Zweiteilchen–Korrelationen in kristallinen Systemen

CHEMNITZ UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

K. Morawetz[1,2], E. P. Nakhmedov[1], B. Schmidt[1], M. Schreiber[1], C. Radehaus[1]

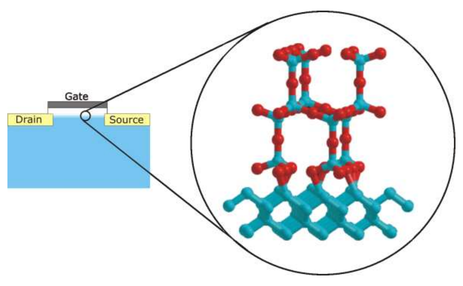
[1]Institute of Physics, Technical University Chemnitz, 09107 Chemnitz, Germany
[2]Max-Planck-Institut für Physik komplexer Systeme, Nöthnitzer Straße 38, 01187 Dresden

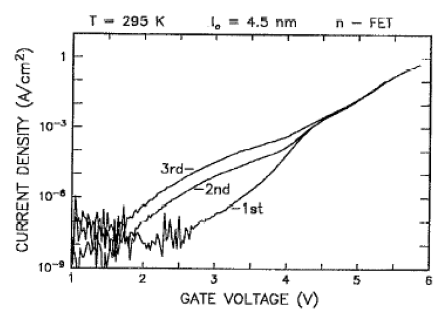
MAX-PLANCK-GESELLSCHAFT

Motivation

Experimentelles Problem:
Degradation und Alterung in Metall–Oxid–Halbleiter(MOS) Strukturen (MOSFETs)

Anlegen einer Gatespannung führt zu Tunnelstrom durch Oxide, der mit Laufzeit ansteigt (stress–induced leakage current)





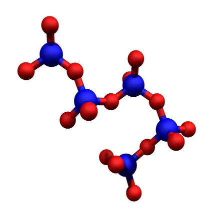
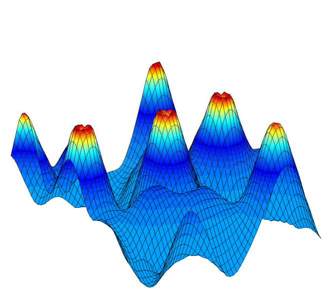
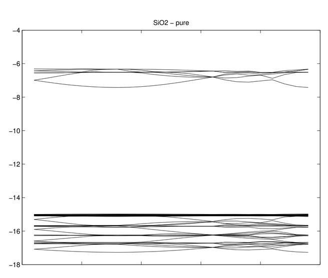
Strom-Spannungs Kennlinie für einen n-Kanal FET mit einer Gate Oxiddicke von 4.5nm und Raumtemperatur bei 3 sukzessiven Spannungserhöhungen. (D.J. DiMaria et al. J.Appl. Phys. 78 (1995)3883)

Atomare Struktur

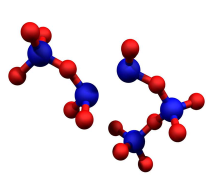
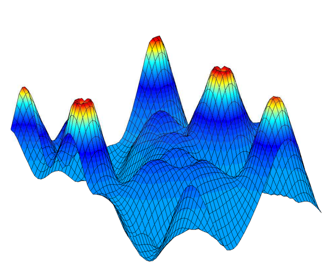
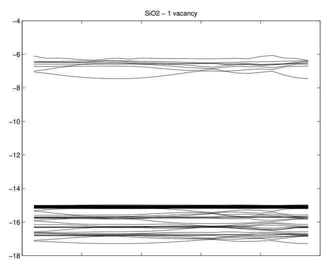
DFT-Simulation mit Pseudopotential and LDA:
72 Atome (24 $Si0_2$ Einheiten) in Superzelle

