Schicht ergibt sich nach der Belichtung und Entwicklung ein besseres Lackprofil an den Lackflanken. Nun wird die Probe vom Elektronenstrahlschreiber belichtet mit einer strukturabhängigen Dosis, wie im folgenden noch erläutert wird. Bei der anschließenden Entwicklung werden die Schritte der Tab. 3.4 durchgeführt, welche für beide Lacksysteme identisch sind.

Tab.3.4: Entwicklung der PMMA Lacke

- 20 sec entwickeln in AR600-55
- 1 min in Propanol legen
- mit N₂ trockenblasen

Die einzustellende Elektronen-Dosis und die Entwicklungszeit sind voneinander und von der lateralen Struktur abhängig. Aus Erfahrungswerten für andere Strukturen wurde die Entwicklungszeit (siehe Tab. 3.4) festgesetzt und die Elektronen-Dosis wurde danach optimiert. Aus einer Dosistestserie von 200 bis 1000 $\mu\text{C}/\text{cm}^2$ wurde in [62] eine optimale Dosis von 450 $\mu\text{C}/\text{cm}^2$ für die größeren Strukturen (Justiermarken von 5 μm) gefunden. Für die Mesa mit einem nominellen Durchmesser von 500 nm ist aufgrund des Proximity-Effektes [65] die nötige Dosis wesentlich größer. Bei dem Proximity-Effekt handelt es sich kurz gesagt um den Effekt einer Elektronenstrahlaufweitung im Lack, der zu einer Verwaschung von feinen Strukturen und Ecken in der Lithographie führt. Unter Zuhilfenahme des Raster-Elektronen-Mikroskops (REM oder SEM) konnte dieser Einfluß quantitativ bestimmt werden. Für den realen Durchmesser d des Mesa-Kontakts (nominell 500

nm) in den nachfolgenden Präparationsschritten konnte folgende Beziehung in Abhängigkeit der Dosis D bestimmt werden [62]:

$$d = (515 \text{ nm} + 0,55 \cdot (D / \frac{\mu\text{C}}{\text{cm}^2} - 600) \text{ nm}) \pm 10\% \quad (3.1)$$

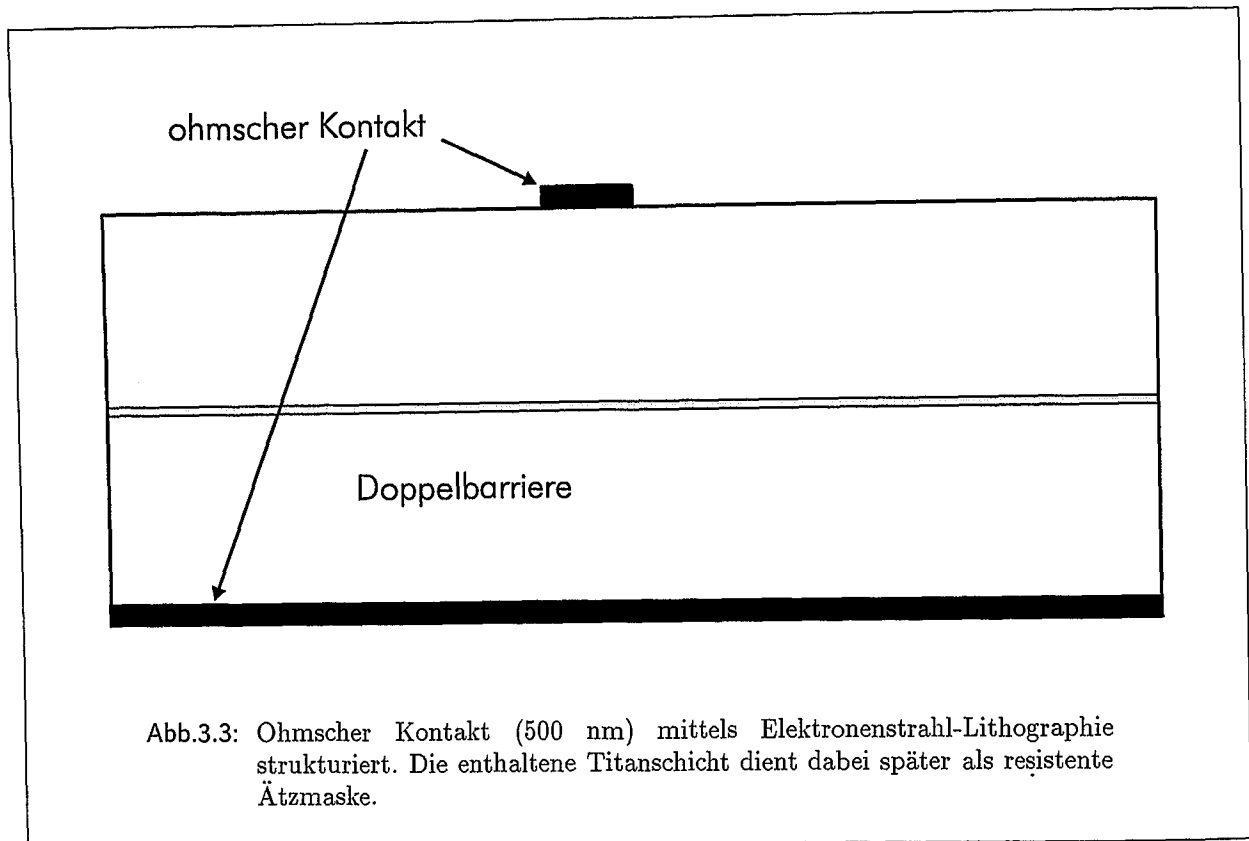
Als Dosis für die Mesa wurde dann $650 \mu\text{C}/\text{cm}^2$ gewählt, in den Ecken der quadratischen Mesa allerdings noch mit einer zusätzlichen numerischen Korrektur, die der Elektronenstrahl-Schreiber automatisch erledigte. Das Resultat ist eine durchgehende Lackschicht mit einzelnen quadratischen Öffnungen.

Im nachfolgenden Schritt wurde die Probe nun mit den Schichten in Tab. 3.5 für den ohmschen Kontakt der Mesa aufgedampft, wobei nur an den Elektronenstrahl-belichteten Öffnungen das Metall auf dem Halbleiter haften kann. Die Titanschicht dient dabei als Ätzmaske für die anschließende Mesa-Ätzung.

Tab.3.5: Ohmscher Kontakt und Ätzmaske auf Mesa

- 3 sec Sauerstoff-Plasma (200 W) zur Entfernung von Lackschleiern
- Ar-Sputtern: 500 V, 5 mA, 20 sec für einen besseren Kontakt
- Ni: 5 nm
- AuGe: 60 nm
- Ni: 15 nm
- Ti: 30 nm

Substratseitig kann an dieser Stelle ebenfalls der ohmsche Kontakt aufgebracht werden. Wie in Tab. 3.6 aufgeführt, weicht die dazu benötigte Schichtfolge nur geringfügig vom Mesakontakt ab. Zum einen wird die Titanschicht nicht benötigt, zum anderen ist die Gesamtschichtdicke wegen des ganzflächigen Kontaktes auf der Rückseite ohne Lift-Off nicht so kritisch. Es bietet sich auch die Alternative, den Rückseiten-Kontakt ganz am Schluß der Präparation aufzudampfen. In beiden Fällen sind die Halbleiteroberfläche und die vorhandenen lithographischen Strukturen unter Metall- bzw. Lackschichten geschützt.



Tab.3.6: Ohmscher Kontakt auf Rückseite (Substrat)

- Ar-Sputtern: 500 V, 5 mA, 20 sec für einen besseren Kontakt
- Ni: 5 nm
- AuGe: 90 nm
- Ni: 25 nm
- Au: 100-500 nm

Danach folgt der Lift-Off in Aceton. Um in den folgenden Schritten Aussagen über Ätztiefen machen zu können, wurden bei allen Aufdampfschritten die Metalldicken mit Hilfe eines Tiefenprofilers (Dektak) kontrolliert. Die Abb. 3.3 zeigt nun den ohmschen Kontakt für die Mesa, der gleichzeitig als Ätzmaske im folgenden dient. Zum Einlegieren des ohmschen Kontaktes folgt zum Ende der Präparation noch ein Tempersschritt (s.u.).

Nach diesem Prozeßschritt wurde die Mesa-Ätzung durchgeführt. Verwendet wurden dabei Proben mit Kantenlängen von ca. 1 cm. Zum Einsatz kam das reaktive Ionen-Ätzen (RIE) mit dem

in der Tab. 3.7 angegebenen Programm.

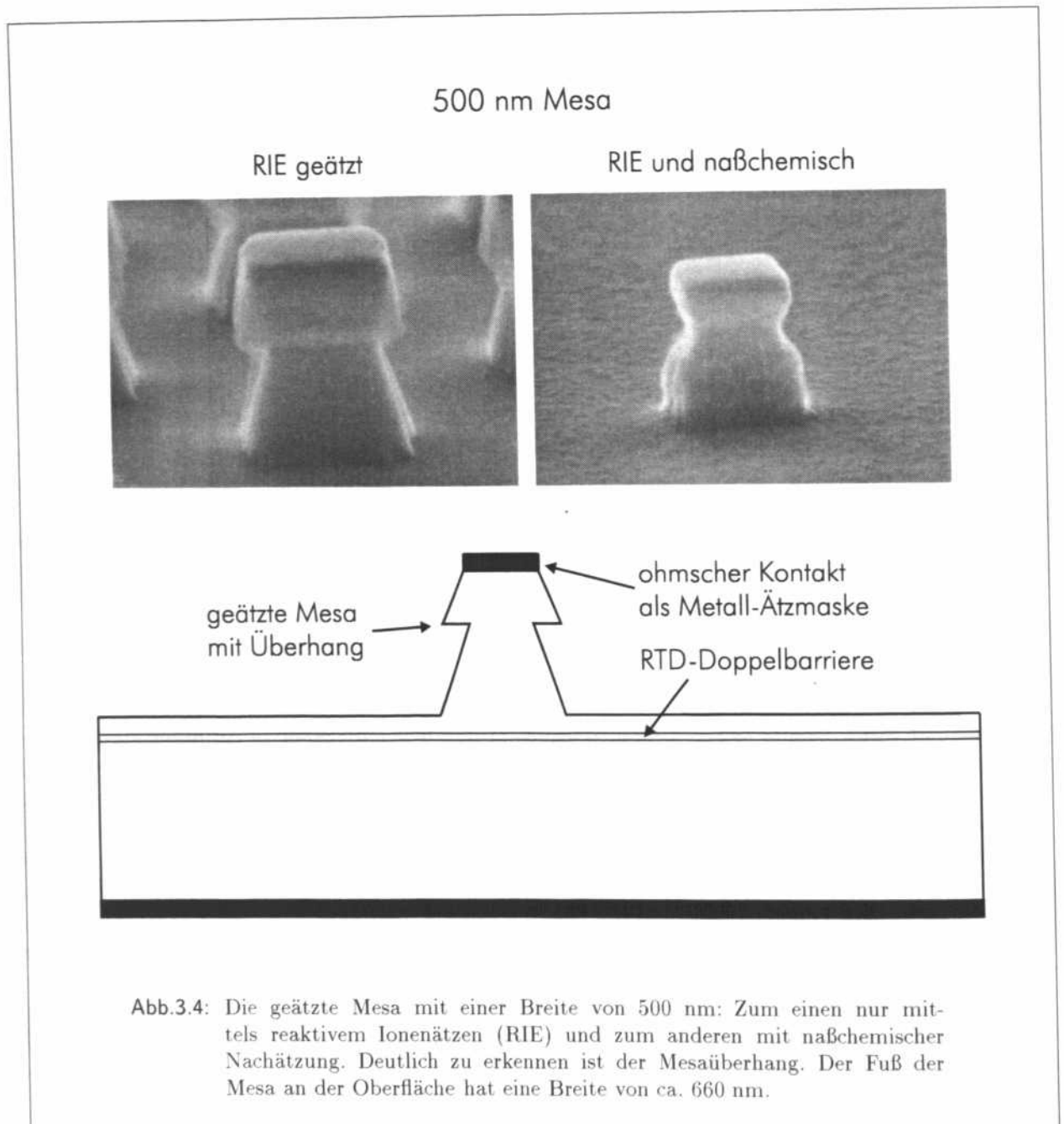
Tab.3.7: Prozeßparameter für die reaktive Ionenätzung (RIE) der Mesa

- evtl. 20 sec Lackentfernung im Sauerstoff-Plasma bei 200 W
- CH₄:H₂-Ätzung bei 300 W für 90 min bei einem Verhältnis der Volumenflüsse von 25:1 (die Partialdrücke hängen dann vom verwendeten Reaktor ab)
- Polymerentfernung im Sauerstoff-Plasma bei 200 W für 12 min

Die daraufhin gemessene Ätztiefe von $\simeq 1 \times 1 \text{ cm}^2$ großen Proben betrug im Mittel $650 \text{ nm} \pm 20 \text{ nm}$, das heißt, daß die Doppelbarriere sich nun $735 \text{ nm} - 650 \text{ nm} = 85 \text{ nm}$ im Mittel unterhalb der Oberfläche befindet und sicher in diesem Bereich verarmt ist (s. Abb. 3.2), da die Raumladungszone sich im n^- -Gebiet auf ca. 220 nm erstreckt bei einem Fermilevel-Pinning von 0,7 eV (siehe Kap. 5.1.2). Wie in [62] mittels einer zur Hälfte mit Lack bedeckten Titanschicht experimentell in einer Testätzung überprüft wurde, wird die Titanschicht um weniger als 10 nm angeätzt. Eine Schädigung des ohmschen Kontaktes (Tab. 3.5) ist somit ausgeschlossen. In der Abb. 3.4 ist der nach der Ätzung vorliegende Zustand der Probe dargestellt.

Das Photo in Abb. 3.4 zeigt außerdem einen kragenförmigen Überhang der Mesa im oberen Teil. Da dieser "Kragen" nach dem Tempern einer Testprobe in diesem Stadium noch vorhanden war, kann daraus geschlossen werden, daß es sich hierbei nicht um Metall des ohmschen Kontaktes handeln kann. Hierzu beachte man, daß das AuGe oberhalb einer bestimmten Temperatur flüssig wird. Die bei den chemischen Vorgängen während der Ätzung entstehenden Polymere sollten durch den O₂-Plasmaschritt (s. Tab. 3.7) entfernt werden. Eine plausible Erklärung für das Zustandekommen dieses Überhangs ist denmach, daß nach längerer Ätzzeit die sich bildenden schützenden Polymerschichten an den Mesaflanken abreißen und somit eine Unterätzung im unteren Teil der Mesa entsteht aufgrund der chemischen Komponente beim reaktiven Ionenätzen. Eine zweite Möglichkeit für die Zusammensetzung des Überhangs mag die Polymerschicht selbst darstellen. Die sich bildenden Polymere könnten soweit gehärtet sein, daß sie im nachfolgenden Sauerstoff-Plasma nicht mehr entfernt werden können. Man beachte, daß beim reaktiven Ionenätzen die elektrische Feldverteilung eine entscheidende Rolle spielt [66]. (Bei den prozessierten Proben wurde zur Erzielung obiger Strukturen ein isolierender Quarzteller bei einer Probengröße von ca. 1 cm^2 verwendet.)

Ebenfalls ist in der Abb. 3.4 eine Probe zu erkennen, bei der anschließend an den reaktiven Ionenätzschritt (RIE, Tab. 3.7) eine kurze naßchemische Ätzung durchgeführt wurde, wie in der Tab. 3.8 angegeben. Dieser optionale Prozeßschritt stellt eine Alternative zur Herstellung einer Unterätzung der Mesa dar, falls der RIE-Schritt allein nicht die gewünschte Unterätzung in Form eines "Kragens" liefert. Wie im folgenden noch gezeigt wird, bildet diese Unterätzung



eine wesentliche Voraussetzung zur selbstjustierenden Schottky-Gate-Aufdampfung. Eine solche naßchemische Nachätzung bietet also die Möglichkeit, die vorgestellte Prozeßfolge auf andere Halbleitermaterialien mit entsprechend anderen RIE-Ätzprozessen, die steilflankige Mesas liefert, zu übertragen.

Tab.3.8: Naßchemische Behandlung zur Unterätzung

- $\text{H}_3\text{PO}_4:\text{H}_2\text{O}_2:\text{H}_2\text{O}$ (3:1:50) 20 sec
- Spülen in deionisiertem Wasser

Die somit entstandene Unterätzung bildet eine wesentliche Voraussetzung für den noch folgenden Kontaktabriß bei der Schottky-Gate-Bedampfung (s.u.). Um eine Benetzung der Mesaflanken mit AuGe zu verhindern, sollte an dieser Stelle der ohmsche Kontakt noch nicht einlegiert werden.

3.2.2 SiO_2 -Isolation

Im nächsten Schritt wird eine isolierende Unterlage für die später aufzubringenden Bondpads aufgedampft. Hierzu ist eine SiO_2 -Schicht geeignet, die jeweils um die Mesa herum ein kleines Fenster aufweist, um den lateralen Schottky-Kontakt zum Halbleiter für das später folgende Gate zu ermöglichen. Ein größeres Fenster liefert zwar größere Gate-Leckströme, verhindert aber die Möglichkeit von Kurzschlüssen zwischen Mesa- und Gate-Kontaktierung an den SiO_2 -Flanken [62]. Hierbei wurde ein Standard-Photolithographie-Prozeß benutzt. Der Positiv-Prozeß ist im Detail in Tab. 3.9 angegeben, bei dem die belichteten Photolackstellen nach der Entwicklung entfernt sind.

Tab.3.9: Positiv-Photolithographie

- Reinigung der Probe nach Tab. 3.1
- 5 min auf der Heizplatte bei 115°C trocknen
- Photolack AZ5214 aufschleudern bei 4000 rpm
- 5 min auf der Heizplatte bei 90°C (zur Verdampfung von Lösungsmitteln im Lack)
- evtl. Randentlackung (60 sec belichten, 30 sec entwickeln wie weiter unten)
- Justieren der Maske
- max. 5,0 sec belichten bei 7,0 mW/cm²
- 50 sec in MIF 1:1,5 (AZ312MIF:H₂O) entwickeln, anschließend in deionisiertem Wasser spülen

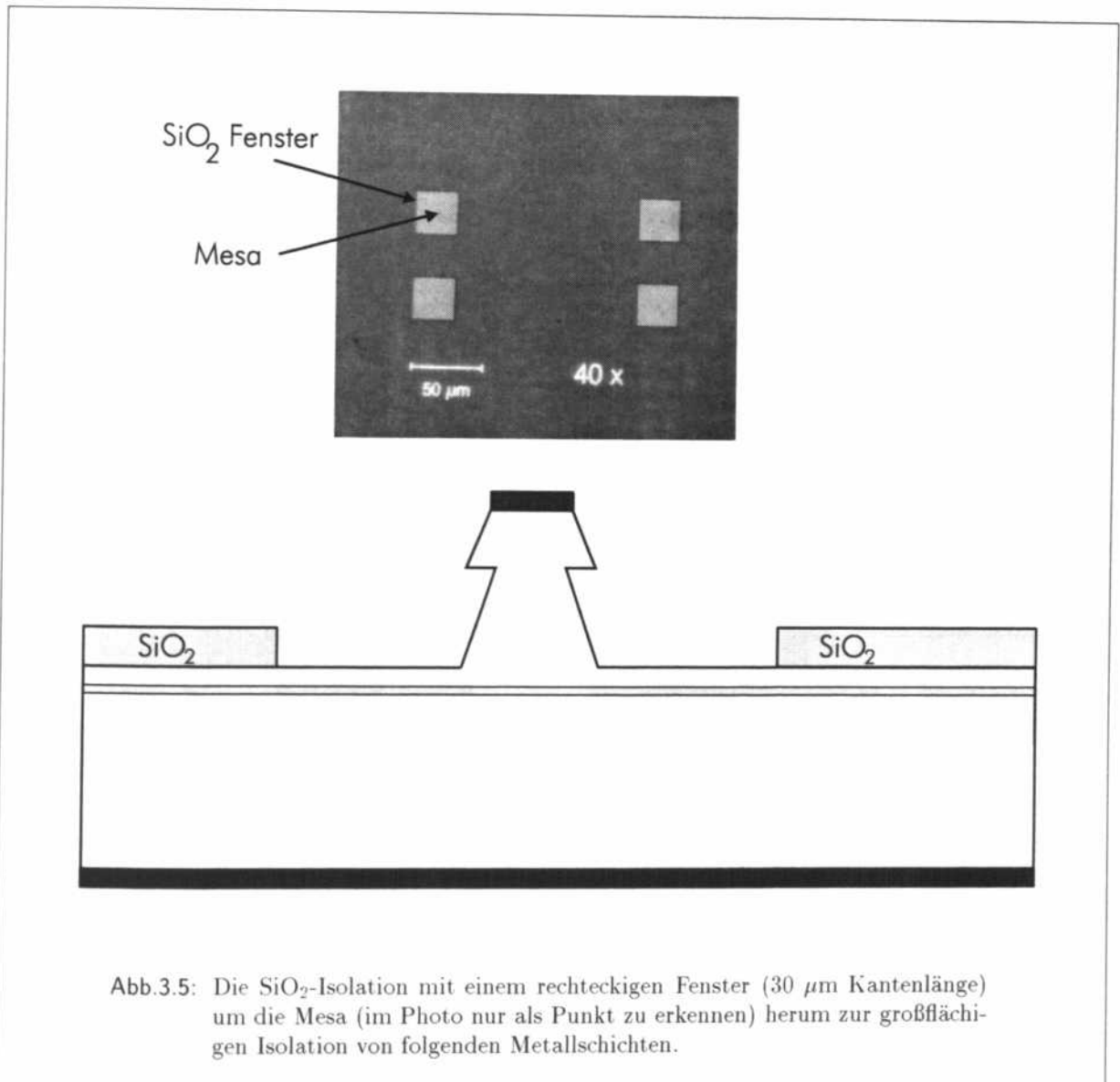
Daran anschließend wird eine ca. 200 nm dicke SiO₂-Schicht aufgedampft. Mit einem Lift-Off-Schritt in Aceton erhält man schließlich die in Abb. 3.5 gezeigte Struktur mit rechteckigen SiO₂-Fenstern, wie im Photo zu erkennen ist. (Es handelt sich dabei um eine Maskenversion mit kleinen Fenstern.)

Falls die SiO₂-Schicht zu dick ausfällt, können große Probleme beim Lift-Off auftreten: An den Kanten können hochstehende "Fahnen" entstehen, welche später zu einem Kuzschluß zwischen Gate und Source führen. Daher kann für diesen Fall vor dem Entwickeln die Probe 5 min in Chlorbenzol gelegt werden, was dazu führt, daß die oberste Schicht des Lackes etwas angehärtet wird. Dementsprechend muß dann auch ca. 40 sec länger entwickelt werden (siehe Tab. 3.9). Der Lack erhält dann negative Flanken, was den Film-Abriß an den Lackkanten beim Aufdampfen und das anschließende Ablösen beim Lift-Off verbessert.

