

Masterarbeit

# ELEKTRONENTRANSPORT DURCH PLANARE SCHICHTSYSTEME

---

eingereicht von

**Felix Paul Jochen Willert**

am 12. September 2021

an der Universität Greifswald,

Institut für Physik

Erstgutachter/Betreuer: PD Dr. Franz X. Bronold

Zweitgutachter: Prof. Dr. Matthias Eschrig



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>5</b>
<b>2</b>	<b>Grundlagen des Transports</b>	<b>9</b>
2.1	Fundamentale Gleichungen . . . . .	9
2.1.1	Boltzmann-Gleichung . . . . .	9
2.1.2	Kontinuitätsgleichung . . . . .	12
2.1.3	Wichtige Transportprozesse . . . . .	12
2.1.4	Superdiffusive Transportgleichung . . . . .	13
2.2	Transport in planaren Schichten . . . . .	16
2.2.1	Transportgleichung in dreidimensionaler Auflösung . . . . .	17
2.2.2	Transportgleichung in eindimensionaler Auflösung (Milne's Problem) . . . . .	20
2.2.3	Herleitung aus der superdiffusiven Transportgleichung . . . . .	23
2.2.4	Inhomogene Medien und Reflexionen . . . . .	25
2.3	Transport in einem externen Feld . . . . .	31
2.3.1	Herleitung der Transportgleichung . . . . .	31
2.3.2	Erlaubte Trajektorien und kritische Winkel . . . . .	34
2.4	Propagatoren im Metall-Halbleiter-Schichtsystem . . . . .	37
<b>3</b>	<b>Numerische Implementation und deren Test</b>	<b>41</b>
3.1	Feldfreier Transport . . . . .	41
3.1.1	Numerische Implementation . . . . .	41
3.1.2	Fluss und Reflexionen . . . . .	44
3.1.3	Vergleich mit analytischer Lösung . . . . .	46
3.2	Transport mit externem Feld . . . . .	48
3.2.1	Numerische Implementation . . . . .	48
3.2.2	Test und Vergleich mit feldfreiem Transport . . . . .	51
3.2.3	Transport mit Grenzfläche . . . . .	54
<b>4</b>	<b>Planares Metall-Halbleiter-Schichtsystem</b>	<b>57</b>
4.1	System und Parameter . . . . .	57
4.1.1	Der Schottky-Übergang . . . . .	58
4.1.2	Materialeigenschaften . . . . .	60

4.2	Spinunabhängiger Transport . . . . .	65
4.3	Spinaufgelöster Transport . . . . .	73
<b>5</b>	<b>Diskussion und Zusammenfassung</b>	<b>79</b>
5.1	Kritik der Methodik . . . . .	79
5.2	Verbesserungen und Ausblick . . . . .	80
5.3	Zusammenfassung . . . . .	82
<b>A</b>	<b>Zeitabhängiger Fluss</b>	<b>I</b>
A.1	Herleitung des zeitabhängigen Flusses . . . . .	I
A.2	Ableitung des stationären Falles . . . . .	III
<b>B</b>	<b>Propagatoren und Trajektorien im konstanten Feld</b>	<b>V</b>
B.1	Zusammenhang der Propagatoren im Halbleiter mit dem im Metall . . . . .	V
B.2	Mögliche Trajektorien im Metall-Halbleiter-Schichtsystem . . . . .	VII
<b>C</b>	<b>Rechnungen zur numerischen Implementation</b>	<b>IX</b>
C.1	Korrektur der Matrixelemente zur Flusserhaltung . . . . .	IX
C.2	Behebung der Singularitäten im Flusskern . . . . .	X
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>XIII</b>

# Kapitel 1

## Einleitung

Elektronen tragen nicht nur eine Ladung, sondern auch einen Spin, der ein magnetisches Moment erzeugt und somit an ein magnetisches Feld koppelt. Es ist daher – nicht nur von einem theoretischen, sondern auch von einem technologischen Standpunkt aus betrachtet – erstrebenswert, neben der Ladung auch den Spin zu nutzen, um Informationen elektronisch zu speichern und zu verarbeiten. Die Manipulation von Elektronenspins in Festkörpern zur Informationsverarbeitung wird als „Spintronik“ bezeichnet [1]. Durch die Entdeckung des gigantischen Magnetowiderstandes (*engl.*: giant magnetoresistance, GMR) durch GRÜNBERG et al. [2] und FERT et al. [3] ist die Nutzung des Spins zur Informationsspeicherung, z. B. in Festplatten, bereits seit geraumer Zeit Realität.

Neben diesen metallischen, elektronischen Bauteilen zur Informationsspeicherung sind auch Halbleiter-Spintronik-Bauteile in der theoretischen Entwicklung begriffen [4]. Spinanregungen haben in Halbleitern bedeutend längere Lebensdauern [5, 6], was bedeutet, dass Spinströme auf deutlich größeren Zeit- und Längenskalen stabil sind und somit den Informationstransport durch Spins ermöglichen könnten. Halbleiter erhalten darüber hinaus viel Aufmerksamkeit bei der Untersuchung Spin-basierter Phänomene, da zirkular polarisiertes Licht benutzt werden kann, um spezifische Spin-Orientierungen zu erzeugen und zu detektieren, und da diese Materialien bereits in der herkömmlichen Elektronik weit verbreitet sind [7]. Der simple Ansatz, einen Spin-polarisierten Strom in einem Halbleiter dadurch zu erzeugen, dass ein gewöhnlicher, unpolarisierter Strom zunächst durch eine magnetisierte Ferromagnetschicht geschickt wird, liefert eine viel zu geringe Polarisation [8]. Vielversprechender ist es hingegen „heiße“ Elektronen, also solche mit einer hohen Energie im Leitungsband, zu injizieren, die dann den Spinstrom bilden [9]. Obwohl bei der Spin-Injektion in Halbleiter bereits Fortschritte [10, 11] zu verzeichnen waren, gibt es noch Raum für Verbesserungen und ein genaueres Verständnis der Prozesse, die zur Spin-Injektion beitragen [12]. Daher soll eine Untersuchung des Elektronentransports an einer Metall-Halbleiter-Grenzschicht Hauptgegenstand dieser Arbeit sein.

Ausgangspunkt der theoretischen Beschreibung des Transports ist ein anderes, mit dem Spin zusammenhängendes Phänomen, nämlich die ultraschnelle Demagnetisierung [13]. Es wurde

gezeigt, dass ein wichtiger Beitrag zur ultraschnellen Demagnetisierung durch einen superdiffusiven Spin-Transport geleistet wird [14–16]. Dieser Transport wurde mit einer sogenannten superdiffusiven Transportgleichung von BATTIATO et al. theoretisch untersucht und vorhergesagt [17, 18]. Außerdem wurde mithilfe dieser Gleichung eine sehr schnelle Spininjektion von einem Ferromagneten in einen Halbleiter, ausgelöst durch eine Femtosekunden-Laseranregung, beschrieben [12].

In der vorliegenden Arbeit wird ebenfalls die Spininjektion von einem Ferromagneten in einen Halbleiter untersucht. Allerdings wird nicht nur der Transport durch die Grenzfläche, sondern auch der Transport im Halbleiter, weit von der Grenzfläche entfernt, Beachtung finden. Außerdem wird kein ultraschneller Transport, sondern ein stationärer beschrieben, der zu einem spinpolarisierten Gleichstrom führt. Die dafür notwendige externe Elektronenquelle wird in dieser Arbeit nicht weiter simuliert oder spezifiziert, es ist jedoch denkbar, dass ein Plasma, das an die Ferromagnetschicht angrenzt, als Quelle für die heißen Elektronen dienen kann [19, 20].

Zur Beschreibung dieses Spinstroms wird eine zeitunabhängige Form der superdiffusiven Transportgleichung hergeleitet. Der Vorteil dieser Gleichung und der Grund, weshalb sie in dieser Arbeit verwendet und weiter entwickelt wird, ist die Tatsache, dass mit ihr ein dreidimensionaler Transportprozess unter Ausnutzung der Symmetrie mathematisch als eindimensionales Problem formuliert werden kann, was das Lösen der Gleichung vereinfacht und vor allem den numerischen Aufwand reduziert. Dies führt allerdings dazu, dass man die Materialien und die Stoßprozesse als isotrop annehmen muss, was besonders für die Stöße eine starke Vereinfachung darstellt. Die Herleitung erfolgt auf verschiedene Arten, ausgehend von unterschiedlichen grundlegenden Transportgleichungen (Kontinuitätsgleichung, Boltzmann-Gleichung) bzw. von einfachen Grundprinzipien. Dies geschieht zum einen, um zu zeigen, dass die hier erhaltenen Resultate mit früheren Rechnungen übereinstimmen bzw. sich in Ergebnisse aus anderen Arbeiten überführen lassen. Zum anderen geschieht dies, da es sich herausstellen wird (vgl Abs. 3.2.3), dass es numerisch vorteilhaft ist, nicht mit dem Endresultat der Transportgleichung zu rechnen, sondern mit einer früheren Version.

Diese Gleichung wurde bereits in den 1950er Jahren zur Beschreibung von Neutronentransport hergeleitet, dort aber hauptsächlich für homogene Medien und elastische Stöße verwendet [21], obwohl auch inelastische Prozesse in inhomogenen Medien damit behandelbar sind. Hier sollen hingegen auch inhomogene Medien mit reflektierenden Grenzflächen und inelastischen Streuprozessen untersucht werden. Desweiteren wird die superdiffusive Transportgleichung derart erweitert, dass mit ihr auch der Transport in einem Material mit einem externen Feld beschrieben werden kann. Die Auswirkungen des Feldes auf den Transport lassen sich im Rahmen der superdiffusiven Beschreibung untersuchen. Für die in dieser Arbeit präsentierten numerischen Resultate wird ein Nickel-Silizium-Schichtsystem betrachtet. Silizium wird hierbei verwendet, da es sich besonders gut zum Spintransport eignet, was an der geringen Wahrscheinlichkeit für einen Spin-Flip bei einem Stoß liegt [9]. Das Verfahren lässt sich jedoch einfach auf jedes beliebige Material anwenden. Es werden lediglich zwei Materialeigenschaften

---

ten der Materialien benötigt, nämlich die Lebensdauer  $\tau$  der Elektronen und der Betrag der Geschwindigkeit  $v$ , jeweils in Abhängigkeit von der Energie und der Spin-Orientierung der Elektronen.

Die Arbeit ist wie folgt strukturiert. Im Kapitel 2 wird die Theorie zur Beschreibung des Transports erläutert. Zunächst werden die grundlegenden Gleichungen (Kontinuitätsgleichung, Boltzmann-Gleichung) vorgestellt, die dem Transport zugrunde liegen und daraus dann auf verschiedene Arten die superdiffusiven Transportgleichung hergeleitet. Im Anschluss daran wird erörtert, wie Inhomogenitäten und Reflexionen zu behandeln sind, sowie wie die Gleichung modifiziert werden muss, um den Transport in einem externen Feld zu beschreiben. Das Kapitel 3 beschäftigt sich mit der numerischen Implementation der hergeleiteten Gleichung und mit dem Testen dieser Implementation in einfachen Systemen. Im darauffolgenden Kapitel 4 werden die Ergebnisse der numerischen Rechnung für ein Ferromagnet-Halbleiterschichtsystem vorgestellt. Zunächst werden die Eigenschaften des Systems näher erläutert, bevor der Elektronentransport betrachtet wird. Dieser wird einmal spinunabhängig mit Fokus auf dem Transportmechanismus, dem Einfluss des externen Feldes und den Energien der Elektronen untersucht, und einmal spinaufgelöst mit Fokus auf der Spinpolarisierung. Das letzte Kapitel (Kap. 5) hat unter anderem eine Kritik der hier verwendeten Methodik zum Inhalt, sowie einen Ausblick auf mögliche Weiterentwicklungen und Verbesserungen des Verfahrens. Auch eine kurze Zusammenfassung der Ergebnisse findet sich dort.





# Kapitel 2

## Grundlagen des Transports

### 2.1 Fundamentale Gleichungen

#### 2.1.1 Boltzmann-Gleichung

Eine der wichtigsten klassischen Transportgleichungen ist die *Boltzmann-Gleichung*, die von LUDWIG BOLTZMANN (1844 - 1906) ursprünglich entwickelt wurde, um die Kinetik in klassischen Gasen zu beschreiben [22]. Die Boltzmann-Gleichung findet aber auch Anwendung in der Beschreibung von Transportprozessen in Flüssigkeiten oder Plasmen und auch beim Elektronentransport in Festkörpern, was in dieser Arbeit von Bedeutung ist.

Zur Herleitung der Gleichung betrachtet man den siebendimensionalen Phasenraum, aufgespannt durch den Ort  $\vec{r}$ , die Geschwindigkeit  $\vec{v}$  und die Zeit  $t$ . Hierauf definiert man die Verteilungsfunktion  $f(\vec{r}, \vec{v}, t) d^3r d^3v$ , die angibt wie viele Teilchen sich im Phasenraumvolumen  $d^3r d^3v$  bei  $\vec{r}, \vec{v}$  befinden [23]. Diese Verteilungsfunktion ist klassisch zu verstehen; quantenmechanisch ist es natürlich nicht möglich, Teilchen durch Ort und Geschwindigkeit zu beschreiben, und diese beiden Größen sind auch nicht simultan scharf messbar [24]. Dies bedeutet streng genommen, dass die Verteilungsfunktion eine Summe von DIRACschen  $\delta$ -Funktionen ist. Praktisch jedoch wählt man die Volumenelemente  $d^3r d^3v$  so, dass sie zwar klein sind im Vergleich zur makroskopischen Dimension des Systems bzw. den mittleren, auftretenden Geschwindigkeiten, jedoch so groß, dass sich noch immer viele Teilchen in dem Volumenelement aufhalten [25]. Die Verteilungsfunktion stellt dann eine Mittelung über  $d^3r d^3v$  dar, ist also stetig.

Nach dem Satz von LIOUVILLE bleibt in Abwesenheit von Stößen die Dichte im Phasenraum erhalten. Für die Verteilungsfunktion folgt daraus

$$f(\vec{r} + d\vec{r}, \vec{v} + d\vec{v}, t + dt) = f(\vec{r}, \vec{v}, t) \quad (2.1)$$

oder anders formuliert für kleine Änderungen der Variablen:

$$\frac{\partial f}{\partial \vec{r}} d\vec{r} + \frac{\partial f}{\partial \vec{v}} d\vec{v} + \frac{\partial f}{\partial t} dt = 0. \quad (2.2)$$

Die Ableitung nach einem Vektor bedeutet hier den Gradienten nach den Komponenten des Vektors zu bilden, also beispielsweise  $\frac{\partial}{\partial \vec{r}} = (\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z})$ . Lässt man nun Stöße der Teilchen untereinander zu, so muss deren Effekt durch einen Korrekturterm  $df|_{\text{Stoß}}$  berücksichtigt werden. Leitet mal alle vier Terme nach der Zeit ab, erhält man die Boltzmann-Gleichung:

$$\vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \vec{a} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{v}} + \frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{\text{Stoß}}, \quad (2.3)$$

wobei  $\vec{a} = \frac{\partial \vec{v}}{\partial t}$  die Beschleunigung ist, die die Teilchen durch externe Felder erfahren, weshalb dieser Term auch *Feldterm* genannt wird. Der erste Term wiederum wird *Diffusions-* und der Ausdruck auf der rechten Seite wird *Stoßterm* genannt [26]. Letzterer beschreibt die Interaktion der Teilchen untereinander und hängt vom konkreten, untersuchten System ab. Während der Rest der Gleichung klassisch ist, fließen in den Stoßterm häufig quantenmechanische Beschreibungen der Wechselwirkung ein. Auch ohne Kenntnis der einzelnen mikroskopischen Prozesse, die der Teilchen-Teilchen-Wechselwirkung zugrunde liegen, können hier zwei wichtige Formen, die das Stoßintegral prinzipiell annehmen kann, diskutiert werden.

Zum einen ist die *Relaxationszeit-Näherung* von Bedeutung. Bei diesem heuristischen Ansatz spaltet man die Verteilungsfunktion in einen Gleichgewichts- ( $f_0$ ) und einen Störungsanteil ( $f_1$ ) auf, sodass

$$f(\vec{r}, \vec{v}, t) = f_0(\vec{v}) + f_1(\vec{r}, \vec{v}, t) \quad (2.4)$$

gilt und  $f_0(\vec{v})$  die Lösung der Boltzmann-Gleichung ohne äußere Störungen bezeichnet<sup>1</sup>, das heißt, dass im Gleichgewichtszustand in jeden Zustand genau so viele Teilchen hinein wie auch wieder hinaus gestreut werden. Die Stöße der Gleichgewichtsverteilungsfunktion tragen also nichts zum Stoßintegral bei. Ist das System nun nicht im Gleichgewicht, so wird es durch zusätzliche Stöße dorthin relaxieren, und zwar nimmt man an, dass dies umso schneller geschieht, je stärker die Abweichung vom Gleichgewicht ist. Man setzt daher für den Stoßterm

$$\frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{\text{Stoß}} = -\frac{f_1(\vec{v})}{\tau} \quad (2.5)$$

an, wobei  $\tau$  Relaxationszeit genannt wird und eine charakteristische Zeit für das Abklingen der gestörten Verteilungsfunktion ist. Die Relaxationszeit kann natürlich ebenfalls von  $\vec{r}$ ,  $\vec{v}$  und  $t$  abhängen und kann als Maß für die Stärke der Wechselwirkung aufgefasst werden: Je größer  $\tau$ , desto schwächer bzw. seltener ist die Wechselwirkung der Teilchen untereinander.

Zum anderen lässt sich der Stoßterm auch mittels Übergangswahrscheinlichkeiten und Summen bzw. Integralen<sup>2</sup> formulieren. Hierbei argumentiert man wie folgt: Die Besetzung der Zustände

---

<sup>1</sup>Im klassischen Gas wäre diese Lösung beispielsweise die Maxwell-Boltzmann-Verteilung und im Elektrogenas im Festkörper die Fermi-Dirac-Verteilung.

<sup>2</sup>Deshalb wird der Stoßterm teilweise auch als Stoßintegral bezeichnet.

$\vec{v}$  nimmt ab, indem Teilchen in andere Zustände  $\vec{v}'$  am selben Ort  $\vec{r}$  durch Stöße übergehen. Andererseits gehen Teilchen durch Stöße aus allen möglichen Zuständen  $\vec{v}'$  nach  $\vec{v}$  über. Dies erfolgt jeweils mit einer Wahrscheinlichkeit  $w(\vec{v}|\vec{v}')$  bzw.  $w(\vec{v}'|\vec{v})$ . Da sich im Folgenden mit Elektronen beschäftigt werden wird, ist außerdem zu bedenken, dass jeder Zustand gemäß des Pauli-Prinzips nur durch ein Elektron besetzt werden kann. Wenn man den Spin zunächst einmal ignoriert, bedeutet das, dass man die Übergangswahrscheinlichkeiten multiplizieren muss mit der Wahrscheinlichkeit, dass der Ausgangszustand besetzt ist und dass der Endzustand unbesetzt ist, also mit  $f(\vec{r}, \vec{v}, t) \cdot (1 - f(\vec{r}, \vec{v}', t))$  und vice versa. Der Stoßterm lautet dann also

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{\text{Stoß}} = \sum_{\vec{v}'} \left[ -w(\vec{v}'|\vec{v}) \cdot f(\vec{r}, \vec{v}, t) (1 - f(\vec{r}, \vec{v}', t)) + w(\vec{v}|\vec{v}') \cdot f(\vec{r}, \vec{v}', t) (1 - f(\vec{r}, \vec{v}, t)) \right] \quad (2.6)$$

für einen Ein-Teilchen-Stoß. Praktisch sind natürlich immer auch andere Teilchen an einem Stoß beteiligt, deren Übergangswahrscheinlichkeiten und Besetzungszahlen zusätzlich berücksichtigt werden müssten. Dies soll im Folgenden jedoch keine Berücksichtigung finden.

Es sollen nun „heiße“ Elektronen [27] betrachtet werden, also Elektronen, deren Energie  $E$  deutlich größer ist als die Fermi-Energie  $E_F$ . Für Elektronen im Festkörper ist die Gleichgewichtsverteilung die Fermi-Dirac-Verteilung, für die  $f_0(\vec{v}(E)) \approx 0$  für  $E > E_F$  gilt. Auch die Störung der Gleichgewichtsverteilung wird als klein angenommen, also  $f_1(\vec{r}, \vec{v}, t) \ll 1$ . Setzt man diese Näherungen in (2.6) ein, vereinfacht sich der Stoßterm zu

$$\left. \frac{\partial f_1}{\partial t} \right|_{\text{Stoß}} = \sum_{\vec{v}'} \left[ -w(\vec{v}'|\vec{v}) \cdot f_1(\vec{r}, \vec{v}, t) + w(\vec{v}|\vec{v}') \cdot f_1(\vec{r}, \vec{v}', t) \right]. \quad (2.7)$$

Man sieht, dass der erste Term, also das Herausstreuen aus dem Zustand  $\vec{v}$  nicht mehr von der Besetzung der übrigen Zustände abhängt, sondern nur noch von der Summe aller Übergangswahrscheinlichkeiten pro Zeiteinheit. Dies lässt sich effektiv mit der oben erwähnten Relaxationszeit-Näherung beschreiben. Auch im zweiten Term lässt sich die Relaxationszeit-Näherung verwenden, indem man die Übergangswahrscheinlichkeit aufspaltet in die Streurrate  $\frac{1}{\tau(\vec{v}')}$ , die angibt, wie häufig ein Übergang von  $\vec{v}'$  in einen beliebigen anderen Zustand erfolgt; und eine Übergangswahrscheinlichkeit  $p(\vec{v}|\vec{v}')$ , die angibt, mit welcher Wahrscheinlichkeit pro Stoß das Elektron nach  $\vec{v}$  gestreut wird. Der Stoßterm wird dann zu

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{\text{Stoß}} = -\frac{f(\vec{r}, \vec{v}, t)}{\tau(\vec{v})} + \sum_{\vec{v}'} \frac{p(\vec{v}|\vec{v}')}{\tau(\vec{v}')} \cdot f(\vec{r}, \vec{v}', t), \quad (2.8)$$

wobei der Index der Verteilungsfunktion unterdrückt wurde. Dies ist die Form des Stoßterms, die in dieser Arbeit verwendet wird.

Es sei noch angemerkt, dass alle hier verwendeten Ausdrücke auch für andere Dimensionen verwendbar sind. Den eindimensionalen Fall erhält man, indem man  $\vec{r}$  und  $\vec{v}$  durch ein-

mensionale Größen, z. B.  $z$  und  $v_z$  ersetzt und die Gradienten durch die dementsprechenden partiellen Ableitungen.

### 2.1.2 Kontinuitätsgleichung

Eine weitere, bedeutende Gleichung, die zur Beschreibung von Transport benutzt wird, ist die *Kontinuitätsgleichung*. Sie kann für jede Erhaltungsgröße und den dazugehörigen Fluss formuliert werden, in diesem Fall für die Teilchendichte  $n(\vec{r}, t)$  und den Teilchenfluss  $\vec{j}(\vec{r}, t)$ . Beide Größen sind in der Regel wie die Verteilungsfunktion in der Boltzmann-Gleichung (2.3) als statistische Mittelungen aufzufassen.

Die Kontinuitätsgleichung beschreibt, dass eine Änderung der Teilchendichte an einem Ort  $\vec{r}$  entweder dadurch bewirkt wird, dass der Teilchenfluss divergent ist an diesem Ort – also dass netto mehr Teilchen in das Volumenelement hineinfließen als heraus oder andersherum – oder dadurch, dass eine externe Quelle  $S(\vec{r}, t)$  Teilchen injiziert. Die Gleichung lautet dann

$$\frac{\partial n(\vec{r}, t)}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j}(\vec{r}, t) = S(\vec{r}, t). \quad (2.9)$$

Auch die Kontinuitätsgleichung und die später daraus abgeleiteten Gleichungen lassen sich eindimensional formulieren, indem das gleiche Vorgehen wie bei der Boltzmann-Gleichung angewandt wird.

Man bemerke, dass die in der Kontinuitätsgleichung verwendete Teilchendichte mit der Verteilungsfunktion aus der Boltzmann-Gleichung (2.3) über

$$n(\vec{r}, t) = \int d^3v f(\vec{r}, \vec{v}, t) \quad (2.10)$$

zusammenhängt. Die Informationen über die genaue Kinetik der Teilchen stecken nun also nicht mehr in der Verteilungsfunktion, sondern im Teilchenfluss  $\vec{j}(\vec{r}, t)$ . Des Weiteren sei angemerkt, dass (2.3) aus (2.9) abgeleitet werden kann, indem man  $n$  durch  $f$  ersetzt und die sechsdimensionale Geschwindigkeit  $\vec{w} = (\vec{v}, \vec{a})$  einführt und  $\vec{j} = f\vec{w}$  postuliert [25].

### 2.1.3 Wichtige Transportprozesse

#### Diffusion

Der Teilchenfluss kann beispielsweise diffusiver Natur sein. Das heißt, dass die Teilchen durch häufiges Stoßen ungerichtete Zufallsbewegungen aufgrund ihrer thermischen Energie oder der thermischen Energie des Mediums, in dem sie sich befinden, ausführen. Hierdurch bewegen sich statistisch betrachtet mehr Teilchen aus den Gebieten mit hoher Teilchendichte in Regionen mit niedriger Teilchendichte als andersherum. Der daraus resultierende Teilchenfluss ist also umgekehrt proportional zum Dichtegradienten  $\operatorname{grad} n$ , wobei die Proportionalitätskonstante

$D$  Diffusionskonstante genannt wird. Der Fluss schreibt sich als  $\vec{j}(\vec{r}, t) = -D \text{grad } n(\vec{r}, t)$  und die Kontinuitätsgleichung wird zu

$$\frac{\partial n(\vec{r}, t)}{\partial t} + \Delta n(\vec{r}, t) = S(\vec{r}, t) \quad (2.11)$$

mit dem Laplace-Operator  $\Delta = \text{div} \cdot \text{grad}$ . Für den späteren Vergleich mit anderen Transportprozessen ist es hilfreich zu wissen, dass das mittlere Abstandsquadrat  $\langle \Delta r^2 \rangle$  eines Teilchens zu seinem Quellpunkt sich für diffusive Prozesse zeitlich wie  $\langle \Delta r^2 \rangle \propto t$  verhält.

### Ballistischer Transport

Beim ballistischen Transport bewegen sich die Teilchen von ihrem Quellort auf geraden Trajektorien mit konstanter Geschwindigkeit weg, ohne einen Richtungswechsel durch Stöße zu erfahren. Deswegen ist der räumliche Abstand der Teilchen zur Quelle proportional zur Zeit  $t$  und damit  $\langle \Delta r^2 \rangle \propto t^2$ .

### Anomale Diffusion

Als anomale Diffusion bezeichnet man Transportprozesse mit einem nicht linearen Zusammenhang zwischen  $\langle \Delta r^2 \rangle$  und der Zeit  $t$  [28]. In der Regel folgt die Varianz einem Potenzgesetz, also  $\langle \Delta r^2 \rangle \propto t^\gamma$ . Gilt  $0 < \gamma < 1$ , so wird der Prozess als *subdiffusiv* bezeichnet und für  $\gamma > 1$  als *superdiffusiv*, wobei der Spezialfall  $\gamma = 2$ , also der ballistische Transport, teilweise auch zur anomalen Diffusion gezählt wird [29]. Dies ist zunächst einmal eine rein makroskopische, phänomenologische Beschreibung des Prozesses. Die der anomalen Diffusion zugrunde liegenden mikroskopischen Prozesse können sehr unterschiedlich sein und sind auch nicht immer einfach herzuleiten. Für diese Arbeit ist ein superdiffusiver Prozess von Relevanz, der aus einer Kaskade von ballistischen Transporten besteht [18] und im nächsten Abschnitt erläutert werden soll.

## 2.1.4 Superdiffusive Transportgleichung

### Herleitung aus dem Generationenbild

Zur Herleitung dieser Transportgleichung geht man davon aus, dass der (ballistische) Fluss  $\phi(\vec{r}, t | \vec{r}_Q, t_Q)$  von Teilchen am Ort  $\vec{r}$  und zur Zeit  $t$  für eine Punktquelle bei  $(\vec{r}_Q, t_Q)$  bekannt ist. Nun wird eine externe Quelle  $S^{\text{ext}}(\vec{r}_Q, t_Q)$  betrachtet und man bezeichnet als erste Teilchengeneration die Teilchen, die von der Quelle erzeugt, aber noch nicht gestreut worden sind. Teilchen, die gestreut wurden, werden dann zu effektiven Quellen der höheren Generationen und tragen nichts mehr zur ersten Generation bei. Die Teilchendichte der ersten Generation  $n^{[1]}(\vec{r}, t)$  wird dann durch die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial n^{[1]}(\vec{r}, t)}{\partial t} + \text{div } \hat{\phi} S^{\text{ext}} = S^{\text{ext}}(\vec{r}, t) - \frac{n^{[1]}(\vec{r}, t)}{\tau}, \quad (2.12)$$

wobei der letzte Term die Verluste durch Streuung mit effektiver Lebensdauer  $\tau$  beschreibt und

$$\hat{\phi}S^{\text{ext}} := \int dz_Q \int dt_Q \phi(\vec{r}, t | \vec{r}_Q, t_Q) S^{\text{ext}}(\vec{r}_Q, t_Q) \quad (2.13)$$

definiert wurde.

Dies kann man natürlich nicht nur für eine Art von Teilchen betrachten, sondern für beliebig viele, die mit dem (Multi-)Index  $I$  indiziert werden, wobei  $I$  z. B. verschiedene Spins, verschiedene Energie oder auch verschiedene Spezies enthalten kann. Diese unterschiedlichen Teilchen wechselwirken zunächst nicht. Erst wenn ein Teilchen gestreut wird, hat es einen Einfluss auf die nächsthöhere Generation von Teilchen, indem sie zur Quelle für jene Generation werden. Der effektive Quellterm für die zweite Generation lautet beispielsweise

$$S^{[2]} = \sum_{I'} p(I|I') \frac{n^{[1]}(\vec{r}, t, I')}{\tau(I')} =: \hat{S}n^{[1]}, \quad (2.14)$$

wobei sowohl  $\tau$  als auch  $p$  im allgemeinen von  $\vec{r}$  und  $t$  abhängen können. Damit lässt sich die Kontinuitätsgleichung für die  $j$ -te Teilchengeneration schreiben als

$$\frac{\partial n^{[j]}}{\partial t} + \text{div} \hat{\phi} \hat{S}n^{[j-1]} = \hat{S}n^{[j-1]} - \frac{n^{[j]}}{\tau}. \quad (2.15)$$

Betrachtet man nun alle Generationen, so erhält man für die Gesamtteilchendichte  $n = \sum_{j=1}^{\infty} n^{[j]}$  den Ausdruck

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{n}{\tau} = \left( -\text{div} \hat{\phi} + \hat{\text{id}} \right) \left( \hat{S}n + S^{\text{ext}} \right) \quad (2.16)$$

mit dem Identitätsoperator  $\hat{\text{id}}$ , indem man über alle Generationen aufsummiert. Auffällig ist, dass der Flussterm nicht direkt auf die Dichte wirkt, wie es bei der Diffusion der Fall ist, sondern auf die externe und die effektive Quelle. Darüber hinaus ist zu bedenken, dass über den Quelloperator  $\hat{S}$ , die verschieden Teilchenarten  $I$  miteinander gekoppelt sind. Es handelt sich bei dieser, von Battiato et al. *superdiffusive Transportgleichung* [17] genannten, Gleichung um einen Satz von gekoppelten Integro-Differential-Gleichungen. Dass der so beschriebene Transport tatsächlich superdiffusiver Natur ist, wird in Ref. [18] gezeigt. Der entscheidende, physikalische Unterschied zwischen einem so beschriebenen Transport und der Diffusion ist, dass hier zwischen zwei Stößen eine relevante Strecke ballistisch zurückgelegt wird, während bei der Diffusion unendlich viele Stöße zu jeder Zufallsbewegung beitragen. Durch die endliche zurückgelegte Strecke zwischen zwei Stößen, gibt es eine relevante Anzahl an Teilchen, die kurze bis mittlere Strecken (im Vergleich zur Strecke zwischen Stößen) zurücklegen und dabei nicht zu häufig hin und her gestreut werden, sodass keinen zu großen Anteil der Strecke mehrfach

zurücklegen müssen<sup>3</sup>. Dadurch durchqueren diese Teilchen die Strecke in deutlich kürzerer Zeit, als Teilchen, die sich diffusiv bewegen.

### Vergleich mit der Diffusionsgleichung

Wie bereits erwähnt, unterscheiden sich die Diffusionsgleichung (2.11) und die superdiffusive Transportgleichung (2.16) (im Folgenden: SDTG) unter anderem dadurch, dass in letzterer der Flussterm an die Quelle gekoppelt ist, sowie, dass bei der Diffusion von einer großen Anzahl von Stößen zwischen zwei Betrachtungszeitpunkten ausgegangen wird, während bei der Superdiffusion der nächste Betrachtungszeitpunkt jeweils der nächste Stoß ist<sup>4</sup>. Erst im Limes großer Längen, über die der Transport erfolgen soll, gehen die Ergebnisse für Diffusionsgleichung und SDTG ineinander über. Wählt man die Zeit und damit die Strecke zwischen zwei Stößen als sehr klein und betrachten nur Orte, die weit weg von der externen Quelle sind, sollten beide Gleichungen auf die gleiche Lösung für die Teilchendichte führen.

Um dies zu zeigen, wird ein eindimensionales System betrachtet, es werden also  $\vec{r}$  durch  $z$ , usw. ersetzt und es wird angenommen, dass der Fluss  $\phi(z|z_Q)$  eine begrenzte Reichweite  $\lambda$  hat und somit die Quellstärke und die Teilchendichte am Ort  $z_Q$  keinen Einfluss haben auf die Lösung am Ort  $z$ , falls  $|z - z_Q| > \lambda$  gilt. Es wird nun ein System mit Punktquelle  $S^{\text{ext}} = S \cdot \delta(z - z_S)$  untersucht, womit die Diffusionsgleichung dann

$$\frac{\partial n}{\partial t} - D \frac{\partial^2 n}{\partial z^2} = S \cdot \delta(z - z_S) \quad (2.17)$$

lautet und die SDTG

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{n}{\tau} = \left( -\frac{\partial}{\partial z} \hat{\phi} + \hat{\text{id}} \right) \left( S \cdot \delta(z - z_S) + \hat{S}n \right). \quad (2.18)$$

Es wird nun lediglich eine Teilchenspezies betrachtet, sodass  $\hat{S}n = \frac{n}{\tau}$  gilt und man erkennt durch Subtraktion der beiden Gleichungen, dass für  $z \neq z_S$

$$D \frac{\partial^2 n}{\partial z^2} = -\frac{\partial}{\partial z} \hat{\phi} \left( \frac{n}{\tau} + S \cdot \delta(z - z_S) \right) \quad (2.19)$$

gelten müsste. Sei nun  $|z - z_S| \gg \lambda$  und  $\lambda$  so klein, dass für  $z - \lambda < z_Q < z + \lambda$   $n(z_Q) = a(z_Q - z) + c$  für zwei Konstanten  $a$  und  $c$  gilt. Dann vereinfacht sich (2.19) zu

$$Da\tau = -\hat{\phi}n, \quad (2.20)$$

---

<sup>3</sup>Und falls sie doch einen Teil der Strecke mehrfach zurücklegen müssen, dann müssen sie dies nur endlich oft und wahrscheinlich recht selten tun.

<sup>4</sup>Dies ist auch der Grund, weshalb der Spezialfall des ballistischen Transportes nicht mit (2.16) behandelt werden kann: Beim nächsten Stoß nach der Erzeugung befinden sich die Teilchen bereits im Unendlichen und man erhält eine Nulllösung.

wenn man auf beiden Seiten über  $z$  integriert und im Diffusionsterm die Ableitung explizit ausführt. Der Flussterm ist dann gegeben durch

$$\hat{\phi}n = \int_{z-\lambda}^{z+\lambda} dz_Q (a(z_Q - z) + c) \phi(z|z_Q) \quad (2.21)$$

und man nimmt nun an, dass  $\phi$  nur vom relativen Abstand von Start- und Zielort und antisymmetrisch ist, also sich

$$\phi(z|z_Q) = \text{sgn}(z - z_Q) \phi(|z - z_Q|) \quad (2.22)$$

schreiben lässt. Damit erhält man dann

$$\hat{\phi}n = -a \int_{z-\lambda}^{z+\lambda} dz_Q |z_Q - z| \cdot \phi(|z - z_Q|), \quad (2.23)$$

was bedeutet, dass für

$$\tau D = \int_{z-\lambda}^{z+\lambda} dz_Q |z_Q - z| \cdot \phi(|z - z_Q|) \quad (2.24)$$

die beiden Gleichungen auf dieselbe Lösung in weiter Entfernung von der Quelle führen. Die rechte Seite von (2.24) ist offensichtlich eng mit dem zweiten (zentralen) Moment des Flusses  $\phi$  verwandt, was nicht verwundert, da man aus der zeitlichen Entwicklung des zweiten Momentes der Verteilungsfunktion den Diffusionskoeffizienten bestimmen kann (vgl. Abs. 2.1.3).

## 2.2 Transport in planaren Schichten

Von nun an sollen keine allgemeinen Systeme mehr untersucht werden, sondern welche, bei denen die Materialeigenschaften sich lediglich entlang einer Achse (hier der  $z$ -Achse) ändern. In die anderen beiden Richtungen soll sich das System homogen und unendlich fortsetzen. Dies bedeutet allerdings nicht, dass hier eine rein eindimensionale Beschreibung verwendet wird, die korrekten, dreidimensionalen Trajektorien der Teilchen und damit ein dreidimensionaler Fluss sollen Beachtung finden. Außerdem wird sich auf stationäre, also zeitunabhängige Probleme beschränkt.

Häufig wird sich auf Systeme beschränkt werden, bei denen sich die Materialeigenschaften nicht stetig ändern, sondern sprunghaft an Grenzflächen, wie das beispielsweise bei Verbundstoffen der Fall ist (vgl. auch Abb. 2.3). Da die Materialien zwischen den Grenzflächen bzw. -ebenen homogen und unendlich ausgedehnt sind, werden sie als *planare Schichten* bezeichnet. Zunächst einmal werden aber vollständig homogene Systeme betrachtet und in diesen die superdiffusive Transportgleichung sowohl aus physikalischen Grundprinzipien als auch aus der Boltzmann- und der Kontinuitätsgleichung hergeleitet.



### 2.2.1 Transportgleichung in dreidimensionaler Auflösung

In diesem Abschnitt wird gezeigt werden, wie der Transport in dreidimensionaler Auflösung – also aus Volumenelementen  $dV'$  in ein ausgewähltes Volumenelement  $dV$  bei  $\vec{r} = (x, y, z)$  – mit einer Integralgleichung beschrieben werden kann. Hierzu betrachtet man ein unendlich ausgedehntes, homogenes und isotropes System, das bedeutet, dass die Materialeigenschaften, in diesem Fall ist alleine die Lebensdauer  $\tau(\vec{r}, \vec{v})$  relevant, weder vom Ort  $\vec{r}$  noch von der Richtung  $\vec{\Omega}$  abhängt, also  $\tau = \tau(v)$  gilt, wobei  $\vec{v} = v \cdot \vec{\Omega}$  definiert wurde. Hieraus folgt auch, dass die Teilchen sich zwischen den Stößen auf ungekrümmten Trajektorien bewegen. Auch die Streuung soll isotrop sein, aber auch randomisierend; die Übergangswahrscheinlichkeit hängt also weder von der Richtung des eingestreuten Teilchens, noch von der Richtung des ausgestreuten Teilchens ab und auch nicht von der Differenz der beiden Winkel, sondern lediglich von dem Betrag der Geschwindigkeiten, was durch  $p(v|v')$  beschrieben wird. Außerdem sei eine externe, isotrope Quelle durch  $S^{\text{ext}}(\vec{r}, v)$  gegeben. Die Teilchendichte  $n$ , die hier von Interesse ist, hängt mit der Verteilungsfunktion  $f$  aus der Boltzmann-Gleichung über

$$n(\vec{r}, v) = \iint d\Omega f(\vec{r}, \vec{v}) \quad (2.25)$$

zusammen.

