

Abschlußbericht

Vorhaben:	Monte-Carlo-Bauelementsimulationen für verspanntes SiGe-Material und HBTs
Förderkennzeichen:	01 M 2416 C
Projektleiter:	Prof. Dr.-Ing. Dipl.-Math. B. Meinerzhagen
Autoren:	S. Decker, S. Keith, M. Bartels, B. Neinhüs, C. Jungemann und B. Meinerzhagen
Projektzeitraum:	01.07.1997 – 30.06.2000



Institut für Theoretische Elektrotechnik
und Mikroelektronik



Universität Bremen

Die im Vorgängerprojekt entwickelten Monte-Carlo-Simulatoren zur Simulation von verspanntem Si-Ge (Bulk- und Bauelement-Simulator) wurden durch einem im Rahmen dieses Projektes entwickelten rechenzeiteffizienten und experimentell verifizierten Fullband-Monte-Carlo-Simulator ersetzt. Die hierzu benötigten Bandstrukturdaten, die vom Germaniumgehalt abhängen, wurden mit Hilfe der Pseudopotentialmethode berechnet. Ein flexibler Gitteralgorithmus ermöglicht es, bei der Diskretisierung der Bandenergie im irreduziblen Bereich der Brillouinzone ein vorgegebenes (dynamisches) Fehlerkriterium zu berücksichtigen. Die vom Algorithmus erstellten diskretisierten Bandstrukturdaten sind zudem speichereffizient genug, um auch die Simulation von SiGe-Heterobipolartransistoren mit komplexeren Germaniumprofilen zu ermöglichen. Die mit Hilfe der Fullband-Monte-Carlo-Methode berechneten Transportparameter werden als Eingabegröße für klassische Bauelementsimulatoren (DD, HD) verwendet und wurden an die Projektpartner übergeben. Die Simulation ausgewählter HBT-Strukturen mittels der FBMC-Methode umfaßt erstmals auch transiente Kenngrößen wie z.B. die Transitfrequenz. Diese Simulationen dienen als Referenz zur Verifikation der klassischen Bauelementsimulatoren (DD, HD). In die Simulationen wurden auch Quantenpotentialmethoden zur Berücksichtigung von Intraband-Tunneleffekten einbezogen. Insgesamt betrachtet ist das HD-Modell genauer als das DD-Modell. Die klassischen Bauelementsimulatoren können zur Durchführung von Mixed-Level-Simulationen in einen Schaltkreissimulator integriert werden; hiermit wurde der Einfluß der Stoßionisation auf das Verhalten eines Mobilfunk-Leistungsverstärkers untersucht.

The Monte Carlo device and bulk simulators for strained SiGe structures, previously developed in the BMBF project 01M2416A, have been replaced by an experimentally verified and computationally efficient full band Monte Carlo simulator. The germanium-dependent band structure data has been calculated with the empirical pseudo-potential method. In order to compute the band energy in the irreducible wedge of the Brillouin zone, the band energy is discretized by an adaptive grid generation algorithm which allows to specify an upper bound for the discretization error. The amount of generated band structure data is small enough to hold multiple band structure data for different germanium contents in computer memory.

The developed full band simulator was used to generate a set of transport parameter data, which serves as input for classical device simulators (DD, HD). This data was transferred to the project partners. The simulation of typical HBT structures with the full band Monte Carlo device simulator also included transient quantities like the transit frequency. The results were used as reference for comparisons with classical DD and HD device simulators. The simulations were extended using a quantum potential method in order to take intra-band tunneling into account. It was shown that the HD model is more accurate than the DD model.

The classical DD and HD simulators have been integrated in the framework on a mixed-level circuit simulator. This circuit simulator was used to examine the influence on impact ionization for a typical radio-frequency power amplifier design.

Inhalt

Zusammenfassung	5
Veröffentlichungen	9
1 Full-Band-Monte-Carlo-Bauelementsimulator	11
1.1 Einführung	11
2 Bandstruktur von $Si_{1-x}Ge_x$-Legierungen	12
2.1 Diskretisierung der Brillouinzone	14
2.1.1 Leitungsbandstruktur	19
2.1.2 Valenzbandstruktur	21
2.2 Streuprozesse in $Si_{1-x}Ge_x$ -Legierungen	24
2.2.1 Phonon-Streuung	24
2.2.2 Legierungsstreuung	27
2.2.3 Störstellenstreuung	28
2.2.4 Stoßionisation	29
2.3 Bandlücke in $Si_{1-x}Ge_x$ -Legierungen	32
3 Full-Band-Monte-Carlo-Simulation homogener Transportparameter	37
3.1 Ohmsche Beweglichkeiten	37
3.2 Massentensor	38
3.3 Driftgeschwindigkeiten	42
4 Full-Band-Monte-Carlo-Simulationen von SiGe-HBTs	44
4.1 Einführung	44
4.2 Der Monte-Carlo-Algorithmus	45
4.3 Ladungstransport über Heteroübergänge	47
4.4 Vergleichssimulationen: Full-Band-Monte-Carlo – Analytisch	52
4.5 Vergleichssimulationen: Full-Band Monte-Carlo – Hydrodynamik	55
4.6 Effizientes 1D-Monte-Carlo-Modell eines HBTs	59
4.7 Simulation der Generationsrate in einer 1D HBT-Struktur	64
5 Genauigkeitsprüfung des DD- und HD-Modells für HBTs	69
5.1 Tunneleffekte	69
5.2 Fazit	70
6 Transportparametersimulation für verspanntes SiGe	77
6.1 Das Hydrodynamische Bilanzgleichungssystem	77
6.1.1 Driftgeschwindigkeiten	78
6.1.2 OHmsche Beweglichkeiten	78
6.1.3 Mittlere Energie	79
6.1.4 Energierelaxationszeit	79

7 Optimierung der B/C-Diode eines HBTs	91
7.1 Modellstruktur und Verifikation	91
7.2 Schaltung eines Mobilfunk-Leistungsverstärkers	91
7.3 Mixed-Level-Simulationsergebnisse	91
7.4 Zusammenfassung	93
Abbildungen	103
Tabellen	107
Literatur	109

Zusammenfassung

Der vorliegende Bericht faßt die im Rahmen des Forschungsprojektes 01 M 2416 C „Monte-Carlo Simulationen für verspanntes SiGe-Material und HBTs“ erzielten Ergebnisse zusammen. Das Projekt wurde am Institut für Theoretische Elektrotechnik und Mikroelektronik (ITEM) der Universität Bremen bearbeitet. Es wurde im Rahmen des Verbundprojektes „(LOTUS II) Si/SiGe-NT-Technologien für schnelle analoge und digitale Schaltkreise“ in enger Zusammenarbeit mit den Verbundprojektpartnern Daimler-Chrysler Ulm (DBU), Institut für Halbleiterphysik Frankfurt/Oder (DBU), Ruhr-Universität Bochum (RUB), Technische Universität Ilmenau (TUI), Universität Stuttgart (UST) und der Universität Ulm (UUL) durchgeführt. Das Projekt hatte zwei wesentliche Ziele: Erstens sollte das EUREKA-Projekt SIGMA mit Hilfe der klassischen numerischen Bauelementsimulation unterstützt werden. Hierbei sollten die Optimierung des Durchbruchverhaltens des SiGe Heterobipolartransistors (HBT) und exemplarische Schaltkreissimulationen mit numerischen HBT Modellen für Detailoptimierungen auf der Schaltungsebene im Vordergrund stehen. Zweitens sollten die im Rahmen des Vorgängerverbundvorhabens LOTUS entwickelten Monte-Carlo Simulatoren für verspanntes SiGe-Material und SiGe-HBTs weiterentwickelt und für die Transportparameterbestimmung bzw. für Referenzsimulationen zur Genauigkeitskontrolle der klassischen numerischen Bauelementsimulation genutzt werden. Beide Projektziele und auch die in der LOTUS II Projektskizze genannten Meilensteine wurden voll erreicht.

Während der Projektlaufzeit war es notwendig, den zunächst vorgesehenen Arbeitsplan zu modifizieren. Um die Modellgenauigkeit insbesondere bei höheren Gittertemperaturen und höheren treibenden Feldstärken zu verbessern (siehe erster und zweiter Zwischenbericht), war es notwendig, den SiGe-Materialsimulator von der zunächst zugrundegelegten analytischen Bandstrukturbeschreibung auf die vollständige Bandstrukturbeschreibung (Full-Band) umzustellen. Dies wurde durch neuartige, effizienzsteigernde Algorithmen [1] und die günstige Entwicklung der Hauptspeichergrößen bei Arbeitsplatzrechnern ermöglicht. Diese Umstellung führte zu erheblichen Mehrarbeiten beim Materialmodell, da das neue Modell erneut verifiziert und alle Transportparameter für die klassische numerische Bauelementsimulation neu berechnet werden mußten.

Ferner wurde dadurch auch eine Umstellung des Monte-Carlo Bauelementsimulators auf die vollständige Bandstrukturbeschreibung notwendig. Im Vergleich zur ursprünglichen Planung, nur in den Si-Regionen die vollständige Bandstruktur zu berücksichtigen, führte diese Umstellung zum zusätzlichen Vorteil, daß an den Heteroübergängen kein Bandstrukturbeschreibungswechsel auftritt, der den Teilchentransport in unphysikalischer Weise empfindlich stören kann. Ein großer Teil der für diese Umstellungen notwendigen außerplanmäßigen Zusatzarbeiten wurde dabei vom Oberingenieur des Institutes, Herrn Dr. Jungemann, durchgeführt. Die Genauigkeit des Monte-Carlo Modells hat durch diese Umstellung stark zugenommen. Dies zeigt nicht zuletzt die Tatsache, daß es dem ITEM in Zusammenarbeit mit dem IHP inzwischen gelungen ist, die Minoritätsträgerbeweglichkeit der Elektronen in verspanntem SiGe aus Magnetotransportmessungen zu extrahieren. Das Ergebnis dieser Zusammenarbeit wird auf dem nächsten International Electron Devices Meeting in San Francisco (Dezember 2000) [2] vorgestellt. Die im Vergleich zum Vorgängerprojekt durchgeführten umfangreichen Monte-Carlo Modellmodifikation werden im vorliegenden Abschlußbericht in Kapitel 2 bis 4 zusammenfassend dargestellt.

In Kapitel 5 werden Full-Band-Monte-Carlo-Bauelementsimulationen für exemplari-

sche SiGe-HBT Strukturen vorgestellt und mit Resultaten des ursprünglichen analytischen Monte-Carlo-Bauelementsensors sowie des hydrodynamischen Modells verglichen. Zusammenfassend läßt sich aufgrund der Monte-Carlo Referenzsimulationen festhalten, daß mit einem konsistenten hydrodynamischen Modell, das auf Monte-Carlo Transportparametern beruht, eine hohe Genauigkeit auch bei der Beschreibung der Stoßionisation erreicht werden kann.

In Kapitel 6 wird gezeigt, daß bereits bei heutigen HBT-Strukturen der Intraband-tunneleffekt bei der Überwindung von parasitären Barrieren wichtig sein kann. Inkonsistenzen zwischen der Monte-Carlo und der hydrodynamischen Simulation können bei Berücksichtigung dieses Effektes verringert werden.

Kapitel 7 beschreibt anhand von exemplarischen Beispielen die Simulation von Transportparametern für das Drift-Diffusions und das hydrodynamische Modell, die in homogenem, verspannten SiGe Material durchgeführt und an den Projektpartner TUI übergeben wurden.

Die Stoßionisation ist bei SiGe-Leistungsverstärkerschaltungen ein wichtiger leistungsbegrenzender Effekt. Auf einer soliden physikalischen Basis kann man diesen Effekt in Leistungsverstärkerschaltungen nur mit einer Mixed-Level-Device/Circuit Simulation auf der Basis von klassischen numerischen Bauelements simulationsmodellen beschreiben. In Kapitel 8 wird daher anhand einer vom SIGMA-Projektpartner TEMIC zur Verfügung gestellten Leistungsverstärkerschaltung die Leistungsfähigkeit der Mixed-Level-Device/Circuit Simulation demonstriert, wobei insbesondere auf den Einfluß der Stoßionisation eingegangen wird. Umfangreiche Simulationen zur Optimierung des Abbruchverhaltens der Kollektor/Basis Diode wurden bereits im 4. Zwischenbericht vorgestellt.

Zusammenarbeit mit LOTUS-, SIGMA- und MEDEA-Projektpartnern

Eine besonders enge Zusammenarbeit auf dem Gebiet der Modellverifikation hat während der gesamten Projektlaufzeit mit dem Daimler–Chrysler–Forschungslabor Ulm, dem Institut für Halbleiterphysik in Frankfurt (Oder) und dem SIGMA-Projektpartner TEMIC in Heilbronn stattgefunden. Aus dieser Zusammenarbeit sind die gemeinsamen Veröffentlichungen [3, 4, 2] hervorgegangen. Besonders wichtig war die Unterstützung der TEMIC auch bei den Leistungsverstärkersimulationen. Wir bedanken uns insbesondere für die vielfältige experimentelle Unterstützung.

Für die klassische numerische Bauelements simulation an der Technischen Universität Ilmenau (TUI) wurde eine umfangreiche Transportparameterdatenbasis zur Verfügung gestellt. Unsere Simulationsarbeiten zur HBT-Optimierung wurden mit denen der TUI abgestimmt und setzen zum Teil auf Vorarbeiten der TUI auf.

Die Projektarbeiten an der Universität Stuttgart wurden von uns durch Bauelementsimulationen unterstützt.

Mit dem MEDEA-Projektpartner Prof. Dr. Rein fand eine intensive Diskussion bezüglich der Genauigkeit der Drift-Diffusions-Simulation statt, in deren Verlauf auch Monte-Carlo-Referenzsimulationen durchgeführt wurden.

Allen Zusammenarbeitspartnern möchten wir für Ihre Kooperationsbereitschaft und die vielen offenen und hilfreichen Diskussionen danken.

Danksagung

Wir bedanken uns für die Förderung beim Bundesministerium für Bildung und Forschung sowie für die Betreuung dieses Projektes beim Projektträger DLR. Unser besonderer Dank gilt ferner Herrn Prof. Dr. H. Grimmeiss, dem Koordinator des Förderschwerpunktes Nanoelektronik, und Herrn Dr. U. König, dem Projektkoordinator für das Projekt LOTUS II.

Veröffentlichungen

In der Projektlaufzeit sind bisher zum Projektthema die folgenden Veröffentlichungen erschienen:

1. F. M. Bufler, P. Graf, and B. Meinerzhagen, "Hole transport investigation in unstrained and strained SiGe," in *2nd International Symposium on Silicon Heterostructures: From Physics to Devices*, (Barga (Italy)), p. C8, Sept. 1997.
2. F. M. Bufler, "Full-Band Monte Carlo Simulation of Electrons and Holes in Strained Si and SiGe," Dissertation, Universität Bremen, Bremen, 1997. (H. Utz Verlag Wissenschaft, München: 1998).
3. F. M. Bufler, P. Graf, and B. Meinerzhagen, "High-field hole transport in strained Si and SiGe by Monte Carlo simulation: Full band versus analytic band models," *VLSI Design*, vol. 8, pp. 41–45, 1998.
4. P. Graf, S. Keith, and B. Meinerzhagen, "Evaluation of solenoidal and statistically enhanced total current densities." *Proc. SISPAD*, Cambridge, MA (USA), 1997.
5. P. Graf, F. M. Bufler, B. Meinerzhagen, and C. Jungemann, "A comprehensive SiGe Monte Carlo model for transient 2D simulations of HBTs," in *IEDM Tech. Dig.*, pp. 881–884, 1997.
6. B. Neinhüs, S. Decker, P. Graf, F. M. Bufler, and B. Meinerzhagen, "Consistent hydrodynamic and Monte-Carlo simulation of SiGe HBTs based on table models for the relaxation times," *VLSI Design*, vol. 8, pp. 387–391, 1998.
7. F. M. Bufler, P. Graf, B. Meinerzhagen, G. Fischer, and H. Kibbel, "Hole transport investigation in unstrained and strained SiGe," *J. Vac. Sci. Technol. B*, vol. 16, pp. 1667–1669, 1998.
8. F. M. Bufler, S. Keith, and B. Meinerzhagen, "Anisotropic ballistic in-plane transport of electrons in strained Si," in *Proc. SISPAD*, pp. 239–242, 1998.
9. F. M. Bufler and B. Meinerzhagen, "Hole transport in strained $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ alloys on $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ substrates," *J. Appl. Phys.*, vol. 84 (10), pp. 5597–5602, 1998.
10. F. M. Bufler and B. Meinerzhagen, "Hydrodynamic transport parameters for holes in strained silicon," in *Proc. IWCE*, 1998.
11. C. Jungemann, M. Bartels, S. Keith, and B. Meinerzhagen, "Efficient methods for Hall factor and transport coefficient evaluation for electrons and holes in Si and SiGe based on a full-band structure," in *Proc. IWCE*, (Osaka (Japan)), pp. 104–107, 1998.
12. P. Graf, "Entwicklung eines Monte Carlo Bauelementsimulators für Si/SiGe-Heterobipolartransistoren," Dissertation, Universität Bremen, Bremen, 1999. (H. Utz Verlag Wissenschaft, München: 1999).

13. S. Keith, C. Jungemann, S. Decker, B. Neinhüs, M. Bartels, and B. Meinerzhagen, "Full-band Monte Carlo device simulation of a Si/SiGe-HBT with a realistic Ge profile," in *Proc. SISPAD*, (Kyoto (Japan)), pp. 219–222, Sept. 1999.
14. M. Bartels, S. Decker, B. Neinhüs, and B. Meinerzhagen, "A robust curve tracing scheme for the simulation of bipolar breakdown characteristics with nonlocal impact ionization models," in *Proc. ESSDERC*, (Leuven (Belgium)), pp. 492–495, 1999.
15. M. Bartels, S. Decker, B. Neinhüs, K. H. Bach, A. Schüppen, and B. Meinerzhagen, "Comprehensive hydrodynamic simulation of an industrial SiGe heterobipolar transistor," in *Proc. BCTM*, (Minneapolis (Minnesota, USA)), pp. 105–108, 1999.
16. M. Bartels and B. Meinerzhagen, "Investigation of time step control for the mixed-level device/circuit simulation of SiGe bipolar microwave power amplifiers," in *Proc. SCEE (to be published)*, (Warnemünde (Germany)), 2000.
17. M. Bartels and B. Meinerzhagen, "Design of RF power amplifiers based on mixed-level device/circuit simulation," in *Proc. ITG Workshop „Mikroelektronik für die Informationstechnik“*, (Darmstadt (Germany)), pp. 51–54, 2000.
18. C. Jungemann, S. Keith, and B. Meinerzhagen, "Full-band Monte Carlo device simulation of a Si/SiGe-HBT with a realistic Ge profile," *IEICE Trans. on Electronics*, vol. E83-C, no. 8, pp. 1228–1234, 2000.
19. C. Jungemann, B. Neinhüs, and B. Meinerzhagen, "Spatial analysis of the electron transit time in a silicon/germanium heterojunction bipolar transistor by drift-diffusion, hydrodynamic, and full-band Monte Carlo device simulation," in *Proc. SISPAD*, (Seattle (USA)), pp. 42–45, Sept. 2000.
20. C. Jungemann, B. Heinemann, K. Tittelbach-Helmrich, and B. Meinerzhagen, "An accurate, experimentally verified electron minority carrier mobility model for Si and SiGe," in *IEDM Tech. Dig.*, (to be presented at IEDM, San Francisco (USA)), 2000.

1 Full-Band-Monte-Carlo-Bauelementsimulator

1.1 Einführung

In diesem Kapitel wird der im Rahmen dieses Projektes entwickelte Full-Band-Monte-Carlo-Bauelementsimulator (FB-MC) zur Simulation von *Si/SiGe*-Heterobauelementen mit adaptivem Gitter zur Diskretisierung der Brillouinzone, der ausschließlich auf der vollständigen Bandstruktur basiert, vorgestellt. Dieser löst damit den im vorangegangenen Projekt entwickelten analytischen MC-*Si/SiGe*-Bauelementsimulator ab.

Die Verwendung der vollständigen Bandstruktur (Full-Band) ermöglicht hierbei eine äußerst genaue Beschreibung der Bandstruktur. Der bisherige Monte-Carlo Bauelementsimulator [5, 6] verwendete eine analytische Parametrisierung der Energiebandstruktur, die infolge notwendiger Näherungen deutliche Schwächen hinsichtlich ihrer Genauigkeit hat. Dies ist zum einen die schlechte Darstellung der hochenergetischen Zustände im Falle der Elektronen, die unter anderem eine genaue Beschreibung der Stoßionisation unmöglich macht [7]. Ziel dieses Projektes war es aber unter anderem, Hochenergieeffekte wie z. B. das Durchbruchverhalten von HBTs zu charakterisieren, was die Verwendung der FB-MC-Methode bedingt. Zum anderen ist dies die Unfähigkeit analytischer Modelle, die Verwerfungen der Lochbänder hinreichend genau darzustellen [8].

Vorteile der analytischen Modelle waren zunächst die einfachere Implementierung der physikalischen Modelle und Algorithmen, was sich auch in deutlich reduziertem Rechenzeitaufwand widerspiegelte. Die verstärkten Entwicklungen der FB-MC-Methode während der Projeklaufzeit haben nun zu einer ausgereiften Diskretisierung der Bandstruktur und entsprechenden Algorithmen geführt, die im Aufwand vergleichbar zu analytischen Modellen sind. Des weiteren relativiert der rasante Anstieg der Rechnerleistung in den letzten Jahren den noch bestehenden Rechenzeitvorteil des analytischen MC-Bauelementsimulator. Neben der Rechenleistung war ein weiterer Nachteil der Verwendung der vollständigen Bandstruktur der erhöhte Bedarf an Arbeitsplatzspeicher (> 50 MByte), was wiederum für heutige moderne Arbeitsplatzrechner kein Problem mehr darstellt. Zusammenfassend kann man sagen, daß der in diesem Abschlußbericht vorgestellte FB-MC-Monte-Carlo-Bauelementsimulator in seiner Effizienz und Robustheit dem vorherigen analytischen MC Bauelementsimulator in nichts nachsteht, dafür aber eine erhöhte Genauigkeit der Beschreibung der physikalischen Effekte bietet. Dies ist insbesondere bei der Simulation von Heterobipolartransistoren (HBT) wichtig, da hier der Einfluß von Germaniumgehalt und mechanischer Verspannung von *SiGe*-Legierungen auf die jeweilige Energiebandstruktur und somit auf die Transporteigenschaften möglichst genau berücksichtigt werden muß.

Im ersten Zwischenbericht [9] wurde zunächst die Idee einer Kopplung von analytischem und FB-MC-Simulator verfolgt. Ziel war es, die Vorteile der jeweiligen Methode, Schnelligkeit und Genauigkeit, auszunutzen. Es zeigte sich aber sehr schnell, daß infolge der inhomogenen Bandstruktur weitere Probleme auftraten, z. B. der komplizierte Wechsel von Testteilchen zwischen den unterschiedlichen Bandstrukturbeschreibungen, die die Vorteile der Kopplung relativierten. Dies führte dann zur Entscheidung, ausschließlich die FB-MC-Methode anzuwenden.

Im folgenden werden zunächst die neue Diskretisierung und die Details der Leitungsband- und Valenzbandstruktur von *Si/SiGe*-Legierungen erläutert. Es folgt dann eine Zusammenstellung des verwendeten Streuratensystems. Anschließend werden die Verände-

rungen des Monte-Carlo-Algorithmus infolge der Verwendung der vollständigen Bandstruktur dargelegt.

2 Bandstruktur von $Si_{1-x}Ge_x$ -Legierungen

Die Beziehung zwischen Bandenergie ϵ und Teilchenzustand $\{\vec{k}, b\}$ eines Ladungsträgers kann für den unendlich ausgedehnten kristallinen Festkörper mit Hilfe der nichtlokalen Pseudopotentialmethode berechnet werden [10]. Diese Energiedispersionsrelation $\epsilon_b(\vec{k})$ ist periodisch im reziproken Gittervektorraum (\vec{k} -Raum). Daher reicht die Darstellung der Bandenergie innerhalb der 1. Brillouinzone (BZ) zur Beschreibung des gesamten \vec{k} -Raumes aus. Da die Brillouinzone selbst wiederum mehrfach symmetrisch bezüglich der Hauptachsen ist, kann mit der Kenntnis der Bandenergie in einem sogenannten irreduziblen Bereich die Bandenergie in der gesamten BZ bestimmt werden. Zur Veranschaulichung ist in Abbildung 2.1 die BZ und der irreduzible Bereich (Index I.) von Silizium gezeigt. Dieser Bereich entspricht $\frac{1}{48}$ des Gesamtvolumens der BZ und wird durch folgende sechs Eckpunkte, die entsprechend der Abbildung 2.1 miteinander verbunden sind, aufgespannt:

$$\begin{aligned} \Gamma &= \frac{2\pi}{a_0} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, L = \frac{2\pi}{a_0} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}, K = \frac{2\pi}{a_0} \begin{pmatrix} \frac{3}{4} \\ \frac{3}{4} \\ 0 \end{pmatrix}, \\ W &= \frac{2\pi}{a_0} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, X = \frac{2\pi}{a_0} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, U = \frac{2\pi}{a_0} \begin{pmatrix} \frac{1}{4} \\ 1 \\ \frac{1}{4} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Die Eckpunkte der übrigen 47 irreduziblen Bereiche ergeben sich durch $3! = 6$ Vertauschungen der Koordinaten und $2^3 = 8$ Wechsel der Vorzeichen.

Die Bandstruktur für Silizium entlang der Kanten des irreduziblen Bereiches ist in Abb. 2.2 dargestellt. Die für den Ladungstransport wichtigsten Bereiche befinden sich in der Nähe der Bandlücke, da in der Regel die niederenergetischen Zustände hauptsächlich besetzt sind. Da das Energieminimum der Elektronen nahe beim X -Punkt nicht mit dem Energieminimum der Löcher im Γ -Punkt zusammenfällt, wird Silizium auch als indirekter Halbleiter bezeichnet.

Für beliebige homogene $Si_{1-x}Ge_x/Si_{1-y}Ge_y$ -Materialsysteme kann die Energiebandstruktur der aktiven Schicht ebenfalls mit Hilfe von Pseudopotentialberechnungen bestimmt werden [11]. In dieser verspannten Schicht sind die Gitterkonstanten im Ortsraum a_{\perp} und a_{\parallel} allerdings unterschiedlich. Dies wiederum bewirkt im reziproken \vec{k} -Raum eine Verzerrung der BZ und vermindert die Symmetrieeigenschaften der Bandstruktur. Dadurch vergrößert sich der irreduzible Bereich der Bandstruktur von verspanntem $Si_{1-x}Ge_x$ im Vergleich zu Silizium auf $\frac{1}{16}$ der BZ, wie in Abbildung 2.1 (Index II.) zu sehen ist¹.

Die Verwendung der im Sinne der Pseudopotentialberechnung exakten Bandstruktur in der Monte-Carlo-Simulation (MC) bezeichnet man als "Full-Band"-Methode (FB). Die Anforderungen an diese oder aber auch an analytische Bandstrukturbeschreibungen

¹Die Verzerrung der Brillouinzone wird aus Gründen der Übersichtlichkeit in der Abbildung vernachlässigt.

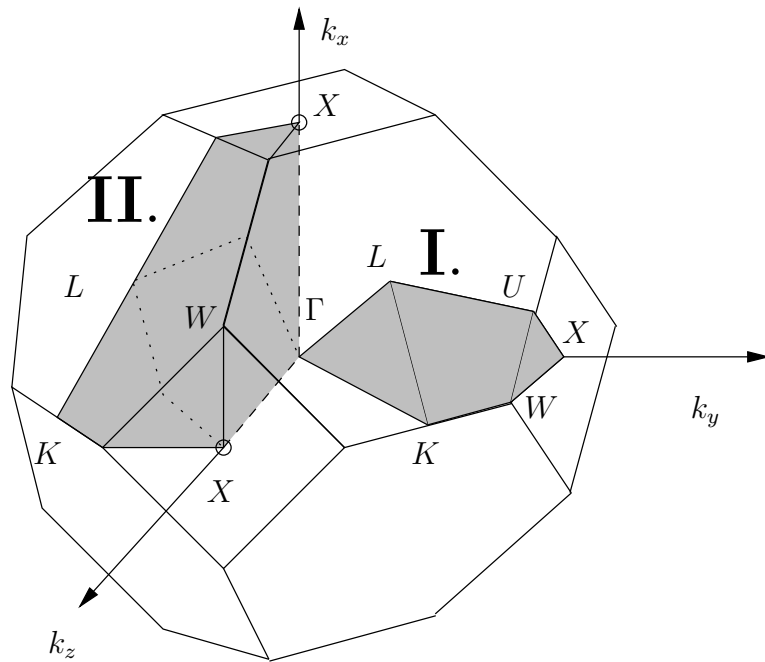


Abbildung 2.1: Die Brillouinzone und der irreduzible Anteil in Silizium

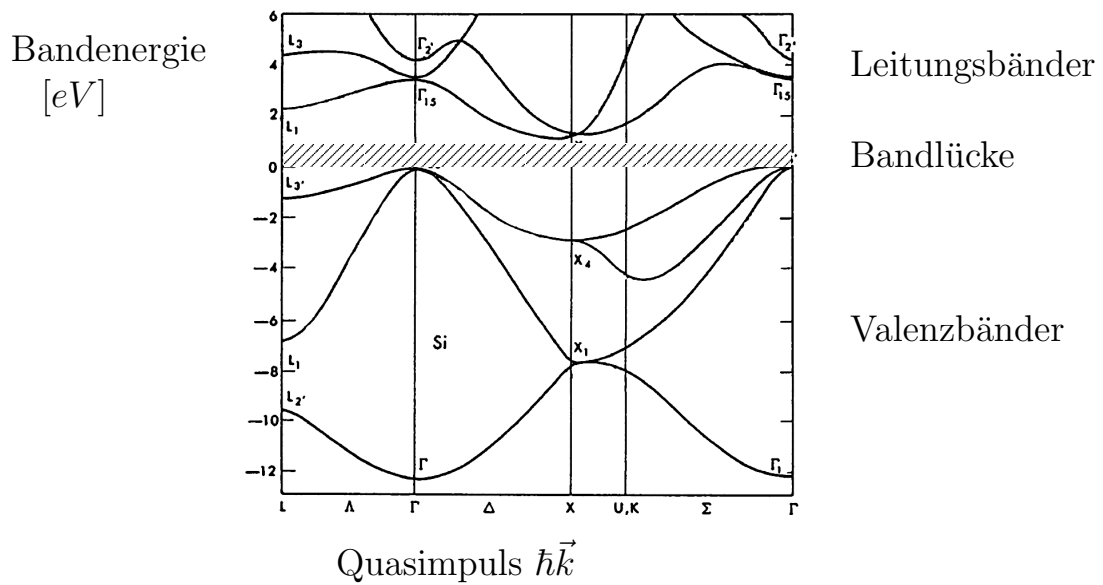


Abbildung 2.2: Pseudopotential-Bandstruktur des unverspannten Siliziums aus [10].

sind, daß während der Simulation die Funktion $\epsilon = \epsilon(\vec{k})$ und ebenfalls die Menge aller Vektoren \vec{k} , die auf der zur Energie ϵ gehörenden Äquienergiefläche liegen ($\vec{k} = \vec{k}(\epsilon)$), benötigt werden (Details hierzu folgen in Kapitel 4.2). Da die Berechnung der Bandenergie ϵ mit Hilfe der Pseudopotentialberechnung sehr rechenzeitintensiv ist, ist diese Methode während der Simulation nicht direkt anwendbar. Aus diesem Grund ist die effektive Verwendung der vollständigen Bandstruktur "Full-Band" (FB) nur mit numerischen Näherungsverfahren möglich. Hierzu muß die Brillouinzone diskretisiert werden. Die Gitterpunkte definieren dann Volumenelemente, in denen die gesuchte Energie interpoliert werden kann. Die einfachste Methode dafür ist ein äquidistantes Gitter mit Würfeln als Volumenelement [12, 13]. Diese Methode hat allerdings deutliche Nachteile: Die Umrandung der BZ wird nicht bündig aufgelöst, die Interpolation innerhalb der Würfel ist aufwendig und eine feinere Auflösung wichtiger Bereiche in der BZ führt zu einer sehr hohen Anzahl von Stützstellen. Insbesondere für Heterobaelemente ist dies von Nachteil, da hier ja auch mehrere Bandstrukturen (unterschiedlicher Germaniumgehalt) benötigt werden. Eine weitere Möglichkeit ist, die Würfel wiederum in sechs gleiche Tetraeder zu unterteilen [14, 15]. Dies erleichtert die Interpolation, bietet aber ebenfalls keine Möglichkeit, wichtige Bereiche besser aufzulösen. In dieser Arbeit wird daher eine Aufteilung des irreduziblen Bereiches und somit der BZ mit Tetraedern unterschiedlicher Größe benutzt, ähnlich der Methode in [16, 17]. Gegenüber einer weiteren Methode mit ungleichen Tetraedern [18] wird in dieser Arbeit aufgrund der Beschränkung auf den irreduziblen Bereich wesentlich weniger Speicherplatz benötigt. Im folgenden wird die hier verwendete Diskretisierung [19, 20] erläutert. Alle dafür verwendeten Bandstrukturen – Variationen von Germaniumgehalt in der aktiven Schicht und dem Substrat – wurden zunächst mit der nichtlokalen Pseudopotentialmethode berechnet und standen dann als umfangreiche Datenbasis zur Verfügung.

2.1 Diskretisierung der Brillouinzone

Das Ziel der Diskretisierung ist, den irreduziblen Bereich exakt, bezüglich Volumen und Oberfläche, mit ungleichförmigen Tetraedern auszufüllen und den Diskretisierungsfehler in allen Bereichen möglichst gering zu halten. Hierzu wird eine Generierungsvorschrift mit verschiedenen Kriterien zur Bestimmung der Tetraeder angewendet, die die jeweilige Eigenschaft der betrachteten Bandstruktur berücksichtigt. Die Qualität des Ergebnisses ist hierbei grundsätzlich abhängig von der Startlösung, d.h. von der Wahl der Starttetraeder in dem irreduziblen Bereich. Da aber für die Energiebandstrukturen die Extrema gut bekannt sind, ist eine geeignete Anfangslösung dadurch gegeben, daß die Tetraedereckpunkte auf diesen Extrempunkten liegen. In dieser Arbeit wird der irreduzible Bereich der BZ zuerst in vier Tetraeder aufgeteilt, wobei z. B. im Falle des ersten Leitungsbandes das Energieminimum, bei $k_x = 0.85 \frac{2\pi}{a_0}$ gelegen, auf einen Tetraedereckpunkt fällt.

Ein weiterer wichtiger Aspekt der Diskretisierung ist, daß für die Simulation von Heterobaelementen die gleichzeitige Verwendung mehrerer Bandstrukturen notwendig ist. Da unterschiedliche Gitter den Simulationsaufwand erhöhen (siehe dazu Kapitel 4.3), wird der Gitteralgorithmus auf der Basis mehrerer Bandstrukturen gleichzeitig angewendet. Die Methode von Bude et al. [16], bei der die Tetraedereckpunkte ausschließlich auf Äquienergielinien liegen, kann daher nicht verwendet werden. Es folgt nun eine Aufstellung der verwendeten Vorschriften zu Gittererzeugung. Die Starttetraeder werden solange geteilt, bis alle Tetraederkanten folgende Bedingungen erfüllen:

- Die maximal erlaubte Kantenlänge eines Tetraeders darf höchstens ein Zehntel der Kantenlänge zwischen den Punkten Γ und X sein.
- Die interpolierte Energie in der Mitte einer Tetraederkante darf maximal 2% von der wahren Energie an dieser Stelle abweichen. Die wahre Energie ergibt sich aus der nichtlokalen Pseudopotentialmethode, wohingegen die interpolierte Energie das arithmetische Mittel der Energie an den zugehörigen Tetraedereckpunkten ist.
- Das vorherige Kriterium der prozentualen Abweichung findet nur Beachtung, wenn die absolute Abweichung der interpolierten Energie von der wahren Energie mehr als 0,05 meV beträgt. Damit wird in den niederenergetischen Tetraedern die Unterteilung in zu feine Tetraeder verhindert. Zum Beispiel beträgt bei einer wahren Energie von 1,0meV und einer interpolierten Energie von 0,97meV der relative Fehler mehr als 2%, aber aufgrund des geringen Energieunterschiedes von 0,03meV ist keine Unterteilung notwendig.

Diese Kriterien führen schrittweise zu einer Unterteilung der Anfangstetraeder bis zum endgültigen Gitter. Bei der Teilung eines Tetraeders werden alle Tetraeder, die an die betrachtete Kante anschließen, ebenfalls geteilt. Damit wird vermieden, daß Tetraedereckpunkte auf andere Tetraederkanten fallen. Dadurch hat jeder Tetraeder immer genau vier Nachbartetraeder. Für die Seitenfläche benachbarter Tetraeder ist somit aufgrund der linearen Interpolationsvorschrift die Stetigkeit der Energie gewährleistet. Details zur Energieinterpolation folgen am Ende dieses Abschnittes. Die Konvergenz des Algorithmus wird mit Hilfe der Volumenqualität Q_V der Tetraeder beeinflusst [17]:

$$Q_V = 6\sqrt{2} \frac{V_{tet}}{h_{max}^3}$$

Hierbei ist V_{tet} das Volumen des Tetraeder und h_{max} seine maximale Kantenlänge. Der Vorfaktor $6\sqrt{2}$ ergibt sich aus der Normierung der Volumenqualität eines Tetraeders mit drei gleich langen Kanten a , die in einem Eckpunkt rechtwinklig aufeinander stehen. Hierfür soll gelten $Q_V = 0,5$ mit $V_{tet} = \frac{1}{6}a^3$ und $h_{max} = \sqrt{2}a$. Der Ablauf des Algorithmus im einzelnen ist folgendermaßen:

- 1.) Es werden alle Tetraederkanten nach den beschriebenen Kriterien überprüft und diejenigen markiert, die diese nicht erfüllen.
- 2.) Die längste Tetraederkante der markierten Tetraederkanten wird für die Teilung vorgesehen.
- 3.) Die Volumenqualität Q_V aller Tetraeder, die diese Kante enthalten, wird überprüft. Liegt bei allen Q_V über 5%, wird die Kante geteilt. Der Algorithmus beginnt wieder von vorne und Schritt 4.) entfällt.
- 4.) Im Tetraeder mit der kleinsten Q_V wird die längste Kante bestimmt und anstelle der vorgesehenen Kante geteilt. Dies kann natürlich immer noch die Kante sein, die in Schritt 2.) schon bestimmt wurde.