3.2.3 Gate-Bedampfung

Ziel des nächsten Schrittes ist es, das laterale Schottky-Gate aufzudampfen. Dabei mußten die Metallschichten möglichst senkrecht aufgedampft werden, um einen Kontaktabriß vom Mesa-Anschluß zum Gate zu gewährleisten. Voraussetzung dafür ist auch die hohe Flankensteilheit und die Unterätzung der Mesa, was dann zu einer Art Schattenwurf führt und die selbstjustierende Gate-Technik ermöglicht.

Um das Gate zu strukturieren, wurde diesmal ein Umkehrprozeß durchgeführt, der aus den Schritten der Tab. 3.10 besteht. Bei diesem Schritt handelt es sich um ein Negativ-Verfahren, bei dem die belichteten Photolackstellen nach der Entwicklung übrig bleiben. Für die Lithographie wurde vor dem Aufschleudern des Photolackes auf die SiO₂-Schicht zur besseren Haftung noch ein Haftvermittler (Hexa-Methyl-Disilazan HMDS) aufgebracht.



Tab.3.10: Negativ-Photolithographie (Umkehrprozeß)

- Reinigung der Probe nach Tab. 3.1
- 5 min auf der Heizplatte bei 115°C trocknen
- optional: (bei SiO₂ als Untergrund)
 - HMDS aufschleudern bei 4000 rpm
 - tempern bei 90°C für 1 min
- Photolack AZ5214 aufschleudern bei 4000 rpm
- 5 min auf der Heizplatte bei 90°C (zur Verdampfung von Lösungsmitteln im Lack)
- evtl. Randentlackung (60 sec belichten, 30 sec entwickeln wie weiter unten)
- Justieren der Maske
- max. 3,3 sec (hardcontact) belichten bei 7,0 mW/cm²
- 2 min auf der Heizplatte bei 115°C tempern (reversal bake),
- 15 sec Flutbelichtung,
- 35-40 sec in MIF 1:1,5 (AZ312MIF:H₂O) entwickeln, anschließend in deionisiertem Wasser spülen

Anschließend wurde das Gate (Tab. 3.11) aufgedampft. Die Goldschicht sollte nicht zu dünn sein, damit der Kontakt über den SiO₂-Flanken nicht abreißt.

Tab.3.11: Schottky-Gate

- Ti: 30 nm
- Pt: 30 nm
- Au: ca. 150 nm

Es ist möglich, die Gate-Metallisierung bis zu 350 nm zu wählen, ohne daß ein Kurzschluß zwischen dem oben liegenden Source-Kontakt und dem Gate entsteht. Die nun vorliegende Struktur ist schematisch in der Abb. 3.6 dargestellt. Man erkennt, daß jeweils zwei Dioden ein gemeinsames Gate besitzen.

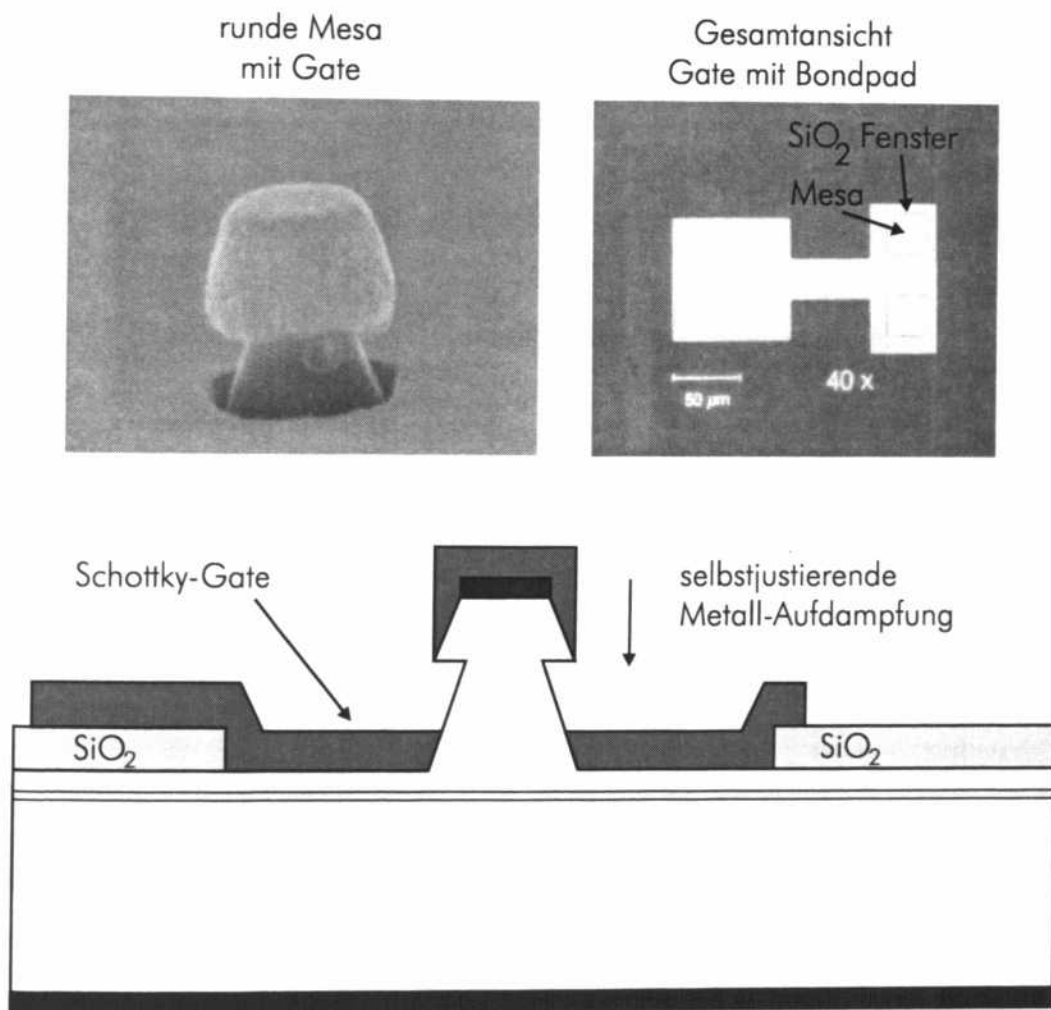


Abb.3.6: Die Mesa nach der Aufdampfung der Gate-Metallisierung. (Hier handelt es sich um eine Probe ohne Proximity-Korrektur in den Ecken der Mesa, die daher rund erscheint.) Der Mesaüberhang führt zu einem Kontaktabriß, so daß das Gate selbstjustierend aufgedampft wird.

3.2.4 Polyimid-Planarisierung

Es besteht nun die Aufgabe, die Mesa anzukontaktieren, ohne dabei einen Kurzschluß zum Gate zu erhalten. Dies bedeutet, daß ein weiterer Metall-Layer vorgesehen werden muß, der isoliert vom Gatemetall-Layer ausgeführt werden sollte. Als Lösung wird nun eine isolierende Polyimid-Zwischenschicht aufgebracht, wie in Tab. 3.12 angegeben. Das Polyimid besitzt dann eine Dicke von etwa 2 μm .

Tab.3.12: Polyimidschicht

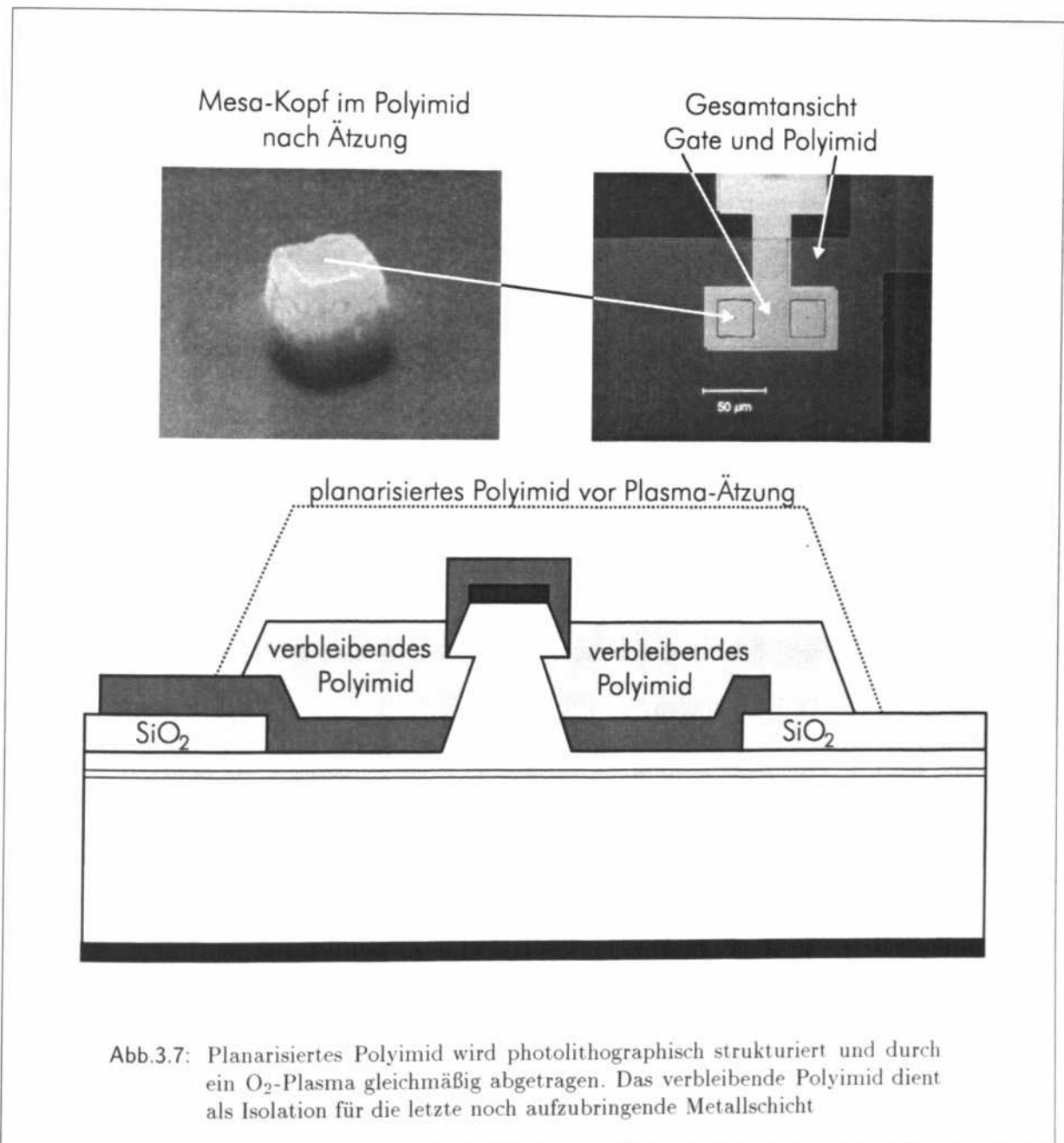
- Reinigung der Probe in Aceton und Propanol
- Probe bei 150°C ca. 10 min trocknen
- optional: Haftvermittlerlösung QZ3289 mit 4000 rpm aufschleudern
- Polyimid (HTR3-50) mit 5000 rpm aufschleudern
- trocknen bei 90°C für 5 min

Für das Folgende ist es wichtig, daß das Polyimid beim Aufbringen planarisiert, so daß die Schichtdicke direkt über der Mesa kleiner ist als über dem Rest der Probe. Die Abb. 3.7 deutet dies schematisch an. Nach der Strukturierung kann mit Hilfe eines Sauerstoff-Plasmas vom Polyimid eine obere Schicht gleichmäßig entfernt werden, bis der Mesa-Kontakt gerade aus der isolierenden Polyimid-Schicht herausragt. Diese Schritte der Strukturierung und Ätzung werden nun im Folgenden beschrieben.

Das eingesetzte Polyimid kann wie ein Photolack strukturiert werden (Tab. 3.13, analog zum Umkehrprozeß (Tab. 3.10), wo die belichteten Lackteile nach der Entwicklung übrigbleiben.

Tab.3.13: Photolithographische Strukturierung der Polyimidschicht

- Maske justieren
- 15 sec belichten bei 7,0 mW/cm²
- 15 sec entwickeln mit D2-Entwickler (mit Sprühflasche)
- 15 sec entwickeln in 1:1 (D2:Propanol)
- 15 sec in reinem Propanol spülen
- 60 min bei 250°C tempern zur Härtung



Das Polyimid besitzt nach der Härtung eine Dicke von ca. $1\text{ }\mu\text{m}$ und einen Flankenwinkel um die 45° . Ein flacher Flankenwinkel erleichtert die Führung der Bondpad-Metallbahn vom Mesa-Kontakt herunter zum Bondpad auf dem SiO_2 erheblich (s. Abb. 3.8).

Nun muß die Polyimidschicht gehärtet werden, wonach die Dicke des Polyimids nur noch ca. $1\text{ }\mu\text{m}$ beträgt. Die genaue Bestimmung der Dicken muß jedoch individuell für jede Probe mit Hilfe eines Tiefenprofilers (Dektak) vorgenommen werden. In Tab. 3.14 ist die Abfolge der Temperschritte angegeben.

Tab.3.14: Härtung der Polyimidschicht

- Lineare Rampe von 150°C bis 270°C mit einer Rate von 200°C/h
- Temperofen evakuieren
- 100 min bei 270°C tempern
- Lineare Rampe von 270°C bis 150°C mit einer Rate von -150°C/h
- Temperofen mit N_2 spülen

Eine alternative Möglichkeit zur Strukturierung des Polyimids ist in [66] angegeben. Zur Übertragung der lateralen Struktur wird dabei eine Aluminium-Ätzmaske nach dem Härtungsschritt aufgebracht und anschließend mittels eines O_2 -Plasmas geätzt (Tab. 3.15). Die dabei gewählten Plasma-Parameter bestimmen maßgeblich den Flankenverlauf des Polyimids. Zur Erzielung eines Flankenwinkels von ca. 45° ist ein hoher Prozeßdruck und eine geringe Beimengung von CF_4 nötig (siehe auch [66]).

Tab.3.15: Strukturierung der Polyimidschicht mit Ätzmaske

- Umkehrprozeß der Tab. 3.10
- 100 nm Al aufdampfen als Maske
- Lift-Off in Aceton
- O₂-Plasma-Ätzung des Polyimids mit Maske:
 - O₂-Fluß von 40 ml/min
 - CF₄-Fluß von 2,5 ml/min
 - das liefert einen Kammerdruck von 1,3 mbar (abhängig vom Reaktor)
 - Plasmagenerator-Leistung 100 W (abhängig vom Reaktor)

Das vollständige Durchätzen wird mittels eines Laser-Interferometers überwacht.

- Entfernung der Al-Maske in konzentrierter Salzsäure

Jetzt folgt die gleichmäßige Abtragung des Polyimids mit Hilfe eines O₂-Plasmas zur Freilegung des Mesa-Kontaktes. Für die Bestimmung der geeigneten Äztiefe kann man annehmen, daß vor dem Härtungsschritt (Tab. 3.14) das Polyimid vollständig plan war. Sei die Polyimiddicke über dem breiten Gategebiet $D_{\text{gate}}^{\text{vorher}}$ und über der Mesa $D_{\text{mesa}}^{\text{vorher}}$, so gilt demnach

$$D_{\text{mesa}}^{\text{vorher}} = D_{\text{gate}}^{\text{vorher}} - H_{\text{mesa}} \quad (3.2)$$

bei einer Mesahöhe von H_{mesa} . Bei einer homogenen Dickenreduktion nach dem Härtungsschritt (Tab. 3.14) gilt dann

$$\frac{D_{\text{mesa}}^{\text{nachher}}}{D_{\text{mesa}}^{\text{vorher}}} = \frac{D_{\text{gate}}^{\text{nachher}}}{D_{\text{gate}}^{\text{vorher}}} \quad (3.3)$$

Durch Einsetzen erhält man dann einen Ausdruck für $D_{\text{mesa}}^{\text{nachher}}$ als Funktion von $D_{\text{gate}}^{\text{vorher}}$, $D_{\text{gate}}^{\text{nachher}}$ und H_{mesa} . Alle diese Größen sind experimentell mittels eines Tiefenprofilers (Dektak) vor der Ätzung bestimmbar. Als Mindest-Äztiefe ist also $D_{\text{mesa}}^{\text{nachher}}$ zu wählen, was gerade dem Freilegen des Mesa-Kontaktes entspricht.

Die Plasma-Ätzung selber wird die ganze Zeit mittels eines Laser-Interferometers überwacht, so daß die gewünschte Äztiefe genau eingehalten werden kann. Bei dieser Online-Überwachung wird der Brechungsindex des Polyimids (bei der Laserwellenlänge) benötigt. (Dies erfordert eine Testätzung mit anschließender Dickenmessung.) In der Tab. 3.16 sind nun die erforderlichen Prozeßparameter aufgeführt.

Tab.3.16: Gleichmäßige Ätzung der Polyimidschicht

- O₂-Fluß von 40 ml/min
- CF₄-Fluß von 2,5 ml/min
- das liefert einen Kammerdruck von 1,3 mbar (abhängig vom Reaktor)
- Plasmagenerator-Leistung 100 W (abhängig vom Reaktor)

In mehreren Versuchen konnte eine durchschnittliche Ätzrate von (97 ± 10) nm/min bestimmt werden. Durch Vergleichsmessung der Äztiefe mit einem Laser-Interferometer lieferte dies einen Brechungsindex von 1,8 für das verwendete Polyimid.

3.2.5 Bond-Pads

Abschließend können nun die Bondpads aufgedampft werden, welche zum einen den Anschluß zum oberen Mesa-Kontakt liefern und zum anderen das Gatepad verstärken. Es wurde eine Metallisierung aus Ti/Pt/Au wie beim Gate (Tab. 3.11) gewählt (abgesehen von einer eventuell dickeren Goldschicht von bis zu 600 nm). Zur Strukturierung wurde dabei ein Umkehrprozeß (Tab. 3.10) benutzt. Die Schichtabfolge ist klar in Abb. 3.8 zu erkennen. Das SiO₂ dient als isolierende und stabile Unterlage für die Bondpads, wogegen sich das Polyimid wegen seiner Elastizität als Unterlage zum Bonden nicht eignet.

Daß ein Kontakt zum oberen Teil der Mesa hergestellt wurde, zeigt die REM-Aufnahme in Abb. 3.8 mit der Ausbuchtung in der Metallisierung an der Stelle der Mesa. Wie man in der Abb. 3.8 sehen kann, besitzt das geätzte Polyimid eine flache Flanke (s.o.), was eine problemlose Führung der Metallbahnen zur Folge hat.

3.2.6 Einlegieren, Bonden

Für die Funktionsfähigkeit der ohmschen Kontakte ist es noch wichtig, diese einzulegieren. Dies geschah durch Tempern der Probe bei 400-450°C für 5 sec im RTA-Ofen (Rapid Thermal Annealing). Diese Temperung ist desweiteren nötig, um RIE-Schäden, die bei der Mesa-Ätzung entstanden, auszuheilen. (Dies sind vor allem tiefe Störstellen durch Wasserstoffeinbau an der geätzten Probenoberfläche, also an der Schottky-Gate-Grenzfläche.)

In Abb. 3.2 ist nun die vollständige Abfolge der einzelnen Schichten zu sehen. Zwei Transistoren besitzen je ein gemeinsames Gate, die Mesa-Anschlüsse sind sinnvollerweise jedoch getrennt ausgeführt.

Der Halbleiter wird nun zwischen den einzelnen Strukturen im Raster von ca. 1,5 mm×1,5 mm gespalten, in Chip-Carrier eingebaut (geklebt mit Leitsilber oder In-Kügelchen) und angebondet

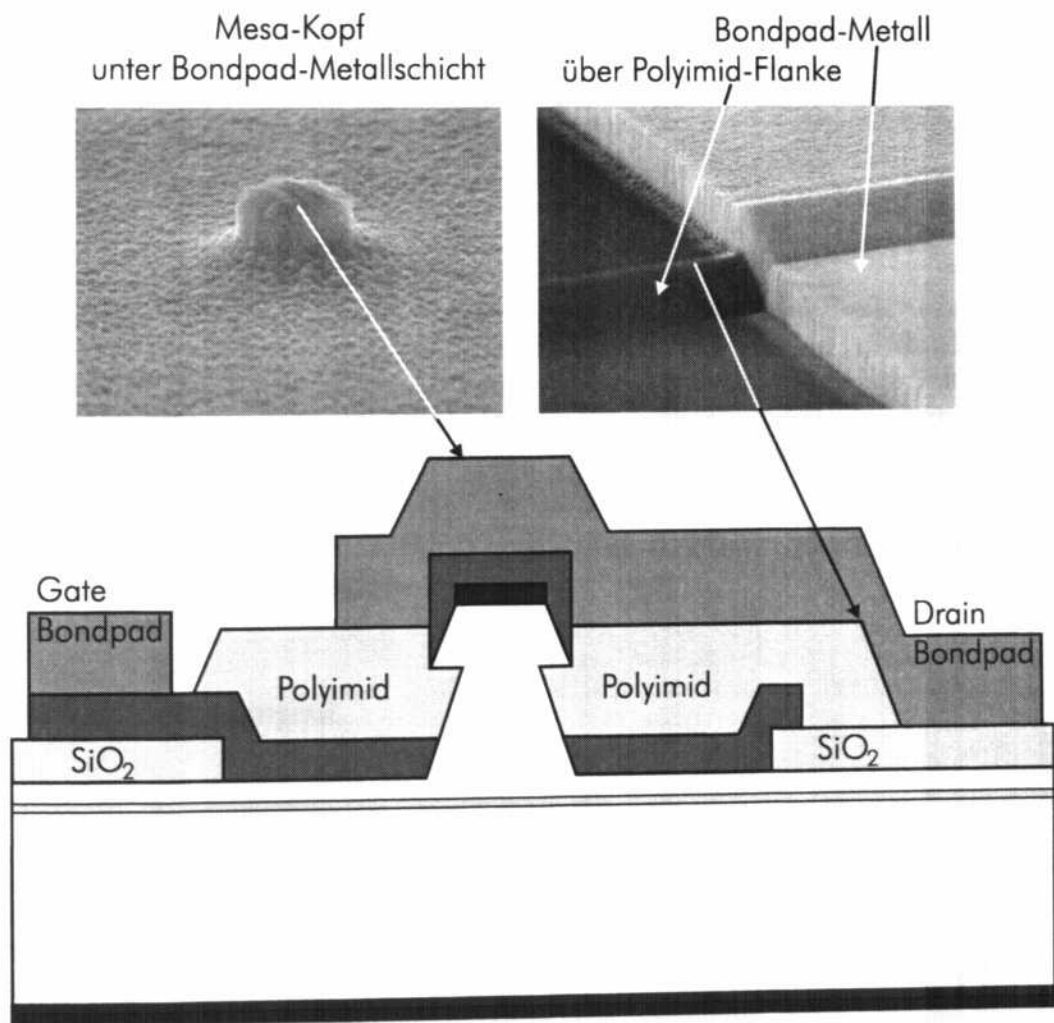


Abb.3.8: Letzte Metallisierung zum Anschluß des Mesa-Kontaktes und zur Herstellung der Bondpads.

(mit Al-Draht).