#### Herleitung aus Grundprinzipien

Die Teilchenzahl  $n(\vec{r}, v)dV dv$  von Teilchen im Geschwindigkeitsintervall  $[v, v+dv]$  im Volumen  $dV$  bei  $\vec{r}$  lässt sich bestimmen als Integral über das gesamte Volumen, gewichtet durch die „Beiträge“, die die jeweiligen Volumenelemente  $dV'$  liefern. Anschaulich gesprochen betrachtet man alle Orte  $\vec{r}'$  und summiert alle Teilchen auf, die in dem jeweiligen Volumenelement  $dV'$  starten und dann  $dV$  erreichen.

Der Beitrag der Volumenelemente kann aufgefasst werden als die Anzahl der dort „erschaffenen“ Teilchen, multipliziert mit der Wahrscheinlichkeit, für diese Teilchen das ausgewählte Volumenelement  $dV$  zu erreichen.

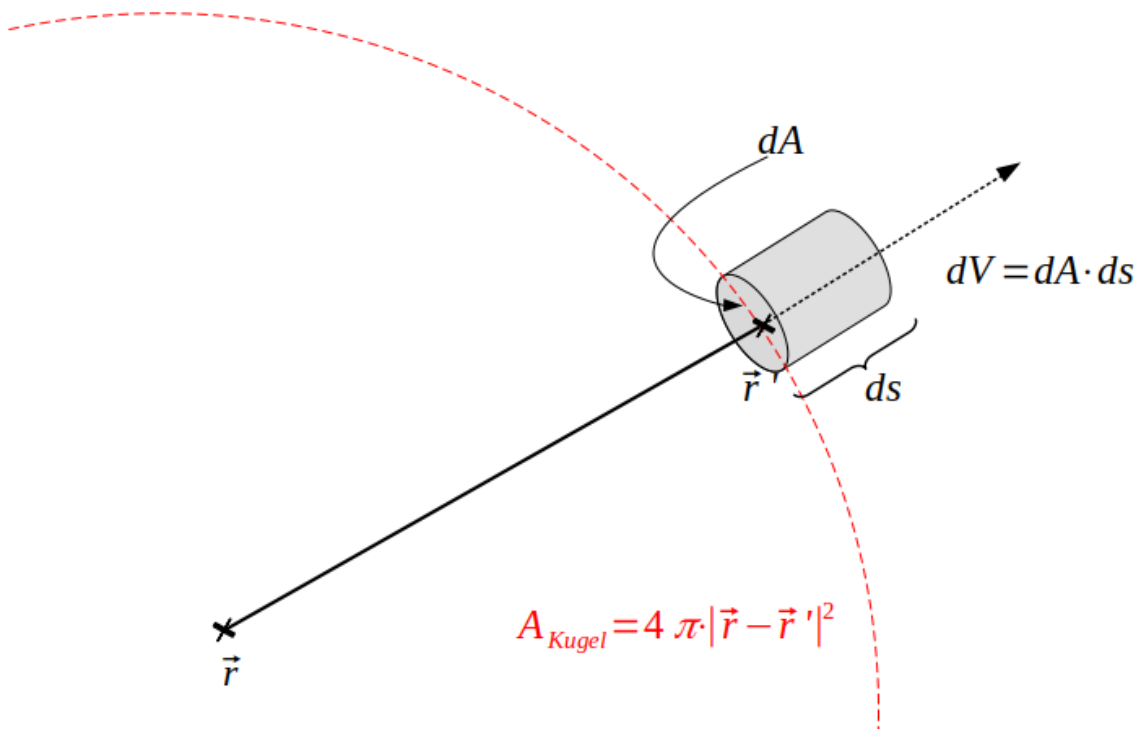
Die Anzahl der „erschaffenen Teilchen“ setzt sich wiederum aus zwei Faktoren zusammen:

- (a) Die Anzahl der ins Intervall  $[v, v + dv]$  gestreuten und extern erzeugten Teilchen pro Zeiteinheit im Volumen  $dV'$

$$\int dv' \frac{n(\vec{r}', v')}{\tau(v')} \cdot p(v|v') dV' dv + S^{\text{ext}}(\vec{r}', v) dV' dv \quad (2.26)$$

- (b) Die Zeit, in der die Teilchen zur Teilchenzahl in  $dV$  beitragen können, also dort detektiert werden können. Hat das Volumenelement die Länge  $ds$  parallel zur Trajektorie, so ist die Zeit durch  $\frac{ds}{v}$  bestimmt.

Auch die Wahrscheinlichkeit  $dV$  zu erreichen, spaltet sich in zwei Faktoren auf:



**Abbildung 2.1:** Skizze der Geometrie, die für die Herleitung aus den Grundprinzipien verwendet wurde. Dargestellt ist die Trajektorie eines Teilchens, dass bei  $\vec{r}'$  erzeugt wird und dann in das Volumen  $dV$  (als Zylinder dargestellt) gelangt. In rot ist die Kugel aus (d) angedeutet.

- (c) Die Wahrscheinlichkeit nicht gestreut zu werden, bevor  $dV$  erreicht wird:

$$e^{-\frac{|\vec{r} - \vec{r}'|}{\tau(v)v}}. \quad (2.27)$$

Die Strecke  $\tau(v)v$  ist die mittlere Strecke zwischen zwei Stößen und wird auch als mittlere freie Weglänge (*engl.*: mean free path, kurz: mfp)  $l(v)$  bezeichnet.

- (d) Die Wahrscheinlichkeit, dass die Trajektorie durch  $dV$  verläuft. Dies lässt sich aus dem Verhältnis der Fläche  $dA$  zu der Fläche  $A_{\text{Kugel}}$  der Kugel mit Radius  $|\vec{r} - \vec{r}'|$  berechnen, da  $dA$  proportional zu der Anzahl der Trajektorien ist, die durch  $dV$  verlaufen und  $A_{\text{Kugel}}$  proportional zu der Anzahl aller möglichen Trajektorien. Die Wahrscheinlichkeit ist also

$$\frac{dA}{A_{\text{Kugel}}} = \frac{dA}{4\pi|\vec{r} - \vec{r}'|^2}. \quad (2.28)$$

Die Teilchenzahl in  $dVdv$  ist also gegeben durch

$$n(\vec{r}, v)dVdv = \iiint (a)(b)(c)(d) \quad (2.29)$$

$$= \iiint dV'dv \left( \int dv' \frac{n(\vec{r}', v')}{\tau(v')} \cdot p(v|v') + S^{\text{ext}}(\vec{r}', v) \right) \frac{ds}{v} \frac{dA}{4\pi|\vec{r} - \vec{r}'|^2} \cdot e^{-\frac{|\vec{r} - \vec{r}'|}{\tau(v)v}}. \quad (2.30)$$

Indem man nun die Teilchendichte und die Lebensdauer über die Energie  $E$  statt die Geschwindigkeit  $v(E) = \sqrt{\frac{2}{m}E}$  parametrisiert, sowie den angepassten Ausdruck aus (a) zusammenfasst zur lokalen Quellstärke

$$S(\vec{r}, E) = \int dE' \frac{n(\vec{r}, E')}{\tau(E')} p(E|E') + S^{\text{ext}}(\vec{r}, E) \quad (2.31)$$

und  $dV = dAds$  beachtet, erhält man den finalen Ausdruck für die superdiffusive Integralgleichung in homogenen Medien:

$$n(\vec{r}, E) = \iiint dV' S(\vec{r}', E) \frac{e^{-\frac{|\vec{r} - \vec{r}'|}{\tau(E)v(E)}}}{4\pi v(E) |\vec{r} - \vec{r}'|^2}. \quad (2.32)$$

### Herleitung aus der Boltzmann-Gleichung

Die Integralgleichung (2.32) kann auch aus der Boltzmann-Gleichung abgeleitet werden, obwohl diese bekanntlich eine Differentialgleichung ist. Ausgangspunkt ist die zeitunabhängige (also ohne  $\frac{\partial f}{\partial t}$ -Term) und feldfreie (also ohne Feldterm) Boltzmann-Gleichung (2.3) mit dem Stoßterm, wie in (2.8) angegeben

$$\vec{v} \cdot \nabla f(\vec{r}, \vec{v}) + \frac{f(\vec{r}, \vec{v})}{\tau(v)} = \int dv' \frac{1}{\tau(v')} \iint d\Omega'' f(\vec{r}, \vec{v}'') \cdot p(\vec{v}|\vec{v}'') + \frac{S^{\text{ext}}(\vec{r}, v)}{4\pi}, \quad (2.33)$$

wobei  $\frac{S^{\text{ext}}(\vec{r}, v)}{4\pi}$  die Quellstärke pro Raumwinkel beschreibt und die verwendete winkelaufgelöste Übergangswahrscheinlichkeit mit der zuvor verwendeten über

$$\iint d\Omega \iint d\Omega'' p(\vec{v}|\vec{v}'') = p(v|v'') \quad (2.34)$$

zusammenhängt, was später noch verwendet werden wird. Die rechte Seite der Gleichung (2.33) ist die Emissionsstärke pro Raumwinkel, was im Folgenden mit  $Q(\vec{r}, \vec{v})$  bezeichnen wird.

Man substituiert nun  $\vec{r}$  durch  $\vec{r} - R\vec{\Omega}$ , wodurch  $\vec{v} \cdot \nabla$  entlang einer Trajektorie zu  $-v \frac{d}{dR}$  wird, da  $\vec{\Omega} \cdot \nabla$  die Ableitung in Richtung von  $\vec{\Omega}$  ist. Multipliziert man dann (2.33) mit  $v$ , erhält man die gewöhnliche Differentialgleichung

$$- \frac{d}{dR} f(\vec{r} - R\vec{\Omega}, \vec{v}) + \frac{f(\vec{r} - R\vec{\Omega}, \vec{v})}{\tau(v)v} = \frac{1}{v} Q(\vec{r} - R\vec{\Omega}, \vec{v}), \quad (2.35)$$

die mit analytischen Mitteln gelöst werden kann. In der Lösung

$$f(\vec{r} - R\vec{\Omega}, \vec{v}) = f(\vec{r} - R_0\vec{\Omega}, \vec{v})e^{\frac{R-R_0}{\tau(v)v}} + \frac{1}{v} \int_R^{R_0} dR' Q(\vec{r} - R'\vec{\Omega}, \vec{v})e^{\frac{R-R'}{\tau(v)v}} \quad (2.36)$$

setzt man  $R = 0$  und betrachtet den Fall  $R_0 \rightarrow \infty$ . Der erste Term auf der rechten Seite wird dann null und man erhält

$$f(\vec{r}, \vec{v}) = \frac{1}{v} \int_0^\infty dR Q(\vec{r} - R\vec{\Omega}, \vec{v})e^{\frac{R}{\tau(v)v}}. \quad (2.37)$$

An dieser Stelle wird nun  $\vec{r} - R\vec{\Omega} = \vec{r}'$  substituiert und auf beiden Seiten über  $\Omega$  und  $\Omega'$  integriert. Man erhält

$$4\pi \cdot n(\vec{r}, v) = \frac{1}{v} \iint d\Omega \int_0^\infty dr' S(\vec{r}', v) e^{-\frac{|\vec{r}-\vec{r}'|}{\tau(v)v}} \quad (2.38)$$

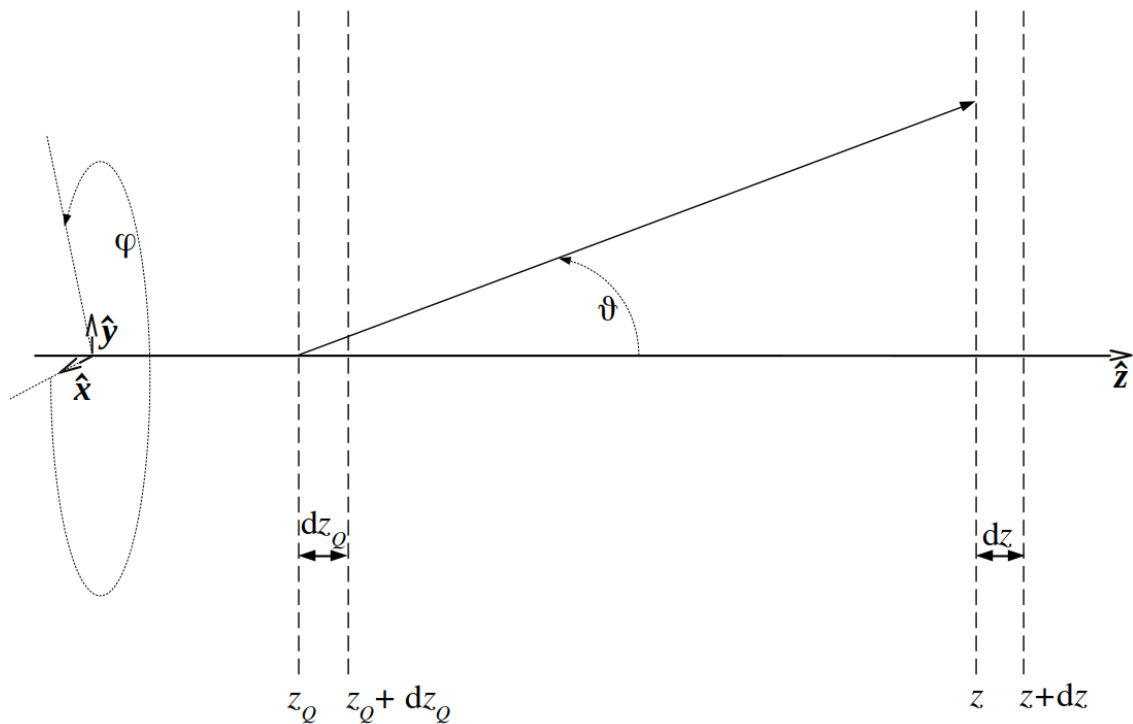
und daraus unter Beachtung von  $dV' = d\Omega dr' |\vec{r}' - \vec{r}|^2$  und dem Übergang von Geschwindigkeiten zu Energien die Gleichung (2.32) [21].

### 2.2.2 Transportgleichung in eindimensionaler Auflösung (Milne's Problem)

Die im vorherigen Abschnitt hergeleitete Transportgleichung soll nun vereinfacht werden und an das Problem der planaren Schichten angepasst werden. Da Systeme untersucht werden, in denen sich die Materialeigenschaften nur entlang einer Achse verändern, soll die Teilchendichte auch nur entlang dieser Achse aufgelöst werden und die beiden anderen Dimensionen ausintegriert werden. Das bedeutet, dass der Transport nicht mehr von Volumenelement zu Volumenelement, sondern von Linienelement zu Linienelement beschrieben wird. Dieses Problem wurde in sehr ähnlicher Form bereits in der Neutronentransporttheorie untersucht [21], wobei dieser Fall als *Milne's Problem* [30] bezeichnet wird. Milne's Problem stammt ursprünglich jedoch aus der Astrophysik, wo die Verdunkelung der Sonne untersucht wurde [31].

Zunächst werden die Teilchendichte  $n$  und die Quellstärke  $S$  umdefiniert, sodass sie lediglich von einer Koordinate, der  $z$ -Koordinate, abhängen. Es gelte also

$$n(z, E) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy n(\vec{r}, E), \quad (2.39)$$



**Abbildung 2.2:** Dargestellt ist eine mögliche Trajektorie vom Punkt  $z_Q$  zum Punkt  $z$  unter dem Winkel  $\vartheta$ . Die Quelle für den Transport setzt sich zusammen aus allen internen oder externen Quellen im Linienelement  $dz_Q$ ; betrachtet wird der Transport in das Volumen zwischen den Ebenen bei  $z$  und  $z + dz$ , was durch das Linienelement  $dz$  beschrieben wird. Die eingezeichneten Winkel  $\vartheta$  und  $\varphi$  sind die Integrationsvariablen.

sowie

$$S(z, E) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy S(\vec{r}, E) \quad (2.40)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \left( S^{\text{ext}}(\vec{r}, E) + \hat{S}n(\vec{r}, E) \right) \quad (2.41)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy S^{\text{ext}}(\vec{r}, E) + \hat{S}n(z, E), \quad (2.42)$$

wobei der Quelloperator  $\hat{S}$  wie in (2.14) definiert verwendet wurde. Da das System homogen ist, ist für den Transport von einem Ort zum anderen lediglich die relative Entfernung der beiden Orte von Bedeutung, sodass die Integrationen über  $x$  und  $y$  am Quell- und am Zielort unabhängig voneinander ausführt werden können und man sich vorstellt, dass die Integration am Quellort die ausgedehnte Quelle auf einen Ort zusammenzieht, von dem aus alle Teilchen starten, wie es in Abb. 2.2 für eine beliebige Trajektorie angedeutet ist. Dort und auch im Folgenden wurden die gestrichenen Größen, die ja die Quellorte bezeichnen, durch dieselben Größen mit dem Index Q dargestellt, um die Übersichtlichkeit zu erhöhen. Um die gesuchte quasi-eindimensionale<sup>5</sup> Transportgleichung zu erhalten, integriert man nun (2.32) über  $x$  und  $y$  und führt auf der rechten Seite der Gleichung die Integration über  $x_Q$  und  $y_Q$  aus. Man erhält

$$n(z, E) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int dz_Q \frac{S(z_Q, E)}{4\pi v(E)} \cdot \frac{\exp\left(-\frac{|\vec{r} - \vec{r}_Q|}{\tau(E)v(E)}\right)}{|\vec{r} - \vec{r}_Q|^2} \quad (2.43)$$

und benutzt dann gemäß Abb. 2.2 den Zusammenhang  $|\vec{r} - \vec{r}_Q| = |z - z_Q| \cdot \cos \vartheta$ , was auf

$$n(z, E) = \int dz_Q \frac{S(z_Q, E)}{4\pi v(E)} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{\cos^2 \vartheta}{|z - z_Q|^2} \cdot \exp\left(-\frac{|z - z_Q|}{\tau(E)v(E) \cos \vartheta}\right) \quad (2.44)$$

führt. Um das Flächenintegral über  $x$  und  $y$  zu lösen, führt man die Transformation  $(x, y) \rightarrow (\vartheta, \varphi)$  ein, die über

$$x - x_Q = r \cdot \cos \varphi \sin \vartheta \quad (2.45)$$

$$y - y_Q = r \cdot \sin \varphi \sin \vartheta \quad (2.46)$$

mit der Jacobi-Determinante

$$|J| = (z - z_Q)^2 \cdot \frac{\sin \vartheta}{\cos^3 \vartheta} \quad (2.47)$$

definiert ist und  $r = |\vec{r} - \vec{r}_Q|$  gilt. Damit lautet die Gleichung für  $z > z_Q$  dann

<sup>5</sup>Quasi-eindimensional bedeutet, dass der Transportprozess zwar dreidimensional ist, die Beschreibung aber auf eine Dimension reduziert wird.

$$n(z, E) = \int dz_Q \frac{S(z_Q, E)}{4\pi v(E)} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \tan \vartheta \cdot \exp\left(-\frac{z - z_Q}{\tau(E)v(E) \cos \vartheta}\right) \quad (2.48)$$

und für  $z < z_Q$  erhält man einen analogen Ausdruck. Zusammen erhält man die Lösung

$$n(z, E) = \int dz_Q \frac{-S(z_Q, E)}{2v(E)} \cdot \text{Ei}\left(-\left|\frac{z - z_Q}{\tau(E)v(E)}\right|\right) =: \int dz_Q \varphi(z|z_Q) S(z_Q) \quad (2.49)$$

mit dem Integralexponential, das über

$$\text{Ei}(x) = \int_{-\infty}^x \frac{e^{-t}}{t} dt \quad (2.50)$$

definiert ist. Außerdem wurde die Größe  $\varphi(z|z_Q)$  eingeführt, die nicht mit dem gleich bezeichneten Winkel zu verwechseln ist und als *Flusskern* bezeichnet wird, wobei die Energieabhängigkeit der Lesbarkeit wegen unterdrückt wurde. Weshalb die Größe so bezeichnet wird und warum dieses Formelzeichen verwendet wird, wird im Abschnitt 2.2.3 ersichtlich werden.

### 2.2.3 Herleitung aus der superdiffusiven Transportgleichung

Wie im vorigen Abschnitt, wird auch hier die Teilchendichte in Abhängigkeit von lediglich der  $z$ -Koordinate betrachtet und die übrigen Dimensionen ausintegriert. Hierzu verwendet man die Definitionen (2.39) und (2.42), sowie die SDTG (2.16) in eindimensionaler und stationärer Formulierung, also:

$$\frac{n(z, E)}{\tau(E)} = \left(-\frac{\partial}{\partial z} \hat{\phi} + \text{id}\right) \left(\hat{S}n(z, E) + S^{\text{ext}}(z, E)\right). \quad (2.51)$$

Das einzige, was es noch zu bestimmen gilt, ist der Flussoperator  $\hat{\phi}$  bzw. der Fluss  $\phi(z|z_Q)$ , der im Flussoperator enthalten ist. Um diesen zu bestimmen, betrachtet man eine Ebene bei  $z_Q$  und stellen uns – mit der gleichen Argumentation wie zuvor – die Quelle als in einem Punkt lokalisiert, statt über die gesamte Ebene „verschmiert“ vor. Die Quellstärke wird wie üblich durch Integration über die gesamte Ebene berechnet. Ausgehend von dieser Punktquelle kann dann die geometrische Anordnung aus Abb. 2.2 betrachtet werden und – auf dem vorherigen Abschnitt recht ähnliche Weise – der Fluss von  $z_Q$  nach  $z$  bestimmt werden.

Zunächst betrachtet man die Flussdichte  $\vec{j}(\vec{r})$  einer Punktquelle bei  $\vec{r}_Q$  ohne Berücksichtigung von Verlusten durch Streuung. Da die Quelle isotrop sein soll, ist die Richtung des Teilchenflusses durch  $\frac{\vec{r} - \vec{r}_Q}{|\vec{r} - \vec{r}_Q|}$  gegeben und dessen Betrag folgt aus der Quellstärke  $S_0$ , sowie der Teilchenzahlerhaltung, die fordert, dass durch jede Kugelfläche um den Quellpunkt herum

mit Oberfläche  $4\pi(\vec{r} - \vec{r}_Q)^2$  die gleiche Anzahl von Teilchen fließen muss. Daher lautet die Flussdichte

$$\vec{j}(\vec{r}) = \frac{S_0}{4\pi} \frac{\vec{r} - \vec{r}_Q}{|\vec{r} - \vec{r}_Q|^3} \quad (2.52)$$

ohne Streuung. Berücksichtigt man nun Verluste durch Streuung mit Streurrate  $\frac{1}{\tau}$ , so ist die Teilchenzahlerhaltung natürlich nicht mehr gegeben, da gestreute Teilchen als verlorene Teilchen gelten (vgl. Abs. 2.1.4). Stattdessen erreichen die Teilchen den Ort  $\vec{r}$  mit Wahrscheinlichkeit  $e^{-\frac{|\vec{r}-\vec{r}_Q|}{\tau v}}$ , womit die Flussdichte multipliziert werden muss.

Von Interesse ist jedoch nicht die Flussdichte  $\vec{j}(\vec{r})$  selbst, sondern der Fluss durch eine Ebene senkrecht zur  $z$ -Achse am Ort  $z$ . Dieser lässt sich durch

$$\phi(z|z_Q) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \hat{e}_z \cdot \vec{j}(x, y, z) \quad (2.53)$$

berechnen, wobei der Einheitsvektor  $\hat{e}_z$  die Orientierung der Ebene bestimmt und stets mit positivem Vorzeichen gewählt wird, auch für den Fall, dass  $z < z_Q$  gilt. Der Fluss gibt somit an, wie viele Teilchen pro Zeiteinheit die Ebene von links nach rechts passieren. Wählt man nun die Quelle als bei  $\vec{r}_Q = (0, 0, z_Q)$  lokalisiert und definiert Abb. 2.2 folgend  $r^2 = (\vec{r} - \vec{r}_Q)^2 = \frac{(z - z_Q)^2}{\cos^2 \vartheta}$ , findet man unter Berücksichtigung von  $\langle \vec{j}(z), \hat{e}_z \rangle = \cos \vartheta$  den Fluss

$$\phi(z|z_Q) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{\cos^3 \vartheta}{(z - z_Q)^3} \cdot \exp\left(-\left|\frac{z - z_Q}{\tau v \cos \vartheta}\right|\right). \quad (2.54)$$

Dieses Integral lässt sich nun unter Zuhilfenahme der Substitution (2.45) - (2.47) lösen. Hierzu definiert man noch  $\Delta = \frac{z - z_Q}{\tau v}$  und unterscheidet, ob  $z$  links oder rechts von  $z_Q$  liegt. Zu lösen sind dann

$$\phi(z|z_Q) = \frac{S_0}{4\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \sin \vartheta \cdot \exp\left(-\frac{\Delta}{\cos \vartheta}\right) \quad (2.55)$$

für  $z > z_Q$  und

$$\phi(z|z_Q) = \frac{S_0}{4\pi} \int_{\pi}^{\frac{3\pi}{2}} d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \sin \vartheta \cdot \exp\left(-\frac{\Delta}{\cos \vartheta}\right) \quad (2.56)$$

für  $z < z_Q$ . Nach kurzer Rechnung erhält man das Ergebnis

$$\phi(z|z_Q) = \frac{S_0}{2} \left( \operatorname{sgn}(\Delta) e^{-|\Delta|} + \Delta \cdot \operatorname{Ei}(-|\Delta|) \right). \quad (2.57)$$

Dieser Ausdruck für den stationären Fluss durch eine Ebene lässt sich nicht nur auf diese Weise herleiten, sondern auch aus dem aus der Literatur [18] bekannten Ausdruck für den zeitabhängigen Fluss berechnen, was in Anhang A beschrieben ist.

Mit diesem Ergebnis ist der Flussoperator fertig bestimmt, allerdings steht in Gleichung 2.51 die Ableitung des Flussoperators angewandt auf die Quelle nach  $z$ . Da aber weder die



externe Quelle  $S^{\text{ext}}$  noch die interne Quelle  $\hat{S}n$  vom Zielort  $z$  abhängen (vom Quellort  $z_Q$  hängen sie natürlich ab), ist es möglich die Ableitung explizit auszuführen. Unter Verwendung von  $\frac{\partial}{\partial x}\text{Ei}(x) = \frac{e^x}{x}$  und  $\frac{\partial}{\partial x}\text{sgn}(x) = 2 \cdot \delta(x)$  erhält man

$$-\frac{\partial}{\partial z}\phi(z|z_Q) = -S_0 \frac{\delta(\Delta)}{\tau v} - \frac{S_0}{2} \frac{\text{Ei}(-|\Delta|)}{\tau v}. \quad (2.58)$$

Um die SDTG kompakt zusammenzufassen, kann man jetzt noch die Ableitung des Flussoperators zusammen mit dem Identitätsoperator betrachten und erhält

$$\begin{aligned} & \left( -\frac{\partial}{\partial z}\hat{\phi} + \hat{\text{id}} \right) S(z) \\ &= \int dz_Q \left( -S(z_Q) \frac{\delta(\Delta)}{\tau v} - \frac{S(z_Q)}{2} \frac{\text{Ei}(-|\Delta|)}{\tau v} \right) + S(z) \\ &= \int dz_Q \left( -S(z_Q) \frac{\delta(\Delta)}{\tau v} - \frac{S(z_Q)}{2} \frac{\text{Ei}(-|\Delta|)}{\tau v} + \frac{\delta(\Delta)}{\tau v} S(z_Q) \right) \\ &= -\int dz_Q \frac{S(z_Q)}{2} \frac{\text{Ei}(-|\Delta|)}{\tau v} \\ &=: \int dz_Q \varphi(z|z_Q) S(z_Q) = \hat{\phi} S(z). \end{aligned} \quad (2.59)$$

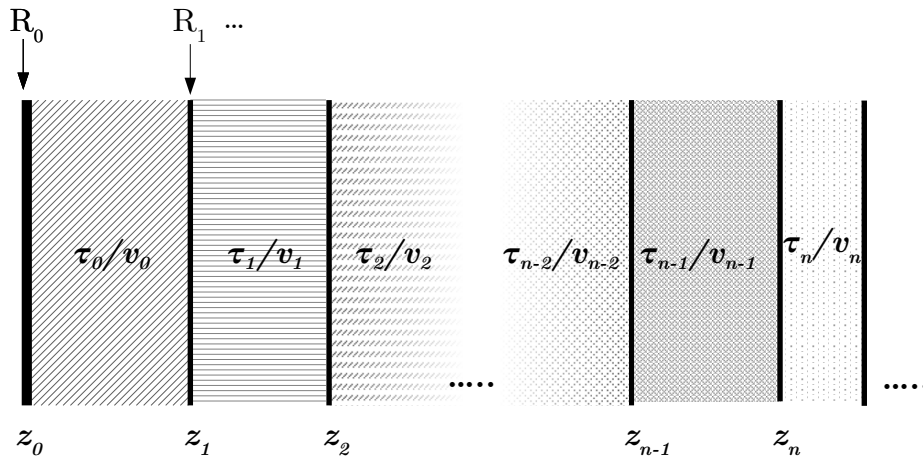
Hierbei wurde wieder der Flusskern  $\varphi$  und der dazugehörige Integraloperator  $\hat{\phi}$  eingeführt<sup>6</sup>, der hauptsächlich als Ableitung von  $\phi$  verstanden werden kann und daher dieses Formelzeichen erhält. Dass sich die  $\delta$ -Funktionen in (2.59) wegekürzen, lässt sich im Generationenbild aus Abs. 2.1.4 am besten verstehen: Der Identitätsoperator beschrieb die äußeren Quellen aus der vorherigen (niedrigeren) Generation oder der externen Quelle. Betrachtet man nun den Punkt  $z_Q$ , so beschreibt  $-\frac{\partial}{\partial z}\hat{\phi}$  den Wegfluss der Teilchen aus dem Linienelement  $dz_Q$  und  $\hat{\text{id}}$  das Hineinfließen aus anderen Linienelementen und dann hier streuen in  $dz_Q$ . Im stationären Zustand sollten sich diese beiden Prozesse genau ausgleichen, wie man hier sehen kann. Mit diesem Flusskernoperator lässt sich die SDTG dann schreiben als

$$\boxed{\frac{n(z, E)}{\tau(E)} = \hat{\phi} \left( \hat{S}n(z, E) + S^{\text{ext}}(z, E) \right)}. \quad (2.60)$$

## 2.2.4 Inhomogene Medien und Reflexionen

Von nun an werden inhomogene Medien mit reflektierenden Grenzschichten, also planare Systeme, betrachtet. Ein beispielhaftes System ist in Abb. 2.3 dargestellt. Das System kann in beide Richtungen unendlich fortgesetzt sein oder durch eine totalreflektierende Schicht abgeschlossen werden. An den Orten  $z_n$  befinden sich Grenzflächen, wo Reflexionen mit dem jeweiligen Reflexionskoeffizienten  $R_n$  stattfinden können, zwischen den Grenzflächen befinden

<sup>6</sup>Diese Bezeichnung ist widersprüchlich zu dem, was sonst in der Literatur üblich ist [12, 17, 18, 32], wo die Funktion  $\phi$  als Flusskern bezeichnet wird. Da aber  $\phi$  hauptsächlich benötigt wird, um  $\varphi$  zu bestimmen und der Begriff auch für diese Funktion passend ist, soll dieser Konvention gefolgt werden.

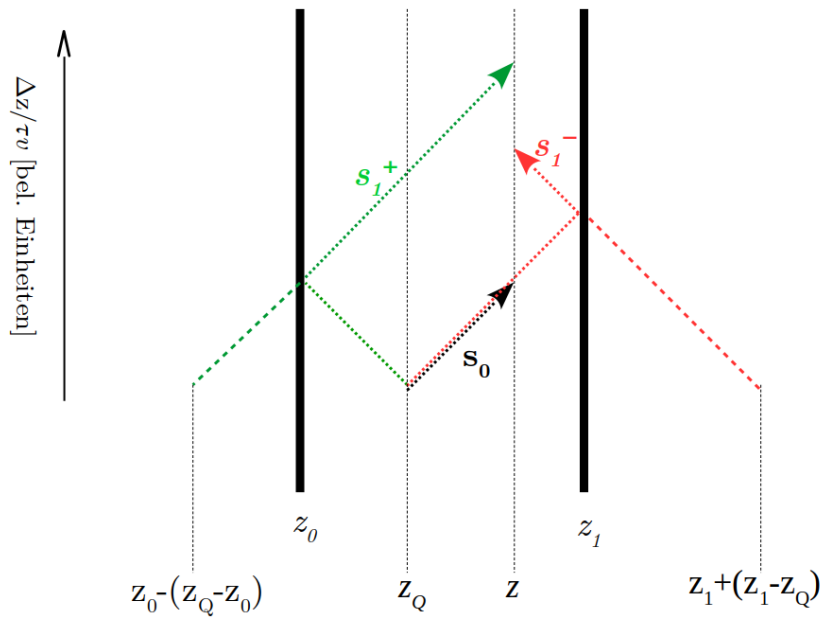


**Abbildung 2.3:** Skizze eines allgemeinen Schichtsystems, das hier untersucht werden soll. Das System könnte auch nach links fortgesetzt werden, jedoch wird meistens eine Totalreflexion an dieser Seite angenommen. Die Reflexionskoeffizienten  $R_0$ , usw. beschreiben die Wahrscheinlichkeit einer Reflexion an der Grenzschicht bei  $z_0$  usw.; es wäre in diesem Formalismus auch einfach möglich zu unterscheiden, wie hoch die Reflexionswahrscheinlichkeit links und rechts der Grenzfläche ist, darauf wird hier aber verzichtet. Die Materialeigenschaften  $\tau_n$  und  $v_n$  beschreiben jeweils das Material **rechts** der Grenzfläche  $z_n$ . Die verschiedenen Schichten können beliebig breit sein.

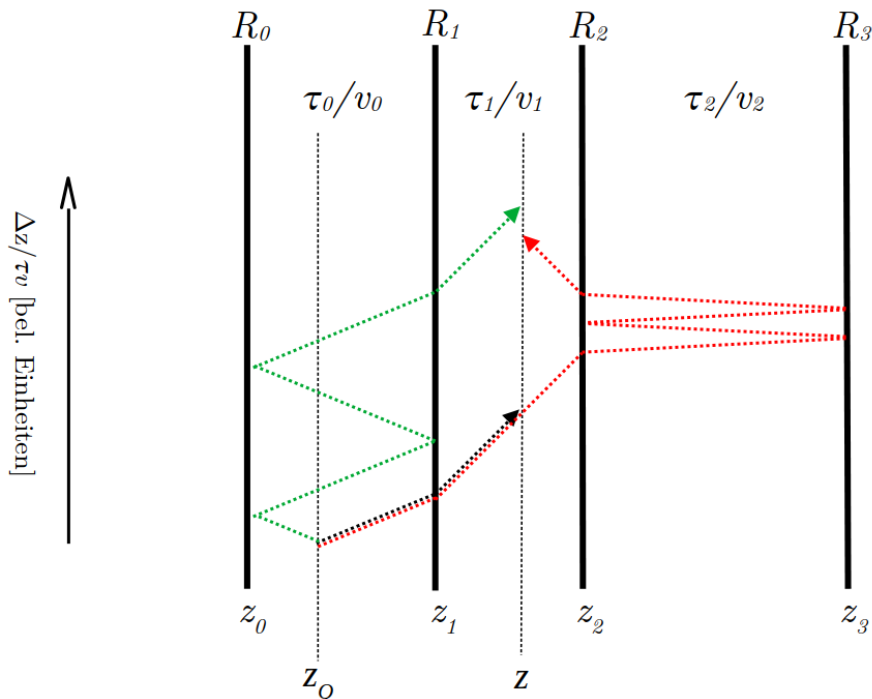
sich homogene Medien, die durch die Lebensdauer  $\tau_n$  und die Geschwindigkeit  $v_n$  bestimmt sind<sup>7</sup>. Wenn man inhomogene Medien mit reflektierenden Grenzflächen betrachtet, gilt es, im Vergleich zum homogenen Fall ohne Reflexionen, zu beachten, dass

1. durch die Reflexionen Teilchen Linienelemente häufiger durchlaufen können und daher nicht mehr der direkte Weg zwischen zwei Punkten notwendigerweise die Streuwahrscheinlichkeit bestimmt,
2. wegen der Inhomogenität die Wahrscheinlichkeit zu streuen lokal betrachtet werden muss,
3. die Reflexionen und Transmissionen an den Grenzflächen die Wahrscheinlichkeit der Teilchen eine bestimmte Trajektorie zu nehmen beeinflusse und
4. es nun mehrere mögliche Trajektorien von  $z_Q$  nach  $z$  gibt.

<sup>7</sup>und über die jeweilige Übergangswahrscheinlichkeit  $p(E|E')$ , was jedoch für den Transport keine Bedeutung hat, lediglich für den Quellterm



(a) Reflexionen lassen sich behandeln, indem man sich das System an der reflektierenden Schicht gespiegelt fortgesetzt vorstellt und den Quellpunkt (oder alle zuvor durchlaufenen Orte) sich ebenfalls an der Schicht gespiegelt vorstellt, sodass man wieder eine gerade Trajektorie hat.



(b) Durchquert eine Trajektorie eine andere Kombination von Materialparametern, verändert sich auch die mittlere freie Weglänge und somit die Wahrscheinlichkeit gestreut zu werden.

**Abbildung 2.4:** Dargestellt sind zwei Skizzen zur Verdeutlichung der Beschreibung von Reflexionen und Inhomogenitäten. Die horizontale Achse beschreibt die geometrische Strecke in  $z$ -Richtung, die die Teilchen zurückgelegt haben, während die vertikale Achse die zurückgelegte Strecke in Einheiten der jeweiligen mittleren freien Weglänge beschreibt, was ein Maß für die Wahrscheinlichkeit gestreut zu werden ist. Für weitere Erläuterungen siehe den Haupttext.

**Zu 1.** Durch die Reflexionen bewegen sich die Teilchen nicht mehr unbedingt auf dem direkten Weg vom Quellort  $z_Q$  zum Zielort  $z$ , auch über die Bewegung in  $x$ - oder  $y$ -Richtung hinaus. Man betrachte hierzu Abb. 2.4a: Die schwarze Trajektorie beschreibt den direkten Weg und wird, da es zu keinen Reflexionen kommt, mit  $s_0$  bezeichnet. Die rote und die grüne Trajektorie führen ebenfalls von  $z_Q$  nach  $z$ , jedoch beinhalten beide eine Reflexion, daher der Index 1. Da die grüne Trajektorie bei  $z$  ein Rechtsläufer ist, erhält sie das Superskript  $+$  und die rote das Superskript  $-$ . Man beachte, dass ein Teilchen, das als Linksläufer startet, zum Rechtsläufer werden kann und andersherum. In der Skizze erkennt man, dass man sich die Trajektorie so vorstellen kann, als wäre das Teilchen außerhalb der Grenzflächen entstanden und dann in das System ohne Reflexion oder anderweitige Störung eingetreten. Das Teilchen hat dann die gleiche Strecke wie auf der tatsächlichen, physikalischen Trajektorie zurückgelegt und am Ort  $z$  die gleiche Richtung, allerdings hat es sich auf einer geraden Linie fortbewegt und kann somit offensichtlich in dem bisherigen Formalismus beschrieben werden.