Um ein möglichst gutes Gitter für alle Bandstrukturen zu erhalten, berücksichtigt der Algorithmus gleichzeitig drei unterschiedliche Bandstrukturen: reines Si ($x = 0\%, y = 0\%$), verspanntes Si ($x = 0\%, y = 40\%$) und verspanntes SiGe ($x = 40\%, y = 0\%$). Da für verspannte Strukturen die BZ im Vergleich zu Silizium verzerrt ist, wird vor der Anwendung des Gitteralgorithmus deren BZ mit einer einfachen Transformationsvorschrift in die Brillouinzone von Silizium überführt:

$$\vec{k}^* = \underline{\underline{T}} \vec{k} \quad (2.1)$$

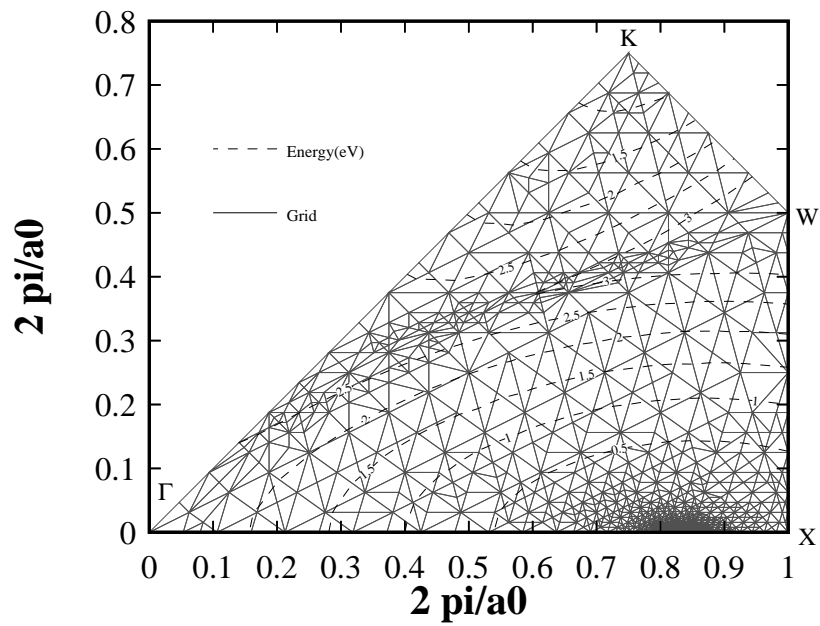
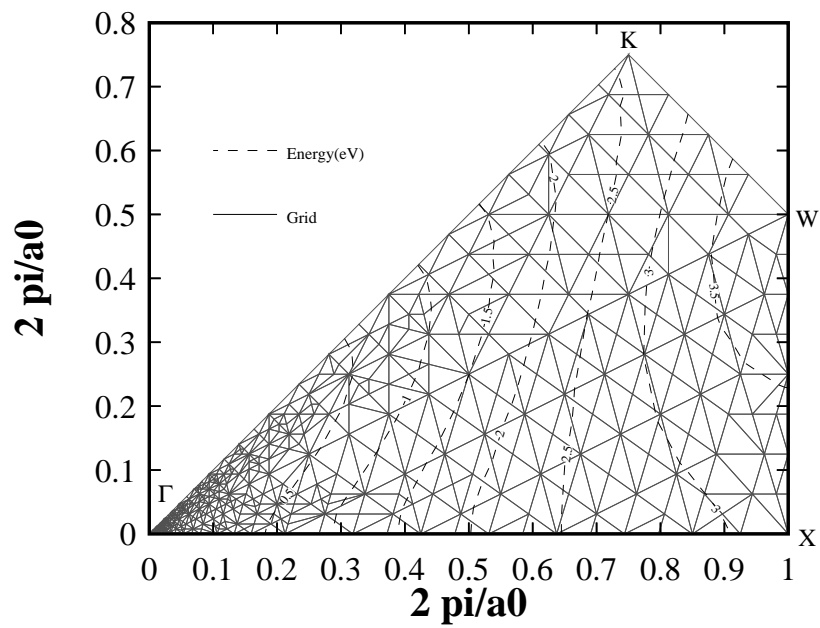
Hierbei gibt \vec{k}^* den Impulsvektor in der Brillouinzone von unverspanntem Silizium an und \vec{k} ist der Impulsvektor in der verspannten Brillouinzone. Die Transformationsmatrix lautet:

$$\underline{\underline{T}} = \begin{pmatrix} \frac{a_{\parallel}}{a_0} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{a_{\perp}}{a_0} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{a_{\perp}}{a_0} \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

Danach entspricht der transformierte, irreduzible Bereich von verspannten Bandstrukturen genau dem dreifachen der irreduziblen BZ von Si (siehe Abb. 2.1 Index II.). Somit läßt sich also der irreduzible Bereich in verspannten Bandstrukturen durch die Zusammensetzung von drei einzelnen irreduziblen Bereichen in Silizium als Basiselement (Abb. 2.1 Index I.) erreichen. Folglich muß die Diskretisierung der Energiebandstruktur nur für dieses Basiselement durchgeführt werden, um die gesamte BZ für alle Bandstrukturen darzustellen. In Schritt 1.) des Algorithmus für das Basiselement werden dazu 7 verschiedene Bandstrukturbeschreibungen gleichzeitig verwendet. Das sind die Bandstruktur von unverspanntem Si, die drei in ihrer Bandstruktur unterschiedlichen Basiselemente von verspanntem Si (40% Germanium im Substrat) und die drei in ihrer Bandstruktur unterschiedlichen Basiselemente von verspanntem SiGe (40% Germanium in der aktiven Schicht). Da die einzelnen Energiebänder sich wiederum stark in ihrer Form unterscheiden, wird diese Diskretisierung für jedes Band einzeln durchgeführt. In Abb. 2.3 ist die Diskretisierung des ersten Leitungsbandes, gültig für alle Bandstrukturen in der k_x, k_y -Ebene, gezeigt. Man erkennt die wesentlich feinere Auflösung des Energieminimums durch die entsprechend höhere Anzahl der Tetraeder in diesem Gebiet. In Abb. 2.4 ist die Diskretisierung des ersten Valenzbandes gezeigt. Hier erkennt man deutlich die höhere Auflösung in der Nähe des Γ -Punktes.

In Abb. 2.5 ist das Gitter in der LUWK-Ebene gezeigt, welche auch eine Oberfläche des irreduziblen Bereichs der Brillouinzone darstellt. Um eine kontinuierliche Energieinterpolation im gesamten periodischen \vec{k} -Raum zu erhalten, muß die Diskretisierung symmetrisch bezüglich der LW-Geraden sein. Dies ist notwendig, da Teilchen, die über die LUWK-Ebene in die benachbarte Brillouinzone wechseln, von dort eine LUWK-Ebene „sehen“, die spiegelsymmetrisch zur LW-Geraden auf der ursprünglichen LUWK-Ebene liegt. Die Punkte K und U werden also beim Brillouinzonwechsel und der anschließenden Rückprojektion in die ursprüngliche Brillouinzone durch den Umklapprozeß vertauscht. Mit einem Gitter, das in der LUWK-Ebene symmetrisch zur LW-Geraden ist, wird gewährleistet, daß beim Umklapprozeß die Energie aufgrund einer geänderten diskreten Darstellung nicht springt.

Zusammenfassend wird nun eine Übersicht der Eckdaten des resultierenden Gitters gegeben. Die kürzeste Kante aller Tetraeder ist 0,0003 mal der ΓX -Länge und die gemittelte Volumenqualität ist 0,27. In Tabelle 2.1 sind die Anzahl der Tetraeder und

Abbildung 2.3: Diskretisierung des ersten Leitungsbandes für Silizium in der k_x, k_y -EbeneAbbildung 2.4: Diskretisierung des ersten Valenzbandes in der k_x, k_y -Ebene

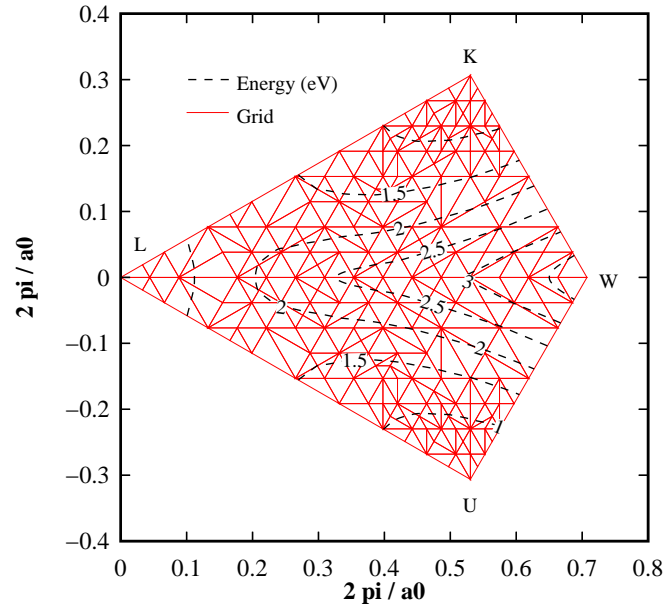


Abbildung 2.5: Symmetrisches Gitter der LUWK-Ebene des ersten Leitungsbandes

Band	Index b	N^{knot}	N^{tet}	Speicherplatz
4. Leitungsband	c4	2763	12439	9.3 MByte
3. Leitungsband	c3	2761	12499	9.3 MByte
2. Leitungsband	c2	3051	13494	9.5 MByte
1. Leitungsband	c1	6572	29735	20.3 MByte
1. Valenzband	v1	3082	13111	9.1 MByte
2. Valenzband	v2	2209	9354	6.6 MByte
3. Valenzband	v3	1284	5226	4.1 MByte

Tabelle 2.1: Anzahl der Gitterpunkte N^{knot} , Tetraeder N^{tet} und Speicherplatzbedarf der vorgestellten Diskretisierung

Tetraedereckpunkte sowie der benötigte Speicherplatz in MByte angegeben. Verglichen mit der Diskretisierung nur für reines Silizium [19] ist die Anzahl der Tetraeder und Tetraedereckpunkte um etwa 30% gestiegen. Der Gesamtbedarf an Speicherplatz für eine Bandstruktur ist ungefähr 70 MByte. Für heute mögliche 500 MByte – 1 GByte Hauptspeicher in modernen Arbeitsplatzrechnern können demzufolge bis zu 14 Bandstrukturen gleichzeitig verwendet werden. Dies ermöglicht z. B. für die Simulation eines $SiGe$ -Heterobipolartransistors eine hinreichend genaue Auflösung des Germaniumprofils in der Basis des Transistors [21].

Abschließend wird nun die lineare Interpolation der Bandenergie ϵ innerhalb eines Tetraeders erläutert. Diese Interpolation erfüllt, wie schon erwähnt, die wichtige Eigenschaft, daß die Interpolationsvorschrift auch stetig an Grenzflächen ist. Sie lautet für $\vec{k} \in V_{tet}$:

$$\epsilon(\vec{k}) = \epsilon_0 + \vec{v}_{tet} \hbar (\vec{k} - \vec{k}_0) \quad (2.3)$$

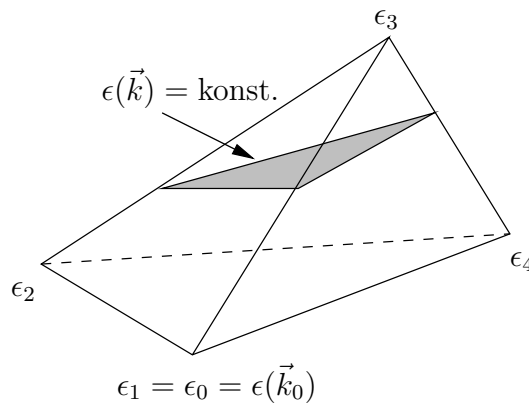


Abbildung 2.6: Tetraeder mit Äquienergieebene

Die Gruppengeschwindigkeit im Tetraeder ergibt sich dann wie folgt:

$$\vec{v}(\vec{k}) = \nabla_{\vec{k}} \epsilon(\vec{k}) = \vec{v}_{tet} = \text{konst.} \quad (2.4)$$

Die Konstanten $\epsilon_0 = \epsilon(\vec{k}_0)$, \vec{k}_0 und \vec{v}_{tet} lassen sich direkt mit den aus der Pseudopotentialrechnung bekannten Werten der Energie an den Tetraedereckpunkten bestimmen. Wählt man z.B. \vec{k}_0 als Tetraedereckpunkt, reduziert sich Gl. 2.3 auf ein Gleichungssystem dritter Ordnung, \vec{v}_{tet} ergibt sich dann aus den drei übrigen Energiewerten. Zur Veranschaulichung ist in Abbildung 2.6 ein Tetraeder gezeigt. Die Interpolation führt dazu, daß Flächen mit konstantem ϵ Schnittebenen (grau schraffiert) innerhalb des Tetraeders darstellen. Dies wiederum bedeutet, daß immer eine Menge von Vektoren \vec{k} existiert, die die Bedingung $\epsilon = \epsilon(\vec{k})$ erfüllen. Die dadurch auftretenden Probleme und deren Handhabung werden in Kapitel 4.2 weiter ausgeführt.

2.1.1 Leitungsbandstruktur

Das unterste Leitungsband von *Si* weist eine Mehrtalstruktur mit sechs Energieminima ("Tälern"), verteilt auf die drei Kristallhauptachsen, auf. Reines Germanium hingegen besitzt eine Mehrtalstruktur mit acht Tälern im *L*-Punkt [22]. Da für die im Projektzeitraum untersuchten HBTs der maximale Germaniumgehalt in der Basis kleiner 30% war, kann man für die betrachteten *SiGe*-Legierungen ebenfalls von einer Mehrtalstruktur ähnlich zu Silizium ausgehen². Betrachtet man nun die verspannten *SiGe*-Legierungen, so stellt man fest, daß infolge der Druckspannung die beiden Täler der Wachstumsrichtung "off-plane (*op*)" energetisch angehoben werden. Die Wachstumsrichtung entspricht im folgenden immer der *x*-Richtung in Abb. 2.7. Die Zugspannung jedoch bewirkt das Gegenteil, hier werden die Täler in der Ebene parallel zur Wachstumsrichtung (*in-plane* (*ip*)) energetisch angehoben. Zur Veranschaulichung sind in Abb. 2.7 Äquienergieflächen im Impulsraum für die beschriebenen Fälle gezeigt. Bei niedrigen Energien haben die Äquienergieflächen bekannterweise eine ellipsoide Form sowohl in Silizium als auch in *SiGe*. Kleinere Ellipsoide stellen hier die energetisch angehobenen Täler dar. Dieser energetische Abstand der *ip*- und *op*-Täler in verspanntem Material wächst mit Zunahme der Verspannung. Für verspanntes *SiGe* zum Beispiel liegt das Energieminimum der

²Erst ab einem Germaniumgehalt von 85% tritt eine Mehrtalstruktur ähnlich zu Germanium auf [23].

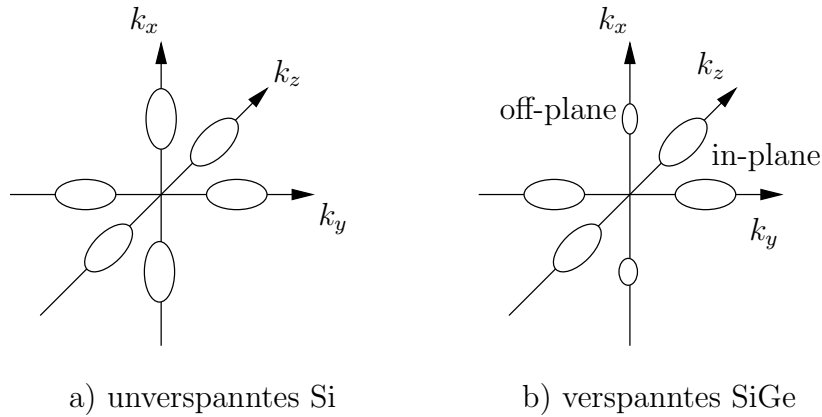


Abbildung 2.7: Äquienergieflächen im dreidimensionalen Impulsraum

op-Täler für einen Germaniumgehalt von $x_{Ge} = 40\%$ etwa 260meV über dem Energieminimum der *ip*-Täler. In verspanntem *Si* beträgt der Energieabstand für $y_{Ge} = 40\%$ ungefähr 255meV . Eine Parametrisierung der relativen Lage der Energieminima zueinander findet man im vorherigen Abschlußbericht [5].

Eine wichtige Größe der Bandstruktur ist die energieabhängige Zustandsdichte, da sie maßgeblich die Streuraten der Phonon- und Legierungsstreuung bestimmt. Die Zustandsdichte beschreibt die Menge aller möglichen Zustände in Abhängigkeit der Energie. Sie lautet für ein Band b und eine Spinrichtung folgendermaßen:

$$Z_b(\epsilon) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{BZ} d^3\vec{k} \delta(\epsilon - \epsilon_b(\vec{k})) \quad (2.5)$$

Die Lösung des Integrals über die Deltafunktion ergibt:

$$Z_b(\epsilon) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\epsilon_b(\vec{k})=\epsilon} \frac{dF}{|\nabla_{\vec{k}}\epsilon_b|} \quad (2.6)$$

Hierin ist F eine Äquienergieebene der Energie ϵ . Für die diskretisierte Bandstruktur folgt damit:

$$Z_b(\epsilon) = \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_1^{n_{tet}} \frac{F_{tet}(\epsilon)}{|\nabla_{\vec{k}}\epsilon_b|} = \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_1^{n_{tet}} \frac{F_{tet}(\epsilon)}{|\vec{v}_{tet}|} \quad (2.7)$$

Die Zustandsdichte berechnet sich folglich als Summe der Äquienergieflächen zur Energie ϵ über alle Tetraeder, die diese Energie enthalten, gewichtet mit der konstanten Gruppengeschwindigkeit \vec{v}_{tet} . In Abb. 2.8 a) ist nun die Summe der so berechneten Zustandsdichte von unverspanntem *Si* über alle vier Leitungsbänder gezeigt:

$$Z(\epsilon) = \sum_{b=c1}^{c4} Z_b(\epsilon)$$

Weiterhin sind die Zustandsdichten der einzelnen Bänder, jetzt zusätzlich für verspanntes *SiGe* und verspanntes *Si*, in der Nähe der Bandlücke in Abb. 2.8 b) dargestellt. Das zweite Leitungsband in *Si* beginnt erst ab einer Energie von 130meV . Dies verdeutlicht die

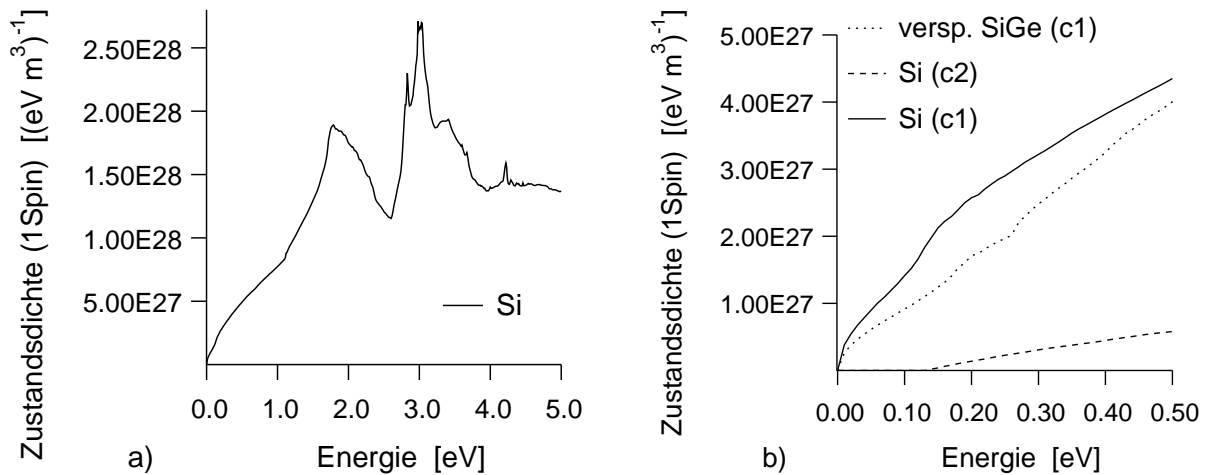


Abbildung 2.8: Zustandsdichte der Elektronen: a) Summe über alle vier Bänder für reines Silizium b) 1. und 2. Band für unverspanntes *Si* und 1. Band für verspanntes *SiGe*

dominierende Bedeutung des ersten Leitungsbandes für den Elektronentransport, welches bei kleinen und mittleren Feldstärken zu über 90% besetzt ist. Dies gilt ebenso für verspanntes *Si* und *SiGe*. Vergleicht man nun die Zustandsdichte untereinander, erkennt man, daß die Zustandsdichte im ersten Leitungsband in verspanntem Material deutlich geringer ist. Der Grund dafür sind die energetisch angehobenen Täler, sie tragen erst bei höheren Energien zur Zustandsdichte bei.

2.1.2 Valenzbandstruktur

Im Gegensatz zu den Elektronen wird der Ladungstransport bei Löchern von den drei wichtigsten Valenzbändern zusammen bestimmt. Es sind dies das schwere Lochband, das leichte Lochband und das *split-off*-Band, deren Energieminimum im Γ -Punkt liegt. Es gilt für die Lochbandstrukturen in dieser Arbeit folgende Konvention: Das niedrigste Energieminimum legt die Valenzbandkante fest und mit zunehmendem Abstand zur Valenzbandkante wächst die Lochenergie. Die Bezeichnungen "schwer" und "leicht" beziehen sich hier auf die zugehörigen Lochmassen. Des weiteren ist das *split-off*-Band gegenüber den beiden anderen energetisch angehoben. Kennzeichnend für alle Bänder ist die starke Anisotropie der Äquienergieflächen in der Brillouinzone. In den Abbildungen 2.9 und 2.10 sind zur Verdeutlichung Konturlinien der Bandenergie für das schwere Lochband in unverspanntem *Si* und verspanntem *SiGe* in der Ebene $k_y = 0$ der BZ gezeigt. Für verspanntes *SiGe* (Abb. 2.10, $x_{Ge} = 40\%$) erkennt man darin sehr gut, daß die sogenannten Verwerfungen infolge der Verspannung bei kleinen Energien verschwinden. Die jeweils angegebenen Germaniumgehalte gelten ebenfalls in den noch folgenden Abbildungen dieses Kapitels. Der Abstand benachbarter Äquienergielinien beträgt in allen Abbildungen 20meV .

Es folgt nun eine vertiefende Diskussion der Bandverläufe im einzelnen. Zur Veranschaulichung sind in Abbildung 2.11 a) Schnitte der Bandenergie in unverspanntem *Si* entlang k_x gezeigt. Man erkennt deutlich das *split-off*-Band, wobei die *split-off*-Energie in reinem *Si* 44meV beträgt. *hh*- und *lh*-Band unterscheiden sich in ihrer Krümmung.

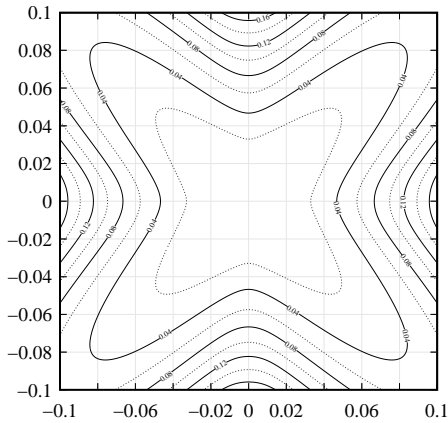


Abbildung 2.9: Konturplot der Bandenergie in der Ebene $k_y = 0$ (Wegen der Symmetrie ergibt sich der gleiche Bandverlauf für $k_x = 0$ oder $k_z = 0$) für das schwere Lochband im unverspannten Silizium

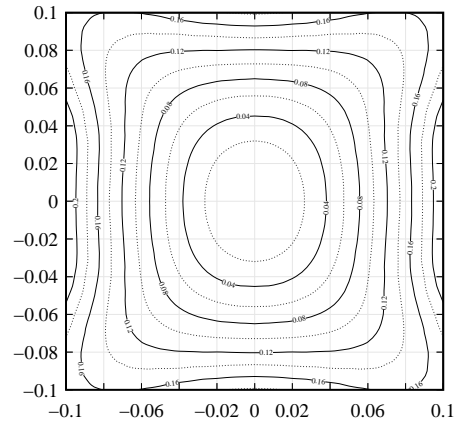


Abbildung 2.10: Konturplot der Bandenergie in der Ebene $k_y = 0$ für das schwere Lochband im verspannten $SiGe$ ($x_{Ge} = 40\%$)

Mit der Definition des inversen Massentensors

$$\underline{\underline{m}}^{-1} = \frac{1}{\hbar^2} \nabla_{\vec{k}} (\nabla_{\vec{k}} \epsilon(\vec{k}))^T$$

entspricht an dieser Stelle anschaulich ausgedrückt das leichte Lochband dem Band mit größerer Krümmung und das schwere Lochband dem Band mit kleinerer Krümmung. Details zum inversen Massentensor folgen in Kapitel 3.2. In verspanntem $SiGe$ führt die Verspannung zusätzlich zu einer energetischen Verschiebung der Lochbänder gegeneinander. Dabei entfernen sich das leichte Lochband sowie das *split-off*-Band von der Bandkante (siehe Abb. 2.11 b)), so daß das schwere Lochband ähnlich wie bei den Elektronen bei kleinen und mittleren elektrischen Feldstärken zu über 90% besetzt ist und im Gegensatz zu unverspanntem Silizium den Hauptteil des Lochtransportes bestreitet. Im Unterschied zu Elektronen ist aus der Literatur keine einfache Parametrisierung der Energieverschiebung unter den Lochbändern bekannt. Im Gegensatz zu analytischen Bandstrukturbeschreibungen [6], bei denen die Verschiebungen vorgegeben werden müssen, sind bei Verwendung der vollständigen Bandstruktur diese Verschiebungen allerdings ”*ab initio*” durch die Pseudopotentialmethode berücksichtigt.

Analog zu den Elektronen wird die Zustandsdichte der Löcher mit Gleichung 2.7 bestimmt. In Abbildung 2.12 a) ist wiederum die Summe der Zustandsdichte über alle drei Valenzbänder für unverspanntes Si gezeigt. Daneben sind in Abbildung 2.12 b) die Zustandsdichten der einzelnen Bänder dargestellt. Man erkennt, daß das *split-off*-Band nicht nur wegen der energetischen Anhebung, sondern auch wegen der geringeren Zustandsdichte eine untergeordnete Rolle im Ladungstransport spielt. Des weiteren ist auch bei unverspanntem Si das *hh*-Band wegen der höheren Zustandsdichte das entscheidende Band für den Ladungstransport. Dies gilt in gleichem Maße auch für verspanntes $SiGe$ (Abb. 2.13 a)).

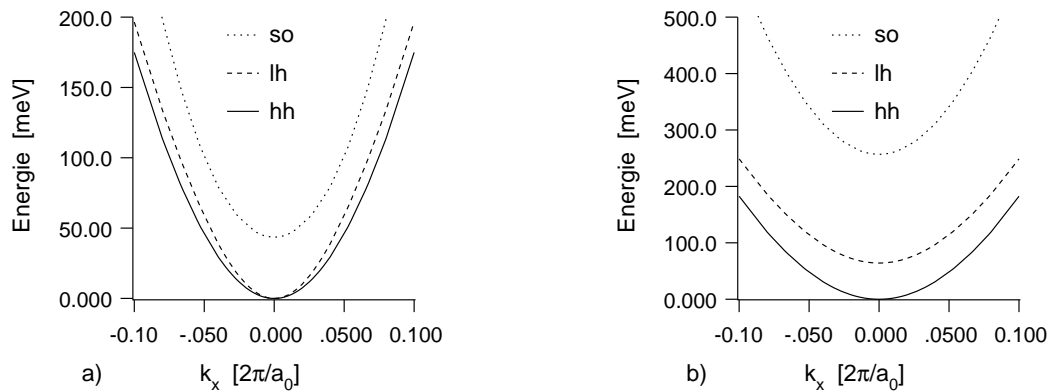


Abbildung 2.11: Bandenergien des schweren (hh), leichten (lh) und $split-off$ (so)-Valenzbandes im a) unverspannten Si und b) im verspannten $SiGe$.

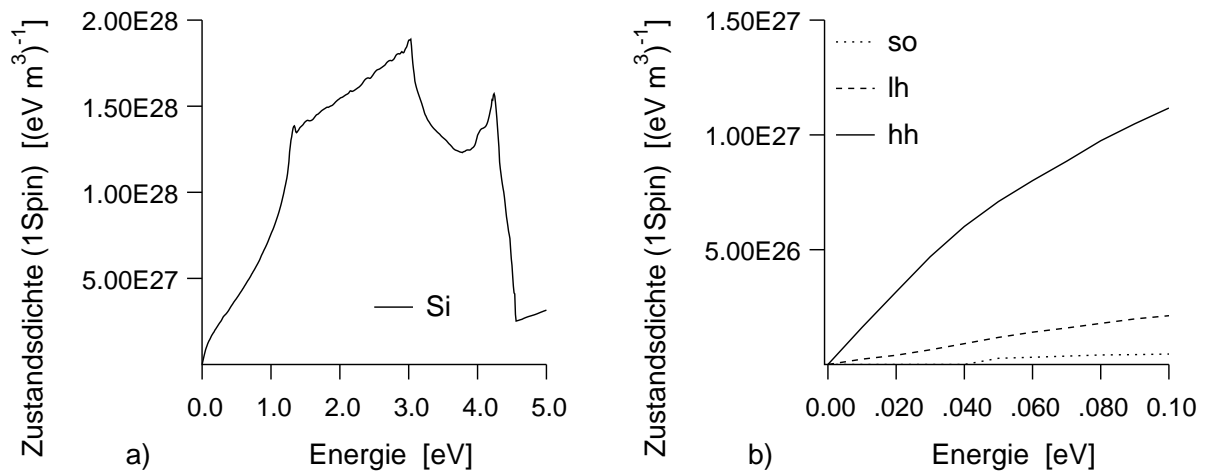


Abbildung 2.12: Zustandsdichte der Löcher in unverspanntem Si a) für die Summe über alle drei Valenzbänder und b) für das hh -, lh - und so -Band in der Nähe der Bandkante.

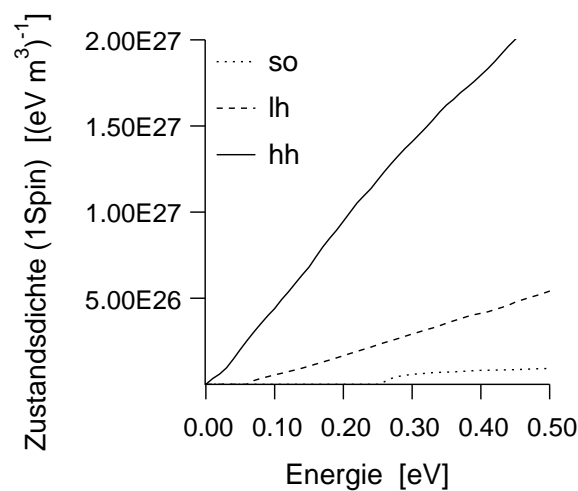


Abbildung 2.13: Zustandsdichte der Löcher für verspanntes $SiGe$

2.2 Streuprozesse in $Si_{1-x}Ge_x$ -Legierungen

Im Abschlußbericht [5] wurde in der Einführung zur Boltzmann-Transportgleichung der Stoßterm vorgestellt, welcher die Zusammenfassung aller möglichen Streuprozesse darstellt. Die wichtigsten Streuprozesse in $SiGe$ -Legierungen sind die Streuung an Phononen (Gitterschwingungen), die Legierungsstreuung und die Streuung an geladenen Störstellen. Für die ersten beiden Streuprozesse wurden die Modelle im Falle der FB-MC-Methode vom bisherigen analytischen MC-Simulator übernommen. Im Falle der Störstellenstreuung wurde nur die dotierungsabhängige Anpassung geändert. Der Vollständigkeit halber sind alle Streuprozesse für Elektronen und Löcher hier nochmals kurz erläutert. Weiterführende Details findet man im vorangegangenen Abschlußbericht [5].

Zusätzlich wird im Anschluß das Modell der Stoßionisation vorgestellt, welches zur Beschreibung der hochenergetischen Elektronen z. B. im Kollektor des HBTs notwendig ist.

2.2.1 Phonon-Streuung

Die Phonon-Streuung beschreibt die Wechselwirkung der Ladungsträger mit thermischen Gitterschwingungen. Grundsätzlich unterscheidet man zwischen elastischen und inelastischen Phononen. Die Streuung an elastischen Phononen hat die Eigenschaft, daß kein Energieaustausch zwischen Gitter und Teilchen stattfindet. Bei inelastischen Phononen nimmt ein Teilchen Energie vom Gitter auf oder gibt sie ab. Die Energie bestimmt sich aus den Phonon-Dispersionskurven [24]. Hierin unterscheidet man zwischen longitudinalen akustischen (LA), transversalen akustischen (TA), longitudinalen optischen (LO) und transversalen optischen (TO) Phononen. Da die Phononenergie der optischen Phononen in Abhängigkeit des Wellenzahlübertrages nur wenig variiert, wird diese Energie als konstant ($\neq 0$) angenommen. Die optischen Phononen sind daher immer inelastisch. Bei den akustischen Phononen wird die Phonon-Dispersionskurve mit einerseits elastischen und andererseits konstant inelastischen Phononen genähert. Diese Näherungen sind insoweit gerechtfertigt, da die experimentelle Verifikation in [5] keine Notwendigkeit zeigt, die Modellierung zu verbessern.

Die physikalischen Grundlagen der nun vorgestellten Modelle der Phononstreuprozesse findet man z. B. in [22, 25] und die Formulierung der Übergangswahrscheinlichkeiten für die Monte-Carlo-Simulation in [26, 27]. Details des Phononsystems, unter anderem zur Wahl der verwendeten Modellparameter, findet man in [5, 28, 6]. Es folgt eine Aufstellung der verwendeten Phononstreuprozesse:

$$\text{Phononen} \left\{ \begin{array}{l} \text{Elektronen} \left\{ \begin{array}{l} \textit{Intra}\text{-Tal und -band (elastisch)} \\ \textit{Inter}\text{-Tal und -Band (inelastisch)} \end{array} \right. \\ \\ \text{Löcher} \left\{ \begin{array}{l} \textit{Intra}\text{-Band (elastisch)} \\ \textit{Inter}\text{-Band (inelastisch)} \end{array} \right. \end{array} \right.$$

Die Bezeichnung *intra* (=innerhalb) gibt hierin an, ob es sich um eine Streuung innerhalb eines Tales oder Bandes handelt. Im Gegensatz dazu bedeutet *inter* (=zwischen), daß die Streuung zwischen zwei Tälern oder Bändern stattfindet. Die Mehrtalstruktur des ersten Leitungsbandes erfordert des weiteren eine Unterscheidung der *Inter*-Tal-Streuprozesse in g-Phononen-Streuung (Streuung in gegenüberliegende Täler) und f-Phononen-Streuung

(Streuung in benachbarte Täler). Hierbei kann auch ein Bandwechsel erfolgen, wodurch das zweite, dritte und vierte Leitungsband ebenfalls in eine Mehrtalstruktur aufgeteilt wird. Die Übergangswahrscheinlichkeiten und Streuraten für *Inter*-Tal- und -Band Streuprozesse ohne Spinwechsel lauten:

$$S_{b',b}(\vec{k}'|\vec{k})_{inter}^\lambda = \sum_{\mu,b'} \frac{\pi\hbar(D_tK)_{\lambda,\mu}^2 M_{\mu,b',b}(\vec{k}'|\vec{k})}{\Omega\rho_\lambda k_B\theta_{\lambda,\mu}} (N_{\lambda,\mu} + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2})\delta(\epsilon_{b'}(\vec{k}') - \epsilon_b(\vec{k}) \mp k_B\theta_{\lambda,\mu}) \quad (2.8)$$

$$S(\epsilon_b)_{inter}^\lambda = \sum_{\mu,b'} \frac{\pi\hbar(D_tK)_{\lambda,\mu}^2}{\rho_\lambda k_B\theta_{\lambda,\mu}} (N_{\lambda,\mu} + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}) Z_{b',\mu}(\epsilon_b(\vec{k}) \pm k_B\theta_{\lambda,\mu}) \quad (2.9)$$

Hierin kennzeichnet λ , ob es sich um Silizium- ($\lambda = Si$) oder Germaniumphononen ($\lambda = Ge$) handelt, und der Index μ steht im Falle der Elektronen für die f- und g-Phononen. Für Löcher kennzeichnet μ die auftretenden *Inter*-Band-Streuprozesse, da bei den Löchern keine *Inter*-Tal-Streuprozesse existieren. Des weiteren ist $(D_tK)_{\lambda,\mu}$ die Deformationspotentialkonstante, Ω das Systemvolumen, ρ_λ die Massendichte von Silizium bzw. von Germanium, u_λ die longitudinale Schallgeschwindigkeit in *Si* oder *Ge*, T_0 die Gittertemperatur, $N_{\lambda,\mu}$ die gittertemperaturabhängige Besetzungswahrscheinlichkeit der Phononen und $k_B\theta_{\lambda,\mu}$ die absorbierte (positives Vorzeichen) oder emittierte (negatives Vorzeichen) Phononenergie.

$M_{\mu,b',b}(\vec{k}'|\vec{k})$ gibt an, ob der Übergang von $\{\vec{k}, b\}$ mit dem Streuprozess μ in den Zustand $\{\vec{k}', b'\}$ möglich ist. Somit sind die Auswahlregeln der f- und g-Phononen berücksichtigt. Es gilt daher

- $M_{\mu,b',b} = 1$ für Löcher, da für Löcher keine Talstruktur definiert ist.
- $M_{\mu,b',b} = 1$ für Elektronen im Ausgangsband $b = c2, c3$ oder $c4$. Im Falle der Ein-Streuung in das erste Leitungsband wird demnach keine Auswahlregel bezüglich der unterschiedlichen Täler gemacht. Man beachte an dieser Stelle, daß z.B. für die Streuung zwischen den Bändern $b = c2, c3$ oder $c4$ talabhängige Deformationspotentiale benutzt werden, obwohl die Bandstrukturen der höheren Bänder keine Talstruktur aufweisen. Diese willkürliche Aufteilung in Täler vereinfacht die gesamte Modellierung der Phononstreuung erheblich. Insgesamt sind aber die Auswirkungen dieser Näherung auf das Phononsystem vernachlässigbar.
- $M_{\mu,b',b} = 1$ für Elektronen im ersten Leitungsband, die in ein Endband $b = c2, c3$ oder $c4$ streuen. Im Falle der Ausstreuung aus dem ersten Leitungsband wird ebenfalls keine Auswahlregel bezüglich der unterschiedlichen Täler beachtet.
- $M_{\mu,b',b} = 0$ oder 1 für Elektronen im ersten Leitungsband, die ins erste Leitungsband streuen.

$Z_{b',\mu}(\epsilon)$ gibt in Gl. 2.9 die energieabhängige Zustandsdichte aller möglichen Endzustände an. Im Falle der Elektronen ist deshalb ebenfalls der Index μ notwendig, da ja aufgrund

Phonon- streuprozeß	$(D_t K)_{\lambda,\mu}$		$\theta_{\lambda,\mu} = \text{Energie-übertrag} / k_B$	
Elektronen				
	Si	Ge	Si	Ge
	[$10^8 eV/cm$]		[K]	
gültig für Intertal oder Interband				
g_1 (TA)	0,488	0,479	140	65
g_2 (LA)	0,782	0,772	215	100
g_3 (LO)	10,75	9,28	720	430
f_1 (TA)	0,293	0,283	220	115
f_2 (LA)	1,950	1,940	550	325
f_3 (TO)	1,950	1,690	685	380
Löcher				
	Si	Ge	Si	Ge
	[$10^8 eV/cm$]		[K]	
Interband	9,910	8,048	735	430

Tabelle 2.2: Parameter der *Inter*-Tal und -Band-Phononstreuung für Silizium- und Germaniumphononen.

der unterschiedlichen Zustandsdichten in den f- und g-Tälern die Zahl der möglichen Endzustände variiert. In der Brillouinzone wird ein Tal durch sechs der Basiselemente (irreduzibler Bereich in *Si*) dargestellt. Die Zustandsdichte in diesem Tal ist dann abhängig von der Kombination der sechs Basiselemente, da im Falle von verspannten Bandstrukturen drei bezüglich der Energiebandstruktur unterschiedliche Basiselemente vorhanden sind.

Die verwendeten Parameter der Kopplungskonstanten und der Phononenergien sind in Tabelle 2.2 zusammengefaßt. Sie entsprechen im wesentlichen den Werten aus [26] und wurden nur leicht nach Anpassung an neuere Experimente modifiziert [5]. Da bei den Löchern auch ein *Inter*-Band-Streuprozeß zugelassen ist, wo Ausgangs- und Endband identisch sind, kann der Streuprozeß auch als inelastischer *Intra*-Band-Prozeß bezeichnet werden.

Die Übergangs- und Streuraten für *Intra*-Tal und -band Streuprozesse ohne Spinwechsel lauten (*intra* = innerhalb):

$$S_{b,b}(\vec{k}'|\vec{k})_{intra}^{\lambda} = \frac{2\pi k_B T_0 \Xi_{\lambda}^2}{\Omega \hbar \rho_{\lambda} u_{\lambda}^2} \delta(\epsilon_b(\vec{k}') - \epsilon_b(\vec{k})) \quad (2.10)$$

$$S(\epsilon_b)_{intra}^{\lambda} = \frac{2\pi k_B T_0 \Xi_{\lambda}^2}{\hbar \rho_{\lambda} u_{\lambda}^2} Z_{b,\mu}(\epsilon_b(\vec{k})) \quad (2.11)$$

Es ist hierin Ξ_{λ} das Deformationspotential. Der Index μ in $Z_{b,\mu}$ deutet an, daß im Falle

Phonon- streuprozess	Elektronen Ξ_λ		Löcher Ξ_λ	
	Si	Ge	Si	Ge
	[eV]		[eV]	
Intraband	8,79	8,79	5,120	3,406
Intratal	8,79	8,79		

Tabelle 2.3: Parameter der *Intra*-Tal und –Band Phononstreuung für Silizium- und Germaniumphononen.

	Elektronen	Löcher
U_0 [eV]	0,75	1,18

Tabelle 2.4: Parameter der Legierungsstreuung für Elektronen und Löcher.

der Elektronen nur die Zustandsdichte im jeweiligen Endtal berücksichtigt wird. Die Tabelle 2.3 zeigt die verwendeten Streuparameter. Für alle *intra*-Prozesse gilt, daß der Bandindex unverändert bleibt. Im ersten Leitungsband gilt zusätzlich, daß der Talindex unverändert bleibt.

In *SiGe*-Legierungen setzt sich dann die endgültige Streurrate aus den gewichteten Anteilen der Streurrate in Silizium und Germanium zusammen. Die Wichtung mit dem Germaniumgehalt in der aktiven Schicht ist linear.

$$S(\epsilon_b) = (1 - x_{Ge})S(\epsilon_b)^{Si} + x_{Ge}S(\epsilon_b)^{Ge}$$

Die Verspannung beeinflusst die Phononstreuraten nur indirekt über die veränderten Zustandsdichten.

2.2.2 Legierungsstreuung

In *SiGe*-Legierungen tritt im Unterschied zu reinem Halbleitermaterial die Legierungsstreuung auf. Ursache hierfür sind die stochastisch im Kristallgitter verteilten Fremdatome, hier Germanium in Silizium. Die Legierungsstreuung wird für Elektronen und Löcher als elastisch angenommen. Des weiteren sind sowohl Talwechsel als auch Bandwechsel möglich. Die Streurrate für die Legierungsstreuung lautet [29]:

$$S_{alloy}(\epsilon_b) = \sum_{b'} (1 - x_{Ge})x_{Ge} \frac{\pi a_0^3}{4\hbar} U_0^2 Z_{b'}(\epsilon_b) \quad (2.12)$$

Hierin ist a_0 die Silizium-Gitterkonstante, x_{Ge} der Germaniumgehalt der *SiGe*-Legierung und U_0 ist die Kopplungskonstante für die Legierungsstreuung. Die Legierungsstreuung verschwindet für reines *Si* ($x_{Ge} = 0$) oder reines *Ge* ($x_{Ge} = 1$). Der Wert des Legierungsstreupotentials U_0 wurde durch Anpassung an Beweglichkeitsexperimente für unverspanntes SiGe ermittelt [5]. In Tabelle 2.4 sind die resultierenden Werte angegeben.