Elektronendichte

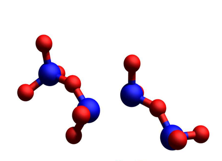
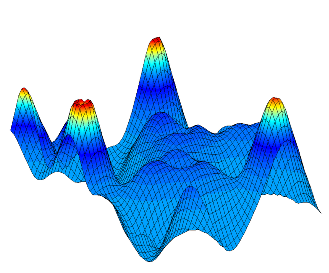
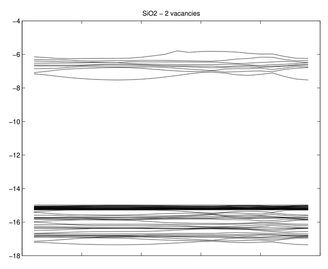
Bandstruktur

Reines $Si0_2$ ($\alpha-$Quartz)

Eine neutrale Fehlstelle (O)

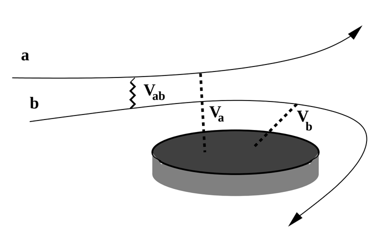
Zwei neutrale Fehlstellen

K L M N O P

Vielteilchentheorie

2-Kanal Streutheorie (Gell-Mann and Goldberger, Phys. Rev. 91 (1053) 398)

$$T = T_1 + (1 + V_1\mathcal{G}_1)T_{ab}(1 + \mathcal{G}_1 V_1)$$



2-Teilchen Streuung an Nanostruktur

Ein-Teilchen T-Matrix
$T_1 = V_1 + V_1\mathcal{G}_1 V_1 \quad V_1 = V_1 + V_b$

und 2-Teilchen T-matrix
$T_{ab} = V_{ab} + V_{ab}\mathcal{G}_1 T_{ab}$

Einteilchen Lösung
$\mathcal{G}_1^{-1} = \omega - \mathcal{H}_1, \quad \mathcal{H}_1\Psi_{n_1} = E_{n_1}\Psi_{n_1}$

Freie 2-Teilchen Streuung: (Mediumeffekte)

$$T_{ab}(pp') = V_{p,p'} + \int dq V_{p,q} \frac{1 - f_{K+\frac{q}{2}} - f_{K-\frac{q}{2}}}{\omega - \frac{K^2}{4m} - \frac{q^2}{m} + i0} T_{ab}(pp')$$

numerisch oder analytisch mit $V_{p,p'} = \lambda g_p g_{p'}$ gelöst

2-Teilchen Streuung an endlicher Nanostruktur
(K. Morawetz, M. Schreiber, B. Schmidt, A. Ficker and P. Lipavský, cond-mat/0409325):

$$T_{ab}(pp') = \frac{\lambda g_p g_{p'}}{1 - J(\omega, K)}$$

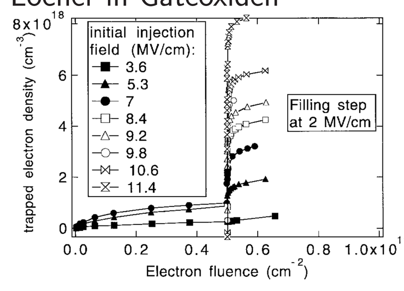
$$J(\omega, K) = \sum_{n_1,n_2} \frac{G_{n_1,n_2}(K)\int dK' G_{n_1,n_2}(K')}{\omega - E_n - E_{n_2}}$$

mit Potentialformfaktor g projiziert auf Einteilchenwellenfunktion

$$G_{n_1,n_2}(K') = \int dq\, g_q\, \Psi_{n_1}(Q + q/2)\Psi_{n_2}(Q - q/2)$$

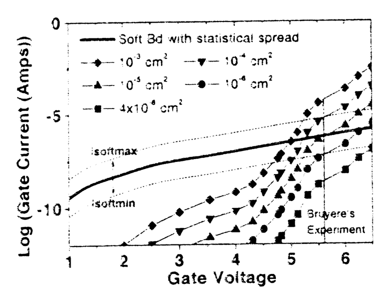
Schwacher Durchbruch

Bisherige experimentelle Studien:
Mechanismus beruht auf Einfangen und Lokalisierung von Elektronen durch Löcher in Gateoxiden



Elektronendichte im Oxid als Funktion des injizierten integrierten Elektronenstromes. (R. Degraeve et al. IEEE Trans. on El.Dev. 45 (1998) 904)