Kapitel 4

Meßtechnik

Die extremen Anforderungen an die Umgebung bei experimentellen Untersuchungen an Einelektronenstrukturen bedürfen einer speziellen meßtechnischen Lösung. Als Randbedingung für Magnetotransport-Messungen im Einelektronenbereich sind Temperaturen im Sub-Kelvinbereich und magnetische Felder in der Größenordnung von mehreren Tesla erforderlich. Die eigens entwickelten Konzepte zur störungsresistenten Aufnahme von statischen Strom-Spannungskennlinien mit 1 pA Stromauflösung bilden hierbei eine wesentliche Voraussetzung [67].

Basierend auf den hier präsentierten experimentellen Möglichkeiten werden anschließend im Kapitel 5 die durchgeführten Messungen dargestellt.

4.1 Randbedingungen

In der Abb. 4.1 ist schematisch die zugrundeliegende Schaltung zur Aufnahme von Transistor-Kennlinien dargestellt. Der Substratanschluß dient dabei als gemeinsame Elektrode *Source* für Eingangs- und Ausgangskreis. Bei einer positiven Spannung an der Mesaelektrode *Drain* fließen die Elektronen aus dem Substrat durch den Kanal, dessen Potentialverhältnisse durch die Gateelektrode gesteuert werden, zum ohmschen Kontakt der Mesa. Dem ganzen Meßverfahren liegt also eine spannungsgetriebene 2-Punkt Messung zu Grunde. Eine solche Vorgehensweise ist adäquat für den vorliegenden Fall, da hier die Spannungsabfälle an den Zuleitungen vernachlässigbar gegen die Spannungen an der Probe sind.

Eine typische Vierpolmessung zur Überprüfung der prinzipiellen Funktionsweise des Bauelements wird sinnvollerweise bei Raumtemperatur durchgeführt (siehe Kapitel 5). Der Temperaturbereich bis hinunter zu einigen 10 K liefert dabei die experimentellen Voraussetzungen zur Beobachtung des Resonanten Tunnelns innerhalb des Kanals. Die entsprechenden Schichtdicken des Doppelbarrierensystems bestimmen hierbei die zu beobachtenden Stromstärken (siehe Kapitel 2). In unserem Fall (500 nm Mesa mit einer Schichtfolge aus Abb. 3.1) liegt die Stromstärke bei einigen nA bei Spannungen bis zu 1 V. In diesem Transportregime oberhalb 10 K sind die besonders interessanten Einelektronen-Effekte noch nicht sichtbar. Als wesentliches Kriterium für den zu

wählenden Temperaturbereich dient dabei das Verhältnis $k_B T / E_{step}$, wobei T die Temperatur und E_{step} die typische Quantisierungsenergie im Kanal darstellt. Dieses Verhältnis $k_B T / E_{step}$ sollte möglichst klein sein. Offensichtlich ist dabei die laterale Ausdehnung des Quantendots aufgrund des Schottky-Gates hier die maßgebliche Länge, da die Doppelbarriere eine wesentlich stärkere räumliche Einschränkung und damit größere energetische Abstände der Quasibindungszustände in der Richtung parallel zum Kanal liefert. Dieses Argument wird bestätigt durch die Beobachtung des Resonanten Tunnelns auch bei Temperaturen oberhalb 10 K. Bei einer energetischen Größenordnung von 1 meV sollte man also deutlich unterhalb von 1 K die experimentellen Untersuchungen zum Einelektronentunneln vornehmen.

Zur Erzeugung von Temperaturen unterhalb 1 K kam in der vorliegenden Arbeit ein Helium-Mischkryostat zum Einsatz [68]. Bei der benutzten Anlage ist ebenfalls ein supraleitender Magnet eingebaut, der es gestattet ein homogenes Magnetfeld bis zu 16 T in einem definierten Winkel zur Transportrichtung von außen anzulegen. Das Prinzip des Mischkryostaten [54] soll hier nur kurz angedeutet werden. Im Kryostaten befindet sich ein flüssiges Gemisch aus He^3 und He^4 . In einem ersten Abkühlungsschritt wird ein Teil des leichteren He^3 aus dem Gemisch in die Gasphase überführt, wodurch eine erste Temperaturabsenkung erfolgt. Ab einer gewissen Temperatur findet ein Phasenübergang statt, bei dem sich eine He^3 -reiche und He^3 -arme Phase im Gemisch ausbildet. Durch weiteres Abdampfen von He^3 diffundiert permanent He^3 aus der He^3 -reichen Phase in die He^3 -arme Phase. In einem geschlossenen Kreislauf findet dieser Durchgang von He^3 an der Phasengrenze kontinuierlich statt und führt zu einer Temperaturabsenkung bis hinunter zu 30 mK. Damit ist eine experimentelle Anforderung zu Magneto-Transportmessungen im Einelektronenbereich erfüllt.

Für den Sub-Kelvin Bereich müssen allerdings auch meßtechnische Randbedingungen eingehalten werden. Es muß gewährleistet sein, daß die Einstrahlung von elektromagnetischen Störungen in den Kryostaten möglichst unterdrückt wird. Zum anderen sollte bei den gegebenen Stromstärkebereichen von einigen nA eine Auflösung von pA gewährleistet werden mit einer Meßschaltung, die unanfällig gegen äußere Störungen ist. Im nächsten Abschnitt wird die gefundene Lösung näher beschrieben.

4.2 Meßkreis

Um den speziellen Anforderungen an die Meßelektronik zur rauscharmen Aufnahme von Strom-Spannungs-Kennlinien im Einelektronenbereich mit einer Auflösung von pA zu erreichen, wurde eigens ein pA-Meßgerät entwickelt. Eine Prinzipdarstellung ist in der Abb. 4.2 zu finden.

Es handelt sich dabei um ein autarkes System mit eigener Steuerelektronik, die es ermöglicht, komplexere Spannungskurven zeitgenau auszugeben und gleichzeitig mit hoher Genauigkeit den fließenden Probenstrom zu messen. Die gesamte Kennlinie wird hierbei intern zwischengespeichert. Zusammen mit dem Kryostaten bildet das Meßgerät ein metallisch abgeschlossenes System zur Unterdrückung elektromagnetischer Einstrahlung von außen. Die Datenein- und -ausgabe geschieht digital und galvanisch getrennt über Lichtleiter zu einem externen Steuercomputer, dessen Funktionsweise im nächsten Abschnitt erklärt wird. Weiterhin besitzt das Meßgerät ei-

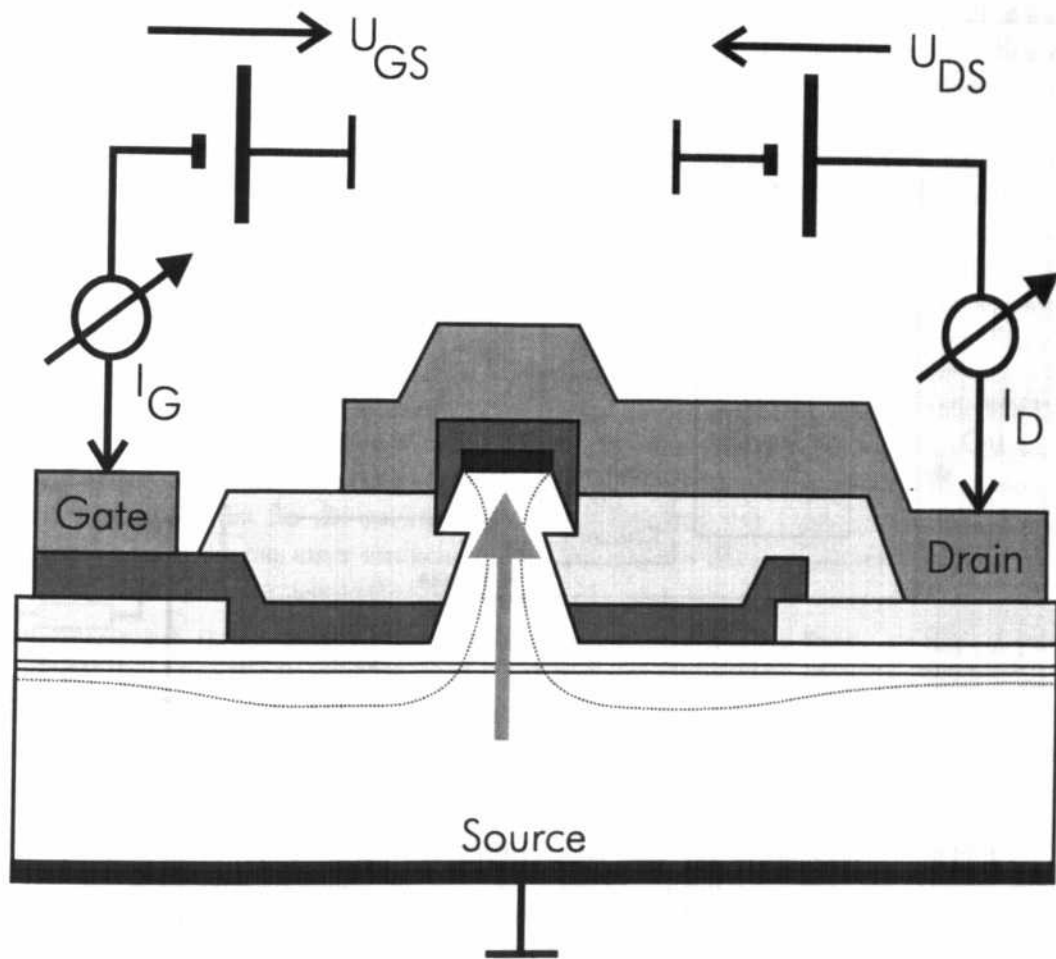


Abb.4.1: Schaltungsanordnung zur Aufnahme der Transistor- und Diodenkennlinien. Die Strom- und Spannungsmessung basiert auf einer einfachen 2-Punkt-Methode.

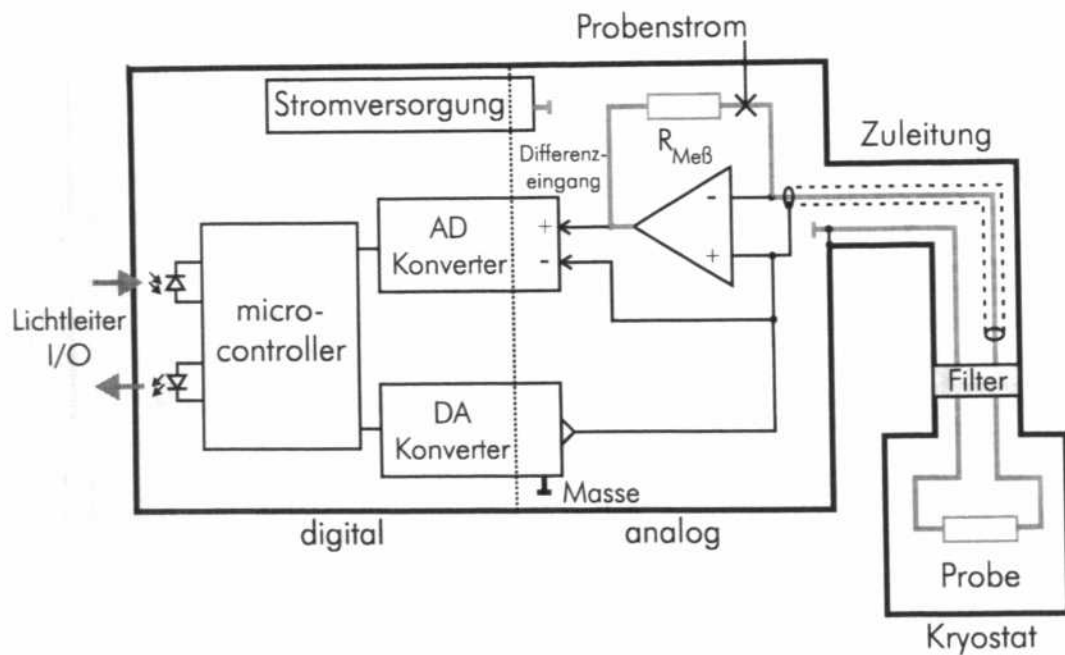


Abb.4.2: Prinzipdarstellung des Meßgerätes. Der gesamte Meßkreis befindet sich in einem metallisch umschlossenen System. Man erkennt den Verlauf des Probenstromes durch den Meßwiderstand hindurch zur Strom-Spannungs-Wandlung. Für eine Auflösung von 1 pA ist die unsymmetrische Signalführung noch vollkommen ausreichend. Der Datenaustausch findet über Lichtleiter statt zur Verringerung der Störeinflüsse. Am Kryostaten ist das System zentral geerdet.

ne eigene batteriegespeiste Stromversorgung. (Als Alternative wurde ebenfalls eine galvanische Trennung mittels eines Transformators eingesetzt.) Eine zentrale Erdung des Gesamtsystems ist am Kryostaten angeschlossen, was die Entstehung von Brummschleifen verhindert.

Der Hauptmeßkreis ist in der Abb. 4.2 als graue Leitung kenntlich gemacht. Die Probe selber befindet sich im Kryostaten über ein Tiefpaßfilter entkoppelt vom Eingangsverstärker. Dieser extrem rauscharme und driftkompensierte Operationsverstärker mit Offsetströmen im 100 fA Bereich dient als Strom-Spannungs-Wandler und gleichzeitig als Spannungsquelle. Der Digital-Analog-Wandler (DA-Konverter) gibt die Soll-Probenspannung am nichtinvertierenden (+) Eingang vor. Dabei regelt der Operationsverstärker seine Ausgangsspannung so nach, daß am invertierenden (-) Eingang dasselbe Potential herrscht wie am nichtinvertierenden Eingang. Man beachte, daß die eine Zuleitung vom invertierenden Eingang zusätzlich mit einer Abschirmung gleichen Potentials umgeben ist. Dies führt zu einer Verringerung von Parallelströmen zur Masse (äußere Abschirmung) vom eigentlichen Meßeingang. Dieser Schirm ist getrieben vom DA-Ausgang und besitzt ein vom empfindlichen Innenleiter nur vernachlässigbar abweichendes Potential. Als Rückleitung von der Probe reicht ein nichtabgeschirmtes Kabel, da dieses am Meßgerät auf Massepotential liegt. Allerdings sollten beide Probenleitungen verdreht ausgeführt werden zur Erzielung einer besseren Störsignalunterdrückung. Alle Leitungen zusammen mit der Ausgangsimpedanz des Strom-Spannungs-Wandlers stellen einen vernachlässigbaren Serienwiderstand dar im Vergleich zum Innenwiderstand der benutzten Proben. Diese unsymmetrische Signalführung (gegen Masse) hat sich als außerordentlich robust erwiesen, so daß die vollständig symmetrische Auslegung des Meßkreises überflüssig ist für die vorliegende Stromauflösung von 1 pA. (Eine solche symmetrische Auslegung entsteht aus einer einfachen Verdopplung des Strom-Spannungswandler-Teils mit einem zusätzlichen Differenzverstärker [69].)

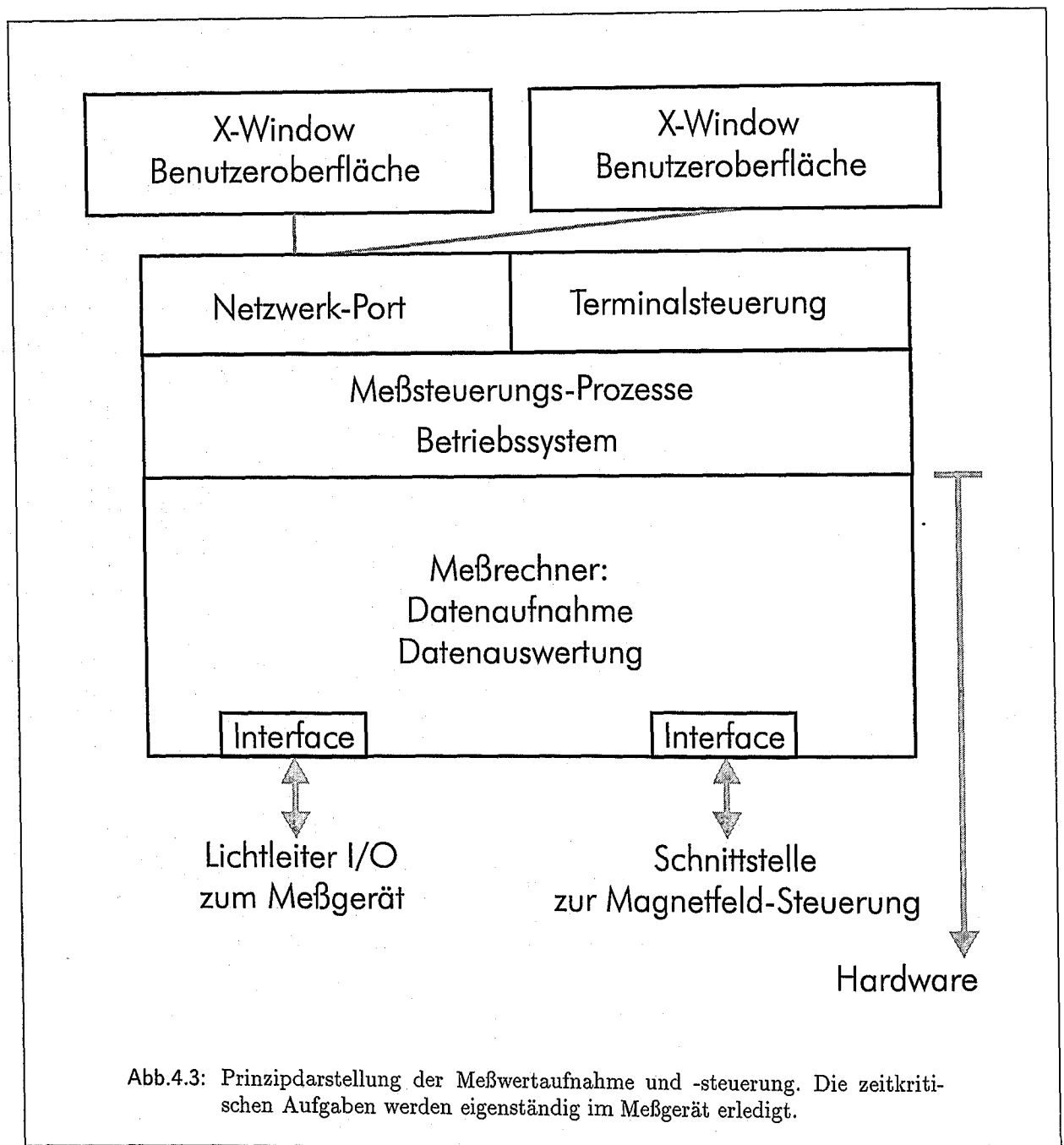
Am Meßwiderstand $R_{\text{Meß}}$ fällt nun eine dem durch ihn fließenden Probenstrom proportionale Spannung ab. Der Analog-Digital-Wandler (AD-Konverter) besitzt einen Differenzeingang und mißt, wie aus dem Schaltbild Abb. 4.2 ersichtlich, genau diese Spannung. (Man beachte, daß, wie oben erklärt, der invertierende Eingang des Operationsverstärkers auf demselben Potential liegt wie der nichtinvertierende.)

Für jeden zu messenden Anschluß des Bauelements, in diesem Fall für Drain und Gate, enthält das Meßgerät einen eigenen Strom-Spannungswandler-Kanal und entsprechend auch dazugehörige DA- und AD-Wandler. Der Übersichtlichkeit wegen ist in der Abb. 4.2 nur ein einziger solcher Kanal dargestellt.

4.3 Datenaufnahme- und Verarbeitung

Anschließend an das pA-Meßgerät folgt ein Steuercomputer. Dieser ist für die Steuerung des Meßgerätes und die zeitunkritische Datenauslese der fertig gemessenen Kennlinien zuständig. Außerdem übernimmt dieser Computer die Kontrolle aller anderen Komponenten, wie zum Beispiel des Magnetnetzteils zur Versorgung der supraleitenden Magnetspulen im Kryostaten. Einen Überblick über die logische Struktur dieses Steuersystems erhält man in der Abb. 4.3.

Eine Ankopplung über ein lokales Netzwerk (LAN) ermöglicht dabei eine räumlich verteilte Nut-



zung mehrerer Benutzeroberflächen auf anderen Computersystemen. Als Resultat erhält man die Möglichkeit einer dezentralen und automatischen Aufnahme von Kennlinienfeldern mit variierender Gate-Spannung und Magnetfeldstärke.

Weitergehende Informationen und Details zur Signalverarbeitung und Steuerung sind im Anhang A zu finden.

Kapitel 5

Experiment

In diesem Kapitel werden experimentelle Ergebnisse zum Einelektronentransport an den im Kapitel 3 definierten Strukturen mit starker Barrierenasymmetrie dargestellt. Als Voraussetzung dienen dabei die meßtechnischen Möglichkeiten aus Kapitel 4.

Die vorliegende Feldeffekt-Transistorstruktur mit Doppelbarriere im Kanal gestattet die Aufnahme von Strom-Spannungs-Kennlinien unter Variation der Kanalgeometrie unter Zuhilfenahme des Schottky-Gates. Eine solche Steuermöglichkeit wird im ersten Abschnitt unter dem Gesichtspunkt der Erweiterung einer Resonantanten Tunneldiode zu einem aktiven 2-Tor-Bauelement untersucht. Der Hauptschwerpunkt des darauf folgenden Abschnittes liegt im Einelektronentransport des Anreicherungsfalltes. Unter diesem Blickwinkel dient das Gate zur Variation des Einteilchenpotentials im System. Ebenso stellt sich der Einfluß eines äußeren Magnetfeldes auf die elektronischen Zustände des Quantendots dar, welche sich dabei unmittelbar in der Gleichstrom-Kennlinie durch den Kanal widerspiegeln. Beide extern veränderlichen Größen (Gatespannung und Magnetfeld) werden daher experimentell gezielt eingesetzt, um zusätzliche Informationen zur elektronischen Struktur zu erhalten.

Genau diese Strom-Spannungs-Kennlinien stellen den Ansatzpunkt zum Vergleich mit der Theorie des Kapitels 2 bereit.

5.1 RTD-Transistor

Vom Grundprinzip des experimentell untersuchten Bauelementes handelt es sich um einen vertikalen Feldeffekttransistor mit Schottky-Gate und im Kanal integrierter Resonanter Tunneldiode (siehe Abb. 3.2). Es soll daher zunächst als Voruntersuchung die Betrachtung des Bauelementes unter dem Aspekt eines Dreipols (oder Zweitores bei einer gemeinsamen Elektrode der beiden Kreise) erfolgen. In allen folgenden Messungen wird die Substratelektrode immer als gemeinsame Referenzelektrode genutzt und als "Source" bezeichnet, wogegen die Mesaelektrode "Drain" heißen soll (unabhängig ob sie nun Emitter oder Kollektor ist).

Die Kennlinien wurden mit Hilfe eines Parameter-Analyzers (HP4145B) aufgenommen, dessen

mittlerer Fehler bei den gewählten Meßbereichen in der Spannung $\pm(0,5\% \cdot \text{max.Spannung} + 10 \text{ mV})$ und im Strom $\pm(1\% \cdot \text{max.Strom} + 50 \text{ pA})$ beträgt.