Dies bedeutet, dass für eine Trajektorie mit beliebig vielen Reflexionen zunächst bestimmt werden muss, welche Strecke in  $z$ -Richtung das Teilchen zurückgelegt hat und dies dann in die Größe, die zuvor bereits mit  $\Delta$  bezeichnet wurde, anstelle von  $z - z_Q$  eingesetzt werden muss. Diese Größe beschreibt also nun nicht mehr nur den geometrischen Abstand zweier Punkte, sondern die gesamte Bewegung der Teilchen und wird im Folgenden als  $z$ -Propagator bezeichnet. Die Größe  $\frac{\Delta}{\cos \vartheta}$ , die die gesamte, dreidimensionale Strecke beschreibt, soll schlicht *Propagator* heißen. Die Bewegung in  $x$ - oder  $y$ -Richtung wird durch den Richtungskosinus  $\cos \vartheta$  beschrieben und muss nicht gesondert für Reflexionen behandelt werden, da bei Reflexionen der Winkel sich gemäß  $\vartheta \mapsto \pi - \vartheta$  verändert, der Richtungskosinus unter dieser Abbildung jedoch konstant bleibt. Die  $\vartheta$ -Integration kann also unverändert, wie in Abschnitt 2.2.3, durchgeführt werden.

**Zu 2.** Auch die veränderten Streuwahrscheinlichkeiten durch die Inhomogenität des Mediums lassen sich in den  $z$ -Propagator inkludieren, da ebenfalls die Richtung der Teilchen sich bei einem Wechsel der Materialeigenschaften nicht ändert. Für ein allgemeines, in  $z$ -Richtung inhomogenes Medium müsste der  $z$ -Propagator ohne Reflexionen<sup>8</sup> als

$$\Delta = \int_{z_Q}^z \frac{dz'}{\tau(z')v(z')} \quad (2.61)$$

berechnet werden. In einem Schichtsystem, wo die Materialeigenschaften stückweise konstant sind, lässt sich dieses Integral lösen zu

$$\Delta = \frac{z_Q - z_1}{\tau_0 v_0} + \dots + \frac{z - z_n}{\tau_n v_n}, \quad (2.62)$$

---

<sup>8</sup>vgl. auch Anhang A

falls der Quellort zwischen  $z_0$  und  $z_1$  liegt und  $z_n < z < z_{n+1}$  gilt. Werden nun Reflexionen mit einbezogen, so wird aus dem Integral in (2.61) ein (eindimensionales) Pfadintegral; das bedeutet, dass wenn ein Teilchen sich beispielsweise von  $z_1$  nach  $z_2$  bewegt, dort reflektiert wird und wieder bei  $z_1$  ankommt, das Integral als

$$\int_{z_1}^{z_2} dz' + \int_{z_2}^{z_1} (-dz') = 2 \cdot \int_{z_1}^{z_2} dz' \neq \int_{z_1}^{z_2} dz' + \int_{z_2}^{z_1} dz' = 0 \quad (2.63)$$

geschrieben werden muss. Das Linienelement  $dl$  muss für den Hinweg also als  $+dz'$  und für den Rückweg als  $-dz'$  geschrieben werden, sodass sich die Wege aufaddieren und nicht gegenseitig aufheben. In einem Schichtsystem lässt sich dieses Integral wieder lösen: Betrachtet man ein Teilchen, das nach seiner Erzeugung bei  $z_Q$  als erstes die Grenzfläche  $z_i$  erreicht (unabhängig davon, ob dort eine Reflexion stattfindet) und nach endlich vielen Reflexionen und Transmissionen im Bereich zwischen  $z_0$  und  $z_{n+1}$  zuletzt die Grenzfläche bei  $z_f$  erreicht, bevor es am Punkt  $z$  gestreut wird, so lässt sich der  $z$ -Propagator schreiben als

$$\Delta = \left| \frac{z_Q - z_i}{\tau(z_Q)v(z_Q)} \right| + \nu_0 \frac{z_1 - z_0}{\tau_0 v_0} + \dots + \nu_n \frac{z_{n+1} - z_n}{\tau_n v_n} + \left| \frac{z - z_f}{\tau(z)v(z)} \right|. \quad (2.64)$$

Die Betragsstriche tragen dem Umstand Rechnung, dass man nicht weiß, ob  $z_Q > z_i$  bzw.  $z > z_f$  gilt, die Vorfaktoren  $\nu_j$  geben an, wie häufig die Schichten durchlaufen wurden. Zum besseren Verständnis des Vorgehens, kann man die Beispiele aus Abb. 2.4b betrachten: Die schwarze Trajektorie beschreibt den direkten Weg von  $z_Q$  nach  $z$ . Diese hätte den  $z$ -Propagator<sup>9</sup>

$$\Delta_{\text{schwarz}} = \frac{z_1 - z_Q}{\tau_0 v_0} + \frac{z - z_1}{\tau_1 v_1}.$$

Die grüne Trajektorie hingegen hätte den  $z$ -Propagator

$$\Delta_{\text{grün}} = \frac{z_Q - z_0 + 3(z_1 - z_0)}{\tau_0 v_0} \frac{z - z_1}{\tau_1 v_1}$$

und die rote Trajektorie

$$\Delta_{\text{rot}} = \frac{z_1 - z_Q}{\tau_0 v_0} + \frac{(z_2 - z_1) + (z_2 - z)}{\tau_1 v_1} + \frac{4(z_3 - z_2)}{\tau_2 v_2}.$$

Die vertikale Achse in der Abbildung beschreibt die zurückgelegte Strecke in Einheiten einer beliebigen ausgewählten mittleren freien Wegstrecke  $\tau v$ . Je höher die Trajektorie reicht, desto höher ist auch die Wahrscheinlichkeit gestreut zu werden<sup>10</sup>. Man erkennt, dass die rote Tra-

<sup>9</sup>Da in einem beliebigen System eine sehr große Zahl an Parametern benötigt werden würde, um die Trajektorie eindeutig zu definieren, verzichtet man hier auf das Einführen praktisch verwendbarer Indizes. In dem System, das später genauer untersucht werden wird, wird dann eine sinnvolle Indizierung – analog zu Abb. 2.4a – eingeführt.

<sup>10</sup>Ein ähnliches Prinzip kennt man aus der Optik, wo die optische Weglänge für einen beliebigen Pfad die Strecke beschreibt, die Licht im Vakuum in der selben Zeit hätte zurücklegen können. Auf diesen Fall bezogen,

jektorie zwar länger als die grüne ist, sie jedoch einen Pfad beschreibt, auf dem das Teilchen eine geringere Wahrscheinlichkeit hat zu streuen.

**Zu 3.** Trifft ein Teilchen auf eine Grenzfläche bei  $z_j$ , so wird es – in diesem Formalismus unabhängig vom Winkel  $\vartheta$  – mit einer Wahrscheinlichkeit von  $R_j$  reflektiert und mit  $T_j = 1 - R_j$  transmittiert. Da der Flusskern  $\varphi(z|z_Q)$  die Wahrscheinlichkeit beschreibt, dass ein Teilchen, das bei  $z_Q$  startet,  $z$  erreicht, muss diese Funktion mit den der Trajektorie entsprechenden Vorfaktoren multipliziert werden. Die Argumente  $(z|z_Q)$  reichen jetzt natürlich nicht mehr aus, um die Trajektorie zu beschreiben, weshalb von nun an der z-Propagator das Argument des Flusskerns sein soll:  $\varphi(\Delta)$ . Für die beispielhaften Trajektorien aus Abb. 2.4b bedeutet dies, dass der Flusskern für die schwarze Trajektorie mit  $1 - R_1$ , für die grüne mit  $R_0^2 R_1^2 (1 - R_1)$  und für die rote mit  $(1 - R_1)(1 - R_2)^2 R_2^2 R_3^2$  multipliziert werden muss.

**Zu 4.** Durch die Reflexionen gibt es unendlich viele mögliche Trajektorien von  $z_Q$  nach  $z$ , die einen Beitrag zum Teilchentransport leisten. Die gesamte transportierte Teilchendichte ist dann die Summe über die einzelnen möglichen Trajektorien. Der Flusskernoperator lässt sich dann symbolisch schreiben als

$$\hat{\varphi}S(z) = \int dz_Q \sum_{\Delta} R_0^{\nu_0} (1 - R_0)^{\mu_0} \cdots R_j^{\nu_j} (1 - R_j)^{\mu_j} \cdots \varphi(\Delta)S(z_Q), \quad (2.65)$$

wobei die  $\nu_j$  und  $\mu_j$  die Anzahl der Reflexionen respektive Transmissionen an der Grenzfläche bei  $z_j$  angeben und die Summe über  $\Delta$  über alle erlaubten Trajektorien von  $z_Q$  nach  $z$  läuft. In der Praxis benötigt man jedoch nur endlich viele dieser Trajektorien; je länger die Trajektorien werden und je mehr Reflexionen und Transmissionen sie enthalten, desto geringer ist ihr Beitrag zum Flusskernoperator. Deshalb kann man beispielsweise eine maximale Anzahl von Reflexionen oder Transmissionen oder von beidem einführen, bis zu der Trajektorien noch berücksichtigt werden.

**Bemerkung zu den Rändern.** Während man für die Lösung von Differentialgleichungen Randbedingungen benötigt, handelt es sich bei der SDTG um eine Integralgleichung, die keine Randbedingungen benötigt. Stattdessen wird über den gesamten Raum integriert. In der Praxis modelliert man natürlich nicht den gesamten Raum, sondern beschränkt sich auf ein Teilgebiet, weshalb auch bislang die Integralgrenzen beim  $z_Q$ -Integral weggelassen wurden. Ist das System von außen her abgetrennt, also wenn keine Teilchen in das System hinein gelangen können<sup>11</sup>, so hat der Raum außerhalb des Systems keinen Einfluss auf das System und die Beschränkung des Integrationsbereichs verändert das Ergebnis im System nicht. Ist das System jedoch offen,

---

hätte man eine äquivalente Größe, wenn man die jeweiligen mfp's  $\tau_j v_j$  auf einen ausgewählten mfp normieren und mit diesen Größen den z-Propagator berechnen würde. Dieser würde dann beschreiben, wie weit ein Teilchen in einem Material mit dem ausgewählten mfp hätte fliegen können, bis es mit gleicher Wahrscheinlichkeit gestreut worden wäre. Aus diesem Grund wurde früher der Propagator auch als optische Weglänge bezeichnet [21].

<sup>11</sup>Ob Teilchen herauskönnen, ist nicht relevant, da der Fluss aus dem System effektiv mitberücksichtigt wird, indem man Trajektorien, die aus dem System heraus führen, nicht mitberücksichtigt.

das heißt es fließen Teilchen hinein, dann muss der Fluss, den diese Teilchen erzeugen, in den externen Quellterm integriert werden. Es ist nicht möglich von-Neumann- oder Dirichlet-Randbedingungen einzufordern; die Teilchendichte bzw. deren Ableitung werden immer durch die Gesamtheit aller Quellen bestimmt.

## 2.3 Transport in einem externen Feld

In diesem Abschnitt soll der superdiffusive Transport durch ein planares Schichtsystem mit einem externen (Kraft-)Feld untersucht werden. Dieses Feld kann im allgemeinen beliebiger Natur sein, praktisch jedoch und beim Elektronentransport im besonderen wird die Kraft durch ein elektrisches Feld hervorgerufen, weshalb angenommen werden soll, dass die Kräfte durch ein gegebenes Feld  $\vec{E}(\vec{r})$  bestimmt sind. Damit der bisherige Formalismus Anwendung finden kann, nimmt man ein Feld in  $z$ -Richtung an, das, wie das Material selbst, sich nur in  $z$ -Richtung verändert, also:  $\vec{E}(\vec{r}) = E_z(z) \cdot \hat{e}_z$ . Zunächst werden keine weiteren Bedingungen an das Feld gestellt, später jedoch wird der Spezialfall eines konstanten Feldes betrachtet und genauer analysiert werden.

### 2.3.1 Herleitung der Transportgleichung

Durch das externe Feld werden die Teilchen parallel zur  $z$ -Achse beschleunigt, während sie senkrecht hierzu ihre Geschwindigkeit beibehalten. Das heißt die Geschwindigkeit parallel zur  $z$ -Achse hängt nicht mehr nur von den Materialeigenschaften, sondern auch vom Feld (und somit von der  $z$ -Koordinate) ab. Damit ändert sich auch die Flugbahn: Die Trajektorie wird gekrümmt. Anstatt zu jedem Zeitpunkt den Winkel  $\vartheta$  zur  $z$ -Achse zu haben, ändert sich der Winkel in Abhängigkeit von  $E_z(z)$ :  $\vartheta \rightarrow \vartheta'(z)$  mit dem Anfangswinkel  $\vartheta'(z_Q) = \vartheta$ . Der Winkel  $\vartheta'$  ist durch das Verhältnis von Geschwindigkeit senkrecht ( $v_\perp$ ) und Geschwindigkeit parallel ( $v_\parallel$ ) zur  $z$ -Achse gemäß

$$\tan \vartheta'(z) = \frac{v_\perp(z, E)}{v_\parallel(z, E)} \quad (2.66)$$

bestimmt. Die beiden Geschwindigkeitskomponenten (bzw. deren Betrag) wiederum lassen sich aus der Anfangsgeschwindigkeit  $v(E)$  und dem Potential<sup>12</sup>  $U$ , welches das externe Feld beschreibt, bestimmen. Zusammen mit der klassischen Energie-Geschwindigkeit-Relation  $E_{\text{kin}} = \frac{m}{2}v^2$  findet man

$$v_\perp(z, E) = v(E) \cdot \sin \vartheta \quad (2.67)$$

$$|v_\parallel(z, E)| = \sqrt{v(E)^2 \cdot \cos^2 \vartheta - \frac{2\Delta U(z|z_Q)}{m}}, \quad (2.68)$$

---

<sup>12</sup>Mit dem Potential ist hier das Potential im Sinne der klassischen Mechanik gemeint, nicht das elektrische Potential. Es gilt also für Elektronen  $-\frac{\partial}{\partial z}U = -e \cdot E_z$ .

wobei  $m$  die Masse des Teilchens ist und  $\Delta U(z|z_Q) = U(z) - U(z_Q)$  gilt. Der Betrag der Geschwindigkeit  $v(E)$  ist unter diesen Voraussetzungen auch nicht mehr beliebig energieabhängig, sondern es gilt  $v(E) = \sqrt{\frac{2}{m}E}$ . Dass auf diese Weise nur der Betrag der Parallelgeschwindigkeit bestimmt ist, wird – wie sich im Folgenden zeigen wird – nicht weiter ins Gewicht fallen, da es möglich ist, den Transport zu beschreiben ohne  $v'(z)$  explizit zu nutzen und da im Flusskern  $v_{\parallel}$  lediglich innerhalb von Betragsstrichen vorkommen wird.

Das Potential weist darüber hinaus auf ein weiteres Problem hin, dass es zu beachten gilt: Durch das Potential ist es Teilchen nicht mehr möglich von jedem beliebigen Punkt aus jeden anderen Punkt zu erreichen, wenn die Energie des Teilchens nicht ausreicht das Potential zu überwinden. Entscheidend ist hierbei nicht die gesamte kinetische Energie, sondern nur der Anteil in paralleler Richtung, sodass der Transport an einigen Punkten nicht mehr für alle Winkelbereiche möglich ist. Deshalb wird in den beiden folgenden Unterabschnitten die Transportgleichung und der Fluss für erlaubte Trajektorien, also solche, die physikalisch möglich sind, hergeleitet. Dabei wird angenommen, dass der untersuchte, aber nicht näher spezifizierte Winkelbereich erlaubte Trajektorien liefert. Im Abschnitt 2.3.2 wird dann genauer darauf eingegangen, wie erlaubte Trajektorien bestimmt werden und wie sich daraus die erlaubten Winkelbereiche bestimmen lassen.

### Herleitung aus Grundprinzipien

Um die Transportgleichung mit externem Feld herzuleiten, ist es notwendig früher als zuvor die Symmetrie des Systems auszunutzen. Von Interesse ist nicht der Transport von Volumenelement zu Volumenelement, sondern von einer Ebene zu einer anderen, die jeweils durch ein Linienelement beschrieben werden. Hiervon abgesehen kann auf analoge Weise zum Vorgehen in Abschnitt 2.2.1 die Transportgleichung hergeleitet werden.

Es sei eine Quellstärke  $S(z, E)$  gemäß (2.42) gegeben. Die Teilchenzahl  $n(z, E) dz dE$  lässt sich wie zuvor aus vier Faktoren berechnen:

- (a) Der Quellstärke  $S(z_Q, E - \Delta U(z|z_Q)) dE$  am Ort  $z_Q$  pro Zeiteinheit. Dies ist die Quellstärke in dem Energieintervall, das sicherstellt, dass die Teilchen am Zielort eine Energie im gesuchten Energieintervall haben.
- (b) Der Wahrscheinlichkeit eines erzeugten Teilchens die Ebene bei  $z$  zu erreichen, bevor es gestreut wird. Diese lässt sich berechnen, in dem man den bekannten Propagator durch das Linienintegral (vgl. Gl. (2.61) )

$$\Delta = \int_{z_Q}^z \frac{dz'}{\tau(z', E)v_{\parallel}(z', E)} \quad (2.69)$$

ersetzt, wobei  $E$  sich auf die Energie der Teilchen am Quellort  $z_Q$  bezieht. Die Wahrscheinlichkeit, die Ebene zu erreichen ist dann wie gewohnt durch  $e^{-|\Delta|}$  gegeben.



(c) Der Wahrscheinlichkeit in den Raumwinkelbereich  $d\Omega$  emittiert zu werden:

$$p_{\text{Emis}}(\vartheta, \varphi) d\Omega = \frac{d\Omega}{4\pi} \quad (2.70)$$

(d) Der Zeit, in der das Teilchen im Linienelement  $dz$  zur Teilchenzahl beitragen kann. Diese lässt sich mittels der Parallelgeschwindigkeit als  $t_{\text{in}} = \frac{dz}{v_{\parallel}(z, E)}$  bestimmen.

Die Teilchenzahl bei  $z$  lässt sich dann als Integral über alle (erlaubten) Raumwinkel und alle Quellorte über das Produkt der vier Faktoren berechnen. Nutzt man die Symmetrie aus und führt die  $\varphi$ -Integration explizit aus, erhält man für die Teilchendichte den Ausdruck

$$n(z, E) = \int dz_{\text{Q}} \int d\vartheta \sin \vartheta \frac{S(z_{\text{Q}}, E - \Delta U(z|z_{\text{Q}}))}{2v_{\parallel}(z, E - \Delta U(z|z_{\text{Q}}))} \exp(-|\Delta|). \quad (2.71)$$

### Herleitung mittels des Flusses

Ist der Teilchenfluss  $\phi$  bekannt, kann der Transport mit der SDTG (2.51) beschrieben werden. Um den Fluss durch eine Ebene in einem externen Feld zu bestimmen, ist es nicht mehr so einfach möglich die Flussdichte  $\vec{j}(\vec{r})$  aufzustellen und daraus  $\phi$  zu berechnen, da die gekrümmten Trajektorien es stark erschweren, die Flussdichte zu berechnen. Stattdessen führt ein etwas anderer Ansatz unter Ausnutzung der Tatsache, dass es nicht von Interesse ist, wo die Teilchen die Ebene erreichen, zum Ziel: Der Fluss einer Punktquelle lässt sich auffassen als die Anzahl der per Zeiteinheit erzeugten Teilchen, die die Ebene erreichen, multipliziert mit einem Vorzeichen, dass die Projektion der Richtung der Teilchen auf die  $z$ -Achse angibt. Geht man davon aus, dass man das Vorzeichen aus der relativen Lage von  $z$  und  $z_{\text{Q}}$  und der genauen Kenntnis der Reflexionen bestimmen kann, genügt es die Quellstärke und die Wahrscheinlichkeit, nicht gestreut zu werden, zu kennen. Der Fluss ist dann das Integral über alle Raumwinkel, die zu erlaubten Trajektorien führen, von der Quellstärke und der Wahrscheinlichkeit die Ebene zu erreichen. Ignoriert man zunächst die Energieabhängigkeiten sowie Reflexionen und betrachtet eine isotrope Punktquelle bei  $z_{\text{Q}}$  mit Quellstärke  $S_0$ , lautet der Fluss

$$\phi(z|z_{\text{Q}}) = \text{sgn}(z - z_{\text{Q}}) \iint d\Omega \frac{S_0}{4\pi} \exp\left(-\left|\int_{z_{\text{Q}}}^z \frac{dz'}{\tau(z')v_{\parallel}(z')}\right|\right), \quad (2.72)$$

wobei die Exponentialfunktion, wie im vorherigen Abschnitt, die Wahrscheinlichkeit nicht zu streuen angibt und die Signum-Funktion das Vorzeichen ohne Reflexionen bestimmt. Betrachtet man die Energieabhängigkeiten nun, muss man beachten, dass die Teilchen, wenn sie sich im Potential bewegen, Energie gewinnen oder verlieren können. Will man den Fluss von Teilchen

mit der Energie  $E$  durch die Ebene bei  $z$  bestimmen, so muss man Teilchen betrachten, die am Ort  $z_Q$  die Energie  $E - \Delta U(z|z_Q)$  hatten. Dem folgend ist dann der Fluss der Punktquelle

$$\phi(z|z_Q; E) = \text{sgn}(z - z_Q) \iint d\Omega \frac{S_0(E - \Delta U(z|z_Q))}{4\pi} \cdot \exp \left( \left| \int_{z_Q}^z \frac{dz'}{\tau(z', E - \Delta U(z|z_Q)) v_{\parallel}(z', E - \Delta U(z|z_Q))} \right| \right) \quad (2.73)$$

und der Propagator im Exponenten soll im Folgenden nicht mehr ausgeschrieben werden, sondern mit  $\Delta$  bezeichnet werden. Führt man einen Teil der Winkelintegration unter Ausnutzung der Symmetrie aus, erhält man

$$\phi(z|z_Q; E) = \int d\vartheta \sin \vartheta \frac{S_0(E - \Delta U(z|z_Q))}{2} \cdot e^{-|\Delta|} \quad (2.74)$$

und kann damit den Flusskern  $\varphi(z|z_Q; E)$  berechnen. Die Ableitung des Flusses nach  $z$  besteht aus zwei Summanden, einem stetigen Anteil und einem, der eine  $\delta$ -Funktion enthält und sich, wie in (2.59), mit dem Identitätsoperator aus der SDTG wegekürzt und deshalb hier nicht angegeben werden soll. Der zu verwendende Flusskern lautet

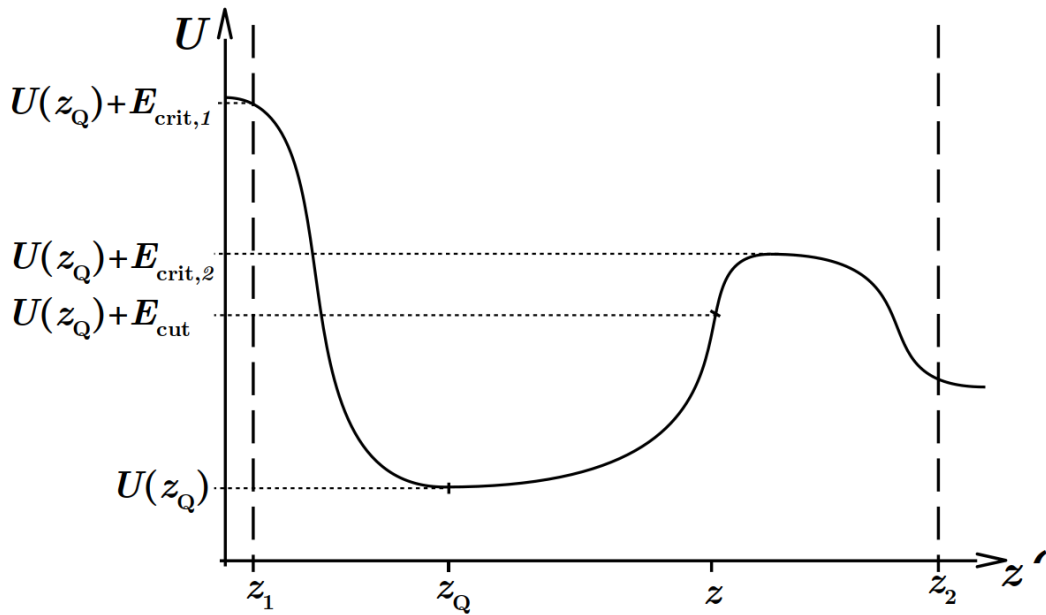
$$\varphi(z|z_Q; E) = \int d\vartheta \sin \vartheta \frac{S_0(E - \Delta U(z|z_Q))}{2\tau(z, E) v_{\parallel}(z, E)} \cdot e^{-|\Delta|} \quad (2.75)$$

und es sei darauf hingewiesen, dass sowohl  $\Delta$  als auch  $v_{\parallel}$  vom Integrationswinkel  $\vartheta$  abhängen. Mit diesem Flusskern kann dann wie in (2.59) der Flusskernoperator gebildet werden und damit die SDTG mit externem Feld aufgestellt werden, die formal genauso wie (2.60) aussieht.

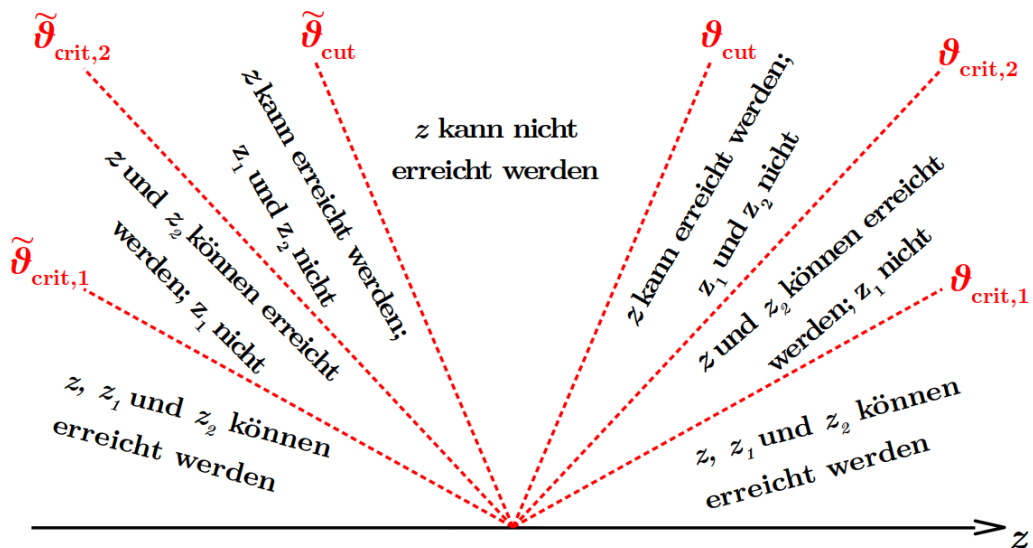
### 2.3.2 Erlaubte Trajektorien und kritische Winkel

Ein nicht konstantes Potential beeinflusst die Trajektorien, die den Teilchentransport verursachen, auf zweierlei Art. Zum einen tragen für bestimmte  $z$  und  $z_Q$  nicht mehr alle Winkel zum Transport bei, die dies ohne Feld getan hätten, da für zu steile Winkel  $\vartheta$  die kinetische Energie parallel zur  $z$ -Achse ( $E_{\parallel}$ ) nicht mehr ausreicht, um das Potential zu überwinden. Zum anderen gibt es Trajektorien, die ohne Feld nicht aufgetreten wären, da Teilchen, deren parallele Energie  $E_{\parallel}$  nicht ausreicht, um das Potential zu überwinden, an dem Ort an dem ihre parallele Energie null wird, umkehren und in entgegengesetzter Richtung weiter propagieren. Dieser Effekt wirkt wie eine Reflexion am Potential und kann auch so beschrieben werden.

Entscheiden dafür, ob eine Trajektorie zu einem gegebenen Anfangswinkel  $\vartheta$  ist also die parallele Energie, die als  $E_{\parallel} = \frac{m}{2} v_{\parallel}^2$  definiert ist. Eine Trajektorie ist physikalisch möglich, wenn an jedem Punkt  $z'$ , den die Trajektorie durchläuft, die parallele Energie größer als Null ist. Alle Winkel, für die dies bei der betrachteten Trajektorie gilt, tragen, dann zum  $\vartheta$ -Integral in (2.71) bei, dies können je nach Wahl der Orte und der Gesamtenergie auch gar keine Winkel



**Abbildung 2.5:** Beispielhafter Potentialverlauf in einem System mit zwei Grenzflächen bei  $z_1$  und  $z_2$ , eingezeichnet sind die Energien, die benötigt werden, um die Punkte  $z_1$ ,  $z_2$  und  $z$  vom Punkt  $z_Q$  aus zu erreichen.



**Abbildung 2.6:** Skizze der kritischen Winkel, die den Energieniveaus in Abb. 2.5 entsprechen.

sein. In der Praxis müssen also für jede mögliche Trajektorie und jede möglich Kombination von  $z$  und  $z_Q$  die Winkel bestimmt werden, für die  $E_{\parallel} \geq 0$  an allen Orten  $z'$  der Trajektorie gilt, aber  $E_{\parallel} = 0$  an einem Punkt, um die Integrationsgrenzen für das Integral zu finden.

Ist es für ein Teilchen möglich den Zielort  $z$  von  $z_Q$  aus zu erreichen, da  $E_{\parallel}(z_Q) \geq \Delta U(z|z_Q)$  gilt, während einige Trajektorien nicht erlaubt sind, da bestimmte Grenzflächen nicht erreicht werden können, gibt es stattdessen neue Trajektorien durch Reflexionen am Potential. Hierbei erfolgt die Reflexion mit Reflexionskoeffizient  $R = 1$  am Umkehrpunkt  $z_U(z_Q, \vartheta, E)$ , der durch  $E_{\parallel}(z_U) = 0$  bestimmt ist.

Das Vorgehen soll qualitativ an dem Potentialverlauf in Abb. 2.5 beispielhaft beschrieben werden. Hierfür werden ein fester Quellort  $z_Q$  und ein fester Zielort  $z$  betrachtet. Teilchen, deren parallele Energie am Quellort kleiner als die eingezeichnete Energie  $E_{\text{cut}}$  ist, ist es nicht möglich den Punkt  $z$  überhaupt zu erreichen. Ist  $E_{\parallel}(z_Q) < E_{\text{crit},2}$ , gelingt es den Teilchen nicht mehr den rechtsseitigen Potentialberg zu überwinden und die Grenzfläche bei  $z_2$  zu erreichen; statt der Reflexion bei  $z_2$ , erfolgt eine Reflexion bei einem  $z_U$  zwischen  $z$  und dem Maximum des Potentialberges. In der anderen Richtung gilt analoges: Gilt  $E_{\parallel}(z_Q) < E_{\text{crit},1}$  kann die linke Grenzfläche bei  $z_1$  nicht erreicht werden, stattdessen kann es zu einer Reflexion am Potential kommen.

Diese Grenz- bzw. kritischen Energien entsprechen kritischen Winkeln, die die Integrationsgrenzen bei der  $\vartheta$ -Integration darstellen. Der Zusammenhang ist darüber festgelegt, dass die Parallelenergie von der Parallelgeschwindigkeit abhängt, die wiederum vom Startwinkel abhängt. Die Parallelgeschwindigkeit wird durch  $\cos \vartheta$  bestimmt, was dazu führt, dass zu jeder kritischen Energie zwei kritische Winkel gehören. Einer, der dem Hauptwert des Arcuskosinus entspricht und für die Teilchen, die nach rechts starten relevant ist und einer der zwischen  $\frac{\pi}{2}$  und  $\pi$  liegt und die Linksstarter beeinflusst. Ersterer wird ohne Zusatz notiert, während Letzterer durch eine Tilde („ $\sim$ “) gekennzeichnet wird. Was dies für die Integration im Flusskern bedeutet, ist in Abb. 2.6 angedeutet. Das Integral mit Propagatoren, die sowohl  $z_1$  als auch  $z_2$  enthalten, wird von 0 bis  $\vartheta_{\text{crit},1}$  bzw.  $\tilde{\vartheta}_{\text{crit},1}$  integriert, je nachdem, ob das Teilchen nach links oder rechts startet, während für Propagatoren, die Rechtsstarter beschreiben, die dann bei  $z_2$  und links von  $z_Q$  am Potential reflektiert werden, von  $\vartheta_{\text{crit},1}$  bis  $\vartheta_{\text{crit},2}$  integriert werden müssen.

Die erlaubten Trajektorien und dazugehörigen Winkelbereiche zu bestimmen, kann in der Praxis für komplizierte Potentialverläufe und viele Grenzflächen sehr aufwendig sein. Im Folgenden werden allerdings nur homogene Systeme (zum Testen der Numerik) und ein Metall-Halbleiter-Schichtsystem betrachtet, wie es in Abb. 2.7 qualitativ skizziert ist. Für dieses System, in dem das Potential entweder konstant ist oder linear abfällt, können die kritischen Winkel und die Umkehrpunkte unkompliziert berechnet werden.

Zunächst einmal sei das Potential für Elektronen durch

$$U(z) = \begin{cases} U_0 & z_0 \leq z \leq z_1 \\ U_0 + \alpha(z - z_1) & z_1 < z \leq z_2 \end{cases} \quad (2.76)$$

gegeben, mit  $\alpha = \frac{-e \cdot U^{\text{ext}}}{z_2 - z_1} < 0$  und der Elementarladung  $e$ . Man erkennt, dass die kritischen Energien bzw. Winkel von  $z_0$  und  $z_2$  zusammenfallen aufgrund des konstanten Potentials im Metall und für  $z_2$  kein kritischer Winkel benötigt wird, da dort keine Reflexionen stattfinden und Elektronen von jedem Ort aus und für jeden Anfangswinkel die Grenzfläche erreichen können. Daher wird der Index, der die betrachtete Grenzfläche bei den kritischen Winkeln angibt, im Folgenden unterdrückt. Außerdem bemerke man, dass für  $z > z_Q$ , sowie für  $z_Q$  im Metall der Punkt  $z$  stets erreicht werden kann;  $\vartheta_{\text{cut}}$  ist also für diesen Punkt  $\frac{\pi}{2}$ . Für  $z_Q$  im Metall und  $z < z_Q$  sind dann die kritischen Winkel durch

$$\vartheta_{\text{crit}}(z_Q, E) = \arccos \left( \sqrt{\frac{2\alpha(z_1 - z_Q)}{v(E)^2 m}} \right) \quad (2.77)$$

$$\vartheta_{\text{cut}}(z, z_Q, E) = \arccos \left( \sqrt{\frac{2\alpha(z - z_Q)}{v(E)^2 m}} \right) \quad (2.78)$$

$$\tilde{\vartheta}_{\text{crit}}(z_Q, E) = \pi - \vartheta_{\text{crit}}(z_Q, E) \quad (2.79)$$

$$\tilde{\vartheta}_{\text{cut}}(z, z_Q, E) = \pi - \vartheta_{\text{cut}}(z, z_Q, E) \quad (2.80)$$

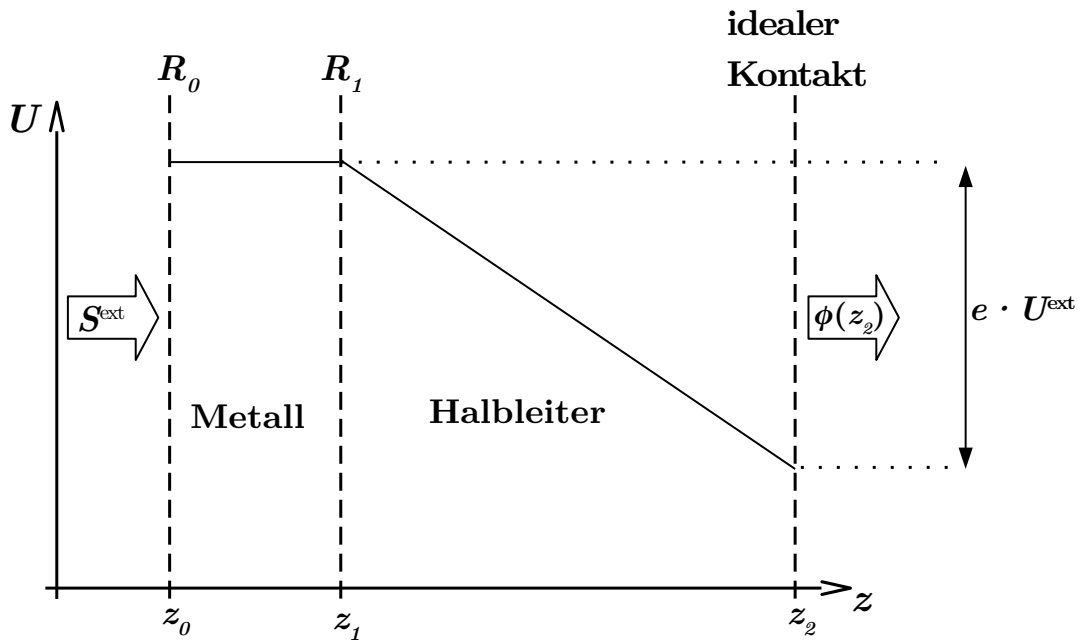
gegeben und der Umkehrpunkt für Winkel  $\vartheta$  mit  $\vartheta_{\text{crit}}(z_Q, E) < \vartheta < \vartheta_{\text{cut}}(z, z_Q, E)$  oder  $\tilde{\vartheta}_{\text{cut}}(z, z_Q, E) < \vartheta < \tilde{\vartheta}_{\text{crit}}(z_Q, E)$  ist durch

$$z_U(z_Q, E, \vartheta) = z_Q + \frac{v(E)^2 \cdot \cos^2 \vartheta \cdot m}{2\alpha} \quad (2.81)$$

gegeben. Eine Übersicht über die dadurch möglichen Trajektorien und die zur Berechnung dieser benötigten Integrationsgrenzen findet sich in Anhang B.2.

## 2.4 Propagatoren im Metall-Halbleiter-Schichtsystem

Um die Flusskerne zu bestimmen und damit den Transport zu beschreiben, werden die Propagatoren  $\Delta$  benötigt. Hierfür mache man sich zunächst klar, dass der Fluss für eine Trajektorie, die zwei Schichten (hier: Metall und Halbleiter) durchläuft, für ein einzelnes Teilchen (also Quellstärke 1) als die Wahrscheinlichkeit weder im Metall, noch im Halbleiter gestreut zu werden, interpretiert werden kann. Der Fluss durch beide Schichten ist also – bis auf einen Vorfaktor, der berücksichtigt, dass bei einer Streuung Teilchen nach links oder nach rechts starten können, während sie bei einer Transmission eine vorgeschriebene Richtung haben – das Produkt der beiden einzelnen Flüsse. Da die Propagatoren im Exponenten in den Flusskernen stehen, ist der Betrag des Propagators für eine Trajektorie, die durch mehrere Schichten



**Abbildung 2.7:** Skizze des untersuchten Systems und des dazugehörigen Potentialverlaufs, bestehend aus einem (ferromagnetischen) Metall, in das Elektronen von links injiziert werden, und einem Halbleiter. Bei  $z_0$  und  $z_1$  befinden sich reflektierende Grenzflächen, wobei  $R_1$ , wenn nichts anderes geschrieben auf eins gesetzt wird. Bei  $z_2$  befindet sich eine nicht reflektierende Grenzfläche, die einen idealen Kontakt darstellen soll, d. h. alle Teilchen, die die Grenzfläche erreichen, verlassen das System und keine Teilchen treten in das System ein. Die Teilchen, die das System verlassen, stellen den Teilchenfluss  $\phi(z_2)$  dar. Das Potential ist durch eine äußere, angelegte Spannung  $U^{\text{ext}}$  bestimmt. Im Metall wird das elektrische Feld abgeschirmt, weshalb das Potential dort konstant ist, während das Potential im Halbleiter linear abfällt und somit für eine konstante Beschleunigung der Elektronen in positiver  $z$ -Richtung sorgt.

verläuft, die Summe der Beträge der einzelnen Beiträge in den Schichten, unabhängig von der konkreten Form der Propagatoren.

