

Anhang A

Die Methode der finiten Differenzen

In diesem Anhang werden die Formeln zusammengestellt, die sich bei der Lösung des gekoppelten Differentialgleichungssystems (3.73)–(3.75) mit Hilfe der Methode der finiten Differenzen ergeben.

A.1 Approximation der Differentialquotienten

Zur Diskretisierung des Gleichungssystems benutzen wir ein nicht-äquidistantes Gitter mit Gitterpunkten x_j ($j = 0, 1 \dots m$) im Intervall $[x_0, x_m]$ und Abständen $h_j = x_j - x_{j-1}$ (vgl. Abb. A.1). Die ersten und zweiten Differentialquotienten einer beliebigen Funktion $f(x)$ werden im Finite-Differenzen-Schema im allgemeinen approximiert durch [70]

$$f'(j) = \frac{1}{2} \left\{ \frac{f(j+1) - f(j)}{h_{j+1}} + \frac{f(j) - f(j-1)}{h_j} \right\}, \quad (\text{A.1})$$

$$f''(j) = \frac{f(j+1) - f(j)}{h_{j+1} \bar{h}_j} - \frac{f(j) - f(j-1)}{h_j \bar{h}_j} \quad (\text{A.2})$$

mit

$$\bar{h}_j = \frac{h_{j+1} + h_j}{2}, \quad (\text{A.3})$$

wobei $f(j) = f(x_j) \dots$. In einem modifizierten Schema (vgl. Ref. [48], Kap. 6.1) werden Zwischengitterpunkte an den Stellen $x_{j-1/2} = x_j - h_j/2$, $x_{j+1/2} = x_j + h_{j+1}/2$ eingeführt und die ersten Ableitungen an diesen Stellen geschrieben als

$$f'(j-1/2) = \frac{f(j) - f(j-1)}{h_j}, \quad (\text{A.4})$$

$$f'(j+1/2) = \frac{f(j+1) - f(j)}{h_{j+1}}. \quad (\text{A.5})$$

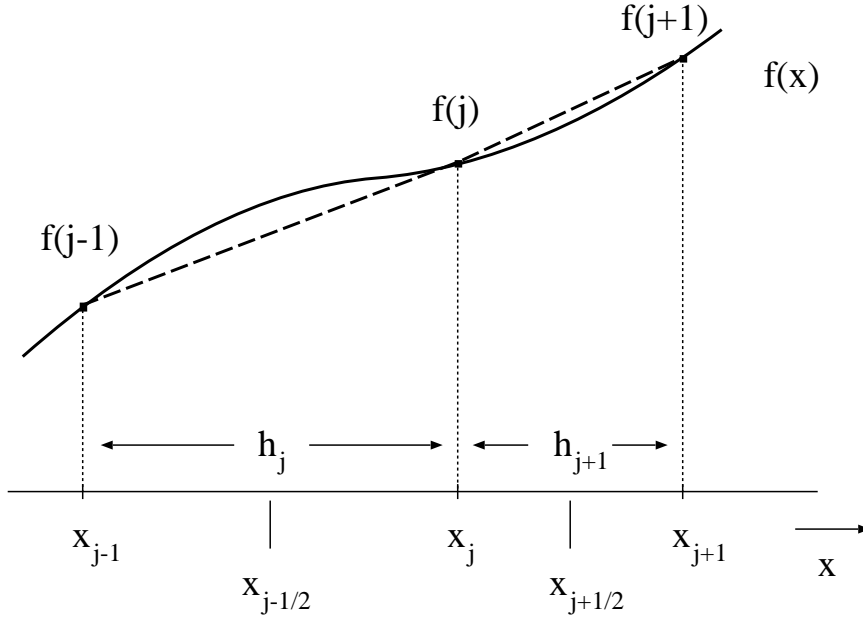


Abbildung A.1: Indizierung des Gitters mit variablem Abstand der Gitterpunkte

Durch Ersetzen aller Ableitungen in dem System (3.73)–(3.75) durch die Ausdrücke (A.1) und (A.2) bzw. durch die entsprechenden Ausdrücke im modifizierten Schema ergibt sich ein nichtlineares algebraisches Gleichungssystem der Dimension $3(m + 1)$ in den Unbekannten $E_c(j)$, $E_F^e(j)$, $E_F^h(j)$ ($j = 0, 1, \dots, m$), das wir mit einem auf der Methode von Powell basierenden Verfahren [71] numerisch lösen.