5.1.1 Raumtemperatur

Zur Überprüfung der Funktionsfähigkeit der Proben wurden Strom-Spannungs-Kennlinien bei Raumtemperatur ($T \approx 300 \text{ K}$) durchgeführt. Bei der Charakterisierung betrachtet man das Bauelement als 2-Tor-Element, wobei der Eingangskreis von Gate und Substrat gebildet wird und analog der Ausgangskreis von Mesakontakt (Drain) und Substrat, wie in der Abb. 4.1 gezeigt.

Zunächst betrachten wir die Ausgangs-Kennlinienfelder, die in der Abb. 5.1 dargestellt sind. Die Gatespannung wurde dabei schrittweise verändert. Im oberen Diagramm ist die Vorwärtsrichtung ($U_{DS} > 0$) aufgetragen. Man erkennt den Stromeinsatz bei 0 V, der auf eine korrekte Funktionsweise der ohmschen Kontakte zumindest bei höheren Temperaturen schließen läßt. Der Kennlinienverlauf zeigt ein deutlich ausgeprägtes Sättigungsverhalten im Strom bei wachsender Drain-Spannung. Qualitativ ist dieses Verhalten sofort einsichtig, da geometrisch bedingt eine zunehmende Einschnürung des Kanals bei wachsender positiver Drainspannung und konstanter Gatespannung erfolgt. Die Doppelbarriere zeigt hier nur einen stromlimitierenden Einfluß. Als differentiellen Ausgangswiderstand im Sättigungsbereich erhält man $R_2 \approx 1,2 \cdot 10^{-8} \Omega$ bei einer Steilheit von $S \approx 44 \text{ nA/V}$ ($U_{DS} = 1,0 \text{ V}$, $U_{GS} = 0 \text{ V}$).

Weiterhin ist im unteren Diagramm von Abb. 5.1 die Rückwärtsrichtung ($U_{DS} < 0$) in analoger Weise dargestellt. Im Gegensatz zur Vorwärtsrichtung hat man es hier mit einem stark ansteigenden Strom bei wachsender Drainspannung zu tun. Auch die Absolutwerte des Stromes sind hier um fast zwei Größenordnungen größer. Offensichtlich handelt es sich hierbei um den gleichen geometrischen Effekt, der in Vorwärtsrichtung zur Sättigung führt. Allerdings kommt es nun zu einem Öffnen des Kanals mit wachsender negativer Drainspannung, wobei es dann allerdings für noch größere Spannungen ($U_{GS} > 1 \text{ V}$) auch zu einem einsetzenden, nichtvernachlässigbaren Gatestrom kommt. Die Steilheit ergibt sich hier zu $S \approx 190 \text{ nA/V}$ ($U_{DS} = 0,5 \text{ V}$, $U_{GS} = 0 \text{ V}$). Man erkennt weiterhin deutlich eine schulterförmige Struktur im Strom, die bei zuschnürendem Gate zu höheren Drainspannungen wandert. Es handelt sich hierbei um die verwaschene Resonanz der Resonanten Tunneldiode, wie durch Vergleich mit den in den folgenden Abschnitten dargestellten Tieftemperatur-Messungen verständlich wird. Daß im hier betrachteten höheren Temperaturbereich ($T \approx 300 \text{ K}$) keine negativ differentiellen Kennlinien beobachtbar sind, liegt an den relativ dicken Barrieren von 4 bzw. 6,5 nm, bei denen der Streueinfluß dieses Temperaturbereiches jegliche Resonanzen verwischt. Diese Barrierenstruktur wurde für das Einelektronentunnelregime (unterhalb $T \approx 4 \text{ K}$) entwickelt und müßte bei alleinigem Transistoreinsatz für Raumtemperaturanwendungen zu dünneren Barrierensystemen hin optimiert werden.

Zur weiteren Charakterisierung des Schottky-Gates ist in der Abb. 5.2 die Eingangskennlinie in Durchlaß- und Sperrichtung für Raumtemperatur dargestellt. Man erkennt das ausgezeichnete Sperrverhalten bei einem Sperrstrom von unter 100 pA bis zu $U_{GS} = -3,0 \text{ V}$. Bei Durchlaßspannungen bis $U_{GS} \approx 0,2 \text{ V}$ ist sogar ein Betrieb mit positiver Gatespannung bei Raumtemperatur möglich mit Gateströmen unterhalb von 1 nA.

Man beachte, daß die hier gezeigten Kennlinien an den Proben, die in den Einelektronentunnel-

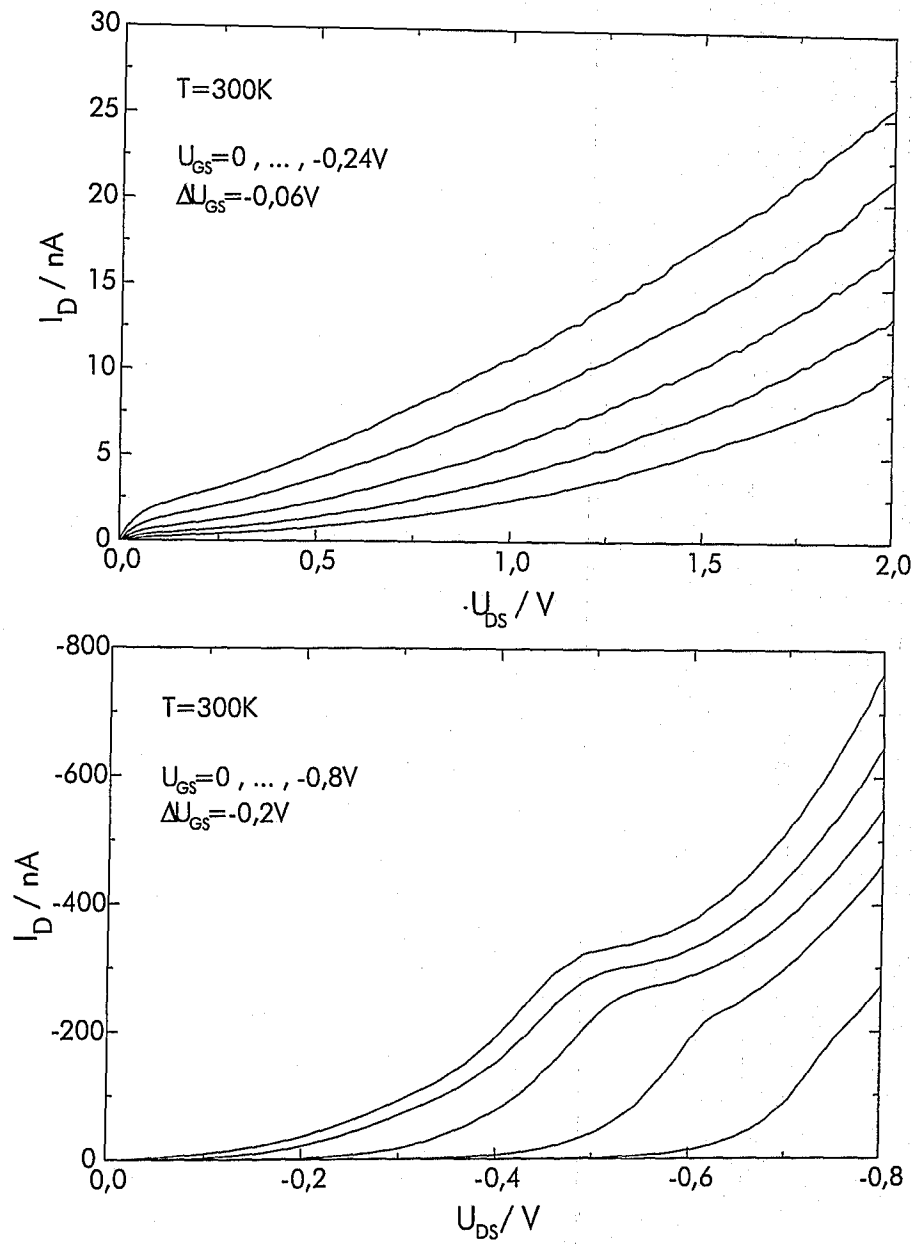


Abb.5.1: Ausgangs-Kennlinienfelder bei variierter Gate-Source-Spannung U_{GS} . Das Substrat ist immer die Referenzelektrode. $T = 300\text{ K}$.

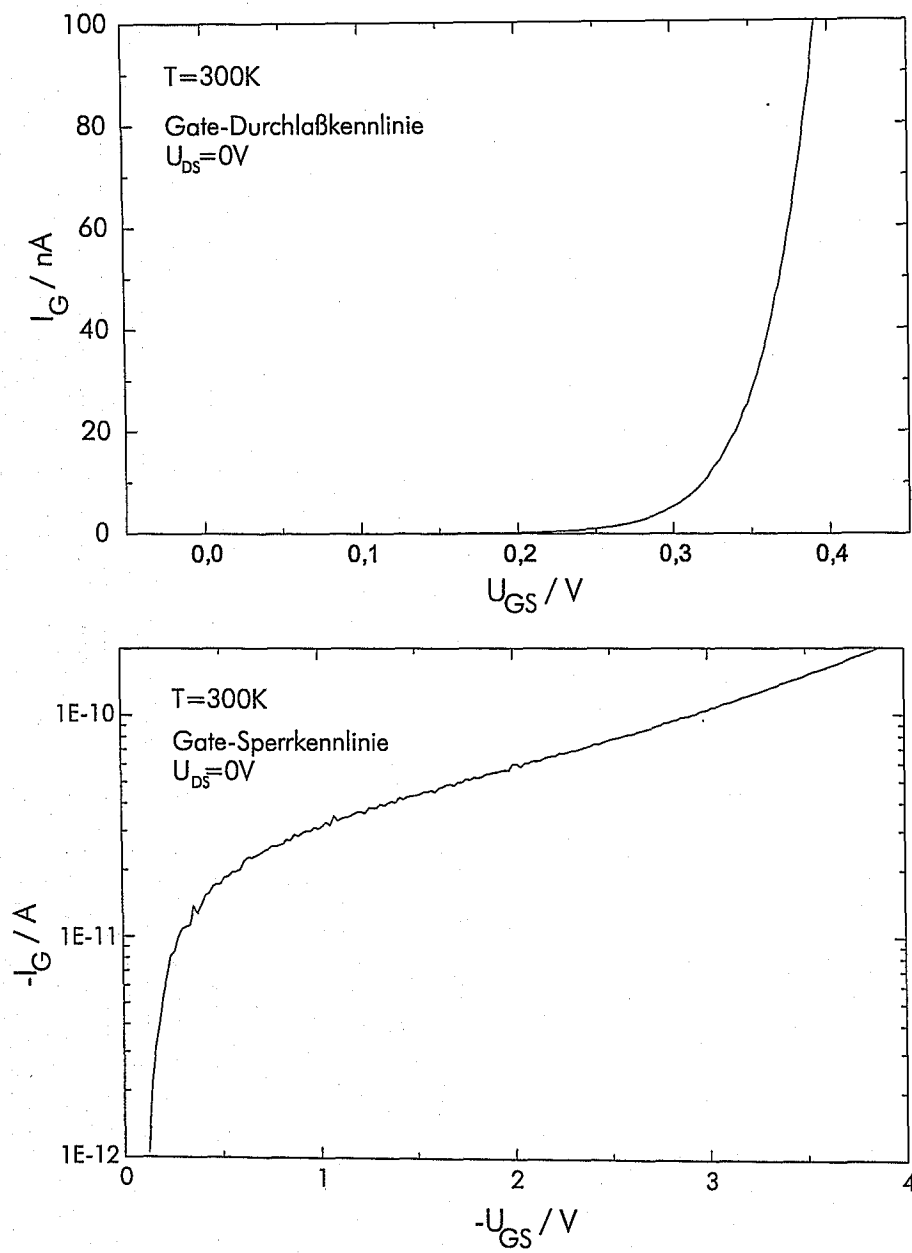


Abb.5.2: Gate-Kennlinien in Durchlaß- und Sperrichtung. $T = 300\text{ K}$.

Experimenten benutzt wurden, erst nachträglich aufgenommen wurden, um eine Schädigungsgefahr bei elektrischen Durchbrüchen zu vermeiden. Der Funktionstest der Probenserie geschah jedoch logischerweise vor den Tieftemperatur-Untersuchungen an nominell identischen Proben derselben Serie.

5.1.2 1,4K-Messungen

Wir betrachten nun die Kennlinienfelder derselben Probe bei $T = 1,4$ K. In der Abb. 5.3 sind die entsprechenden Meßkurven für Vorwärts- und Rückwärtsrichtung aufgetragen. Analog zu den Messungen bei Raumtemperatur kann man wiederum die geometriebedingten Unterschiede beider Spannungsrichtungen für die Drainspannung U_{DS} erkennen. Als wesentlicher Unterschied ist hier jedoch die um mehr als 0,5 V erhöhte Einsatzspannung der Kennlinien zu erkennen. Es handelt sich hierbei zum einen um den Spannungsabfall an den nichtoptimierten sub- μm ohmschen Kontakten bei Temperaturen unterhalb von 4 K. Zum anderen spielt sicherlich auch die im Hinblick auf gute Gate-Steuerbarkeit niedrig gewählte Dotierkonzentration im Mesabereich eine Rolle. In den Tieftemperaturmessungen spiegelt sich dieses Verhalten in hohen Offsets im Gegensatz zu den theoretisch ermittelten, niedrigeren Einsatzspannungen wider.

Im positiven Spannungsbereich $U_{DS} > 0$ (oberes Diagramm der Abb. 5.3) ist deutlich das Sättigungsverhalten des weiter zuschnürenden Gates zu erkennen. Man erkennt außerdem deutlich die Ausbildung eines negativ differentiellen Widerstandsbereiches, der die Funktionsfähigkeit der Resonanten Tunnelstruktur innerhalb des Transistors deutlich macht. Wegen der deutlich reduzierten Gateströme für diesen Temperaturbereich konnte ohne weiteres das Gate in gewissen Grenzen in Durchlaßrichtung betrieben werden. Die Gate-Kennlinien sind zur quantitativen Diskussion in der Abb. 5.4 aufgetragen. In einem Gate-Spannungsbereich von $U_{GS} = -2$ V bis $+0,7$ V bleibt der Gatestrom unterhalb von 30 pA. Diese Feststellung ist von besonderer Bedeutung für die Einelektronen-Experimente der folgenden Kapitel, bei denen innerhalb dieser Grenzen mit positiven Gatespannungen gearbeitet wird. Wir wollen nun den Einfluß der geometrischen Anordnung der Elektroden und der Barrierenstruktur untereinander näher diskutieren (siehe dazu im folgenden die Abb. 4.1). Bei positiven Drainspannungen ist der mesaseitige Bereich der Struktur der Kollektor, als gemeinsame Referenzelektrode dient somit der Emitter. Man beachte bei den folgenden Überlegungen, daß jegliche Strukturen in der Kennlinie (Einsatz, Peak, etc.) gegeben sind durch die relative energetische Lage ΔE des Doppelbarrieren-Potentialtopfes gegen die Fermienergie des Emitters. Unter negativ werdender Gatespannung kommt es in den Messungen zu einem Verschieben der Drain-Einsatzspannung U_{DS0} zu höheren Werten. Der zugehörige "Durchgriff" der Einsatzspannung (d.h. $I_D = \epsilon \rightarrow 0+$) beträgt hier $|dU_{GS}/dU_{DS0}| \approx 0,6$, welcher kleiner als 1 ist und somit dem klassischen Verhalten des Gates als Gitter zwischen Anode und Kathode in einer Vakuumröhre entspricht, wobei die Doppelbarriere sich hier ($U_{DS} > 0$) dann zwischen Gitter und Kathode befindet: Eine Gate-Spannungsänderung ΔU_{GS} sorgt für eine bestimmte Verkippung ΔE des Topfes gegen den Emitter, die von der entgegengesetzt gepolten Kollektor-Spannungsänderung ΔU_{DS} kompensiert werden muß, um den Drainstrom konstant zu halten.

$$\Delta E = -e(\alpha \Delta U_{DS} + \beta \Delta U_{GS}) \quad (5.1)$$

Da das Gate geometrisch gesehen den Kollektor gegen die Barrierenstruktur und den Emitter abschirmt, ist die benötigte Kollektoränderung betragsmäßig größer als die Gateänderung und damit der Durchgriff kleiner als 1. Im Gegensatz zur Einsatzspannung liegt die Position des Strompeaks erst bei sehr hohen Drainspannungen, und damit ist der Kanal mit Elektronen überflutet. Der kollektorseitige Bereich des eingeschnürten Kanals in der Höhe des Gates ist damit in seiner energetischen Lage fast unabhängig vom Gatepotential. Nur der Querschnitt wird noch schwach vom Gate gesteuert, was in der Modulation des Peakstromes bestätigt wird. Somit hat das Gate fast keinen Einfluß mehr auf die relative energetische Lage des unterhalb liegenden Doppelbarrieren-Potentialtopfes zum substratseitigen Emittersreservoir und damit auf die Drainspannung von Strukturen in der Ausgangskennlinie. Es legt nur die Lage des Potentials an der Oberfläche in der Höhe der Gateelektrode im Kollektorgebiet fest, wobei der Drainspannungsabfall hier eine tiefe "Potentialrinne" zieht. Diese Überlegung wird quantitativ durch die in erster Näherung vom Gate unabhängige Drain-Peakspannung bestätigt. Man erkennt weiterhin im Bereich um $U_{GS} \approx -0,2$ V das Auftreten einer weiteren Schulterstruktur im Valley-Bereich der Kennlinie. Es handelt sich hierbei wahrscheinlich um einen zusätzlichen Transportkanal, hervorgerufen durch quasigebundene Zustände im dreiecksförmigen Quantentopf vor der emitterseitigen Barriere (s. Kap. 2.2.1 und [4]).

In der negativen Drainspannungsrichtung $U_{DS} < 0$ im unteren Diagramm von Abb. 5.3 kommt es wie bei den Raumtemperaturmessungen zu einem starken Stromanstieg für absolut wachsende Drainspannungen, da eine negative Drainspannung einen öffnenden Effekt im Kanal hat. Die Tunnelkennlinie mit negativ differentielltem Widerstand ist hier wesentlich stärker ausgeprägt. Hier zeigt sich der Gateeinfluß zunächst wieder in einer gleichmäßigen Verschiebung der Drain-Einsatzspannung, hier allerdings mit einem Durchgriff von $|dU_{GS}/dU_{DS0}| \approx 1,6$, der größer als 1 ist. Um dies zu verstehen, betrachten wir wiederum die geometrische Anordnung des Gates relativ zum Potentialtopf, Emitter und Kollektor (siehe Abb. 4.1). Für den hier betrachteten Bereich negativer Drainspannungen liegt diesmal der Kollektor substratseitig, und der mit Elektronen gefüllte Emitter entspricht dem Mesagebiet, innerhalb dessen sich auch die Lage des Gates befindet. Nun ist also der Kollektor die gemeinsame Referenzelektrode. (Die Bezeichnung "Drain" ist für diese Polarität strenggenommen also nicht korrekt, wir wollen den Mesakontakt allerdings hier immer als Drainkontakt bezeichnen und die Spannung mit U_{DS} . Die Begriffe "Emitter" und "Kollektor" sollen dagegen korrekt die Elektronenreservoirs bezeichnen.) Eine negative Änderung der Drainspannung impliziert damit eine energetische Anhebung des mesaseitigen Emitters sowohl gegen das Gate als auch gegen den substratseitigen Kollektor. Das Schottky-Gate erzeugt im Emitterbereich bis in das Doppelbarrierensystem hinein eine leichte Potentialbarriere, die von der ebenfalls negativen Emitterspannung (d.h. Drainspannung) überwunden werden muß. Daher resultiert die zunehmende, negative Verschiebung der Einsatzspannung mit negativ werdender Gatespannung (s. unteres Diagramm der Abb. 5.3). Da die effektive Höhe der Gate-Barriere nicht der vollen Gatespannung entspricht, ist der Durchgriff bezüglich der Einsatzspannung hier auch größer als 1. Ein weiterer Effekt des Gates ist in den Kennlinien ebenfalls ersichtlich. Das Gatepotential hat auch einen Einfluß auf die relative energetische Lage des Doppelbarrieren-Potentialtopfes zum Emitter, es erzeugt, anders formuliert, eine leichte Vorverkipfung der Barrierenstruktur. Genau

dieser Einfluß äußert sich in der Kennlinie (s. unteres Diagramm der Abb. 5.3) im monoton abnehmenden Abstand zwischen Einsatz- und Peakspannung. Eine genauere quantitative Betrachtung der Peakspannung zeigt, daß diese sich um 28% weniger verschiebt als die Einsatzspannung.

Vergleich mit der Tunneldiodensimulation

Eine weitergehende quantitative Analyse der obigen qualitativen Argumente bedürfte einer selbstkonsistenten 3D-Simulation unter Einbeziehung von Quantentransport, welche zum Zeitpunkt der Arbeit noch nicht verfügbar war. Wir wollen hier jedoch einen einfachen Vergleich mit den Simulationen des Beispiels aus Kap. 2.2.1 (Abb. 2.2) machen. Dort wurde die hier experimentell untersuchte Struktur als makroskopische Diode simuliert. In diesem Sinne sind die folgenden quantitativen Auswertungen als Abschätzungen zu verstehen.

Zunächst betrachten wir die Drainspannungs-Skalierung beim Punkt $U_{GS} = 0$. Im Fall $U_{DS} < 0$ liefert das Experiment einen Wert von $U_{DS0}^{exp} = -0,80$ V für die Einsatzspannung und $U_{DSp}^{exp} = -0,98$ V für die Peakspannung, was einen Hub von $\Delta U_{DS}^{exp} = 0,18$ V ergibt. Vergleichend dazu liefert die Simulation die Werte $U_{DS0} = -0,032$ V und $U_{DSp} = -0,048$ V, was einen Hub von $\Delta U_{DS} = 0,016$ V ergibt. Weiterhin sagt die Simulation einen Faktor $\alpha \approx 0,4$ für die Abhängigkeit des Potentialtopfniveaus von der Drainspannung voraus. Damit folgt $\alpha^{exp} \approx 1/28$ aus den experimentellen Werten. Als Referenzspannung für α wurde dabei die Einsatzspannung gewählt (s. Gl.(2.12)). Der Unterschied in α von einem Faktor 11 zum theoretischen Wert liegt darin begründet, daß wir in den Simulationen in keinsten Weise den Einfluß des Gates auf den Kanal berücksichtigt haben. Man kann nun auch die am Kontakt abfallende Spannung abschätzen, indem man die theoretische Einsatzspannung mit diesem Korrekturfaktor multipliziert von der experimentellen Spannung abzieht. Man erhält dann $U_{kontakt} \approx 0,44$ V für die am Kontakt abfallende Spannung. Wir betrachten nun noch die Größen der gemessenen und simulierten Peakströme. Bei einer simulierten Peakstromdichte von $j \approx 78,0$ A/cm² und einem experimentellen Peakstrom von 400 nA liefert dies einen effektiven Kanaldurchmesser von $d = 716$ nm. Bei einem Mesadurchmesser von ca. 660 nm (am Fuß der Mesa, s. Kap. 3) muß der Kanal unterhalb des Gates vor der ersten Barriere also trichterförmig aufgeweitet sein, was im hier betrachteten Bereich negativer Drainspannungen, welche der Gate-Raumladungszone reduzierend entgegenwirken, verständlich ist.