2.2.3 Störstellenstreuung

Die Streuung an ionisierten Störstellen für Elektronen und Löcher wird entsprechend dem Modell von Brooks-Herring [30] modelliert. Die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit für die Streuung eines Teilchens lautet:

$$S_{b',b}(\vec{k}'|\vec{k})_{impurity} = \frac{2\pi N_{imp} e^4}{\hbar\Omega\varepsilon_\lambda^2\varepsilon_0^2(\beta^2 + q^2)^2} \delta(\epsilon_{b'}(\vec{k}') - \epsilon_b(\vec{k})) \quad (2.13)$$

mit der inversen Abschirmlänge

$$\beta_n^2 = e^2 n / (\varepsilon_\lambda \varepsilon_0 k_B T_0) \text{ oder } \beta_p^2 = e^2 p / (\varepsilon_\lambda \varepsilon_0 k_B T_0)$$

und dem quadratischen Wellenvektorübertrag

$$q^2 = (\vec{k}' - \vec{k})^2$$

wobei mit k_B die Boltzmann-Konstante bezeichnet worden ist. n oder p geben die Ladungsträgerkonzentrationen an, die im homogenen Fall (und bei Annahme vollständiger Aktivierung und Ionisierung) mit der Dotierungskonzentration N_{imp} zusammenfallen. Zwischentalstreuung im Falle der Elektronen wird wegen des großen Impulsübertrages q vernachlässigt. Einzige materialabhängige Größe ist die Dielektrizitätskonstante. Sie wird in $SiGe$ -Legierungen abhängig vom Germaniumgehalt x_{Ge} zwischen den Werten der beiden Elemente Si und Ge interpoliert:

$$\varepsilon_\lambda = \varepsilon_0(11,7(1 - x_{Ge}) + 16,0x_{Ge}) \quad (2.14)$$

Die Streurrate erhält man nun durch Integration der Übergangswahrscheinlichkeit über alle Energiezustände. Allerdings ist diese Integration der Übergangswahrscheinlichkeit bei der Verwendung der vollständigen Bandstruktur nur sehr schwierig durchführbar, da q^2 abhängig vom Endzustand $\{k', b'\}$ ist. Mit der Annahme, daß die Störstellenstreuung nur im niederenergetischen Bereich von Bedeutung ist (bei höheren Energien überwiegt die Phononstreuung), wird zur Integration die vorhandene analytische Bandstrukturbeschreibung benutzt. Dies ist für Elektronen gerechtfertigt, da gerade in diesem Bereich die analytische noch sehr gut an die vollständige Bandstrukturbeschreibung angepaßt werden kann. Die Störstellenstreuung wird für Elektronen auch nur im ersten Leitungsband betrachtet. Im Falle der Löcher werden das hh- und das lh-Band berücksichtigt. Allerdings ist für Löcher die gesamte Modellierung aufgrund der starken Anisotropie schon bei kleinen Energien nur als sehr einfacher Ansatz zu verstehen. Die Streurrate für parabolische Bänder lautet [25]:

$$S_{imp}^{approx}(\epsilon_b) = \frac{1}{\tau_{imp}} c(N_{imp}) \cdot \frac{\sqrt{2} N_{imp} e^4}{32\pi\varepsilon_\lambda^2\varepsilon_0^2\sqrt{m_d}} \epsilon_b^{-\frac{3}{2}} \left(\ln \frac{\epsilon_\beta + 4\epsilon_b}{\epsilon_\beta} - \frac{4\epsilon_b}{4\epsilon_b + \epsilon_\beta} \right) \quad (2.15)$$

Mit der Zustandsdichtemasse der Elektronen oder Löcher [31] im jeweiligen Band ist ϵ_β gegeben durch

$$\begin{aligned} \epsilon_\beta &= \frac{\hbar^2 \beta^2}{2m_d} \\ m_{c,d} &= (m_\perp m_\parallel m_\parallel)^{1/3} \\ m_{v,d} &= m_{hh} \text{ oder } m_{lh} \end{aligned}$$

	μ_{max} [$\text{cm}^2/(\text{Vs})$]	μ_{min} [$\text{cm}^2/(\text{Vs})$]	N_{ref} [cm^{-3}]	α
Majorität	1430	74.5	$8.6 \cdot 10^{16}$	0.77
Minorität	1430	200	$5.3 \cdot 10^{16}$	0.68

Tabelle 2.5: Fitparameter des Störstellenstrommodells für Elektronen bei 300 K.

	μ_{max} [$\text{cm}^2/(\text{Vs})$]	μ_{min} [$\text{cm}^2/(\text{Vs})$]	N_{ref} [cm^{-3}]	α
Majorität	480	47.0	$1.7 \cdot 10^{17}$	0.79
Minorität	480	122.3	$1.4 \cdot 10^{17}$	0.70

Tabelle 2.6: Fitparameter des Störstellenstrommodells für Löcher bei 300 K.

Dabei wird wieder wie in [5] mit $c(N_{imp})$ ein dotierungsabhängiger Anpassungsfaktor eingeführt. Ziel ist es, die dotierungsabhängige Ohmsche Beweglichkeit zu reproduzieren. Es werden zur Anpassung allerdings nur experimentelle Ergebnisse von unverspanntem Si verwendet. Im Unterschied zur Anpassung in [5], wo die inverse Abschirmlänge angepaßt wurde ($\beta^2 \rightarrow c(N_{imp}) \cdot \beta^2$), wird hier die gesamte Streurrate mit einem Faktor multipliziert. Die Anpassung von β^2 hat bei kleinen Werten von $c(N_{imp})$ zur Folge, daß das Maximum der Streurrate sich erhöht und zu kleineren Energien hin verschoben wird. Beides wirkt sich während der Simulation ungünstig auf die Rechenzeit aus. Dies wird durch die Multiplikation der gesamten Streurrate vermieden.

Die Anpassung an die experimentellen Beweglichkeitsmessungen in Si bei Raumtemperatur ergibt sich folgendermaßen: Zunächst werden die verfügbaren Beweglichkeitsmessungen für Minoritäts- und Majoritätsbeweglichkeiten in Si mit der Formel [32]

$$\mu = \mu_{min} + \frac{\mu_{max} - \mu_{min}}{1 + \left(\frac{N}{N_{ref}}\right)^\alpha} \quad (2.16)$$

parametrisiert. Es ergaben sich die in Tab. 2.5 (Elektronen) und Tab. 2.6 (Löcher) aufgelisteten Werte für die Fitparameter in Gl. (2.16). Anschließend wurde der Faktor $c(N_{imp})$ in (2.15) so angepaßt, daß die Caughey–Thomas–Formel (2.16) mit dem Störstellenstrommodell reproduziert wird. In Abb. 2.14 sind die Beweglichkeiten nach der Anpassung für Minoritäten und Majoritäten im Falle der Elektronen und in 2.16 a) die zugehörigen Anpassungsfaktoren $c(N_{imp})$ gezeigt. Im nachhinein rechtfertigt die relativ geringe Variationsbreite (1-10) des Faktors $c(N_{imp})$ über dem Dotierungsbereich $10^{16} \text{cm}^{-3} - 10^{19} \text{cm}^{-3}$ die Einführung der neuen Anpassungsmethode. In 2.15 und 2.16 b) sind die analogen Abbildungen für Löcher gezeigt. Eine weitere Betrachtung der Beweglichkeiten im verspannten $SiGe$ folgt in Kapitel 3.1. Eine experimentelle Verifizierung des Elektronenbeweglichkeitsmodell für Minoritäten ist in [2] zu finden.

2.2.4 Stoßionisation

Das Stoßionisationsmodell enthält eine energieabhängige Streurrate nach Thoma [40] (Gl. 2.17). Einzige Modifikation gegenüber dem Originalmodell ist der globale Anpaßparameter $P_{T,MC} = 0.017$. Mit dieser Modifikation reproduziert das FB–MC Modell die experimentellen Ergebnisse für Quantenausbeute [41] und den Stoßionisationskoeffizienten [42]

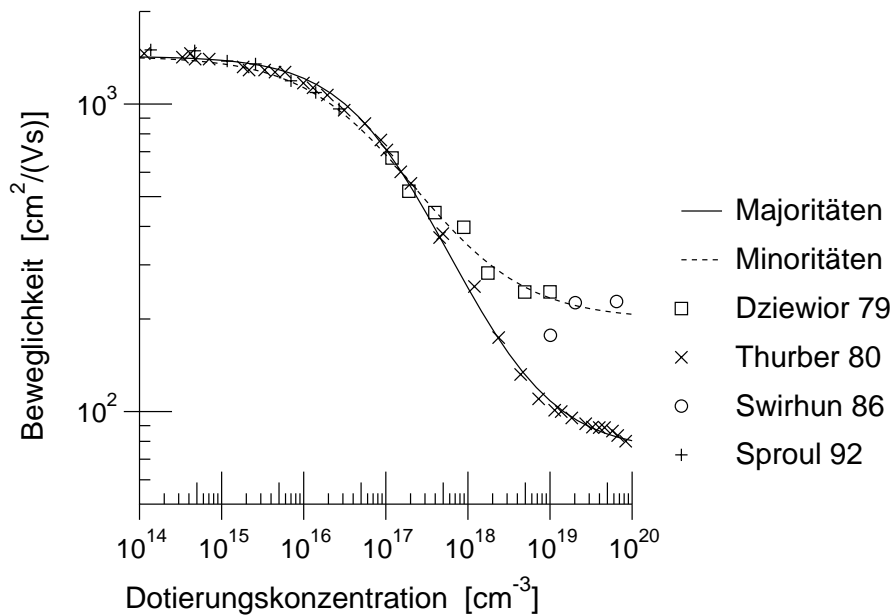


Abbildung 2.14: Dotierungsabhängige *Anpassung* des Störstellenstrommodells von Elektronen an Beweglichkeitsmessungen bei Raumtemperatur für Minoritäten von Sproul *et al.* [33], Dzewior und Silber [34] und Swirhun *et al.* [35] sowie für Majoritäten von Thurber *et al.* [36].

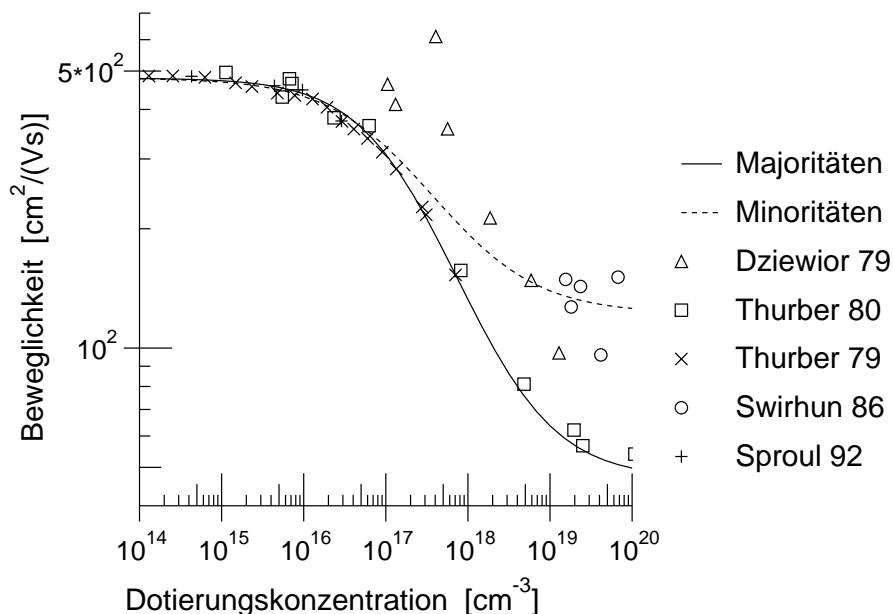


Abbildung 2.15: Dotierungsabhängige *Anpassung* des Störstellenstrommodells von Löchern an Beweglichkeitsmessungen bei Raumtemperatur für Minoritäten von Sproul *et al.* [33] und Swirhun *et al.* [37] (zum Vergleich sind auch die Daten von Dzewior und Silber [34] gezeigt) sowie für Majoritäten von Thurber *et al.* [38, 39]

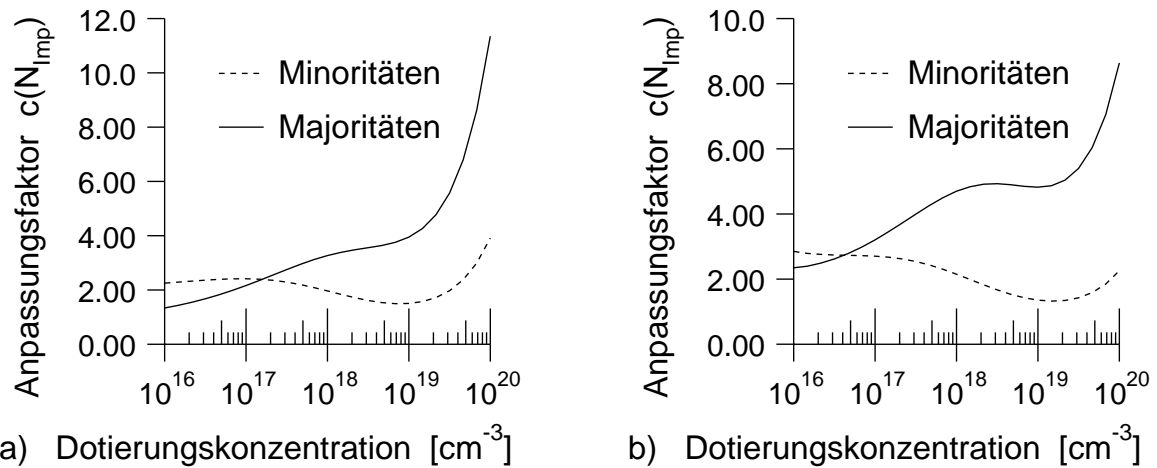


Abbildung 2.16: Anpassungsfaktor für das Störstellenmodell zur Reproduktion der experimentellen a) Elektronen- und b) Löcherbeweglichkeit.

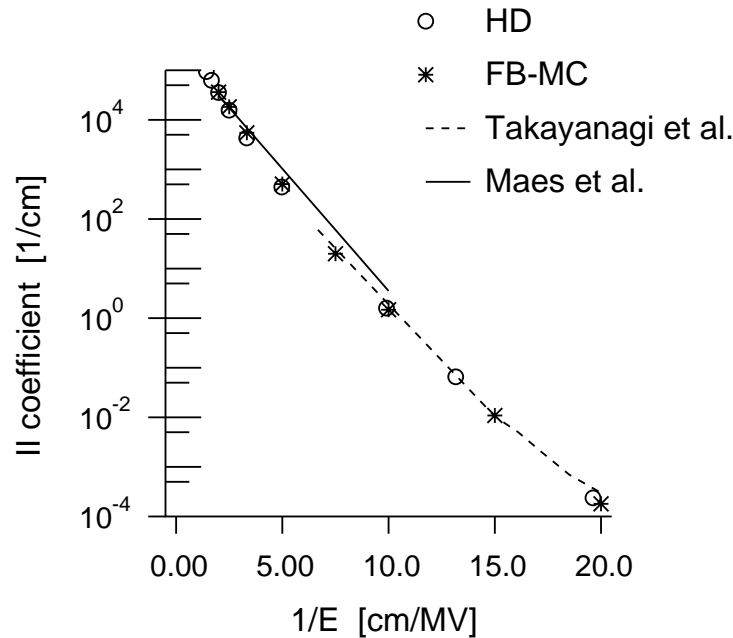


Abbildung 2.17: Stoßionisationskoeffizient für Elektronen.

sehr gut [7].

$$g(\epsilon) = P_{T,MC} \cdot \begin{cases} 0.875eV \cdot 10^{13} \frac{1}{s} (\epsilon/eV - 1.128)^3 & : 1.128eV < \epsilon < 1.75eV \\ 6.646eV \cdot 10^{13} \frac{1}{s} (\epsilon/eV - 1.572)^2 & : 1.750eV < \epsilon \end{cases}$$

In Abbildung (2.17) ist der Stoßionisationskoeffizient, der sich aus der Streurrate $g(\epsilon)$ in einem homogenen elektrischen Feld der Stärke E ergibt, im Vergleich zu experimentellen Werten und dem Stoßionisationskoeffizient, der sich aus dem *Soft-Threshold Lucky-Electron Model* in den HD Simulationen ergibt, gezeigt.

Die Generation der Elektron-/Lochpaare erfolgt nach [15]. Aufgrund der Annahme, daß alle am Stoß beteiligten Teilchen nach dem Streuprozess die gleiche Energie haben,

Temperaturbereich	a [eV]	b [eV]	c [eV]
$0 K < T < 190 K$	1,17	$1,059 \cdot 10^{-5}$	$-6,05 \cdot 10^{-7}$
$190 K < T < 275 K$	1,1785	$-9,025 \cdot 10^{-5}$	$-3,05 \cdot 10^{-7}$
$275 K < T$	1,206	-2,73	0

Tabelle 2.7: Parameter des temperaturabhängigen Bandgaps.

lautet diese wie folgt:

$$\epsilon_{\text{nachher}} = \frac{1}{3}(\epsilon_{\text{vorher}} - \epsilon_{\text{gap}}) \quad (2.17)$$

Die Nachstoßzustände des Vorstoß-Elektrons, Nachstoß-Elektrons und Nachstoß-Loches werden dann stochastisch zu dieser Energie ausgewählt.

2.3 Bandlücke in $Si_{1-x}Ge_x$ -Legierungen

Die fundamentale Bandlücke E_G ist eine spezifische Eigenschaft in Halbleitern und gibt die relative Lage zwischen Leitungsband- und Valenzbandkante an. Bei einer Gittertemperatur von $T_0 = 300K$ beträgt die Bandlücke in Silizium E_G^{Si} ungefähr 1,124 eV und in Germanium ist $E_G^{Ge} = 0,665 eV$. Die Temperaturabhängigkeit der Bandlücke für unverspanntes Si ist gegeben über folgende Parametrisierung [43]:

$$E_G^{Si}(T) = a + b \cdot \frac{T}{K} + c \cdot \left(\frac{T}{K}\right)^2 \quad (2.18)$$

Die entsprechenden Parameter findet man in Tabelle 2.7.

Betrachtet man nun $SiGe$ -Legierungen, so stellt man eine Änderung der Bandlücke zum einen durch den Germaniumgehalt und zum anderen durch den Grad der Verspannung fest. In Abbildung 2.18 ist hierzu die Bandlücke in Abhängigkeit des Germaniumgehaltes x_{Ge} für verspanntes $SiGe$ gezeigt. Zusammengefaßt sind hier zwei experimentelle Werte aus Photolumineszenzmessungen [44, 45] bei $T_0 = 4K$, eine empirische Anpassung an elektrische Messungen [46] und eine theoretische Kurve aus Pseudopotentialberechnungen [11]. Die Abweichung letzterer erläutert der Autor mit dem Hinweis, daß im Gegensatz zu reinem Si die experimentelle Bandlücke für Ge sehr gut getroffen wird. Die abweichende Steigung begründet sich durch vereinfachte Annahmen in der Theorie. In dieser Arbeit wird die extrapolierte Parametrisierung der Bandlücke nach [44] verwendet. Sie lautet für verspanntes $SiGe$:

$$E_G^{\text{versp. } SiGe}(x_{Ge}) = E_G^{Si}(T_0) - x_{Ge} \cdot 0,896 eV + x_{Ge}^2 \cdot 0,396 eV \quad (2.19)$$

In unverspanntem $SiGe$ als Substratmaterial bestimmt sich die Bandlücke für Germaniumgehalte $y_{Ge} < 0,85$ folgendermaßen [47]:

$$E_G^{\text{unversp. } SiGe}(y_{Ge}) = E_G^{Si}(T_0) - y_{Ge} \cdot 0,43 eV + y_{Ge}^2 \cdot 0,206 eV \quad (2.20)$$

Hierzu sind in Abbildung 2.19 eine theoretische Kurve aus Pseudopotentialberechnungen [11], die Werte basierend auf Ergebnissen der Photoluminiszenzspektrometrie [47] und weitere experimentelle Ergebnisse [23] gezeigt. Die Änderung der Bandlücke ist in

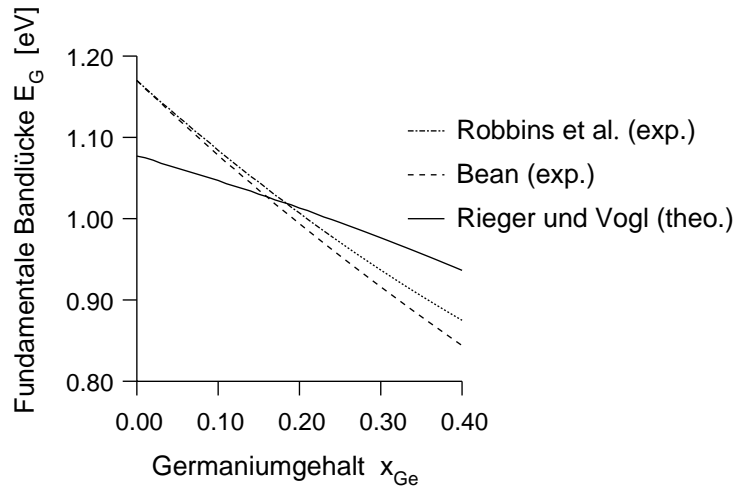


Abbildung 2.18: Bandgap in verspanntem $SiGe$ auf Si -Substrat für 4 K: durchgezogene Kurve: Theorie (Rieger und Vogl, [11]), gepunktete Kurve: Photolumineszenzexperiment extrapoliert (Robbins et al., [44]), gestrichelte Kurve: Fit an weitere Experimente (Bean, [45]).

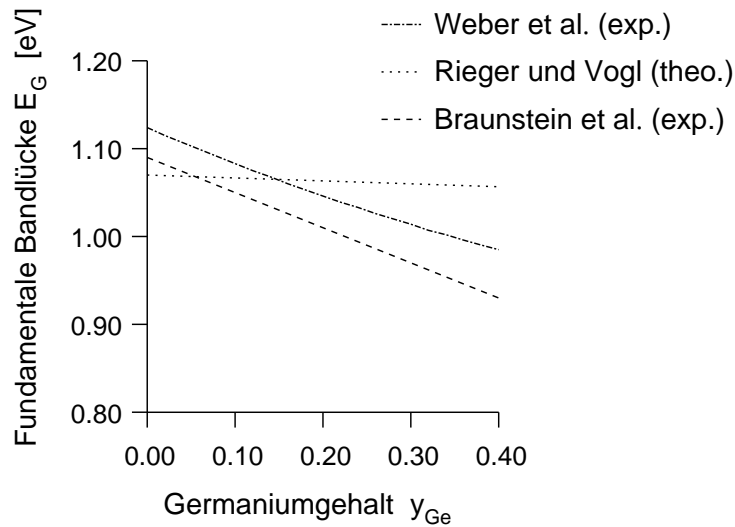


Abbildung 2.19: Bandgap in relaxiertem $SiGe$ für 300K: gepunktete Kurve: Theorie (Rieger und Vogl, [11]), gestrichelt-gepunktete Kurve: Photolumineszenzexperiment (Weber et al., [47]) und gestrichelte Kurve: Fit an weitere Experimente (Braunstein et al., [23]).

relaxiertem $SiGe$ deutlich geringer als in verspanntem $SiGe$. Neben den bisher beschriebenen Ursachen der Änderung der Bandlücke können auch Bandstrukturänderungen durch hohe Dotierungen (*heavy doping Effekte*) auftreten. Diese Effekte können durch eine dotierungsabhängige Verkleinerung der Bandlücke (*Band-Gap-Narrowing* (BGN)) modelliert werden [48]. In Gleichung 2.21 ist dieses aus [48] entnommene Modell des BGN wiedergegeben

$$\Delta E^{\text{Bgn}} = E_0 \left(\ln \frac{N_T}{N_{\text{Ref}}} + \sqrt{\left(\ln \frac{N_T}{N_{\text{Ref}}} \right)^2 + 0.5} \right) \quad (2.21)$$

mit $E_0 = 6.92\text{meV}$, $N_{\text{Ref}} = 1.3 \cdot 10^{17}/\text{cm}^3$ und der Gesamtdotierung N_T .

Bisher wurden Aussagen über die Bandlücke nur innerhalb einer einzelnen Bandstruktur gemacht. Betrachtet man nun aber ein Materialsystem, z.B. verspanntes $SiGe$ auf relaxiertem Si , so muß hier nun die relative Lage der Bandkanten an solch einem Heteroübergang geklärt werden. Hierzu wird der Unterschied in den Bandlücken in zwei Bandkantensprünge (*Offsets*) aufgeteilt. Es sind dies die Änderung der Leitungsbandkante ΔE_c und die Änderung der Valenzbandkante ΔE_v .

Es folgt nun die Analyse des Heteroübergangs von verspanntem $SiGe$ auf unverspanntem Si . Hierin wird folgende Aufspaltung der Änderung der Bandlücke (Gl. 2.19) angewendet (Vergleiche Tabelle 2.9 in [46]).

$$\Delta E_c = -0,196 \text{ eV} \cdot x_{Ge} + 0,396 \text{ eV} \cdot x_{Ge}^2 \quad (2.22)$$

$$\Delta E_v = -0,7 \text{ eV} \cdot x_{Ge} \quad (2.23)$$

Die gesamten Bandkantensprünge inklusive des BGN lauten dann folgendermaßen:

$$\Delta E_c^T = \Delta E_c - \frac{1}{2} \Delta E^{Bgn} \quad (2.24)$$

$$\Delta E_v^T = \Delta E_v - \frac{1}{2} \Delta E^{Bgn} \quad (2.25)$$

Ein Vergleich der Werte für Leitungsband- und Valenzbandoffset von dieser Arbeit, Bean et al. [45], und Rieger et al. [11] wird in den Abbildungen 2.20 a) und b) gegeben. Bei den Bandkantensprüngen im Valenzband ist eine gute Übereinstimmung erkennbar, nicht aber bei den Bandkantensprüngen des Leitungsbandes. Hierzu besteht in der Literatur [45, 44] noch keine eindeutige Meinung über das Vorzeichen von ΔE_c ³. Weiterhin erkennt man, daß ΔE_c deutlich kleiner ist als ΔE_v . Die hier verwendeten Werte für ΔE_c nach [46] führen dazu, daß bei verspanntem $SiGe$ auf relaxiertem Si ein Typ-I-Heteroübergang vorliegt. Typ-I-Heteroübergang bedeutet, daß im Bänderschema die kleinere Bandlücke des einen Materials vollständig innerhalb der Bandlücke des zweiten Materials liegt. In Abbildung 2.21 ist hierzu das Bänderschema für ein verspanntes $Si/Si_{0.6}Ge_{0.4}/Si$ -Materialsystem gezeigt. Die Vorzeichenkonvention von ΔE_c und ΔE_v im gemeinsamen Bänderschema ist hierbei so zu verstehen: Ein negativer Bandkantensprung ΔE_c und ein positives ΔE_v führen beide zu einer Verkleinerung der Bandlücke. Weitere Details zur Bandlücke in verspanntem $SiGe$ findet man in [6].

Nachdem nun die Bandlücke in verspannten Heteromaterialien ausführlich erläutert wurde, folgt jetzt eine Beschreibung des Einflusses der Bandlücke auf den Ladungstransport. Eine wichtige spezifische Größe für Halbleiter ist die intrinsische Eigenleitungsdichte n_i . Sie steht in direktem Zusammenhang zur Bandlücke über

³Für die elektrische Funktion eines Si/SiGe-HBTs ist dieses auch wenig relevant, solange sich der Bandabstand nicht ändert.

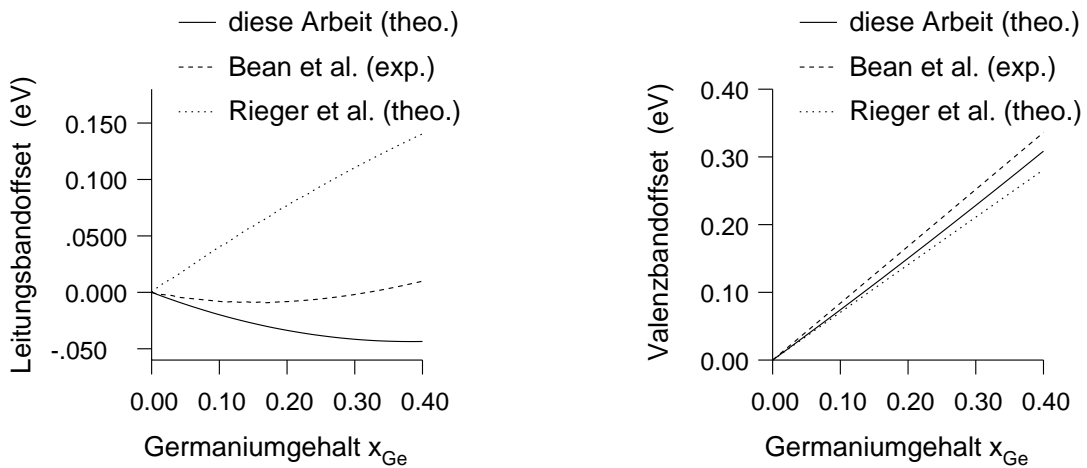


Abbildung 2.20: a) Leitungsband- und b) Valenzbandoffset in verspanntem $SiGe$ nach [11], nach [45] sowie die hier benutzten Werte [46].

Typ-I-Heteroübergang

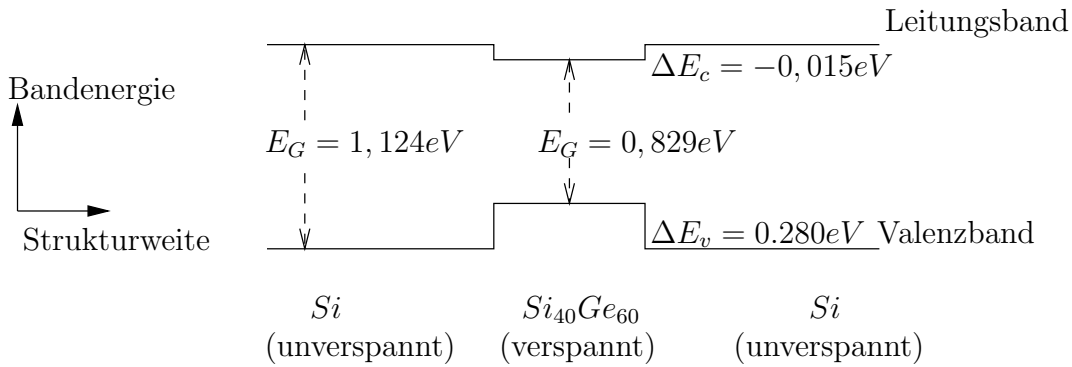


Abbildung 2.21: Typ-I-Heteroübergang für ein verspanntes $Si/Si_{0.6}Ge_{0.4}/Si$ -Materialsystem (undotierter Fall).

$$n_i^2 = N_c N_v \exp\left(-\frac{E_G}{k_B T}\right) \quad (2.26)$$

$$\text{mit } N_c = 2 \sum_{b=c1}^{c4} \int_{\epsilon_{0,b}}^{\infty} d\epsilon Z_b(\epsilon) \exp(-\epsilon/(k_B T)) \quad (2.27)$$

$$\text{und } N_v = 2 \sum_{b=v1}^{v3} \int_{\epsilon_{0,b}}^{\infty} d\epsilon Z_b(\epsilon) \exp(-\epsilon/(k_B T)). \quad (2.28)$$

Hierin ist N_v die effektive Zustandsdichte der Löcher und N_c die effektive Zustandsdichte der Elektronen. Sie berechnen sich wie angegeben aus der energieabhängigen Zustandsdichte $Z_b(\epsilon)$. Mit der intrinsischen Dichte n_i aus (2.26) gilt im nichtentarteten Halbleiter (nicht zu hohe Dotierungen) in der Nähe des thermodynamischen Gleichgewichts folgende Beziehung zwischen den Elektron- und Löcherdichten:

$$n \cdot p = n_i^2 \quad (2.29)$$

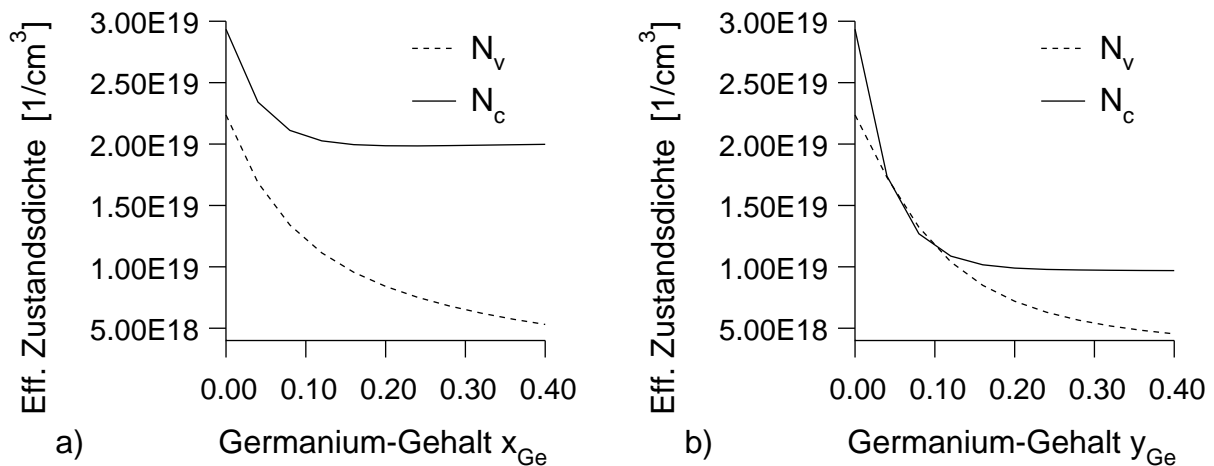


Abbildung 2.22: Effektive Zustandsdichte N_v und N_c a) für verspanntes $SiGe$ und b) für verspanntes Si bei 300 Kelvin.

Dadurch führt zum Beispiel ein erhöhtes n_i in Gebieten mit konstanter Majoritätsträgerdichte zu einer erhöhten Minoritätsträgerdichte. Diesen Effekt nutzt man in Heterobipolartransistoren [49, 6]. Für Unipolarbauelemente, die hauptsächlich in dieser Arbeit behandelt werden, spielt dieser Effekt im normalen Betriebsfall keine Rolle.

Die effektiven Zustandsdichten für Löcher und Elektronen, jeweils für verspanntes $SiGe$ und verspanntes Si , sind in Abb. 2.22 a) und b) dargestellt. In verspanntem $SiGe$ fällt N_c auf zwei Drittel der effektiven Zustandsdichte in reinem Si , was eine direkte Folge der Ausblendung der zwei Täler ist. Analog dazu fällt in verspanntem Si N_c auf ein Drittel ab, hier werden ja vier von sechs Tälern ausgeblendet. N_v nimmt in beiden Fällen stark mit zunehmendem Germaniumgehalt ab, weil zum einen die Zustandsdichte im tiefstliegenden Band abnimmt und zum anderen die Abspaltung des hh - oder lh -Bandes mit steigendem Germaniumgehalt zunimmt.

3 Full–Band–Monte–Carlo–Simulation homogener Transportparameter

Dieses Kapitel gibt eine Zusammenfassung der Transporteigenschaften der Ladungsträger für die hier vorgestellten *Si/SiGe*–Materialsysteme. Hierzu zählen die Ohmsche Beweglichkeit, in dotiertem und undotiertem Material, und die Driftgeschwindigkeit über dem elektrischen Feld. In der Arbeit von [28] wurde anhand dieser homogenen Simulationen die experimentelle Verifikation — auch temperaturabhängig — durchgeführt. Schwerpunkt in der vorliegenden Arbeit ist die Beschreibung der Auswertemethoden im Falle der neuen Bandstrukturdiskretisierung und eine Diskussion der Ergebnisse im Hinblick auf verspannte HFETs. Die Ergebnisse von [28] und der vorliegenden Arbeit sind weitgehend gleich, neu ist hier die Bestimmung der Ohmschen Beweglichkeit mit Hilfe eines zur Bandstruktur konsistenten effektiven Massentensors.

Die Beweglichkeit ist allgemein gegeben über $\vec{v}_D = \underline{\underline{\mu}}(\vec{E})\vec{E}$. Als Ohmsche Beweglichkeit bezeichnet man dann die Beweglichkeit bei kleinen elektrischen Feldern. Grundsätzlich ließe sich die Ohmsche Beweglichkeit durch Lösung der homogenen BTG mit Hilfe des MC–Algorithmus bestimmen, der ja den Erwartungswert der Driftgeschwindigkeit liefert. Für kleine Felder ist die mittlere Geschwindigkeit klein gegenüber der Varianz der Geschwindigkeitsschätzung. Dies erfordert hohe Simulationszeiten zum Erreichen zuverlässiger Ergebnisse. Aus diesem Grund wird hier zur Bestimmung der Ohmschen Beweglichkeit eine Definition des Beweglichkeitstensors $\underline{\underline{\mu}}$ mit Hilfe einer skalaren mikroskopischen Relaxationszeit gewählt [50, 51]. Diese Formulierung bedingt aber gewisse Eigenschaften für Bandstruktur und Streuprozesse. Das folgende Kapitel beschreibt nun die Berechnung des Beweglichkeitstensors und faßt alle wesentlichen Aspekte der Ohmschen Beweglichkeit in verspannten *Si*– und *SiGe*–Legierungen zusammen. Anschließend werden die Ergebnisse der MC–Simulation der Driftgeschwindigkeit in Abhängigkeit des elektrischen Feldes gezeigt.

3.1 Ohmsche Beweglichkeiten

Die Ohmsche Beweglichkeit ist die maßgebliche Größe des Ladungstransports für kleine treibende Felder. Sie wird hier mit Hilfe der mikroskopischen Relaxationszeit (MRT) bestimmt, welche im nichtentarteten Fall über folgende Integralgleichung [25, 22] gegeben ist:

$$\vec{v}(\vec{k}) = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_{BZ} S_{b',b}(\vec{k}'|\vec{k}) \left[\underline{\underline{\tau}}(\vec{k})\vec{v}(\vec{k}) - \underline{\underline{\tau}}(\vec{k}')\vec{v}(\vec{k}') \right] d^3\vec{k}' \quad (3.1)$$

Hierin ist $\underline{\underline{\tau}}(\vec{k})$ die impulsabhängige MRT. Die in dieser Arbeit vorgestellten speziellen Streuprozesse sind entweder “velocity randomizing“ oder elastisch und isotrop [25], so daß (3.1) sich für jeden Prozeß durch eine skalare und nur energieabhängige Relaxationszeit lösen läßt.

- „*velocity–randomizing*“ Streuprozess: Hier sind Nachstoß– und Vorstoßgeschwindigkeit unkorreliert. Die zugehörige Streurrate hängt dann nur von der Energie und

dem Bandindex ab. Die spätere Anwendung der Matthiessenschen Regel in Gleichung 3.4 ist hierbei auch dann möglich, wenn ein Interbandprozeß erlaubt ist. Zu diesen zählen die Phonon- und die Legierungsstreuung. Die Lösung für $\tau(\epsilon_b)$ lautet dann:

$$\tau_{phonon}^{-1}(\epsilon_b) = S_{phonon}(\epsilon_b) \quad \text{und} \quad \tau_{alloy}^{-1}(\epsilon_b) = S_{alloy}(\epsilon_b) \quad (3.2)$$

- Isotroper, elastischer Streuprozeß: Hier ist die Streurrate nur von der Energie und vom Bandindex abhängig. Hierzu zählt die Störstellenstreuung. Hierbei ist kein Interbandprozeß erlaubt.

$$\tau_{impurity}^{-1}(\epsilon_b) = S_{impurity}(\epsilon_b) \quad (3.3)$$

Die Summe der einzelnen inversen Relaxationszeiten ergibt dann die gesamte inverse Relaxationszeit.

$$\frac{1}{\tau(\epsilon)} = \sum_b \left(\frac{1}{\tau_{phonon}(\epsilon_b)} + \frac{1}{\tau_{alloy}(\epsilon_b)} + \frac{1}{\tau_{impurity}(\epsilon_b)} \right) \quad (3.4)$$

Mit Hilfe dieser skalaren und nur von der Energie abhängigen Relaxationszeit und dem inversen Massentensor $\underline{\underline{m}}^{-1}$ lautet dann der Beweglichkeitstensor folgendermaßen [51]:

$$\underline{\underline{\mu}} = q \left\langle \tau(\epsilon) \underline{\underline{m}}^{-1}(\vec{k}) + \frac{d\tau(\epsilon)}{d\epsilon} \vec{v}(\vec{k}) \vec{v}^T(\vec{k}) \right\rangle \quad (3.5)$$

Hierin bildet $\langle \rangle$ den Erwartungswert bei Berücksichtigung einer beliebigen Verteilungsfunktion. Im thermodynamischen Gleichgewicht ist die Verteilungsfunktion, die Maxwell-Boltzmann-Verteilung, bekannt. Dadurch kann für diesen Fall die Monte-Carlo-Simulation durch eine wesentlich effizientere numerische Berechnung des Beweglichkeitstensors ersetzt werden. Im Abschlußbericht [5] wurde im Falle der analytischen Bandstruktur eine Berechnung der Diagonalkomponenten des Beweglichkeitstensors über die Integration der energieabhängigen Gruppengeschwindigkeit und Zustandsdichte durchgeführt, wodurch allerdings nicht alle Einzelheiten der Bandstrukturanisotropien erfaßt wurden. Bevor nun eine ausführliche Diskussion der einzelnen Komponenten von $\underline{\underline{\mu}}$ erfolgt, wird im folgenden Kapitel die Berechnung des inversen Massentensors für die vollständige Bandstruktur $\underline{\underline{m}}^{-1}$ vorgestellt.