A.2 Diskretisierung der Poisson-Gleichung

Aus der Poisson-Gleichung (3.73) ergeben sich mit Gl. (A.2) im Finite-Differenzen-Schema die algebraischen Gleichungen ($j = 0, 1, \dots, m$)

$$\frac{h_j}{h_{j+1}} [E_c(j + 1) - E_c(j)] - [E_c(j) - E_c(j - 1)] - h_j \bar{h}_j u_j = 0 \quad (\text{A.6})$$

mit

$$u_j = -\frac{e^2}{\epsilon} [n(j) - p(j) - N_d] + \frac{1}{h_j} \frac{e}{\epsilon} \sum_{i=1}^n q_t^{(i)} \delta_{ij}, \quad (\text{A.7})$$

wobei die Ladungsträgerdichten $n(j)$ bzw. $p(j)$ Funktionen von $E_c(j)$ und $E_F^e(j)$ bzw. von $E_c(j)$ und $E_F^h(j)$ sind. Bei der Schreibweise der Summe in Gl. (A.7) bedeutet $i = j$, daß die Korngrenze bei x_i in das Intervall $[x_j, x_{j+1}]$ fällt, der Grenzflächenterm also einen Beitrag liefert (die Äquivalenz dieses Terms zu dem entsprechenden Term in der kontinuierlichen Darstellung von Gl. (3.73) ist offensichtlich).

A.3 Diskretisierung der Drift-Diffusions-Gleichungen

Zur Diskretisierung der Drift-Diffusions-Gleichungen (3.74) und (3.75) wenden wir das modifizierte Schema an, in dem die ersten Ableitungen an den Zwischengitterpunkten durch die Ausdrücke (A.4) und (A.5) ersetzt werden. Dazu gehen wir zurück auf Gln. (3.63) und (3.64) für die Drift-Diffusions-Ströme. Für den Elektronenstrom $j_e(j \pm 1/2)$ an den Zwischengitterpunkten erhalten wir

$$j_e(j + 1/2) = \mu_e n(j + 1/2) \frac{E_F^e(j + 1) - E_F^e(j)}{h_{j+1}}, \quad (\text{A.8})$$

$$j_e(j - 1/2) = \mu_e n(j - 1/2) \frac{E_F^e(j) - E_F^e(j - 1)}{h_j}, \quad (\text{A.9})$$

wobei die Elektronendichten $n(j \pm 1/2)$ Funktionen von $E_c(j \pm 1/2)$ und $E_F^e(j \pm 1/2)$ sind. Diese Zwischengitterwerte wiederum werden als Mittelwerte der Funktionswerte an den benachbarten Gitterpunkten berechnet. Die Kontinuitätsgleichung (3.65) wird nun in der Form

$$\frac{j_e(j + 1/2) - j_e(j - 1/2)}{\bar{h}_j} - G_e(j) + R_e(j) = 0 \quad (\text{A.10})$$

dargestellt. Einsetzen der Ausdrücke (A.8) und (A.9) sowie der expliziten Form (3.67) und (3.68) für die Raten G_e und R_e liefert dann die algebraischen Gleichungen, die die Drift-Diffusions-Gleichung (3.74) für die Elektronen in diskretisierter Form darstellen ($j = 0, 1, \dots, m$):

$$\begin{aligned} & \frac{n(j + 1/2)}{n(j - 1/2)} \frac{h_j}{h_{j+1}} [E_F^e(j + 1) - E_F^e(j)] \\ & - [E_F^e(j) - E_F^e(j - 1)] - h_j \bar{h}_j w_j^{(e)} = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

mit

$$w_j^{(e)} = \frac{1}{n(j) \mu_e} \left[-e G + \frac{e}{\bar{h}_j} \sum_{i=1}^n S_{\text{SRH}}^{(i)} \delta_{ij} \right]. \quad (\text{A.12})$$

Für die Summe über die Grenzflächenterme gelten die Bemerkungen, die wir oben in Bezug auf die entsprechenden Terme in der Poisson-Gleichung gemacht haben.