Im Fall $U_{DS} > 0$ ergibt das Experiment einen Wert von $U_{DS0}^{exp} = 0,75$ V und $U_{DSp}^{exp} = 2,75$ V, was einen Hub von $\Delta U_{DS}^{exp} = 2,00$ V ergibt. Die Simulation liefert die Werte $U_{DS0} = 0,035$ V und $U_{DSp} = 0,140$ V, was einen Hub von $\Delta U_{DS} = 0,105$ V ergibt. Weiterhin sagt die Simulation einen Faktor $\alpha \approx 1/20$ für die Abhängigkeit des Potentialtopfniveaus von der Drainspannung voraus. Damit folgt $\alpha^{exp} \approx 1/380$ aus den experimentellen Werten. Als Referenzspannung für α wurde dabei wieder die Einsatzspannung gewählt (s. Gl.(2.12)). Der Faktor der Abweichung in α von Experiment und Theorie liegt hier bei 19 und damit in derselben Größenordnung wie für $U_{DS} < 0$. Dieser mittlere experimentelle Wert von α für den gesamten Bereich vom Einsatz bis zum Peak ist allerdings rein rechnerisch unter der Annahme eines vernachlässigbaren Gateeinflusses zu verstehen. Eine solche Annahme ist jedoch nicht gerechtfertigt, da für wachsende Drainspannungen der Kanal immer mehr zuschnürt, und damit α immer mehr abnimmt (vgl. Abb. 2.2), so daß

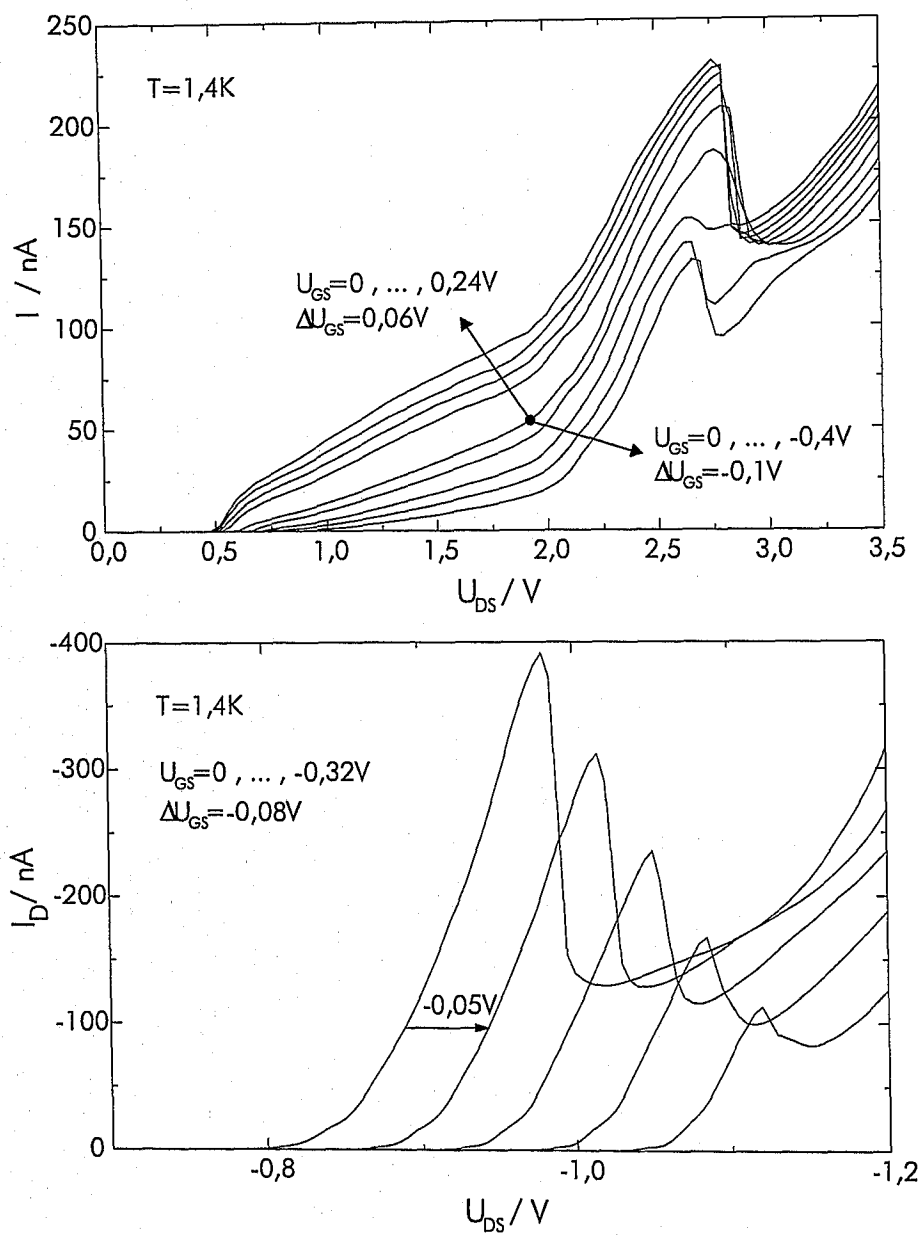


Abb.5.3: Ausgangs-Kennlinienfelder bei variierter Gate-Source-Spannung U_{GS} . Das Substrat ist immer die Referenzelektrode. $T = 1,4 \text{ K}$.

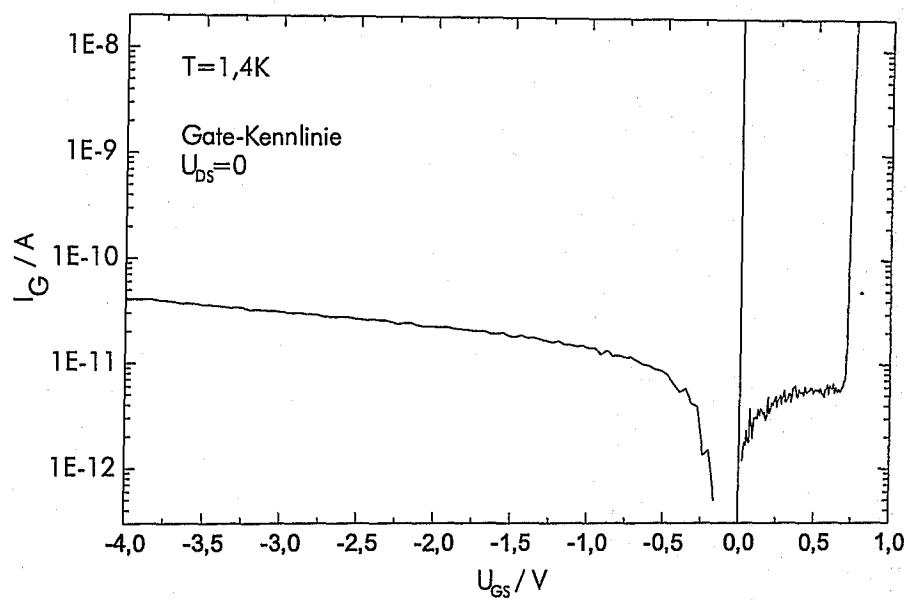


Abb.5.4: Gate-Kennlinien in Durchlaß- und Sperrichtung. $T = 1,4 \text{ K}$. In Durchlaß-Richtung setzt der Gatestrom ($>10 \text{ pA}$) erst ab $U_{GS} = 0,71 \text{ V}$ ein.

die experimentelle Peakspannung wesentlich größer ausfällt als die einfache Hochskalierung der simulierten Peakspannung. Der experimentell richtige Wert von α für die Umgebung der Einsatzspannung wird im folgenden Kapitel zum Einelektronentunneln auf eine vollständig andere Weise nochmals ermittelt. (Wir werden sehen, daß der dort bestimmte Wert von α sehr gut zu dem obigen experimentellen Ergebnis zu α für $U_{DS} < 0$ paßt.) Bei einer simulierten Peakstromdichte von $j \approx 230 \text{ A/cm}^2$ und einem experimentellen Peakstrom von -200 nA erhält man einen effektiven Kanaldurchmesser von $d = 295 \text{ nm}$, was eine realistische Größenordnung ist.

Gateeinfluß auf den Strom

Wir wollen nun den Einfluß der Gatespannung auf die Kennlinien detaillierter betrachten. Zu den interessierenden Parametern gehören hier die Höhe des Strompeaks und das Verhältnis aus Peak- zu Valleystrom (PVR) der Tunnelkennlinie. In der Abb. 5.5 sind diese Größen für beide Drain-Spannungsrichtungen aufgetragen.

Beginnen wir mit der Diskussion der Peakströme, die im oberen Diagramm der Abb. 5.5 dargestellt sind. Im Bereich positiver Drainspannungen $U_{DS} > 0$ zeigt sich nur eine sehr schwache Abhängigkeit von der Gatespannung U_{GS} . Wie schon bei der Diskussion zur spannungsmäßigen Position des Peaks für diesen Fall erklärt, hat das Gate bei den hohen Drainspannungen, die im Peak der Tunnelkennlinie auftreten, nur noch einen schwachen Einfluß auf die Potentialverteilung im Kanal. Dagegen zeigt sich der Einfluß des Gates auf den effektiven Kanalquerschnitt im Fall negativer Drainspannungen $U_{DS} < 0$ wesentlich stärker. Wir wollen hier ein einfaches 1D-Modell betrachten, das den effektiven Querschnitt des Emitters in Gatehöhe als Funktion der Gatespannung beschreibt. (Eine genauere Betrachtung des lateralen Potentials in der Höhe des Doppelbarrieren-Potentialtopfes wird erst im folgenden Kapitel zum Gateeinfluß auf das Einelektronentunneln vorgestellt.) Die Ausdehnung l der Raumladungszone eines Schottky-Übergangs der Dotierung n mit einem Fermilevel-Pinning von U_0 lautet

$$l = \sqrt{\frac{2\epsilon_0\epsilon_r(U_0 - U_{GS})}{ne}}. \quad (5.2)$$

Der effektive, klassische Durchmesser d des Kanals beträgt dann bei beidseitiger Einschnürung

$$d = L - 2l \quad (5.3)$$

mit der geometrischen Breite L der Mesa. Es folgt dann aus der Stromdichte j

$$f := \left| \frac{\partial I}{\partial U_{GS}} \right|_{U_{GS}=0} = 4j d \Delta l \quad \text{mit} \quad \Delta l := \left| \frac{\partial l}{\partial U_{GS}} \right| = \sqrt{\frac{\epsilon_0\epsilon_r}{2U_0ne}} \quad (5.4)$$

der lineare Zuwachs f um $U_{GS} = 0$. Man beachte, daß dies nicht der Steilheit bei konstanter Drainspannung experimentell entspricht, sondern der Steigung unter gatespannungsabhängiger Drain-Peakspannung, bei der die Transmission der Doppelbarriere konstant bleibt.

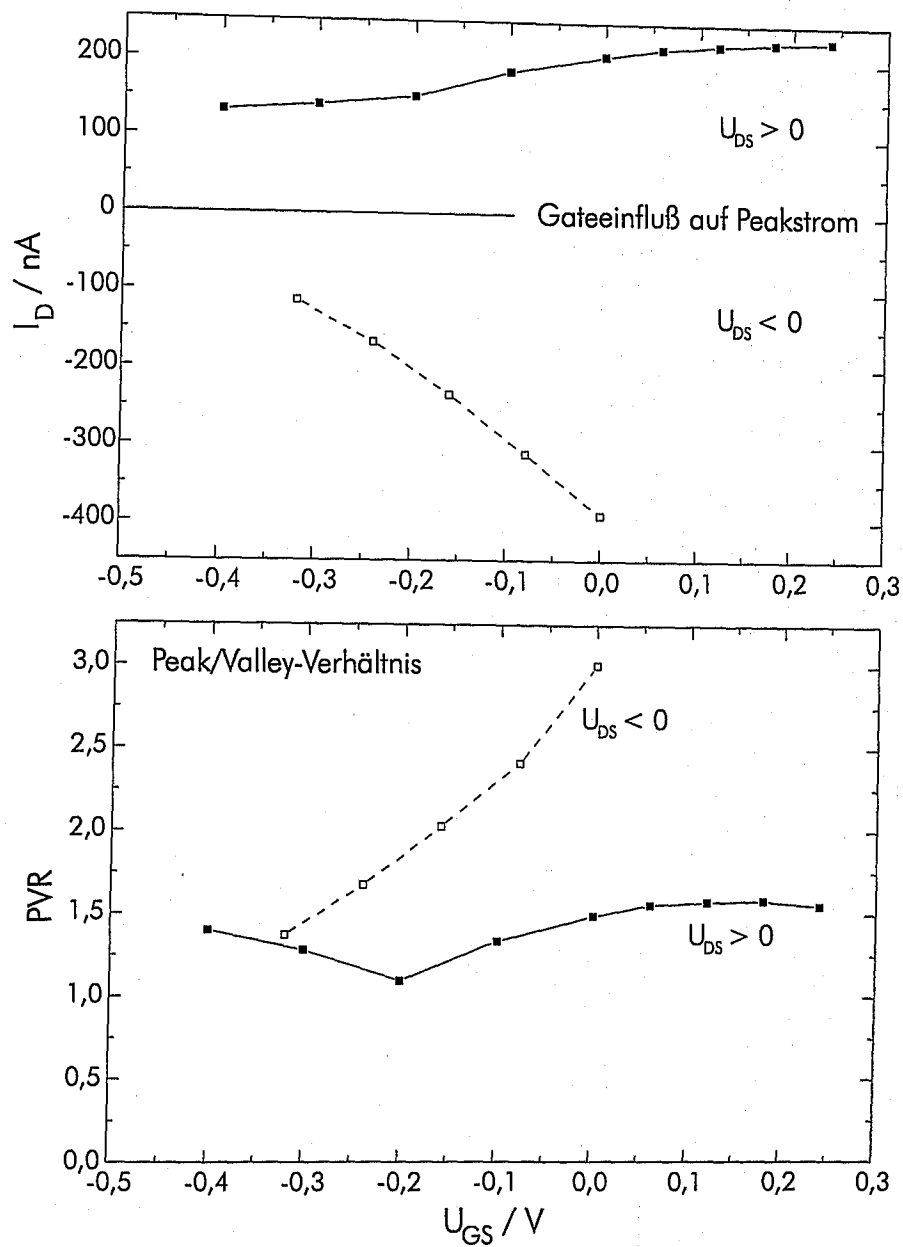


Abb.5.5: Übertragungseigenschaften des Gates bei $T = 1,4$ K. Obere Abbildung: Peakstrom als Funktion der Gatespannung für beide Diodenspannungsrichtungen. Für $U_{DS} > 0$ ist nur eine sehr schwache Abhängigkeit zu verzeichnen, für $U_{DS} < 0$ besteht näherungsweise ein linearer Zusammenhang. Untere Abbildung: Peakstrom-Valleystrom-Verhältnis (PVR) als Funktion der Gatespannung für beide Diodenspannungsrichtungen.

Aus den nominellen Werten der Struktur von $n = 2,0 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $\epsilon_r = 13,1$ und einem Fermilevel-Pinning von $U_0 = 0,7 \text{ V}$ erhält man für die Ausdehnung der Raumladungszone $l = 225 \text{ nm}$ und die Konstante $\Delta l = 161 \text{ nm/V}$. Aus der obigen, simulierten Stromdichte für $U_{DS} < 0$ von $j = 78,0 \text{ A/cm}^2$ und dem daraus bestimmten Wert für den effektiven Kanaldurchmesser von $d = 716 \text{ nm}$ erhält man dann für die Steigung $f^{theo} = 359 \text{ nA/V}$. Der experimentelle Verlauf im oberen Diagramm von Abb. 5.5 zeigt tatsächlich in erster Näherung einen linearen Zusammenhang für $U_{DS} < 0$. Ein linearer Fit an die Meßdaten liefert dann $f^{exp} = 874 \text{ nA/V}$. Die Abweichung vom theoretischen Wert um etwa einen Faktor 2 kann man zum einen durch eine zu geringe theoretische Stromdichte begründen. Für negative Drainspannungen ist die dann obenliegende Emitterbarriere dicker als die Kollektorbarriere und somit strombestimmend. Eine geringfügig stärkere Verkipfung der Emitterbarriere unter dem Einfluß des Gatepotentials läßt die Peakstromdichte j ansteigen und damit auch die Steigung $f^{theo} \propto \sqrt{j}$ bei festem Peakstrom I (da $d = \sqrt{I/j}$). Man beachte ferner, daß mit zunehmender Drainspannung, die wir betrachten müssen bei der Bestimmung der Peakspannung in Abhängigkeit der variierten Gatespannung, der Kanal wegen der hier untersuchten negativen Drainspannungs-Polarität weiter geöffnet wird. Auch dieser positive Effekt auf f^{theo} ist im Modell nicht berücksichtigt. Zum anderen ist im wesentlichen der Querschnitt im Bereich der Barrieren (ca. 100 nm unterhalb des Gates) und nicht in Gatehöhe maßgeblich für den Strom, so daß mit einem effektiv kleinerem Pinning U_0 die Steigung f^{theo} größer wird. Sicherlich ist dieses klassische Modell zur Gatewirkung nur eine grobe Näherung für den 3D-Potentialverlauf im Gatebereich des Emitters, insbesondere müßte man hier 1D-Subbänder betrachten und nicht klassische Querschnitte. Trotzdem lassen sich die experimentellen Werte gut erklären.

Zum Schluß der Diskussion der Transistoreigenschaften betrachten wir noch den Verlauf des Peak-Valley-Stromverhältnisses (PVR), der im unteren Diagramm der Abb. 5.5 dargestellt ist.

Für den Fall positiver Drainspannungen $U_{DS} > 0$ bleibt das PVR annähernd konstant bei variierender Gatespannung. Die Dip-Struktur fällt mit dem Auftreten der Schulter-Struktur in der Strom-Spannungs-Kennlinie zusammen (siehe Abb. 5.3). Bei großen $U_{DS} > 0$ im Peakbereich ist der Einfluß des Gates auf die Barrierenregion geringer (s.o.) und der Potentialverlauf aufgrund der hohen Drainspannungen kollektorseitig konstant stark verkippt.

Der Fall negativer Drainspannungen $U_{DS} < 0$ gestaltet sich dagegen interessanter. Zum einen ist das PVR hier fast doppelt so hoch und zum anderen fällt das PVR bei zusteuerndem Gate um einen Faktor zwei auf einen ähnlich niedrigen Wert wie für $U_{DS} > 0$. Aufgrund des kleineren effektiven Querschnittes bei negativeren Gatespannungen nimmt der Valleystrom ab, allerdings nicht in dem Maße wie der Peakstrom, was sich in einem sinkenden PVR äußert. Um dies zu verstehen betrachte man das untere Diagramm der Abb. 5.3. Die negativer werdende Gatespannung verschiebt die gesamte Tunnelkennlinie zu negativeren Drainspannungen, was in einer zunehmenden, dreidimensionalen Potentialverzerrung in der Barrierenregion resultiert. Zum einen verkippen dabei die Barrieren stärker. Zum anderen kommt es hier zu einem zunehmend nichtkonstanten lateralen Querschnitt in Transportrichtung, der zu einer Mischung der eindimensionalen Subbänder im Transport führt. Diese Verkipfung der Barrieren und die Modenmischung führt zu einem abnehmenden PVR.

5.2 Einelektronentunneln

In diesem Abschnitt werden die gemessenen Strom-Spannungs-Kennlinien im Temperaturbereich unter 2 K in der Nähe der Einsatzspannung in Abhängigkeit der angelegten Gate-Spannung und eines äußeren Magnetfeldes genauer untersucht. Die beobachteten, typischen Einelektronen-Stromstufen des Anreicherungsfalltes, das heißt $U_{DS} > 0$, werden dabei mit Hilfe der theoretischen Überlegungen des Kap. 2 ausgewertet. Für diesen Fall $U_{DS} > 0$ ist die Mesaelektrode also der Kollektor, dessen zugewandte Barriere dicker ist als die substratseitige Emitterbarriere (siehe Abb. 4.1).

Die hier vorgestellten Meßergebnisse wurden mit Hilfe der pA-Meßelektronik des Kap. 4 aufgenommen. Dabei befand sich die Probe im Mischkryostaten innerhalb eines variablen, homogenen Magnetfeldes parallel zur Transportrichtung (s. Kap. 4). Aus Kalibrationsmessungen kann der maximale Fehler im Strom zu ± 10 pA (bzw. ± 1 pA bei Messungen unterhalb von 1 nA) und in der Spannung zu ± 1 mV angegeben werden. Die Temperaturgenauigkeit beträgt 10% und das Magnetfeld hat einen maximalen Fehler von 0,01 T.

5.2.1 Temperatur-Einfluß

In der Abb. 5.6 sind die Strom-Spannungs-Kennlinien in der Nähe des Einsatzpunktes dargestellt. Die Gatespannung wurde hier fest auf $U_{GS} = +200$ mV eingestellt, wobei der Gatestrom parallel überwacht wurde und immer unterhalb 1 pA lag. Man erkennt deutlich die Ausbildung von Einelektronenstufen gleichbleibender Höhe. Zu höheren Spannungen hin zeigt sich eine zunehmende Verschmierung der Stufen aufgrund der stärkeren Verkipfung im Barrierensystem. Die Kennlinien der beiden Temperaturen $T = 1,4$ K und $T = 30$ mK unterscheiden sich zunächst in der Einsatzspannung. Es handelt sich hierbei um einen Aufladungseffekt innerhalb der Isolationsschichten (Polyimid), die an die Mesa angrenzen. Solche Ladungen sind äquivalent zu einer leichten Verschiebung der Gatespannung. Die Zeitkonstanten zur Umladung liegen hier im Bereich von Stunden (siehe Kap. 5.2.2 zum Magnetotransport). Zum anderen zeigen die unterschiedlichen Temperaturen auch den erwarteten Einfluß auf die Stufenflanken bei unveränderter Stufenhöhe. Wie aus den Überlegungen des Kap. 2.2.2 hervorgeht, läßt sich die Stromflanke als Funktion der Energiedifferenz vom chemischen Potential im Emitter und der Lage des Quasibindungsniveaus beschreiben als eine Faltung einer Lorentzkurve mit der Fermiverteilungsfunktion zur Elektronentemperatur. Die Breite der Lorentzkurve ergibt sich dabei aus der Lebensdauer der Quasibindungszustände im Quantendot. Man beachte, daß die Umrechnung der Energiedifferenz auf die Spannungsachse hier aus einer Umskalierung mit dem noch unbekannten Faktor α relativ zum Einsatzpunkt besteht. Man beachte, daß hier also die Einsatzspannung U_{DS0} als Referenzpunkt für α genommen wird (siehe dazu die Definition Gl.(2.12)).