3.2 Massentensor

Der inverse Massentensor ist gegeben durch:

$$\underline{\underline{m}}^{-1} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} \vec{v}(\vec{k})^T = \frac{1}{\hbar^2} \nabla_{\vec{k}} (\nabla_{\vec{k}} \epsilon(\vec{k}))^T$$

Die lineare Interpolation der Energie in der gewählten FB-Diskretisierung bedingt, daß die Gruppengeschwindigkeit in den Tetraedern konstant ist und daß sie an den Tetraedergrenzflächen unstetig ist. Die Ableitung ergibt dann innerhalb eines Tetraeders einen verschwindenden Anteil zum Massentensor und an den Grenzflächen einen Anteil in Form einer Dirac-Distribution. Eine Mittelung dieser Anteile über die gesamte BZ zur Bestimmung der effektiven inversen Massen ist schwierig durchführbar. Aus diesem Grund wird

zur Formulierung des inversen Massentensors folgende Herleitung benutzt [19]. Aus dem Gaußschen Integralsatz folgt direkt für eine beliebige skalare Ortsfunktion $v_{x,y,z}$:

$$\int_{V_{tet}} \text{grad } v_{x,y,z} dV = \oint_{F_{tet}} v_{x,y,z} d\vec{F} \quad (3.6)$$

Hiermit läßt sich dann das Volumenintegral des Massentensors im Tetraeder durch das Oberflächenintegral der drei Komponenten v_x, v_y und v_z der Gruppengeschwindigkeit über die vier Grenzflächen des Tetraeders angeben.

$$\frac{1}{V_{tet}} \int_{V_{tet}} \underline{\underline{m}}^{-1} dV = \frac{1}{\hbar V_{tet}} \oint_{F_{tet}} \vec{v} d\vec{F}^{\text{T}} = \underline{\underline{m}}_{tet}^{-1} \quad (3.7)$$

Die Division durch das Tetraedervolumen V_{tet} ergibt dann den pro Tetraeder konstanten inversen Massentensor $\underline{\underline{m}}_{tet}^{-1}$. Da die Gruppengeschwindigkeit an den Tetraedergrenzflächen unstetig ist, wird das Oberflächenintegral über das arithmetische Mittel der Gruppengeschwindigkeit beiderseits gebildet.

$$\oint_{F_{tet}} \vec{v} d\vec{F}^{\text{T}} = \sum_{j=1}^4 \frac{\vec{v}_{tet}^j + \vec{v}_{tet}}{2} \vec{n}_j^{\text{T}} A_j \quad (3.8)$$

Hierin läuft der Index j über die Grenzflächen der vier anliegenden Tetraeder mit der zugehörigen Gruppengeschwindigkeit \vec{v}_{tet}^j . \vec{n}_j ist der nach außen liegende Normalenvektor der jeweiligen Grenzfläche, A_j ist der Flächeninhalt und \vec{v}_{tet} ist die Gruppengeschwindigkeit im Tetraeder, für welchen der inverse Massentensor berechnet wird. Insgesamt erhält man einen symmetrischen inversen Massentensor für jeden Tetraeder in Übereinstimmung mit der Diskretisierung der Bandstruktur.

Um eine Aussage über die Ladungsträgerbeweglichkeiten zu treffen, ist die Kenntnis des effektiven Massentensors $\underline{\underline{m}}_{eff}^{-1}$ wichtig. Dieser wird über den Erwartungswert von $\underline{\underline{m}}_{tet}^{-1}$ gebildet:

$$\underline{\underline{m}}_{eff}^{-1} = \left\langle \underline{\underline{m}}_{tet}^{-1} \right\rangle \quad (3.9)$$

Es folgt nun eine genauere Betrachtung der Diagonalkomponenten von $\underline{\underline{m}}_{eff}^{-1}$, unter Annahme einer Gleichgewichtsverteilung, wobei m_{xx} der *Off-Plane* -Richtung und m_{yy} der *In-Plane* -Richtung entspricht. In den Abbildungen 3.1 und 3.2 sind die inversen Elektronen- und Löchermassen für verspanntes *SiGe* in Abhängigkeit von x_{Ge} gezeigt. Zur Interpretation der Ergebnisse betrachtet man zunächst die Sechstalstruktur des ersten Leitungsbandes, welches im Gleichgewicht hauptsächlich besetzt ist. Die Flächen mit konstanter Energie sind hierbei Ellipsoide. Innerhalb eines Tales wird dadurch die Masse der Elektronen richtungsabhängig. Man erhält eine transversale Masse m_t (senkrecht zur Kristallhauptachse, *In-Plane*) und eine longitudinale Masse m_l (in Richtung der Kristallhauptachse, *Off-Plane*) auf. Die Werte dieser Massen sind in Tabelle 3.1 gegeben. Da in unverspanntem *Si* keine der drei Hauptachsen eine auszeichnende Position hat, sind die Diagonalkomponenten von $\underline{\underline{m}}_{eff}^{-1}$ alle gleich. In jeder Richtung sind immer vier Täler mit der transversalen Masse und zwei mit der longitudinalen Masse am Ladungstransport beteiligt. Aufgrund der energetischen Anhebung einzelner Täler bestehen in verspanntem

$m_l [m_0]$	$m_t [m_0]$
0,918	0,197

Tabelle 3.1: Die longitudinale Masse m_l und die transversale Masse m_t der Elektronen in einem Energietal des ersten Leitungsbandes

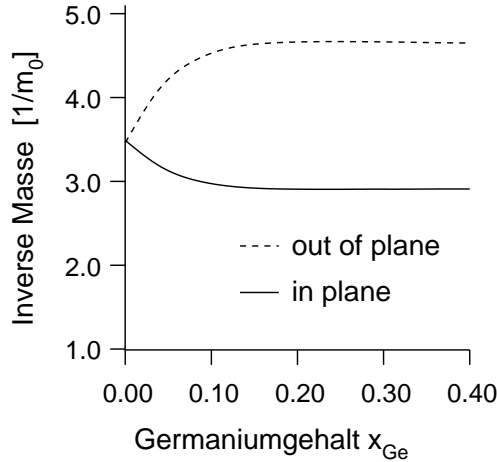


Abbildung 3.1: Inverse Elektronenmasse für verspanntes *SiGe*

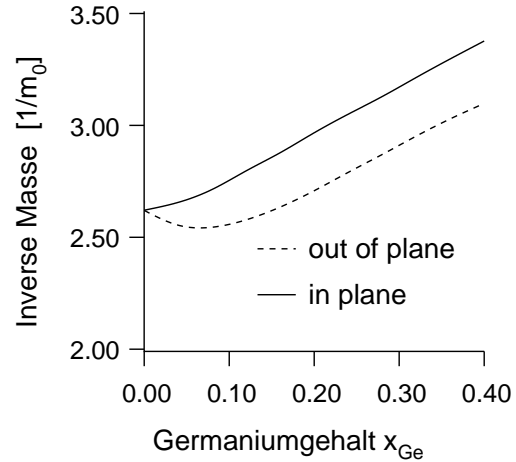


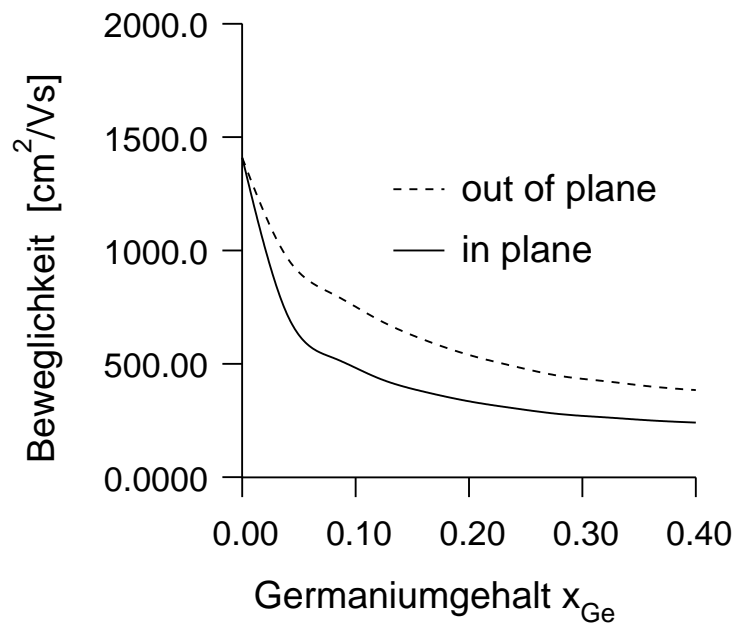
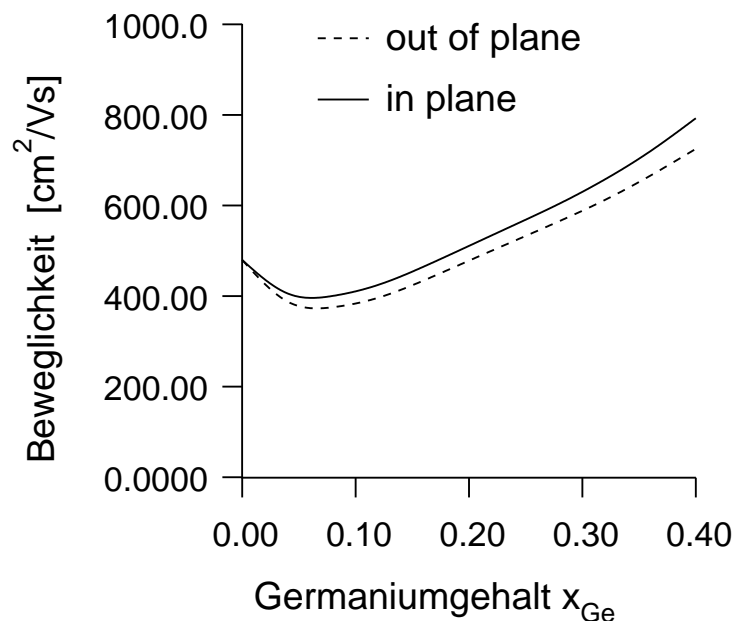
Abbildung 3.2: Inverse Löchermasse für verspanntes *SiGe*

Material jedoch große Unterschiede der inversen effektiven Massen bezüglich der Raumrichtungen. Die Werte für m_l, m_t ändern sich allerdings nur gering in den angehobenen Tälern.

In verspanntem *SiGe* sind mit zunehmendem Germaniumgehalt nur noch die *In-Plane*-Täler besetzt. Dadurch werden die Massen der *Off-Plane*-Richtung m_{xx} ab etwa 15% Germaniumgehalt nur noch durch die transversalen Massen bestimmt. Die inversen Massen der *In-Plane*-Richtung allerdings setzen sich hier aus jeweils zwei Tälern mit ihren longitudinalen und zwei Tälern mit ihren transversalen Massen zusammen. Man erkennt dies in Abb. 3.1, worin die *In-Plane* inverse Masse etwa dem Mittelwert von $1/m_t$ und $1/m_l$ entspricht.

Betrachtet werden nun die inversen Massen der Löcher. Für diese gestaltet sich die Interpretation schwieriger. Die Verspannung führt in verspanntem *SiGe* zu zwei unabhängigen Veränderungen der jeweiligen Bandstruktur. Zum einen spalten sich das *hh*-Band und das *lh*-Band energetisch voneinander ab und zum anderen verändern sich deren Massen. In Abbildung 3.2 ist die inverse Masse gezeigt. Der Unterschied zwischen *In-Plane* und *Off-Plane*-Richtung ist im Vergleich zu den Elektronen geringer. Am bedeutendsten ist die Tatsache, daß mit zunehmendem Germaniumgehalt die inversen Massen zunehmen, was eine erhöhte Beweglichkeit erwarten läßt.

Es folgt nun eine Aufstellung der Ohmschen Beweglichkeiten der Elektronen und Löcher. In Abb. 3.3 sind die Elektronbeweglichkeiten in undotiertem verspanntem *SiGe* gezeigt. Aufgrund der Werte für die inversen Massen kann man hier nun einen Anstieg der *Off-Plane*-Beweglichkeiten erwarten, die Werte für *Off-Plane*- und *In-Plane*-Beweglichkeit sinken aber jeweils auf 384 Vs/cm^2 und 240 Vs/cm^2 . Die Ursache dafür ist die in *SiGe*-Legierungen zusätzlich auftretende und dominierende Legierungsstreuung.

Abbildung 3.3: Elektronenbeweglichkeit für verspanntes *SiGe* bei 300 KAbbildung 3.4: Löcherbeweglichkeit für verspanntes *SiGe* bei 300 K

Im Falle der Löcherbeweglichkeit in undotiertem verspanntem *SiGe* (Abb. 3.4) führt die Legierungsstreuung zunächst zu einer Erniedrigung der Beweglichkeiten. Ab einem Germaniumgehalt von 10% allerdings steigen *In-Plane* – und *Off-Plane* – Beweglichkeit wieder an. Ab diesem Prozentsatz überwiegen wieder die Vorteile durch die gestiegenen inversen Massen und die Vorteile, die sich durch die Veränderungen der Bandstruktur aufgrund der Verspannung ergeben.

Bislang wurden die Beweglichkeiten nur für undotierte Materialkonfigurationen betrachtet. Um die Modellierung des Ladungstransportes in verspanntem und dotiertem *SiGe* zu überprüfen, folgt nun ein Vergleich entsprechender, simulierter Beweglichkeiten

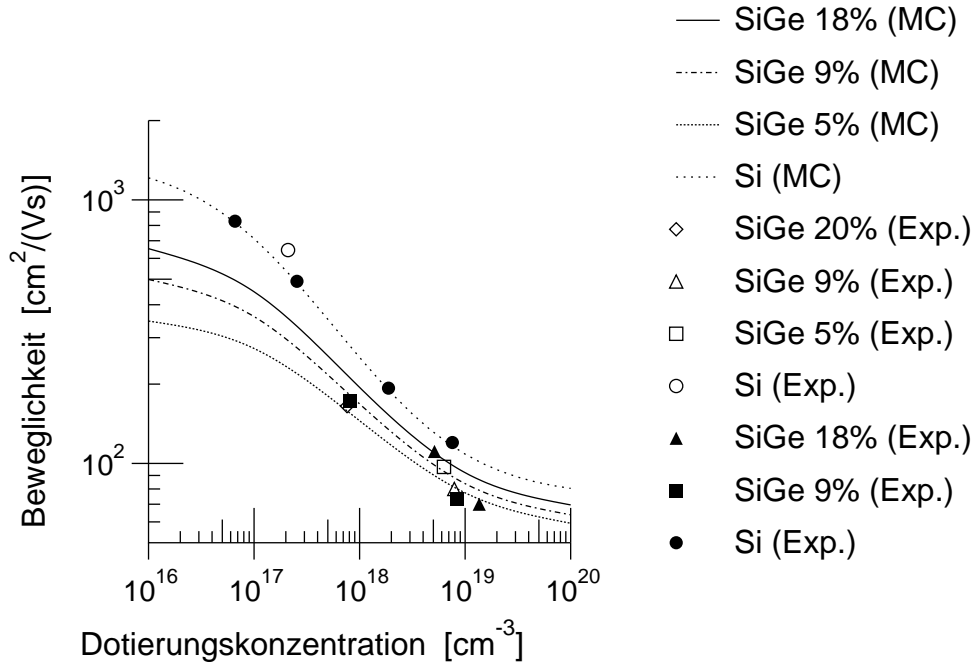


Abbildung 3.5: Vergleich der Ohmschen Majoritätselektronenbeweglichkeit (*In-Plane* – Komponente) in verspanntem *SiGe* anhand von Messungen (gefüllte Symbole = *molecular beam epitaxy* (MBE), offene Symbole = *low pressure chemical vapor deposition* (LPCVD))

mit den zur Verfügung stehenden Meßergebnissen. Zur Erinnerung folgen nochmals zwei Details der Modellierung des Streuratensystems:

- Die Anpassung des Legierungsstreupotentiales wurde nur für unverspanntes *SiGe* durchgeführt.
- Die Anpassung der Störstellenstreuung wurde nur für unverspanntes *Si* durchgeführt.

Insofern stellt der Vergleich von Simulation und Messung im verspanntem Material eine echte Verifikation dar. Betrachtet man nun die Abbildungen 3.5 und 3.6, so ist eine gute Übereinstimmung der simulierten Werte mit den Messungen erkennbar. Dies bestätigt zunächst einmal die Modelle der Legierungs- und Störstellenstreuung. Eine Überprüfung anhand einer breiteren Datenbasis wäre hier für die Zukunft wünschenswert.

3.3 Driftgeschwindigkeiten

Nachdem nun die Ohmschen Beweglichkeiten ausführlich diskutiert wurden, folgt nun eine eingehende Betrachtung der Driftgeschwindigkeiten in Abhängigkeit des elektrischen Feldes. Die Driftgeschwindigkeiten wurden durch Simulationen einer homogenen Materialstruktur bestimmt. Es wurden hierzu für verspanntes *SiGe* ($x_{Ge} = 30\%$) die *In-Plane* und *Off-Plane* – Driftgeschwindigkeit jeweils für Elektronen und Löcher simuliert und mit den entsprechenden Werten für unverspanntes *Si* verglichen. Die gezeigten Driftgeschwindigkeiten sind hierbei die Komponente der Driftgeschwindigkeit in Richtung des elektrischen Feldes, welches für die *Off-Plane* – Komponente v_D^{op} parallel zur $\langle 100 \rangle$ –Richtung gelegt wurde. Im Falle der *In-Plane* – Komponente v_D^{ip} war das Feld parallel zur $\langle 011 \rangle$ –Richtung,

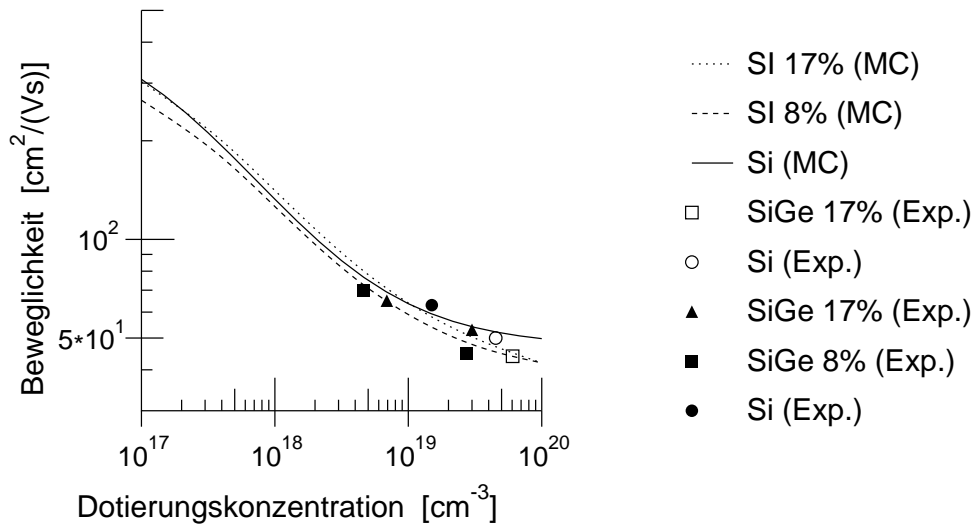


Abbildung 3.6: Vergleich der Ohmschen Majoritätslöcherbeweglichkeit (*In-Plane* – Komponente) in verspanntem SiGe anhand von Messungen (gefüllte Symbole = MBE, offene Symbole = LPCVD)

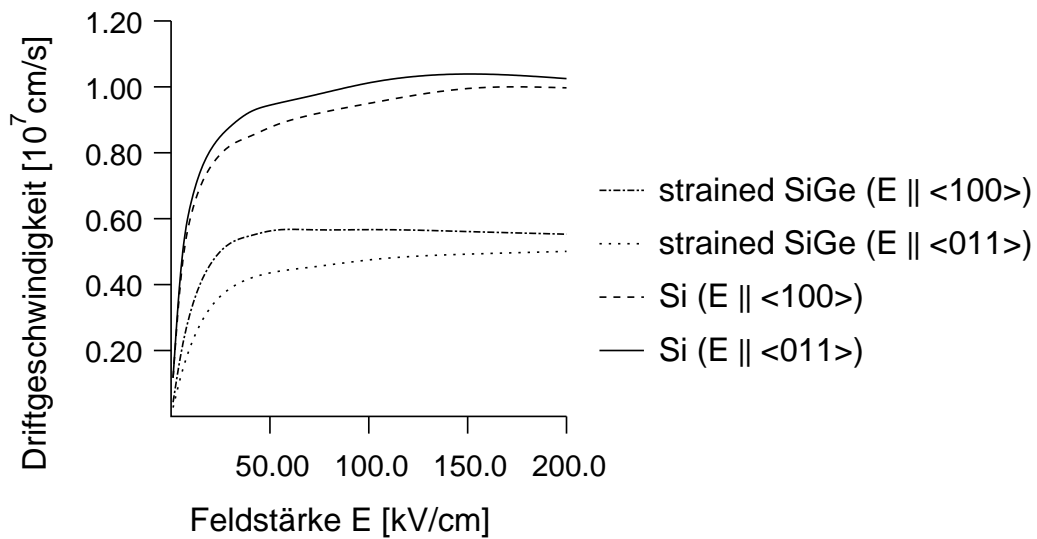


Abbildung 3.7: Driftgeschwindigkeiten der Elektronen für verspanntes *SiGe*

da üblicherweise in MOS-Transistoren diese Richtung der Ausrichtung des Kanals entspricht.

In Abbildung 3.7 sind nun die Driftgeschwindigkeiten für verspanntes *SiGe* im Vergleich zu unverspanntem *Si* gezeigt. Infolge der Legierungsstreuung sind hier die Driftgeschwindigkeiten, v_D^{op} und v_D^{ip} , deutlich kleiner, sowohl für kleine als auch für große elektrische Felder. Die Sättigungsdriftgeschwindigkeit liegt nur bei etwa $5 \cdot 10^6 \text{ cm/s}$.

Für Löcher in verspanntem *SiGe* (siehe Abb. 3.8) gilt, daß v_D^{op} und v_D^{ip} für mittlere und hohe Feldstärken ebenfalls deutlich unter den Werten von unverspanntem *Si* liegen. Die Driftgeschwindigkeit sättigt ungefähr bei $7,5 \cdot 10^6 \text{ cm/s}$.

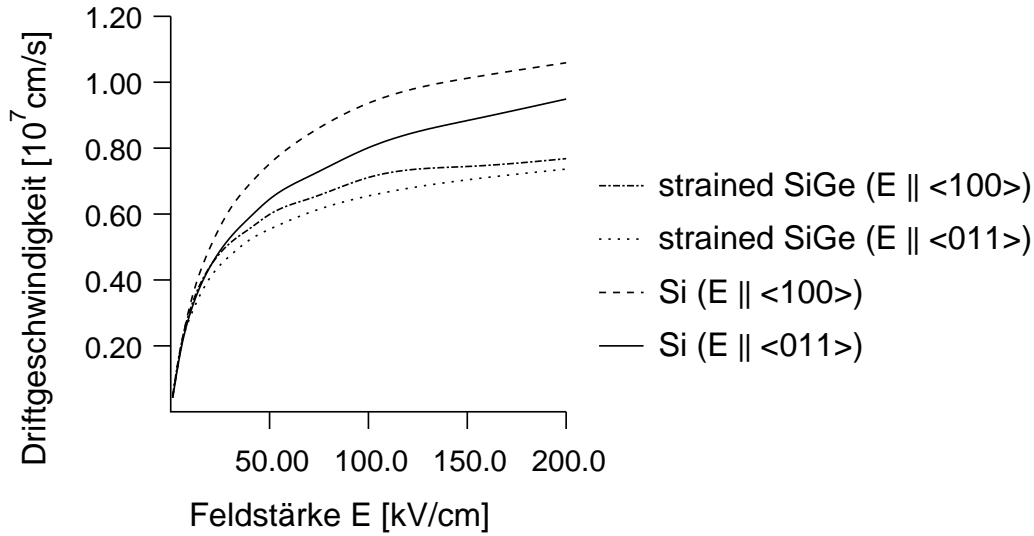


Abbildung 3.8: Driftgeschwindigkeiten der Löcher für verspanntes SiGe

4 Full-Band-Monte-Carlo-Simulationen von SiGe-HBTs

4.1 Einführung

In den vorangegangenen Kapiteln wurde das Full-Band-Monte-Carlo Modell für den Ladungstransport in homogenen Systemen beschrieben. Es umfaßt die Zeitentwicklung der impulsabhängigen Ladungsträgerverteilungsfunktion $f_b(\vec{r}, \vec{k}, t)$ durch Propagation von Teilchen im Impulsraum unter dem Einfluß von elektrischem Feld und Stößen. Die Verteilungsfunktion $f_b(\vec{r}, \vec{k}, t)$ wird in der MC-Methode durch ein gewichtetes Teilchenensemble repräsentiert:

$$f_b(\vec{r}, \vec{k}, t) \rightarrow \frac{(2\pi)^3}{2} \sum_{i=1}^N w_i \delta_{b,b_i} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \delta(\vec{k} - \vec{k}_i)$$

Hierin ist N die Anzahl der Simulationsteilchen und w_i das Teilchengewicht ($0 \leq w_i \leq 1$ und $\sum w_i = 1$). Die Evolution der Verteilungsfunktion wird durch die Propagation der Einzelteilchen bestimmt, wobei zunächst die Rückwirkung der Teilchenbewegung auf die Poisson-Gleichung unterdrückt wird. Diese Propagation wird durch den Monte-Carlo-Algorithmus beschrieben. Des weiteren benötigt man für die Bauelementsimulation von HBTs die selbstkonsistente Lösung von Poisson- und Boltzmann-Transportgleichung mit den zugehörigen Randbedingungen im Ortsraum, welche im vorherigen Abschlußbericht [5] ausführlich beschrieben wurde und im Falle des FB-MC-Bauelementsimulators unverändert zur Anwendung kommt. Dies umfaßt ebenfalls die Auswertung ortsabhängiger Erwartungswerte. Wichtig zum Verständnis ist jedoch, daß das Ortsraumgitter ein nicht äquidistantes Rechteckgitter ist, das den Ort in Quadranten aufteilt.

Grundsätzlich verändert hat sich aufgrund der Verwendung der vollständigen Bandstruktur die Ortsraumpropagation der Ladungsträger und die Modellierung von Grenzflächen mit unterschiedlichen Bandparametern. Dies wird nun in den anschließenden Abschnitten ausführlich erläutert.

4.2 Der Monte–Carlo–Algorithmus

Die Bewegung der Teilchen setzt sich entsprechend der semiklassischen Transporttheorie aus sich abwechselnden freien Flügen und instantanen Stößen zusammen. Während des freien Fluges unterliegt das Teilchen im Phasenraum gemäß den Bewegungsgleichungen einer kontinuierlichen Bewegung. Der Streuprozess hingegen führt zu einer abrupten Änderung des Quasiimpulses. Die Dauer des freien Fluges t_f bestimmt die MC–Methode (siehe [52] und Zitate darin). Für den Quasiimpuls eines Teilchens führt die Integration der Bewegungsgleichung im Impulsraum zu

$$\hbar\vec{k}(t) = \hbar\vec{k}(t_0) + \int_{t_0}^t \vec{F}(\vec{r}(\tau))d\tau \quad (4.1)$$

und analog dazu gilt für die Ortskoordinate:

$$\vec{r}(t) = \vec{r}(t_0) + \int_{t_0}^t \vec{v}_b(\vec{k}(\tau))d\tau \quad (4.2)$$

Diese Gleichungen sind über $\vec{v}_b(\vec{k})$ und $\vec{F}(\vec{r})$ stark gekoppelt. Des weiteren ist $\vec{v}_b(\vec{k})$ unstetig in der Brillouinzone für die gewählte FB–Diskretisierung. Zusammengefaßt bedeutet dies, daß die Integrale 4.1 und 4.2 nicht für jeden beliebigen Zeitpunkt t geschlossen lösbar sind. Um dieses Problem zu umgehen, wird für den Monte–Carlo–Algorithmus folgender Ansatz gemacht. Man betrachtet zunächst ein beschränktes Gebiet im Phasenraum, für das gilt:

- $\vec{v}_b(\vec{k}) = \textit{konstant}$
- $\vec{F}(\vec{r}) = \textit{konstant}$

Gleichung 4.1 und 4.2 lauten dann:

$$\hbar\vec{k}(t) = \hbar\vec{k}(t_0) + \vec{F} \cdot (t - t_0) \quad (4.3)$$

$$\vec{r}(t) = \vec{r}(t_0) + \vec{v}_b \cdot (t - t_0) \quad (4.4)$$

Diese Gleichungen sind nun zum einen nicht mehr gekoppelt und zum anderen existiert eine eindeutige Umkehrung. D.h. zu jedem Ort \vec{r} oder \vec{k} kann die benötigte Flugzeit $t = t_f$ berechnet werden.

Die Bestimmung eines Phasenraumelementes mit konstanten Parametern ist für die FB–MC–Methode durch die Wahl der BZ–Diskretisierung sehr einfach möglich. Nach Kapitel 2.1 ist innerhalb eines Tetraeders $v_b = \textit{konstant}$. Somit stellt ein Tetraeder für Gleichung 4.3 die Begrenzung dar. Als Ortsgebiet mit konstanter Kraft \vec{F} wählt man nun die einzelnen Quadranten. Durch den folgenden Ansatz erzielt man, daß die Bedingung $\vec{F} = \textit{konstant}$ erfüllt ist. Die Kraft auf Teilchen in Heteromaterialien lautet zunächst allgemein:

$$\vec{F}(\vec{r}) = q(\vec{E}(\vec{r}) + \vec{v}_b \times \vec{B}(\vec{r})) + \vec{F}_{chem}(\vec{r}) \quad (4.5)$$

$$\text{mit } \vec{F}_{chem}(\vec{r}) = -\nabla_{\vec{r}}\epsilon(\vec{r}, \vec{k}) \quad (4.6)$$

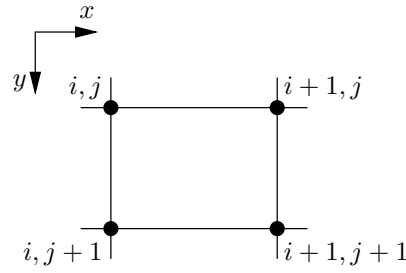


Abbildung 4.1: Zur Indizierung der Quadrantengrößen

Hierin tritt die sogenannte „chemische Kraft“ \vec{F}_{chem} nur in Heteromaterialien mit ortsabhängiger Bandstruktur auf, z. B. aufgrund eines ortsabhängigen Germaniumgehaltes. Die chemische Zusammensetzung des Kristalls ist in diesem Fall die Ursache der Kraft. Damit in jedem Ortsraumquadranten die Summe aller Kräfte konstant ist, wird \vec{F}_{chem} auf folgende Weise modelliert:

- Der Germaniumgehalt im Quadranten ist konstant. Damit gilt: $\vec{F}_{chem} = 0$. Allerdings führt dies zu unterschiedlichen Parametern der Bandstruktur an Quadrantengrenzen. Eine Beschreibung dieser Heteroübergänge folgt in Kapitel 4.3.

Des Weiteren berechnet sich das elektrische Feld im Quadranten Ω_{ij} über die aus der PG resultierenden Kantengrößen des elektrischen Feldes. Mit der Definition (vergl. Abbildung 4.1)

$$E_{\Omega_{ij}} = \begin{pmatrix} E_{\Omega_{ij}}^x \\ E_{\Omega_{ij}}^y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \cdot (E_{ij \rightarrow i+1,j} + E_{i,j+1 \rightarrow i+1,j+1}) \\ \frac{1}{2} \cdot (E_{ij \rightarrow i,j+1} + E_{i+1,j \rightarrow i+1,j+1}) \end{pmatrix} \quad (4.7)$$

ist das elektrische Feld im kompletten Quadranten Ω_{ij} konstant. Insgesamt gilt nun für die Kraft auf ein Testteilchen innerhalb eines Quadranten mit Vernachlässigung des magnetischen Feldes \vec{B} :

$$\vec{F}(\vec{r}) = q\vec{E}_{\Omega_{ij}} = \textit{konstant} \quad (4.8)$$

Dadurch sind die Gleichungen 4.3 und 4.4 nun gültig für ein Teilchen im Quadrant Ω_{ij} (Ortsraum) und Tetraeder tet_n im \vec{k} -Raum. Die Flugzeit zum Erreichen der Tetraedergrenze t_{tet} , die Zeit zum Erreichen der Quadrantengrenze t_{Ω} und die Zeit bis zum nächsten Stoß t_{stoB} geben nun die Obergrenze der freien Flugzeit t_f an:

$$t_f = \text{Min}\{t_{tet}, t_{\Omega}, t_{stoB}\} \quad (4.9)$$

Danach wird entweder

- der Tetraeder gewechselt. Dabei muß die Gruppengeschwindigkeit aktualisiert werden.
- der Quadrant gewechselt. Danach müssen das elektrische Feld und die Bandparameter aktualisiert werden.

- ein Streuprozeß ausgeführt. Dieser wird durch die MC-Methode stochastisch ausgewählt, ebenso der Nachstoßzustand. Dies ist üblicherweise mit einem Tetraederwechsel verbunden, die Ortskoordinate bleibt unverändert.

Die Bestimmung des Nachstoßzustandes gehört zu den aufwendigsten Algorithmen in der FB-MC Simulation. Zunächst bestimmt der ausgewählte Streuprozeß die Endenergie, das Endband und den irreduziblen Bereich, der den Endtetraeder enthalten soll. Die Wahrscheinlichkeit eines Tetraeders, als Endtetraeder ausgewählt zu werden, hängt von der Größe der Äquienenergiefläche (siehe Abb. 2.6) zur Endenergie ϵ ab. Tetraeder, die diese Energie nicht enthalten, stehen folglich nicht zur Auswahl. Am Anfang einer Simulation werden aller Tetraeder in einer Liste bestimmten Energieintervallen zugeordnet. Diese Liste erlaubt dann einen schnellen Zugriff auf alle Tetraeder, die die Endenergie ϵ enthalten. Aus diesen Tetraedern wird mit Hilfe der *Acceptance-Rejection*-Methode [53] dann der Endtetraeder bestimmt. Dazu muß die Äquienenergiefläche durch eine Obergrenze abgeschätzt werden. Diese Abschätzung erfolgt wiederum energieabhängig, um die Effektivität des Algorithmus zu erhöhen [19]. Schließlich muß auf der Äquienenergiefläche im Endtetraeder der Nachstoßzustand \vec{k} bestimmt werden. Die Äquienenergiefläche ist entweder ein Dreieck oder ein Viereck, welches sich wieder durch zwei Dreiecke aufspalten läßt. Im letzteren Fall wird zunächst eines der Dreiecke aufgrund der zugehörigen Flächen mit der direkten Methode stochastisch ausgewählt. Im endgültigen Dreieck seien \vec{a} , \vec{b} und \vec{c} die Eckpunkte. Dann bestimmt sich der Nachstoßzustand mit Hilfe der gleichverteilten Zufallszahlen r_1, r_2 wie folgt:

$$\vec{k} = \vec{a} + \lambda_1(\vec{b} - \vec{a}) + \lambda_2(\vec{c} - \vec{a}) \quad (4.10)$$

mit

$$\lambda_1 = 1 - \sqrt{1 - r_1} \quad (4.11)$$

$$\lambda_2 = r_2(1 - \lambda_1) \quad (4.12)$$

Weitere Details zur Bestimmung des Nachstoßzustandes findet man in [51].

Zur Veranschaulichung ist dieses Vorgehen des gesamten Monte-Carlo-Algorithmus in Abbildung 4.2 gezeigt. Nachdem nun alle Teilchen entsprechend dem MC-Algorithmus propagiert wurden, erhält man in der Summe die Verteilungsfunktion $f_b(\vec{r}, \vec{k}, t+T)$, welche wiederum zu diesem Zeitpunkt eine Lösung der BTG darstellt [54].

4.3 Heteroübergänge zwischen zwei Quadranten mit unterschiedlichem Germaniumgehalt

Die Auflösung beliebiger Germaniumprofile im FB-MC-Bauelementsimulator bedingt eine gleichzeitige Verwendung mehrerer Bandstrukturen zur Modellierung der Bauelementstruktur eines HBTs. Dies führt zu benachbarten Quadranten mit unterschiedlichem Germaniumgehalt und somit zu einer Grenzfläche mit unstetiger Bandstrukturbeschreibung. Dieses Problem ist vergleichbar mit der Behandlung der *Si/SiO₂*-Grenzfläche, da dort ebenfalls ein Heteroübergang zwischen zwei unterschiedlichen Bandstrukturen vorliegt. Für die Zustandsgrößen \vec{k} und $\epsilon_b(\vec{r}, \vec{k})$ gilt daher [6]:

- Es gilt Energieerhaltung beim Übergang eines Teilchens durch die Hetero-Grenzfläche: $\epsilon_b(\vec{k}_{ij}, y_{j+1}) = \epsilon_b(\vec{k}_{i,j+1}, y_{j+1})$.

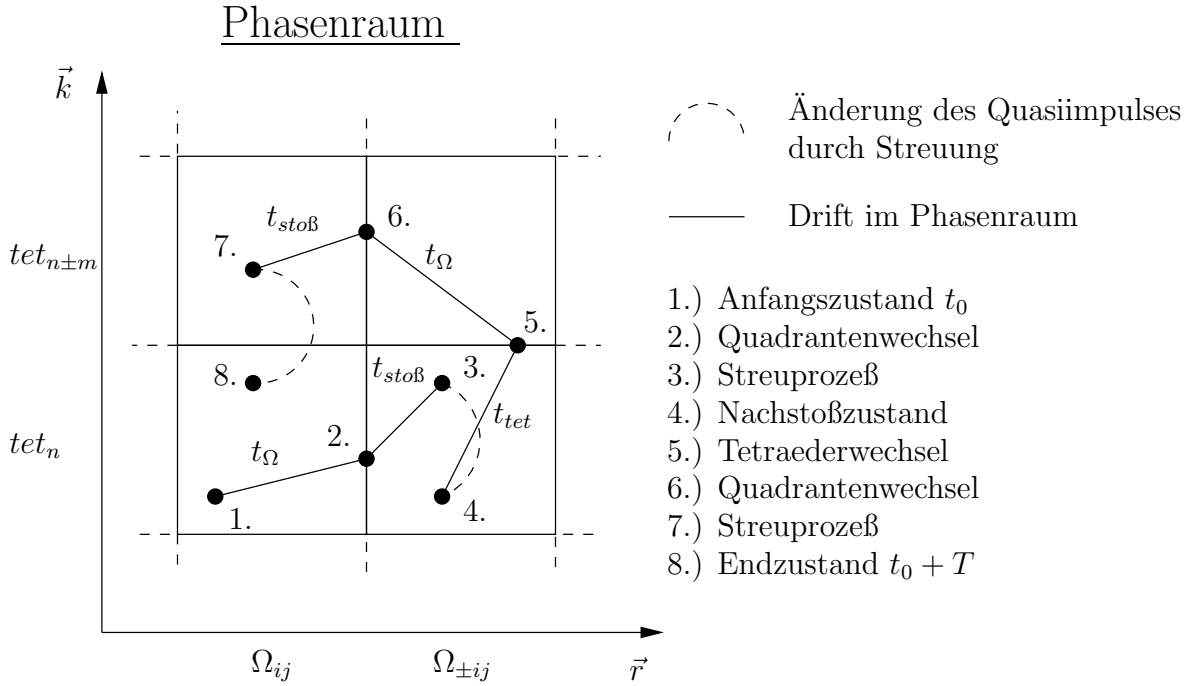


Abbildung 4.2: Monte-Carlo-Algorithmus für die Propagation eines Teilchens vom Zeitpunkt t_0 zum Zeitpunkt $t_0 + T$, T ergibt sich durch die Addition der jeweiligen freien Flugzeit t_{tet} , t_{Ω} und $t_{sto\beta}$.

- Es findet kein Bandwechsel statt.
- Der Tangentialimpuls bleibt erhalten: $\vec{k}^{\parallel} = \text{konstant}$. Für das Beispiel in Abbildung 4.3 a) sind es die parallelen Komponenten k_x und k_z , die den Tangentialimpuls bilden.
- Die Longitudinalkomponente von \vec{k} ändert sich: $k_{ij}^{\perp} \neq k_{i,j+1}^{\perp}$. Für das Beispiel in Abbildung 4.3 ändert sich also die Komponente k_y senkrecht zur Hetero-Grenzfläche.