Ganz analog erhält man die algebraischen Gleichungen, die die Drift-Diffusions-Gleichung (3.75) für die Löcher in diskretisierter Form darstellen ($j = 0, 1, \dots, m$):

$$\begin{aligned} & \frac{p(j + 1/2)}{p(j - 1/2)} \frac{h_j}{h_{j+1}} [E_F^h(j + 1) - E_F^h(j)] \\ & - [E_F^h(j) - E_F^h(j - 1)] - h_j \bar{h}_j w_j^{(h)} = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

mit

$$w_j^{(h)} = \frac{1}{p(j) \mu_h} \left[e G - \frac{e}{\hbar_j} \sum_{i=1}^n S_{\text{SRH}}^{(i)} \delta_{ij} \right]. \quad (\text{A.14})$$

A.4 Randbedingungen

Das Gitter sei so gewählt, daß der Anfangspunkt x_0 mit der Anfangskoordinate x_0 der Probe und der Endpunkt x_m mit der Endkoordinate $x_0 + S$ zusammenfällt.

Die Randbedingungen (3.83)–(3.85) lassen sich schreiben als

$$E_c(0) = E_c(x_0), \quad (\text{A.15})$$

$$E_F^e(0) = E_F^{\text{vol}}, \quad (\text{A.16})$$

$$E_F^h(0) = E_F^h(x_0), \quad (\text{A.17})$$

wobei $E_c(x_0)$ und $E_F^h(x_0)$ durch numerische Lösung von Gl. (3.85) bzw. Gl. (3.84) bestimmt werden.

Entsprechend werden die aus Gln. (3.80)–(3.82) folgenden Randbedingungen geschrieben als

$$E_c(m) = E_c(0) - eV, \quad (\text{A.18})$$

$$E_F^e(m) = E_F^e(0) - eV, \quad (\text{A.19})$$

$$E_F^h(m) = E_F^h(0) - eV. \quad (\text{A.20})$$

In den Gleichungssystemen (A.6), (A.11) und (A.13) treten die gesuchten Funktionen nicht nur an den im Intervall $[x_0, x_m]$ gelegenen Gitterpunkten auf, sondern auch jeweils an einer Stelle links und rechts von diesem Intervall. Zum Beispiel tritt in dem System (A.6) für $j = 0$ der Wert $E_c(-1)$ und für $j = m$ der Wert $E_c(m+1)$ auf. Für eine periodische Anordnung lassen sich diese Werte mittels periodischer Fortsetzung der Randbedingungen (A.18)–(A.20) durch Werte an solchen Stellen ausdrücken, die im Intervall $[x_0, x_m]$ liegen:

$$E_c(m \pm 1) = E_c(\pm 1) - eV, \quad (\text{A.21})$$

$$E_F^e(m \pm 1) = E_F^e(\pm 1) - eV, \quad (\text{A.22})$$

$$E_F^h(m \pm 1) = E_F^h(\pm 1) - eV. \quad (\text{A.23})$$

Damit lauten z.B. in dem System (A.6) die Gleichung für $j = 0$

$$\frac{h_m}{h_1} [E_c(1) - E_c(0)] - [E_c(0) - E_c(m-1) - eV] - h_m \bar{h}_{1,m} u_0 = 0 \quad (\text{A.24})$$

und die Gleichung für $j = m$

$$\frac{h_m}{h_1} [E_c(1) - eV - E_c(m)] - [E_c(m) - E_c(m-1)] - h_m \bar{h}_{1,m} u_m = 0, \quad (\text{A.25})$$

wobei wir Periodizität der Abstände der Gitterpunkte angenommen haben,

$$h_0 = h_m, \quad h_{m+1} = h_1, \quad (\text{A.26})$$

und

$$\bar{h}_{1,m} = \frac{h_1 + h_m}{2} \quad (\text{A.27})$$

gesetzt haben. Wenn man die Werte $E_c(0)$ bzw. $E_c(m)$ in Gl. (A.24) bzw. (A.25) durch die Randbedingungen (A.15) bzw. (A.18) ersetzt und die Periodizitätsbedingung $u_m = u_0$ (die aus der Periodizität der Trägerdichten folgt) berücksichtigt, erkennt man, daß Gl. (A.24) und Gl. (A.25) identisch sind. Wie zu erwarten, reduziert sich also im periodischen Fall die Zahl der unabhängigen Gleichungen in dem System (A.6) auf m .

Entsprechendes gilt für die Gleichungssysteme (A.11) und (A.13), so daß die gesamte Dimension des numerisch zu lösenden algebraischen Gleichungssystems gleich $3m$ ist.