Für 1,4 K ist die erste Stufenflanke in sehr guter Näherung durch eine Fermifunktion

$$I(U_{DS}) = \frac{I_{step}}{\exp\left(\frac{U_{DS} - U_{DS0}}{U_{kT}}\right) + 1} + I_{offset} \quad (5.5)$$

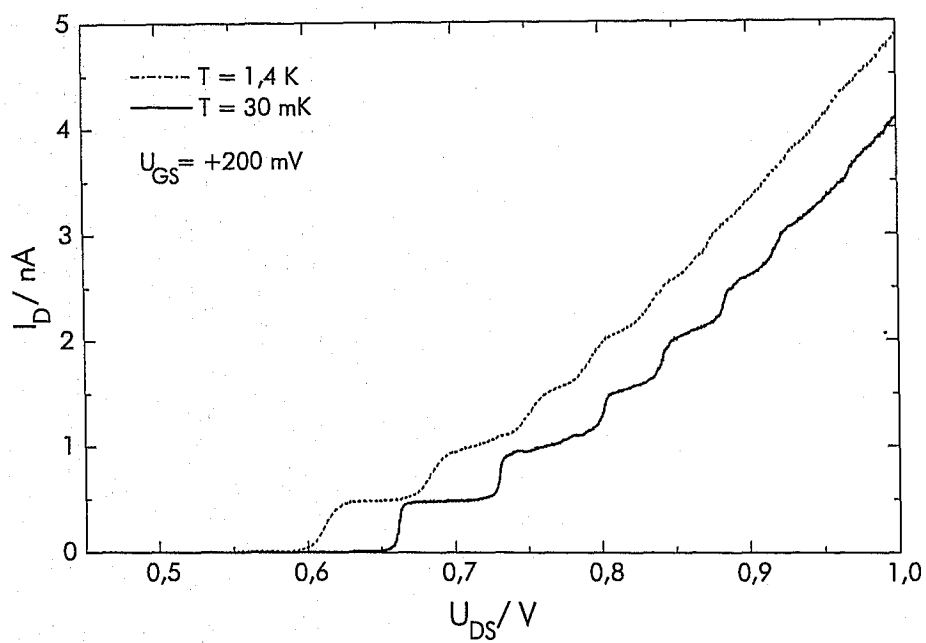


Abb.5.6: Einelektronen-Tunnelmessungen bei $T = 30 \text{ mK}$ und $1,4 \text{ K}$ ohne äußeres Magnetfeld. Die Gatespannung war konstant bei $U_{GS} = 200 \text{ mV}$.

anpassbar. Der Fit liefert für die Stufenhöhe $I_{step} = 475 \text{ pA} \pm 1\%$. Eine Simulation der vorliegenden Barrierenstruktur im Beispiel des Kap. 2.2.2 liefert 496 pA , was eine ausgezeichnete Übereinstimmung bedeutet. Des weiteren erhält man aus dem Fit eine Flankenbreite von $U_{kT} = 4,52 \text{ mV} \pm 1\%$ und eine Einsatzspannung von $U_{DS0} = 0,612 \text{ V} \pm 1\%$. Von dieser Stufenbreite U_{kT} muß noch der Beitrag aus der Lorentz-Verbreiterung (s.o.) der Niveaus durch Kopplungs-Selbstenergie, Streuung, Störeinstrahlung etc. abgezogen werden. Hierzu bietet sich die unter denselben sonstigen Randbedingungen aufgenommene Kennlinie bei $T = 30 \text{ mK}$ an, bei der die nominelle Temperaturverbreiterung von $2,6 \text{ } \mu\text{eV}$ vernachlässigbar ist. Tatsächlich läßt sich die experimentell gefundene erste Stufenflanke für 30 mK nur schlecht durch eine Fermifunktion anpassen, da die hochenergetischen Ausläufer nicht exponentiell sind, sondern eher einem Potenzgesetz gehorchen. Bei einer Anpassung der numerisch abgeleiteten Stufenfunktion an eine Funktion der Lorentzform

$$I' = I'_0 + \frac{A}{\pi} \frac{\frac{w}{2}}{(U_{DS} - U_{DS0})^2 + \left(\frac{w}{2}\right)^2} \quad (5.6)$$

erhält man für die Partialbreite $w = 3,17 \text{ mV} \pm 1\%$. Die Fläche $A = 515 \text{ pA} \pm 1\%$ entspricht dabei der Stufenhöhe, welche sehr gut zum Ergebnis bei $1,4 \text{ K}$ paßt. Mit dem numerisch bestimmten Wichtungsfaktor $k = 1/2,956$ für die zusätzliche Verbreiterung der $1,4 \text{ K}$ -Fermifunktion durch die hier angegebene Lorentzkurve erhält man schließlich für die reine Temperaturverbreiterung der $1,4 \text{ K}$ -Kennlinie eine Spannung von $\Delta U_{1,4K} = 3,46 \text{ mV} \pm 2\%$. Unter Zuhilfenahme der Beziehung

$$e \Delta U = \frac{1}{\alpha} k_B T \quad (5.7)$$

liefert dies mit $T = 1,4 \text{ K} \pm 10\%$ den gesuchten Umrechnungsfaktor $\alpha = 1/28,6 \pm 13\%$.

Ein Vergleich mit der Auswertung zur Transistor-Kennlinie bei $1,4 \text{ K}$ im Kap. 5.1.2, welche einen Wert von $\approx 1/28$ für negative Drainspannungen liefert, zeigt eine gute Übereinstimmung. Ein direkter Vergleich mit der hier im Einelektronentunneln untersuchten positiven Spannungsrichtung ist zur Bestätigung der Größenordnung von α in der unmittelbaren Umgebung des Einsatzzpunktes, also der ersten Stufenflanke, wo noch keine weiteren Elektronen im Topf vorhanden sind, zulässig. Bei wachsenden, positiven Spannungen im Anreicherungsfall äußert sich die damit einhergehende Elektronenanreicherung im Potentialtopf im Rahmen der Hartree-selbstkonsistenten Potentialberechnung in Form des drastisch sinkenden Wertes von α (s. Kap. 2.2.1 und Abb. 2.2). Da wir jedoch die für den sinkenden α -Wert verantwortliche Elektron-Elektron-Wechselwirkung in den folgenden Abschnitten explizit betrachten, werden wir diesen Einfluß auf α nicht berücksichtigen und von einem konstanten α ausgehen. Die spannungsmäßige Streckung (d.h. kleines α) der Kennlinie in der klassischen Hartree-selbstkonsistenten Berechnung aufgrund der Wechselwirkung ist interessanterweise im Lichte der expliziten quantentheoretischen Berücksichtigung dieser Abstoßung nichts anderes als die Verlängerung der Stufenplateaus um die Wechselwirkungsenergie. Im Mittel wird die Kennlinie also auch hier spannungsmäßig gestreckt, allerdings mit einer Stufung.

Aus dem oben ermittelten Faktor α läßt sich nun rückwärts aus der bestimmten Spannungs-

Partialbreite w die intrinsische Partialbreite $\Gamma = e\alpha w \approx 110 \mu\text{eV}$ berechnen. Allein schon der Vergleich mit dem Wert der Kopplungs-Selbstenergie aus Kap. 2.2.2 von $\Gamma^L + \Gamma^R \approx 50 \mu\text{eV}$ zeigt eine gute Übereinstimmung. Unter der Annahme einer realistischen zusätzlichen Verbreiterung von ca. $60 \mu\text{eV}$ (vgl. $k_B T \approx 2,6 \mu\text{eV}$ bei 30 mK) durch Streuung und elektromagnetische Einstrahlung paßt der Wert von α also gut zur Simulation.

Eine weitere interessante Eigenschaft ist in der 30 mK-Kennlinie der Abb. 5.6 zu erkennen. Einige der Stufenplateaus besitzen eine reproduzierbare, leichte Feinstruktur. Diese kleinen Stromfluktuationen spiegeln Zustandsdichte- und Kopplungs-Fluktuationen der über die Barrieren angekoppelten Elektronenreservoirs wider. Im Kap. 2.3.5 des Theorieteils dieser Arbeit wurde die Möglichkeit solcher Fluktuationen vorausgesagt.

Zum Schluß der Betrachtung des Temperatureinflusses auf die Kennlinien wollen wir noch kurz eine Abschätzung der Verlustleistung innerhalb der Probe geben. Die maximale Wärmeleistung bei einer Spannung von $U = 1 \text{ V}$ und einem fließenden Strom von $I = 5 \text{ nA}$ beträgt $P = UI \approx 5 \text{ nW}$, was vernachlässigbar gegen die vom Kryostaten abführbare Leistung von $400 \mu\text{W}$ bei 100 mK ist [68], insbesondere kann von einem Gleichgewicht der Elektronenreservoir-Temperaturen zum Kristallgitter ausgegangen werden.

5.2.2 Magnetotransport

Ziel dieses Abschnittes ist es, eine Auswertung der Stufenbreiten in der Strom-Spannungskennlinie in Abhängigkeit eines äußeren Magnetfeldes vorzunehmen, um daraus Aussagen über die elektronische Struktur im Quantendot zu erhalten (zur Methode siehe [9, 11, 12, 13]). Bei allen Experimenten liegt das homogene Magnetfeld B parallel zur Transportrichtung. Die Gate-Spannung wurde konstant auf $U_{GS} = +200 \text{ mV}$ wie im vorherigen Abschnitt gehalten, wobei der Gatestrom dabei unterhalb von 1 pA blieb.

Laterale Quantisierungsenergie

Die wichtigste Größe, die wir benötigen, ist die laterale Quantisierungsenergie E_{lat} innerhalb des Quantendots. Als Ausgangspunkt dient dabei die spannungsmäßige Breite $U_{12} = 78 \text{ mV} \pm 1,3\%$ der ersten Stromstufe bei $B = 0$, bei der es sich also um die Hinzufügung eines weiteren Elektrons zu einem bereits vorhandenen Elektron handelt. Über den bereits bestimmten Umrechnungsfaktor α erhält man daraus eine Wechselwirkungsenergie von $E_{12} = e\alpha U_{12} = 2,7 \text{ meV} \pm 13\%$. (Der relativ große Fehler ergibt sich aus der Ungenauigkeit bei der Bestimmung von α .) Die weiteren Überlegungen beziehen sich nun auf die theoretischen Ergebnisse des Kap. 2.3 und die Simulationen in Kap. 2.3.6 zu der vorliegenden Struktur. Aus einem doppeltlogarithmischen Polynomfit der Tab. 2.2 bzw. der Abb. 2.8 erhält man eine laterale Quantisierungsenergie von $E_{lat} = 1,0 \text{ meV} \pm 13\%$. (Bei der Fehlerangabe beachte man, daß wir hier keinen prinzipiellen Fehler durch die modellmäßige Beschreibung und die theoretischen Näherungen berücksichtigt haben. Es handelt sich hierbei mehr um einen Fitparameter zur Simulation.) Da uns der genaue laterale Einteilchen-Potentialverlauf innerhalb der Barrierenstruktur nicht zugänglich ist, werden wir hier nur eine obere und untere Schranke für die zu erwartende laterale Quantisierungsenergie E_{lat} angeben.

Nimmt man ein harmonisches Potential innerhalb der Struktur mit einem Potential-Pinning von $0,7 \text{ V} - U_{GS} = 0,5 \text{ V}$ an der Oberfläche und einem Mesadurchmesser von $d = 660 \text{ nm}$ an, so ergibt dies eine Obergrenze von $E_{lat}^{max} \approx 3,2 \text{ meV}$. Berücksichtigt man demgegenüber vollständig die Raumladungszone von 225 nm beidseitig mit einem plateauförmigen Potentialverlauf von 212 nm Breite im Inneren, so liefert die numerische Berechnung der Eigenwerte eine untere Grenze von $E_{lat}^{min} \approx 0,05 \text{ meV}$. In der realen Struktur wird sich die Quantisierungsenergie zwischen diesen beiden Extremen bewegen. Die aus der Wechselwirkungsenergie berechnete laterale Quantisierungsenergie von $1,0 \text{ meV}$ paßt demnach gut zur untersuchten Struktur und deutet auf einen fast harmonischen lateralen Potentialverlauf hin.

Einsatzspannungen im Magnetfeld

Ausgehend von der so bestimmten lateralen Quantisierungsenergie lassen sich nun die Magnetotransport-Messungen auswerten. In der Abb. 5.7 ist nun die spannungsmäßige Position der Einelektronen-Stufenflanken als Funktion des äußeren Magnetfeldes aufgetragen. In einem ersten Schritt wollen wir den Verlauf der untersten Stufe mit sich veränderndem Magnetfeld mit dem theoretischen Modell eines 1D-Reservoirs mit lateral harmonischem Potential des Kap. 2.3.5 beschreiben [4, 5].

Unter der Wahl einer optimierten eindimensionalen Elektronenkonzentration von $350 \mu\text{m}^{-1}$ und unter Anpassung der Einsatzspannung bei $B = 0$ läßt sich der in der Abb. 5.7 gezeigte theoretische Verlauf (durchgezogene Linie) mit obigem $\alpha = 1/28,6$ berechnen. Als wesentliche Struktur wird hier der experimentell sichtbare Dip bei $B = 2 \text{ T}$, der einer Entleerung eines Subbandes entspricht, und das Krümmungsverhalten wiedergegeben. Weiterhin ist auch der vorhergesagte Spannungshub von 0 bis 12 T mit den experimentellen Daten in guter Übereinstimmung. Auch die aus der angegebenen Elektronenkonzentration leicht zu berechnende Lage des Fermi-niveaus von $6,0 \text{ meV}$ paßt gut zu dem simulierten Wert von $4,6 \text{ meV}$ (s. Kap. 2.2.1) für eine makroskopische Tunnelodiode identischer Schichtabfolge und Dotierung. Die Abweichungen in den Funktionen sind auf die vereinfachenden Annahmen eines wechselwirkungsfreien, lateral harmonischen 1D-Reservoirs zurückzuführen.

Elektronenbefüllung im Magnetfeld

Wir wollen uns nun den höheren Elektronenstufen zuwenden. Dazu betrachten wir nur noch die Spannungsdifferenz $\Delta U_{DS}(B) = U_{DS}(B) - U_{DS0}(B)$ zur Einsatzspannung $U_{DS0}(B)$, d.h. zur Flanke der niedrigsten Stufe, für jedes Magnetfeld B . Die sich so ergebenden höheren Stufenpositionen sind in der Abb. 5.8 als Funktion des Magnetfeldes aufgetragen. In dasselbe Diagramm sind nun auch die simulierten Stufenpositionen eingezeichnet. Hierbei wurde der obige Wert von $\alpha = 1/28,6$ und die oben bestimmte laterale Quantisierungsenergie $E_{lat} = 1,0 \text{ meV}$ vorausgesetzt. Wie man eindeutig an dem parallelen und näherungsweise äquidistanten Stufenverlauf erkennen kann, handelt es sich um einen Quantendot im kapazitiven Regime (zur Definition siehe Kap. 2.3.6). Obwohl wir hier nur $0,1,2,3,\dots$ Elektronen auffüllen geht hier eine Vielzahl von Einelektronenzuständen ein. Zur Simulation wurden 50 Einteilchenlevel und ein 512 bis 2048 di-

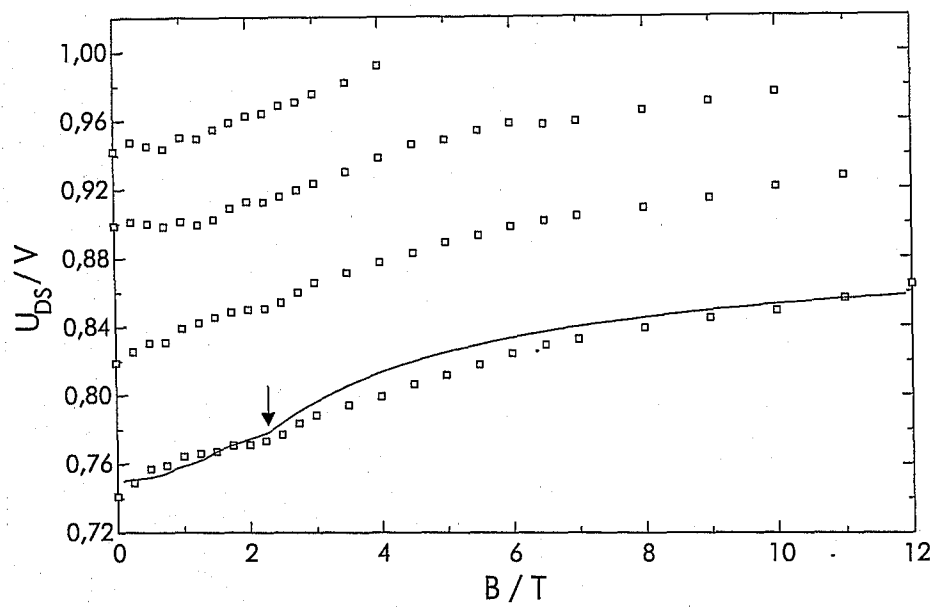


Abb.5.7: Magnetotransport-Messungen bei $T = 30$ mK und $U_{GS} = 200$ mV. Die gemessenen Einelektronen-Stufenflankenpositionen sind als Quadrate dargestellt, wobei der simulierte Verlauf der ersten Stufe als durchgezogene Linie eingezeichnet ist. Die Entleerung eines Subbandes mit wachsendem Magnetfeld ist als Dip an der Pfeilposition klar zu erkennen. Auch das Krümmungsverhalten von Simulation und Messung stimmt überein.

mensionaler Fockraum betrachtet. Die ersten drei Stufenverläufe (d.h. bis 3 Elektronen) passen hervorragend zu den experimentellen Werten, selbst für hohe Magnetfelder (hier bis 6 T simuliert). Die Abweichungen im Bereich von 4 oder mehr Elektronen für höhere Magnetfelder können verschiedene Ursachen haben. Zum einen wurde ein lateral harmonisches Potential bei der Simulation zugrundegelegt und Kopplungs-Selbstenergien vernachlässigt, wodurch anharmonische Effekte bei höheren Energien sicher eine Rolle spielen. Desweiteren stellen die simulierten Energien aufgrund der endlichen Projektion eine obere Grenze dar, was sich auch im Diagramm widerspiegelt. Als weiterer Punkt kommt noch die Abweichung des Quantendots vom Anreicherungsfall hinzu. Wie schon im Beispiel des Kap. 2.2.2 deutlich wurde, kommt es bei höheren Spannungen bereits zu einer nichtganzzahligen Besetzung des Systems, da hier die Barrierenasymmetrie kleiner wird. Als Folge ist die Dichtematrix einem zunehmenden Einfluß der dickeren Kollektorbarriere ausgesetzt. Nur ein extremeres Barrierendickenverhältnis kann diesem Phänomen entgegenwirken. (Für eine experimentelle Untersuchung des Barrierenverhältnisses siehe [70].)

Wir sind also mit Hilfe der Vielteilchensimulation in der Lage mehrere höhere Elektronenbesetzungen als Funktion des Magnetfeldes sehr gut zu beschreiben, im Gegensatz zur einfachen Einteilchenbetrachtung eines harmonischen Oszillators im Magnetfeld [4]. Der Einfluß der Elektron-Elektron-Wechselwirkung im untersuchten Anreicherungsfall führt also zu einem hier experimentell bestätigten kapazitiven Verhalten der Stufenpositionen.

Zum Schluß sei noch auf eine Betrachtung der Genauigkeit der Spannungsangaben bei den Magnetotransportmessungen eingegangen, da eine solche Messung mehrere Stunden dauern kann. In der Abb. 5.8 sind bei $B = 0$ zwei Meßpunkte zu jeder Stufe eingezeichnet. Die beiden Werte ergaben sich jeweils vor und nach der vollständigen Meßreihe. Die sehr geringe Drift verursacht hier einen systematischen Fehler von 10 mV in der Absolutspannung, der sich in der Betrachtung von Spannungsdifferenzen kompensieren sollte. Das Auftreten der Drift (bei extrem stabilem Meßgerät) kann in derselben Weise wie der Versatz in den Einsatzspannungen bei 30 mK und 1,4 K (s.o.) erklärt werden durch Ladungen in Isolationsschichten an der Mesaoberfläche, welche einer effektiven Gate-Spannungsverschiebung entsprechen. Diese Argumentation wird durch die in derselben Größenordnung (10 mV) veränderten Einsatzspannungen an derselben Probe nach einem Abkühl-Erwärm-Zyklus untermauert.

5.2.3 Variables laterales Potential

In diesem Abschnitt soll nun der Einfluß des Schottky-Gates auf die elektronische Struktur des Quantendots untersucht werden. Wir betrachten dasselbe System des vorherigen Abschnittes, hier allerdings bei $B = 0$ und variierender Gatespannung. Im Gegensatz zur Diskussion der Steuerwirkung des Gates auf den Peakstrom im Kap. 5.1.2, wo die Wirkung auf den effektiven Transportquerschnitt untersucht wurde, wollen wir hier die Modulation des lateralen Potentials in der Barrierenregion untersuchen.

Zunächst sind in der Abb. 5.9 (oben) die experimentellen Stufenpositionen in Abhängigkeit von der anliegenden Gatespannung aufgetragen. Im oberen Diagramm sieht man deutlich den Einfluß des Gates auf die Einsatzspannung, also die erste Stufe. Es handelt sich hierbei um den Durchgriff des Gates auf die Barrierenregion, der schon im Kap. 5.1.2 diskutiert wurde. Aus der Steigung

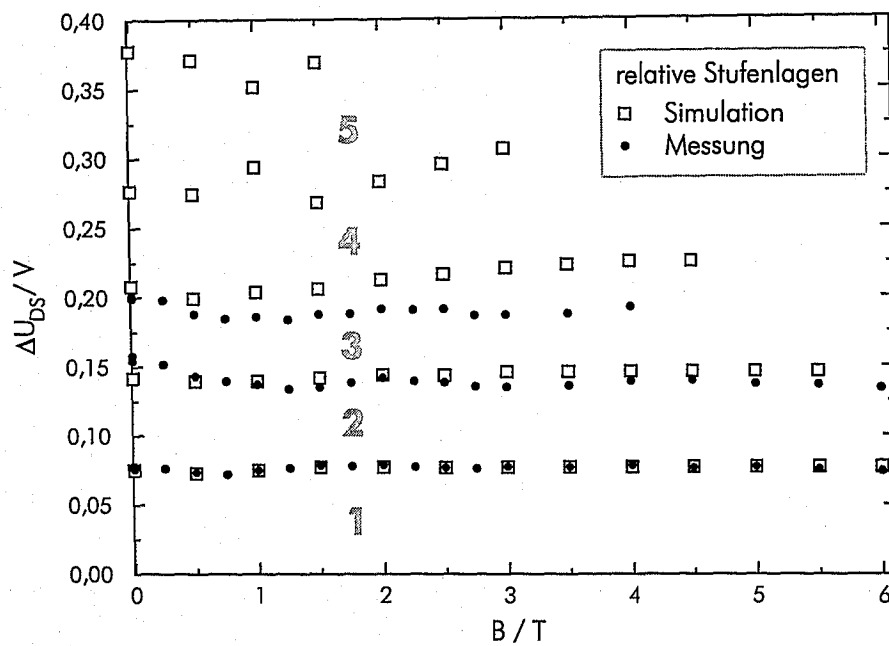


Abb.5.8: Magnetotransport-Messungen bei $T = 30$ mK und $U_{GS} = 200$ mV. Aufgetragen sind die Spannungen ΔU_{DS} der Stromstufen relativ zur ersten Stufe für variierendes Magnetfeld B . (Die erste Stufe ist also immer bei $\Delta U_{DS} \equiv 0$.) Die gemessenen Einelektronen-Stufenpositionen sind als gefüllte Quadrate und die simulierten Punkte als offene Quadrate dargestellt. Graue Zahlen geben die Elektronenzahl innerhalb jedes Streifens an.

der genähert linearen Abhängigkeit erhält man hier den Wert von $\approx 0,6$ für den Durchgriff.