Bei anwachsender Bandkante von Quadrant Ω_{ij} nach $\Omega_{i,j+1}$ (siehe Abbildung 4.3 a)) ist die Erfüllung der Energieerhaltung überhaupt nur möglich wenn gilt: $\epsilon^{vor} > \Delta E_{c,v}$. Eine Teilchenbewegung von Quadrant Ω_{ij} nach $\Omega_{i,j+1}$ wird dabei angenommen. Andererseits wird das Teilchen reflektiert und es findet kein Quadrantenwechsel statt. Die Suche eines passenden Endzustandes für $\epsilon^{vor} > \Delta E_{c,v}$ beginnt wie folgt:

- Das Teilchen wird mit seinem alten \vec{k} -Vektor in die neue Bandstruktur $\epsilon_{i,j+1}$ gesetzt (Index 1 in Abb. 4.3 b). Aufgrund der gemeinsamen Diskretisierung aller Bandstrukturen geschieht dies ohne Tetraederwechsel. Bei ungleicher Diskretisierung wäre an dieser Stelle ein sehr rechenzeitintensiver Algorithmus zur Bestimmung des gültigen Tetraeders im irregulären Gitter notwendig.
- Die zugehörige Energie ϵ^{hilf} erfüllt nicht die Energieerhaltung (Index 2 in Abb. 4.3 b)). Es wird nun die Longitudinalkomponente des Impulsvektors \vec{k}^{\perp} , hier k_y , solange sukzessive mit den notwendigen Tetraederwechseln geändert bis gilt: $\epsilon^{vor} = \epsilon^{nach}$ (Index 3 in Abb. 4.3 b)).

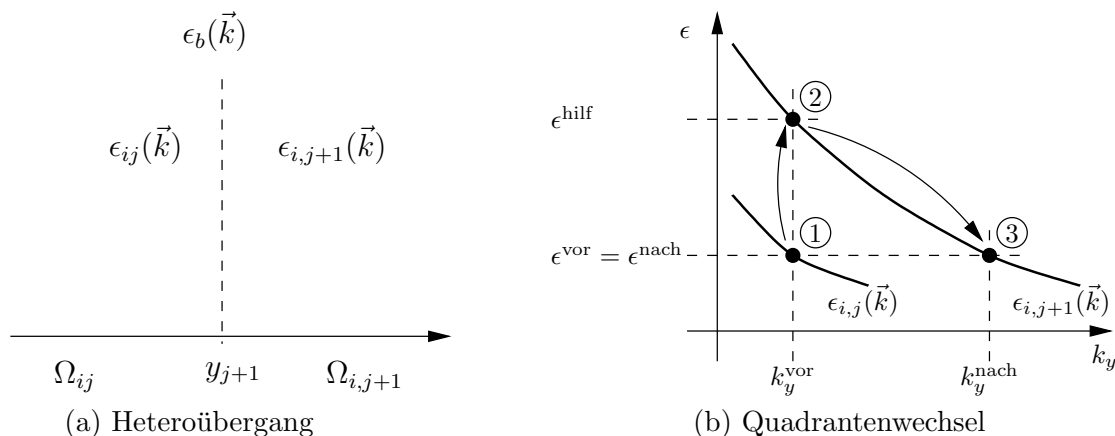


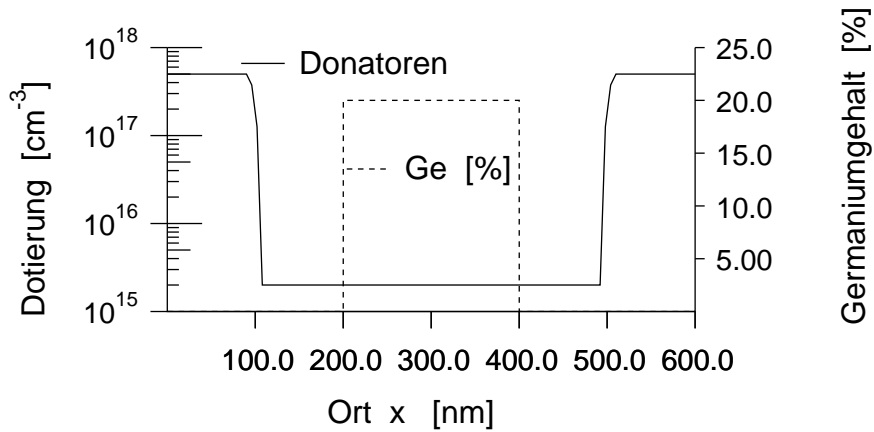
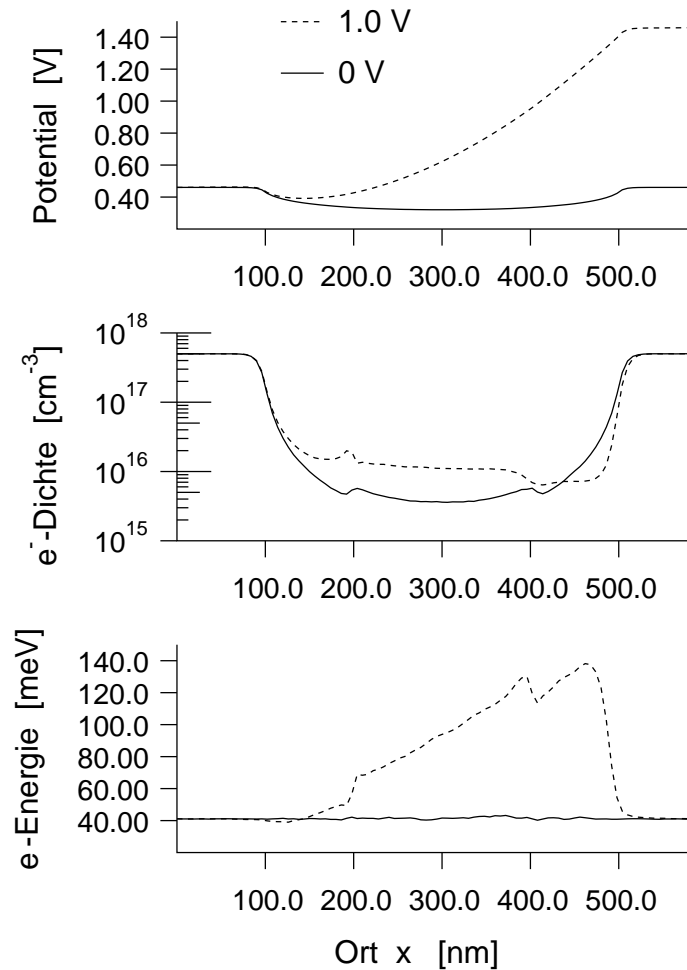
Abbildung 4.3: a) Grenzbedingung für Energie und Impuls bei un stetigen Bandparametern, b) Bestimmung der Longitudinalkomponente beim Wechsel von Bandstruktur ϵ_{ij} nach $\epsilon_{i,j+1}$.

- Der maximale Suchabstand beträgt $4\pi/a_0$. Dies entspricht einem kompletten Durchlauf durch die BZ.
- Ein gültiger Zustand muß neben der Energieerhaltung auch eine Geschwindigkeitskomponente in Richtung des neuen Quadranten $\Omega_{i,j+1}$ besitzen.
- Kann kein gültiger Endzustand gefunden werden, bricht der Algorithmus ab und das Teilchen wird an der Grenzfläche reflektiert. Andernfalls setzt sich die Propagation des Teilchens im neuen Quadranten und in neuer Bandstruktur fort. Eine Reflexion ist immer möglich, da alle Bandstrukturen symmetrisch bezüglich der drei Hauptebenen sind. Eine Umkehr der Geschwindigkeitskomponente bei gleichzeitiger Energieerhaltung ist dadurch immer durchführbar. Der endgültige Endzustand ergibt sich jedoch wieder aus einem Stoßprozeß und ist nicht in jedem Fall symmetrisch zum Ausgangszustand.

Aufgrund der meist geringen Energieunterschiede der Bandstrukturen wird sehr rasch ein Endzustand gefunden. Dieser Algorithmus ist somit ohne nachteilige Auswirkungen auf die Rechenzeit anwendbar.

Um die Vorgänge an einem Heteroübergang zu veranschaulichen, werden nun Simulationsergebnisse für eine N^+NN^+ -Struktur mit einer SiGe-Schicht der Dicke 200 nm und einem Germaniumgehalt von 20% vorgestellt. Das Dotierungsprofil der Struktur und die Lage der $Si_{0.8}Ge_{0.2}$ -Schicht sind in Abb. 4.4 gezeigt. Ziel ist es, anhand einer einfachen Bauelementstruktur, beispielhaft einen Heteroübergang zwischen unverspanntem Si und verspanntem SiGe zu charakterisieren und die Frage zu klären, inwieweit die Reflexion oder die Transmission an der Grenzfläche überwiegt.

Das Leitungsbandminimum im verspannten SiGe liegt entsprechend der Leitungsband-Offsets um etwa 21 meV unter der Siliziumbandkante. Des weiteren sind aber durch die Verspannung des SiGe-Materials die x-Täler des ersten Leitungsbandes, hier die Täler senkrecht zur Si/SiGe-Grenzfläche, gegenüber den anderen Tälern um etwa 260 meV angehoben. D. h. die sechs äquivalenten Täler des Siliziums liegen zwischen den energetisch verschobenen Tälern des verspannten SiGe. Hier ist zu erwarten, daß z. B. Elektronen

Abbildung 4.4: Dotierung der N^+NN^+ -StrukturAbbildung 4.5: Potential, Elektronendichte und e -Energie der N^+NN^+ -Struktur für 0,0 und 1,0 Volt

aus einem x -Tal im *Si* zwar grundsätzlich ins verspannte *SiGe* übergehen können, aber aufgrund der angehobenen Täler im verspannten *SiGe* nur selten einen gültigen Zustand besetzen können.

	1. Heteroübergang (links) Trans./Refl.		2. Heteroübergang (rechts) Trans./Refl.	
	$Si \rightarrow SiGe$	$Si \leftarrow SiGe$	$SiGe \rightarrow Si$	$SiGe \leftarrow Si$
0,0 V	73%/27%	89%/11%	89%/11%	73%/27%
1,0 V	71%/29%	89%/11%	95%/5%	78%/22%

Tabelle 4.1: Statistik der Transmission und Reflektion am Heteroübergang

In Abbildung 4.5 sind die örtliche Verteilung des Potentials, der Elektronendichte und Elektronenenergie im Gleichgewicht (0,0V) und für eine Kontaktspannung von 1,0V für die N^+NN^+ -Struktur gezeigt. Für den Gleichgewichtsfall sind die Sprünge in der Elektronendichte an den beiden Grenzflächen zu sehen, die durch die Leitungsbandsprünge an den Grenzflächen verursacht werden. Die mittlere Elektronenenergie beträgt entlang der gesamten Bauelementstruktur etwa 41 meV. Im Unterschied zu einer analytischen, parabolischen Bandstrukturbeschreibung, die eine mittlere Energie von $38,5\text{meV} = 3/2k_bT$ ($T = 300\text{K}$) hat, liegt die Gleichgewichtsenergie der vollständigen, nicht parabolischen Bandstruktur etwas über diesem Wert. Bei dieser Energie ist für das verspannte $SiGe$ zu erwarten, daß die x-Täler verschwindend gering besetzt sind. Dies wird durch die Statistik der Talbesetzung der sechs Täler auf den drei Hauptachsen in Abb. 4.6 bestätigt. Im unverspannten Si sind alle Täler gleichverteilt besetzt, wohingegen im verspannten $SiGe$ nur die z- und y-Täler besetzt sind. Des weiteren sind in Tabelle 4.1 die Anteile von Transmission und Reflektion jeweils für den ersten Heteroübergang ($Si|SiGe$) und den zweiten Heteroübergang ($SiGe|Si$) angegeben. Für 0.0 V sind die Werte erwartungsgemäß symmetrisch bezüglich erstem und zweitem Übergang. Beim Übergang von Si nach $SiGe$ allerdings fällt die Transmission mit 73% deutlich niedriger aus als im Vergleich zum Übergang vom $SiGe$ zum Si . Die Ursache dafür ist die verstärkte Reflektion der Elektronen in den x-Tälern.

Bei anliegender Kontaktspannung bewirkt die bevorzugte Drift der Elektronen in x-Richtung aufgrund des treibenden elektrischen Feldes eine vermehrte Besetzung der x-Täler (siehe Abb. 4.6). Dies wiederum führt am ersten Heteroübergang zu einer verstärkten Reflektion, der Prozentsatz der Transmission sinkt demzufolge auf 71%. Dies führt dann zu einer leichten Aufstauung der Elektronen, was in Abbildung 4.5 an der Erhöhung der Elektronendichte an dieser Stelle zu erkennen ist. Am rechten Übergang erhöht sich die Elektronenenergie merklich, wodurch sich der Anteil der Transmission in beide Richtungen erhöht. Insgesamt zeigt sich, daß auch bei diesen „extremen“ Heteroübergängen der gewählte Algorithmus die Transportprozesse adäquat beschreibt.

Die Simulation der homogenen N^+NN^+ -Struktur zeigt weiterhin keinen signifikanten Unterschied in der benötigten Rechnerzeit zum Vergleichsfall ohne SiGe-Schicht, wodurch die Effizienz dieser Modellierung der Heteroübergänge bestätigt wird.

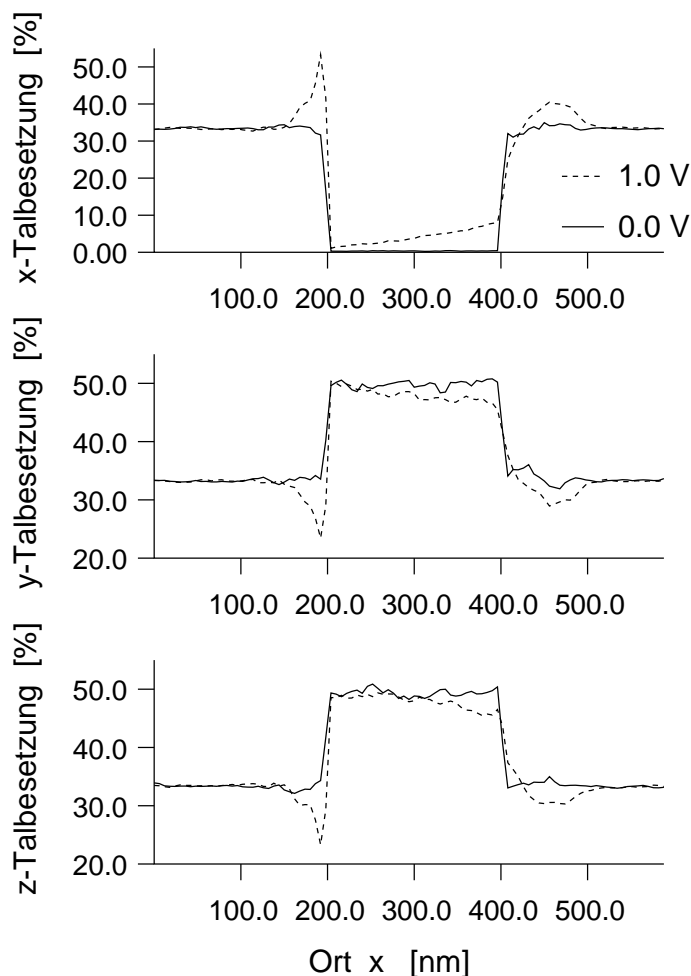


Abbildung 4.6: Relative Besetzungswahrscheinlichkeit der drei Hauptachsen in %

4.4 Vergleichssimulationen einer HBT-Struktur: Analytisch gegenüber Full-Band-Monte-Carlo

Nachdem nun die neue FB-MC-Methode einschließlich des Monte-Carlo-Algorithmus ausführlich vorgestellt wurde, wird nun anhand von Simulationen einer HBT-Struktur aus dem Abschlußbericht [5] ein Vergleich des analytischen Monte-Carlo Bauelementsimulators mit den Ergebnissen des FB-MC-Simulators durchgeführt. Ziel ist es, den neuen Simulator mit Hilfe des alten Simulators zu überprüfen und die Ergebnisse zu verifizieren. Das hierzu betrachtete Bauelement ist in Abbildung 4.7 gezeigt.

Die Kontaktspannungen des Arbeitspunktes sind $U_{CE} = 1.0\text{ V}$ und $U_{BE} = 0.75\text{ V}$. In Abbildung 4.9 sind die Ergebnisse der Simulation für Schnitte durch das Bauelement bei $y = 435\text{ nm}$ gezeigt. Man erkennt, daß beide Simulationen bezüglich des Potentials, der Elektronendichte, der Elektronendriftgeschwindigkeit und der Elektronentemperatur sehr gut übereinstimmen. Insgesamt zeigt dies deutlich, daß der neue FB-MC-Simulator den alten auf analytischen, nichtparabolischen Bandstrukturen beruhenden Simulator voll ersetzen kann. Größere Unterschiede zwischen beiden Simulatoren ergeben sich erst bei höheren Basisspannungen, da die Ladungsträger sich dann stärker aufheizen. Hier liefert dann der FB-MC-Simulator die genaueren Ergebnisse. Betrachtet man die benötigten CPU-Zeiten der beiden Simulationsarten in Tabelle 4.2, so erkennt man, daß der

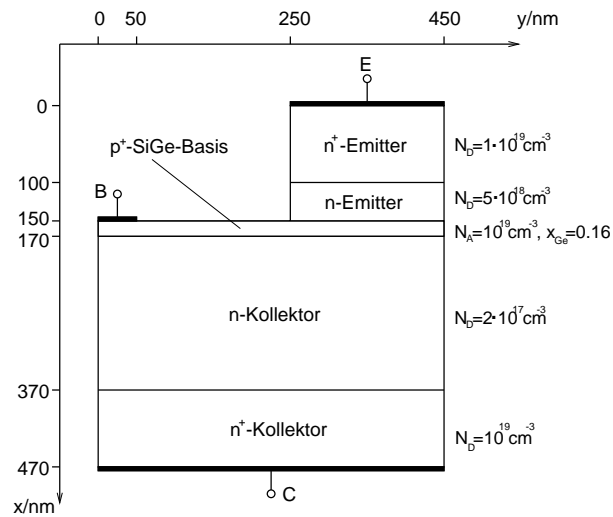


Abbildung 4.7: Aufbau des simulierten HBTs

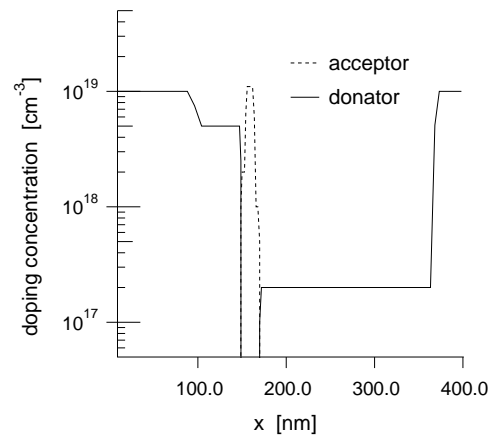


Abbildung 4.8: Dotierungsprofil der HBT-Struktur

Geschwindigkeitsvorteil der analytischen Simulation mit etwa 10% unbedeutend ist im Vergleich zu den Vorteilen, die die FB-MC-Methode bietet.

	CPU-Zeit	$I_C [A/cm]$	Testteilchen	Zeitintervall
FB-MC	16 h	0.25	150.000	5 ps
analyt. MC	14 h	0.28	150.000	5 ps

Tabelle 4.2: Aufgewendete Rechenzeit für die vorgegebene Anzahl von Testteilchen und geforderte Dauer der Simulationseinheit

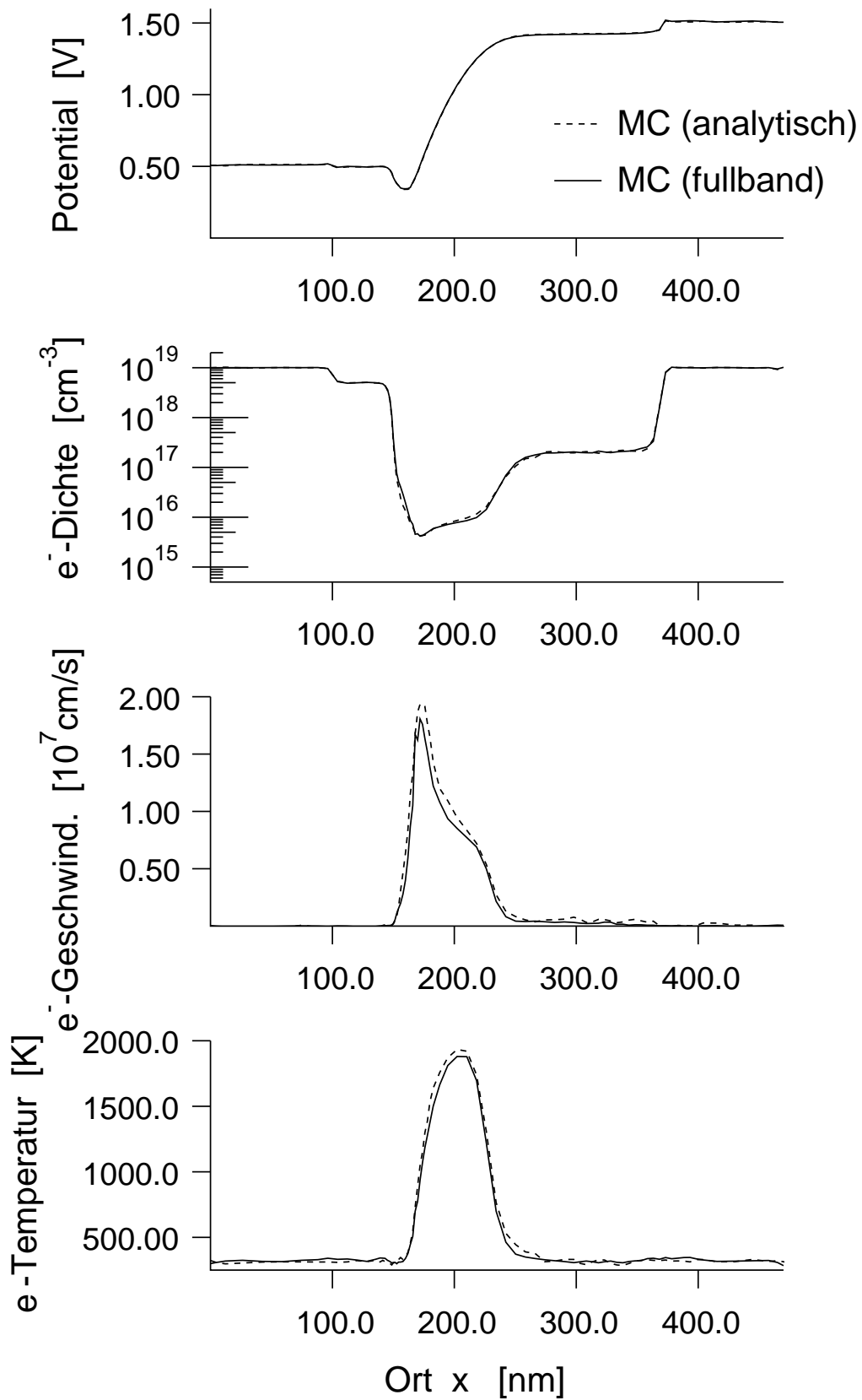


Abbildung 4.9: Potential, Elektronendichte, -geschwindigkeit und -temperatur des HBTs bei $U_{CB} = 1.0\text{ V}$, $U_{BE} = 0.75\text{ V}$.

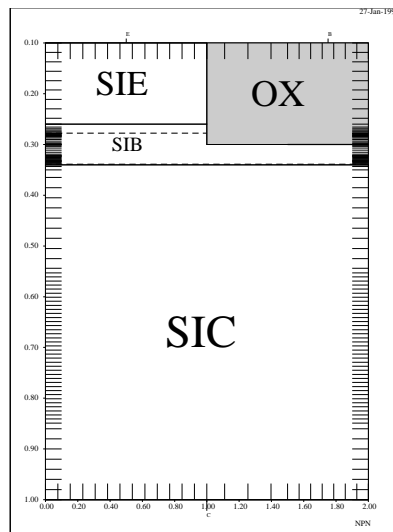


Abbildung 4.10: Simulationsgitter der HBT-Struktur

4.5 Vergleichssimulationen einer HBT-Struktur: Full-Band-Monte-Carlo gegenüber Hydrodynamik

Zur Simulation von Heterobipolartransistoren mit dem hydrodynamischen Simulator *Galene III* wird ein Tabellenmodell benutzt, in dem die Transportparameter des verallgemeinerten hydrodynamischen Modells [55] in Abhängigkeit von Dotierung und Germaniumgehalt in Form von Tabellen parametrisiert sind. Diese Transportparameter basierten zunächst auf den Monte-Carlo-Simulationen mit analytischer Bandstrukturbeschreibung. Mit dem Übergang vom analytischen zum FB-MC-Simulator im Rahmen dieses Projektes wurden diese Parameter nun durch Simulationsergebnisse des FB-MC-Simulators ersetzt. Das erreichte Ziel ist nun eine vollständige Konsistenz der Beweglichkeitsdaten zwischen der FB-MC-Simulationsmethode und den hydrodynamischen Simulationen (HD). Zur Verifikation der neuen Transportparameter wurde eine HBT-Struktur, die in Zusammenarbeit mit dem Projektpartner TEMIC, Heilbronn erarbeitet wurde, untersucht. Verglichen werden die Ergebnisse jeweils mit HD-Simulationen basierend auf den neuen (FB-MC) und alten (analyt.) Transportparametern. Diese werden mit HD (alt) und HD (neu) bezeichnet.

In Abbildung 4.11 ist das Dotierungsprofil des HBTs, welches an SIMS-Messungen des Projektpartners angepaßt wurde, gezeigt. Die maximale Akzeptordotierung in der Basis ist $3 \cdot 10^{19} \text{cm}^{-3}$. Im Emitter- und Kollektorgebiet wurde die Maximaldonatordotierung im Bauelement von $1 \cdot 10^{20} \text{cm}^{-3}$ auf $1 \cdot 10^{19} \text{cm}^{-3}$ herabgesetzt, um während der Simulation die unerwünschte Aufheizung des Teilchengases durch künstliche Plasmaschwingungen zu verhindern. Es wurden hierzu HD-Simulationen durchgeführt, die zeigen, daß dieses Vorgehen auf die relevanten Simulationsergebnisse keinen Einfluß hat.

Das trapezförmige Germaniumprofil ist in Abbildung 4.12 gezeigt. Der maximale Germaniumgehalt in der Basis beträgt 23%. Im Falle der FB-MC-Simulationen wird das Profil mit fünf Bandstrukturen unterschiedlichen Germaniumgehalts angenähert. Mit der Bandstruktur für reines Siliziumgebiet ergeben sich sechs verwendete Bandstrukturen. Für jede Bandstruktur werden um die 70 MByte Arbeitsspeicher benötigt. Der Gesamtbedarf in diesem Beispiel sind somit 420 Mbyte. Begrenzt ist die Anzahl der ver-

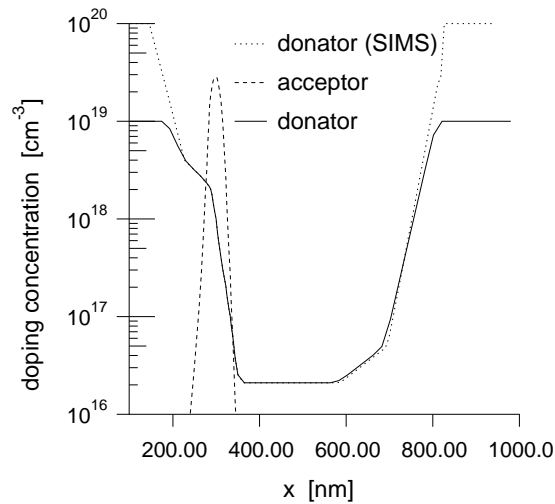


Abbildung 4.11: Dotierungsprofil der HBT-Struktur

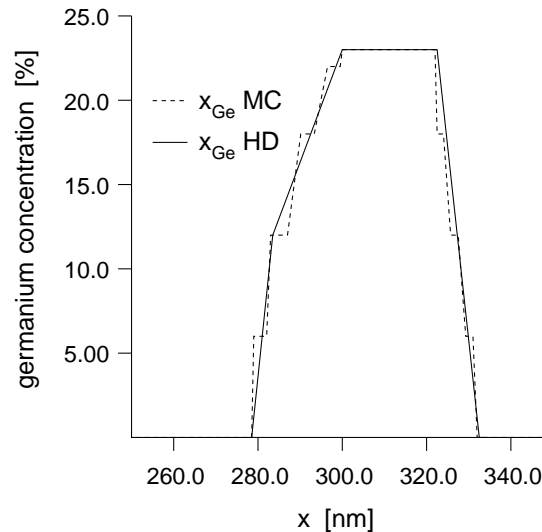


Abbildung 4.12: Germaniumprofil in der Basis der HBT-Struktur

wendeten Bandstrukturen nur durch das Gesamtangebot von Arbeitsspeicher, und nicht durch das Programm selbst. Somit lassen sich beliebige Germaniumprofile hinreichend genau mit verschiedenen Bandstrukturen annähern. Ein weiterer großer Vorteil ist, daß bei Verwendung mehrerer Bandstrukturen im Vergleich zur Verwendung von nur einer kein Rechenzeitnachteil zu beobachten ist.

In Abbildung 4.14 sind die Simulationsergebnisse der beiden unterschiedlichen HD Simulationen und der FB-MC-Simulationen zusammengefaßt. Es wurde der Arbeitspunkt $U_{BE} = 0.75V$ bei $U_{CB} = 2.0V$ untersucht. Es sind das Potential, Elektronendichte, Elektronendriftgeschwindigkeit und dynamische Elektronentemperatur T^* gezeigt. Die elektrischen Potentiale der FB-MC und beider HD-Simulationen sind so gut wie identisch. Die Elektronendichten zeigen eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den neuen HD- und FB-MC-Simulationen, besonders in der Basis und den Raumladungszonen, die für transiente Simulationen von Bedeutung sind. Ebenfalls gute Übereinstimmung zeigt die Elek-

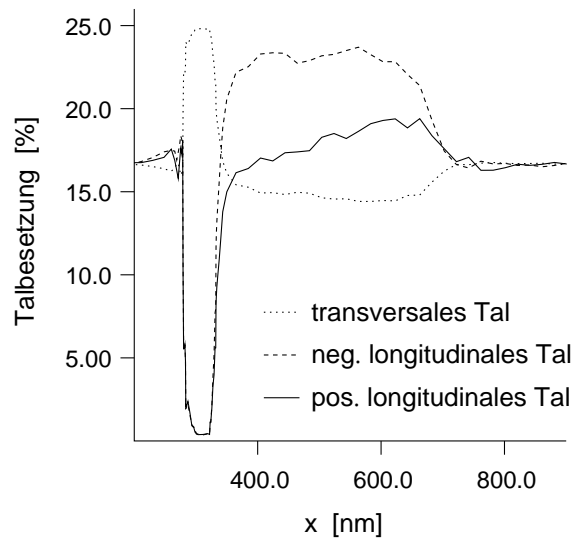


Abbildung 4.13: Relative Besetzungswahrscheinlichkeit der transversalen und longitudinalen Bandstrukturtälern in %

tronendriftgeschwindigkeit, wobei beide Simulationsarten einen deutlichen *velocity overshoot* am Basis-Kollektorübergang zeigen. Am Verlauf der Elektronentemperatur erkennt man verstärkt den Unterschied zwischen alten und neuen HD-Simulationen. Die geringe Abweichung der MC-Elektronentemperatur von der entsprechenden HD-Temperatur in der Basis hat ihre Ursache in der stark unterschiedlichen Ladungsgewichtung von Elektronen und Löchern und kann durch erhöhten MC-Simulationsaufwand noch verringert werden.

Zusammenfassend kann man sagen, daß durch diese Ergebnisse erneut die Leistungsfähigkeit des neuen FB-MC-Simulators unter Beweis gestellt wurde und mit der konsistenten Datenbasis der Transportparameter in *Galene III* eine sehr gute Übereinstimmung zwischen HD- und FB-MC-Simulationen erreicht wird, die kaum noch zu verbessern ist.

Ein großer Vorteil der FB-MC-Methode ist die Möglichkeit, physikalische Feinheiten auf mikroskopischer Ebene darzustellen und somit unter Umständen makroskopische Eigenschaften zu erklären. In Abbildung 4.13 ist zum Beispiel solch ein Detail der FB-MC-Simulation zu sehen. Dies ist die relative Talbesetzung der Elektronentäler. Unterschieden wird hierbei zwischen transversalen und longitudinalen Tälern. Durch die biaxiale Druckspannung in der Basis werden die zwei Täler in Wachstumsrichtung (d.h. in Richtung senkrecht zur *SiGe/Si*-Grenzfläche) energetisch angehoben (siehe Abbildung 2.7). Diese beiden Täler sind die positiv und negativ longitudinalen Täler und entsprechen für das Koordinatensystem in Abbildung 4.10 der *x*-Richtung. Im Emittorgebiet sind die Elektronen nahezu im thermodynamischen Gleichgewicht und so sind dann im Silizium alle Täler gleichförmig besetzt. Beim Eintritt in die Basis werden nun aufgrund der geringen Energie die energetisch angehobenen longitudinalen Täler nicht besetzt, und somit befinden sich alle Elektronen in den transversalen Tälern. In der Kollektorregion werden nun wieder alle Täler besetzt, wobei das hohe elektrische Feld für eine vermehrte Besetzung der longitudinalen Täler führt. In der Nähe des Kollektorkontaktes stellt sich für die Elektronen wieder das thermodynamische Gleichgewicht ein, und alle Täler sollten wieder gleichbesetzt sein.

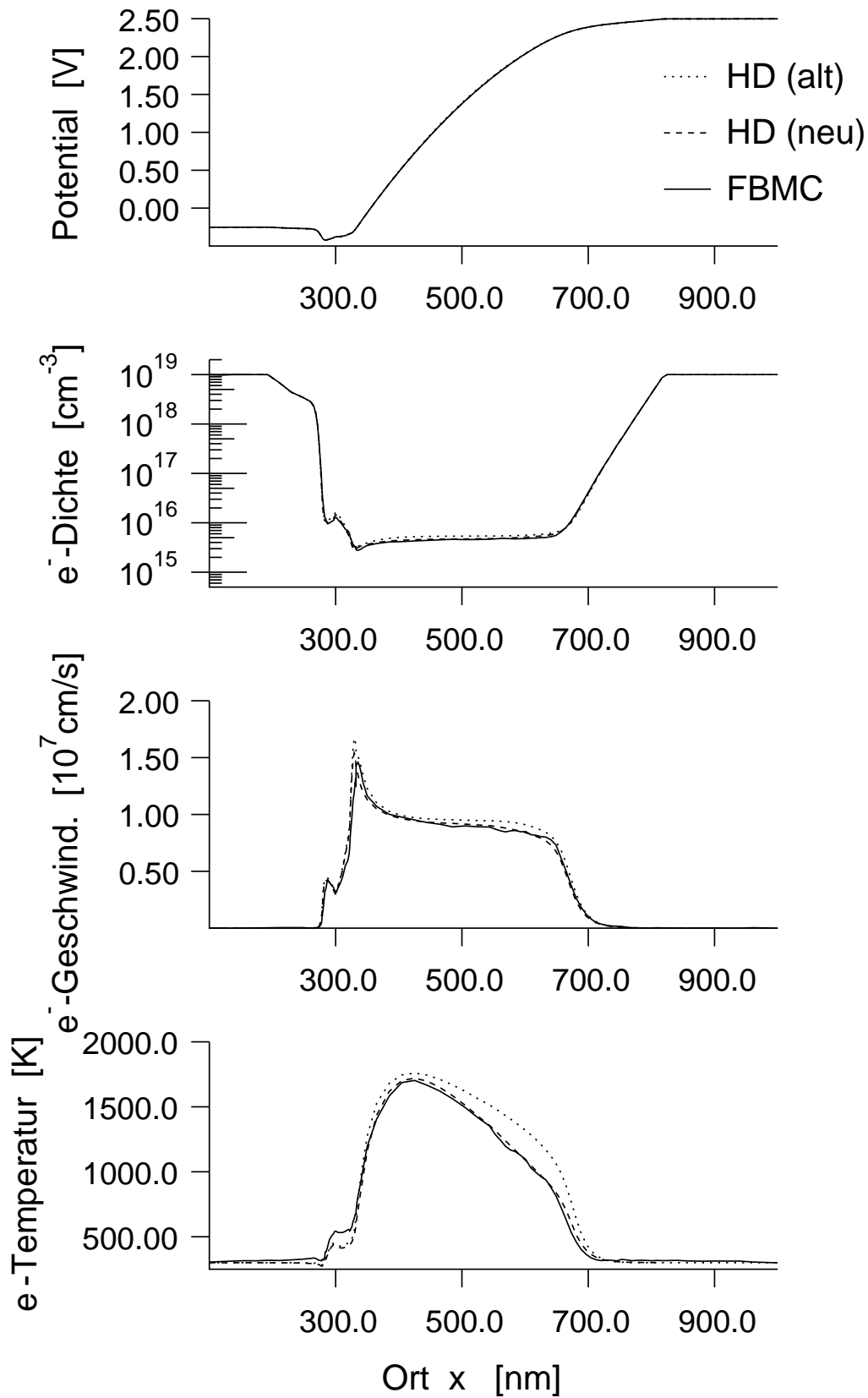


Abbildung 4.14: Potential, Elektronendichte, -geschwindigkeit und -temperatur des HBTs bei $U_{CB} = 2.0$ V, $U_{BE} = 0.75$ V.

4.6 Effizientes 1D–Monte–Carlo–Modell eines HBTs

In diesem Abschnitt wird ein effizientes eindimensionales Monte–Carlo Modell des HBTs aus Abschnitt 4.5 vorgestellt. Das wesentliche Ziel der anschließend gezeigten FB–MC Simulationen war die zuverlässige Bestimmung des Kollektorstromes, da hiermit erst die Bestimmung zweier wichtiger Bauelementgrößen möglich wird. Dies sind die EARLY–Spannung V_A und die Transitfrequenz f_T eines HBTs.

Die Simulation des Kollektorstromes läßt sich sehr gut mit Hilfe einer eindimensionalen Bauelementstruktur durchführen, solange die angelegten Spannungen nicht im Bereich der Hochinjektion des HBTs liegen. Hierdurch lassen sich die erforderlichen CPU–Zeiten deutlich reduzieren. Eine Berechnung des Basisstromes ist dadurch allerdings nicht mehr möglich. Der Einfluß der Löcher wird bei diesen 1D–Simulationen durch die Lösung der nichtlinearen Poisson–Gleichung mit einem zeitlich für die Simulation konstanten Quasi–Fermi–Niveau der Löcher berücksichtigt, welches ortsabhängig mit einem konsistenten Drift–Diffusions–Modell berechnet wird.

Grundsätzlich sind die Simulationsergebnisse der Monte–Carlo–Simulationsmethode rauschbehaftet, also auch die Kontaktströme. Das Ziel, die Bestimmung der Kontaktströme mit hoher Genauigkeit in angemessener Simulationszeit, erreicht man daher nur mit einer effizienten Stromauswertung, die das Signal/Rausch–Verhältnis optimiert, und einer anschließenden wahrscheinlichkeitstheoretischen Bewertung des Ergebnisses. Die Details zur Stromauswertung und zur sogenannten Konvergenzschätzung werden in diesem Abschnitt vorgestellt.

Zur Berechnung der Transitfrequenz f_T oder der EARLY–Spannung V_A sind jeweils die differentiellen Ableitungen entscheidender Bauelementgrößen notwendig. Für f_T wird die Ableitung der Elektronendichte nach dem Kollektorstrom benötigt. Die vollständige Definition von f_T ist in Kapitel 5 gegeben. Des weiteren wird für V_A die Ableitung des Kollektorstromes nach der Kollektor/Emitterspannung benötigt. Für beide Ableitungen gilt, daß sie in der Monte–Carlo–Simulation durch *Finite Differenzen* gebildet werden. Zur Bestimmung benötigt man also den Kollektorstrom zweier nah aneinanderliegender Arbeitspunkte, einmal von der Eingangskennlinie (f_T) und einmal von der Ausgangskennlinie (V_A). Die numerische Genauigkeit dieser einzelnen Kollektorströme ist also unabdingbar, damit die Differenz nicht durch zu hohe Fehlertoleranzen verfälscht wird.

Die dem eindimensionalen Modell zu Grunde liegende Bauelementstruktur, sowie das Dotierungs– und das Germaniumprofil entsprechen dem HBT aus Abschnitt 4.5 (Abb. 4.10–4.12).

Das hieraus extrahierte eindimensionale Bauelement entspricht von der Struktur her der Struktur des zweidimensionalen Bauelementes entlang der Gitterlinie $y = 0nm$. Das eindimensionale Bauelement wurde mit 195 Gitterpunkten diskretisiert.

Das originale Germaniumprofil wird wiederum im FB–MC Simulator stufenförmig mit sechs Bandstrukturen mit entsprechendem Germaniumgehalt genähert. Das bedeutet dann für alle Gitterzellen, die zu einer Stufe mit konstantem Germaniumgehalt gehören, daß diese bei der Simulation nur eine Bandstruktur benötigen werden. Für alle weiteren germaniumabhängigen Größen, z. B. die Bandkante, gilt aber nach wie vor das originale Germaniumprofil.