Die Propagatoren werden über das Integral

$$\Delta = \int \frac{dz'}{\tau(z', E)v_{\parallel}(z', E)} \quad (2.82)$$

definiert, wobei in diesem Abschnitt  $E$  die Energie am Quellort sein soll. Dieses Integral muss, wie im Abschnitt 2.2.4 beschrieben, entlang des Pfades des Teilchens gelöst werden. Der Propagator ist dann proportional zur Projektion der zurückgelegten Strecke auf die  $z$ -Achse<sup>13</sup>,

<sup>13</sup>Dies entspricht dem Propagator ohne Feld mit  $\tau v \cos \vartheta = 1$ .

die im Metall mit  $\Delta z^{\text{M}}$  und im Halbleiter mit  $\Delta z^{\text{HL}}$  bezeichnet werden soll. Die Strecke  $\Delta z^{\text{M}}$  kann stets in der Form

$$\Delta z^{\text{M}} = z \pm z_{\text{Q}} + \nu_0 z_0 + \nu_1 z_1 \quad (2.83)$$

mit ganzen Zahlen  $\nu_i$  geschrieben werden, da durch diese vier Punkte die gesamte Trajektorie bestimmt ist (vgl. auch Anhang B.2). Für  $\Delta z^{\text{HL}}$  gilt Analoges. Der dazugehörige Propagator  $\Delta^{\text{M}}$  kann dann in die Form

$$\Delta^{\text{M}} = \iota(z) \pm \iota(z_{\text{Q}}) + \nu_0 \iota(z_0) + \nu_1 \iota(z_1) \quad (2.84)$$

gebracht werden, wobei

$$\iota(z) := \int_{z_{\text{Q}}}^z \frac{dz'}{\tau(z', E) v_{\parallel}(z', E)} \quad (2.85)$$

gilt. Dies ist möglich, da das Integral in (2.82) ein Pfadintegral ist und der Pfad so in einzelne Teilstücke aufgespalten wird. Dadurch, dass als Startpunkt für jedes Teilstück der Quellort  $z_{\text{Q}}$  verwendet wird, werden einige Strecken häufiger berechnet, als sie tatsächlich durchquert werden, jedoch sind die Vorzeichen derart, dass diese unphysikalischen Strecken in der Summe keinen Beitrag leisten.

Das Integral (2.85) kann natürlich nicht für jede Energieabhängigkeit der Lebensdauer  $\tau(E)$  analytisch gelöst werden. Da das numerische Lösen der Integrale aber die Rechenzeit für das Lösen des Transportproblems deutlich erhöht und zum Testen der der numerischen Implementation, sowie zum Verständnis der Wirkung der Energieabhängigkeit der Lebensdauer auf den Transport einfache Funktionen besser geeignet sind, werden nun vier verschiedene, einfache Formen von  $\iota(z)$  bestimmt, die wichtigen physikalischen Spezialfällen entsprechen. Der erste Fall bezieht sich auf das Metall, wo das Feld abgeschirmt wird und daher keinen Einfluss auf den Propagator hat. Die restlichen drei Fälle beziehen sich auf den Halbleiter, wobei die mittlere freie Weglänge der Elektronen einmal mit der Energie steigen wird, einmal konstant bleibt und einmal kleiner wird.

1. Der erste wichtige Spezialfall ist der bereits bekannte Ausdruck im Metall, bei dem für eine gegebene Anfangsenergie  $\tau(z', E) = \tau_0$  für alle  $z'$ , sowie  $v_{\parallel}(z', E) = v_0 \cos \vartheta$  gilt. Damit erhält man

$$\iota^{\text{M}}(z) = \frac{z - z_{\text{Q}}}{\tau_0 v_0 |\cos \vartheta|}. \quad (2.86)$$

Die Betragsstriche um den Kosinus herum sind nicht notwendig, da  $\Delta$  und damit  $\iota$  immer nur in Betragsstichen vorkommt, durch die Verwendung der Betragsstriche erhält man jedoch ein mit den Ergebnissen im Halbleiter konsistentes Ergebnis.

2. Auch im Halbleiter lohnt es sich den Fall konstanter Lebensdauer zu betrachten, der aufgrund des Feldes nur vorhanden sein kann, wenn  $\tau(E) = \tau_1 = \text{const.}$  gilt. Da die

Energie des Teilchens und damit die Parallelgeschwindigkeit sich beim Bewegen durch das Potential ändert, erhält man einen anderen Ausdruck für  $\iota(z)$  als im Metall, nämlich

$$\iota^{\text{HL},0}(z) = \frac{-m_1}{\alpha\tau_1} \sqrt{v_1(E)^2 \cos^2 \vartheta - \frac{2\alpha}{m_1}x} \Bigg|_{x=0}^{z-z_Q}, \quad (2.87)$$

in dem, wie in allen folgenden Rechnungen für den Halbleiter,  $v_1(E) = \sqrt{\frac{2}{m_1}E}$  mit der effektiven Masse  $m_1$  gilt.

3. Ebenfalls von Bedeutung ist der Fall konstanter mittlerer freier Weglänge, also  $\tau(E)v(E) = l = \text{const.}$  Da  $v \propto \sqrt{E}$  gilt, gilt dementsprechend  $\tau \propto \frac{1}{\sqrt{E}}$ . Gilt für eine gegebene Anfangsenergie  $\tau(E) = \tau_1$  und  $E = \frac{m_1}{2}v_1^2$ , gilt für  $\iota(z)$ :

$$\begin{aligned} \iota^{\text{HL},1}(z) &= \frac{1}{\tau_1 v_1} \int_{z_Q}^z dz' \frac{\sqrt{E - \alpha(z' - z_Q)}}{E \cos^2 \vartheta - \alpha(z' - z_Q)} \\ &= \frac{1}{-\alpha\tau_1 v_1} \left[ \sqrt{E - \alpha x} \sqrt{E \cos^2 \vartheta - \alpha x} \right. \\ &\quad \left. + E \sin^2 \vartheta \operatorname{arsinh} \sqrt{\frac{E \cos^2 \vartheta - \alpha x}{E \sin^2 \vartheta}} \right]_{x=0}^{z-z_Q} \end{aligned} \quad (2.88)$$

4. Um den Fall mit der Energie abfallender mittlerer freier Weglänge zu berücksichtigen, wird zuletzt der Fall  $\tau \propto \frac{1}{E}$  betrachtet. Auch hier sei wieder für eine Anfangsenergie  $E = \frac{m}{2}v_1^2$  die Lebensdauer  $\tau_1$  bekannt, womit man

$$\begin{aligned} \iota^{\text{HL},2}(z) &= \int_{z_Q}^z dz' \frac{E - \alpha(z' - z_Q)}{\tau_1 E \sqrt{v_1^2 \cos^2 \vartheta - \frac{2\alpha}{m}(z' - z_Q)}} \\ &= \left[ \frac{-m}{3\alpha\tau_1 v_1^2} \left( \frac{2\alpha}{m}x + 2v_1^2 \cos^2 \vartheta \right) \sqrt{v_1^2 \cos^2 \vartheta - \frac{2\alpha}{m}x} \right. \\ &\quad \left. - \frac{m}{\alpha\tau_1} \sqrt{v_1^2 \cos^3 \vartheta - \frac{2\alpha}{m}x} \right]_{x=0}^{z-z_Q} \end{aligned} \quad (2.89)$$

erhält.

Im feldfreien Fall, also für  $\alpha \rightarrow 0$ , müssen die Propagatoren aus 2. - 4. bzw. die dazugehörigen  $\iota$  mit dem Propagator aus 1. übereinstimmen für  $\tau_0 = \tau_1$  und  $v_0 = v_1$ . Dass dies tatsächlich der Fall ist, wird in Anhang B.1 nachgewiesen.



## Kapitel 3

# Numerische Implementation und deren Test

### 3.1 Feldfreier Transport

#### 3.1.1 Numerische Implementation

Numerisch zu lösen ist die SDTG (2.60), wobei die Dichten und die Quellen, sowie die Materialeigenschaften von der Energie und der Spin-Orientierung abhängen. Die Gleichung wird iterativ gelöst. Das bedeutet, dass sich der Lösung durch das wiederholte Ausführen desselben Verfahrens schrittweise angenähert und diese somit approximativ bestimmt wird. Das Anwenden des Verfahrens wird auch Iterationsschritt genannt. Ausgangspunkt für einen jeweiligen Iterationsschritt ist die Lösung des vorherigen Iterationsschrittes. In diesem konkreten Fall heißt das, dass zunächst (im nullten Iterationsschritt) eine Lösung für  $n(z, \sigma, E)$  geraten wird. Diese Lösung setzt man dann auf der rechten Seite von (2.60) ein und berechnet daraus die linke Seite der Gleichung und somit eine neue Lösung für  $n(z, \sigma, E)$ ; dies ist der erste Iterationsschritt. Auf diese Lösung kann das Verfahren dann erneut angewandt werden. Dies führt man so lange fort, bis ein Abbruchkriterium erfüllt ist. In der Regel ist dies, dass die relative Änderung der Lösung von einem Iterationsschritt zum nächsten kleiner ist als ein vorher bestimmter Schwellenwert. Sei als  $n_{[j]}(z, \sigma, E)$  die Lösung nach dem  $j$ -ten Iterationsschritt und  $c_{\text{Abbruch}}$  der Schwellenwert. Dann würde

$$\max_{z, \sigma, E} \left| \frac{n_{[j+1]}(z, \sigma, E) - n_{[j]}(z, \sigma, E)}{n_{[j+1]}(z, \sigma, E)} \right| < c_{\text{Abbruch}} \quad (3.1)$$

bedeuten, dass die Lösung  $n_{[j]}(z, \sigma, E)$  als approximative Lösung akzeptiert und das Iterationsverfahren abgebrochen wird. Jeder einzelne Iterationsschritt (also das Berechnen der linken Seite der Gleichung) besteht wiederum aus zwei Schritten: Zuerst werden die Quellen  $\hat{S}n + S^{\text{ext}}$  berechnet und danach der Integraloperator  $\hat{\phi}$  auf diese Quellen angewandt.

Gelöst wird auf einem dreidimensionalen Gitter, aufgespannt durch den Ort  $z$ , die Spin-Orientierung  $\sigma$  und die Energie  $E$ . Die Spin-Orientierung  $\sigma$  ist bereits diskret (Orientierungen „up“ und „down“), die anderen beiden Größen müssen diskretisiert werden. Dazu wird z. B. die  $z$ -Achse von  $z_0$  bis  $z_2$  in beliebige Teilstücke zerlegt und diese Teilstücke mit ganzen Zahlen  $i$  indiziert<sup>1</sup>. Der Mittelpunkt eines solchen Teilstückes ist dann  $z[i]$  und die obere bzw. untere Grenze liegt bei  $z^{\text{oben}}[i]$  bzw.  $z^{\text{unten}}[i]$ . Für die Energieachse verfährt man analog, jedoch ist die obere Grenze nicht ohne weiteres eindeutig bestimmt. Die Obergrenze erhält man erst, wenn man die Energieverteilung der externen Quelle kennt und weiß, wie viel Energie Teilchen maximal durch Stöße gewinnen können. Können sie keine Energie gewinnen, so sollte man die Obergrenze praktischerweise als höchste mögliche Quellenergie wählen. Auf diesem diskreten Gitter ist dann auch die Teilchendichte bestimmt. So lässt sich zum Beispiel die Teilchendichte  $n[i, j, k]$  als die mittlere Teilchendichte von Teilchen im Intervall  $(z^{\text{unten}}[i], z^{\text{oben}}[i])$  mit Spinorientierung  $\sigma = j$  und einer Energie im Intervall von  $E^{\text{unten}}[k]$  bis  $E^{\text{oben}}[k]$  interpretieren.

### Berechnung der Quellen

Die Quellstärke ist eine lokale Größe, ist also unabhängig von anderen Orten im System. Das Berechnen der Quellstärke entspricht also keinem Transport auf der räumlichen Achse, sondern auf der Energie- oder Spin-Achse. Die Quellstärke besteht aus der externen Quelle und der internen Quelle, die von der Teilchendichte abhängt.

Die externe Quelle kann entweder bereits in diskreter Form gegeben sein, wo dann nichts mehr zu tun ist, oder in kontinuierlicher Form bestimmt sein, woraus die diskrete Form abgeleitet werden muss. Dies geschieht, indem man die Quellstärke über alle Orte und Energien aufintegriert, die zum betrachteten Diskretisierungsintervall gehören. Die externe Quelle im Diskretisierungsintervall  $[i, j, k]$  ist dann also

$$S^{\text{ext}}[i, j, k] = \int_{z^{\text{unten}}[i]}^{z^{\text{oben}}[i]} dz \int_{E^{\text{unten}}[k]}^{E^{\text{oben}}[k]} dE S^{\text{ext}}(z, \sigma = j, E). \quad (3.2)$$

Die interne Quelle kann auf ähnliche Weise bestimmt werden. Hier ist der Ausgangspunkt die bereits diskretisierte Teilchendichte, sodass (2.14) entsprechend die Übergangswahrscheinlichkeit  $p(\sigma, E|\sigma', E')$  diskretisiert und ein geeigneter Wert für die Lebensdauer  $\tau(\sigma' E')$  bestimmt werden muss. Da die Teilchendichte nur in diskreter Form berechnet wird, ist es nicht möglich, analog zur externen Quelle den gesamten Ausdruck über ein jeweiliges Diskretisierungsintervall zu integrieren. Stattdessen werden die Faktoren einzeln diskretisiert. Die genaue Dichteverteilung in einem Diskretisierungsintervall ist nicht bekannt, weshalb es nicht sinnvoll

---

<sup>1</sup>Größen, die nun auf dem diskreten Gitter definiert sind und dementsprechend von ganzen Zahlen abhängen, werden dadurch gekennzeichnet, dass die Abhängigkeiten der Größe in eckigen statt in runden Klammern angegeben sind.

ist, die Lebensdauer über ein solches zu integrieren, stattdessen wählt man den Wert von  $\tau$  als den Wert in der Mitte des Diskretisierungsintervalls, also

$$\tau[i, j, k] = \tau(z[i], \sigma = j, E[k]), \quad (3.3)$$

was impliziert, dass alle Teilchen in dem Diskretisierungsintervall bezüglich der internen Quelle so behandelt werden, als hätten sie die Lebensdauer eines Teilchens in der Mitte des Diskretisierungsintervalls.

Die Übergangswahrscheinlichkeiten werden diskretisiert, indem über die Start- und die Endenergien integriert wird. Die diskrete Übergangswahrscheinlichkeit schreibt sich dann als

$$p[j, k|j', k'; i] = \int_{E^{\text{unten}}[k]}^{E^{\text{oben}}[k]} dE \int_{E'^{\text{unten}}[k]}^{E'^{\text{oben}}[k]} dE' p(\sigma = j, E|\sigma' = j', E'; z[i]). \quad (3.4)$$

Die interne Quellstärke erhält man dann, indem man

$$\hat{S}n [i, j, k] = \sum_{j=0}^1 \sum_k \frac{n[i, j', k']}{\tau[i, j', k']} p[j, k|j', k'; i] \quad (3.5)$$

berechnet, wobei die  $k$ -Summe über alle möglichen Energielevel zu erfolgen hat. Die Gesamtquelle wird berechnet, indem die externe und die interne Quelle eintragsweise addiert werden.

### Anwendung der Flusskernoperators

Das Anwenden des Flusskernoperators bedeutet einen Transport im Ortsraum, jedoch keinen Transport im Energieraum, da die Teilchen keine Energie durch das fehlende Potential gewinnen oder verlieren können, und auch keine Änderung der Spin-Orientierung. Das Integral  $\int dz_Q$  über alle Quellorte wird für den diskreten Fall in die Summe über alle Intervalle  $\sum_{i'}$  umgeschrieben. Dadurch hat der Quelloperator in diskreter Form, die Form einer Matrixmultiplikation

$$\frac{n[i, j, k]}{\tau[i, j, k]} = \sum_{i'} \text{ME}_n[i|i'; j, k] \cdot S[i', j, k], \quad (3.6)$$

wobei die Matrixelemente ( $\text{ME}_n$ ) durch den Vergleich mit (2.65) bestimmt werden können. Sie sind demnach die Summe über alle erlaubten Trajektorien von den Flusskernen, multipliziert mit den dazugehörigen Reflexionskoeffizienten. Numerisch werden die Matrixelemente wie folgt berechnet: Die Flusskerne werden lediglich für alle möglichen Kombinationen von Mittelpunkten der Diskretisierungsintervalle berechnet, also gilt

$$\varphi[i|i'; j, k] = \varphi(z[i]|z_Q[i']; \sigma = j, E[k]). \quad (3.7)$$

Alle Teilchen werden also so behandelt, als könnten sie sich nur von einem Mittelpunkt zu einem anderen bewegen. Dies führt allerdings zu einem Problem, wenn man eine Trajekto-

rie ohne Reflexionen betrachtet, wo Quell- und Zielort im gleichen Diskretisierungsintervall liegen. Würde man dieses Matrixelement herkömmlich berechnen, würde es, da das Intergralexponential  $Ei(x)$  für  $x = 0$  divergiert, ebenfalls divergieren. Stattdessen berechnet man dieses Matrixelement (bzw. diesen Summanden des Matrixelementes), indem man den Fluss an den Grenzen des Diskretisierungsintervalles betrachtet. Der Summand ist dann Eins minus der Fluss aus dem Diskretisierungsintervall heraus. Hat das Intervall die Länge  $\delta z$ , bedeutet dies

$$\begin{aligned} \varphi[i|i'; j, k] &= 1 - \phi(z^{\text{oben}}[i] | z[i]; \sigma = j, E[k]) + |\phi(z^{\text{unten}}[i] | z[i]; \sigma = j, E[k])| \\ &= 1 - \left( \exp\left(-\frac{\delta z}{2\tau[i, j, k]v[i, j, k]}\right) - \frac{\delta z}{2\tau[i, j, k]v[i, j, k]} \cdot Ei\left(-\frac{\delta z}{2\tau[i, j, k]v[i, j, k]}\right) \right). \end{aligned} \quad (3.8)$$

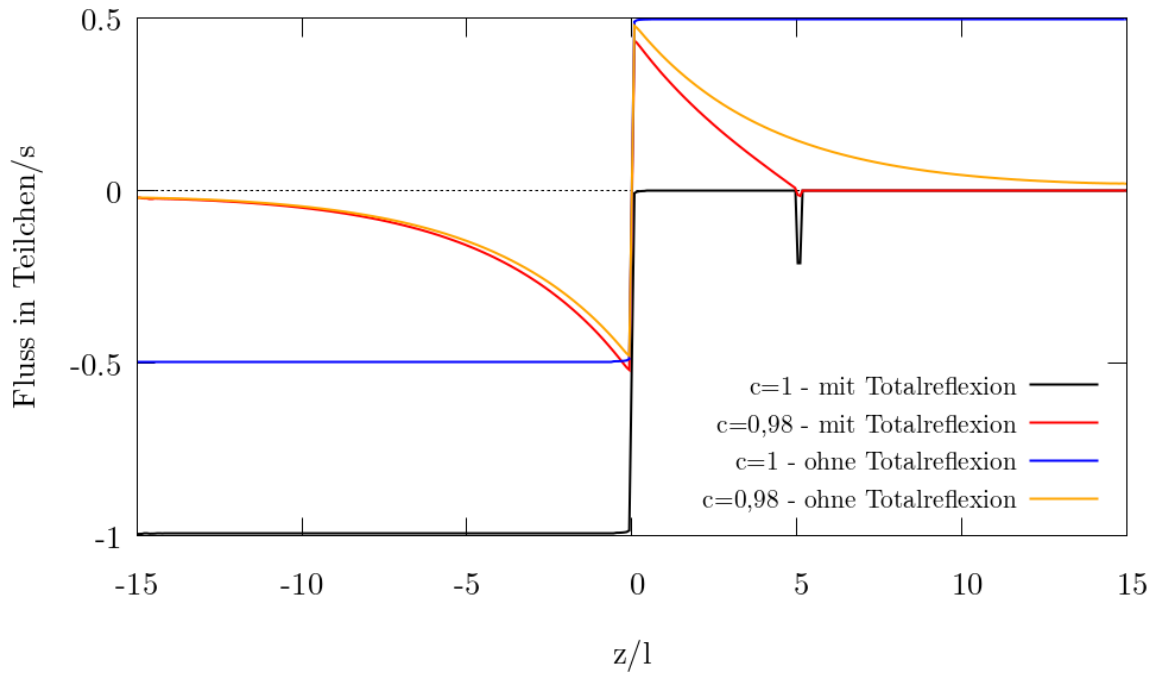
Es können natürlich nicht alle erlaubten Trajektorien berechnet werden, stattdessen beschränkt man sich auf Trajektorien bis zu einer maximalen Anzahl von Reflexionen  $\nu_{\text{Ref}}$ . Der Beitrag von Trajektorien mit mehr Reflexionen wird ignoriert. Im Folgenden wurde  $\nu_{\text{Ref}} = 7$  gewählt, was für die meisten Flusskerne weit von Grenzflächen entfernt mehr als ausreichend ist und auch für Flusskerne im Metall, wo viele Reflexionen auftreten können, ändern sich die Werte der Flusskerne, wenn man mehr Reflexionen zulässt, erst in der sechsten geltenden Stelle oder später.

Die Matrixelemente hängen nicht von der Teilchendichte ab, sodass es genügt, sie ein einziges Mal zu berechnen und in den Iterationsschritten lediglich die Matrixmultiplikation auszuführen. Die Berechnungen der einzelnen Matrixelemente sind auch unabhängig voneinander, weshalb sie sich sehr effizient parallelisieren lassen.

Ist das Iterationsverfahren konvergiert und eine finale Teilchendichte berechnet, wird aus dieser Dichte der Teilchenfluss bestimmt. Dies erfolgt analog zu der Berechnung der Dichte, nur dass der Iterationsschritt nur einmal angewandt wird und in den zu berechnenden Matrixelementen statt des Flusskerns  $\varphi[i|i'; j, k]$  der Fluss  $\phi[i|i'; j, k]$  steht. Außerdem können die Matrixelemente für die Dichte sowie den Fluss zusätzlich noch in Linksläufer- und Rechtsläufer-Matrixelemente aufgespalten werden. Das bedeutet, dass einmal nur Trajektorien berücksichtigt werden, bei denen die Teilchen sich bei  $z$  nach links bewegen und einmal nur solche bei denen sie sich nach rechts bewegen. Damit kann aus der finalen Dichte der Fluss und die Dichte, nach Links- bzw. Rechtsläufern aufgelöst, berechnet werden.

### 3.1.2 Fluss und Reflexionen

Um die Korrektheit und die Güte der Implementation zu überprüfen, ist es sinnvoll den Fluss  $\phi(z)$  zu betrachten. Dieser ist gemäß der Kontinuitätsgleichung konstant an Orten, wo keine externe Quelle ist. Dies ist, Abs. 2.1.2 folgend, eine direkte Konsequenz der Teilchenzahlerhaltung. Ein Flussverlust bedeutet also einen Verlust an Teilchen, daher wird die Flussenerhaltung als Kriterium dafür verwendet, ob die Lösung physikalisch korrekt sein kann. Die numerischen



**Abbildung 3.1:** Für eine monoenergetische  $\delta$ -Quelle ist der Fluss für einen Sekundäremissionsfaktor von  $c = 1$  und  $c = 0,98$  dargestellt, je einmal mit einer totalreflektierenden Grenzschicht bei  $z = 5l$ .

Ergebnisse sind natürlich keine exakten Lösungen, weshalb der Fluss auch nicht exakt erhalten ist und auch keine perfekte Flusserhaltung gefordert wird, damit ein numerisches Resultat Verwendung finden kann.

Für eine  $\delta$ -Quelle der Form  $1 \cdot \delta(z)$  lässt sich der Fluss angeben als

$$\phi(z) = \begin{cases} -\frac{1}{2}; & z < 0 \\ +\frac{1}{2}; & z > 0. \end{cases} \quad (3.9)$$

Auch mit einer reflektierenden Grenzschicht bei  $z = z_R$  lässt sich der Fluss einfach konstruieren. Dabei folgt man dem Vorgehen in Abs. 2.2.4 und stellt sich das System als an der reflektierenden Grenzschicht gespiegelt vor. Dann werden die Flüsse der realen Quelle und der Spiegelquelle addiert. Für eine totalreflektierende Grenzschicht bei  $z = z_R > 0$  erhält man den Fluss

$$\phi(z) = \begin{cases} -1; & z < 0 \\ 0; & z > 0, \end{cases} \quad (3.10)$$

wobei für  $z > z_R$  keine Teilchen vorhanden sind und der Teilchenfluss daher null ist, während für  $0 < z < z_R$  die Flüsse von links und rechts sich gegenseitig aufheben. Diese Resultate werden für eine monoenergetische  $\delta$ -Quelle mit den Materialeigenschaften  $\tau$  und  $v$  sowie der mittleren freien Weglänge  $l = \tau v$  überprüft. Da nur eine Energie und eine Spin-Orientierung

betrachtet wird, sind die Übergangswahrscheinlichkeiten  $p(\sigma, E|\sigma', E') = c \cdot \delta_{\sigma\sigma'}\delta(E - E')$ , wobei der Sekundäremissionsfaktor  $c$  angibt, wie viele Teilchen nach einem Stoß weiter zum Transport beitragen. Bislang wurde dieser Faktor nicht explizit aufgeführt und wird, wenn nicht anders erwähnt, zukünftig auf eins gesetzt sein, sodass Teilchenerhaltung gilt. Man erkennt in Abb. 3.1 eine sehr gute Übereinstimmung mit den theoretischen Werten, außer direkt an der reflektierenden Grenzfläche, was daran liegt, dass der Fluss im Diskretisierungsintervall nicht genau genug berechnet wird, was aber, wie die restlichen Werte zeigen, keinen bedeutenden Einfluss auf den Fluss weiter von der Grenzfläche entfernt hat. Damit man diese gute Übereinstimmung erhält, müssen die Matrixelemente für den Flusskern zuvor jedoch mit sogenannten lokalen Korrekturfaktoren multipliziert werden, was im Anhang C.1 erläutert wird.

In Abb. 3.1 sind ebenfalls Resultate für  $c = 0,98$  dargestellt. Hier ist der Fluss für  $z \neq 0$  nicht null, da bei jedem Stoß ein Teilchenverlust auftritt. Aber auch hier ist der Effekt der Totalreflexion bemerkbar: Rechts der Quelle ist der Fluss mit Totalreflexion deutlich kleiner als der Fluss ohne Teilchenreflexion, während links der Quelle der Fluss der realen Quelle und der Spiegelquelle das gleiche Vorzeichen haben und der Fluss mit Totalreflexion deshalb betragsmäßig größer ist. Am linken Rand ist dieser Effekt durch den Teilchenverlust kaum mehr sichtbar.

Darüber hinaus kann man durch das Verhältnis der Flüsse mit  $c = 1$  und  $c = 0,98$ , jeweils ohne Totalreflexion, approximieren, wie oft Teilchen stoßen, bis sie das System verlassen. Durch jeden Stoß verringert<sup>2</sup> sich die Teilchenzahl und damit der Fluss um den Faktor  $c$ . Der Quotient  $Q = \frac{\Phi_c(z = 15l)}{\Phi_{c=1}(z = 15l)}$  für den Fluss mit Sekundäremissionsfaktor  $c$  am rechten Rand ist auch durch  $Q = c^n$  berechenbar, wobei  $n$  die mittlere Anzahl an Stößen ist, die ein Teilchen erfährt, bevor es das System verlässt. Für dieses System erhält man  $n \approx 46$ . Würden die Teilchen sich eindimensional in Richtung der  $z$ -Achse bewegen und nach einem Stoß nicht in eine zufällige richtung gestreut werden, sondern sich in die gleiche Richtung bewegen wie vor dem Stoß, würden sie im Mittel 15 Stöße erfahren, bevor sie das System verlassen, denn sie müssen 15 mittlere freie Weglängen zurücklegen. Die Teilchen haben also beim superdiffusiven Transport in etwa dreimal so viele Stöße erfahren, wenn sie das System verlassen, als wenn sie sich nur in positive  $z$ -Richtung bewegt hätten.

### 3.1.3 Vergleich mit analytischer Lösung

Um die numerische Implementation der Gleichung zu testen, ist es ratsam, die Ergebnisse aus einer numerischen Rechnung mit denen einer analytischen Rechnung zu vergleichen. Es ist natürlich nicht möglich, die vollständige SDTG mit beliebig komplizierten Materialparametern und Übergangswahrscheinlichkeiten – selbst im feldfreien Fall – zu lösen, allerdings lässt sich die Gleichung für ein homogenes, monoenergetisches System für einen einzelnen Spinkanal mittels der Methode der Fourier-Transformation fast vollständig analytisch lösen [21, 33].

---

<sup>2</sup>Dies gilt für  $c < 1$ , für  $c > 1$  (hier nicht untersucht) vergrößert sich der Fluss durch Stöße.

Gelöst werden soll die SDTG (2.60) mit einer monoenergetischen  $\delta$ -Quelle  $S_0\delta(z)$  bei  $z = 0$  und den konstanten Materialeigenschaften  $\tau$  und  $v$ . Da nur eine Energie und eine Spin-Orientierung betrachtet wird, sind die Übergangswahrscheinlichkeiten  $p(\sigma, E|\sigma', E') = c \cdot \delta_{\sigma\sigma'}\delta(E - E')$ , mit dem Sekundäremissionsfaktor  $c$ . In dieser Rechnung wird sich herausstellen, dass es notwendig ist, auch  $c \neq 1$  zu berücksichtigen. Die interne Quelle ist damit als  $\hat{S}n(z) = \frac{c}{\tau}n(z)$  gegeben und die SDTG lässt sich schreiben als

$$\begin{aligned} n(z) &= \frac{-1}{2v} \int_{-\infty}^{\infty} dz' \operatorname{Ei} \left( -\frac{|z - z'|}{\tau v} \right) \left( \frac{c}{\tau} n(z') + S_0 \delta(z') \right) \\ &= -\frac{S_0}{2v} \operatorname{Ei} \left( -\frac{|z|}{\tau v} \right) + \frac{-c}{2\tau v} \int_{-\infty}^{\infty} dz' \operatorname{Ei} \left( -\frac{|z - z'|}{\tau v} \right) n(z') \\ &=: g(z) + \int_{-\infty}^{\infty} dz' k(|z - z'|) n(z'). \end{aligned} \quad (3.11)$$

Diese Gleichung wird einer Fourier-Transformation unterzogen, wobei für  $n(z)$  die Hin- bzw. Rücktransformation durch

$$\tilde{n}(p) = \int_{-\infty}^{\infty} dz n(z) e^{-ipz} \quad (3.12)$$

$$n(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi} \tilde{n}(p) e^{ipz} \quad (3.13)$$

gegeben ist. Für  $g(z)$  und  $k(z)$  gilt Analoges. Das Integral in der letzten Zeile von (3.11) ist ein Faltungsintegral, das unter einer Fourier-Transformation zu einer Multiplikation wird. Hierdurch erhält man als transformierte Gleichung den Ausdruck

$$\tilde{n}(p) = \tilde{g}(p) + \tilde{k}(p)\tilde{n}(p) \quad (3.14)$$

und die Lösung im  $p$ -Raum

$$\tilde{n}(p) = \frac{\tilde{g}(p)}{1 - \tilde{k}(p)}. \quad (3.15)$$

Die transformierten Funktionen  $\tilde{g}(p)$  und  $\tilde{k}(p)$  lassen sich analytisch berechnen als

$$\tilde{g}(p) = \frac{S_0}{vp} \arctan(\tau vp) \quad (3.16)$$

und

$$\tilde{k}(p) = \frac{c}{\tau vp} \arctan(\tau vp). \quad (3.17)$$

Die Teilchendichte im  $p$ -Raum ist somit

$$\tilde{n}(p) = \frac{S_0 \tau \cdot \arctan(\tau v p)}{\tau v p - c \cdot \arctan(\tau v p)} \quad (3.18)$$

Von Interesse ist natürlich die Teilchendichte  $n(z)$  im Ortsraum. Die dafür notwendige Rücktransformation lässt sich nicht mehr analytisch durchführen, stattdessen wird diese numerisch berechnet<sup>3</sup>. Allerdings hat  $\tilde{n}(p)$  eine nicht integrable Singularität für  $c = 1$  und  $p = 0$ , weshalb die Rücktransformation für  $c = 1$  nicht durchführbar ist. Deswegen wird sowohl die numerische als auch die analytische Lösung für  $c < 1$  berechnet.

Das Ergebnis der numerischen und analytischen Rechnung ist in Abb. 3.2 dargestellt. Man sieht, dass die beiden Lösungen für fast alle  $z$  nahezu identisch sind, lediglich nahe der Quelle und am Rand des Systems erkennt man Unterschiede. Die Abweichungen nahe der Quelle rühren von der endlichen Auflösung der numerischen Rechnung her, sodass die dort dargestellte Dichte ein Mittelwert über das Diskretisierungsintervall ist und nicht der Wert in der Mitte des Intervalls, der größer ist. Am Rand macht sich bemerkbar, dass in der numerischen Rechnung nur ein endliches System betrachtet wird, während in der analytischen Lösung über den ganzen, unendlichen Raum integriert wird. In der numerischen Lösung können keine Teilchen von außerhalb des betrachteten Bereiches in den Bereich eintreten, während sie es im analytischen Fall können, weshalb die Dichte für die analytische Lösung am Rand größer als in der numerischen Lösung ist.

## 3.2 Transport mit externem Feld

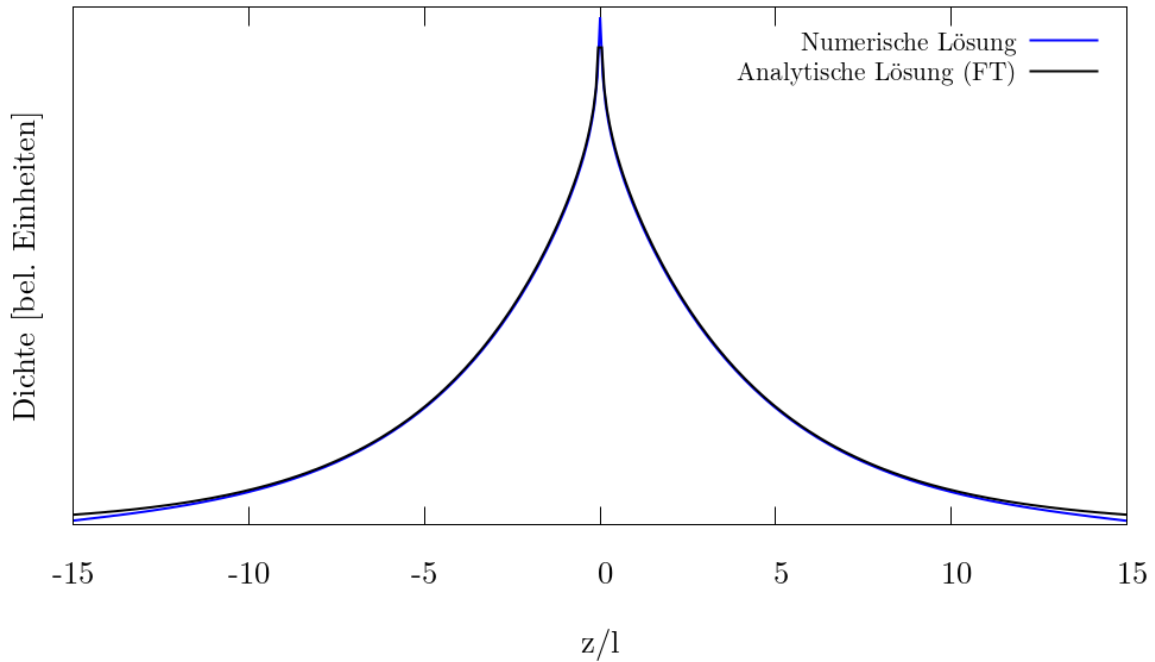
### 3.2.1 Numerische Implementation

Die Implementation erfolgt sehr ähnlich dem Fall ohne Feld. Das numerische Verfahren soll nun schematisch anhand von Abb. 3.3 erläutert werden. Betrachtet wird beispielhaft der Transport der Teilchendichte auf dem Gitterpunkt  $[i - 1, k + 2]$ . In einem kontinuierlichen Koordinatensystem lässt sich die Dichte vorstellen als gleichmäßig über die gesamte Gitterzelle verteilt, was durch das dunkelgrüne Quadrat angedeutet ist. Der Transport erfolgt nun in zwei Schritten. Der erste Schritt, der Stoßprozess, erfolgt räumlich lokal. Durch das Stoßen mit anderen Teilchen wird die Energie (und der Spin) der betrachteten Teilchendichte geändert, beschrieben durch die Übergangswahrscheinlichkeiten  $p(\sigma, E|\sigma', E)$ . In diesem Beispiel treten nur Energieverluste auf, sodass die Teilchen im etwas helleren grünen Rechteck landen und auf den Gitterpunkten  $[i - 1, k]$  und  $[i - 1, k - 1]$  zur Dichte beitragen. Dadurch dass die Energiespanne der Dichte sich vergrößert hat, ist die Dichte natürlich geringer, um die Teilchenerhaltung sicherzustellen, weshalb das Rechteck heller dargestellt ist als das ursprüngliche Quadrat. In der numerischen Implementation bedeutet dies, dass nur die Übergangswahrscheinlichkeiten  $p[k|k + 2]$  und  $p[k - 1|k + 2]$  zum Transport beitragen, alle anderen Werte sind null für die

---

<sup>3</sup>Hierfür wurde das QAWF-Paket der GNU Scientific Library (GSL) verwendet: <https://www.gnu.org/software/gsl/doc/html/integration.html>



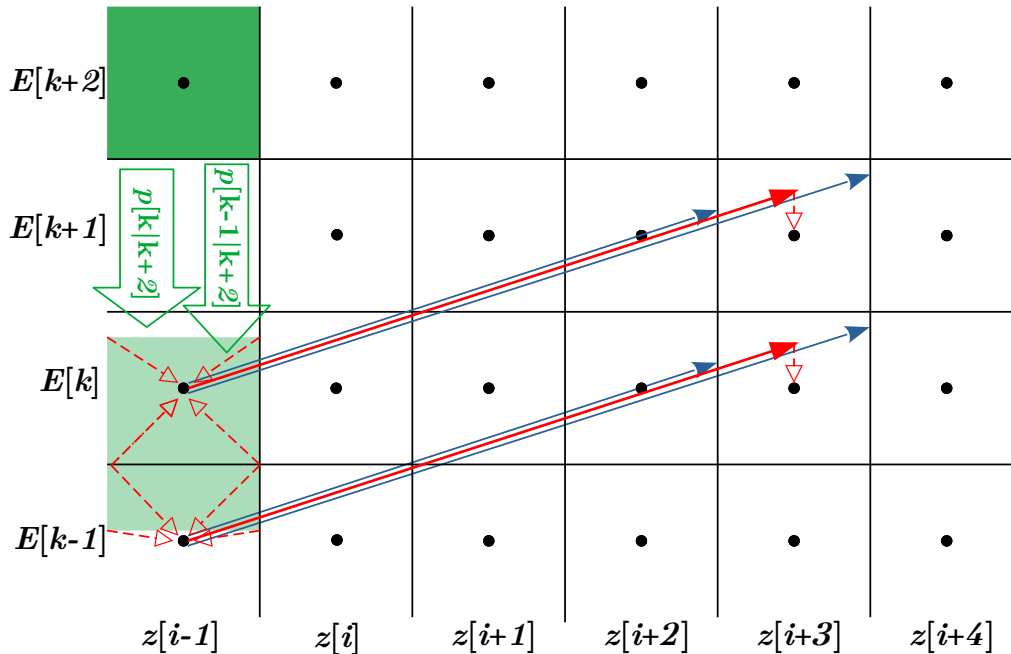


**Abbildung 3.2:** Die Teilchendichte ist über dem Ort  $z$  in Einheiten der mittleren freien Weglänge  $l = \tau v$  dargestellt.

sen Start-Gitterpunkt. Die Werte dieser beiden Übergangswahrscheinlichkeiten ergeben sich aus der Größe der Fläche des grünen Rechtecks in der jeweiligen Gitterzelle im Verhältnis zum Flächeninhalt des gesamten Rechtecks (vgl. Gl. 3.4). Dadurch, dass die Dichten nur auf den Gitterpunkten gespeichert werden und der weitere Transport lediglich von Gitterpunkt zu Gitterpunkt berechnet wird, wird die gesamte Dichte in der Gitterzelle numerisch so behandelt, als wäre sie im Gitterpunkt lokalisiert. Dies ist durch die gestrichelten roten Pfeile mit nicht ausgefülltem Pfeilkopf angedeutet. Die gestrichelten Pfeile sollen symbolisieren, dass es sich hierbei um keinen realen, physikalischen Transport, sondern um einen der Numerik geschuldeten Transport handelt.