Wesentlich interessanter für die Auswertung der elektronischen Struktur sind die Spannungsdifferenzen der höheren Stufen zur Einsatzspannung. Dies ist im unteren Teil der Abb. 5.9 dargestellt. Qualitativ läßt sich die monotone Abnahme der Stufenbreiten (und damit der Wechselwirkungsenergien im kapazitiven Regime hier) bei zunehmend positiverer Gatespannungen sofort einsehen. Durch die aufsteuernde Wirkung einer positiver werdenden Gatespannung wird die laterale Einschnürung im Dot immer geringer und damit die Quantisierungsenergie ebenfalls. Für eine quantitative Auswertung dieser Abhängigkeit betrachten wir das einfache Modell eines harmonischen Oszillators der Breite l mit einem Potential-Pinning von $U_0 - U_{GS}$ an der Oberfläche. Die laterale Quantisierungsenergie $E_{lat} \equiv \hbar\omega_0$ lautet dann

$$E_{lat} = \frac{2\hbar}{l} \sqrt{\frac{2e(U_0 - U_{GS})}{m^*}}. \quad (5.8)$$

Um diese Abhängigkeit an das Experiment anpassen zu können, muß die erste spannungsmäßige Stufenbreite U_{12} für jede Gatespannung mit Hilfe des oben bestimmten Faktors $\alpha = 1/28,6$ in eine Wechselwirkungsenergie E_{12} umgerechnet werden. Diese Energie E_{12} wird anschließend mittels der doppeltlogarithmisch durch Polynome angepaßten Tab. 2.2 (bzw. Abb. 2.8) in eine laterale Quantisierungsenergie E_{lat} übersetzt. Die so aus den Meßpunkten erhaltenen Werte E_{lat} sind in der Abb. 5.10 aufgetragen. Bei einer Anpassung von obigem E_{lat} an die Meßpunkte mit l und U_0 als freien Parametern erhält man für die effektive Breite $l = 1,45 \mu\text{m} \pm 5\%$ und für die Pinningspannung $U_0 = 356 \text{ mV} \pm 1\%$. Man beachte, daß es sich bei den so erhaltenen Strukturparametern um Größen eines effektiven harmonischen Oszillators handelt. Für die Mesabreite von 660 nm in der Höhe der Gatemetallisierung (s. Kap. 3) ist dieses l sicherlich um einen Faktor 2 zu groß. Auch die Pinningspannung U_0 liegt hier niedriger als der Wert von ca. $0,7 \text{ V}$ direkt an der Metall-Halbleiter-Grenzfläche. Beide effektiven Größen U_0 und l sind allerdings unmittelbar verständlich, wenn man beachtet, daß das Doppelbarrierensystem ca. 100 nm unterhalb des Gates liegt und somit nur einen abgeschwächten Potentialverlauf erfährt. Im Rahmen des sehr einfachen harmonischen Potentialmodells mit einer effektiven Steuerwirkung des Gates als Veränderung der Pinningspannung läßt sich der experimentelle Befund in seinem funktionalen Verhalten jedoch gut erklären. Wir haben hier natürlich nicht den Einfluß der Gatespannung auf den Umrechnungsfaktor α berücksichtigt, so daß obige Abweichung zusätzlich auch eine Folge dieses Einflusses sein könnte. Eine Betrachtung der Stufenflankensteigungen, in die der Faktor α maßgeblich eingeht, bei $U_{GS} = +200 \text{ mV}$ (30 mK) und $U_{GS} = +301 \text{ mV}$ (30 mK) zeigt jedoch nur eine Abweichung von maximal 20% . Als Gesamtergebnis der Gateuntersuchungen dieses Abschnittes läßt sich also für die hier untersuchte Struktur schließen, daß wir es tatsächlich mit einem vom Gate gesteuerten lateralen Potential im Quantendot zu tun haben und nicht mit der Bindung an Störstellen. (Zur Diskussion dieser Frage siehe [6, 71] und [7].)

Bei genauem Hinsehen fällt auf, daß bei einer Gatespannung von $U_{GS} = +200 \text{ mV}$ die Anpassung in der Abb. 5.10 nur eine laterale Quantisierungsenergie von $E_{lat} \approx 0,8 \text{ meV}$ liefert. Die im Magnetotransport-Abschnitt (Kap. 5.2.2) ermittelte Energie von $E_{lat} = 1,0 \text{ meV}$ findet sich nun bei $U_{GS} = +150 \text{ mV}$ wieder. Es handelt sich hierbei um den oben diskutierten Aufladungseffekt, der sich hier in einer effektiven Verschiebung der Gatespannung um ca. 50 mV bemerkbar

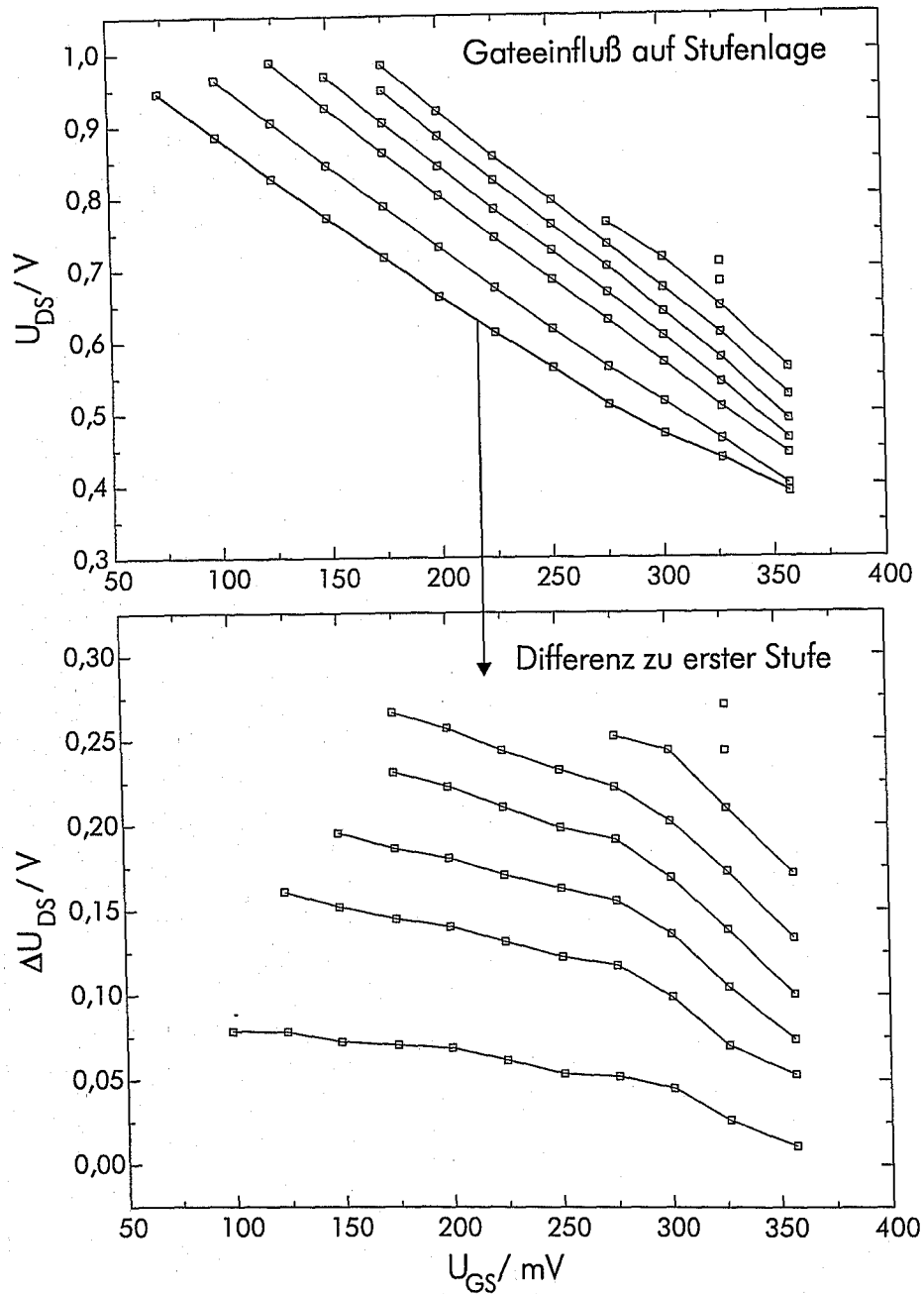


Abb.5.9: Transport-Messungen bei $T = 30$ mK, $B = 0$ und variabler Gatespannung U_{GS} . (Die durchgezogenen Linien dienen nur zur Verbesserung der Lesbarkeit.) Obere Abbildung: Die gemessenen Einelektronen-Stufenpositionen sind als Quadrate dargestellt. Man sieht die Parallelverschiebung der Diodenspannung U_{DS} mit der Gatespannung U_{GS} . Untere Abbildung: Dieselbe Messung nur jeweils umgerechnet relativ zur Spannung der ersten Stufe. Deutlich zu erkennen ist die Abnahme der Stufenbreiten bei steigender (positiver) Gatespannung, welche den Kanal weiter öffnet.

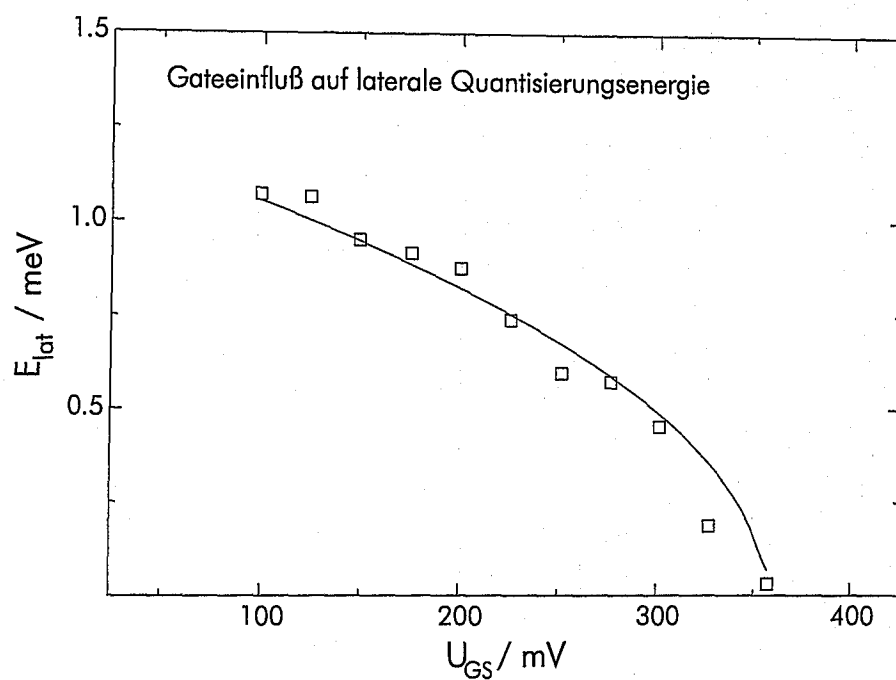


Abb.5.10: Laterale Quantisierungsenergie bei $T = 30 \text{ mK}$, $B = 0$ und variabler Gatespannung U_{GS} . Die aus den experimentellen Stufenbreiten errechneten Werte sind als Quadrate dargestellt. Bei der durchgezogenen Kurve handelt es sich um eine Anpassung mit einem Modell eines harmonischen Potentials, welches über die Gatespannung verändert wird.

macht. Dieser Effekt kommt hier zum Tragen, da dieselbe Probe in diesem Experiment zur Gateabhängigkeit erneut einen Abkühl-Erwärm-Zyklus erfahren hat.

Kapitel 6

Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit dient der physikalischen Untersuchung des Einelektronen-Transportes innerhalb mesoskopischer Resonanter Tunneldioden auf der Basis einer AlGaAs/GaAs Halbleiterheterostruktur. Mit Hilfe eines lateral umschließenden Schottky-Gates wird dabei ein variables bindendes Potential im Sub- μm -Bereich ermöglicht. Ein solches System stellt die Realisierung eines Quantendots dar, der über zwei Tunnelbarrieren an Elektronenreservoirs angekoppelt und somit einer transportmäßigen Untersuchung zugänglich ist. Die Bindung von Elektronen innerhalb des Quantendots ist dabei in Transportrichtung durch den Potentialtopf der Resonanten Tunnel-diode und lateral durch die Verarmungszone des Gates gegeben. Es werden ineinandergreifend theoretische, experimentelle und technologische Aspekte dieses Systems behandelt.

Zunächst werden theoretische Modelle zum elektronischen Transport in niedrigdimensionalen Tunnelstrukturen auf Greenfunktionenbasis unter Formulierung verallgemeinerter Randbedingungen mit Hilfe von Kopplungsselbstenergien vorgestellt. Desweiteren dient eine quantenfeldtheoretische Behandlung der Elektron-Elektron-Wechselwirkung und der Vielteilchen-Zustände innerhalb des Quantendots durch einen Näherungsansatz für die Dichtematrix einer Beschreibung der elektronischen Struktur des Systems. Abhängig von der Geometrie eines solchen Quantendots wird eine Unterteilung in "atomare" und "kapazitive" Systeme physikalisch definiert. Im Rahmen dieser Betrachtungen wird der Grenzfall einer klassischen, kapazitiven Beschreibung der Elektron-Elektron-Wechselwirkung aufgezeigt. Eine Meanfield-Behandlung der Wechselwirkung und das Auftreten von Bistabilitäten wird im Rahmen eines Modellsystems vergleichend dargestellt.

Ein wesentlicher Aspekt dieser Arbeit stellt auch die Entwicklung eines technologischen Prozesses zur Herstellung der mesoskopischen Resonanten Tunneldioden mit lateralem Schottky-Gate dar. So wird ein vertikaler Feldeffekttransistor zur Untersuchung von Quanteneffekten in mesoskopischen Systemen vorgestellt, in dessen Kanal eine Doppelbarrierenstruktur epitaktisch integriert ist. Mit Hilfe der Elektronenstrahl-Lithographie gelingt es Kanalbreiten unterhalb von $1\ \mu\text{m}$ zu realisieren. Ebenso ist die Entwicklung einer meßtechnischen Umgebung ein wichtiger Bestandteil zur Durchführung der experimentellen Arbeiten im pA-Regime.

Der experimentelle Teil dieser Arbeit stellt die an diesem System durchgeführten Transport-

Messungen vor. Zunächst wird die Funktionsweise der Struktur als vertikaler Feldeffekttransistor mit intergrierter Resonanter Tunneldiode untersucht. Die untersuchten Proben zeigen die theoretisch erwarteten Diodenkennlinien mit negativ differentieller Widerstandsregion, welche mit Hilfe des Gates in weiten Grenzen steuerbar sind. Im darauf folgenden Abschnitt ist der Einelektronentransport im Anreicherungsbereich bei Temperaturen unterhalb 1 K Gegenstand der Messungen. Es handelt sich hierbei um die Aufnahme von Kennlinien in einem Spannungsbereich in der Nähe des Stromeinsatzes, welche die charakteristischen Einelektronen-Stromstufen sukzessiver Elektronenauffüllung des Quantendots aufweisen. Ziel dieser Messungen ist eine spektroskopische Untersuchung an dem vorliegenden wechselwirkenden Mehrelektronensystem auf der Basis von Transporteigenschaften, wie in diesem Fall der Strom-Spannungs-Kennlinie. Ein Haupthilfsmittel dieser Untersuchungen ist hierbei der Einfluß eines äußeren Magnetfeldes auf die elektronische Struktur des Quantendots und damit auf die einzelnen Einelektronen-Stufenpositionen. Im Rahmen des entwickelten theoretischen Vielteilchenmodells lassen sich die so gewonnenen Meßdaten hervorragend quantitativ erklären. Insbesondere gelingt die Vorhersage der Kennlinien bei höherer Elektronenbefüllung und die Identifizierung charakteristischer Merkmale eines Quantendots des kapazitiven Regimes. Ein weiterer wichtiger Untersuchungsgegenstand stellt der Einfluß des Gates auf die Bindungsstärke des lateralen Potentials im Quantendot dar. So gelangt man unter Zuhilfenahme der obigen theoretischen Betrachtungen zu einer quantitativen Aussage über die laterale Quantisierungsenergie als Funktion der Gatespannung. Die dargestellten experimentellen Befunde, sowohl zum Einelektronentransport durch die Tunnelbarrieren hindurch, als auch zur elektronischen Struktur im Quantendot, werden somit quantitativ im Detail durch die entwickelten theoretischen Modelle erklärt.

Basierend auf diesen drei Standbeinen stellt die vorliegende Arbeit sowohl für die Grundlagenphysik des Transportes in wechselwirkende Elektronensystemen als auch für zukunftsorientierte Quantenbauelement-Anwendungen im nm-Bereich weiterführende Ergebnisse bereit.

Anhang A

Details zum Meßsystem

In diesem Kapitel werden kurz die wesentlichen Ideen zum eigens entwickelten Meßsystem vorgestellt, die eine Voraussetzung für den experimentellen Teil dieser Arbeit bilden.

A.1 Echtzeitsystem

Ausgangspunkt für die schnelle und möglichst störarme Aufnahme von Strom-Spannungskennlinien, wie im Kapitel 4 dargestellt, bildet ein rauscharmes pA-Meter mit der Fähigkeit, selbständig und zeitlich genau beliebige Spannungs-Kurven durchzufahren.

Kern des Meßgerätes ist ein autonomes Computer-System auf der Basis eines 80C32 8-Bit Microcontrollers (11,0592MHz Takt, [72]). Die AD- und DA-Wandler sind dabei an einem gefilterten Daten- und Adreß-Bus angeschlossen, das heißt, es handelt sich um ein Memory-Mapped-I/O-Konzept. Eine Auflösung von 16 Bit ist vorgesehen, implementiert wurden Wandler mit 12 und 14 Bit. Die Anbindung an einen Computer (z.B. PC) mit Meßsteuerungs-Software und Benutzeroberfläche geschieht über eine serielle bidirektionale Lichtleiter-Schnittstelle, mittels derer die Datenauslese und Meßbefehlübertragung stattfindet. Auf dem microcontrollerbasierten Meßgerät läuft ein selbst entwickeltes Multitasking-Echtzeitbetriebssystem, bei dem die Meßwertaufnahme, Spannungsausgabe und Schnittstellenkommunikation als eigene Prozesse implementiert sind. Dies ermöglicht eine Datenaufnahme von maximal 40 Meßpunkten pro Sekunde. Der zeitgesteuerte Scheduler des Betriebssystems basiert auf dem Round-Robin-Verfahren mit zwei Prioritätswarteschlangen und Synchronisation über Semaphore ([73], [74]). Als Zeitreferenz dient dabei der interne Quarzoszillator. In der Abb. A.1 ist das Speicherlayout vereinfacht dargestellt.

A.2 Client-Server-Architektur

Anschließend an das pA-Meter mit eigener Echtzeitsteuerung folgt über Lichtleiter entkoppelt ein UNIX-Rechner (z.B. PC), der hauptsächlich zur Meßdatenaufnahme und Steuerung der einzelnen Komponenten des gesamten Meßaufbaus dient, wie zum Beispiel das pA-Meter und das

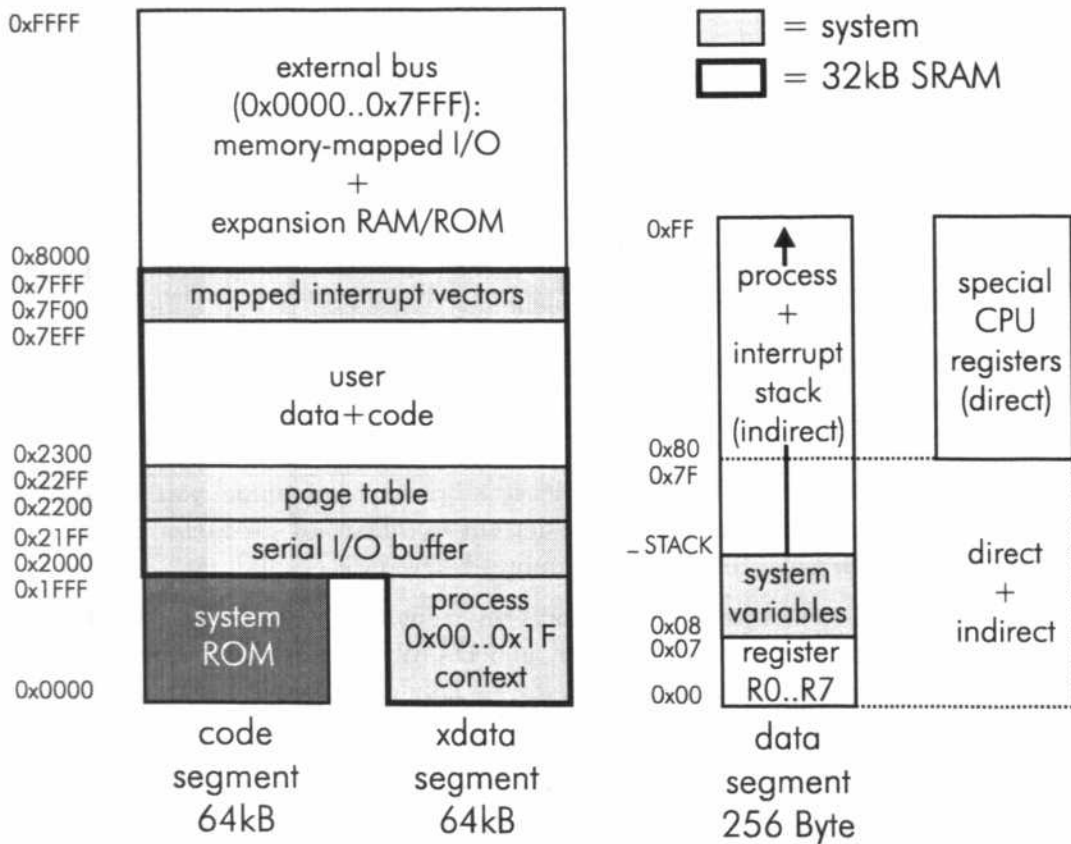
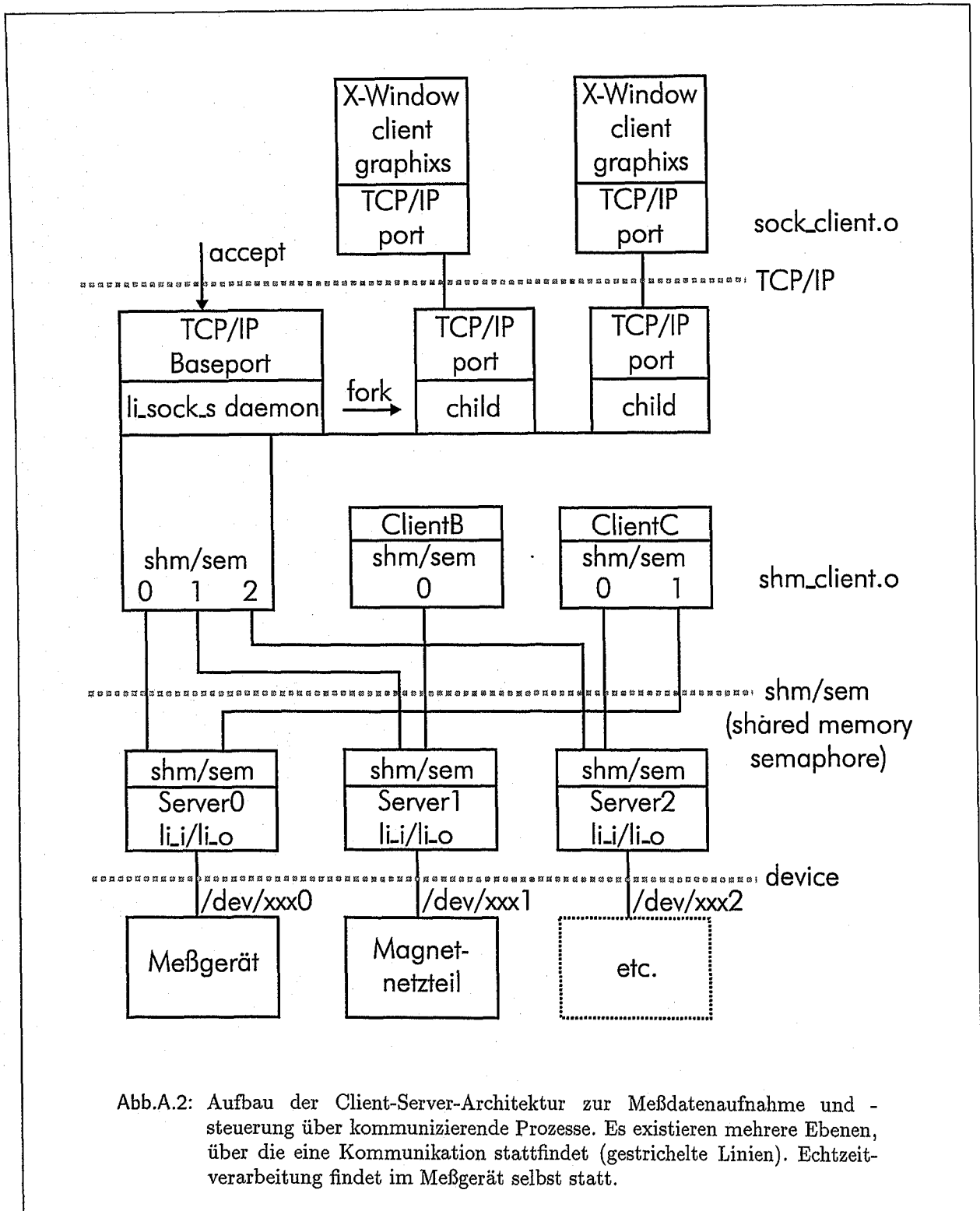


Abb.A.1: Speichermodell des Echtzeitsystems im Meßgerät. (Adressen sind im Hexadezimalformat angegeben.) Es gibt 3 Speichersegmente: 64kB *code* für Programmcode, 64kB *xdata* und 256Byte *data* für Daten. Eine spezielle Hardwarelösung spiegelt *code* und *xdata* ab Adresse 0x2000. Zur Konzeption siehe auch [72].