Wichtigster Aspekt, hervorgerufen durch den Germaniumgehalt, ist die Änderung der Bandkante im SiGe–HBT. In Abbildung 4.15 sind die entsprechenden Bandoffsets der Leitungs– und Valenzbandkante entlang der x -Koordinate aufgetragen. Die Bandkante

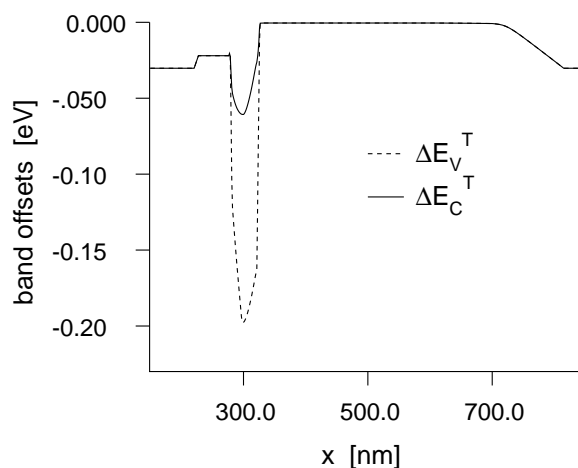
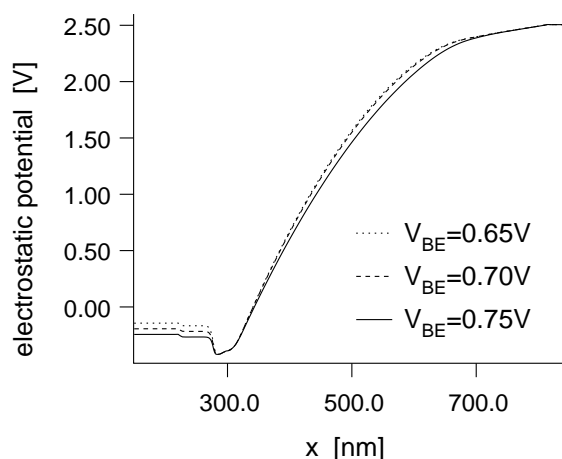


Abbildung 4.15: Bandkantensprung des Leitungs- und Valenzbandes

Abbildung 4.16: Elektrisches Potential für $V_{CB} = 2.0V$ und $V_{BE} = 0.65V, 0.70V, 0.75V$.

wird hierbei für jeden Gitterpunkt in Abhängigkeit von Germaniumgehalt und Dotierung am jeweiligen Gitterpunkt berechnet. Der Germaniumgehalt am Gitterpunkt wird dabei, wie schon erwähnt, durch das Originalgermaniumprofil bestimmt. Dadurch entspricht der Bandkantenverlauf in der Monte-Carlo-Simulation auch dem Bandkantenverlauf, wie er für die Vergleichsimulationen mit dem hydrodynamischen Simulator in Abschnitt 4.4 benutzt wird.

Es folgen nun die Full-Band-Monte-Carlo-Simulationsergebnisse der 1D-Teststruktur des HBTs. Die Simulationen wurden durchgeführt für eine Kollektorspannung $V_C = 2V$ und eine Basisspannung von $V_B = 0V$. Die Emitterspannung variiert zwischen $V_E = -0.75V$ und $V_E = -0.65V$. Die entsprechenden elektrischen Potentiale sind in Abbildung 4.16 gezeigt. Wegen der konstanten Basis-Kollektorspannung bleibt der Spannungsverlauf in der Basis- und Kollektorregion weitgehend unabhängig von der Emitterspannung. Der Spannungsverlauf im Emitter folgt hingegen der angelegten Emitterspannung.

In Abbildung 4.17 sind die simulierten Elektronendichten zu sehen. Für die kleinste Basis/Emitterspannung von $V_{BE} = 0.65V$ fällt die Elektronendichte vom Emitter zur Basis über fünf Größenordnungen ab. Die nahezu unverrauschten Ergebnisse der Dichten sind hierbei **nur** durch die Anwendung der *Multiple-Refresh*-Methode [56] erreichbar,

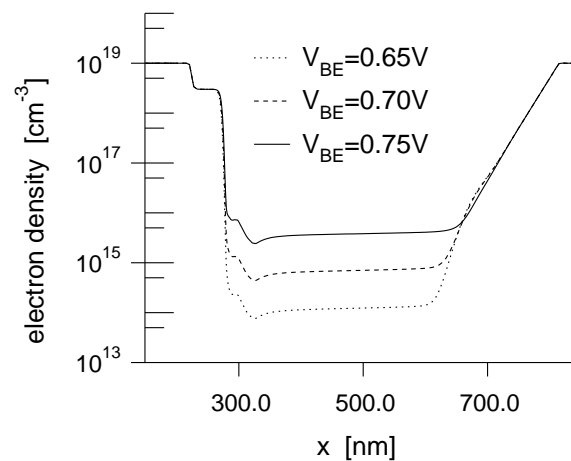


Abbildung 4.17: Elektronendichte für $V_{CB} = 2.0V$ und $V_{BE} = 0.65V, 0.70V, 0.75V$.

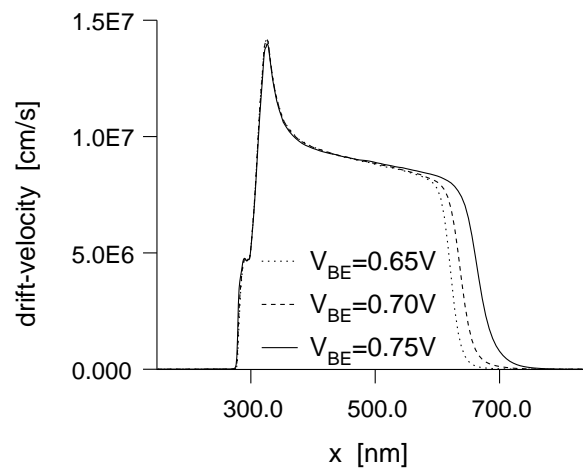


Abbildung 4.18: Driftgeschwindigkeit der Elektronen für $V_{CB} = 2.0V$ und $V_{BE} = 0.65V, 0.70V, 0.75V$.

welche die Besetzung seltener Zustände im Ortsraum sowie im Phasenraum kontrolliert. In diesem Beispiel sind in jedem der 195 Quadranten in etwa 50 Testteilchen vorhanden, außer in den hochdotierten Kontaktzonen, wo deutlich mehr Teilchen benötigt werden, um die künstlichen Plasmaschwingungen zu unterdrücken. Die interessanten Bereiche nahe der Basis sind des weiteren mit einer Strukturbreite von $1nm$ aufgelöst.

Die Driftgeschwindigkeiten in Abbildung 4.18 zeigen im Bereich des Basis/Kollektor-Übergangs einen starken *Velocity-Overshoot*. Vergleicht man hierzu das Maximum der dynamischen Elektronentemperatur in Abbildung 4.19, welches kurz dahinter auftritt, so erkennt man, daß in diesem Bereich der Elektronentransport als quasiballistisch bezeichnet werden kann.

Das Maximum der dynamischen Elektronentemperatur beträgt ungefähr $1800K$. Für die höchste Basis/Emitter-Spannung verringert sich dieses allerdings, da hier aufgrund der erhöhten Raumladung im niedrig dotierten Kollektor das maximale elektrische Feld reduziert wird.

Die Auswertung der Kontaktströme im Monte-Carlo-Bauelementsimulator erfolgt durch zwei unterschiedliche Verfahren. Zum einen ist dies ein Verfahren basierend auf der Ra-

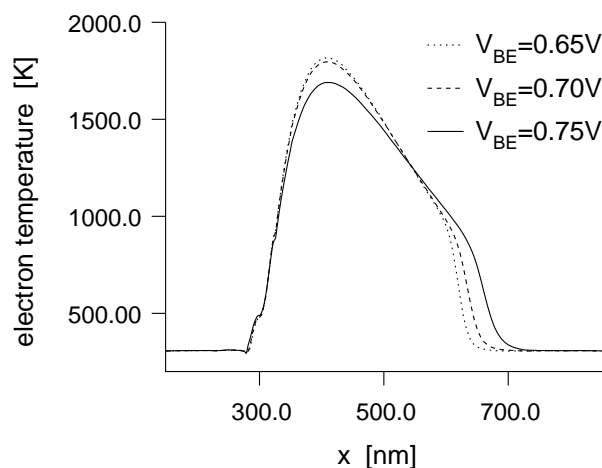


Abbildung 4.19: Dynamische Temperatur der Elektronen für $V_{CB} = 2.0\text{V}$ und $V_{BE} = 0.65\text{V}, 0.70\text{V}, 0.75\text{V}$.

V_{BE} [V]	I_C [$\text{mA}/\mu\text{m}^2$]	
	MC	Exp.
0.65	$1.75 \cdot 10^{-3} \pm 1.1 \cdot 10^{-4}$	$1.890 \cdot 10^{-3}$
0.70	$9.92 \cdot 10^{-3} \pm 2.8 \cdot 10^{-4}$	$1.078 \cdot 10^{-2}$
0.75	$5.449 \cdot 10^{-2} \pm 7.6 \cdot 10^{-4}$	$6.080 \cdot 10^{-2}$

Tabelle 4.3: Vergleich der simulierten und gemessenen Kollektorströme

mo/Shockley–Theorie [57], welches die Auswertung stationärer **und** transienter Kontaktströme ermöglicht. Zum anderen ist dies ein Verfahren nach Yoder et al. [58], welches allerdings nur auf stationäre Simulationen anwendbar ist. Für beide Verfahren wird zunächst speziell für die betrachtete Bauelementstruktur ein Satz von Wichtungsfunktionen ermittelt. Beim Verfahren nach Yoder wird dabei zusätzlich die Kenntnis der Elektronendichte und der Diffusionskonstante benutzt, wodurch sich die Wichtungsfunktionen der beiden Verfahren stark unterscheiden. Für stationäre Simulationen zeigen beide Stromschätzer jedoch die gleiche Effizienz im Rahmen der statistischen Genauigkeit [59].

In Tabelle 4.3 sind nun die simulierten Kollektorströme für die drei verschiedenen Spannungen V_{BE} gezeigt. Der Vergleich mit experimentellen Ergebnissen [60, 49] zeigt eine gute Übereinstimmung bei einer Variation des Stromniveaus von fast zwei Größenordnungen. Die Konvergenzschätzung erfolgt hierbei mit einer Methode zur Auswertung statistischer Simulationsgrößen [53]. Zusammenfassend zeigen die Ergebnisse, daß eine hinreichend genaue Bestimmung des Kollektorstromes sogar bei kleinem Stromniveau durchführbar ist.

Zum Abschluß werden nun die Vorteile der *Multiple-Refresh*-Methode am Beispiel der Energieverteilungsfunktion gezeigt. Hierzu wurde in jeder Gitterzelle der Energiebereich von 0eV bis 3eV in Abschnitte von 50meV eingeteilt, die mit Hilfe des *Multiple Refresh* mit jeweils 8 Testteilchen besetzt werden. Ausnahme bildet der am häufigsten besetzte untere Energieabschnitt, in welchem 50 Testteilchen simuliert wurden.

In Abbildung 4.20 ist nun die Energieverteilungsfunktion entlang der 1D-Teststruktur gezeigt. Der *Multiple Refresh* erlaubt es, hierin in angemessener Zeit zuverlässige Ergeb-

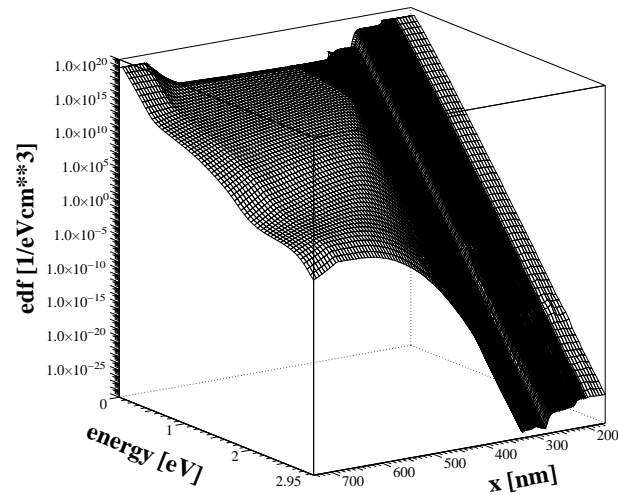


Abbildung 4.20: Energieverteilungsfunktion der Elektronen für $V_{CB} = 2.0V$ und $V_{BE} = 0.75V$.

nisse zu erzielen. Die Energieverteilungsfunktion variiert dabei über 50 Größenordnungen. Im Emitter ($x=200\text{nm}$) erkennt man die typische Boltzmann-Verteilung, wohingegen im Kollektor die Energieverteilungsfunktion sehr stark von der Gleichgewichtsverteilung abweicht.

4.7 Simulation der Generationsrate in einer 1D HBT-Struktur

Um das Bauelementverhalten eines HBTs bei Spannungsrandbedingungen in Nähe der Durchbruchsspannung zu untersuchen, ist die genaue Beschreibung der Effekte heißer Ladungsträger entscheidend. Im FB-MC Bauelementsimulator wird das Hochenergieverhalten der Ladungsträger durch die Bandstruktur, das Phononensystem und durch das Modell der Stoßionisation (siehe Kapitel 2.2.4) bestimmt. In folgenden wird nun eine Methode vorgestellt, die es mit geringem Rechenaufwand ermöglicht, die Generationsrate im Basis-Kollektor-Übergang eines HBTs zu bestimmen. Die verwendete Teststruktur ist die eindimensionale HBT-Struktur aus Abschnitt 4.6. Die FB-MC-Simulationen werden nichtselbstkonsistent (NSC) durchgeführt, d.h. das elektrische Potential wird aus der HD-Simulation übernommen. Des Weiteren werden die Testteilchen entsprechend der Stromdichte der HD-Simulationen in der Basis injiziert. Aufgrund des starken elektrischen Feldes in Richtung Kollektor werden die Testteilchen in Richtung des Kollektors beschleunigt und schließlich vom Kollektorkontakt aufgefangen. Die Möglichkeit, mit Hilfe dieser Methode das Hochenergieverhalten der Testteilchen zu beschreiben, entspricht der Methode in [61]. Diese Methode wird z.B. auch zur NSC-Simulation von Substratströmen in MOSFETs benutzt. In Abbildung 4.21 sind die Simulationsergebnisse der NSC-FB-MC-Simulationen zusammengefaßt. Es wurde der Arbeitspunkt $U_{BE} = 0.75V$ bei steigender Kollektorspannung U_{CB} untersucht. Mit zunehmender Kollektorspannung steigt das elektrische Feld und die Teilchentemperatur nimmt dementsprechend stark zu. Die gute Übereinstimmung der Elektronentemperatur zwischen HD- und NSC-FB-MC-Simulationen verdeutlicht die Fähigkeit des HD-Modells, das Hochenergieverhalten weitgehend korrekt zu beschreiben. Ein Vergleich der Generationsraten wird im Anschluß gezeigt.

In Abbildung 4.22 - 4.24 sind die Generationsraten für die einzelnen Spannungen nochmals detaillierter gezeigt. Im Bereich der maximalen Generationsrate erkennt man die sehr gute Übereinstimmung beider Modelle. Unterschiedlich ist der Anstieg und der Abfall der Generationsraten. Die FB-MC-Kurven steigen früher an und fallen am Ende wieder schneller ab. Der abrupte Einsatz der Generationsraten im Falle der HD Simulationen begründet sich im verwendeten *soft-threshold lucky-electron*-Stoßionisationsmodell [7]. Entscheidend für den Einfluß der Stoßionisation im HBT ist die erzeugte Menge an Ladungsträgern; dies entspricht dem Integral über die Generationsrate und mit der Elementarladung multipliziert. Die entsprechenden Werte sind in Tabelle 4.4 zusammengefaßt. Die NSC-Simulationen wurden mit einer Fehlerabschätzung des durch die Stoßionisation erzeugten Stromes I_{II} durchgeführt. Die Simulationen wurden gestoppt, wenn der Strom I_{II} mit einer Wahrscheinlichkeit von 95% eine Genauigkeit von 3% erreicht hatte. Die Simulationszeiten hierzu sind ebenfalls angegeben. Für die Kollektor-Basis-Spannung $U_{CB} = 7.0V$ beträgt die Simulationszeit z.B. 2.5 CPU-Stunden. Insgesamt steigt I_{II} mit zunehmender Kollektor-Basis-Spannung wie erwartet stark an. Bildet man das Verhältnis zwischen Ergebnissen der HD- und FB-MC-Simulationen, so ergibt sich über den gesamten Bereich von U_{CB} eine gute Übereinstimmung des integrierten Stromes I_{II} mit einer maximalen Abweichung von ungefähr 25%. Dies zeigt, daß auch mit der HD-Simulation eine zuverlässige Beschreibung der Stoßionisation im Si/SiGe-HBT möglich ist.

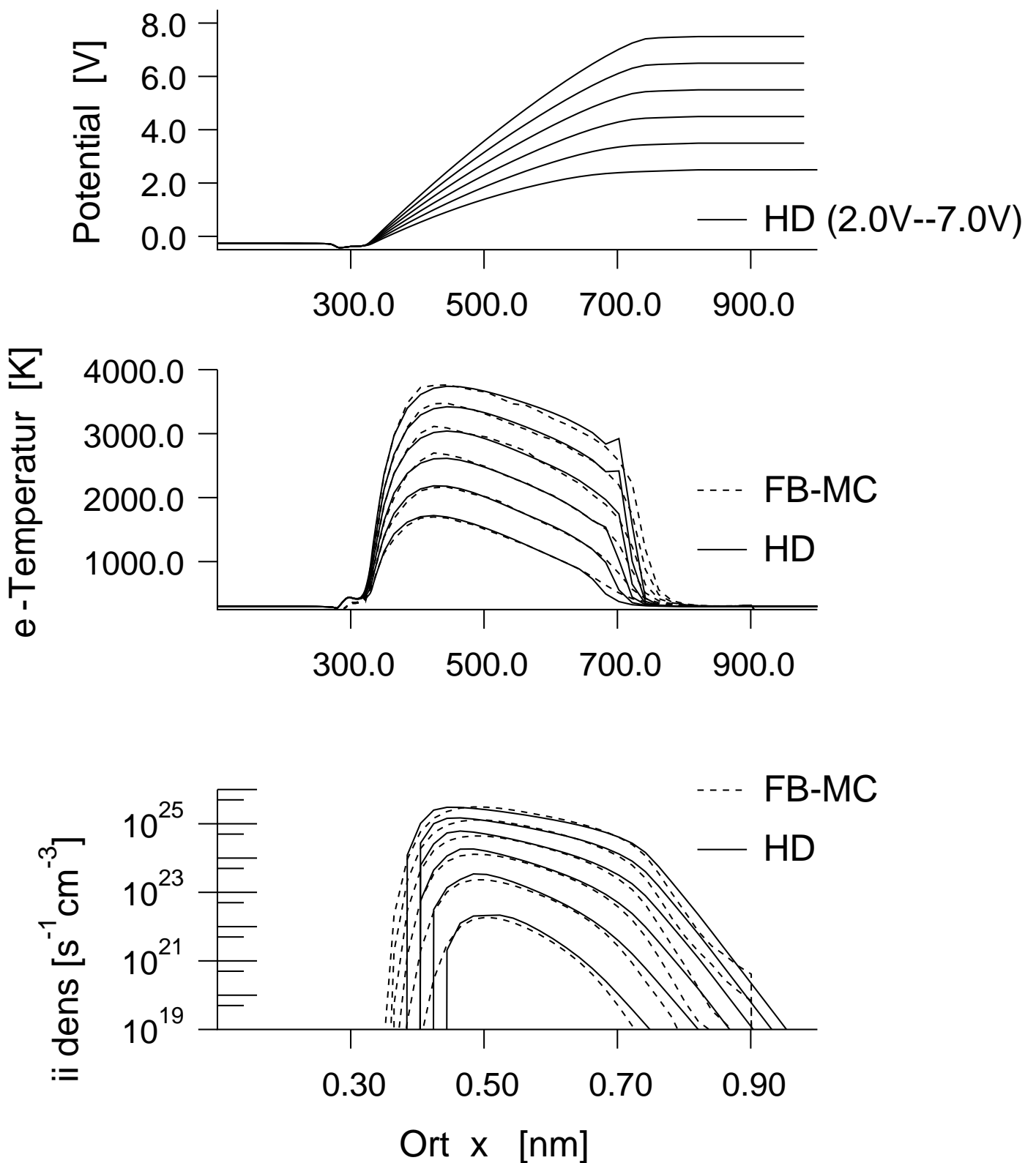


Abbildung 4.21: Potential, Elektronentemperatur und Generationsrate des HBTs bei $U_{CB} = 3.0 - -8.0\text{ V}$, $U_{BE} = 0.75\text{ V}$.

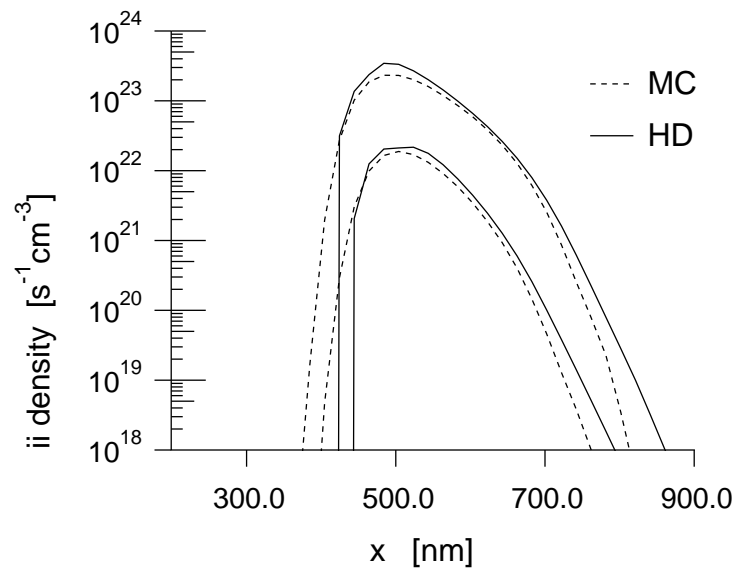


Abbildung 4.22: Vergleich der Generationsrate des HBTs bei $U_{CB} = 2.0$ und 3.0 V .

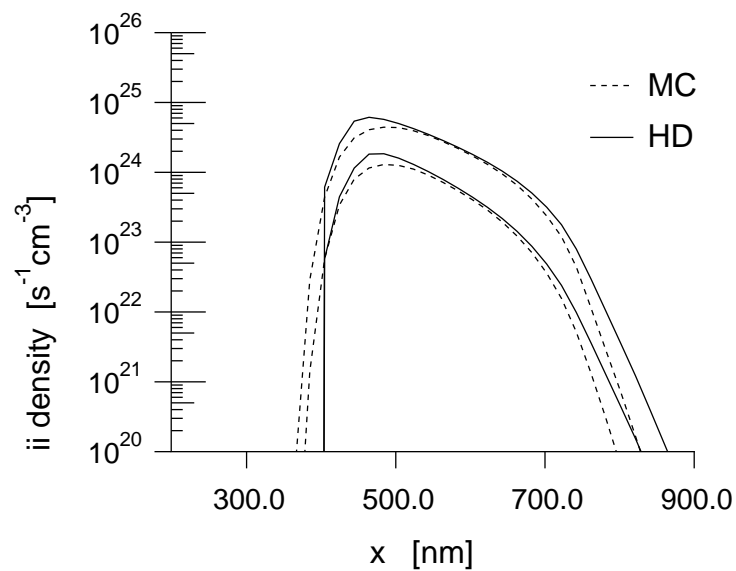
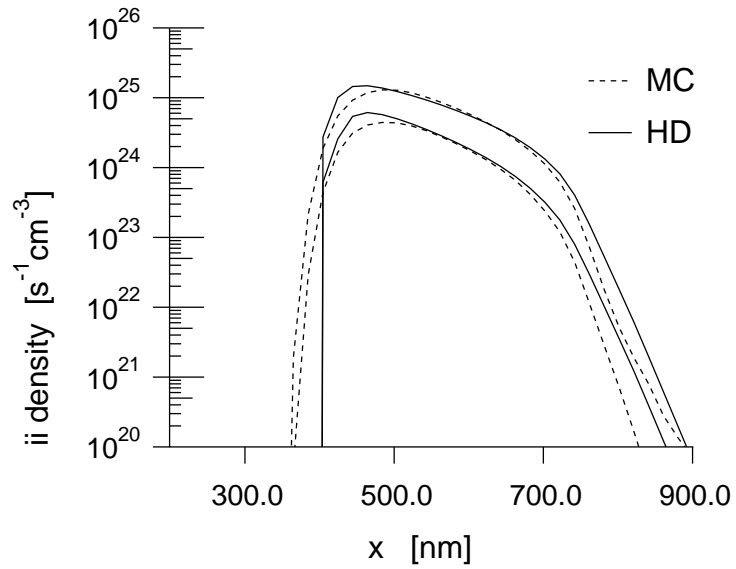


Abbildung 4.23: Vergleich der Generationsrate des HBTs bei $U_{CB} = 4.0$ und 5.0 V .

Abbildung 4.24: Vergleich der Generationsrate des HBTs bei $U_{CB} = 6.0$ und 7.0 V.

U_{CB}	2.0	3.0	4.0	5.0	6.0	7.0
I_C A/cm	0.708	0.711	0.713	0.715	0.716	0.717
CPU-time hours	5.9	4.8	4.1	3.0	2.8	2.5
I_{II} mA/cm (MC)	0.00319	0.053	0.30	1.13	3.56	9.15
I_{II} mA/cm (HD)	0.00396	0.0623	0.378	1.41	3.92	8.98
$I_{II}(HD)/I_{II}(MC)$	1.24	1.17	1.26	1.24	1.10	0.97

Tabelle 4.4:

5 Genauigkeitsprüfung des DD– und HD–Modells für produktionsrelevante HBTs der Firma TEMIC

Das wesentliche Ziel des Projektes bestand in einer Abschätzung des Genauigkeitsverlustes, der bei der Simulation von MC–Bauelementen mit dem DD–Modell gegenüber dem MC–Modell entsteht. Die hierzu benutzte Teststruktur zeigte jedoch parasitäre Barrieren im Leitungsband, die im DD–Modell andere Auswirkungen haben als im MC–Modell und damit sinnvolle Aussagen bezgl. einer Genauigkeitsabschätzung unmöglich machen. Die parasitären Barrieren sind allerdings sehr klein und sollten bei Einsatz von Intraband–Tunnelmodellen zumindest teilweise transparent sein. In diesem Bericht werden nun abschließend Simulationen vorgestellt, die Tunneleffekte mit Hilfe eines Quantenpotentials berücksichtigen.

Bisherige vergleichende Untersuchungen des stationären Verhaltens von SiGe–HBT–Strukturen mit Hilfe des MC–, HD– und DD–Simulators waren stets auf den Vergleich der Potentiale, Trägerdichten, Geschwindigkeitsprofile und Klemmenströme beschränkt. Im letzten Zwischenbericht wurden erstmals Vergleiche auch für wichtige AC–Kleinsignalgrößen wie die Transitfrequenz demonstriert. Möglich wurde dies durch die Entwicklung eines besonders rechenzeiteffizienten, eindimensionalen MC–Modells für SiGe–HBTs, welches Elektronendichte und Kollektorströme mit einer hohen numerischen Genauigkeiten berechnen kann. Dieses MC–Modell wird auch bei der hier vorgestellten Untersuchung von Tunneleffekten verwendet.

5.1 Tunneleffekte

Zur Untersuchung des Einflusses von Tunneleffekten wird die schon im letzten Zwischenbericht dargestellte Struktur in Abbildung 5.1 verwendet. Die mit dem DD–Modell durchgeführten Simulationen der Elektronendichte und der Driftgeschwindigkeit zeigen im Basisbereich im Vergleich mit der MC–Referenzsimulationen starke Abweichungen.

Die Ergebnisse des letzten Zwischenberichtes zeigten, daß die in diesem Bauelement auftretenden parasitären Leitungsbandbarrieren (siehe Abbildung 5.2) teilweise für die beobachteten Abweichungen verantwortlich sind. Die Leitungsbandbarrieren sind nur wenige nm dick und mit einer Schwelle von 20 meV klein genug, um Tunneln zuzulassen. Eine Methode, um Tunneleffekte mit zu berücksichtigen, besteht in der Ableitung von Quantenkorrekturtermen für die BOLTZMANN–Transportgleichung [62].

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} - \frac{e}{\hbar} \vec{E}(\vec{r}, t) \nabla_{\vec{k}} + \vec{v}(\vec{k}) \nabla_{\vec{r}} + \frac{1}{24\hbar} \nabla_{\vec{r}}^3 \Psi \cdot \nabla_{\vec{k}}^3 \right] f(\vec{r}, \vec{k}, t) = \frac{\partial f}{\partial t}(\vec{r}, \vec{k}, t) \quad (5.1)$$

Mit den Annahmen

$$\nabla_{\vec{r}}^3 \Psi \approx \nabla_{\vec{r}} \left(-\frac{1}{\beta} \nabla_{\vec{r}}^2 \log(n) \right), \quad \nabla_{\vec{k}}^3 f \approx -\frac{2\beta\hbar^2}{m} \nabla_{\vec{k}} f \quad (5.2)$$

erhält man eine modifizierte BTG, in der das Potential mit einem Zusatzterm modifiziert wird (sog. Quantenpotential):

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v}(\vec{k}) \nabla_{\vec{r}} + \frac{e}{\hbar} \nabla_{\vec{r}} \left(\Psi + \frac{\hbar^2}{12m} \nabla_{\vec{r}}^2 \log(n) \right) \nabla_{\vec{k}} \right] f(\vec{r}, \vec{k}, t) = \frac{\partial f}{\partial t}(\vec{r}, \vec{k}, t) \quad (5.3)$$

Die Auswirkungen dieses Quantenpotentials werden nun zuerst anhand stationärer Simulationen der Elektronendichte und Elektronengeschwindigkeit (Abbildungen 5.4 und 5.6) untersucht. Im Vergleich mit den analogen Abbildungen 5.3 und 5.5, in denen das Quantenpotential nicht berücksichtigt ist, können modellspezifische Unterschiede festgestellt werden:

- Da das DD-Modell im Unterschied zum MC- und HD-Modell keine Aufheizungseffekte berücksichtigen kann, werden die Elektronen von den Leitungsbandbarrieren ohne Berücksichtigung eines Quantenpotentials deutlich gebremst. Die Korrekturen durch das Quantenpotential mildern diesen Effekt etwas ab, jedoch bleiben die Änderungen klein.
- Der MC-Simulator zeigt in der Umgebung des Basis/Kollektorübergangs eine Mischung von Verteilungsfunktionen heißer und kalter Elektronen. Die Berücksichtigung des Quantenpotentials ermöglicht nun einem Teil der Elektronen das Tunneln durch die Leitungsbandbarriere, was zu einer Abnahme der Elektronendichte in diesem Bereich führt. Die Barriere ist jedoch auch für das MC-Modell nicht völlig transparent.
- Da das hier nicht gezeigte HD-Modell keine Mischungseffekte kalter und heißer Elektronen berücksichtigen kann, erfaßt es nur das Verhalten des heißen Elektronengases. Die Energie dieses heißen Elektronengases ist groß genug, um die Barriere nahezu unbeeinflusst zu passieren. Aus diesem Grund ist die Verwendung eines Quantenpotentials mit dem HD-Modell an dieser Stelle nicht dringend geboten und wurde daher nicht durchgeführt.

Um auch das AC-Kleinsignalverhalten untersuchen zu können, wurden abschließend Simulationen der Transitzeit

$$\tau = q \int_0^L \left. \frac{dn}{dI_C} \right|_{U_{CE}=\text{const}} dx. \quad (5.4)$$

bzw. ihrer Ableitung nach dem Ort durchgeführt.

Die Abbildungen 5.8 und 5.7 zeigen den Verlauf der Ableitung der Transitzeit τ mit und ohne Berücksichtigung des Quantenpotentials. Hierbei fallen vor allem Unterschiede im Bereich vor dem Emitter/Basis-Übergang auf. Während hier beim DD-Modell keine signifikanten Änderungen bei Hinzunahme des Quantenpotentials zu bemerken sind, zeigt das MC-Modell eine deutliche bessere Übereinstimmung mit dem HD-Modell. Allgemein zeigt sich, daß das DD-Modell auch bei Mitnahme des Quantenpotentials die Basistransitzeit signifikant überschätzt.

5.2 Fazit

Der letzte Zwischenbericht zeigt, daß bei Fehlen von parasitären Barrieren die Modellunterschiede wichtiger Kenngrößen wie z.B. der Basistransitzeit zwischen der FB-MC- und der HD-Simulation klein sind. Das DD-Modell liefert dagegen konsistent zu große Basistransitzeiten. Die Quantenpotentialmethode zur Berücksichtigung von Tunneleffekten bei Vorhandensein von parasitären Barrieren bewirkt eine deutliche Verkleinerung der

Modellunterschiede bezüglich der Basistransitzeit zwischen HD und FB–MC. Das DD–Ergebnis zeigt jedoch weiterhin einen zu großen Wert für die Basistransitzeit.

Insgesamt ist festzustellen, daß die Barriere nicht vollständig transparent wird und beim Design eines HBT vermieden werden sollte, da die hierdurch bedingte Erhöhung der Basistransitzeit eine Absenkung der Transitfrequenz f_T zur Folge hat. Diese Aussage beruht allerdings auf der bisherigen Berücksichtigung des Intraband–Tunnelns in der beschriebenen groben Näherung. Die Ergebnisse entsprechen tendenziell unserer Erwartung, daß die HD- und FB–MC–Ergebnisse sich bei Berücksichtigung des Tunneleffektes annähern sollten. Genauere und weitergehende Untersuchungen zu diesem Thema sind jedoch wünschenswert und notwendig.

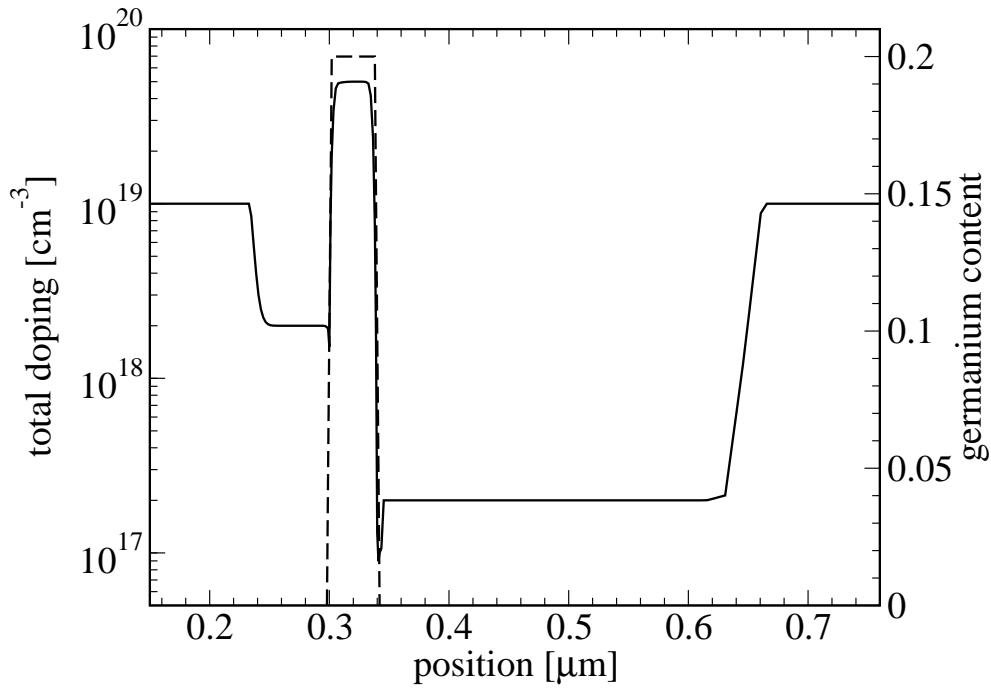


Abbildung 5.1: Germanium (getrichelt) und Dotierungsprofil des in [9] verwendeten Bauelementes

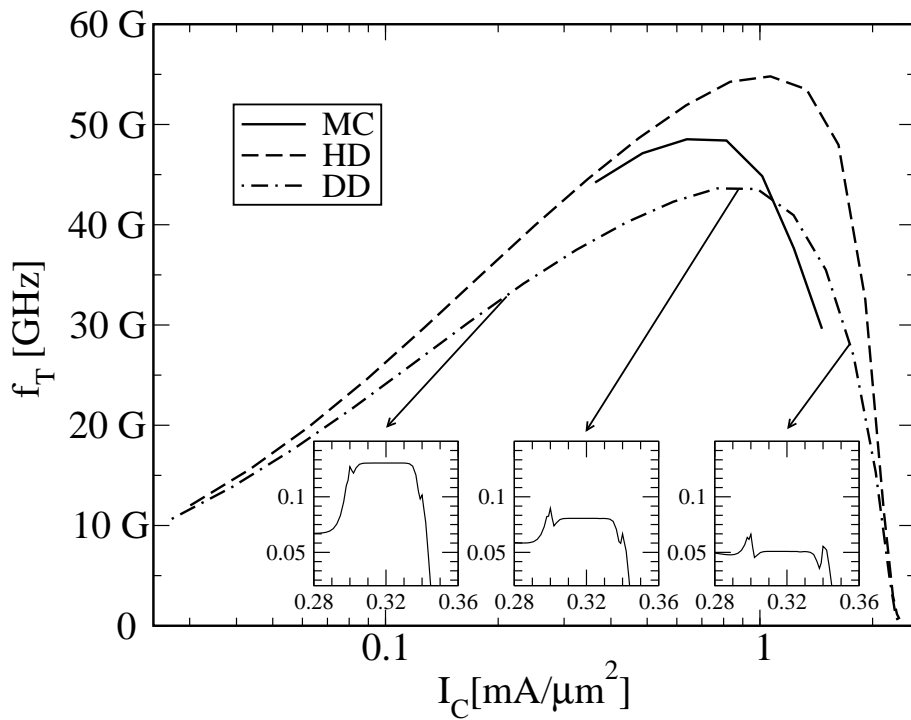


Abbildung 5.2: Transitfrequenz für das DD-, HD- und MC-Modell. Für drei ausgewählte Punkte ist zusätzlich der Verlauf der Leitungsbandkante (in eV) gezeigt.

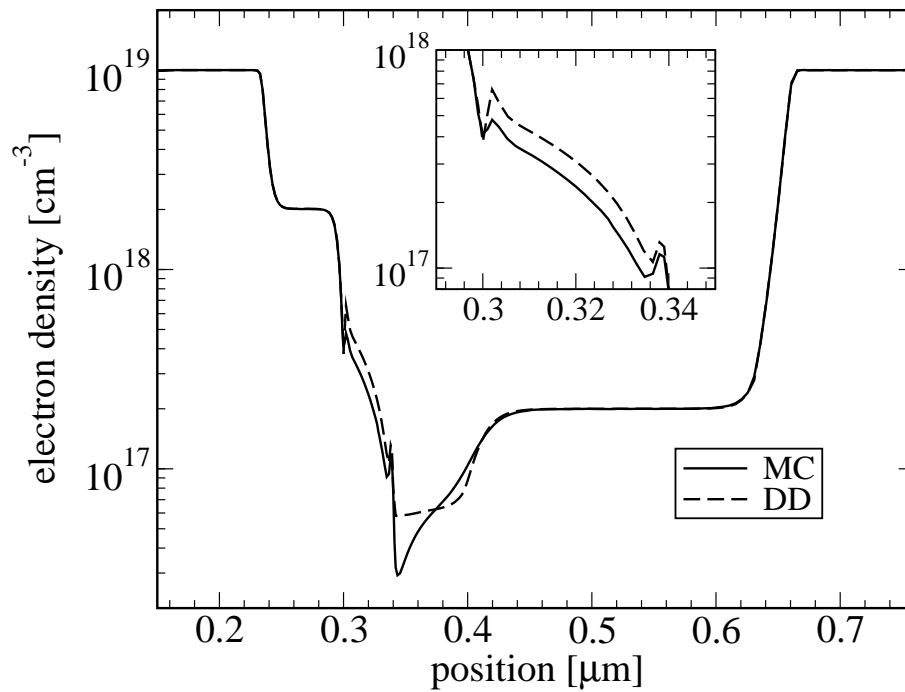


Abbildung 5.3: Verlauf der Elektronendichte ohne Quantenpotential für das DD- und MC-Modell bei gleichem Stromniveau von etwa $0.9 \text{ mA}/\mu\text{m}^2$.

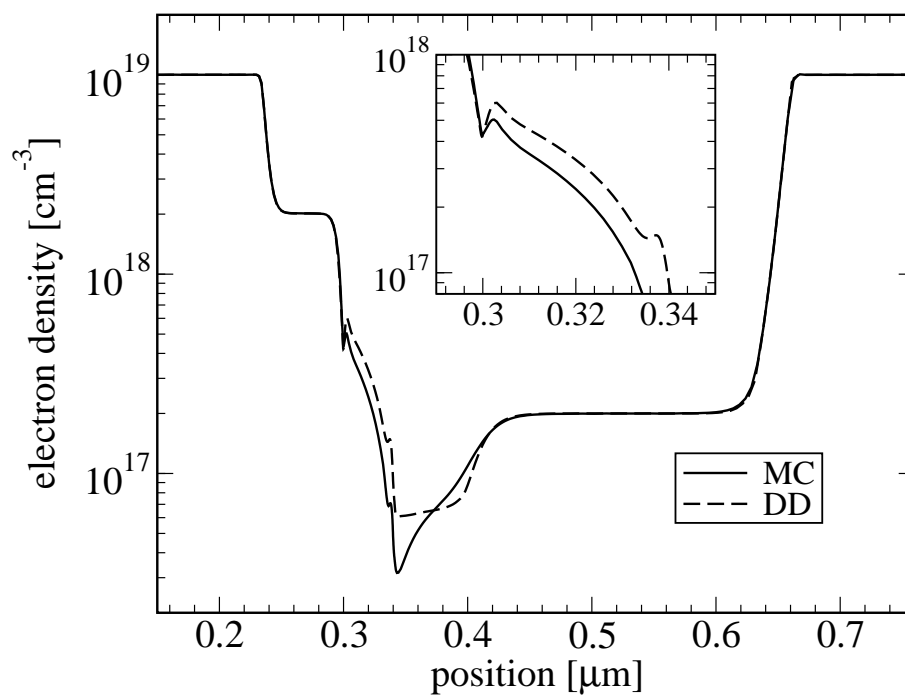


Abbildung 5.4: Verlauf der Elektronendichte mit Quantenpotential für das DD- und MC-Modell bei gleichem Stromniveau von etwa $0.97 \text{ mA}/\mu\text{m}^2$.