Der zweite Teil des Transportes ist die räumliche Bewegung der gestreuten Teilchen bis zum nächsten Stoß. Ausgangspunkt ist die nach der Berechnung der Stöße erhaltene Teilchendichte an einem Gitterpunkt, z. B. bei  $[i - 1, k]$ . Der Beitrag dieses Gitterpunktes zum Intervall bei  $z[i + 3]$  wird gemäß (3.6) berechnet. Bei dieser Berechnung wird zunächst die Energie, die die Teilchen bei  $z[i + 3]$  haben, nicht beachtet, sodass die Matrixmultiplikation in (3.6) nur über die räumlichen Koordinaten, nicht aber über die energetischen erfolgt<sup>4</sup>. Da der Energieunterschied durch Start- und Endpunkt festgelegt ist, trägt jede Anfangsenergie nur zu einer Endenergie bei. Der Transport zu dieser Energie ist durch den durchgezogenen roten Pfeil dargestellt. (Die blauen Pfeile stellen den Fluss auf einem verschobenen Gitter dar und werden erst in

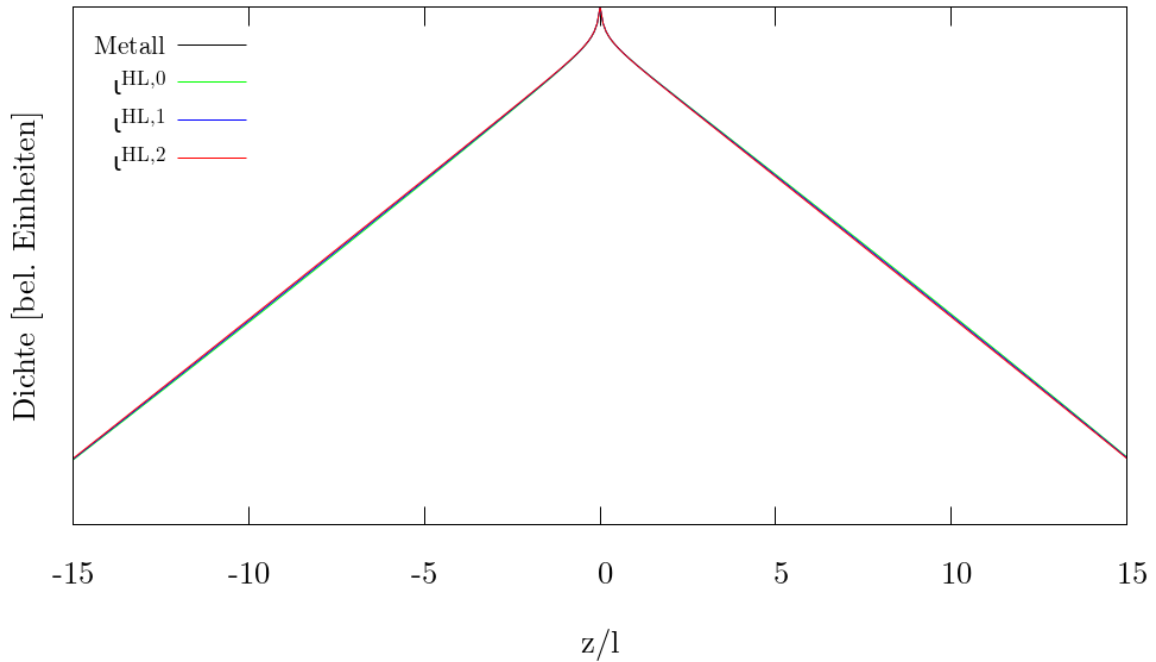
<sup>4</sup>Außerdem muss bei der Berechnung der hierfür benötigten Flusskerne beachtet werden, dass die Integranden für gewisse Werte von  $\vartheta$  divergieren. Die Behebung dieser Divergenzen für die numerische Integration wird in Anhang C.2 erläutert.



**Abbildung 3.3:** Skizze der numerischen Implementation auf dem Gitter. Die räumliche Diskretisierung ist auf der horizontalen Achse dargestellt, die Energiediskretisierung auf der vertikalen. Die Spinkanäle sind nicht dargestellt, werden aber bezüglich der Stöße genauso behandelt wie die Energie; beim räumlichen Transport verbleiben Teilchen stets in ihrem Spinkanal. Für weitere Erläuterungen siehe den Haupttext

Abschnitt 3.2.3 benötigt.) Da die Dichten auf den Gitterpunkten berechnet werden, erfolgt erneut ein unphysikalischer Transport von der eigentlichen Energie (auf einer kontinuierlichen Achse) zum Gitterpunkt auf dem diskreten Gitter; dies ist ebenfalls durch einen gestrichelten Pfeil dargestellt.

Ist die Energieauflösung zu klein gewählt im Vergleich zu der durchschnittlichen Energie, die ein Teilchen im Potential bei der Bewegung gewinnt oder verliert, bleibt ein Großteil der Dichte in dem Energieintervall, in dem der Transport begann. Dies führt dazu, dass der Einfluss des Potentials auf die Energieverteilung der Teilchendichte unterschätzt wird und Energieübergänge fast nur durch Stöße erfolgen. Da, wie sich noch zeigen wird, der Teilchenfluss nach rechts bei dem hier untersuchten System größer ist als der nach links, also mehr Teilchen beim Transport im Potential Energie gewinnen als verlieren, wird die mittlere Energie der Teilchen systematisch unterschätzt. Allerdings ist der Transport in Richtung des Feldes (also nach rechts) längerreichweitig, wodurch mehr Teilchen ein höheres Energieniveau erreichen, was einerseits bedeutet, dass mehr Teilchen in dieser Richtung ein anderes Energieniveau erreichen, andererseits aber auch heißt, dass es mehr Teilchen gibt, die nur knapp nicht ein höheres Energieniveau erreichen, was die Unterschätzung der mittleren Energie umso bedeutender macht.



**Abbildung 3.4:** Die von einer  $\delta$ -Quelle erzeugten Dichteverteilungen für vier verschiedene Propagatoren. Die Dichte „Metall“ wurde ohne Feld wie im vorherigen Abschnitt berechnet, die anderen drei Trajektorien wurden mit einem sehr schwachen, kaum relevanten externen Feld gemäß (2.87) - (2.89) berechnet.

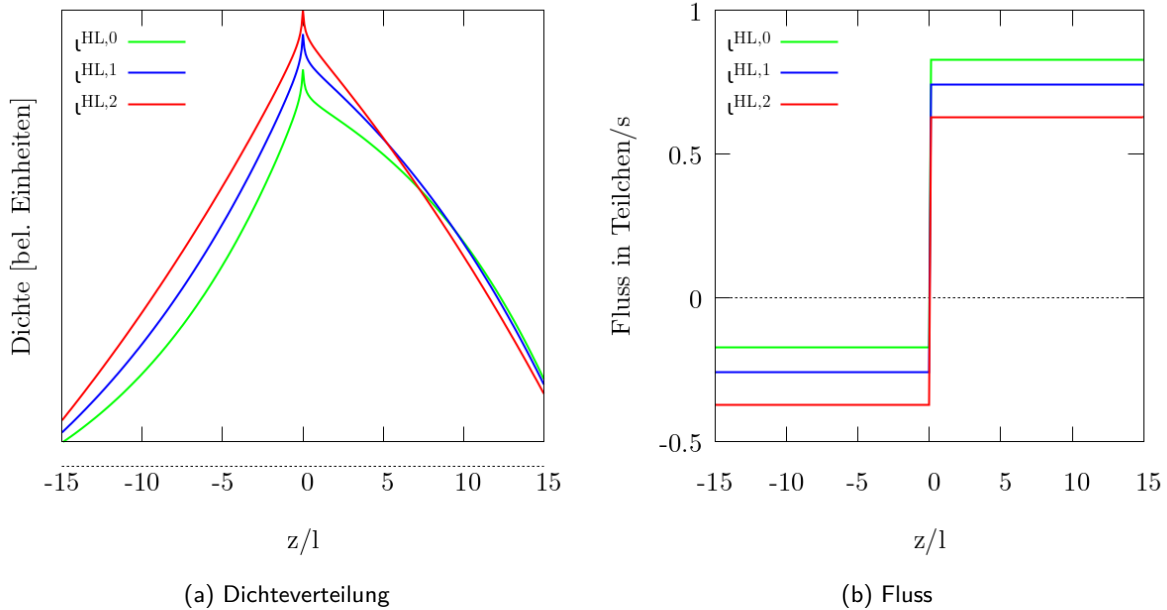
Um diesem Problem zu begegnen, kann man die Energieauflösung erhöhen, was natürlich mehr Rechenleistung und -zeit erfordert, oder man teilt die Dichte, die auf einer kontinuierlichen Achse zwischen zwei Diskretisierungspunkten liegen würde, anteilig entsprechend der Lage den beiden Gitterpunkten zu anstatt nur einem der beiden. Letzteres kann dazu führen, dass Teile der Dichte überproportional viel Energie gewinnen oder verlieren, was zu stark unrealistischen Ergebnissen führen kann und hier aufgrund der Schwerpunktsetzung nicht weiter verfolgt wird<sup>5</sup>.

### 3.2.2 Test und Vergleich mit feldfreiem Transport

#### Vergleich mit vorheriger Lösung für ein schwaches Feld

Für die Teilchendichte mit einem externen Feld gibt es keine analytische Lösung mehr, allerdings lässt sich die Lösung für sehr schwache Felder mit der ohne externes Feld vergleichen. Die beiden Systeme unterscheiden sich dann physikalisch praktisch nicht mehr, jedoch in der mathematischen Beschreibung: Für den Fall ohne Feld wird der Propagator unter Zuhilfe-

<sup>5</sup>Getestet wurde diese Methode für eine lineare Verteilungsfunktion zwischen den beiden Gitterpunkten. Dies führte allerdings zu einer massiven Überschätzung des Energiegewinns, sodass fast alle Teilchen das höchste simulierte Energieniveau erreichten. Auch ein Versuch als Ausgangspunkt für die Berechnung des kontinuierlichen Energiewerts nicht die Energie des Diskretisierungspunktes, sondern die mittlere Energie der Dichte in der Gitterzelle zu verwenden, verbesserte das Ergebnis nicht.



**Abbildung 3.5:** Dichteverteilung und Fluss einer monoenergetischen  $\delta$ -Quelle in einem externen Feld. Die Quellstärke wurde auf eins normiert. Die mittlere freie Weglänge  $l$  ist im Allgemeinen keine Konstante mehr. Zur Normierung wird die verwendet, die die Teilchen direkt nach einem Stoß erfahren. Diese ist für alle drei Propagatoren identisch.

nahme von  $\iota^M(z)$  aus (2.86) verwendet, während für den Fall mit Feld  $\iota^{HL}(z)$  aus (2.87) bis (2.89) Verwendung findet. Verglichen werden die Resultate erneut für eine monoenergetische  $\delta$ -Quelle. Die Ergebnisse sind in Abb. 3.4 dargestellt. Man erkennt, dass die vier Dichteverteilungen nahezu identisch sind, was die Korrektheit der Implementation bekräftigt. Außerdem erkennt man, dass die Dichte für  $|z| > l$  nahezu linear abfällt. Dieses Verhalten würde man auch von der Lösung einer Diffusionsgleichung erwarten. Nur in der Nähe der Quelle erhält man ein qualitativ anderes Verhalten durch die superdiffusive Beschreibung, das aber natürlich einen Einfluss auf das quantitative Verhalten entfernt von der Quelle hat.

### Überprüfung der Flusserhaltung und Einfluss des Feldes

Als nächstes soll aus bekannten Gründen die Flusserhaltung überprüft werden. Dazu wird erneut eine monoenergetische  $\delta$ -Quelle betrachtet, die sich in einem homogenen System ohne Grenzflächen befindet, jedoch herrscht ein nicht zu vernachlässigendes, externes Feld, das die Elektronen nach rechts beschleunigt. Um den Effekt der Propagatoren einfacher zu sehen, werden die Dichte und der Fluss ebenfalls monoenergetisch betrachtet. Das heißt, dass die Energiediskretisierung so grob gewählt wird, dass die Teilchen immer in dem Energieniveau verbleiben, in dem sie gestartet sind, und nach einem Stoß haben sie erneut ihre Anfangsenergie. Während ihres Fluges spüren die Teilchen aufgrund des veränderten Propagators den Einfluss des Potentials. Das Potential ist im Verhältnis zur Anfangsenergie so klein gewählt, dass Reflexionen am Potential nicht den gesamten Transport dominieren. Die Ergebnisse sollen

rein qualitativ diskutiert werden, weshalb nicht weiter auf konkrete Werte eingegangen wird. Dadurch, dass die mittlere freie Weglänge sich mit der Energie der Teilchen ändern kann, ist sie keine Konstante für die gesamte Dichte mehr, außer für  $\iota^{\text{HL},1}$ . Diese mittlere freie Weglänge ist auch die, die Teilchen bei ihrer Erzeugung durch die  $\delta$ -Quelle und direkt nach einem Stoß erfahren.

Die Ergebnisse für die drei untersuchten Propagatoren finden sich in Abb. 3.5. Zunächst wird die Dichte in 3.4 betrachtet. Für alle drei Propagatoren erkennt man eine Ähnlichkeit mit den feldfreien Ergebnissen aus Abb. 3.5a, jedoch sind die Dichteverteilungen links des Quellpunktes streng konvex, während sie rechts des Quellpunktes, bis auf die unmittelbare Umgebung des Quellpunktes, konkav sind und dementsprechend größer als links. Ursächlich hierfür ist offensichtlich das mit dem Feld verbundene Potential, an dem Linksläufer reflektiert werden, wodurch sie dann zu Rechtsläufern werden und weiter rechts zur Dichte beitragen<sup>6</sup>. Dies wird besonders deutlich, wenn man die Flüsse in Abb. 3.5b betrachtet. Durch die Reflexionen ist der Fluss nicht mehr punktsymmetrisch zum Ursprung, sondern nach oben, also zu einem Fluss nach rechts verschoben. Dadurch, dass nach links Reflexionen am Potential stattfinden und nach rechts nicht, verlassen mehr Teilchen rechts das System als links. Abseits von  $z = 0$ , wo die Quelle lokalisiert ist, ist aber dennoch die Flussrichtung gegeben, was für die Korrektheit der Implementation spricht. Außerdem entspricht die Sprunghöhe am Quellort der Stärke der Quelle, wie die Kontinuitätsgleichung es verlangt.

Die Unterschiede der drei Kurven zueinander liegen in den unterschiedlichen Energieabhängigkeiten der mittleren freien Weglängen begründet. Für  $\iota^{\text{HL},1}$ , also die blaue Linie, ist die mittlere freie Weglänge energieunabhängig, was bedeutet, dass Linksläufer, die Energie auf ihrem Weg verlieren, und Rechtsläufer, die Energie gewinnen, im Mittel die gleiche Strecke zurücklegen, bevor sie streuen. Für  $\iota^{\text{HL},0}$  hingegen ist diese Symmetrie gebrochen; die Rechtsläufer haben größere mittlere freie Weglängen als die Linksläufer. Dadurch werden aus mehr Linksläufern Rechtsläufer als andersherum und der Fluss ist im Vergleich zu  $\iota^{\text{HL},1}$  weiter ins Positive verschoben. Dies führt auch dazu, dass die Dichte sich weiter nach rechts verschiebt. Im Mittel ist die Dichte für  $\iota^{\text{HL},0}$  jedoch geringer als für  $\iota^{\text{HL},1}$ , was daran liegt, dass die Rechtsläufer, von denen es ja mehr gibt, seltener stoßen und somit schneller das System verlassen und nicht mehr zur Dichte beitragen. Für  $\iota^{\text{HL},2}$  ergibt sich ein umgekehrtes Bild. Die Rechtsläufer legen eine kürzere Strecke zwischen zwei Stößen zurück als die Linksläufer, wodurch sich der Fluss mehr in Richtung der Linksläufer verschiebt, wenn auch der Fluss nach rechts durch die Streuung am Potential noch überwiegt. Da der Fluss näher am symmetrischen Fall ohne Feld ist, ist auch die Dichteverteilung symmetrischer als für  $\iota^{\text{HL},0}$  und  $\iota^{\text{HL},1}$ . Da Teilchen, die das System rechts verlassen, im Mittel häufiger gestreut wurden als für die anderen Fälle, befinden sich mehr Teilchen im System und die mittlere Teilchendichte ist erhöht.

---

<sup>6</sup>Das Feld sorgt also auch für Orte, die deutlich weiter als eine mittlere freie Weglänge von der Quelle entfernt liegen, für ein qualitativ von der diffusiven Lösung abweichendes Verhalten.

### 3.2.3 Transport mit Grenzfläche

Untersucht werden nicht nur Systeme, in denen durchweg Feld vorhanden oder nicht vorhanden ist, sondern auch Systeme mit feldfreien und feldbehafteten Raumzonen. Von Interesse sind insbesondere Metall-Halbleiter-Systeme in einem äußeren elektrischen Feld, wobei die Metallschicht wegen der Abschirmung feldfrei und die Halbleiterschicht feldbehaftet sein wird. Daher muss die Implementation auch für ein System mit einer Grenzschicht zwischen einer feldfreien Schicht und einer mit einem Feld getestet werden. Hierzu betrachtet man eine monoenergetische  $\delta$ -Quelle in einem System aus zwei planaren Schichten mit den gleichen Materialeigenschaften  $(\tau(E), v(E))$  und einer nicht-reflektierenden Grenzfläche zwischen ihnen. Die eine Schicht wird nun ohne Feld berechnet, während in der anderen die Propagatoren mit externem Feld berechnet werden. Da bei der Berechnung der Propagatoren Terme proportional zu  $\frac{1}{\alpha}$  auftreten, ist es nicht möglich, die Stärke des Feldes (und damit  $\alpha$ ) auf null zu setzen. Trotzdem ist es möglich, so kleine Felder zu betrachten, dass die Dichte an der Grenzfläche – da keine Reflexionen auftreten und die durch das Feld hervorgerufenen Geschwindigkeitsunterschiede vernachlässigbar sind – nahezu stetig ist. Die Ergebnisse der numerischen Rechnung weisen jedoch einen nicht zu vernachlässigenden Sprung der Dichte an der Grenzfläche, dessen Höhe sich kaum ändert, wenn man die Stärke des Feldes variiert.

Die Ursache hierfür erkennt man, wenn man sich die berechneten Matrixelemente anschaut. Dazu stellt man für einen festen Quellort  $z[i_Q]$  die Differenz der Matrixelemente zweier benachbarter Zielorte grafisch dar, also beispielsweise  $ME_n[i|i_Q] - ME_n[i-1|i_Q]$ . Dies entspricht, bis auf einen Faktor, der (numerischen) Ableitung der Matrixelemente. Man erkennt, dass die Ableitung überall stetig ist, nur an der Grenzfläche gibt es einen Peak. Da der vorherige Abschnitt gezeigt hat, dass die Implementation für schwache Felder ohne Grenzfläche Ergebnisse liefert, die sehr nah an den Ergebnissen ohne Feld liegen, deutet dieser Peak darauf hin, dass die Matrixelemente in der Schicht mit Feld zwar relativ zueinander genau genug berechnet sind und durch die Korrekturfaktoren (die in Anhang C.1 eingeführt werden) ohne Grenzschicht auch die Teilchenerhaltung sicherstellen, sie jedoch absolut systematisch zu klein berechnet werden. Es ist also zu vermuten, dass die Behebung der Singularitäten bei der numerischen Integration (vgl. Anhang C.2) nicht ausreicht, um hinreichend exakte Ergebnisse zu erzielen.

Dieses Problem kann man umgehen, indem man die Differentiation in  $\varphi = -\frac{\partial\phi}{\partial z}$ , die den Fluss mit dem Flusskern verknüpft, nicht analytisch, sondern numerisch ausführt. Durch das numerische Ausführen der Ableitung kann es zu numerischem Rauschen kommen, das die Resultate verschlechtern kann. Die Linearität von (2.65) erlaubt es jedoch, die Ableitung auf die Matrixelemente zu ziehen und lediglich einmal zu berechnen, was einer Rauschverstärkung entgegenwirkt. Konkret bedeutet dies, dass man statt direkt die Matrixelemente  $ME_n[i|i'; j, k]$  zu berechnen, zunächst die Matrixelemente  $ME_\phi$  für den Fluss berechnet. Diese berechnet man ebenfalls vom Gitterpunkt  $[i', j, k]$  ausgehend, jedoch nicht zum Punkt  $z[i]$ , sondern zu den Rändern der Gitterzelle hin, wie in Abb. 3.3 durch die blauen Pfeile dargestellt. Da diese

Randpunkte genau zwischen zwei Gitterpunkten liegen, ist es sinnvoll, sie mit  $z[i - \frac{1}{2}]$  bzw.  $z[i + \frac{1}{2}]$  zu bezeichnen, womit die Matrixelemente für die Dichte durch

$$\text{ME}_n[i|i'; j, k] = \text{ME}_\phi \left[ i - \frac{1}{2} | i'; j, k \right] - \text{ME}_\phi \left[ i + \frac{1}{2} | i'; j, k \right] \quad (3.19)$$

gegeben sind. Dies lässt sich folgendermaßen physikalisch interpretieren: Das Matrixelement  $\text{ME}_\phi[i - \frac{1}{2} | i'; j, k]$  gibt an welcher Anteil der Dichte aus der Gitterzelle  $[i', j, k]$  das Diskretisierungsintervall um  $z[i]$  herum erreichen und  $\text{ME}_\phi[i + \frac{1}{2} | i'; j, k]$  gibt an, welcher Anteil das Intervall wieder verlässt. Die Differenz der beiden Werte verbleibt im Intervall und beschreibt somit  $\text{ME}_n[i|i'; j, k]$ . Durch diese Methode ist auch die Teilchen- und damit die Flusserhaltung sichergestellt. Die Korrekturfaktoren aus Anhang C.1 werden nicht mehr benötigt.





# Kapitel 4

## Planares

# Metall-Halbleiter-Schichtsystem

### 4.1 System und Parameter

Das untersuchte System besteht aus einem ferromagnetischen Metall (Nickel) und einem Halbleiter (Silizium). Das Metall kann durch ein externes Magnetfeld magnetisiert werden, sodass eine Spin-Orientierung (Majorität) häufiger vorkommt als die andere (Minorität). Im Halbleiter kann keine Magnetisierung vorliegen. Beide Materialien werden durch die Materialeigenschaften  $\tau$ ,  $v$  sowie die Übergangswahrscheinlichkeiten bei Stößen charakterisiert. Die Bestimmung dieser Parameter erfolgt in Abs. 4.1.2. Außerdem ist es vonnöten, nicht nur die Eigenschaften der separierten Materialien, sondern auch die des Kontaktes der beiden Materialien zu betrachten, was entscheidend für die Reflexion an der Grenzschicht ist. Der Ni-Si-Übergang ist ein sogenannter Schottky-Übergang [34] und wird in Abs. 4.1.1 beschrieben.

Das so beschriebene System wird mit den Methoden aus Kapitel 3 numerisch berechnet. Hierbei wird ein Gitter verwendet, dessen räumliche Achse aus 500 Gitterpunkten besteht, von denen sich 50 im Metall und 450 im Halbleiter befinden, sodass die Auflösung im Metall stark erhöht ist. Auch die Energiediskretisierung erfolgt in zwei Schrittweiten. Von 0 bis 4 eV wird in Schritten von 0,1 eV diskretisiert, darüber werden noch drei Diskretisierungsintervalle von je 1 eV berücksichtigt, sodass insgesamt 43 Diskretisierungsschritte bis zu einer maximalen Energie von 7 eV berechnet werden. Das Abbruchkriterium wurde gemäß (3.1) mit  $c_{\text{Abbruch}} = 1 \cdot 10^{-5}$  implementiert. Die Gesamtlänge des Systems wird auf 4  $\mu\text{m}$  festgelegt. Dieser Wert wurde gewählt, um Transport über eine möglichst weite Strecke zu untersuchen, bei dem jedoch der Energiegewinn der Teilchen durch das nicht konstante Potential numerisch noch erfasst wird. Wählt man eine deutlich kürzere Strecke, sind Stöße im Halbleiter kaum noch relevant und man untersucht einen nahezu ballistischen Transport; wählt man die Strecke deutlich größer, erreichen – wie in Abschnitt 3.2.1 beschrieben – auch bei den höheren hier untersuchten Spannungen nicht mehr genügend Teilchen das nächste Energieintervall, bevor sie streuen, und

die Änderung der Energie der Teilchen auf ihren Trajektorien wird massiv unterschätzt. Die Ferromagnet-Schicht ist, wenn nicht anders erwähnt, 10 nm breit.

#### 4.1.1 Der Schottky-Übergang

Der Potentialverlauf an der Grenzfläche, der ursächlich für die Reflexion ist, ist maßgeblich durch die Lage des chemischen Potentials relativ zur Vakuum-Energie ( $E_{\text{Vakuum}}$ ) bestimmt. Die Energie, die ein Elektron benötigt, um vom chemischen Potential aus sich aus dem Material zu lösen (also  $E_{\text{Vakuum}}$  zu erreichen), wird Austrittsarbeit genannt und wird hier mit  $e\Phi_{\text{M}}$  bzw.  $e\Phi_{\text{HL}}$  bezeichnet (vgl. Abb. 4.1a). Es soll hier n-Silizium betrachtet werden, wobei die Dotierung so schwach gewählt werden kann, dass sie keinen bedeutenden Einfluss auf andere Eigenschaften, wie z. B. die Streurate hat und somit sonst vernachlässigt werden kann. Entscheidend ist nun, dass die Austrittsarbeit von Ni (5,22(4) eV [35]) größer ist als die von n-Si<sup>1</sup> (5,05(3) eV [36]). Hierdurch entsteht ein blockierender Kontakt („Schottky-Kontakt“), während beim umgekehrten Fall ein leitender („Ohmscher“) Kontakt entsteht [37].

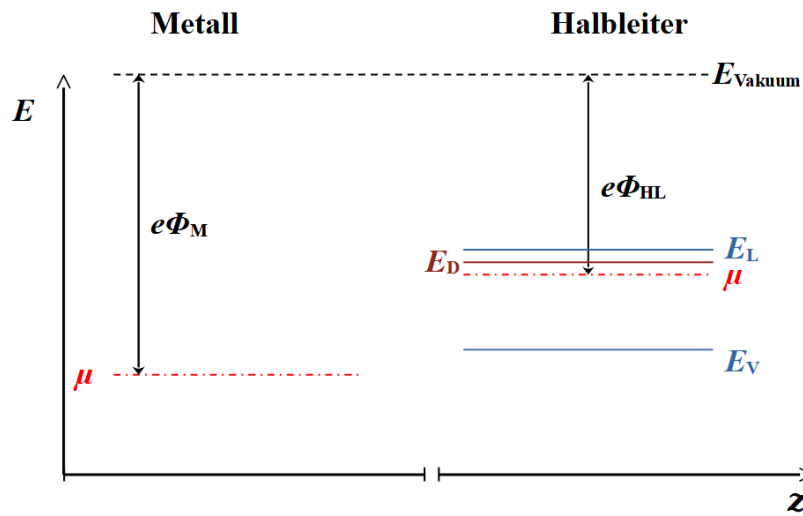
Bringt man das Metall und den Halbleiter zusammen (Abb. 4.1b), muss im thermischen Gleichgewicht das chemische Potential  $\mu$  konstant sein. Dies führt dazu, dass die Bänder (Valenzbandoberkante  $E_{\text{V}}$ , Leitungsbandunterkante  $E_{\text{L}}$  und Donator-Niveau  $E_{\text{D}}$ ) sich wie dargestellt verbiegen. Dies geht einher mit der Ausbildung einer Raumladungszone, die dadurch entsteht, dass Elektronen aus dem Valenzband des Halbleiters in das Leitungsband des Metalls diffundieren [38]. Folgt man der bisherigen Argumentation und der Skizze, wäre anzunehmen, dass die Höhe der Potentialbarriere  $e\Phi_{\text{B}}$  sich aus der Differenz der Austrittsarbeiten berechnen ließe. Experimentelle Befunde zeigen jedoch, dass dies nicht der Fall ist [37, 39]. Auch hier wird deshalb eine experimentell bestimmte Barrierenhöhe, nämlich  $e\Phi_{\text{B}} = 0,86$  eV [40] verwendet, um den Reflexionskoeffizienten  $R_1$  zu bestimmen.

Auch ohne die Potentialbarriere gibt es eine Energiedifferenz von  $E_{\text{L}} - \mu \approx 0,2$  eV zwischen der Leitungsbandunterkante im Silizium und der in Nickel. Fügt man nun eine externe Elektronenquelle im Nickel hinzu und beachtet, dass auf der linken Seite eine totalreflektierende Grenzsicht ist, stellt sich ein anderer Gleichgewichtszustand als das thermische Gleichgewicht ein. Die injizierten Elektronen, deren Energie nicht ausreicht, um das Leitungsband im Silizium zu erreichen, werden an der Grenzfläche reflektiert und sind somit im Metall gefangen (vgl. die roten Pfeile in Abb. 4.1c). Dies geschieht so lange, bis alle Zustände bis zu  $E_{\text{L}}$  besetzt sind. Daraufhin können in diesen Energiebereich keine Elektronen mehr injiziert werden und der Transport findet nur oberhalb dieser Energie statt. Die Potentialdifferenz hat somit keinen Einfluss mehr auf den Transport, und Teilchen gewinnen oder verlieren keine potentielle Energie, wenn sie die Grenzfläche passieren. Alle folgenden Energieangaben<sup>2</sup> sind daher in Relation zur Leitungsbandunterkante im Silizium zu verstehen.

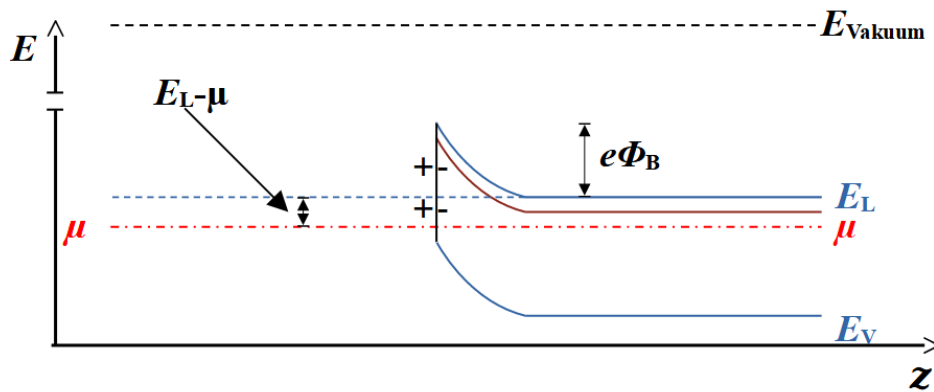
---

<sup>1</sup>Für p- oder undotiertes Silizium gilt dies ebenfalls [36]

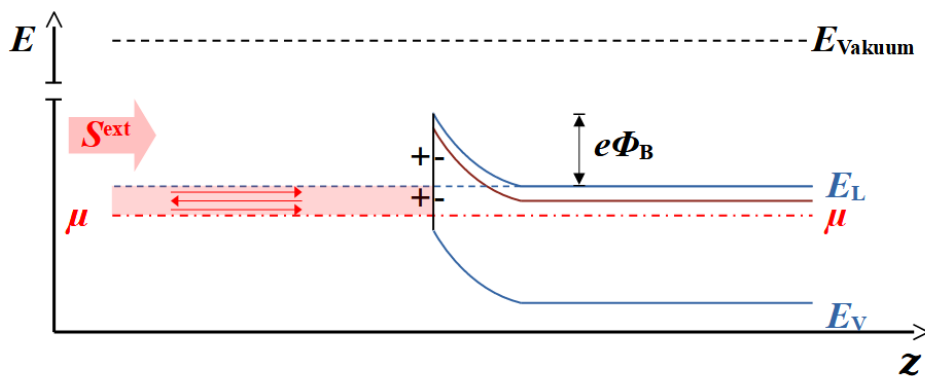
<sup>2</sup>Im Ni führt dies natürlich zu einer Energieverschiebung, die aber bei der Bestimmung der Materialparameter als vernachlässigbar klein angesehen werden wird.



(a) Energien im Metall und im Halbleiter, bevor sie in Kontakt miteinander gebracht werden.



(b) Schottky-Kontakt im thermischen Gleichgewicht.



(c) Schottky-Kontakt im Gleichgewicht mit einer externen Quelle.

**Abbildung 4.1:** Schematische, nicht maßstabsgetreue Darstellung eines Schottky-Kontaktes im Gleichgewicht. Für weitere Erläuterungen siehe den Haupttext.

Der Reflexionskoeffizient  $R_1$  an der Grenzfläche wird als richtungsunabhängig angenommen, auch wenn dies eine starke Näherung ist [41, 42]. Eine Abhängigkeit vom Richtungswinkel  $\vartheta$  ließe sich aber einfach in den Formalismus implementieren, in dem dann die  $\vartheta$ -Integration nicht nur über die Flusskerne, sondern auch über die Reflexionskoeffizienten ausgeführt werden müsste. Auch die Energieabhängigkeit des Reflexionskoeffizienten wird nicht quantenmechanisch berechnet, sondern wird als linear angenommen:

$$R_1(E) = \begin{cases} 1 - E, & E < e\Phi_B \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}. \quad (4.1)$$

Bei  $z_0$  wird, wie bereits erwähnt, eine Totalreflexion ( $R_1 = 1$ ) und bei  $z_2$  wird ein idealer Kontakt angenommen.

## 4.1.2 Materialeigenschaften

### Geschwindigkeiten

Es wird der Transport von heißen Elektronen, also Elektronen, die sich relativ hoch im Band befinden, untersucht. Deshalb wird von einer freien Elektronennäherung ausgegangen und alle Geschwindigkeiten, sowohl im Nickel als auch im Silizium, werden gemäß

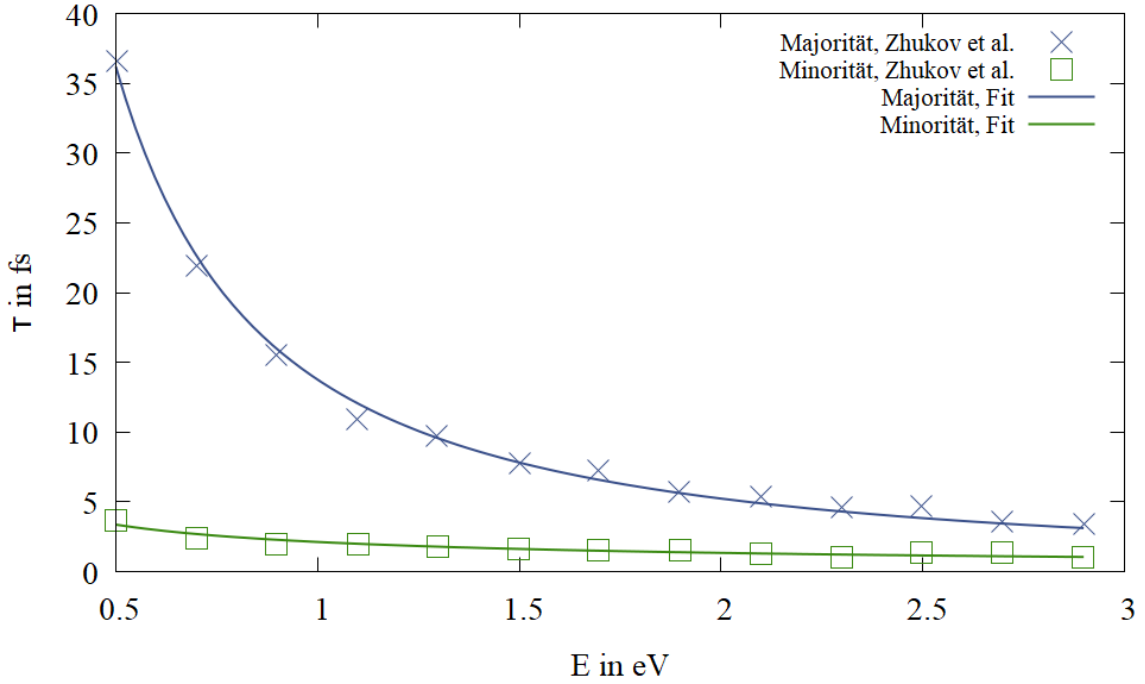
$$v(E) = \sqrt{\frac{2}{m_e} E} \quad (4.2)$$

berechnet mit der freien Elektronenmasse  $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31}$  kg.

### Lebensdauern

**In Nickel** treten zwei relevante Streumechanismen auf: die inelastische Elektron-Elektron-Streuung und elastische Streuung mit Verunreinigungen. Die Lebensdauern für die Elektron-Elektron-Streuung wurden [43] entnommen und dann an die Funktion  $\tau_{0,\text{in}}(\sigma, E) = \tau_{0,\text{in}}^{\text{Maj/Min}} \cdot \left(\frac{E}{\text{eV}}\right)^\gamma$  gefittet. Gefunden wurden für den Majoritätsspin  $\tau_{0,\text{in}}^{\text{Maj}} = 13,76(22) \cdot 10^{-15}$  s und  $\gamma = -1,395(29)$  und für den Minoritätsspin  $\tau_{0,\text{in}}^{\text{Min}} = 2,124(66) \cdot 10^{-15}$  s und  $\gamma = -0,664(56)$  (vgl. Abb. 4.2). Die elastische Lebensdauer wurde, Ref. [32] folgend, als konstant für beide Spin-Orientierungen angenommen, nämlich  $\tau_{0,\text{el}} = 50$  fs. Die aus diesen beiden Prozessen resultierende Lebensdauer erhält man, indem man die Streuraten addiert [44], also

$$\frac{1}{\tau_0(\sigma, E)} = \frac{1}{\tau_{0,\text{in}}(\sigma, E)} + \frac{1}{\tau_{0,\text{el}}}. \quad (4.3)$$



**Abbildung 4.2:** Aus ab-initio Methoden berechnete [43] und daran gefittete Lebensdauern für Ni, unterschieden nach Majorität- und Minorität-Spin-Orientierung.