Normales Verhalten wieder nach Abschalten der Spannung, wiederholte Messung möglich



Strom nach dem schwachen Durchbruch über Tunnelstrom für verschiedene Flächen. (Bilder: M.A. Alam: IEEE Trans. Elec. Dev. 49 (2002) 239)

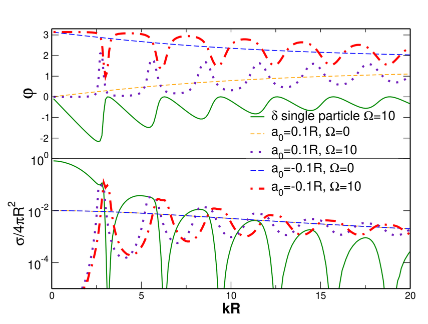
Grenzen der Simulation und Ziele

- Korrelationsabstand der Fehlstellen nur mit sehr großen Superzellen simulierbar ($\propto n^3$)
- Kombinierte analytische und numerische Methoden nötig
- Statt neutraler Fehlstellen sollen geladene Atome oder Elektronen benutzt werden
- Damit Studium der Abhängigkeit der Zweiteilchenkorrelationen von der Ladung und Charakter der substituierten Atome möglich
- Einfluß von Korrelationen zwischen zwei und mehr Defektstellen auf die Bandstruktur
- Einfluß von Zweiteilchenkorrelationen auf Transporteigenschaften

Exakt lösbares Testmodell

2-Teilchen (Kontaktpotential) an halbdurchlässiger Kugel als Quantenstruktur ($V_a = \Omega\delta(R - r)$)

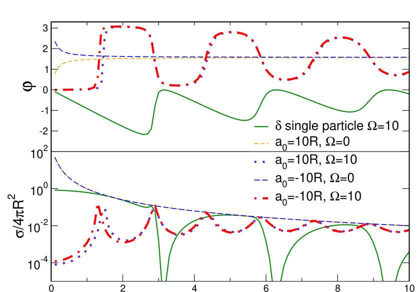
Resultate für Kontaktwechselwirkung
$\Omega = 10\ ,\ a_0 = \pm 0.1R$:



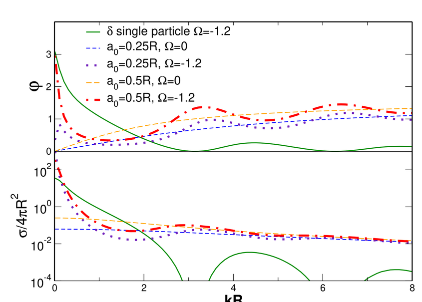
$\delta =$ Einteilchen Phasenshift
$\varphi^\infty =$ freier Zweiteilchen Phasenshift für Kontaktwechselwirkung ohne Quantenstruktur
$a_0 =$ Zweiteilchen Streulänge
$\varphi =$ Freier Zweiteilchen Phasenshift für Kontaktwechselwirkung und Quantenstruktur

- $\delta < 0$ repulsives Potential
- Quantenstruktur erzeugt Oszillationen in φ um den freien Wert

$\Omega = 10,\ a_0 = \pm 10R$:



$\Omega = -1.2,\ a_0 > 0$:



- Zweites Maximum in Streuquerschnitt $\Rightarrow$ Interferenz zwischen Ein- und Zweiteilchen Eigenschaften
- Bindungszustände aufgebrochen für den Fall mit Quantenstruktur
- keine Bindungszustände für φ^∞
- Negative (attraktive) Opazität ermöglicht Bindungszustände

Bedeutung der Zweiteilchenkorrelationen

1. Degradationsproblem
   - Bei Anlegen der Spannung werden Defekte erzeugt
   - Diese werden nicht vollständig abgebaut, da sie korreliert sind
   - Korrelation zwischen Defekten führt zu gerichteter Perkolationsspur
2. Korrelierte Störstellen
   - Langreichweitige Korrelationen führen zu farbigem Rauschspektrum
   - Simulationsresultate zeigen Metall-Isolator Übergang
   - Korrelationen führen zu Verringerung der Bandlücke