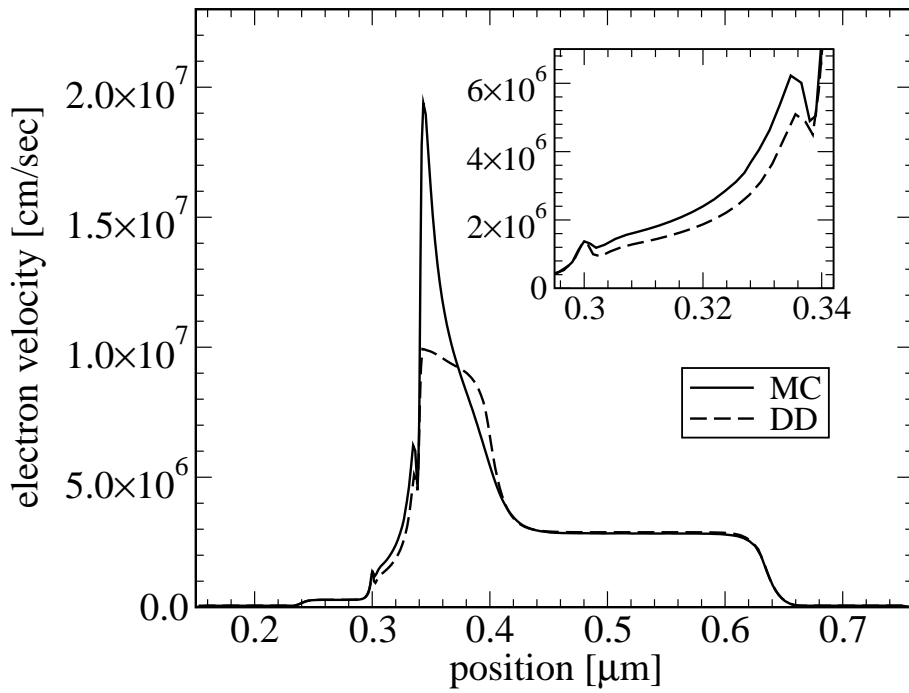


Abbildung 5.5: Verlauf der Elektronengeschwindigkeit ohne Quantenpotential für das DD- und MC-Modell bei gleichem Stromniveau von etwa $0.9 \text{ mA}/\mu\text{m}^2$.

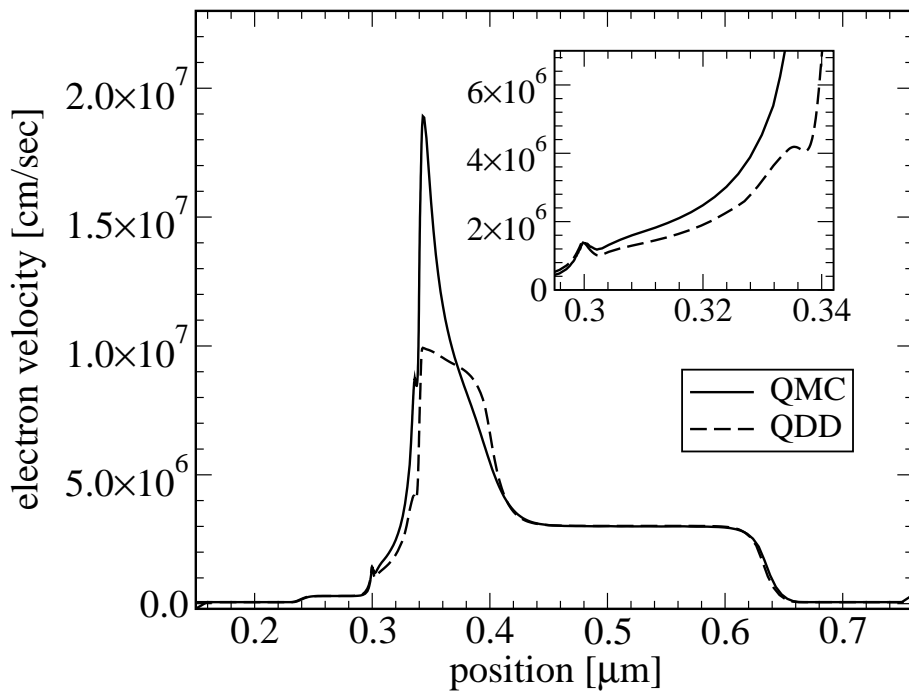


Abbildung 5.6: Verlauf der Elektronengeschwindigkeit mit Quantenpotential für das DD- und MC-Modell bei gleichem Stromniveau von etwa $0.97 \text{ mA}/\mu\text{m}^2$.

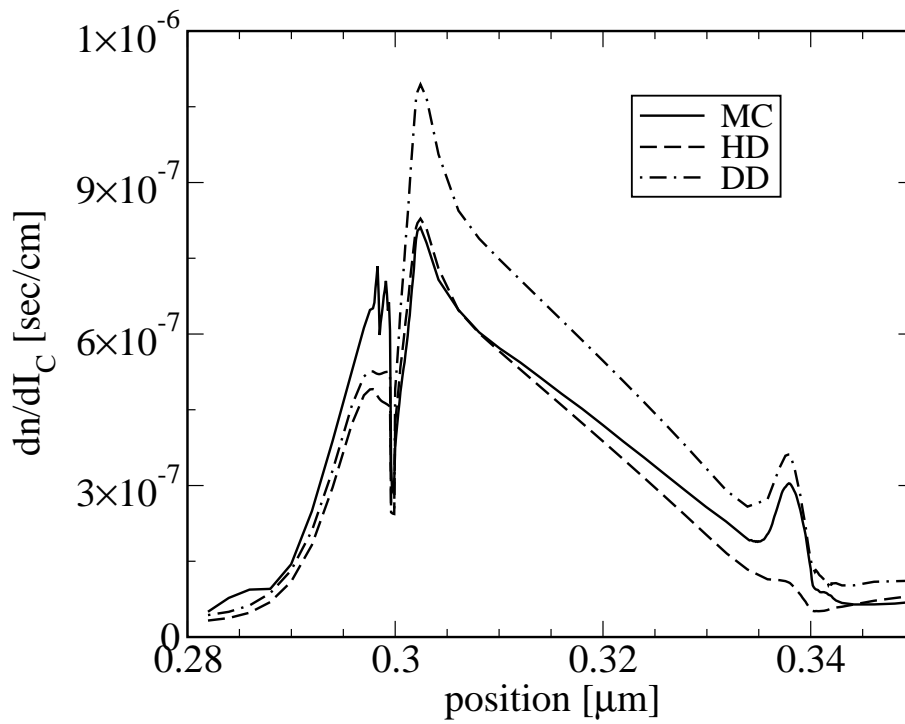


Abbildung 5.7: Vergleich von $\left. \frac{dn}{dI_C} \right|_{U_{CE}=\text{const}}$ für das DD-, HD- und MC-Modell bei gleichem Stromniveau von etwa $1.06 \text{ mA}/\mu\text{m}^2$ ohne Berücksichtigung des Quantenpotentials.

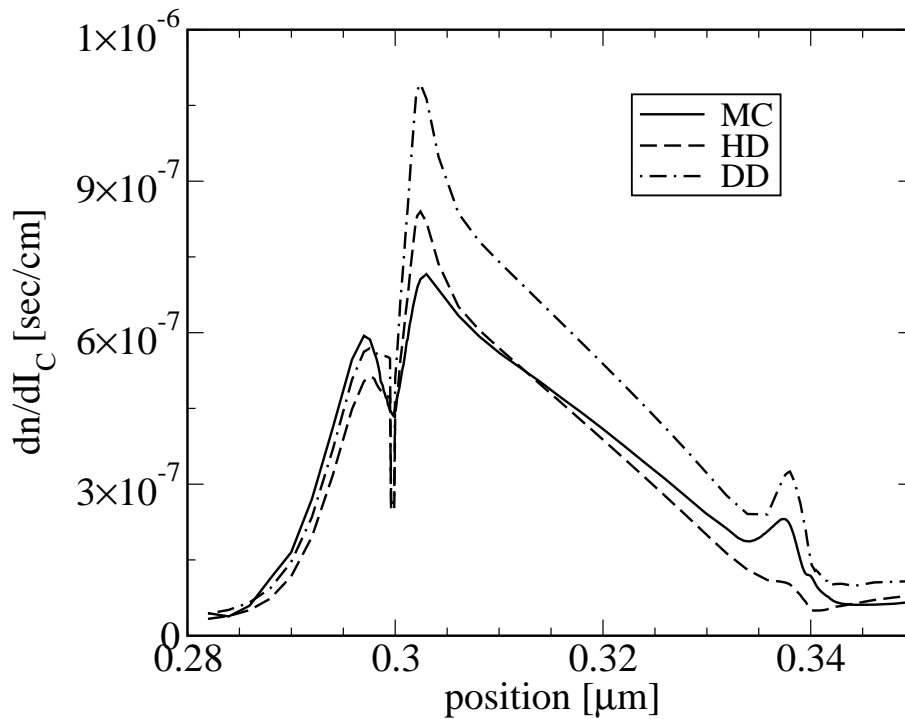


Abbildung 5.8: Vergleich von $\left. \frac{dn}{dI_C} \right|_{U_{CE}=\text{const}}$ für das DD-, HD- und MC-Modell bei gleichem Stromniveau von etwa $0.97 \text{ mA}/\mu\text{m}^2$ mit Berücksichtigung des Quantenpotentials.

6 Transportparametersimulation für verspanntes Si-Ge

In diesem Abschnitt werden die für den Projektpartner TU Ilmenau berechneten Transportparameter vorgestellt und analysiert. Gezeigt werden im wesentlichen Ergebnisse für die Driftgeschwindigkeit, mittlere Energie und Energierelaxationszeit über dem elektrischen Feld. Diese hängen dabei zusätzlich von der Dotierung und der Gittertemperatur ab. Außerdem werden noch Simulationen der OHMSchen Beweglichkeit für verschiedene Temperaturen und Dotierungen über dem Germaniumgehalt gezeigt. Alle Simulationen wurden für Elektronen und Löcher (Minoritäten und Majoritäten) durchgeführt. Aufgrund des großen Umfangs von Simulationsdaten werden nur exemplarische Ergebnisse gezeigt.

6.1 Das Hydrodynamische Bilanzgleichungssystem

Das vom Projektpartner verwendete Hydrodynamische Gleichungssystem hat für Elektronen die folgende Gestalt [46]:

$$\left. \begin{aligned} \nabla_{\vec{r}} \vec{J} &= 0 \\ \vec{J} &= \mu \cdot \left(n \nabla_{\vec{r}} E_c + \frac{2}{3} \nabla_{\vec{r}}(nw) - nw \nabla_{\vec{r}} \ln(\nu^{2/3} m_{dc}) \right) \\ \nabla_{\vec{r}} \vec{S} &= \vec{J} \frac{\nabla_{\vec{r}} E_c}{q} - n \frac{w - w_L}{\tau_w} \\ \vec{S} &= -\frac{5\tau_s}{3q\tau_m} \left(\vec{J}w + \frac{2}{3} \mu n w \nabla_{\vec{r}} w \right) \end{aligned} \right\} \quad (6.1)$$

Zur besseren Übersicht wurde in den obigen Gleichungen die Beschreibung von Generations-/Rekombinationsprozessen vernachlässigt. Da das Gleichungssystem Gl. (6.1) ein makroskopisches Bilanzgleichungssystem darstellt, enthält es selbst keine weitere Information über die Abhängigkeit der Transportparameter μ , τ_s und τ_w vom elektrischen Feld, dem Germaniumgehalt, der Dotierung und der Gittertemperatur. Diese Informationen können nur von einem Simulator bereitgestellt werden, der das System auf mikroskopischer Ebene auswertet. Üblicherweise werden hierzu homogene, stationäre Monte-Carlo-Simulationen durchgeführt, die direkt auf der BOLTZMANN-Transportgleichung aufsetzen können.

Für den Projektpartner wurden mit dieser Methode Transportparameterdaten für die Germaniumgehalte $x_{Ge} = 0, 6, 10, 20, 30, 40\%$, die Gittertemperaturen $T = 250, 300, 350, 400, 450, 500\text{ K}$ und 18 diskrete Dotierungen im Bereich $N = 10^{15} \dots 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ feldabhängig ausgewertet. Der dabei verwendete SiGe Monte-Carlo-Simulator setzt auf der vollständigen Bandstruktur auf [19]. Die Berechnungszeit für eine ausgewählte Gittertemperatur beträgt (Elektronen und Löcher, Minoritäten und Majoritäten) etwa drei Wochen. Aufgrund des großen Datenumfangs werden im folgenden nur einige Ergebnisse exemplarisch vorgestellt.

Bei der Interpretation sind dabei Einflüsse folgender Streuprozesse zu beachten:

- Phononstreuung: Dies ist bei hohen Energien der dominante Prozeß.

- Legierungsstreuung: Die Legierungsstreuung hat signifikanten Einfluß auf alle Simulationen; sie steigt mit zunehmenden Germaniumgehalt.
- Störstellenstreuung: Dieser Prozeß ist insbesondere bei kleinen Energien dominant.

Unter der zusätzlichen Berücksichtigung von Bandstruktureffekten lassen sich die generellen Tendenzen in den gezeigten Kurven erklären.

6.1.1 Driftgeschwindigkeiten

Der Verlauf der Driftgeschwindigkeiten der Elektronen und Löcher (Abbildungen 6.9–6.12 und 6.13–6.16) zeigt eine Scherung bezüglich der Dotierung und eine Sättigungsdriftgeschwindigkeit, die im wesentlichen vom Germaniumgehalt bestimmt wird. Im Sättigungsbereich ist die Dotierungsstreuung gegenüber der von der Dotierung unabhängigen Phononstreuung zu vernachlässigen, so daß die Kurven bei unterschiedlicher Dotierung und gleichem Germaniumgehalt die gleiche Sättigungsdriftgeschwindigkeit aufweisen. Die Legierungsstreuung führt dann lediglich zu einer weiteren Differenzierung der Sättigungsdriftgeschwindigkeit nach dem Germaniumgehalt. Im Gegensatz zu den im vorherigen Zwischenbericht [63] gezeigten Ergebnissen steigt nun die Geschwindigkeit stets mit wachsendem Feld an, das ist Eigenschaft, die sich sehr positiv auf die Stabilität von HD- und insbesondere DD-Simulatoren auswirkt.

6.1.2 Ohmsche Beweglichkeiten

Die Abbildung 6.1 zeigt den Verlauf der OHMSchen Beweglichkeit der Elektronen als Funktion des Germaniumgehaltes. Generell sinkt bei steigendem Germaniumgehalt die Beweglichkeit aufgrund der Legierungsstreuung ab. Ab einer Dotierung von 10^{19}cm^{-3} nimmt die Beweglichkeit der Elektronen bei steigendem Germaniumgehalt jedoch zunächst zu. In diesem Bereich überwiegt die Dotierungsstreuung gegenüber der Legierungsstreuung, wodurch zunächst nur die Ausblendung der beiden energetisch höher liegenden Täler wirksam wird. Zum Transport tragen dann nur die vier kleinen transversalen Massen der abgesenkten Täler bei, was zu einem Anstieg der Beweglichkeit führt. Zwischen Minoritäten und Majoritäten gibt es hinsichtlich dieser Argumentation keine Unterschiede, allerdings liegen die Minoritätsträgerbeweglichkeiten deutlich über den Majoritätsträgerbeweglichkeiten.

Bei den Löchern (Abbildung 6.3) sinkt die Beweglichkeit zunächst ab, steigt jedoch mit zunehmendem Germaniumgehalt wieder deutlich an. Das Absinken der Beweglichkeit zu Beginn ist auf die Legierungsstreuung zurückzuführen, der deutliche Anstieg im weiteren Verlauf der Kurve ist ein Bandstruktureffekt. Das Lochband besitzt in diesem Fall eine Charakteristik, die einer Mischung aus leichtem und schwerem Lochband entspricht. Bei kleinen Energien überwiegt der Charakter des leichten Lochbandes, der sich mit zunehmenden Germaniumgehalt verstärkt. Die damit einhergehende Verkleinerung der Masse führt dann zu einem Anstieg der Beweglichkeit.

Die Abbildungen 6.5–6.8 zeigen den Beweglichkeitsverlauf der Elektronen und Löcher über der Gittertemperatur. Aufgrund der zunehmenden Wechselwirkung mit dem Gitter sinkt die Beweglichkeit mit steigender Temperatur ab. Zudem gibt es leichte Unterschiede im Verhalten der Majoritäten und Minoritäten.

6.1.3 Mittlere Energie

Neben dem erwarteten Verlauf des Anstiegs mit dem Feld (Abbildungen 6.17–6.20) fällt bei den Elektronen auf, daß die mittlere Energie für $x_{\text{Ge}} = 0.0$ und $x_{\text{Ge}} = 0.2$ nahezu zusammenfällt, während die Energie bei $x_{\text{Ge}} = 0.1$ über ersteren Werten liegt. Der Grund liegt darin, daß bei $x_{\text{Ge}} = 0.2$ die beiden oberen Täler energetisch so weit angehoben sind, daß sie bei kleinen Feldstärken kaum besetzt werden. Die mittlere Energie von vier äquivalenten Tälern bei $x_{\text{Ge}} = 0.2$ entspricht dann der von sechs äquivalenten Tälern bei $x_{\text{Ge}} = 0.0$. Bei einem Germaniumgehalt von $x_{\text{Ge}} = 0.1$ werden die energetisch angehobenen Täler jedoch besetzt, was zu einer Erhöhung der mittleren Energie führt.

6.1.4 Energierelaxationszeit

Da die Energierelaxationszeit (Abbildung 6.21) über dem Feld nur eine schwache Dotierungsabhängigkeit zeigt, werden nur Kurvenverläufe bei unterschiedlichen Germaniumkonzentrationen gezeigt. In der Nähe des Gleichgewichts kann es dabei zu Simulationsungenauigkeiten kommen, da die Berechnungen bei einem Fehler von 1% in der Beweglichkeit (Driftgeschwindigkeit) abgebrochen wurden. Der Fehler in der Energierelaxationszeit ist dann jedoch deutlich größer als 1%, im Gleichgewicht wird die Energierelaxationszeit unendlich groß. Da in diesem Bereich das Verhalten der Energierelaxationszeit nicht so relevant ist, lohnen hier keine längeren und damit genaueren Simulationen.

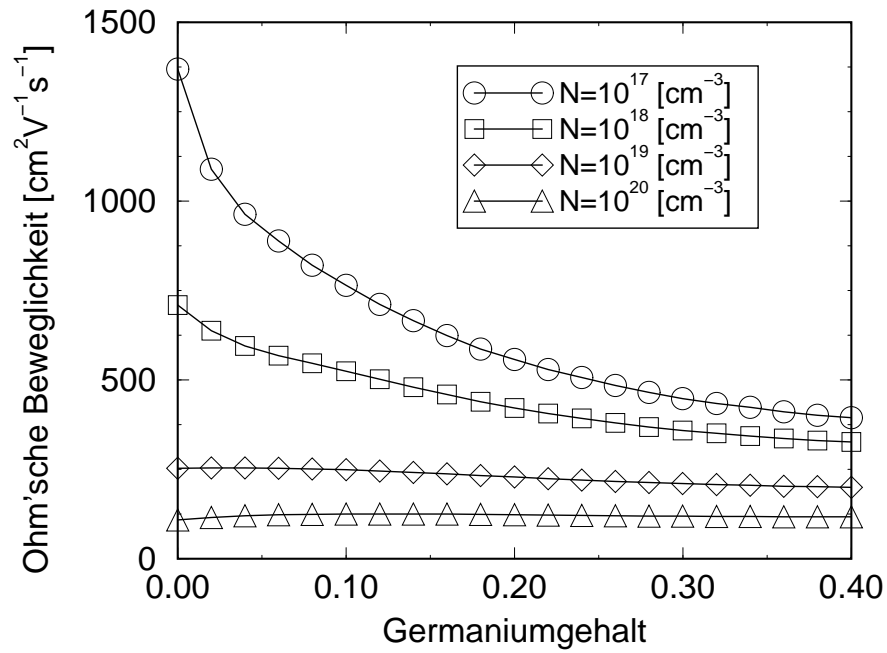


Abbildung 6.1: Elektronbeweglichkeiten (Majoritäten) in Abhängigkeit vom Germaniumgehalt in verspanntem SiGe.

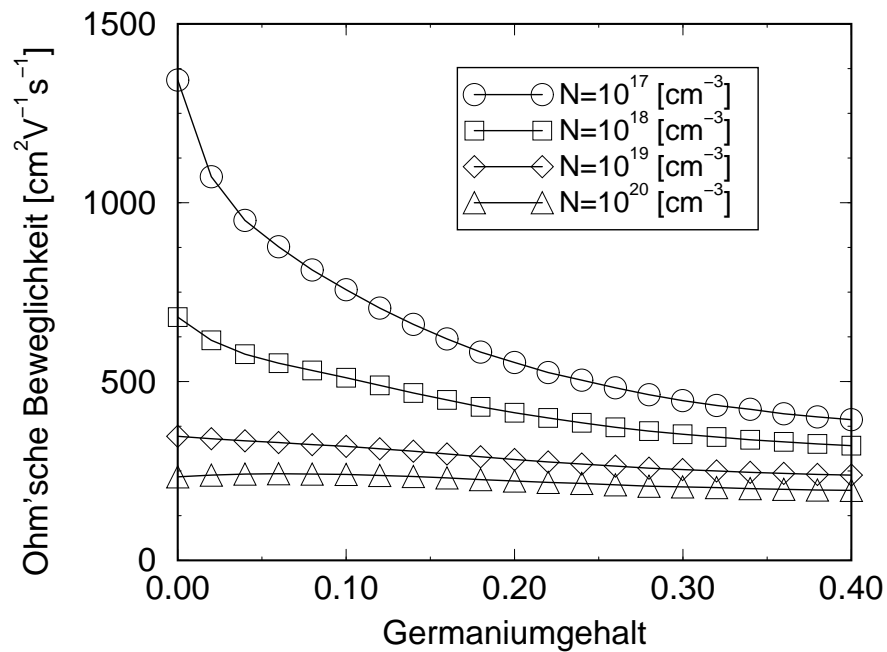


Abbildung 6.2: Elektronbeweglichkeiten (Minoritäten) in Abhängigkeit vom Germaniumgehalt in verspanntem SiGe.

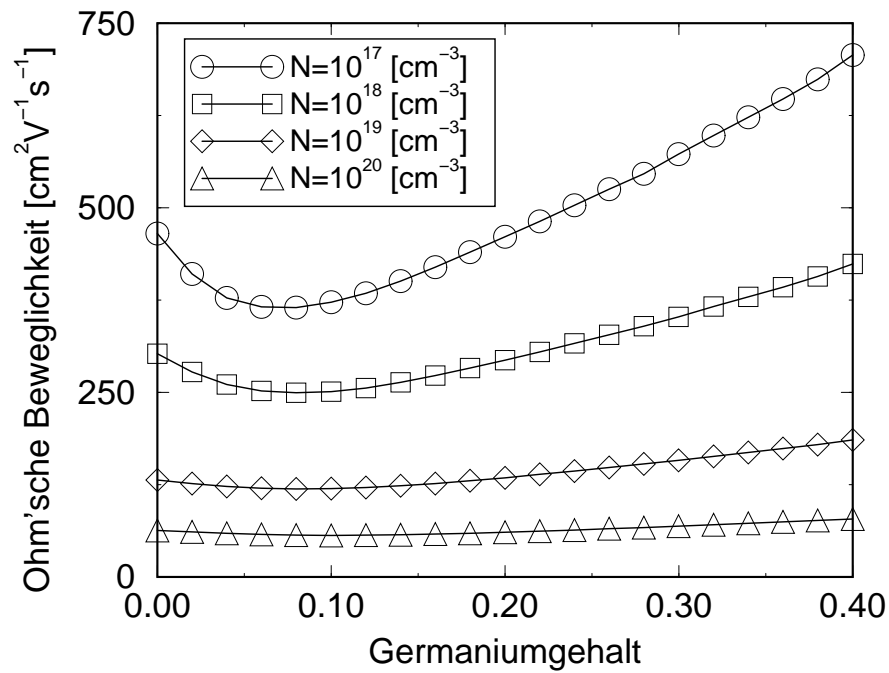


Abbildung 6.3: L cherbeweglichkeiten (Majoritaten) in Abhangigkeit vom Germaniumgehalt in verspanntem SiGe.

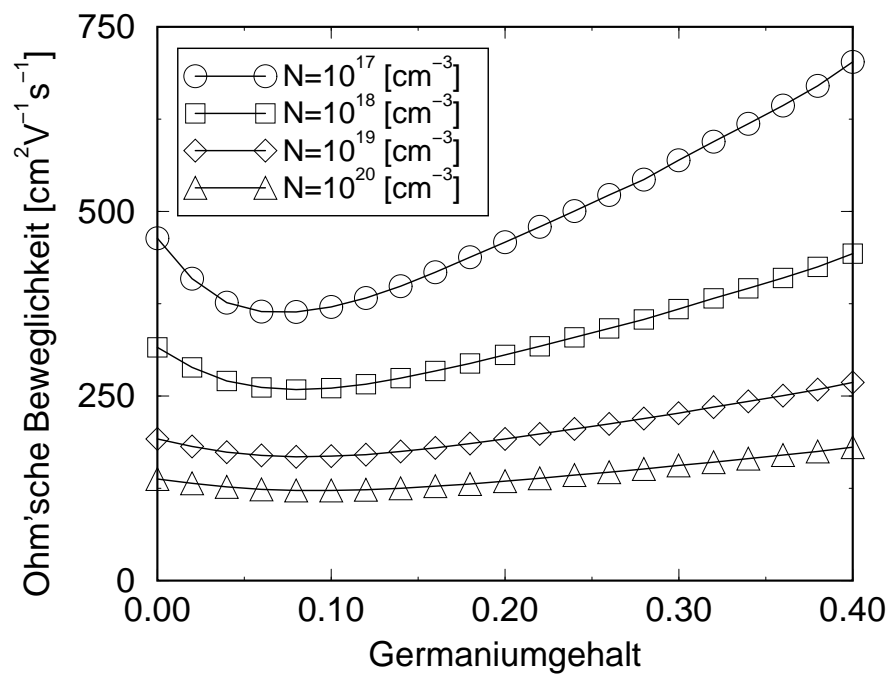


Abbildung 6.4: L cherbeweglichkeiten (Minoritaten) in Abhangigkeit vom Germaniumgehalt in verspanntem SiGe.

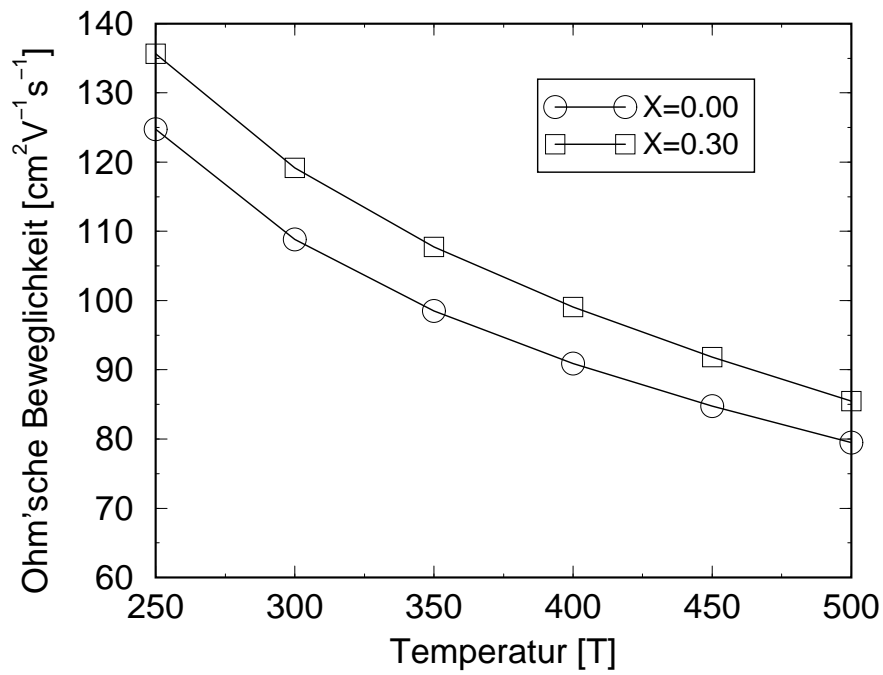


Abbildung 6.5: Elektronbeweglichkeiten (Majoritäten) in Abhängigkeit von der Temperatur in verspanntem SiGe.

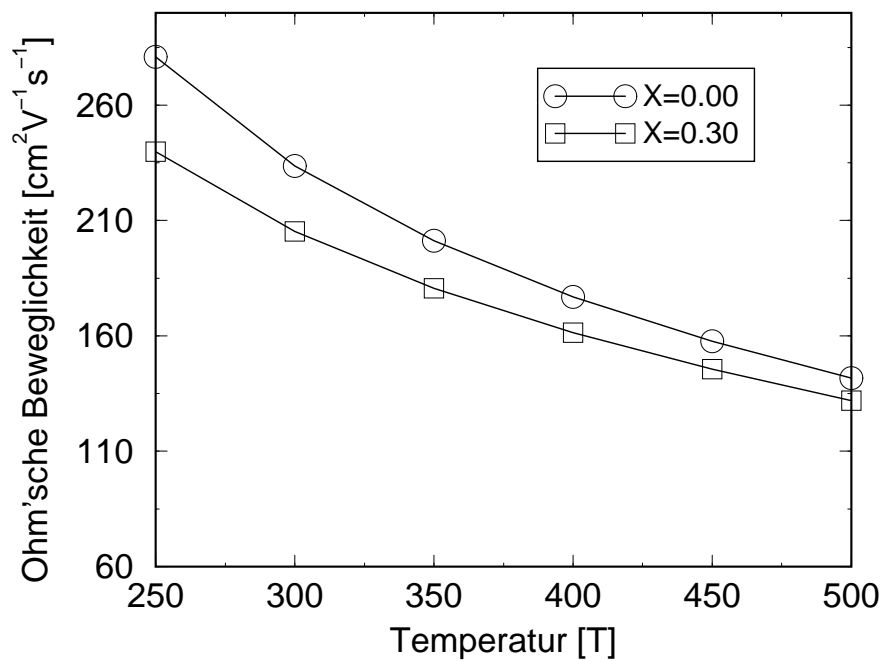


Abbildung 6.6: Elektronbeweglichkeiten (Minoritäten) in Abhängigkeit von der Temperatur in verspanntem SiGe.

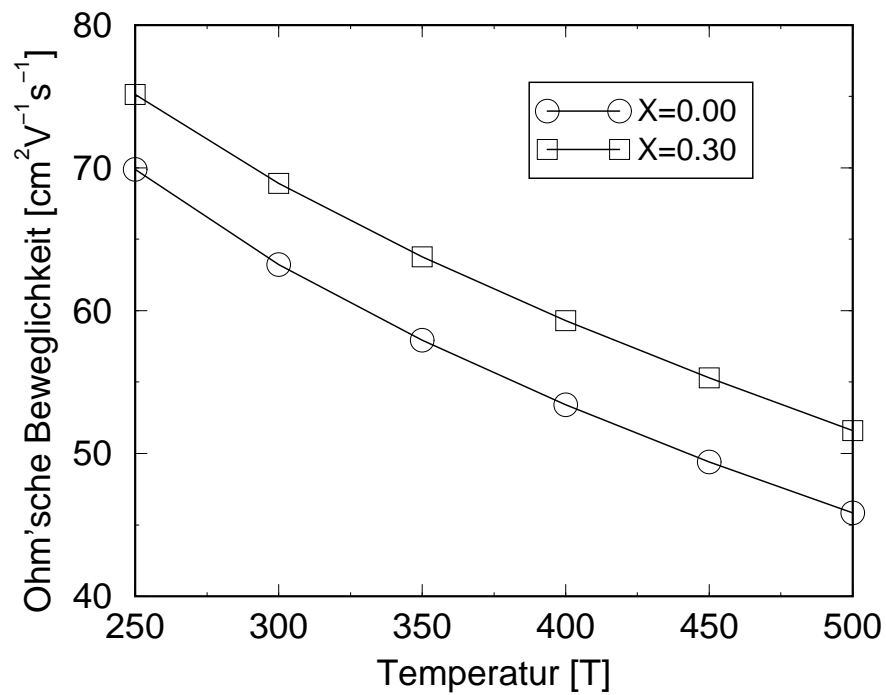


Abbildung 6.7: Löcherbeweglichkeiten (Majoritäten) in Abhängigkeit von der Temperatur in verspanntem SiGe.

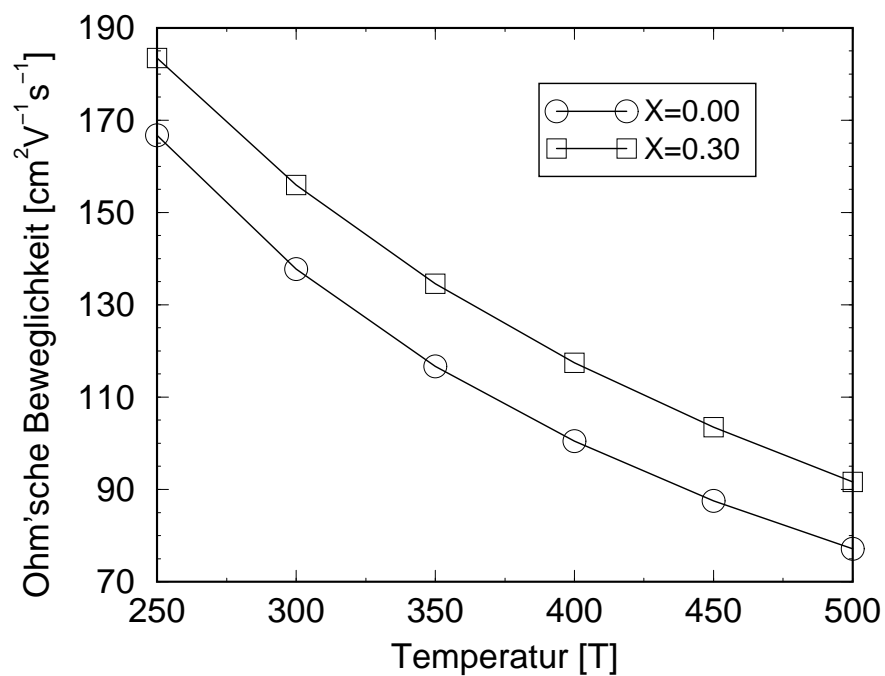


Abbildung 6.8: Löcherbeweglichkeiten (Minoritäten) in Abhängigkeit von der Temperatur in verspanntem SiGe.

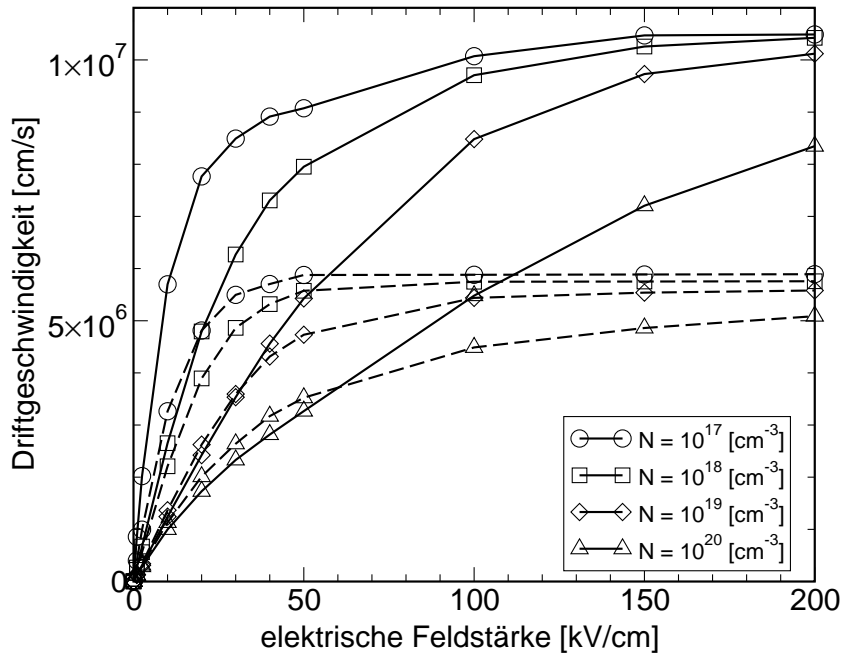


Abbildung 6.9: Driftgeschwindigkeit der Elektronen (Majoritäten) in Abhängigkeit vom elektrischen Feld in verspanntem SiGe bei einer Temperatur von 250 K. Durchgezogene Kurven: Germaniumgehalt 30%, gestrichelte Kurven: Germaniumgehalt 0%.

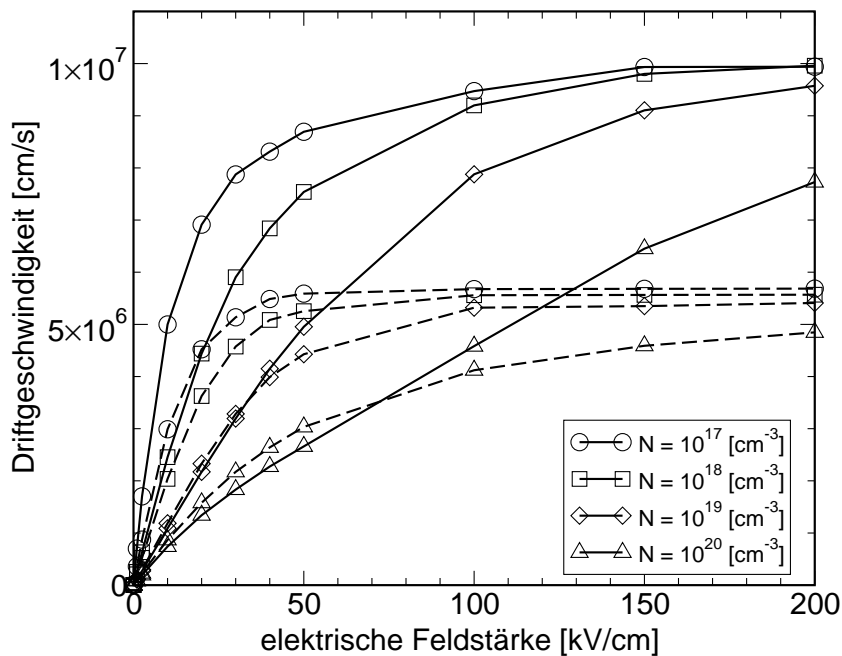


Abbildung 6.10: Driftgeschwindigkeit der Elektronen (Majoritäten) in Abhängigkeit vom elektrischen Feld in verspanntem SiGe bei einer Temperatur von 300 K. Durchgezogene Kurven: Germaniumgehalt 30%, gestrichelte Kurven: Germaniumgehalt 0%.

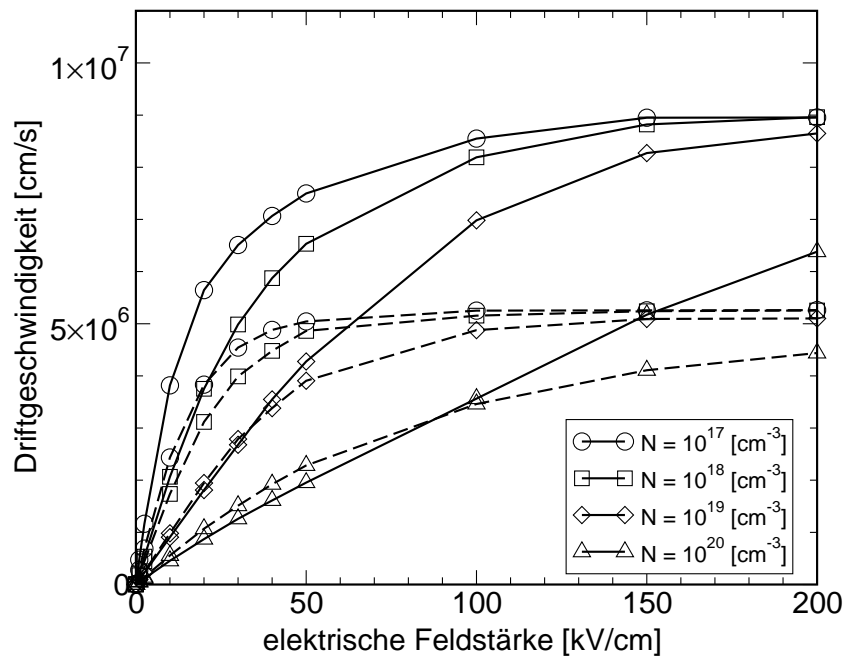


Abbildung 6.11: Driftgeschwindigkeit der Elektronen (Majoritäten) in Abhängigkeit vom elektrischen Feld in verspanntem SiGe bei einer Temperatur von 400 K. Durchgezogene Kurven: Germaniumgehalt 30%, gestrichelte Kurven: Germaniumgehalt 0%.