**In Silizium** gibt es nur einen relevanten Streumechanismus, nämlich die Streuung mit optischen Phononen. Hierbei ist jedoch zwischen der Absorption und der Emission von Phononen zu unterscheiden. Die jeweiligen Streuraten sind [45]

$$\frac{1}{\tau_1^a} = \frac{r_\varepsilon \sqrt{\frac{m}{2}} e^2 \omega_0 n_{\text{op}}}{4\pi \hbar \sqrt{E}} \ln \left( \frac{\sqrt{1 + \hbar\omega_0/E} + 1}{\sqrt{1 + \hbar\omega_0/E} - 1} \right) \quad (4.4)$$

$$\frac{1}{\tau_1^e} = \frac{r_\varepsilon \sqrt{\frac{m}{2}} e^2 \omega_0 (1 + n_{\text{op}})}{4\pi \hbar \sqrt{E}} \ln \left( \frac{1 + \sqrt{1 - \hbar\omega_0/E}}{1 - \sqrt{1 - \hbar\omega_0/E}} \right), \quad (4.5)$$

wobei  $n_{\text{op}}$  die Besetzungszahl der optischen Phononen und  $\hbar\omega_0$  die Phononenenergie ist. Außerdem gilt  $r_\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0}$  mit den Permittivitäten bei hohen Frequenzen bzw. im statischen Feld. Die zur Berechnung notwendigen Parameter wurden [46–48] entnommen. Für die Phononenbesetzungszahl wurden der Wert der Bose-Einstein-Verteilung bei Raumtemperatur ( $n_{\text{op}} \approx 0,31$ ) angenommen. Die so berechneten Streuraten sind in Abb. 4.3 dargestellt. Um die  $z$ -Integration im Propagator analytisch durchführen zu können, wurde nicht die exakte Streuraten verwendet,

sondern die gesamte Streurrate an die Funktion  $\tau_1(E) = aE^2 + bE + c + \frac{d}{E+0,05 \text{ eV}}$  gefittet, was ebenfalls in Abb. 4.3 dargestellt ist. Aus dem Fit erhielt man die Parameter

$$\begin{aligned} a &= 7,78(89) \cdot 10^{10} \frac{1}{\text{s eV}^2} \\ b &= -7,60(68) \cdot 10^{11} \frac{1}{\text{s eV}} \\ c &= 3,22(12) \cdot 10^{12} \frac{1}{\text{s}} \\ d &= -1,43(17) \cdot 10^{11} \frac{\text{eV}}{\text{s}} \end{aligned}$$

mit denen man die zur Berechnung des Propagators notwendige Funktion  $\iota^{\text{HL},3}(z)$  berechnen kann. Das Ergebnis der Integration ist etwas länglich, soll hier aber der Vollständigkeit halber angegeben werden. Man erhält

$$\begin{aligned} \iota^{\text{HL},3}(z) &= \sqrt{\beta x + V} \left[ \frac{2A}{15\beta^3} (3\beta^2 x^2 - 4\beta V x + 8V^2) \right. \\ &\quad \left. + \frac{2B}{3\beta^2} (\beta x + 2V) + \frac{2C}{\beta} \right] \Bigg|_{x=0}^{z-z_Q} \\ &\quad - \frac{2d}{\alpha\sqrt{-s}} \arctan \sqrt{\frac{s + \gamma y}{-s}} \Bigg|_{y=E_s+0,05\text{eV}-\alpha(z-z_Q)}^{E_s+0,05\text{eV}} \end{aligned} \quad (4.6)$$

mit der Startenergie  $E_s = \frac{m}{2}v^2$  sowie

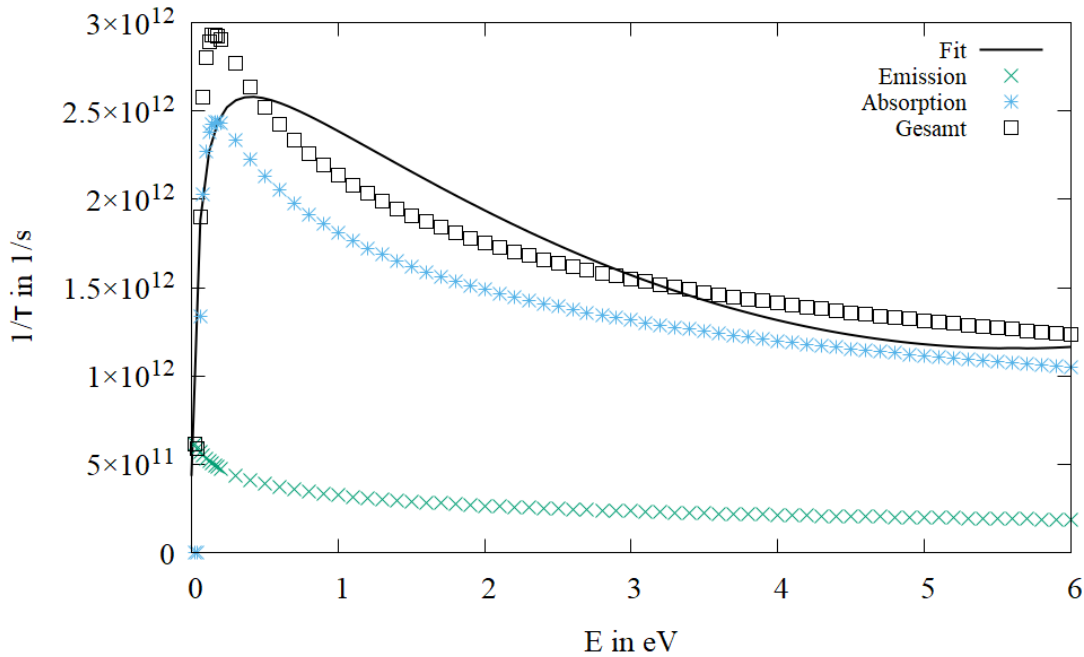
$$\begin{aligned} A &= a\alpha \\ B &= -2aE_s\alpha + b\alpha \\ C &= E_s^2 a + bE_s + c \\ V &= v^2 \cos^2 \vartheta \\ \beta &= \frac{-2}{\alpha m} \\ \gamma &= \frac{2}{m} \\ s &= V - \gamma(E_s + 0,05 \text{ eV}). \end{aligned}$$

### Übergangswahrscheinlichkeiten

**In Nickel** ist die elastische Streuung ebenfalls Spin-erhaltend. Es gilt also

$$p_{\text{el}}(\sigma, E|\sigma', E') = \delta(E - E')\delta_{\sigma\sigma'}. \quad (4.7)$$

Für die inelastische Streuung hingegen ist der Spin nicht erhalten. Dies liegt daran, dass bei der Elektron-Elektron-Streuung zwei Elektronen beteiligt sind, die nach dem Streuprozess beide



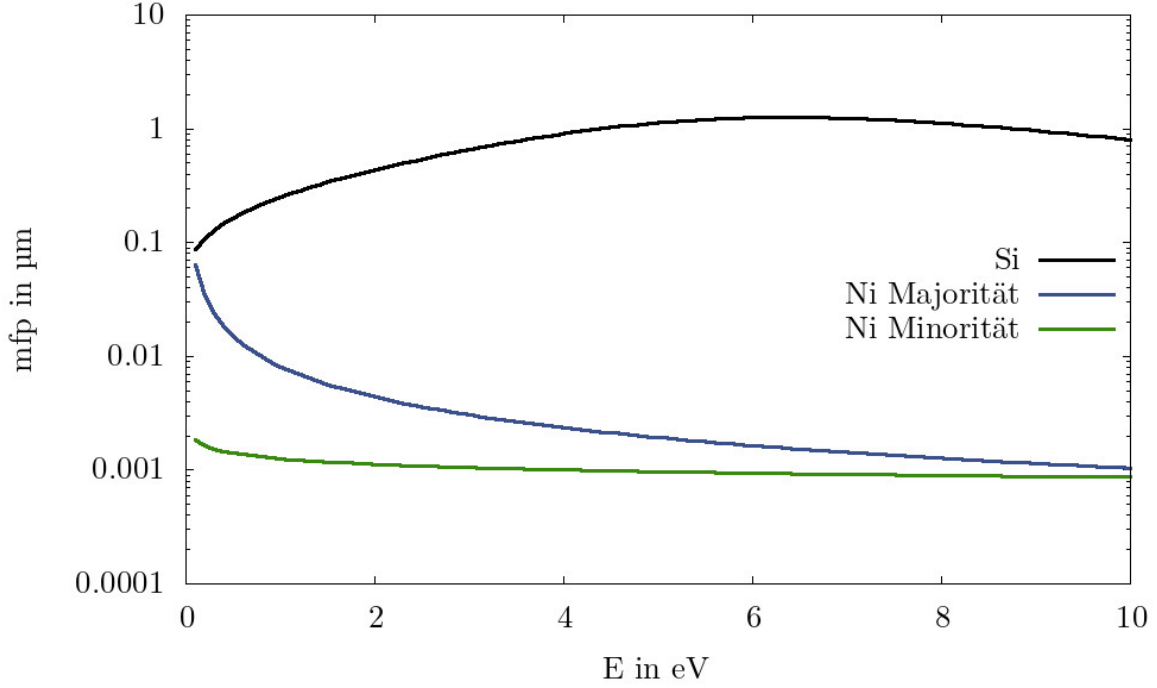
**Abbildung 4.3:** Berechnete und gefittete Streuraten für Elektron-Phonon-Streuung in Silizium

angeregt sind. Eines der beiden Elektronen war bereits vorher im Leitungsband und hat zum Transport beigetragen, während das andere im Valenzband war. Dadurch dass ein Elektron aus dem Valenzband angeregt wird, entsteht dort ein Loch, was wiederum zwei Dinge bedeutet: Zum einen befindet sich das Valenzband nicht mehr im Gleichgewicht, zum anderen können die Elektronen nun mit dem Loch rekombinieren. Es ist nun adäquat anzunehmen, dass die Elektron-Loch-Rekombination sehr viel wahrscheinlicher ist als jeder andere Streuprozess [43], sodass sehr schnell nach dem Entstehen des Loches ein Elektron aus dem Leitungsband mit ihm rekombiniert und nicht mehr zum Transport beiträgt. Außerdem beginnt ein Diffusionsprozess im Valenzband, der im stationären Fall ein neues Gleichgewicht erzeugt. Hier wird angenommen, dass dieses neue Gleichgewicht nicht zu sehr vom alten abweicht und somit die Streuraten und Übergangswahrscheinlichkeiten nicht beeinflusst. Das Streuen und anschließende Rekombinieren, wird nun genähert<sup>3</sup>, indem man nur eines der beiden Elektronen nach der Streuung berücksichtigt, das dementsprechend eine Energie zwischen 0 und der Energie des ursprünglichen Elektrons besitzt. Außerdem ist das Elektron mit 50%-iger Wahrscheinlichkeit ein Elektron, das vor dem Stoß im Valenzband war und eine zufällige Spin-Orientierung hat. Dies bedeutet, dass mit einer Wahrscheinlichkeit von 25% ein Spin-Flip geschieht. Die aus diesen Überlegungen folgende Übergangswahrscheinlichkeit ist

$$p_{\text{el}}(\sigma, E|\sigma', E') = \frac{1}{E'}(0,75 \cdot \delta_{\sigma\sigma'} + 0,25 \cdot \delta_{\sigma\bar{\sigma}'}), \quad (4.8)$$

wobei  $\bar{\sigma}'$  die entgegengesetzte Spin-Orientierung von  $\sigma'$  bezeichnet.

<sup>3</sup>Dies weicht vom Vorgehen in z. B. [18, 49] ab.



**Abbildung 4.4:** Die mittleren freien Weglängen (mfp) in den beiden Materialien, in Ni unterschieden nach der Spinpolarisierung.

Die daraus resultierende gesamte Übergangswahrscheinlichkeit erhält man, indem die beiden Übergangswahrscheinlichkeiten, mit den dazugehörigen Streuraten gewichtet, addiert werden. Man erhält

$$p_0(\sigma, E|\sigma', E') = \frac{\tau_{0,\text{in}}}{\tau_{0,\text{in}} + \tau_{0,\text{el}}} p_{\text{el}}(\sigma, E|\sigma', E') + \frac{\tau_{0,\text{el}}}{\tau_{0,\text{in}} + \tau_{0,\text{el}}} p_{\text{in}}(\sigma, E|\sigma', E'), \quad (4.9)$$

wobei alle Lebensdauern bei  $(\sigma', E')$  berechnet werden müssen.

**In Silizium** lassen sich die Übergangswahrscheinlichkeiten faktorisieren in einen Anteil, der den Übergang in der Energie und einen, der die Spin-Flip-Wahrscheinlichkeit beschreibt. Bei der Phonon-Emission (-Absorption) verlieren (gewinnen) die Elektronen genau die Phononenenergie  $\hbar\omega_0$ . Der Energieanteil der Übergangswahrscheinlichkeit ist somit

$$p_1^a(E|E') = \delta(E - E' - \hbar\omega_0) \quad (4.10)$$

$$p_1^e(E|E') = \delta(E - E' + \hbar\omega_0). \quad (4.11)$$

Betrachtet man die Streuraten (4.4) und (4.5), sieht man, dass sie sich nur durch den Logarithmus und den Faktor  $(1 + n_{\text{op}})$  bzw.  $n_{\text{op}}$  unterscheiden. Für fast alle relevanten Werte sind die Unterschiede im Logarithmus vernachlässigbar im Vergleich zu dem Unterschied der



beiden Faktoren, weshalb es sinnvoll ist, hierüber die beiden Übergangswahrscheinlichkeiten zu gewichten. Daraus folgt der Ausdruck

$$p_1(E|E') = \frac{n_{\text{op}}}{1 + 2n_{\text{op}}} p_1^a(E|E') + \frac{1 + n_{\text{op}}}{1 + 2n_{\text{op}}} p_1^e(E|E') \quad (4.12)$$

für den Energieanteil. Der Spinanteil beinhaltet eine Spin-Flip-Wahrscheinlichkeit, die im Elliott-Yafet-Mechanismus begründet liegt. Die genauen, quantenmechanischen Ursachen für den Spin-Flip sollen hier nicht erörtert werden, stattdessen wird die Spin-Flip-Streureate [1]

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_S(E)} &= \left( \frac{\Delta}{E_g + \Delta} \right)^2 \left( \frac{E}{E_g} \right)^2 \frac{1}{\tau_1(E)} \\ &=: SF(E) \frac{1}{\tau_1(E)} \end{aligned} \quad (4.13)$$

angegeben, der den Zusammenhang mit der bisher verwendeten Impuls-Streureate angibt. Die Bandlücke  $E_g$  und die Spin-Orbit-Aufspaltung des Valenzbandes  $\Delta$  wurden [50] entnommen. Damit ist die Übergangswahrscheinlichkeit durch

$$p_1(\sigma, E|\sigma', E') = p_1(E|E') \begin{cases} SF(E); & \sigma \neq \sigma' \\ 1 - SF(E); & \sigma = \sigma' \end{cases} \quad (4.14)$$

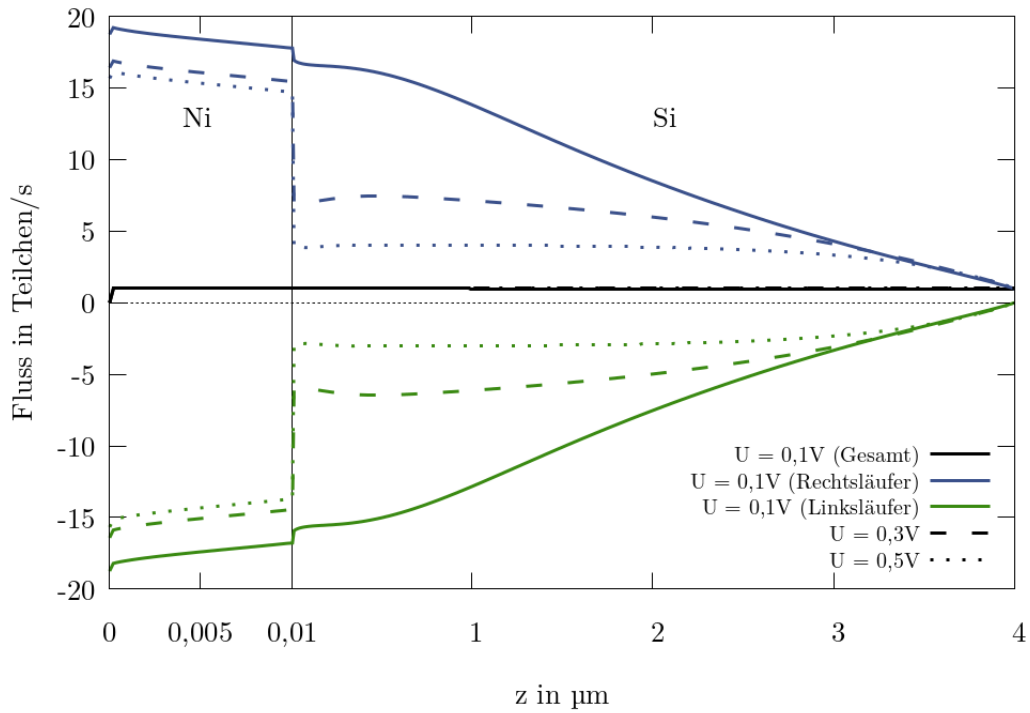
gegeben.

### Externe Quelle

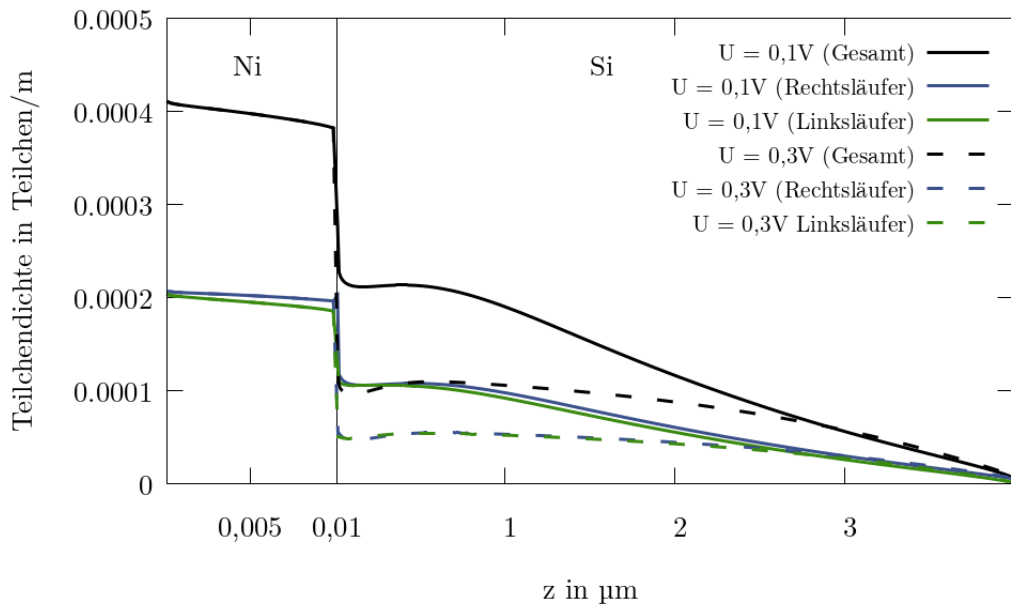
Die externe Quelle ist keiner realen Quelle nachempfunden, stattdessen wird – der leichteren Interpretierbarkeit der Ergebnisse wegen – die Quellstärke auf einen Wert von einem Teilchen pro Sekunde festgelegt. Die Quelle soll monoenergetisch sein und beide Spin-Orientierungen mit gleicher Wahrscheinlichkeit erzeugen. Die Anfangsenergie der Teilchen wird sich im zwanzigsten Energie-Diskretisierungsintervall befinden, was einer Energie von 1,9 - 2 eV entspricht. Die Quelle soll am linken Rand liegen und wird deshalb im am weitesten links liegenden Diskretisierungsintervall implementiert.

## 4.2 Spinunabhängiger Transport

In diesem Abschnitt soll der superdiffusive Transportmechanismus untersucht und detaillierter erläutert werden, insbesondere der Einfluss der Stöße und des Potentials auf die Teilchendichte und den Teilchenfluss. Der Spintransport soll zunächst nicht von Interesse sein. Dazu wird das System auf eine Spinorientierung beschränkt, in diesem Fall die Majoritäts-Spin-Orientierung im Metall. Dies bedeutet, dass die zweite Spin-Orientierung nicht mit berechnet wird und es daher auch zu keinen Spin-Umklapp-Prozessen kommen kann. Im Metall sind dementsprechend nur die Materialeigenschaften für die Majoritäts-Spin-Orientierung von Bedeutung und



(a) Der Fluss im Schichtsystem, aufgelöst nach Links- und Rechtsläufern für drei verschiedene externe Spannungen  $U$ . Die Farbkodierung für Links- und Rechtsläufer ist für die höheren Spannungen die gleiche wie die, die für  $U = 0,1 \text{ V}$  in der Legende angegeben wird.



(b) Die Dichte im System, aufgelöst nach Links- und Rechtsläufern für zwei verschiedene externe Spannungen  $U$ .

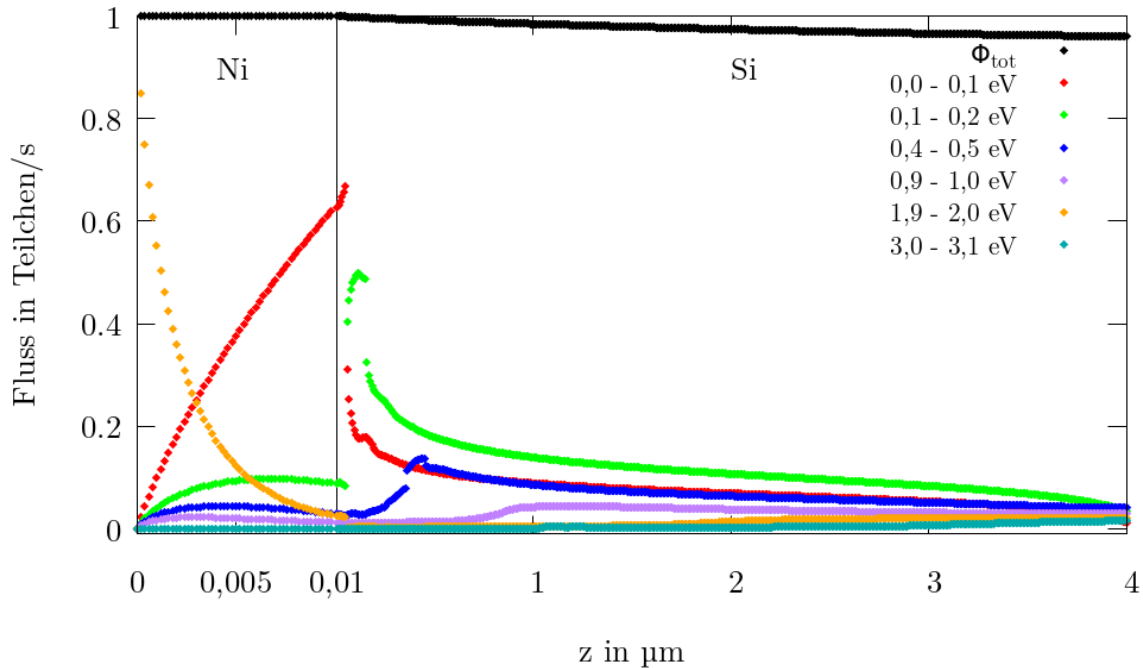
**Abbildung 4.5:** Dargestellt sind der Fluss und die Teilchendichte, aufgelöst nach Links- und Rechtsläufern für verschiedene externe Spannungen. Die Skalierung der horizontalen Achse ändert sich an der Grenzflächen zwischen Ni und Si. In Ni ist die Auflösung hundertmal so groß wie in Si.

die Übergangswahrscheinlichkeiten werden so angepasst, dass kein Teilchenverlust in den anderen Spinkanal auftritt.

Den Einfluss der Stöße auf den Transport kann man gut in Abb. 4.5 sehen. Dort sind die Teilchendichte und der Teilchenfluss, jeweils aufgelöst nach Links- und Rechtsläufern, sowie der Summe der beiden, dargestellt. Die Verläufe in Ni sind stark vergrößert dargestellt. Die Grenzfläche ist durch einen dünnen, schwarzen Strich gekennzeichnet, an dem sich auch die Skalierung der  $z$ -Achse ändert.

Zunächst wird der Fluss in Abb. 4.5a betrachtet. Man erkennt, dass der Gesamtfluss für beide Spannungen stets nahezu eins ist, außer am linken Rand im ersten Diskretisierungsintervall, wo die Quelle liegt. Dies liegt daran, dass wenn  $S^{\text{ext}} = 0$  gilt, aus der Kontinuitätsgleichung  $\phi(z) = \text{const.}$  folgt und – da die Quelle auf eins normiert ist – am rechten Rand auch ein Teilchen pro Sekunde das System verlassen muss. Dass der Fluss für  $U = 0, 1$  V und  $z > 1 \mu\text{m}$  etwas abfällt, liegt an einer unzureichenden Anzahl von Iterationsschritten. Fässt man das Abbruchkriterium strenger und berechnet somit mehr Iterationen, verkleinert sich die Abweichung des Flusses vom Idealwert eins. Da der Gesamtfluss positiv ist, ist der Fluss der Rechtsläufer logischerweise betragsmäßig größer als der der Linksläufer; beide werden jedoch – außer in der Nähe von  $z_0$  und  $z_1$  – betragsmäßig kleiner mit größer werdendem  $z$ . Am rechten Rand wird der Fluss der Linksläufer null, was daran liegt, dass von rechts keine Teilchen in das System eintreten und einen Fluss nach links verursachen könnten. Dort besteht der Fluss nur aus Rechtsläufern, ist also sehr geordnet. Je weiter man nach links geht, desto mehr Links- und Rechtsläufer gibt es, deren Fluss sich gegenseitig aufhebt, was einem ungeordneten Transport entspricht. Die Beträge der Flüsse der Links- und Rechtsläufer und damit die Unordnung des Transports wird zum einen im Metall größer, was durch die kürzeren Lebensdauern und dadurch erhöhte Anzahl von Stößen begründet ist, und zum anderen für kleinere Spannung größer. Letzteres ist der Tatsache geschuldet, dass durch eine größere Spannung mehr Teilchen am Potential reflektiert werden, wodurch aus Links- Rechtsläufer werden und der Fluss geordneter. Außerdem gilt es zu beachten, dass sich durch das Potential die Geschwindigkeit der Rechtsläufer erhöht und die der Linksläufer verringert. Dies würde eine betragsmäßige Erhöhung des Flusses der Rechtsläufer und eine Erniedrigung des Flusses der Linksläufer bedeuten. Damit aber der Gesamtfluss eins bleibt, muss ein Ausgleich hierfür bei den Dichten geschehen, was dazu führt, dass der Unterschied zwischen den Dichten der Links- und Rechtsläufer kleiner ist, als man vermuten könnte.

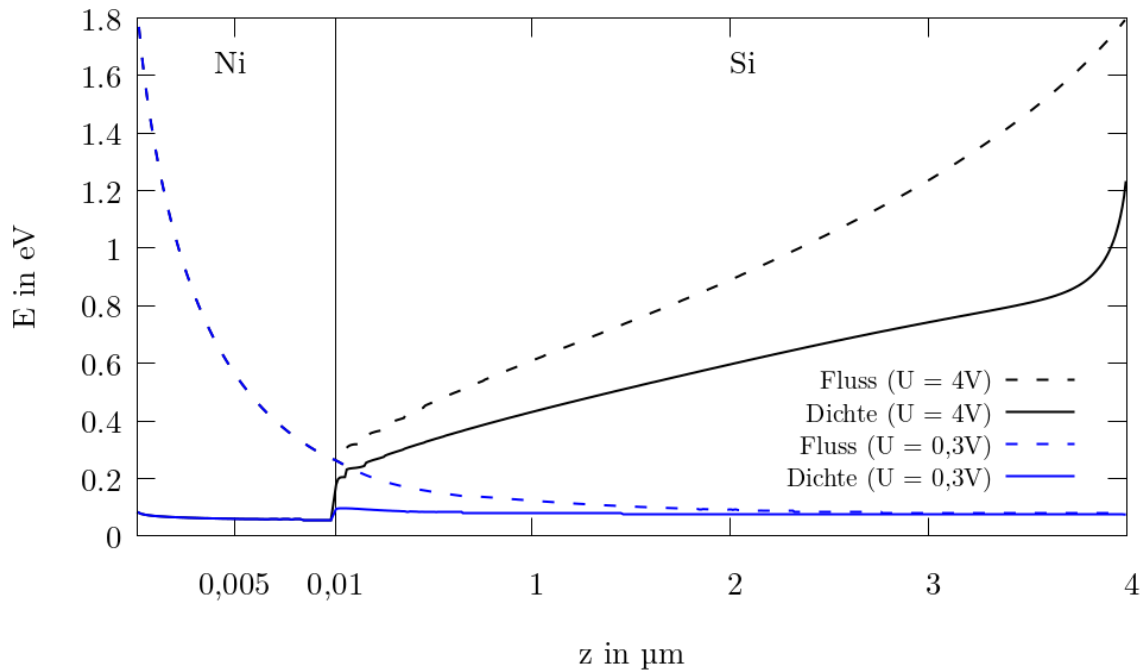
Die Teilchendichten (Abb. 4.5b) sind durch die gleichen Effekte wie die Flüsse bestimmt. Je größer die Unordnung ist, desto mehr Teilchen tragen nicht zum resultierenden Netto-Transport bei, weshalb die Teilchendichte erhöht ist. Da der Gesamtfluss ein Rechtsfluss ist, ist die Dichte der Rechtsläufer größer als die der Linksläufer. Auch hier wird deutlich, wie viele Teilchen nicht zum Netto-Transport beitragen, wenn man bemerkt, wie ähnlich die beiden Teilchendichten an den meisten Orten sind. Lediglich am rechten Rand wird die Linksläufer-Teilchendichte aus bekannten Gründen null und damit erheblich kleiner als die der Rechtsläu-



**Abbildung 4.6:** Der Teilchenfluss in ausgewählten Energieintervallen bei  $U = 4$  V.

fer. Bemerkenswert ist, wie flach der Dichteverlauf für  $U = 0,3$  V ist und wie nah die Dichten der Links- und Rechtsläufer zusammenliegen. Um genauer zu verstehen, wie die Fluss- und Dichteverläufe beeinflusst werden und wie sie daher zu deuten sind, ist einerseits der Einfluss der reflektierenden Grenzflächen zu beachten und andererseits ist es nützlich, einen Blick auf die Energieverteilung der Dichte und des Flusses zu werfen.

Die reflektierenden Grenzflächen sind ursächlich für den Sprung sowohl der Dichten als auch der Flüsse der Links- und Rechtsläufer an der Grenzfläche bei  $z_1 = 10$  nm. Elektronen, die von links die Grenzfläche erreichen und reflektiert werden, gelangen stets nach einer unbestimmten Zahl von Stößen zurück zur Grenzfläche, da sie aufgrund der Totalreflexion bei  $z_0 = 0$  das System nicht verlassen können. Elektronen, die die Grenzfläche von rechts erreichen und reflektiert werden, können hingegen das System verlassen und müssen nicht zur Grenzfläche zurückkehren, weswegen die Dichte und auch der Betrag der beiden Flüsse rechts der Grenzfläche geringer ist. Die Rückkehr wird durch die größere mittlere freie Weglänge für Rechtsläufer und die Reflexionen am Potential für Linksläufer noch weiter erschwert, was ursächlich für den größeren Sprung bei höheren Spannungen ist. Bildlich gesprochen ist der Fluss- und Dichtenunterschied durch Elektronen verursacht, die zwischen den beiden Grenzflächen bei  $z_0$  und  $z_1$  hin und her „pendeln“. Dies ist natürlich kein festes Ensemble von Elektronen: Es können Elektronen, die bereits mehrfach reflektiert wurden, bei  $z_1$  transmittieren und dafür andere Elektronen durch Stöße in den Energiebereich gelangen, in dem Reflexionen bei  $z_1$  möglich sind. Die Reflexionen bei  $z_1$  finden nur bei niedrigen Energien statt, wodurch der Flussunterschied an der Grenzfläche auch auf Elektronen niedriger Energie zurückzuführen ist.



**Abbildung 4.7:** Die mittlere Energie des Teilchenflusses und der Teilchendichte bei  $U = 4 \text{ V}$  sind über dem Ort  $z$  dargestellt.

Bei niedrigen Energien sind die Elektronen deutlich langsamer und tragen wenig zum Fluss bei<sup>4</sup>. Dadurch ist der Sprung in den Dichten relativ größer als der Sprung in den Flüssen der Links- und Rechtsläufer.

Nun sollen die Energieverteilung des Flusses und der Dichten diskutiert werden. Dazu wird zunächst Abb. 4.6 betrachtet, in der der Teilchenfluss in ausgewählten Energieintervallen dargestellt ist. Als Spannung wurde  $U = 4 \text{ V}$  gewählt, da der Effekt des Feldes bei höheren Spannungen besser zu erkennen ist als bei den Spannungen, die in Abb. 4.5 verwendet wurden. Im Metall erkennt man, dass der Gesamtfluss exakt eins ist, wie er es sein sollte, und dass der Fluss nahe der Quelle durch das Energieintervall (1,9 - 2,0 eV) dominiert ist, in dem auch die Quelle lokalisiert ist. Mit ansteigendem  $z$  werden zunehmend mehr Teilchen in niedriger Energieintervalle gestreut, in denen dann der Teilchenfluss stattfindet. In die Energieintervalle zwischen der Energie der Quelle und dem niedrigsten Intervall werden sowohl Elektronen aus höheren Energien hinein gestreut als auch welche in niedrigere heraus gestreut. Dadurch wächst der Teilchenfluss zunächst an, bevor er wieder kleiner wird. Lediglich im untersten Intervall wächst der Teilchenfluss kontinuierlich an, da dort nur Teilchen hinein, aber nicht heraus gestreut werden.

<sup>4</sup>Dass bei niedriger Energie eine höhere Teilchendichte notwendig ist, um den gleichen Fluss wie bei einer höheren Energie zu erzeugen, lässt sich bildlich als „Aufstauen“ der Teilchen verstehen: Damit gleich viele Teilchen pro Zeiteinheit eine Fläche durchqueren, müssen bei niedrigen Geschwindigkeiten die Teilchen näher zusammen liegen als bei hohen Geschwindigkeiten.

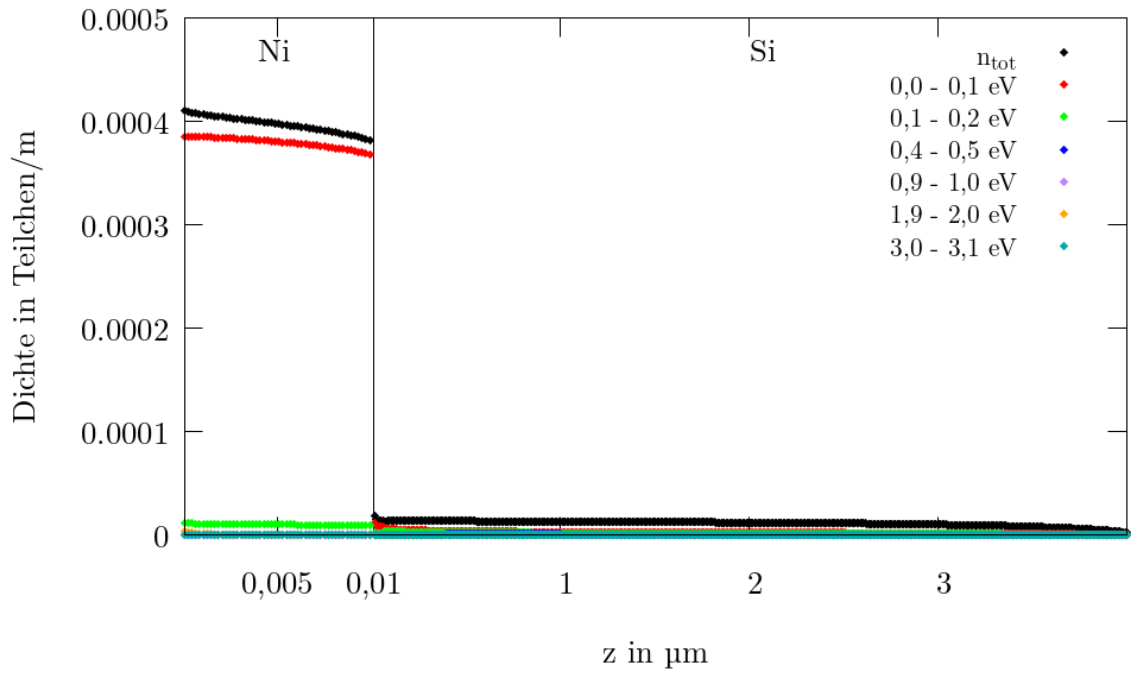
In Si bietet sich einem ein komplexeres Bild. Zuerst ist auffällig, dass der Gesamtfluss nicht konstant ist, sondern abfällt. Dies geschieht vermutlich aufgrund mangelnder Konvergenz des Programms. Der Flussverlust ist aber so moderat, dass die Ergebnisse noch als aussagekräftig betrachtet werden können. In der Nähe der Grenzfläche setzt sich zunächst das Verhalten, das in Ni zu beobachten war, fort. Durch die veränderte Skalierung sieht es so aus, als würden die Streuraten zunehmen, tatsächlich aber wächst der Fluss im niedrigsten Intervall um ein Vielfaches langsamer an. Nach einer kurzen Strecke (50 nm) fällt der Fluss im niedrigsten Energieintervall sprunghaft ab und der Fluss im darüber liegenden Intervall nimmt in ähnlichem Maße zu. Dies liegt daran, dass im Metall die Elektronen durch das Potential keine Energie gewinnen, dies geschieht erst im Halbleiter. Da im Halbleiter die Streuraten so niedrig sind, dass viele Elektronen auf dieser Strecke keine Energieverluste oder -gewinne aufgrund von Stößen erfahren, erreichen viele Elektronen an genau der Sprungstelle ein neues, nämlich das nächst höhere, Diskretisierungsintervall, wodurch der Fluss im niedrigsten Intervallen sprunghaft abnimmt und in den höheren Intervallen zunimmt. Die unterschiedlichen Sprunghöhen in den beiden niedrigsten Intervalle liegen daran, dass aus dem zweitniedrigsten Intervall natürlich auch Elektronen in das drittniedrigste Intervall gelangen. Solche Sprungstellen gibt es weiterhin in Abständen von 100 nm, jedoch werden die Sprünge mit größer werdendem  $z$  immer kleiner, bis sie nach einer gewissen Strecke (ca. 0,5  $\mu\text{m}$ ) nicht mehr wahrnehmbar sind. Der Grund dafür sind die Energiegewinne und -verluste durch Stöße, sodass der Ort, an dem Elektronen in ein höheres Energieintervall gelangen, zufälliger wird. Durch das Potential steigt die mittlere Energie des Flusses von links nach rechts kontinuierlich an (vgl. Abb. 4.7). Der Fluss in den höheren Intervallen nimmt zu und der in den niedrigeren Intervallen nimmt ab, bis am rechten Rand der Teilchenfluss nahezu gleichverteilt in den Energieintervallen ist.

Bei der Teilchendichte ergibt sich ein dem Teilchenfluss entsprechendes Bild. Auffällig ist hier besonders der Sprung an der Grenzfläche, der durch die Reflexionen verursacht war. Dass die Reflexionen bei niedriger Energie ursächlich sind, wird noch einmal deutlich, wenn man bemerkt, dass die mittlere Energie der Teilchendichte an der Grenzfläche sprunghaft ansteigt, während sie für den Teilchenfluss stetig ist. Auch lässt sich beobachten, dass die Dichten niedriger Energie weniger zum Teilchenfluss beitragen als die Dichten hoher Energie, denn zum einen ist die mittlere Energie der Dichte durchgängig niedriger als die des Flusses, und zum anderen ist der Anteil der Dichte im niedrigsten Intervall erheblich größer als ebenjener Anteil des Flusses. So ist das niedrigste Energieintervall für den Fluss nur bis  $z = 50$  nm dominanter als das darüberliegende, obwohl die Dichte im niedrigsten Energieintervall stets größer als die in allen anderen ist. Besonders eklatant ist dieses Verhalten am linken Rand, wo ein Großteil der Teilchen sich im niedrigsten Intervall befindet, dieses Intervall jedoch nichts zum Fluss beiträgt. Durch die reflektierende Grenzfläche heben sich die Flüsse von Links- und Rechtsläufern auf. Es sei jedoch noch einmal erwähnt, dass durch die Energiediskretisierung und die höhere Anzahl von Rechts- als von Linksläufern die mittlere Energie der Teilchen *systematisch unterschätzt* wird.