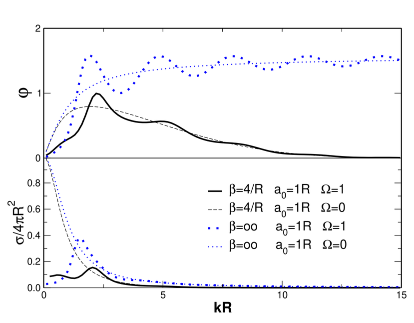
Resultate für Potential mit endlicher Reichweite

Endliche Reichweite

- Wählen exponentiellen Formfaktor des Potentials $g_q = \beta^{-2}e^{-q^2/4\beta^2}$
- Grenzfall $\beta \to \infty$ ist Kontaktpotential
- Halbdurchlässige Kugel als Hintergrund-Hamiltonian

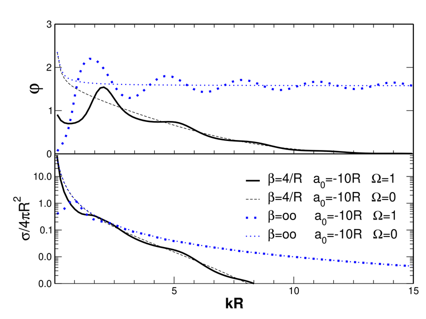
Vergleiche Fall des Kontaktpotentials (blau) mit Fall endlicher Reichweite (schwarz):

$\beta = 4/R,\ a_0 = 1R,\ \Omega = 1$:



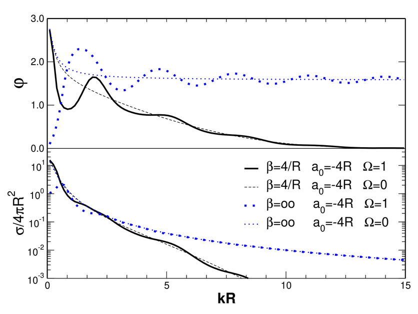
- Keine Bindungszustände für Kontaktpotential und endliche Reichweite
- $\varphi \to 0$ for $kR \to \infty$

$\beta = 4/R,\ a_0 = -10R,\ \Omega = 1$:



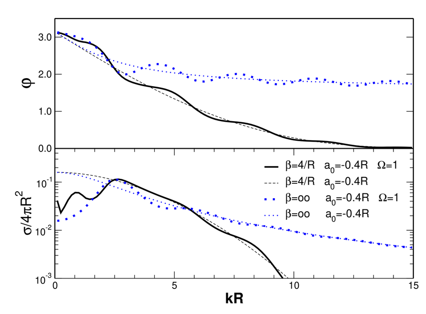
- Endliche Reichweite des Potentials: Bindungszustände für die Fälle mit und ohne Quantenstruktur
- Kontaktwechselwirkung: Keine Bindungszustände für den Fall mit endlicher Quantenstrucktur

$\beta = 4/R,\ a_0 = -4R,\ \Omega = 1$:



- Endliche Reichweite: Bindungszustände für den Fall mit und ohne Quantenstruktur
- Kontaktwechselwirkung: Keine Bindungszustände mit Quantenstruktur

$\beta = 4/R,\ a_0 = -0.4R,\ \Omega = 1$:



- Bindungszustände für beide Fälle

Zusammenfassung

1. Bethe-Salpeter(BS)-Gleichung gelöst mittels separablen Modellpotentials und den Wellenfunktionen eines exakt lösbaren Einteilchenproblems als Eingabe
2. Zusätzliche Oszillationen im Phasenshift durch endliche Quantenstruktur
3. Aufspaltung der Maxima im Streuquerschnitt durch Interferenzeffekte
4. 2-Teilchen Bindungszustände abhängig von Streulänge und Stärke der endlichen Quantenstruktur
5. Numerische Implementation von realistischen Wellenfunktionen möglich

Ausblick

1. Rückwirkung von Zweiteilchenkorrelationen auf Bandstruktur
2. Modifikation der DFT-Codes durch 2-Teilchenkorrelationen
3. Implementation der BS-Lösung als selbstkonsistente Iteration in ab-initio-Einteilchencodes
4. Simulation der Herausbildung einer Perkolationsspur, Anwendung auf Degradationsprobleme