Magnetnetzteil. Er koordiniert alle zeitunkritischen Abläufe und stellt eine Benutzeroberfläche zur Verfügung. Dabei liegt diesem Teil der Meßsteuerung eine Client-Server-Architektur zu Grunde. Die einzelnen Ebenen sind in der Abb. A.2 im Detail zu sehen. Die Kommunikation zwischen den einzelnen Input-Output-Prozessen (I/O) geschieht mittels Nutzung eines gemeinsamen Speichersegments (shared memory), Datenintegrität wird dabei gesichert durch Semaphoren. Man beachte, daß sich die letzte Ebene, also die Benutzeroberfläche, verbunden über ein lokales Netzwerk via TCP/IP, auf einem anderen Computer befinden kann.

Ein solches System gestattet es nun eine komplexe Serie von Kennlinienfeldern mit variierendem Magnetfeld automatisch durchführen zu lassen, ohne daß die eigentliche Meßaufnahme der unteren Ebenen beeinträchtigt wird durch die Geschwindigkeit und Stabilität einer Benutzeroberfläche.



Literaturverzeichnis

- [1] Zunächst die "korrespondenzmäßige Quantentheorie" bzw. Theorie der "Phasenintegral-Quantisierung" von N. Bohr (1913), A. Sommerfeld (1916), daraus wurde die "Matrizenmechanik" von W. Heisenberg, M. Born, P. Jordan (1925) entwickelt: W. Heisenberg, Zeitschrift für Physik **33**, 879 (1925), M. Born, P. Jordan, Zeitschrift für Physik **34**, 858 (1925), M. Born, W. Heisenberg, P. Jordan, Zeitschrift für Physik **35**, 557 (1926). Einen anderen Weg zur Quantentheorie nahm die "Wellenmechanik" von E. Schrödinger (1926), welche die Arbeit von L. de Broglie (1924) als Grundlage hat. Für einen Überblick siehe z.B. M. Schubert, G. Weber, *Quantentheorie*, Spektrum Akademischer Verlag Heidelberg (1993)
- [2] J. Franck, G. Hertz, Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft **15**, 613 (1913)
- [3] *Single Charge Tunneling*, NATO Advanced Study Institute, Series B: Physics, ed. by H. Grabert, M. Devoret, Plenum New York (1992)
- [4] M. Griebel, K. M. Indlekofer, A. Förster, H. Lüth, J. Appl. Phys. **84**, 6718 (1998)
- [5] A. Förster, M. Griebel, M. Indlekofer, H. Lüth, Physica E **2**, 502 (1998)
- [6] M. W. Dellow, P. H. Beton, C. J. G. M. Langerak, T. J. Foster, P. C. Main, L. Eaves, M. Henini, S. P. Beaumont, C. D. W. Wilkinson, Electronics Lett. **27**, 134 (1991), M. W. Dellow, C. J. G. M. Langerak, P. H. Beton, T. J. Foster, P. C. Main, L. Eaves, M. Henini, S. P. Beaumont, C. D. W. Wilkinson, Superlattices and Microstructures **11**, 149 (1992), M. W. Dellow, P. H. Beton, C. J. G. M. Langerak, T. J. Foster, P. C. Main, L. Eaves, M. Henini, S. P. Beaumont, C. D. W. Wilkinson, Phys. Rev. Lett. **68**, 1754 (1992)
- [7] P. Guéret, N. Blanc, R. Germann, H. Rothuizen, Phys. Rev. Lett. **68**, 1896 (1992)
- [8] D. G. Austing, T. Honda, Y. Tokura, S. Tarucha, Jpn. J. Appl. Phys. **34**, 1320 (1995) S. Tarucha, D. G. Austing, T. Honda, Superlattices and Microstructures **18**, 121 (1995)
- [9] S. Tarucha, D. G. Austing, T. Honda, R. v. d. Hage, Jpn. J. Appl. Phys. **36**, 3917 (1997)

- [10] R. Tsu, L. Esaki, Appl. Phys. Lett. **22**, 562 (1973),
L. L. Chang, L. Esaki, R. Tsu, Appl. Phys. Lett. **24**, 593 (1974)
- [11] B. Su, V. J. Goldman, J. E. Cunningham, Phys. Rev. B **46**, 7644 (1992)
- [12] T. Schmidt, M. Tewordt, R. J. Haug, K. v. Klitzing, A. Förster, H. Lüth, Solid State Electronics **40**, 15 (1996),
T. Schmidt, R. J. Haug, V. I. Fal'ko, K. v. Klitzing, A. Förster, H. Lüth, Phys. Rev. Lett. **78**, 1540 (1997)
- [13] M. Tewordt, L. Martín-Moreno, V. J. Law, M. J. Kelly, R. Newbury, M. Pepper, D. A. Ritchie, J. E. F. Frost, G. A. C. Jones, Phys. Rev. B **46**, 3948 (1992)
- [14] C. Caroli, R. Combescot, P. Nozieres, D. Saint-James, J. Phys. C: Solid St. Phys. **4**, 916 (1971)
- [15] R. Lake, G. Klimeck, R. C. Bowen, D. Jovanovic, J. Appl. Phys. **81**, 7845 (1997)
- [16] A. Groshev, T. Ivanov, V. Valtchinov, Phys. Rev. Lett. **66**, 1082 (1991),
Y. Meir, N. S. Wingreen, P. A. Lee, Phys. Rev. Lett. **66**, 3048 (1991),
L. Y. Chen, C. S. Ting, Phys. Rev. B **44**, 5916 (1991)
- [17] K. M. Indlekofer, J. Lange, A. Förster, H. Lüth, Phys. Rev. B **53**, 7392 (1996)
- [18] Conference proceedings of the PHASDOM98, K. M. Indlekofer, A. Förster, H. Lüth, Grenoble (1998),
Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, ISSN 0420-0195, 26. DPG Tagung HL29.3 (1998)
- [19] U. Fano, Review of Modern Physics **29**, 74 (1957)
- [20] W. R. Frensley, Phys. Rev. B **36**, 1570 (1987)
- [21] G. D. Mahan, *Many-Particle Physics*, 2nd ed., Plenum New York (1990)
- [22] E. N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics*, 2nd ed., Springer Verlag (1983)
- [23] L. V. Keldysh, Soviet Physics JETP **20**, 1018 (1965)
- [24] J. R. Tucker, IEEE Journal of Quantum Electronics **QE-15**, 1234 (1979),
W. R. Frensley, Appl. Phys. Lett. **51**, 448 (1987)
- [25] P. Vogl, H. P. Hjalmarson, J. D. Dow, J. Phys. Chem. Solids **44**, 365 (1983)
- [26] P. O. Löwdin, Journal of Chemical Physics **18**, 365 (1950)
- [27] M. D. Jaffe, J. Singh, Solid State Communications **62**, 399 (1987)
- [28] J. A. Støvneng, P. Lipavský, Phys. Rev. B **49**, 16494 (1994)

- [29] R. C. Bowen, W. R. Frensley, G. Klimeck, R. K. Lake, Phys. Rev. B **52**, 2754 (1995)
- [30] A. Förster, Festkörperprobleme, Advances in solid state physics **33**, ed. by R. Helbig, Vieweg Braunschweig (1993)
- [31] Programm *green* Version 60 von K. M. Indlekofer
- [32] Zur experimentellen Bestimmung der effektiven Tunnelbarriere von $280 \text{ meV} \pm 6\%$ für $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}/\text{GaAs}$ siehe Kapitel 8.4 in [42].
Zur Theorie, insbesondere zur effektiven Tunnelmasse, siehe [51].
Die in den Simulationen der vorliegenden Arbeit gewählten Werte von 260-270 meV bzw. $0,074 m_e$ passen sehr gut zu der Messungen des Kap. 5.
- [33] M. A. Reed, J. N. Randall, R. J. Aggarwal, R. J. Matyi, T. M. Moore, A. E. Wetsel, Phys. Rev. Lett. **60**, 535 (1988),
A. Groshev, Phys. Rev. B **42**, 5895 (1990),
J. N. Randall, M. A. Reed, T. M. Moore, R. J. Matyi, J. W. Lee, J. Vac. Sci. Technol. B **6**, 302 (1988),
M. Luban, J. H. Luscombe, M. A. Reed, D. L. Pursey, Appl. Phys. Lett. **54**, 1997 (1989)
- [34] Diplomarbeit von K. M. Indlekofer, Institut für Schicht- und Ionentechnik, Forschungszentrum Jülich, RWTH-Aachen (1996): Tight-Binding-Modell zum Single-Electron-Tunneling
- [35] P. W. Anderson, Phys. Rev. **124**, 41 (1961)
- [36] G. W. Bryant, Phys. Rev. B **39**, 3145 (1988),
G. W. Bryant, Phys. Rev. B **44**, 12837 (1991),
A. Sa'ar, J. Feng, I. Gravé, A. Yariv, J. Appl. Phys. **72**, 3598 (1992)
- [37] L. E. Henrickson, A. J. Glick, G. W. Bryant, D. F. Barbe, Phys. Rev. B **50**, 4482 (1994)
- [38] Y. Zohta, H. Ezawa, J. Appl. Phys. **72**, 3584 (1992)
- [39] M. Büttiker, Phys. Rev. B **32**, 1846 (1985)
- [40] A. D. Stone, Phys. Rev. Lett. **54**, 1196 (1985)
- [41] Programm *set* Version 27b von K. M. Indlekofer
- [42] Dissertation von A. Leuther, Berichte des Forschungszentrums Jülich, Jül-3229, ISSN 0944-2952 (Mai 1996)
- [43] Diplomarbeit von H. J. Becker, Institut für Schicht- und Ionentechnik, Forschungszentrum Jülich, RWTH-Aachen (1997): Die theoretischen Untersuchungen zu gekoppelten Strukturen wurden dort vorab bereits verwendet.
- [44] C. B. Duke, *Tunneling in Solids*, Academic, New York (1969)

- [45] F. Ali, A. Gupta, *HEMTs and HBTs: Devices, Fabrication, and Circuits*, Artech House (1991)
- [46] J. J. Palacios, L. Martín-Moreno, J. H. Oaknin, C. Tejedor, *Superlattices and Microstructures* **15**, 91 (1994)
- [47] D. Pfannkuche, V. Gudmundson, P. A. Maksym, *Phys. Rev. B* **47**, 2244 (1993)
- [48] A. Barenco, M. A. Dupertuis, *Phys. Rev. B* **52**, 2766 (1995)
- [49] D. Pfannkuche, S. E. Ulloa, *Phys. Rev. Letters* **74**, 1194 (1995)
- [50] F. Schwabl, *Quantenmechanik*, 2. Aufl., Springer (1990)
- [51] Kapitel 2.1 in Dissertation von J. Lange, Berichte des Forschungszentrums Jülich, Jül-3291, ISSN 0944-2952 (Oktober 1996)
- [52] Diplomarbeit von M. Griebel, Berichte des Forschungszentrums Jülich, Jül-3432, ISSN 0944-2952 (September 1997): Die theoretischen Betrachtungen zum Magnetfeldeinfluß auf die Einteilchenniveaus im Quantendot und auf die Reservoirs wurden dort vorab bereits verwendet.
- [53] V. Fock, *Z. Phys.* **47**, 446 (1928)
- [54] O. V. Lounasmaa, *Experimental principles and methods below 1 K*, Academic Press (1974).
- [55] W. J. de Haas, P. M. van Alphen: *Leiden Comm.* **208d**, **212a** (1930)
- [56] M. J. Kelly, *J. Phys.: Condens. Matter* **1**, 7635 (1989)
- [57] Programm *bptcoul* Version 99d von K. M. Indlekofer
- [58] C. W. Beenakker, *Phys. Rev. B* **44**, 1646 (1991)
- [59] V. J. Goldman, D. C. Tsui, J. E. Cunningham, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 1256 (1987),
A. Zaslavsky, V. J. Goldman, D. C. Tsui, *Appl. Phys. Lett.* **53**, 1408 (1988),
E. S. Alves, L. Eaves, M. Henini, O. H. Hughes, M. L. Leadbeater, F. W. Sheard, G. A. Toombs, G. Hill, M. A. Pate, *Electronics Letters* **24**, 1190 (1988)
- [60] B. W. Alphenaar, Z. A. K. Durrani, A. P. Heberle, M. Wagner, *Appl. Phys. Lett.* **66**, 1234 (1995)
- [61] K. Natori, N. Sano, *International Conference on Solid State Devices and Materials*, Yokohama (1996), pp. 452-454,
K. Natori, N. Sano, *Superlattices and Microstructures* **23**, 1339 (1998)
- [62] Diplomarbeit von K. M. Indlekofer, Institut für Schicht- und Ionentechnik, Forschungszentrum Jülich, RWTH-Aachen (1996): Entwicklung des Single-Electron-MESFET in einer Version, auf der das Bauelement dieser Arbeit basiert.

- [63] G. W. Bryant, Phys. Rev. B **39**, 3145 (1989)
- [64] G. Faini, A. Ramdane, F. Molloy, H. Launois, Resonant Tunneling in Semiconductors, Edited by L. L. Chang et al., Plenum Press New York (1991)
- [65] Dissertation von Ernst Kratschmer, RWTH-Aachen (1982)
- [66] Diplomarbeit von M. Griebel, Berichte des Forschungszentrums Jülich, Jül-3432, ISSN 0944-2952 (September 1997): Die Prozeßschritte zum Single-Electron-MESFET [62] wurden dort weiterentwickelt.
- [67] Diplomarbeit von K. M. Indlekofer, Institut für Schicht- und Ionentechnik, Forschungszentrum Jülich, RWTH-Aachen (1996): Auf den dort durchgeführten Entwicklungen bauen die hier benutzten Konzepte auf.
- [68] Es wurde der TLM400 $^3\text{He}/^4\text{He}$ Mischkryostat der Firma Oxford eingesetzt mit eingebautem supraleitendem Magneten für Magnetfelder bis 13,8 T mit einer erreichbaren Badtemperatur von ca. 1,4 K bis herab zu 25 mK.
- [69] Diplomarbeit von K. M. Indlekofer, Institut für Schicht- und Ionentechnik, Forschungszentrum Jülich, RWTH-Aachen (1996): Hier wurde eine vollständig symmetrische Signalverarbeitung gewählt. Das Meßsystem war allerdings ohne digitale Signalverarbeitung.
- [70] T. Schmidt, M. Tewordt, R. J. Haug, K. v. Klitzing, B. Schönherr, P. Grambow, Appl. Phys. Lett. **68**, 838 (1996),
T. Schmidt, R. J. Haug, K. v. Klitzing, A. Förster, H. Lüth, Phys. Rev. B **55**, 2230 (1997)
- [71] M. Griebel, K. M. Indlekofer, A. Förster, H. Lüth, J. Phys. D: Appl. Phys. **32**, 1729 (1999)
- [72] Intel Microcontroller Handbook: MCS-51 Architecture (1984),
Advanced Micro Devices (AMD): 8051AH/8031AH (1984)
- [73] W. Sewell, *Inside VMS: the system manager's and system programmer's guide to VMS internals*, Van Nostrand Reinhold (1992),
H. M. Levy, *Computer programming and architecture*, Digital Equipment Corporation (1980, 1989)
- [74] M. J. Bach, *The design of the UNIX operating system*, Prentice-Hall International (1986)

Abbildungsverzeichnis

2.1: Potentialverlauf in einer Resonanten Tunneldiode	9
2.2: Strom-Spannungs-Kennlinie einer Resonanten Tunneldiode	13
2.3: Lokale Zustandsdichte in einer Resonanten Tunneldiode	14
2.4: Potentielle Energie und Elektronendichte in einer RTD	16
2.5: Einelektronen-Tunnelkennlinien	23
2.6: 2D-2D-HEMT	28
2.7: Chemisches Potential im 1D-Reservoir mit Magnetfeld	48
2.8: Korrigierte Wechselwirkungsenergie	50
2.9: Magnetotransport im atomaren Regime	53
2.10: Magnetotransport im kapazitiven Regime	55
2.11: Hysterese-Modell	59
3.1: Epitaxie-Schichtfolge	62
3.2: Querschnitt der Struktur	64
3.3: Ohmscher Kontakt auf Mesa	68
3.4: Geätzte Mesa	70
3.5: SiO ₂ -Isolation	73
3.6: Schottky-Gate	75
3.7: Polyimid-Isolation	77
3.8: Bandpad-Metallisierung	81
4.1: Meßbeschaltung	85
4.2: Meßgerät Prinzip	86
4.3: Prinzip der Meßsteuerung	88
5.1: Ausgangs-Kennlinienfelder bei Raumtemperatur	93
5.2: Gate-Kennlinien bei Raumtemperatur	94
5.3: Ausgangs-Kennlinienfelder bei 1,4 K	98
5.4: Gate-Kennlinien bei 1,4 K	99
5.5: Gateeinfluß: Peak- und Valleystrom bei 1,4 K	101

5.6: Einelektronentransport: Stufenkennlinien	104
5.7: Einelektronentransport: Einsatzspannung im Magnetfeld	108
5.8: Einelektronentransport: Stufenlagen im Magnetfeld	110
5.9: Einelektronentransport: variable Gatespannung	112
5.10: Einelektronentransport: Quantisierung und Gatespannung	113
A.1: Speichermodell	118
A.2: Client-Server-Modell	120

Tabellenverzeichnis

2.1: Wechselwirkungsterme 32

2.2: Korrigierte Wechselwirkungsenergien 51

3.1: Reinigungsschritt 65

3.2: PMMA Zweischichtlack 65

3.3: PMMA Dreischichtlack 66

3.4: Entwicklung der PMMA Lacke 66

3.5: Ohmscher Kontakt und Ätzmaske auf Mesa 67

3.6: Ohmscher Kontakt auf Rückseite (Substrat) 68

3.7: RIE Parameter für Mesa 69

3.8: Naßchemische Nachätzung 71

3.9: Positiv-Photolithographie 72

3.10: Negativ-Photolithographie (Umkehrprozeß) 74

3.11: Schottky-Gate 74

3.12: Polyimidschicht 76

3.13: Photolithographische Strukturierung der Polyimidschicht 76

3.14: Härtung der Polyimidschicht 78

3.15: Strukturierung der Polyimidschicht mit Ätzmaske 79

3.16: Gleichmäßige Ätzung der Polyimidschicht 80

Danksagungen

Ich bedanke mich bei allen, die mich bei der Durchführung dieser Arbeit unterstützt haben:

Herrn Prof. Dr. H. Lüth für die Möglichkeit, diese Arbeit am Institut für Schicht- und Ionentechnik durchführen zu können, für seine Motivation und sein stetes Interesse an meiner Arbeit.

Herrn Dr. A. Förster für die wertvollen Diskussionen, die Epitaxieschichten und die ausgezeichnete Betreuung.

Herrn Dipl.-Phys. M. Griebel für die Mithilfe bei den Probenpräparationen der Eielektronen-Strukturen.

Herrn Dr. A. van der Hart für das Elektronenstrahlschreiben.

Herrn Dipl.-Ing. F. Ringelmann für die Hilfe an der RIE.

Dem Reinraumteam für die Unterstützung bei den Probenpräparationen im Reinraum.

Herrn Dipl.-Ing. H. P. Bochem für die vielen SEM-Aufnahmen.

Den Mitarbeitern der Elektronik-Werkstatt, insbesondere Herrn R. Otto und Herrn N. Wolters, für die Unterstützung bei der Realisierung der Meßelektronik.

Herrn Dr. Th. Schäpers und Herrn G. Mülleians für die Hilfe bei den Tieftemperatur-Experimenten.

Herrn Dipl.-Ing. U. Zastrow für die SIMS-Messungen im Rahmen der Prozeßentwicklung.

Herrn Dipl.-Phys. J. Malindretos für die Unterstützung bei designtechnischen Fragen.

Sowie allen hier namentlich nicht erwähnten Mitarbeitern des Instituts für Schicht- und Ionentechnik für die angenehme Arbeitsatmosphäre.

Meiner Familie, die es mir ermöglicht hat, diese Arbeit durchzuführen.

Forschungszentrum Jülich



Jül-3705
November 1999
ISSN 0944-2952