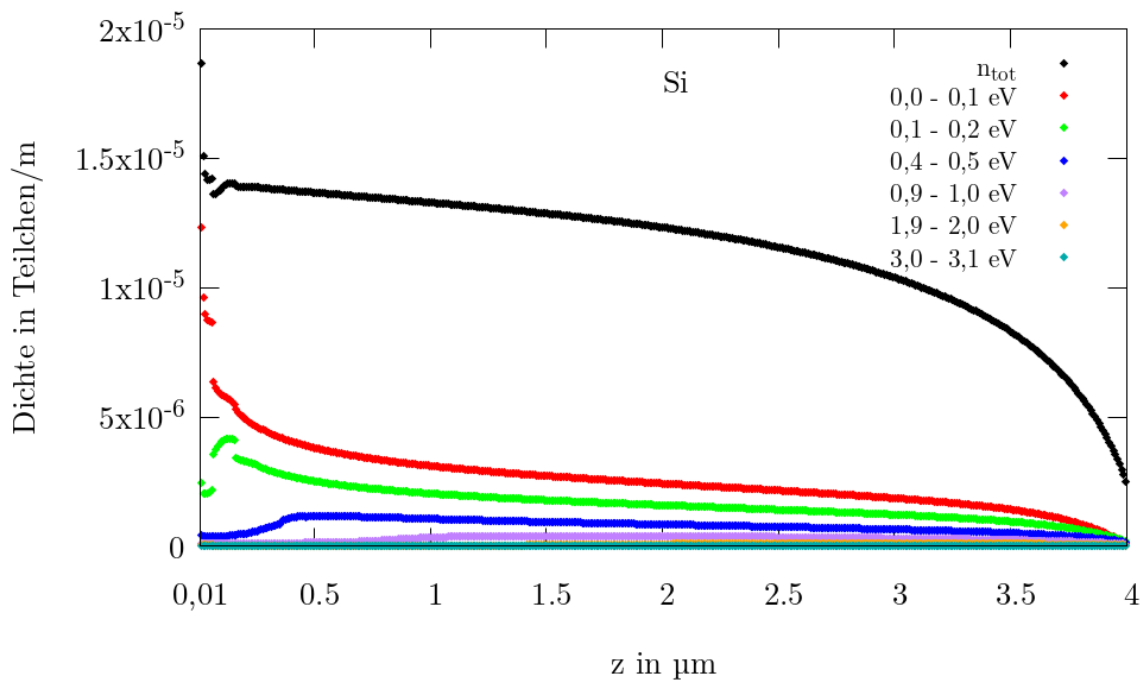
Diese Resultate gelten so natürlich nur für  $U = 4$  V. Für kleinere Spannungen können die Ergebnisse auch qualitativ von den hier gezeigten Ergebnissen abweichen, da für zu kleine Spannungen und gewisse Energiebereiche die Energieverluste durch Stöße die Energiegewinne durch das Potential überwiegen können. Dadurch erhöht sich die mittlere Energie des Flusses auch für große  $z$  nicht zwangsläufig. Dies gilt es zu bedenken, wenn im Folgenden beschrieben wird, welche Effekte die Form des Dichte- und des Flussverlaufs bestimmen.

Der wichtigste Effekt ist der bereits beschriebene Einfluss des idealen Kontaktes am rechten Rand des Systems. Durch den Kontakt treten keine Teilchen von rechts in das System ein, sodass es dort kein Linksläufer gibt und die Dichten dementsprechend gering sind. Es gibt umso mehr Linksläufer, je weiter man nach links geht, da es dort mehr rechtsliegende Quellorte gibt, die Linksläufer erzeugen können. Dies ist im Groben ursächlich für die nach rechts hin abfallende Dichte und die damit verbundenen betragsmäßig kleiner werdenden Links- und Rechtsflüsse. Ein weiterer Faktor sind die Reflexionen am Potential, die den Fluss ordnen und somit die Dichten kleiner werden lassen. Dieser Effekt wird mit zunehmender Spannung stärker, jedoch mit zunehmender Teilchenenergie schwächer. Dies bedeutet, insbesondere für höhere Spannungen, dass mit größer werdendem  $z$  und einem damit verbundenen Anstieg der mittleren Teilchenenergie, der Einfluss des Potentials geringer wird.

Dem setzt sich ein weiter Effekt entgegen, nämlich der Einfluss der energieabhängigen mittleren freien Weglänge. In den hier relevanten Energiebereichen steigt die mittlere freie Weglänge mit der Energie (vgl. Abb. 4.4), sodass für höhere Energie der Fluss geordneter und damit die Dichte, sowie die Beträge der Links- und Rechtsflüsse kleiner werden. Der schwächer werdende Einfluss des Potentials bei hohen Energien überwiegt aber den Einfluss der mittleren freien Weglänge, sodass für höhere Spannungen, bei denen der Anstieg der Energie mit dem Ort  $z$  besonders relevant ist, die Ordnung des Flusses langsamer mit  $z$  zunimmt als bei niedrigeren Spannungen. Dies schlägt sich in flacheren Dichteverläufen für hohe Spannungen nieder, die man in Abb. 4.9 sehen kann. Das Zusammenspiel dieser Effekte und die unterschiedliche Stärke der Effekte bei unterschiedlichen Energien bestimmen die Fluss- und Dichteverläufe, was auch bedeuten kann, dass es zu nicht monotonen Verläufen kommt, wie man sie beispielsweise bei den Dichten bei 0,3 V und bei 0,5 V sehen kann. Die dort zusehende „Delle“ hinter der Grenzfläche rührt daher, dass bei den für den Fluss relevanten Energien (mittlere Energie ca. 0,2 eV) der mit fallender Energie schwächer werdende Effekt der asymmetrischen mittleren freien Weglängen recht empfindlich ist, während die Ordnung durch zusätzliche Reflexionen am Potential bei fallender Energie kaum noch erhöht wird.



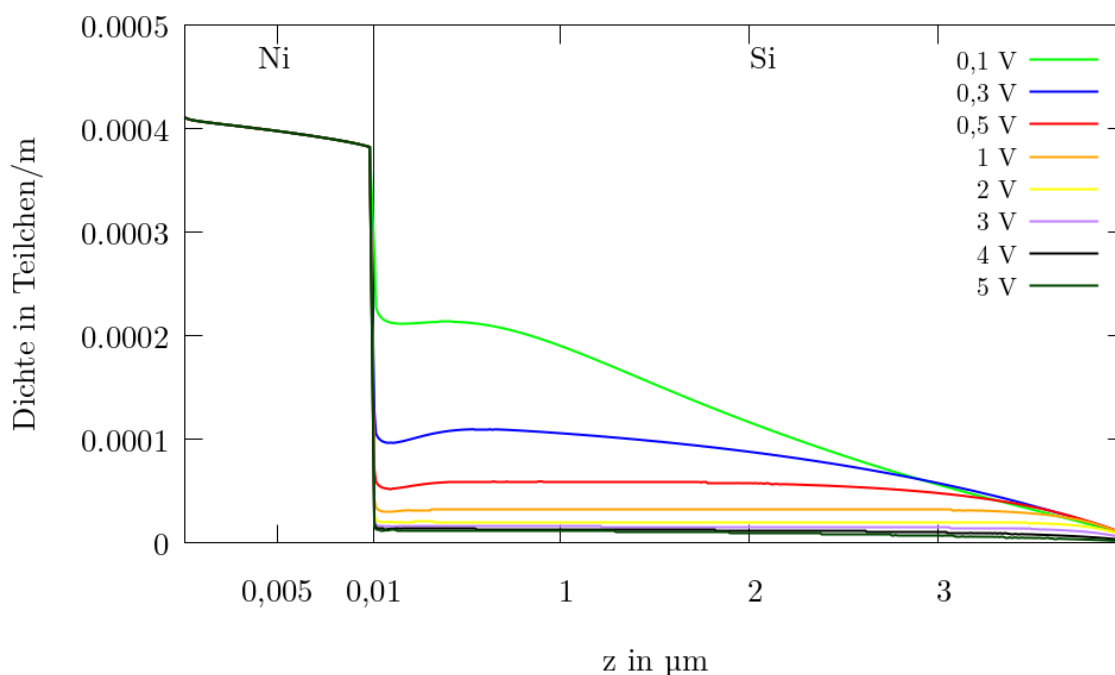
(a) Gesamtsystem



(b) in Si

**Abbildung 4.8:** Die Teilchendichte in ausgewählten Energieintervallen bei  $U = 4 \text{ V}$ .

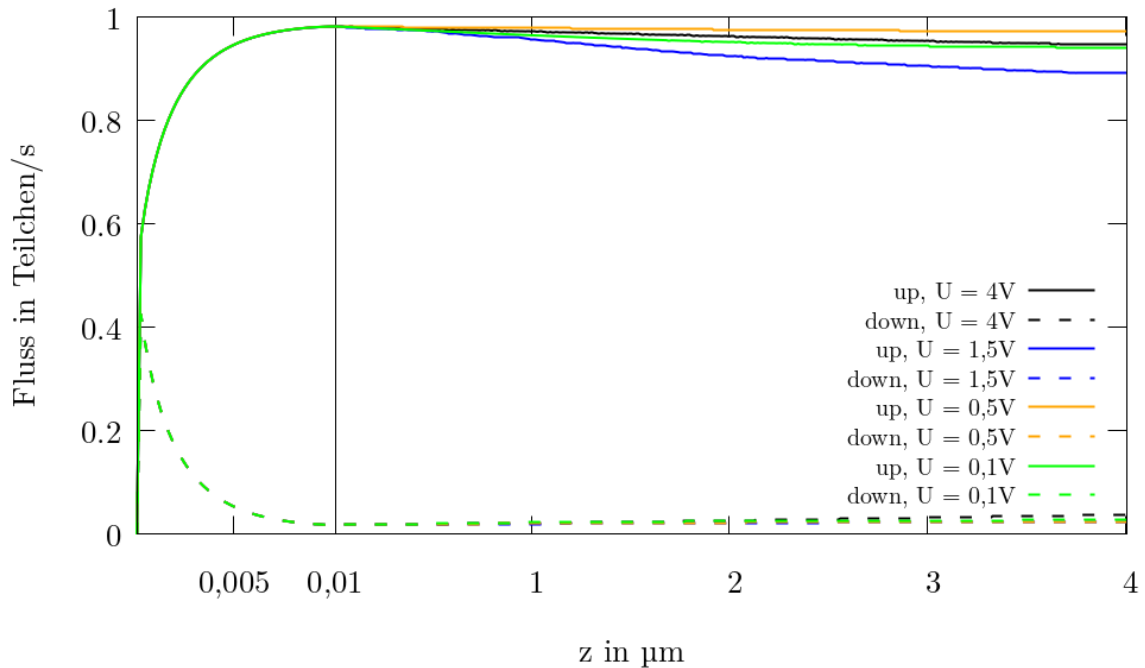




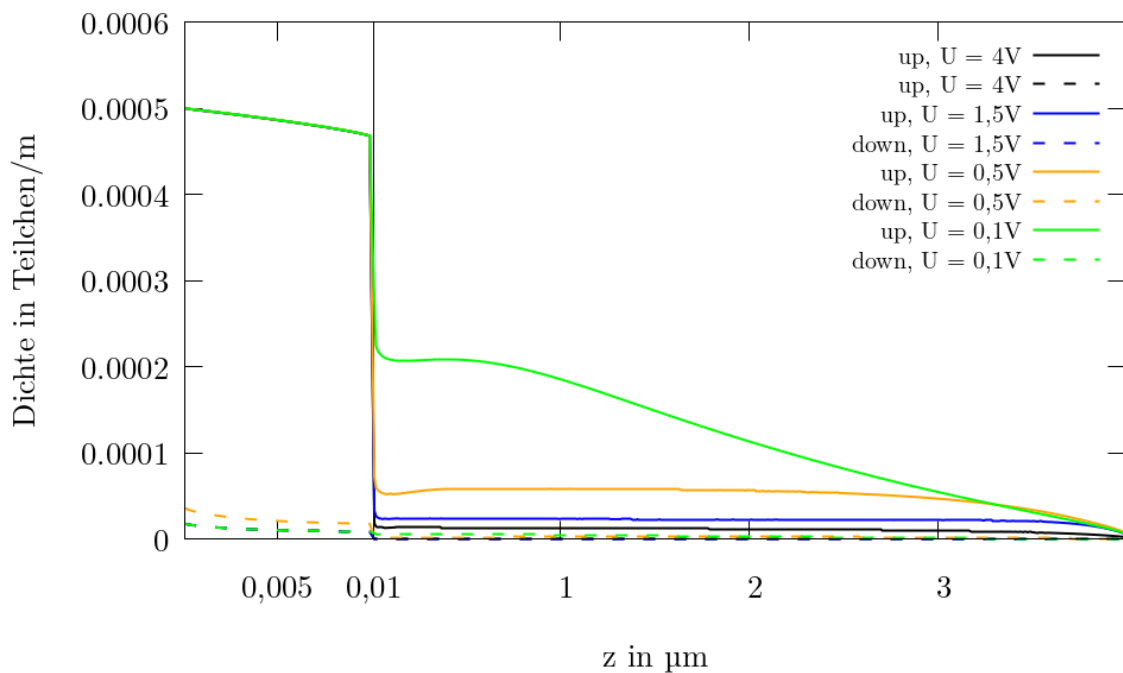
**Abbildung 4.9:** Gesamtdichte bei verschiedenen externen Spannungen.

### 4.3 Spinaufgelöster Transport

In diesem Abschnitt soll der Elektronentransport durch das Ni-Si-Schichtsystem mit beiden Spin-Orientierungen untersucht werden. Als Majoritätsorientierung in Ni wurde hier Spin „up“ ( $\uparrow$ ) gewählt und dementsprechend Spin „down“ ( $\downarrow$ ) als Minorität. Die Quelle sei hierbei unpolarisiert, das heißt sie erzeugt gleich viele „up“- und „down“-Elektronen. Dies erkennt man auch in Abb. 4.10, wo der Teilchenfluss spinaufgelöst dargestellt ist. Man erkennt, dass sowohl der Spin-up-Fluss als auch der Spin-down-Fluss bei 0,5 beginnen, also gleich stark sind – sieht man einmal vom ersten Diskretisierungspunkt bei  $z = 0$  ab. Dort sind beide Flüsse tatsächlich nahezu null, da sich die externe Quelle rechts von diesem Punkt befindet. Geht man in Ni weiter nach rechts, erhöht sich der Spin-up-Fluss und im gleichen Maße verringert sich der Spin-down-Fluss. Dies geschieht aufgrund der unterschiedlichen Lebensdauern von Majoritäts- und Minoritätselektronen. Zunächst geschieht dies schnell, mit zunehmenden  $z$  jedoch verlangsamt sich der Prozess und eine Sättigung tritt ein. Asymptotisch würden die Ströme sich null bzw. eins annähern, was daran liegt, dass kein Prozess eingebaut ist, der die Anregung von Majoritätselektronen begrenzt. In der Realität ist es jedoch nicht möglich, so stark polarisierte Ströme in einen Halbleiter zu injizieren. Dies liegt an dem hier nicht beachteten Transport im Valenzband und an der Tatsache, dass die Potentialbarriere an der Grenzfläche unterschiedlich hoch für die beiden Spin-Orientierungen ist [7], was die Spin-Polarisation deutlich abschwächt. Dies bedeutet, dass hier deutlich höhere Spinpolarisationen berechnet werden als in vergleichbaren Arbeiten (vgl. z. B. [12]). Abseits der Grenzfläche spielen diese Einschränkungen jedoch



**Abbildung 4.10:** Der Teilchenfluss ist für vier ausgewählte Spannungen dargestellt, aufgelöst nach dem Fluss der „up“- und der Spin "down"-Elektronen.



**Abbildung 4.11:** Die Teilchendichte ist für vier ausgewählte Spannungen dargestellt, aufgelöst nach den „up“- und "down"-Elektronen.

keine Rolle, weshalb die hier gezeigten Resultate qualitativ, im Rahmen der gemachten Näherungen, Gültigkeit behalten und dementsprechend qualitativ diskutiert werden.

In Ni hat man ein umgekehrtes Bild. Die Spin-up-Flüsse nehmen ab, während die Spin-down-Flüsse zunehmen. Grund hierfür sind die Spin-Flips durch den Elliott-Yafet-Prozess. Auffällig ist, dass die Verlustrate der Spin-up-Ströme nicht monoton mit der Spannung steigt oder fällt, sondern ohne erkennbare Ordnung variiert. Dies schlägt sich in den Dichteverteilungen (Abb. 4.11) hingegen nicht nieder; dort ist der ordnende Effekt des Potentials so dominant, dass die unterschiedlichen Verlustraten nicht erkennbar sind. Bei der Interpretation der Spinrelaxation mittels der Flüsse ist zu bedenken, dass der Gesamtfluss nicht erhalten war und der Flussverlust unterschiedlich stark für verschiedene Spannungen ausgeprägt war. Deshalb ist es sinnvoll, eine andere Größe, nämlich die Spinpolarisation  $P(z)$  zu betrachten. Diese berechnet sich aus den in Abb. 4.10 dargestellten Flüssen  $\phi_{\uparrow}(z)$  und  $\phi_{\downarrow}(z)$  gemäß

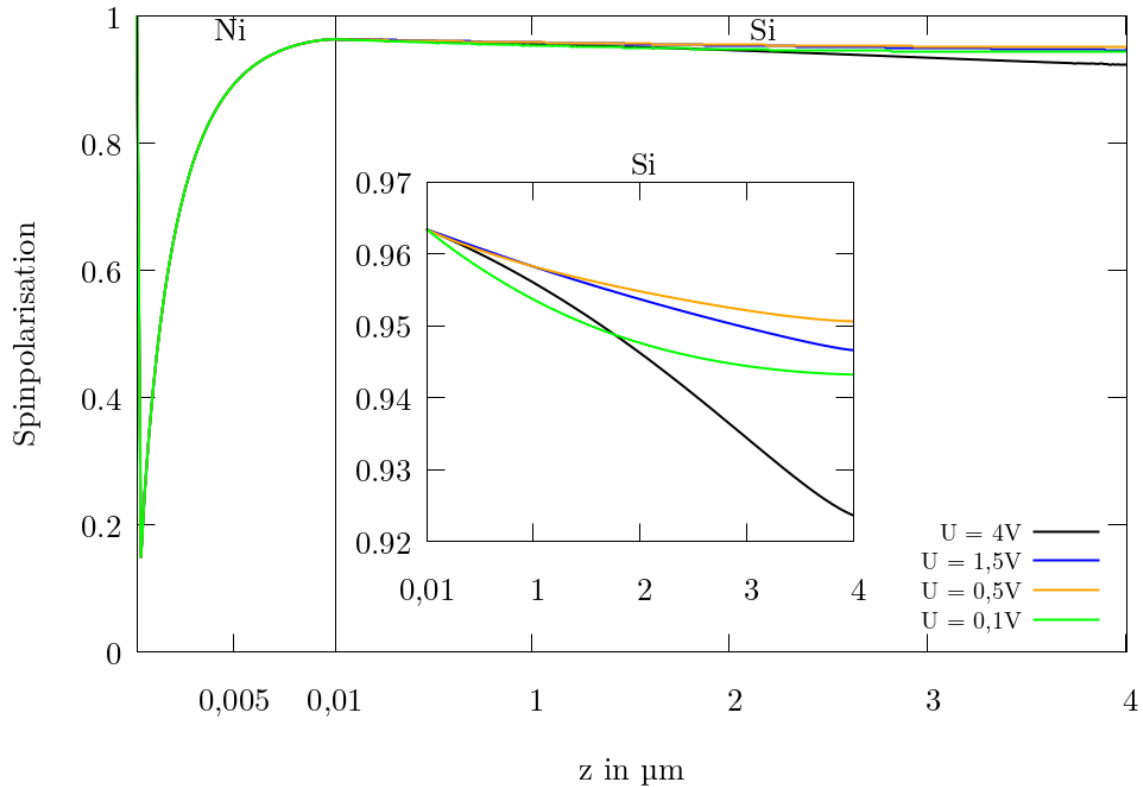
$$P(z) = \frac{\phi_{\uparrow}(z) - \phi_{\downarrow}(z)}{\phi_{\uparrow}(z) + \phi_{\downarrow}(z)}. \quad (4.15)$$

Dadurch dass auf den Gesamtfluss normiert wird, ist die Spinpolarisation nicht durch den Flussverlust beeinflusst. Die so berechnete Spinpolarisation ist für die gleichen ausgewählten Spannungen in Abb. 4.12 dargestellt. Erneut ist der Wert im äußersten, linken Diskretisierungsintervall gesondert zu beachten: Die Flüsse dort sind kleiner als die numerischen Unsicherheiten, weshalb die berechnete Spinpolarisation dort als unphysikalisch betrachtet werden muss. Im übrigen System sieht man das gleiche Verhalten wie zuvor, nämlich einen Anstieg der Spinpolarisation in Ni und einen Abfall in Si. Diese Spinrelaxation in Si, die im Inset noch einmal vergrößert dargestellt ist, soll nun genauer erläutert werden. Besonders aufschlussreich sind die Verläufe für  $U = 0,1 \text{ V}$  und  $U = 4 \text{ V}$ . Zunächst ist die Spinpolarisation für  $U = 4 \text{ V}$  größer, ab ca.  $2 \mu\text{m}$  ist dann die Spinpolarisation für  $U = 0,1 \text{ V}$  größer.

Der Verlauf für  $0,1 \text{ V}$  lässt sich mit dem bereits bekannten Wissen aus dem spinunabhängigen Transport erklären. Weiter links im System ist der Transport sehr ungeordnet und dementsprechend stark stoßbehaftet, wodurch die Spinpolarisation verhältnismäßig schnell abnimmt. Mehr Stöße bedeuten immer auch mehr Möglichkeiten für Spin-Flips. Mit zunehmenden  $z$  steigt auch die Ordnung des Transports (vgl. Abb. 4.5) und somit schwächt sich die Rate, mit der  $P$  abnimmt, ab.

Für  $U = 4 \text{ V}$  gilt zunächst das Gleiche. Auch hier ist der Fluss am linken Rand ungeordneter als weiter rechts, allerdings ist der Transport – aus bekannten Gründen – insgesamt deutlich geordneter als für kleinere Spannungen. Dadurch fällt die Spinpolarisation zu Beginn nicht so schnell wie für  $U = 0,1 \text{ V}$ . Mit größer werdendem  $z$  und dementsprechend größer werdender mittlerer Energie setzt ein dem entgegen wirkender Effekt ein: Je höher die Energie, desto höher ist auch die Wahrscheinlichkeit für einen Spin-Flip (vgl. Gl. 4.13), weshalb die Spinpolarisation für  $4 \text{ V}$  recht bald schneller fällt als für niedrigere Spannungen.

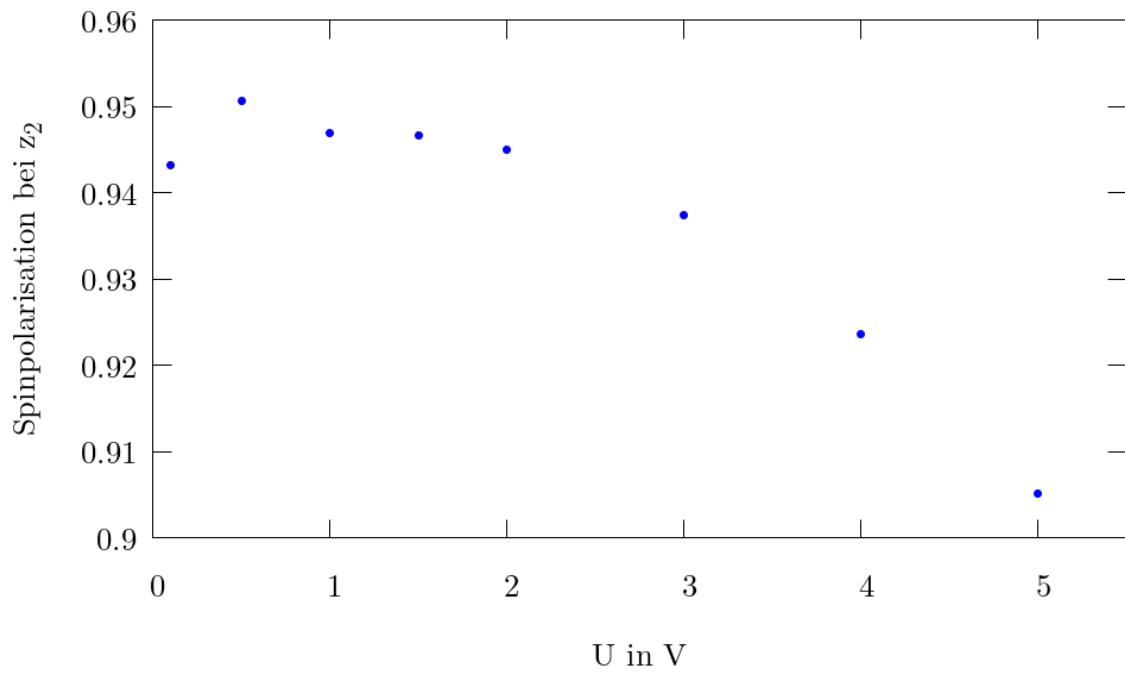
Durch diese Effekte lassen sich die unterschiedlichen Spinpolarisationen am Ende des Systems



**Abbildung 4.12:** Dargestellt ist die Spinpolarisation  $P$  über dem Ort  $z$  für vier ausgewählte Spannungen. Der Verlauf der Spinpolarisation in Si ist vergrößert in das Diagramm hineingesetzt.

erklären. Durch die fehlende Monotonie gibt es eine Spannung, bei der die Spinpolarisation beim Verlassen des Systems bei  $z_2 = 4 \mu\text{m}$  maximiert wird. Diese Spannung ist natürlich von großem Interesse, wenn man einen maximal polarisierten Spinstrom erzeugen möchte. In dieser Arbeit ist es aufgrund der erwähnten Näherungen nicht möglich, einen praktisch verwendbaren Wert zu nennen. Dennoch soll, um eine grobe Vorstellung zu erhalten, die Spinpolarisation bei  $z_2$  für verschiedene Spannungen in Abb. 4.13 betrachtet werden. Man erkennt, dass das Maximum bei  $U \approx 0,5 \text{ V}$  liegt, also bei einer verhältnismäßig niedrigen Spannung.

Desweiteren stellt sich die Frage, wie die Spinpolarisation optimiert werden kann, wenn man die Länge der Ni- oder der Si- Schicht variiert. Dies soll aber hier, aufgrund der beschriebenen Ungenauigkeiten der Methode und der Schwerpunktsetzung der Arbeit, nicht geschehen.



**Abbildung 4.13:** Die Spinpolarisation  $P(z_2 = 4 \mu\text{m})$  am rechten Rand des Systems ist für verschiedene Spannungen abgebildet.



# Kapitel 5

## Diskussion und Zusammenfassung

### 5.1 Kritik der Methodik

Wie gesehen, erlaubt es die hier entwickelte und vorgestellte Methode, den Elektronentransport durch planare Schichten eindimensional zu beschreiben, ohne die Dreidimensionalität der Teilchenbewegung zu ignorieren. Dennoch gibt es eine Reihe von Punkten, die bei der Verwendung dieser Methode und bei der Validierung der Ergebnisse bedacht werden sollten. Der erste und vielleicht wichtigste dieser Punkte betrifft den Anwendungsbereich der Methode. Das Verfahren ist effizient, wenn so viele Stöße im System stattfinden, dass eine rein ballistische Beschreibung nicht mehr genügt, aber nicht so viele Stöße, dass eine diffusive Beschreibung einfacher und effizienter gewesen wäre. Entscheidend ist also das Verhältnis der mittleren freien Weglänge zur Länge des Systems bzw. der Länge der gerade betrachteten Schicht. In dem hier untersuchten System bedeutet dies, dass es sinnvoll war, das Metall und die höheren Energien im Halbleiter mit dieser superdiffusiven Methode zu beschreiben, während für niedrigere Energien (bis ca. 1 eV) ein diffusiver Ansatz vermutlich sehr ähnliche Ergebnisse geliefert hätte und effizienter gewesen wäre. Es soll an dieser Stelle aber noch einmal deutlich gemacht werden, dass das Verwenden dieser Methode für ungünstige Parameter nicht zu falschen Ergebnissen führt, sondern lediglich mehr Rechenleistung erfordert als andere Methoden, um zum gleichen Ergebnis zu kommen.

Ein weiterer, großer Kritikpunkt ist, dass alle Stöße als isotrop angenommen werden müssen, was insbesondere für Elektron-Phonon-Stöße eine ziemlich starke Näherung ist. Außerdem wird lediglich das Leitungsband simuliert, was unter anderem dazu führt, dass bei Elektron-Elektron-Stößen lediglich eines der beiden am Stoß beteiligten Elektronen verfolgt wird, wie in Abs. 4.1.2 beschrieben. Hiermit ist verbunden, dass die Bewegungen der Löcher, die durch die Elektron-Elektron-Stöße im Valenzband entstehen, nicht berücksichtigt werden. Desweiteren wird die Ladungsakkumulation durch die heißen Elektronen vernachlässigt. Diese zusätzlichen Ladungen würden ein zusätzliches, nicht konstantes Feld im Halbleiter erzeugen.

Darüber hinaus sind viele Materialparameter (insb. ihre Energieabhängigkeiten) nur grob bestimmt, wie beispielsweise die inelastische Lebensdauer in Si, oder grob implementiert da-

durch, dass gefittete Werte verwendet werden, um einige Integrale analytisch lösen zu können und somit Rechenzeit zu sparen. Auch dass die Geschwindigkeiten und die Reflexionskoeffizienten als isotrop angenommen werden, verschlechtert die Güte der Ergebnisse. Deutlich bedeutender ist jedoch, dass der Reflexionskoeffizient spinunabhängig implementiert wurde. Neben der Energie- und der Spinabhängigkeit sind natürlich noch andere Abhängigkeiten, zum Beispiel von der Temperatur, möglich, die allesamt ignoriert werden.

## 5.2 Verbesserungen und Ausblick

Einige der zuvor aufgeführten Kritikpunkte ließen sich bei einer aufwendigeren und komplexeren Anwendung der Methodik beseitigen, wie nun ausgeführt werden soll.

Das Problem des nicht immer adäquaten Anwendungsbereichs lässt sich offensichtlich lösen, indem man nicht alle Energiebereiche im Halbleiter mit der hier vorgestellten superdiffusiven Methode modelliert, sondern die niederenergetische Dichte mittels der Diffusionsgleichung beschreibt. Dies erfordert allerdings eine effektive Beschreibung der Energiegewinne und -verluste, die die Dichte im Potential erfährt. Wie in Abs. 3.2.1 gesehen, kann dies dazu führen, dass die Energiegewinne massiv überschätzt werden und man somit unphysikalische Resultate erhält. Von einer Funktion, die die Energieverteilung nach dem räumlichen Transport besser auf die Energieintervalle abbildet, würde natürlich auch die Methode der SDTG profitieren. Ein Weg, das Problem der Energieübergänge bzw. der benötigten, feinen Energieauflösung zu umgehen, wäre eine Teilchenmethode zu verwenden. Dies würde bedeuten, dass man statt Teilchendichten zu simulieren, einzelne Teilchen oder Quasiteilchen betrachtet. Diese führen dann Zufallsbewegungen („Random Walk“) aus. Die Verteilungsfunktion der einzelnen Zufallsbewegung hängt dann von der Energie und dem Anfangsort ( $z_Q$ ) ab. Für Energiebereiche, die mit der SDTG beschrieben werden, ist die Verteilungsfunktion durch den Flusskern  $\varphi(z|z_Q; \sigma, E)$  bzw. die Summe der Flusskerne über alle möglichen Trajektorien, also durch die Ausdrücke, die diskretisiert als Matrixelemente bezeichnet wurden, gegeben. Im diffusiven Bereich ist die Wahrscheinlichkeitsverteilung ohne Feld eine symmetrische, deren Varianz durch den Diffusionskoeffizienten bestimmt ist. Beispielsweise kann eine Normalverteilung gewählt werden. Erfolgt die Bewegung in einem Feld, müssen Reflexionen am Potential am Ort  $z_U = z_U(z_Q; E)$  berücksichtigt werden. Hierfür folgt man den Überlegungen aus Abs. 2.2.4 und berechnet die Übergangswahrscheinlichkeit  $p(z|z_Q)$  als Überlagerung der feldfreien Wahrscheinlichkeitsverteilungen  $p_0$  für den realen und den gespiegelten Anfangsort, also

$$p(z|z_Q; \sigma, E) = \begin{cases} 0; & z < z_Q \\ p_0(z|z_Q; \sigma, E) + p_0(z|z_U - (z_Q - z_U); \sigma, E); & z > z_Q. \end{cases} \quad (5.1)$$

Dabei wurde o. B. d. A. angenommen, dass  $z_U < z_Q$  gelte. Ein konvektiver Anteil ließe sich natürlich als konstanter Sprung aufaddieren. Die Wahrscheinlichkeitsverteilungen müssten streng genommen für jeden Anfangsort und jede Energie einzeln berechnet werden. Praktisch jedoch



würde man natürlich diese Rechnungen für ausgewählte Diskretisierungspunkte, wie es auch in dieser Arbeit für die Matrixelemente getan wurde, berechnen. Als Ausgangspunkt für den nächsten Schritt würde man jedoch den exakten (kontinuierlichen) Ort der Teilchen, sowohl räumlich als auch energetisch, verwenden und somit das Problem der zu groben Beschreibung der Energieübergänge durch Bewegung im Potential umgehen.

Ebenfalls naheliegend ist es, nicht nur die heißen Elektronen im Leitungsband, sondern auch die Löcher, die durch Elektron-Elektron-Stöße im Valenzband entstanden sind, zu simulieren. Die Löcher kann man, je nach Energie, ebenfalls über die SDTG oder die Diffusionsgleichung beschreiben. Die Transportgleichungen für das Leitungsband und das Valenzband sind dann über die Elektron-Elektron-Streuung miteinander gekoppelt.

Für die in jedem Iterationsschritt berechnete Teilchen- und mit ihr verbundene Ladungsdichte lässt sich natürlich die POISSON-Gleichung aufstellen und lösen, wodurch man das selbstkonsistente Potential erhielte und das dazugehörige Feld. Das würde natürlich die Güte der Resultate verbessern, hätte jedoch zwei Nachteile. Zum einen wäre das Potential nicht mehr linear, wodurch es ungleich schwieriger ist, die Umkehrpunkte und kritischen Winkel für jeden Quellort zu bestimmen. Zum anderen erhöht sich der Rechenaufwand enorm, da die Matrixelemente wiederholt für die neu berechneten Potentiale berechnet werden müssten. Weicht das selbstkonsistente Potential nicht zu sehr vom linearen Potential ab, berechnet man klugerweise nicht in jeder Iteration das Potential und die Matrixelemente neu, sondern seltener, da das veränderte Potential nur einen kleinen Einfluss auf den Teilchenfluss hat.

Es ist darüber hinaus möglich, nicht isotrope Streuung – zumindest grob – zu implementieren. Und zwar kann man „Forward Scattering“, also dass Teilchen nach einem Stoß mit größerer Wahrscheinlichkeit die gleiche Richtung wie vor dem Stoß haben, erzwingen. Dazu ist es notwendig, die Trajektorien nicht nur nach Rechts- und Linksläufern, also der Richtung der Teilchen am Ende der Trajektorie, sondern auch nach Rechts- und Linksstartern, also der Richtung, die die Teilchen unmittelbar nach dem Stoß haben, zu kategorisieren. Hat man dies getan, kann man die Quellstärke in einem Diskretisierungsschritt den Links- und Rechtsstartern ungleichmäßig zuordnen. Als Maß dafür, wie ungleich die Quellstärke verteilt wird, ließe sich zum Beispiel das Verhältnis oder die Differenz der Flüsse oder der Dichten der Links- und Rechtsläufer nehmen. Wie stark ein Übermaß an Rechtsfluss beispielsweise die Rechtsstarter bevorzugt, müsste durch einen zusätzlichen, freien Parameter festgelegt werden.

Bessere Resultate erhält man natürlich auch, wenn man möglichst exakte statt gefittete Parameter verwendet. Dies bedeutet natürlich aber auch, dass man die  $z$ -Integration für die Berechnung des Propagators numerisch ausführen müsste, was wiederum einen erhöhten Rechenaufwand bedeutet. Die Reflexionen könnte man besser berücksichtigen, indem man die Reflexionskoeffizienten richtungsabhängig macht und in die  $\vartheta$ -Integration hineinzieht und verschiedene Potentialbarrieren für die beiden Spin-Orientierungen berechnet und implementiert. Außerdem sei erneut darauf hingewiesen, dass die hier erarbeitete Methode nicht nur auf dieses System aus zwei Schichten angewandt werden kann. Es ist, im Gegenteil, sogar sehr effizient, diese Methode für Systeme aus mehreren planaren Schichten zu verwenden, da in diesem For-

malismus alle Schichten in einer Gleichung beschrieben werden und es somit nicht notwendig ist, verschiedene Gleichungen für verschiedene Schichten über Randbedingungen miteinander zu koppeln.

### 5.3 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde eine Transportgleichung hergeleitet, die es ermöglicht, den dreidimensionalen Transport heißer Elektronen mathematisch eindimensional zu beschreiben. Der zugrundeliegende Transportprozess berücksichtigt Stoßprozesse und die ballistische Bewegung zwischen den Stößen, was zusammengenommen für eine superdiffusive Natur des Transportes sorgt. Diese Gleichung wurde nicht nur für homogene Medien, sondern auch für inhomogene Medien mit reflektierenden Grenzflächen hergeleitet und auf Materialien in einem externen Feld erweitert. Insbesondere wurde auch gezeigt, wie die Gleichung numerisch implementiert werden kann und wie die Schwierigkeiten, die bei der Implementation an Grenzflächen von feldbehafteten Schichten auftreten, überwunden werden können.

Diese Implementation erlaubte es, ein Ni-Si-Schichtsystem zu untersuchen. Die dort entstandenen Fluss- und Dichterverläufe wurden unter dem Aspekt der Ordnung des Transports interpretiert. Der Einfluss der externen Spannung und der energie- und spinabhängigen mittleren freien Weglänge auf die Dichteverläufe und später auch auf die Spinrelaxation in Si wurde erläutert. Entscheidenden Einfluss hatten dabei die Reflexionen am Potential, sowie unterschiedlichen mittleren freien Weglängen für Links- und Rechtsläufer. Die für den spinabhängigen Transport verwendete Modellierung des Systems ist zwar nicht detailliert genug gewesen, um quantitativ belastbare Resultate zu erzielen, dennoch konnte gezeigt werden, dass eine höhere Spannung nicht zwingend zu einem besseren Spintransport führt. Es ist vielmehr erstrebenswert, eine Spannung zu wählen, bei der der Transport hinreichend geordnet ist, die Teilchen aber keine zu hohen Energien erreichen, damit möglichst wenige Spin-Flips die Polarisation des Spinstroms beeinträchtigen.

Die hier verwendete Implementation hat zwar einige Schwächen, wie die Isotropie der Stöße und die sehr grobe Modellierung der Grenzfläche, doch diese Schwächen sind größtenteils entweder keine grundsätzlichen Nachteile der Methode und lassen sich bei einer detaillierteren, aufwändigeren Implementation beseitigen, oder, wie im Falle der isotropen Stöße, die Schwächen können abgemildert werden, ohne die Methodik grundsätzlich abändern zu müssen. Daher können diese Methode und die superdiffusive Transportgleichung einen Beitrag dazu leisten, den Transport von heißen Elektronen in planaren Schichtsystemem ohne allzu große Vereinfachungen effizienter zu beschreiben.

# Anhang A

## Zeitabhängiger Fluss

**Anmerkung zu Notation:** In diesem Abschnitt werden die zeitabhängigen Größen ohne Index geschrieben und die zeitunabhängigen Größen werden mit dem Index „stat“ für stationär versehen, während im Rest des Textes, wo stationäre Probleme betrachtet werden, die zeitunabhängigen Größen mit keinem Index bezeichnet werden.

### A.1 Herleitung des zeitabhängigen Flusses

In diesem Abschnitt soll der zeitabhängige Fluss einer Punkt-Quelle bzw. einer auf einer  $x$ - $y$ -Ebene verschmierten „Ebenenquelle“ durch eine weitere  $x$ - $y$ -Ebene berechnet werden. Dies soll monoenergetisch erfolgen, allerdings wird keine Homogenität vorausgesetzt, stattdessen können  $\tau$  und  $v$  mit  $z$  variieren. Die Isotropieannahmen bleiben aber wie gewohnt bestehen. Da der Fluss durch eine unendlich ausgedehnte Ebene betrachtet wird, ist es – wie auch im Haupttext – unerheblich, wo in der Ebene die Quellen lokalisiert sind. Man kann als  $\vec{r}_Q = (0, 0, z_Q)$  wählen. Außerdem sei die Quellstärke  $S_0$  auf eins normiert.

Um den momentanen Fluss  $\phi(z, t|z_Q, t_Q)$  zu berechnen, ist es nützlich, zuerst den aufintegrierten, kumulierten Fluss  $\psi(z, t|z_Q, t_Q)$  zu berechnen, also die Anzahl der Teilchen, die zum Zeitpunkt  $t_Q$  bei  $z_Q$  entstanden sind und **bis** zum Zeitpunkt  $t$  die Ebene bei  $z$  passiert haben. Hierzu werden zunächst die Flugzeit  $\widetilde{\Delta}t$ , die ein Teilchen vom Ort  $\vec{r}_Q$  zum Ort  $\vec{r}$  benötigt, und die Flugzeit in Einheiten der Lebensdauer  $\tilde{p}$  benötigt. Diese lassen sich für inhomogen Medien in Integralform durch

$$\widetilde{\Delta}t = \int_{\vec{r}}^{\vec{r}_Q} \frac{d\vec{r}'}{v(\vec{r}')} = \int_0^{\frac{z-z_Q}{\cos\vartheta}} \frac{dl}{v(\vec{r}(l))} \quad (\text{A.1})$$

und

$$\tilde{p} = \int_{\vec{r}}^{\vec{r}_Q} \frac{d\vec{r}'}{v(\vec{r}')\tau(\vec{r}')} = \int_0^{\frac{z-z_Q}{\cos\vartheta}} \frac{dl}{\tau(\vec{r}(l))v(\vec{r}(l))} \quad (\text{A.2})$$

ausdrücken, wobei diese Pfadintegrale hinter dem zweiten Gleichzeichen durch die Bogenlänge  $l$  parametrisiert sind. Diese wiederum ist für gerade Trajektorien (s. Abb. 2.2) durch  $l(z') =$

$\frac{z'-z_Q}{\cos\vartheta}$  gegeben. Damit ist die Wahrscheinlichkeit für ein Teilchen, nicht gestreut zu werden, bevor es  $z_Q$  erreicht, durch  $p = e^{-\tilde{p}}$  gegeben und der kumulierte Fluss lässt sich für den Fall  $z > z_Q$  durch

$$\psi(z, t|z_Q, t_Q) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \sin\vartheta \frac{1}{4\pi} e^{-\tilde{p}} \cdot \Theta(t - t_Q - \widetilde{\Delta}t) \cdot \Theta(t - t_Q) \quad (\text{A.3})$$

ausdrücken, wobei das  $\frac{1}{4\pi}$  die Wahrscheinlichkeit angibt, in den Raumwinkel  $d\vartheta d\varphi$  emittiert zu werden. Die erste Heaviside-Funktion stellt sicher, dass die Teilchen die Ebene erreichen konnten und die zweite, dass das Teilchen erst bei  $t_Q$  erzeugt wurde. Wenn die Materialeigenschaften  $\tau$  und  $v$  nicht mehr von  $\vec{r}$ , sondern von  $z$  abhängen, ist es sinnvoll  $l(z') = \frac{z'-z_Q}{\cos\vartheta}$  zu substituieren. Hierdurch erhält man

$$\widetilde{\Delta}t = \frac{1}{\cos\vartheta} \int_{z_Q}^z \frac{dz'}{\tau(z')} \quad (\text{A.4})$$

sowie

$$\tilde{p} = \frac{1}{\cos\vartheta} \int_{z_Q}^z \frac{dz'}{\tau(z')v(z')}, \quad (\text{A.5})$$

was in (A.3) eingesetzt wird. Die erste Heaviside-Funktion in (A.3) definiert dann eine implizite Bedingung für den Winkel  $\vartheta$ , bis wohin Teilchen die Ebene bei  $z$  noch rechtzeitig erreichen. Daher wird  $\vartheta$  nun nicht mehr bis  $\frac{\pi}{2}$ , sondern bis  $\arccos\left(\frac{1}{t-t_Q} \int_{z_Q}^z \frac{dz'}{v(z')}\right)$  integriert. Außerdem muss die zweite Heaviside-Funktion (wie unten dargestellt) verändert werden, um den Cosinus auf seine Hauptwerte zu beschränken. Führt man noch die  $\varphi$ -Integration aus, erhält man das Ergebnis

$$\begin{aligned} \psi(z, t|z_Q, t_Q) = & \int_0^{\arccos\left(\frac{1}{t-t_Q} \int_{z_Q}^z \frac{dz'}{v(z')}\right)} d\vartheta \frac{\sin\vartheta}{2} \\ & \cdot \exp\left(\frac{-1}{\cos\vartheta} \int_{z_Q}^z \frac{dz'}{\tau(z')v(z')}\right) \cdot \Theta\left(t - t_Q - |\widetilde{\Delta}t|\right), \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

das sich im homogenen Fall auf

$$\begin{aligned} \psi(z, t|z_Q, t_Q) = & \int_0^{\arccos\left(\frac{1}{t-t_Q} \frac{z-z_Q}{v}\right)} d\vartheta \frac{\sin\vartheta}{2} \\ & \cdot \exp\left(\frac{-1}{\cos\vartheta} \frac{z-z_Q}{\tau v}\right) \cdot \Theta\left(t - t_Q - \left|\frac{z-z_Q}{v}\right|\right), \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

vereinfacht. Den momentanen Fluss erhält man dann nach kurzer Rechnung als

$$\begin{aligned}
 \phi(z, t|z_Q, t_Q) &= \frac{d\psi(z, t|z_Q, t_Q)}{dt} \\
 &= \frac{1}{2(t-t_Q)^2} \cdot \exp\left(-\frac{t-t_Q}{\tau} \cdot \int_{z_Q}^z \frac{dz'}{v(z')} \cdot \int_{z_Q}^z \frac{dz'}{\tau(z')v(z')}\right) \cdot \int_{z_Q}^z \frac{dz'}{v(z')} \\
 &\stackrel{\text{hom.}}{=} \frac{z-z_Q}{2v(t-t_Q)^2} \cdot \exp\left(-\frac{t-t_Q}{\tau}\right) \cdot \Theta\left(t-t_Q - \left|\frac{z-z_Q}{v}\right|\right).
 \end{aligned} \tag{A.8}$$

## A.2 Ableitung des stationären Falles

Um den stationären Fluss  $\phi_{\text{stat}}(z|z_Q)$  aus dem zeitabhängigen Fluss  $\phi(z, t|z_Q, t_Q)$  zu gewinnen, reicht es, Letzteren über alle möglichen Quellzeiten  $t_Q < t$  zu integrieren. Zu berechnen ist also

$$\begin{aligned}
 \phi_{\text{stat}}(z|z_Q) &= \int_{-\infty}^t dt_Q \phi(z, t|z_Q, t_Q) \\
 &= \int_{-\infty}^t dt_Q \frac{z-z_Q}{2v(t-t_Q)^2} \cdot \exp\left(-\frac{t-t_Q}{\tau}\right) \cdot \Theta\left(t-t_Q - \left|\frac{z-z_Q}{v}\right|\right).
 \end{aligned}$$

Um dieses Integral zu lösen, substituiert man  $s = \frac{t_Q - t}{\tau}$  und erhält mit  $\Delta = \frac{z - z_Q}{\tau v}$  den Ausdruck

$$\begin{aligned}
 \phi_{\text{stat}}(z|z_Q) &= \int_{-\infty}^{-|\Delta|} ds \frac{(z-z_Q)\tau}{2v\tau^2 s^2} e^s \\
 &= \int_{-\infty}^{-|\Delta|} ds \frac{\Delta}{2s^2} e^s \\
 &= \frac{\Delta}{2} \left( \frac{e^{-|\Delta|}}{|\Delta|} + \text{Ei}(-|\Delta|) \right) \\
 &= \frac{1}{2} \left( \text{sgn}(\Delta) e^{-|\Delta|} + \Delta \cdot \text{Ei}(-|\Delta|) \right),
 \end{aligned} \tag{A.9}$$

der mit (2.57) für  $S_0 = 1$  übereinstimmt.



## Anhang B

# Propagatoren und Trajektorien im konstanten Feld

### B.1 Zusammenhang der Propagatoren im Halbleiter mit dem im Metall

In diesem Abschnitt soll gezeigt werden, dass die Funktionen  $\iota$  im Halbleiter im feldfreien Fall zu der Form von  $\iota$  im Metall mit angepassten Materialeigenschaften übergehen. Da die bei der Integration verwendeten Substitutionen für  $\alpha = 0$  nicht erlaubt sind, muss  $\iota^{\text{HL},j}(z) \xrightarrow{\alpha \rightarrow 0} \iota^{\text{M}}(z)$  gezeigt werden für  $j = 0, 1, 2$ .

Zunächst wird  $j = 0$  betrachtet und man findet, indem man die Wurzel entwickelt

$$\begin{aligned} \iota^{\text{HL},0}(z) &= \frac{-m}{\alpha\tau_1} \sqrt{v_1(E)^2 \cos^2 \vartheta - \frac{2\alpha}{m_1} x} \Bigg|_{x=0}^{z-z_Q} \\ &= \frac{-mv_1 |\cos \vartheta|}{\alpha\tau_1} \sqrt{1 - \frac{2\alpha}{mv_1^2 \cos^2 \vartheta} x} \Bigg|_{x=0}^{z-z_Q} \\ &\approx \frac{-mv_1 |\cos \vartheta|}{\alpha\tau_1} \left( 1 - \frac{\alpha}{mv_1^2 \cos^2 \vartheta} x \right). \end{aligned} \tag{B.1}$$

Der erste Summand ist konstant in  $x$  und trägt nach dem Einsetzen der Grenzen nichts mehr zum Ergebnis bei. Setzt man die Grenzen in den zweiten Summanden, erhält man

$$\iota^{\text{HL},0}(z) = \frac{z - z_Q}{\tau_1 v_1 |\cos \vartheta|} \hat{=} \iota^{\text{M}}(z). \tag{B.2}$$

Für  $j = 1$  muss man anders vorgehen, ein getrenntes Entwickeln der einzelnen Funktionen führt nicht zum Ziel. Stattdessen wird die gesamte Funktion nach  $\alpha$  entwickelt, wozu zunächst

$\iota^{\text{HL},1}(z)$  ohne das Einsetzen der Grenzen als neue Funktion  $\iota^{\text{HL},0}(x)(\alpha)$  aufgefasst wird. Für diese Funktion berechnet man

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\alpha} \left( \iota^{\text{HL},0}(x)(\alpha) \cdot (-\alpha\tau_1 v_1) \right) &= \frac{2\alpha x^2 - xE(1 + \cos^2 \vartheta)}{2\sqrt{E - \alpha x\sqrt{E \cos^2 \vartheta - \alpha x}}} \\ &+ \frac{E \sin^2 \vartheta}{2\sqrt{1 + \frac{E \cos^2 \vartheta - \alpha x}{E \sin^2 \vartheta}}} \cdot \frac{-x}{E \sin^2 \vartheta} \cdot \sqrt{\frac{E \sin^2 \vartheta}{E \cos^2 \vartheta - \alpha x}} \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

und kann dies nun an der Stelle  $\alpha = 0$  auswerten, um damit die lineare Ordnung der MacLaurin-Reihe zu finden:

$$\begin{aligned} \left. \frac{d}{d\alpha} \left( \iota^{\text{HL},0}(x)(\alpha) \cdot (-\alpha\tau_1 v_1) \right) \right|_{\alpha=0} &= \frac{-xE(1 + \cos^2 \vartheta)}{2E|\cos \vartheta|} \\ &+ \frac{-x}{2} \frac{E \sin^2 \vartheta}{\sqrt{E \sin^2 \vartheta + E \cos^2 \vartheta} \sqrt{E \cos^2 \vartheta}} \\ &= -\frac{x}{2} \left( \frac{1}{|\cos \vartheta|} + \frac{\cos^2 \vartheta}{|\cos \vartheta|} + \frac{\sin^2 \vartheta}{|\cos \vartheta|} \right) \\ &= -\frac{x}{|\cos \vartheta|}. \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Damit erhält man

$$\iota^{\text{HL},0}(x)(\alpha) \cdot \alpha\tau_1 v_1 \approx \frac{x}{|\cos \vartheta|} \quad (\text{B.5})$$

und schlussendlich

$$\iota^{\text{HL},0}(x)(\alpha) \approx \frac{x}{\tau_1 v_1 |\cos \vartheta|} \hat{=} \iota^{\text{M}}(z). \quad (\text{B.6})$$

Zuletzt soll noch der Fall  $j = 2$  betrachtet werden, bei dem man direkt erkennt, dass der zweite Summand  $\iota^{\text{HL},0}(z)$  entspricht und somit in  $\iota^{\text{M}}(z)$  ohne Feld übergeht. Es verbleibt also zu zeigen, dass der erste Summand ( $S_1$ ) für  $\alpha \rightarrow 0$  null wird:

$$\begin{aligned} S_1 &= \frac{-2mv_1^3 |\cos^3 \vartheta|}{3\alpha\tau_1 v_1^2} \left( 1 + \frac{\alpha x}{mv_1^2 \cos^2 \vartheta} \right) \sqrt{1 - \frac{2\alpha}{mv_1^2 \cos^2 \vartheta}} \Bigg|_{x=0}^{z-z_Q} \\ &\approx \frac{-2mv_1^3 |\cos^3 \vartheta|}{3\alpha\tau_1 v_1^2} \left( 1 + \frac{\alpha x}{mv_1^2 \cos^2 \vartheta} \right) \left( 1 - \frac{\alpha x}{mv_1^2 \cos^2 \vartheta} \right) \Bigg|_{x=0}^{z-z_Q} \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

Die nullte Ordnung in  $x$  wird null, wenn man die Grenzen einsetzt; die erste Ordnung wird genau null, da die Vorzeichen in den Klammern genau umgekehrt sind; höhere Ordnungen enthalten mindestens ein  $\alpha$  im Zähler und werden somit auch null.



## B.2 Mögliche Trajektorien im Metall-Halbleiter-Schichtsystem

Die folgende Tabelle gibt an, welche Trajektorien im Metall-Halbleiter-Schichtsystem möglich sind und welche Parameter sie beschreiben. Die Tabelle ist unterteilt in vier Abschnitte, die jeweils für eine Kombination von Start- und Zielort stehen, je nachdem, ob sie im Metall oder im Halbleiter liegen. Dies ist auch im Namen des Propagators vermerkt. Der tiefstehende Index gibt in der Regel die Anzahl der Reflexionen an, außer der Index „Pot.“, der besagt, dass es eine Reflexion am Potential gibt im Unterschied zu dem Propagator  $\Delta_1^{\text{HL} \rightarrow \text{HL}}$ , bei dem die Reflexion an der Grenzfläche bei  $z_1$  erfolgt. Die Zählung beginnt, wenn nicht anders vermerkt, bei  $\nu = 0$ . Die zweite bis fünfte Spalte geben an, wie viele und welche Reflexionen und Transmissionen stattgefunden haben, z. B. bedeutet  $R_0 : \nu$ , dass  $\nu$  Reflexionen an der Grenzfläche bei  $z_0$  mit dem Reflexionskoeffizienten  $R_0$  stattgefunden haben. Die nächsten beiden Spalten geben die Integrationsgrenzen für die  $\vartheta$ -Integration an. Die Spalten  $\Delta^{\text{M}}$  und  $\Delta^{\text{HL}}$  beschreiben den Pfad der Teilchen im Metall bzw. Halbleiter; die dort stehenden Werte sind dann die Vorfaktoren bzw. Argumente für  $\iota$  gemäß (2.84) und dem Vorgehen, beschrieben in Abs. 2.4.

### Bemerkungen

- a) In diesen Fällen bleiben die Teilchen im Metall, wo das Potential keinen Einfluss hat. Die Integration kann deshalb analytisch durchgeführt werden, wobei die Integrationsgrenzen – wie bekannt –  $0$  und  $\frac{\pi}{2}$  bzw.  $\pi$  und  $\frac{\pi}{2}$  sind. Das Vorzeichen im oberen Index gibt an, ob es sich um Rechts- (+) oder Linksläufer (-) handelt.
- b) Für den Fall  $\nu = 0$  darf nur eines der beiden Vorzeichen ausgewertet werden, da ohne Reflexionen beide Trajektorien identisch wären. Sie unterscheiden sich sonst dadurch, an welcher Grenzfläche zuerst eine Reflexion stattfindet.
- c) In diesem Fall beginnt die Zählung bei  $\nu = 1$ .

Propagator	Ref./Transm. mit				Untere Gren- ze	Obere Gren- ze	$\Delta^M$	$\Delta^{\text{HL}}$	Bem.
	$R_0$	$R_1$	$T_1$	Pot.: $R=1$					
$\Delta_{2\nu}^{M \rightarrow M, \pm}$	$\nu$	$\nu$	0	0	siehe Bemerkung		$z - z_Q \pm 2\nu(z_1 - z_0)$	0	a), b)
$\Delta_{2\nu+1}^{M \rightarrow M, +}$	$\nu+1$	$\nu$	0	0			$z - z_Q + 2\nu z_1 - (2\nu + 1)z_0$	0	a)
$\Delta_{2\nu+1}^{M \rightarrow M, -}$	$\nu$	$\nu+1$	0	0			$z - z_Q + 2\nu z_0 - (2\nu + 1)z_1$	0	a)
$\Delta_{2\nu}^{M \rightarrow \text{HL}}$	$\nu$	$\nu$	1	0	0	$\frac{\pi}{2}$	$z_1 - z_Q + 2\nu(z_1 - z_0)$	$z - z_1$	
$\Delta_{2\nu+1}^{M \rightarrow \text{HL}}$	$\nu+1$	$\nu$	1	0	$\pi$	$\frac{\pi}{2}$	$z_Q - z_0 + (2\nu + 1)(z_1 - z_0)$	$z - z_1$	
$\Delta_{2\nu}^{\text{HL} \rightarrow M}$	$\nu$	$\nu$	1	0	$\pi$	$\vartheta_{\text{crit}}$	$-(z_1 - z + 2\nu(z_1 - z_0))$	$z_Q - z_1$	
$\Delta_{2\nu+1}^{\text{HL} \rightarrow M}$	$\nu+1$	$\nu$	1	0	0	$\tilde{\vartheta}_{\text{crit}}$	$z - z_0 + (2\nu + 1)(z_1 - z_0)$	$z_Q - z_1$	
$\Delta_0^{\text{HL} \rightarrow \text{HL}}$	0	0	0	0	0	$\frac{\pi}{2}$	0	$z - z_Q$	$z > z_Q$
$\Delta_0^{\text{HL} \rightarrow \text{HL}}$	0	0	0	0	$\pi$	$\tilde{\vartheta}_{\text{cut}}$	0	$z - z_Q$	$z < z_Q$
$\Delta_1^{\text{HL} \rightarrow \text{HL}}$	0	1	0	0	$\tilde{\vartheta}_{\text{crit}}$	$\frac{\pi}{2}$	0	$z + z_Q - 2z_1$	
$\Delta_{\text{Pot.}}^{\text{HL} \rightarrow \text{HL}}$	0	0	0	1	$\tilde{\vartheta}_{\text{cut}}$	$\tilde{\vartheta}_{\text{crit}}$	0	$z + z_Q - 2z_0$	
$\Delta_{2\nu-1}^{\text{HL} \rightarrow M \rightarrow \text{HL}}$	$\nu$	$\nu-1$	2	0	$\tilde{\vartheta}_{\text{crit}}$	$\frac{\pi}{2}$	$2\nu(z_1 - z_0)$	$z + z_Q - 2z_1$	c)

# Anhang C

## Rechnungen zur numerischen Implementation

### C.1 Korrektur der Matrixelemente zur Flusserhaltung

Wie zuvor bereits mehrfach gezeigt, muss der Teilchenfluss konstant sein an Orten, wo  $S^{\text{ext}} = 0$  gilt. Die Erhaltung des Flusses eignet sich deshalb gut als Kriterium bzw. „Diagnostik“, um die Güte der Implementation zu testen. Überprüft man die Flusserhaltung, stellt man fest, dass der Fluss schwächer wird, je weiter man sich von der Quelle entfernt. Die Diskrepanz wird jedoch kleiner, erhöht man die Anzahl der Gitterpunkte, was auf ein numerisches Problem hindeutet.

Das Problem liegt darin begründet, dass der Flusskern  $\varphi(z|z_Q)$  herangezogen wird, um damit den Fluss von  $(z_Q - \frac{\delta z}{2}, z_Q + \frac{\delta z}{2})$  nach  $(z - \frac{\delta z}{2}, z + \frac{\delta z}{2})$  zu berechnen, wobei  $\delta z$  der Abstand zwischen zwei Diskretisierungspunkten ist. Eigentlich müsste man

$$\int_{z_Q - \frac{\delta z}{2}}^{z_Q + \frac{\delta z}{2}} dz'_Q \int_{z - \frac{\delta z}{2}}^{z + \frac{\delta z}{2}} dz' \varphi(z'|z'_Q) \quad (\text{C.1})$$

berechnen. Im feldfreien, homogenen Fall ist dies auch analytisch möglich, sonst hingegen nur numerisch. Da eine numerische Integration effektiv eine Vervielfachung der Gitterpunkte bedeutet, ist dies keine praktikable Idee. Die explizite Form im feldfreien homogenen Fall (die hier nicht angegeben wird) zeigt aber, dass der Flusskern streng konvex ist und daher bislang systematisch zu klein berechnet wurde, was effektiv einen Teilchen- und Flussverlust bedeutet.

Da die direkte Integration nicht weiterführend ist, muss die Integration anders abgeschätzt werden, z. B. durch Mittelwertbildung der beiden Randpunkte<sup>1</sup>. Der Weg über Mittelwerte führte allerdings nicht zum Erfolg. Verschiedene Arten der Mittelwertbildung (arithmetisches, geometrisches und harmonisches Mittel) wurden mit verschiedenen Gewichtungen getestet, jedoch erhielt man nie ein Ergebnis, das die Flusserhaltung gewährleistet hat.

---

<sup>1</sup>Letztendlich wird eine konsequente Umsetzung des Mittelwertsatzes der Integralrechnung benötigt.

Stattdessen führt eine Methode zum Ziel, bei der für jeden Quellort der Flusskern für alle Zielorte mit einem konstanten Faktor korrigiert wird. Diese Faktoren sollen als lokale Korrekturfaktoren bezeichnet werden; lokal deshalb, weil die Faktoren für jeden Quellort bestimmt werden und nicht nur für jedes Energieniveau.

Diese Methode funktioniert wie folgt. Für ein festes  $z_Q$  berechnet man den Anteil der Dichte, die im System verbleibt. Dies geschieht auf zwei verschiedenen Arten: Zum einen über die Flusskerne mit denen man numerisch rechnet:

$$\Sigma_{\text{in}}^{\text{num}}(z_Q) = \sum_{i=0}^{N-1} \varphi(z|z_Q); \quad (\text{C.2})$$

zum anderen über den Fluss, da man weiß, dass alle Teilchen im System verbleiben, die nicht bei  $z_0$  oder  $z_2$  aus dem System fließen:

$$\Sigma_{\text{in}}^{\text{ana}}(z_Q) = 1 - |\phi(z_0|z_Q)| - |\phi(z_2|z_Q)|. \quad (\text{C.3})$$

Fordert man Gleichheit der beiden Werte, findet man den lokalen Korrekturfaktor

$$c_{\text{Korr}}(z_Q) = \frac{\Sigma_{\text{in}}^{\text{ana}}(z_Q)}{\Sigma_{\text{in}}^{\text{num}}(z_Q)} \quad (\text{C.4})$$

und die korrigierten Flusskerne sind  $\varphi_{\text{Korr}}(z|z_Q) = c_{\text{Korr}} \cdot \varphi(z|z_Q)$ . Da die Matrixelemente linear in  $\varphi$  sind, lassen sich alle Rechnungen auch mit den Matrixelementen durchführen. In allen hier durchgeführten numerischen Rechnungen werden stets die korrigierten Matrixelemente verwendet und auf den Index „Korr“ wird deshalb verzichtet.

## C.2 Behebung der Singularitäten im Flusskern

Zur Berechnung der Flusskerne müssen Integrale der Form

$$\varphi = -\frac{\partial}{\partial z} \int d\vartheta \sin \vartheta e^{-|\Delta^{\text{M}}|} e^{-|\Delta^{\text{HL}}|} \quad (\text{C.5})$$

gelöst werden, wobei die Propagatoren bekanntlich die Formen

$$\Delta^{\text{M}} = \frac{\hat{z} + \dots}{\tau_0 v_0 \cos \vartheta} \quad (\text{C.6})$$

$$\Delta^{\text{HL}} = \int_{z_Q}^{\hat{z}} \frac{dz'}{\tau(z') v_{\parallel}(z', \vartheta)} \quad (\text{C.7})$$

annehmen. Die Variable  $\hat{z}$  kann entweder für  $z$  oder  $z_1$  stehen, je nachdem, ob die Trajektorie im Halbleiter oder im Metall endet. Die Ableitung  $-\frac{\partial}{\partial z}$  wirkt deshalb entweder nur auf  $\Delta^{\text{M}}$  oder  $\Delta^{\text{HL}}$  wirkt. Die Integration erfolgt, wie gewohnt, in den Grenzen, die die kritischen Winkel

vorgeben. Zieht man die Ableitung ins Integral und führt sie aus, erhält man entweder einen Faktor  $\frac{1}{\tau_0 v_0 \cos \vartheta}$  oder  $\frac{1}{\tau(z) v_{\parallel}(z, \vartheta)}$ , je nachdem wo die Trajektorie endet. Dadurch divergiert der Integrand für  $\vartheta \rightarrow \frac{\pi}{2}$  bzw.  $\vartheta \rightarrow \vartheta_{\text{crit}}$ , was selbst bei sehr genauen Auflösungen zu großen Fehlern bei der numerischen Integration führt, wenn in die Nähe des jeweiligen kritischen Winkels die Integration durchgeführt wird. Daher muss die numerische Integration modifiziert werden.

**Für z im Metall,** also für  $\Delta^{\text{M}}(z)$ , lässt sich die Divergenz beheben, indem man den Teil des Integrals, der nach der Ableitung zur Divergenz führt, durch analytisch berechenbare Gewichtungsfaktoren  $w_m$  ersetzt. Man schreibt

$$\begin{aligned} \varphi &= -\frac{\partial}{\partial z} \int d\vartheta \sin \vartheta e^{-|\Delta^{\text{M}}(z, \vartheta)|} e^{-|\Delta^{\text{HL}}(\vartheta)|} \\ &= -\frac{\partial}{\partial z} \sum_{n=0}^{N-1} w_n(z) e^{-|\Delta^{\text{HL}}(\vartheta_n)|}, \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

wodurch man den Integrationsbereich in  $N$  gleich große Teilstücke aufgeteilt hat, deren Mittelpunkt je  $\vartheta_n$  ist. Die Randpunkte seien durch  $\vartheta_j$  bezeichnet, sodass  $\vartheta_n = \frac{\vartheta_{j+1} - \vartheta_j}{2}$  ist. Man drückt nun den Propagator im Metall durch den  $z$ -Propagator  $\Delta_z^{\text{M}} = \Delta^{\text{M}} \cdot \cos \vartheta$  aus. Die Gewichtungsfaktoren sind dann durch

$$W_n(z) = -\frac{\partial w_n(z)}{\partial z} \quad (\text{C.9})$$

$$= -\frac{\partial}{\partial z} \int_{\vartheta_j}^{\vartheta_{j+1}} d\vartheta \sin \vartheta \cdot \exp\left(-\frac{|\Delta_z^{\text{M}}(z)|}{\cos \vartheta}\right) \quad (\text{C.10})$$

$$= \frac{\text{sgn}(\Delta)}{\tau_0 v_0} \left( \text{Ei}\left(-\frac{|\Delta_z^{\text{M}}(z)|}{\cos \vartheta_{j+1}}\right) - \text{Ei}\left(-\frac{|\Delta_z^{\text{M}}(z)|}{\cos \vartheta_j}\right) \right) \quad (\text{C.11})$$

gegeben. Die Gewichtungsfaktoren  $W_n$  gehen dann für  $\vartheta \rightarrow \frac{\pi}{2}$  gegen null, wodurch es zu keiner Divergenz mehr kommt.

**Für z im Halbleiter,** also für  $\Delta^{\text{HL}}(z)$ , muss der Beitrag der anderen Exponentialfunktion in Gewichtungsfaktoren zerlegt werden. Hierzu ist es günstig, zunächst die Ableitung auszuführen, wodurch man

$$\varphi = \int d\vartheta \sin \vartheta \cdot e^{-|\Delta^{\text{M}}(\vartheta)|} \cdot e^{-|\Delta^{\text{HL}}(z, \vartheta)|} \cdot \frac{\text{sgn}(\Delta^{\text{HL}})}{\tau(z) v_{\parallel}(z, \vartheta)} \quad (\text{C.12})$$

erhält und dafür dann

$$\varphi = \sum_{n=0}^{N-1} W_n(z) e^{-|\Delta^{\text{M}}(\vartheta_n)|} \cdot e^{-|\Delta^{\text{HL}}(z, \vartheta_n)|} \cdot \frac{\text{sgn}(\Delta^{\text{HL}})}{\tau(z)} \quad (\text{C.13})$$

ansetzen kann, wobei die Winkeleinteilung wie im vorherigen Absatz erfolgt. Die Gewichte sind durch

$$W_n(z) = \int_{\vartheta_j}^{\vartheta_{j+1}} d\vartheta \frac{\sin \vartheta}{\sqrt{v_1^2 \cos^2 \vartheta - \frac{2\alpha}{m}(z - z_Q)}} \quad (\text{C.14})$$

definiert, wobei der explizite Ausdruck für  $v_{\parallel}(z)$  eingesetzt wurde. Dieses Integral lässt sich analytisch lösen und nach einer längeren Rechnung erhält man

$$W_n(z) = \frac{1}{v_1} \ln \left( \frac{|\cos \vartheta_j| + \sqrt{\cos^2 \vartheta_j - B}}{|\cos \vartheta_{j+1}| + \sqrt{\cos^2 \vartheta_{j+1} - B}} \right) \quad (\text{C.15})$$

mit  $B = \frac{2\alpha}{mv_1^2}(z - z_Q)$ . Der Logarithmus divergiert nur noch langsam für  $\alpha \rightarrow 0$ . Wählt man  $\alpha \cdot \delta z$  (mit der Diskretisierungsschrittweite  $\delta z$ ) groß genug im Verhältnis zur kinetischen Energie  $\frac{m}{2}v_1^2$ , treten keine Probleme bei der numerischen Integration auf.

# Literaturverzeichnis

- [1] I. Žutić, J. Fabian, and S. Das Sarma, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 323 (2004).
- [2] G. Binasch, P. Grünberg, F. Saurenbach, and W. Zinn, *Phys. Rev. B* **39**, 4828 (1989).
- [3] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. N. Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich, and J. Chazelas, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2472 (1988).
- [4] D. D. Awschalom and M. E. Flatte, *Nature Physics* **3**, 153 (2007).
- [5] J. Kikkawa and D. D. Awschalom, *Nature* **397**, 139 (1999).
- [6] I. Žutić and H. Dery, *Nature Mater.* **10**, 647 (2011).
- [7] F. Bronold, A. Saxena, and D. Smith, in *Advances in Research and Applications, Solid State Physics*, Vol. 58, edited by H. Ehrenreich and F. Spaepen (Academic Press, 2004) pp. 73–166.
- [8] G. Schmidt, D. Ferrand, L. W. Molenkamp, A. T. Filip, and B. J. van Wees, *Phys. Rev. B* **62**, R4790 (2000).
- [9] I. Appelbaum, *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **369**, 3554 (2011), <https://royalsocietypublishing.org/doi/pdf/10.1098/rsta.2011.0137> .
- [10] X. Jiang, R. Wang, R. M. Shelby, R. M. Macfarlane, S. R. Bank, J. S. Harris, and S. S. P. Parkin, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 056601 (2005).
- [11] C. Adelmann, X. Lou, J. Strand, C. J. Palmstrøm, and P. A. Crowell, *Phys. Rev. B* **71**, 121301 (2005).
- [12] M. Battiato and K. Held, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 196601 (2016).
- [13] E. Beaurepaire, J.-C. Merle, A. Daunois, and J.-Y. Bigot, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4250 (1996).
- [14] E. Turgut, C. La-o vorakiat, J. M. Shaw, P. Grychtol, H. T. Nembach, D. Rudolf, R. Adam, M. Aeschlimann, C. M. Schneider, T. J. Silva, M. M. Murnane, H. C. Kapteyn, and S. Mathias, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 197201 (2013).

- [15] A. J. Schellekens, N. de Vries, J. Lucassen, and B. Koopmans, *Phys. Rev. B* **90**, 104429 (2014).
- [16] A. Melnikov, I. Razdolski, T. O. Wehling, E. T. Papaioannou, V. Roddatis, P. Fumagalli, O. Aktsipetrov, A. I. Lichtenstein, and U. Bovensiepen, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 076601 (2011).
- [17] M. Battiato, K. Carva, and P. M. Oppeneer, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 027203 (2010).
- [18] M. Battiato, K. Carva, and P. M. Oppeneer, *Phys. Rev. B* **86**, 024404 (2012).
- [19] F. X. Bronold, K. Rasek, and H. Fehske, *Journal of Applied Physics* **128**, 180908 (2020), <https://doi.org/10.1063/5.0027406> .
- [20] K. Rasek, F. X. Bronold, and H. Fehske, *Phys. Rev. E* **102**, 023206 (2020).
- [21] B. Davison and J. B. Sykes, The laws of neutron migration, in *Neutron Transport Theory* (Oxford at the Clarendon Press, 1957) pp. 15–27.
- [22] L. Boltzmann, *Sitzungsberichte der kaiserlichen Akademie der Wissenschaften*, LXVI. Band , 275 (1872).
- [23] T. Fließbach, *Statistische Physik* (Springer, Berlin, 2018) Chap. 42, pp. 378–380, 6th ed.
- [24] G. Czycholl, *Theoretische Festkörperphysik* (Springer, Berlin, 2017) Chap. 1.3, p. 15.
- [25] F. Schwabl, Boltzmann-Gleichung, in *Statistische Mechanik* (Springer Berlin Heidelberg, 2006) pp. 445–487.
- [26] S. Hunklinger, *Festkörperphysik* (De Gruyter, Berlin/Boston, 2018) Chap. 9, pp. 351–352.
- [27] A. F. J. Levi, J. R. Hayes, P. M. Platzman, and W. Wiegmann, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 2071 (1985).
- [28] J.-P. Bouchaud and A. Georges, *Physics Reports* **195**, 127 (1990).
- [29] R. Metzler and J. Klafter, *Physics Reports* **339**, 1 (2000).
- [30] G. Placzek and W. Seidel, *Phys. Rev.* **72**, 550 (1947).
- [31] W. Westphal, Wärmestrahlung, in *Handbuch der Astrophysik: Band III / Erste Hälfte Grundlagen der Astrophysik Dritter Teil*, edited by G. Eberhard, A. Kohlschütter, H. Lüdendorff, E. A. Milne, A. Pannekoek, S. Rosseland, and W. Westphal (Springer, Berlin, Heidelberg, 1930) pp. 1–64.
- [32] M. Battiato and K. Held, Supplementary material to ultrafast and gigantic spin injection in semiconductors (2016).



- [33] J. J. Duderstadt and W. R. Martin, *Transport Theory* (Wiley, New York, 1979) Chap. 2, pp. 77–80.
- [34] W. Schottky, *Proceedings of the Institute of Radio Engineers* **14**, 695 (1926).
- [35] B. Baker, B. Johnson, and G. Maire, *Surface Science* **24**, 572 (1971).
- [36] A. Novikov, *Solid-State Electronics* **54**, 8 (2010).
- [37] S. Hunklinger, *Festkörperphysik* (De Gruyter, Berlin/Boston, 2018) Chap. 10, pp. 460–462.
- [38] R. Grossr and A. Marx, *Festkörperphysik* (De Gruyter, Berlin/Boston, 2018) Chap. 10, pp. 527–529.
- [39] M. A. Yeganeh and S. H. Rahmatollahpur, *Journal of Semiconductors* **31**, 074001 (2010).
- [40] S. Zhu, R. Van Meirhaeghe, C. Detavernier, G.-P. Ru, B.-Z. Li, and F. Cardon, *Solid State Communications* **112**, 611 (1999).
- [41] F. X. Bronold and H. Fehske, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 225001 (2015).
- [42] C. Wu and E. Yang, *Solid-State Electronics* **22**, 241 (1979).
- [43] V. P. Zhukov, E. V. Chulkov, and P. M. Echenique, *Phys. Rev. B* **73**, 125105 (2006).
- [44] L. M. Roth, Chapter 10 – dynamics and classical transport of carriers in semiconductors, in *Basic Properties of Semiconductors* (1992).
- [45] A. R. St. Denis and D. L. Pulfrey, *Journal of Applied Physics* **84**, 4959 (1998), <https://doi.org/10.1063/1.368740> .
- [46] M. M. Dignam and A. A. Grinberg, *Phys. Rev. B* **50**, 4345 (1994).
- [47] J. C. Phillips, *Phys. Rev. Lett.* **20**, 550 (1968).
- [48] X. Yang, X. Liu, S. Yu, L. Gan, J. Zhou, and Y. Zeng, *Electronics* **8**, 10.3390/electronics8080886 (2019).
- [49] D. M. Nenno, B. Rethfeld, and H. C. Schneider, *Phys. Rev. B* **98**, 224416 (2018).
- [50] J. L. Cheng, M. W. Wu, and J. Fabian, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 016601 (2010).

## Danksagung

Auf dem Weg zur Erstellung dieser Arbeit hat mich eine Reihe von Leuten unterstützt, denen ich zu Dank verpflichtet bin. Zuerst wäre da der Betreuer dieser Arbeit, Franz Bronold, zu nennen, der dieses spannende Thema vorgeschlagen hat und mir bei allen auftretenden Problemen auf teilweise wenig ausgetretenen Pfaden mit Rat und Tat zur Seite stand. Auch bei den anderen Mitgliedern der AG Fehske möchte ich mich bedanken für die vielen freundlichen Gespräche, auch wenn aufgrund der Corona-Pandemie die Kaffee-Runden seltener waren. Besonders aber möchte ich Kristopher V. J. Rasek hervorheben, der mich mit vielen anregenden Gesprächen und Diskussionen bei Laune gehalten hat und mir insbesondere bei numerischen Problemen häufig weitergeholfen hat und mir dabei viele Stunden mühseliger Internetrecherche erspart hat.

Darüber hinaus gilt meinen Eltern, nicht nur für die finanzielle Unterstützung während des Studiums, mein allergrößter Dank.