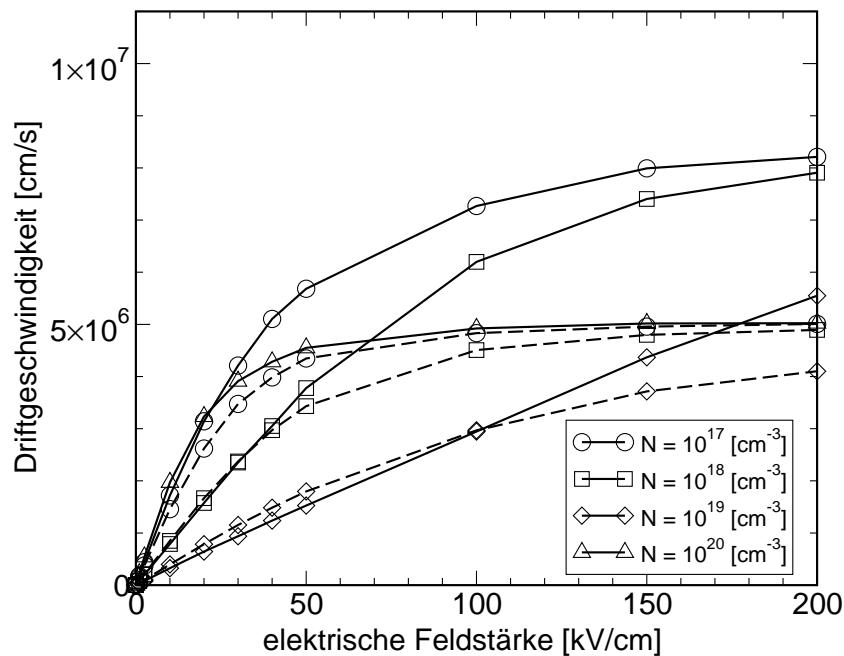


Abbildung 6.12: Driftgeschwindigkeit der Elektronen (Majoritäten) in Abhängigkeit vom elektrischen Feld in verspanntem SiGe bei einer Temperatur von 500 K. Durchgezogene Kurven: Germaniumgehalt 30%, gestrichelte Kurven: Germaniumgehalt 0%.

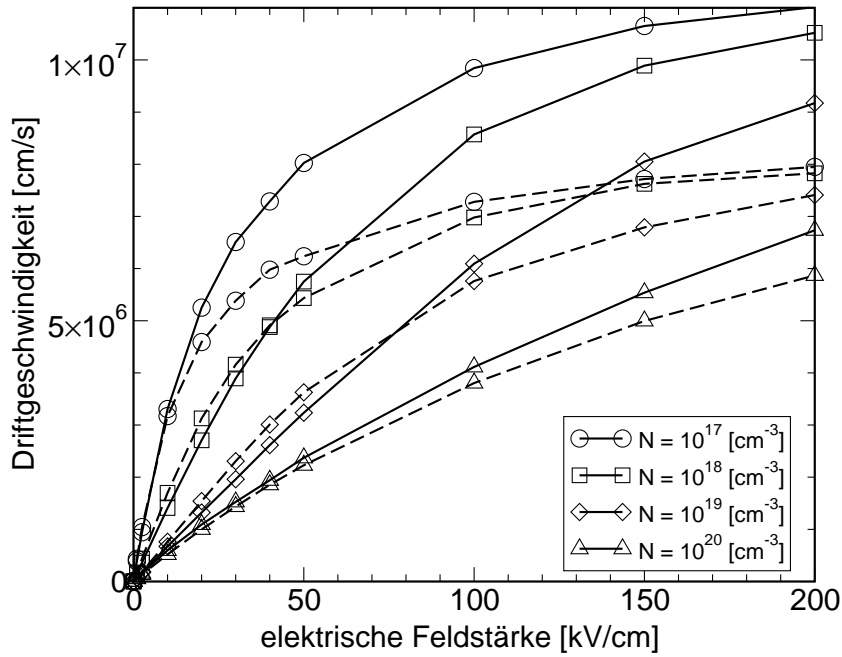


Abbildung 6.13: Driftgeschwindigkeit der Löcher (Majoritäten) in Abhängigkeit vom elektrischen Feld in verspanntem SiGe bei einer Temperatur von 250 K. Durchgezogene Kurven: Germaniumgehalt 30%, gestrichelte Kurven: Germaniumgehalt 0%.

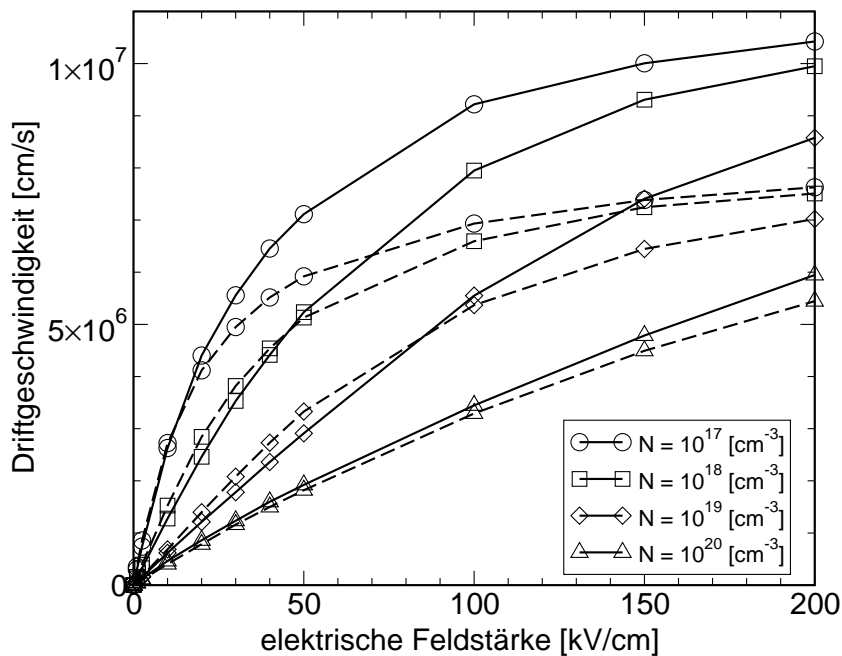


Abbildung 6.14: Driftgeschwindigkeit der Löcher (Majoritäten) in Abhängigkeit vom elektrischen Feld in verspanntem SiGe bei einer Temperatur von 300 K. Durchgezogene Kurven: Germaniumgehalt 30%, gestrichelte Kurven: Germaniumgehalt 0%.

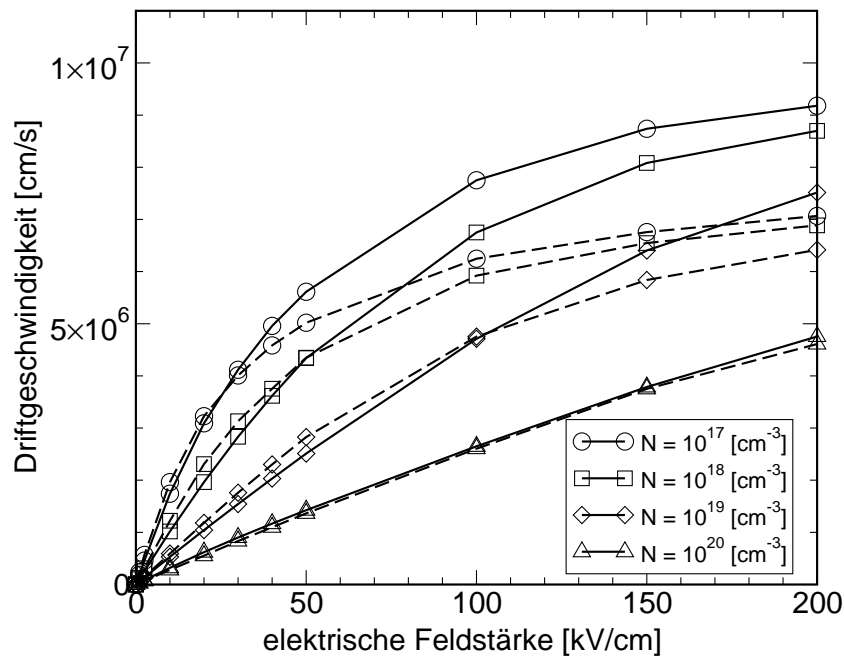


Abbildung 6.15: Driftgeschwindigkeit der Löcher (Majoritäten) in Abhängigkeit vom elektrischen Feld in verspanntem SiGe bei einer Temperatur von 400 K. Durchgezogene Kurven: Germaniumgehalt 30%, gestrichelte Kurven: Germaniumgehalt 0%.

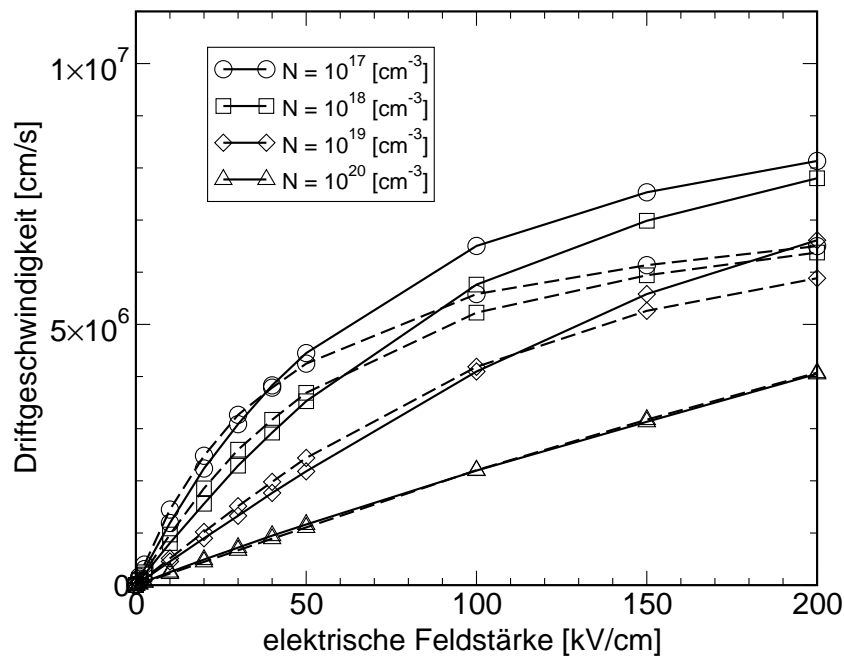


Abbildung 6.16: Driftgeschwindigkeit der Löcher (Majoritäten) in Abhängigkeit vom elektrischen Feld in verspanntem SiGe bei einer Temperatur von 500 K. Durchgezogene Kurven: Germaniumgehalt 30%, gestrichelte Kurven: Germaniumgehalt 0%.

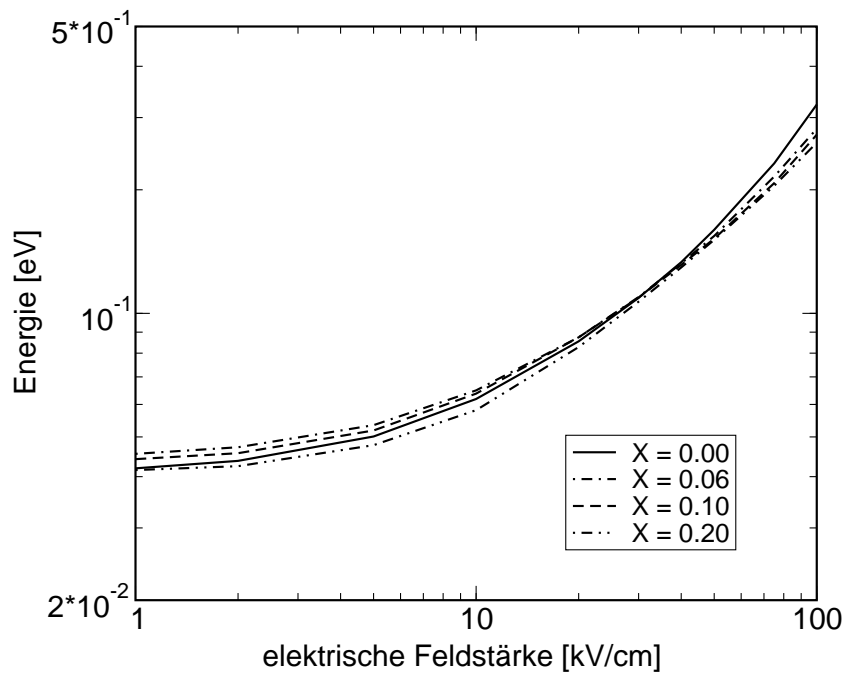


Abbildung 6.17: Mittlere Energie der Elektronen (Majoritäten) in Abhängigkeit vom elektrischen Feld in verspanntem SiGe bei einer Temperatur von 300 K.

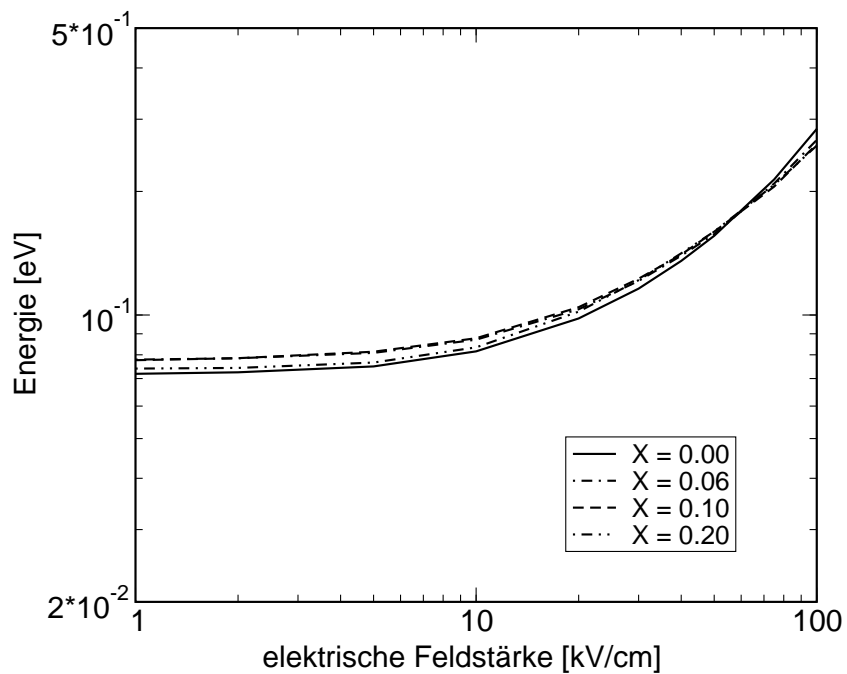


Abbildung 6.18: Mittlere Energie der Elektronen (Majoritäten) in Abhängigkeit vom elektrischen Feld in verspanntem SiGe bei einer Temperatur von 500 K.

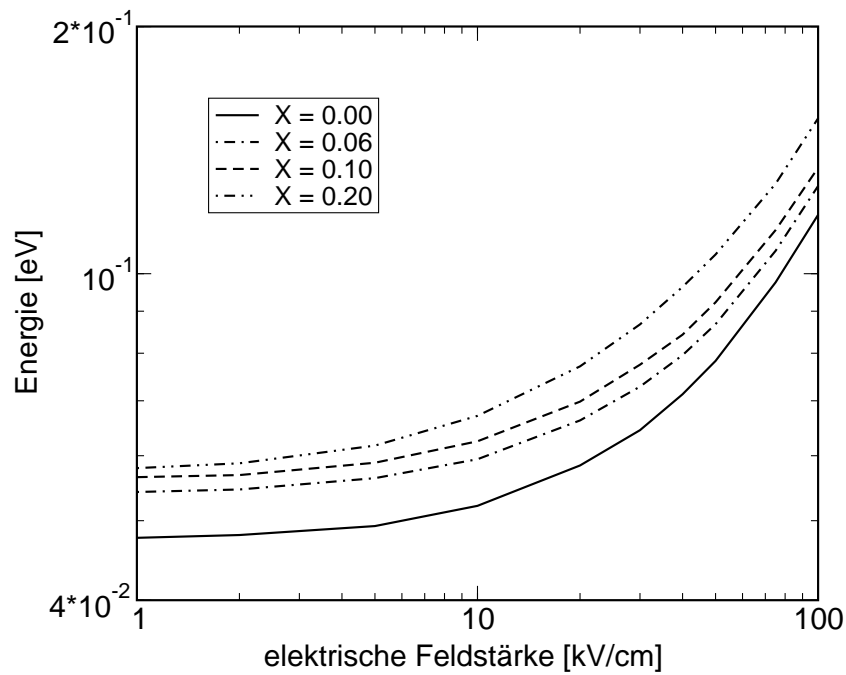


Abbildung 6.19: Mittlere Energie der Löcher (Majoritäten) in Abhängigkeit vom elektrischen Feld in verspanntem SiGe bei einer Temperatur von 300 K.

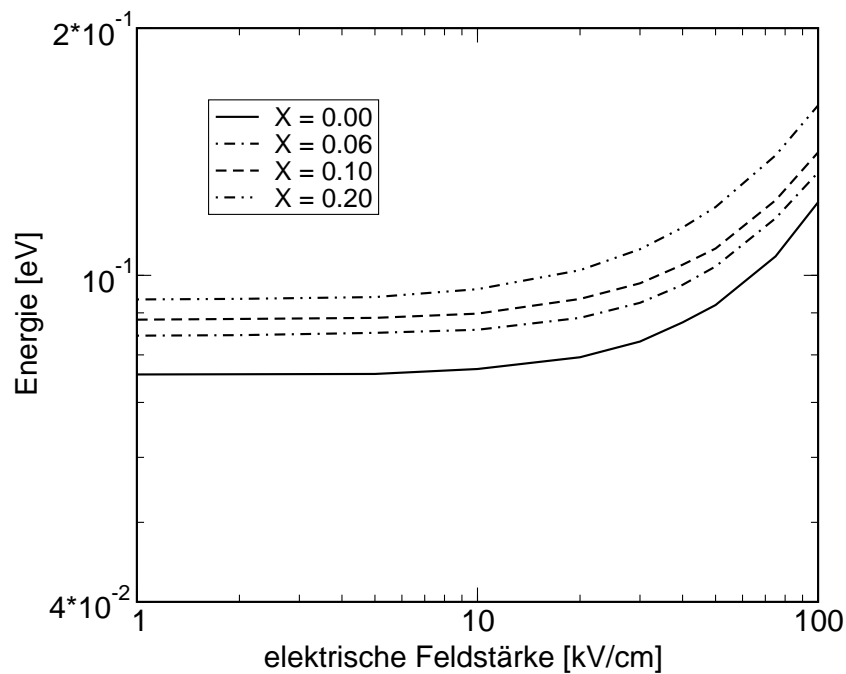


Abbildung 6.20: Mittlere Energie der Löcher (Majoritäten) in Abhängigkeit vom elektrischen Feld in verspanntem SiGe bei einer Temperatur von 500 K.

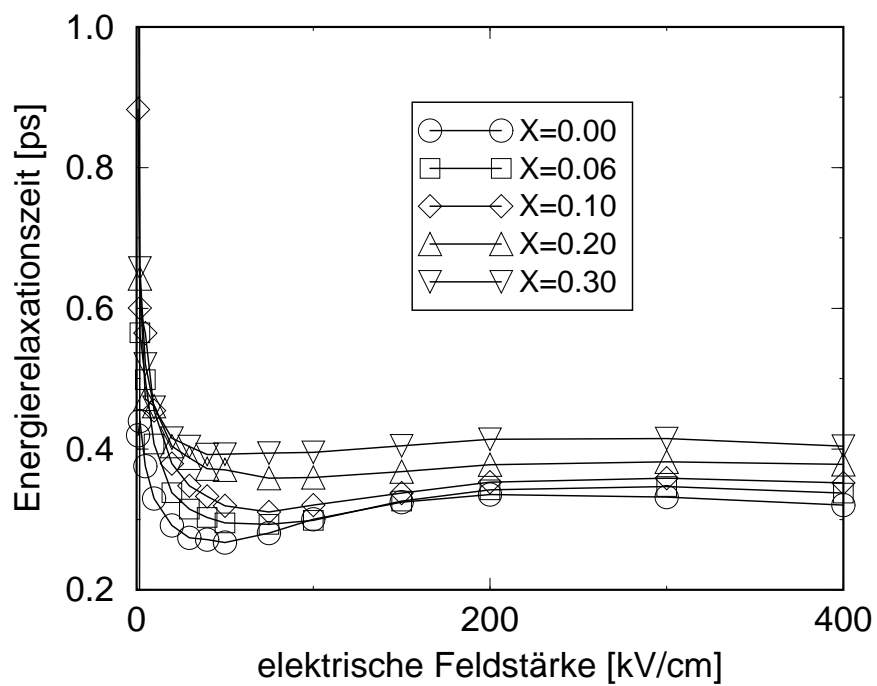


Abbildung 6.21: Energierelaxationszeit der Elektronen (Majoritäten) in Abhängigkeit vom elektrischen Feld in verspanntem SiGe bei einer Temperatur von 300 K.

7 Optimierung der B/C–Diode eines HBTs

Im letzten Zwischenbericht wurde bereits die aktuelle Modellstruktur eines HBTs des Projektpartners TEMIC, Heilbronn vorgestellt, die in der Zwischenzeit für umfangreiche Mixed–Level–Device/Circuit–Simulationen einer Leistungsverstärkerstufe genutzt wurde. Damit wurden für verschiedene Frequenzen des Eingangssignals sowie Ausgangsanpassungen Simulationsergebnisse für den periodisch eingeschwungenen Zustand erzielt. Diese Ergebnisse umfassen u. a. die Leistungsverstärkung, den Wirkungsgrad, Intermodulationsprodukte dritter Ordnung sowie den örtlichen Verlauf der Generationsrate im HBT.

Nachfolgend werden zunächst die Ergebnisse früherer Zwischenberichte zusammengefaßt, bevor die Mixed–Level–Simulationsergebnisse dargestellt werden.

7.1 Modellstruktur und Verifikation

Abbildung 7.1 zeigt die aktuell verwendete Simulationsstruktur, wie sie im fünften Zwischenbericht vorgestellt wurde. Details sind dort zu finden. Abbildung 7.2 faßt die Modellverifikation zusammen.

7.2 Schaltung eines Mobilfunk–Leistungsverstärkers

In Abbildung 7.3 ist die Schaltung des Mobilfunk–Leistungsverstärkers zu sehen, wie sie im dritten Zwischenbericht erstmals vorgestellt wurde. Inzwischen ergaben sich kleinere Veränderungen an den Parametern, wie z. B. bei der Frequenz des Eingangssignals und den Werten der Gleichspannungsquellen, weshalb alle Schaltungsparameter in Tabelle 7.2 noch einmal zusammengefaßt sind. In diese Schaltung wurde das im fünften Zwischenbericht vorgestellte HBT–Modell mit den Kontaktwiderständen

$$R_E = 6 \Omega, \quad R_B = 40 \Omega, \quad R_C = 0 \quad (7.1)$$

eingefügt, die entsprechend den Gesamtmitterflächen der einzelnen Transistoren nach Tabelle 7.2 skaliert wurden.

7.3 Mixed–Level–Simulationsergebnisse

Für die Mixed–Level–Simulation des Leistungsverstärkers wurden die Transistoren aus Rechenzeitgründen mit dem Drift/Diffusions–Modell beschrieben. Bei der transienten Simulation wurde eine ausreichende Anzahl von Erregungszyklen bis zum Erreichen des periodisch eingeschwungenen Zustandes abgewartet. Dann wurden aus der letzten Signalperiode per Fourierreihenentwicklung die zur Wirkleistungsberechnung nötigen Gleichanteile sowie Zeiger bei der Grundschiwingung und höheren Harmonischen bestimmt.

	$C_1 = 5 \text{ pF}$	$C_1 = 10 \text{ pF}$	$C_1 = 20 \text{ pF}$
$f = 0.95 \text{ GHz}$	—	—	Abb. 7.4
$f = 1.9 \text{ GHz}$	Abb. 7.7	Abb. 7.8	Abb. 7.5
$f = 3.8 \text{ GHz}$	—	—	Abb. 7.6

Tabelle 7.1: Übersicht der durchgeführten Simulationen

Um weiterhin Simulationszeit einzusparen, wurden bei der Zeitschrittsteuerung nur die Schrittweitevorgaben des Schaltungsmodells, nicht jedoch des numerischen Bauelementmodells berücksichtigt. Daß dieses Vorgehen tatsächlich zu einer erheblichen Einsparung von Zeitschritten ohne erkennbaren Genauigkeitsverlust führt, wurde bereits in [64] gezeigt.

Tabelle 7.1 ist zu entnehmen, in welchen Abbildungen welche Simulationsergebnisse zu finden sind. Nachfolgend werden die Ergebnisse mit Bezug auf die einzelnen Teilabbildungen (a)...(f) näher beschrieben. Die Ergebnisse wurden in kleinerem Umfang auch in [65] veröffentlicht.

(a) Power Sweep. Die Teilabbildung zeigt über der Eingangsleistung P_{in} der Grundschwingung (f) die Ausgangsleistungen P_{out} der Grundschwingung und höherer Harmonischer (2nd, 3rd), die Leistungsverstärkung G der Grundschwingung sowie den auf die Grundschwingung bezogenen Wirkungsgrad (Power-added efficiency, PAE). Der in der Bildunterschrift angegebene 1 dB-Kompressionspunkt wurde mit Hilfe von Polynominterpolation aus den simulierten $P_{\text{in}}/P_{\text{out}}$ -Datenpunkten bestimmt.

In der Standardkonfiguration mit $f = 1.9$ GHz und $C_1 = 20$ pF werden von der Schaltung $P_{\text{out}} = 27$ dBm bei $P_{\text{in}} = 19$ dBm erwartet. Der maximale Wirkungsgrad von 55 % sollte 3...4 dB rechts vom 1 dB-Kompressionspunkt liegen. Insgesamt stimmt die Simulation mit diesen Vorgaben sehr gut überein.

(b) Intermodulationsprodukte. Die hier gezeigten Intermodulationsprodukte dritter Ordnung wurden mit der einfachen Methode zur Hüllkurvenanalyse gewonnen, die in [66] beschrieben wird und ausschließlich die $P_{\text{in}}/P_{\text{out}}$ -Kurve ohne weitere Phaseninformation verwendet. In den Plots werden die $IM3$ in dBc (c: „carrier“) angegeben, womit ausgedrückt wird, wie weit die Intermodulationsprodukte unterhalb der Trägerschwingung liegen. Eine sinnvolle Bewertung dieser Ergebnisse erfordert die Festlegung eines maximal tolerierbaren $IM3$ -Niveaus, aus dem sich dann eine maximale Eingangsleistung ergibt. In der Praxis ist oft ein Wert von $IM3_{\text{max}} = -20 \dots -30$ dBc üblich.

(c, d) Basisstrom und Stoßionisationsintegral. Für zwei verschiedene Eingangsleistungen, einmal in der Nähe des maximalen Wirkungsgrades (c), das andere Mal bei der maximal simulierten Eingangsleistung (d), wird der Basisstrom mit der über das gesamte Bauelement integrierten Generationsrate über eine Periode im periodisch eingeschwungenen Zustand verglichen. Hier kann beurteilt werden, inwieweit Stoßionisation im Bauelement den Basisstrom und damit den Arbeitspunkt des Transistors in der Schaltung beeinflusst, da zu erwarten ist, daß die im Kollektorbereich generierten Löcher über den Basiskontakt abfließen. Offenbar ist nur im Fall (d) ein Einfluß auf den Basisstrom erkennbar; allerdings würde die Schaltung in der Praxis nie in dieser Region betrieben werden, in der sowohl eine starke Leistungskompression als auch ein niedriger Wirkungsgrad vorliegen. Nahe dem PAE -Maximum kann man den Einfluß der Stoßionisation vernachlässigen. Daher steht zu vermuten, daß die Schaltung bezüglich dieser leistungsbegrenzenden Nebenbedingung aggressiver ausgelegt werden könnte.

(e, f) Generationsraten im Bauelement. Die Abbildungen zeigen einen eindimensionalen Schnitt durch den Transistor an der in Abbildung 7.1(a) markierten Stelle. Ent-

lang dieses Schnitts wird über eine Periode im periodisch eingeschwungenen Zustand die räumliche Verteilung der Generationsrate wiedergegeben. Die horizontalen Linien teilen die Bilder von oben nach unten in Basis, Launcher Layer, niedrig dotierten Kollektor und Anstieg des Buried Layer. Die Verteilung der Generationsrate korrespondiert gut mit den Beobachtungen beim Stoßionisationsintegral (Vergleich (c) \leftrightarrow (e) und (d) \leftrightarrow (f)).

7.4 Zusammenfassung

Unter Verwendung der bisher entwickelten Modellstruktur eines HBTs des Projektpartners TEMIC wurden Mixed-Level-Device/Circuit-Simulationen einer Leistungsverstärkerstufe durchgeführt. Die dabei erzielten Simulationsergebnisse entsprechen den an die Schaltung gestellten Erwartungen. Variationen der Erregungsfrequenz und der Ausgangsanpassung bestätigen anhand der erzielten Ausgangsleistung und des maximalen Wirkungsgrades, daß die Standardversion des vorliegenden Entwurfes nahe am Optimum ist. Die Auswertung der Bauelement-internen Stoßionisationsrate und ihres Einflusses auf den Basisstrom ergeben im interessierenden Betriebsbereich des Verstärkers nahe dem maximalen Wirkungsgrad einen vernachlässigbaren Einfluß auf das Schaltungsverhalten.

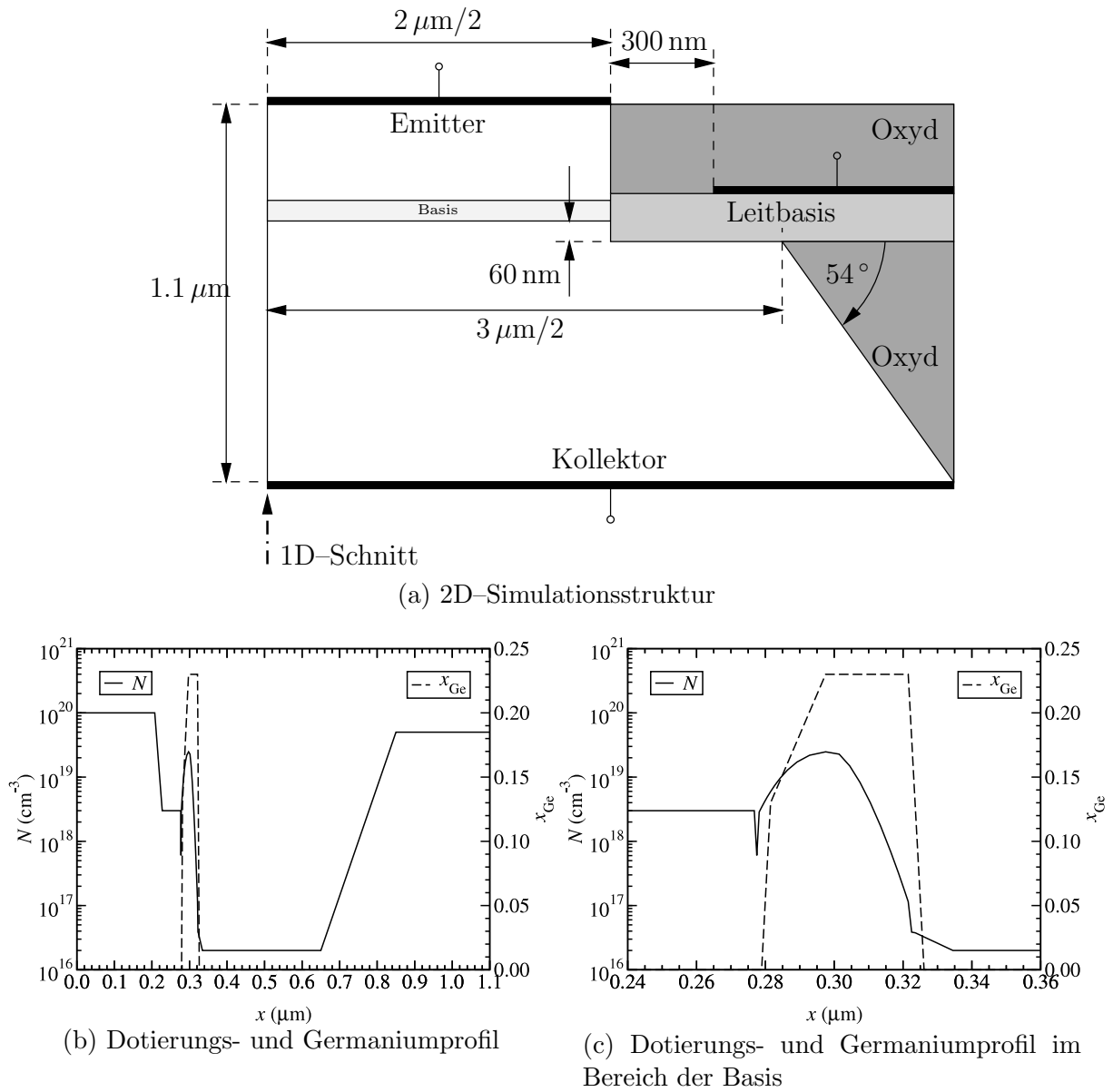
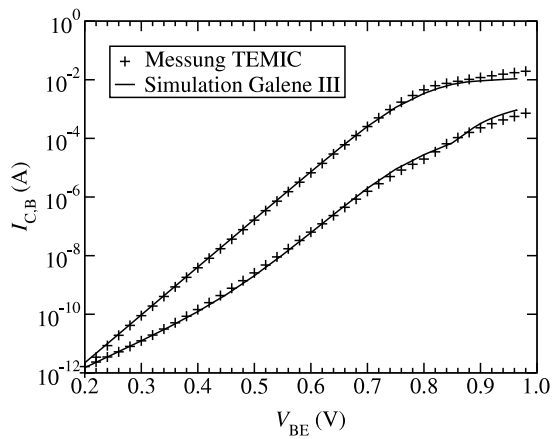
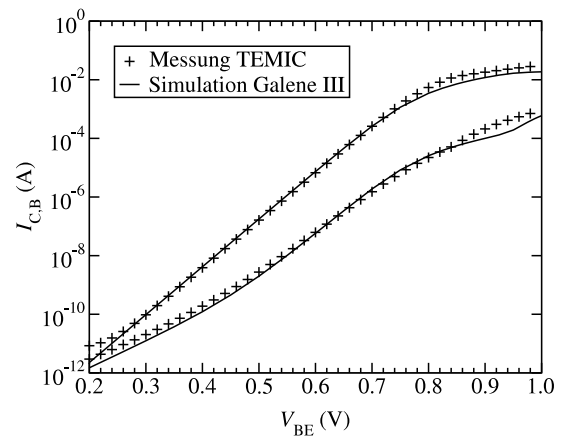


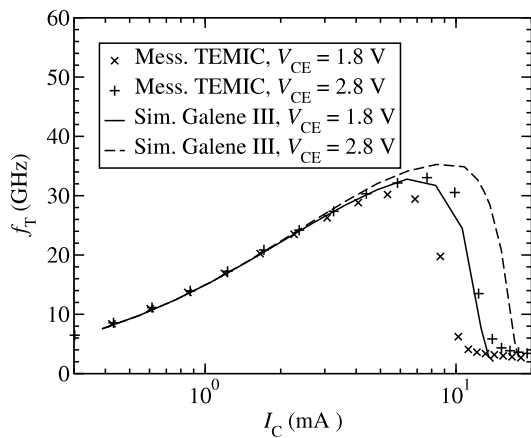
Abbildung 7.1: Aktuelle Simulationsstruktur



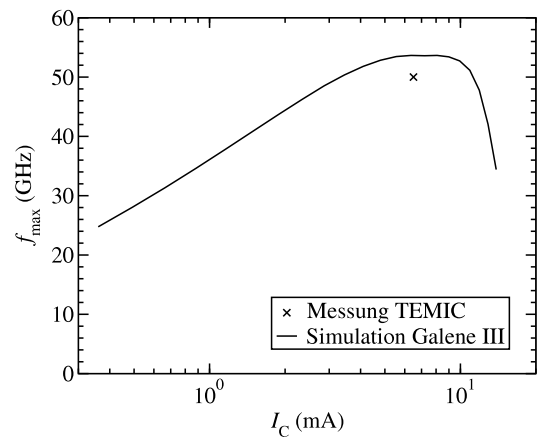
(a) GUMMEL-Plot bei $V_{CB} = 0\text{ V}$



(b) GUMMEL-Plot bei $V_{CB} = 2\text{ V}$



(c) f_T



(d) f_{\max} bei $V_{CE} = 2.8\text{ V}$

Abbildung 7.2: Modellverifikation bei $\vartheta = 31.9\text{ }^\circ\text{C}$, **HD**

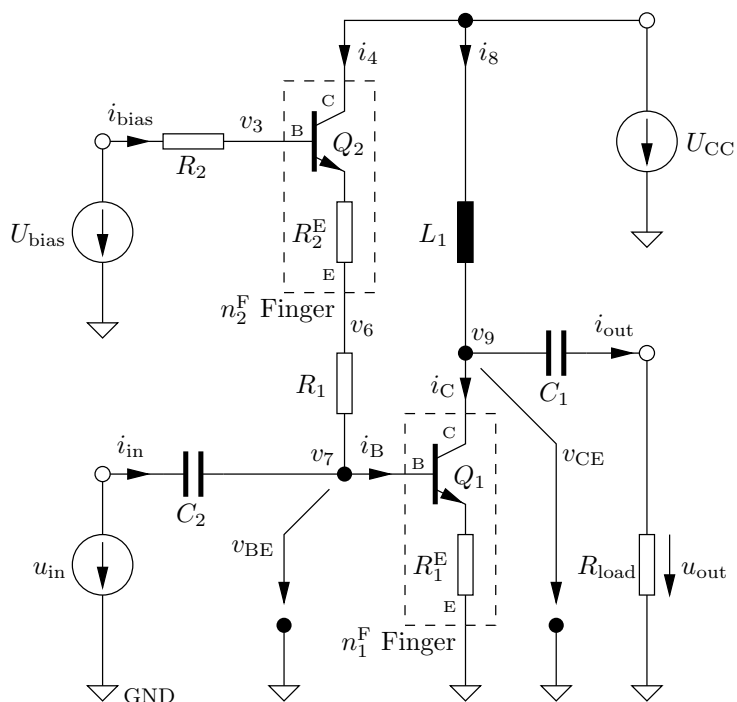
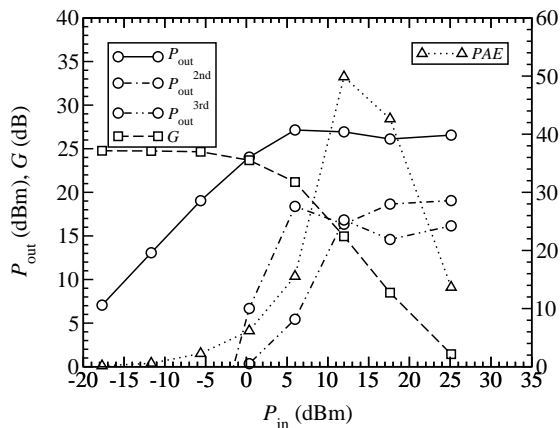


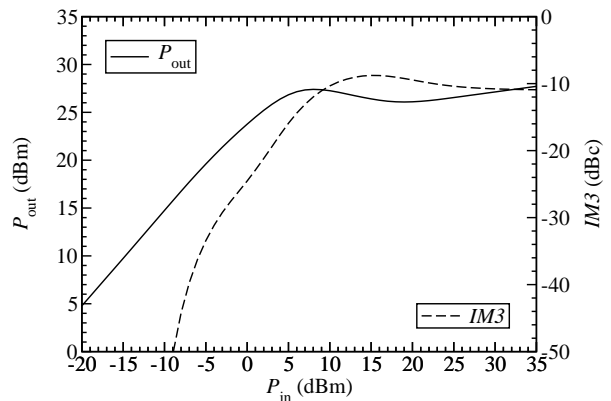
Abbildung 7.3: Schaltung des Leistungsverstärkers

$n_1^F = 60$	$n_2^F = 3$	$U_{CC} = 3.6 \text{ V}$
$A_1^E = n_1^F \cdot 2 \cdot 30 \mu\text{m}^2$	$A_2^E = n_2^F \cdot 2 \cdot 20 \mu\text{m}^2$	$U_{\text{bias}} = 2.1 \text{ V}$
$R_1^E = \frac{1}{n_1^F} \cdot 4 \Omega$	$R_2^E = 0$	$u_{\text{in}} = U_{\text{in,S}} \cdot \sin(2\pi ft)$
$R_1 = 50 \Omega$	$R_2 = 1 \text{ k}\Omega$	$U_{\text{in,S}} = 0.05, 0.1, \dots, 6.4 \text{ V}$
$C_1 = 5, 10, 20 \text{ pF}$	$C_2 = 20 \text{ pF}$	$f = 0.95, 1.9, 3.8 \text{ GHz}$
$L_1 = 10 \text{ nH}$	$R_{\text{load}} = 7 \Omega$	

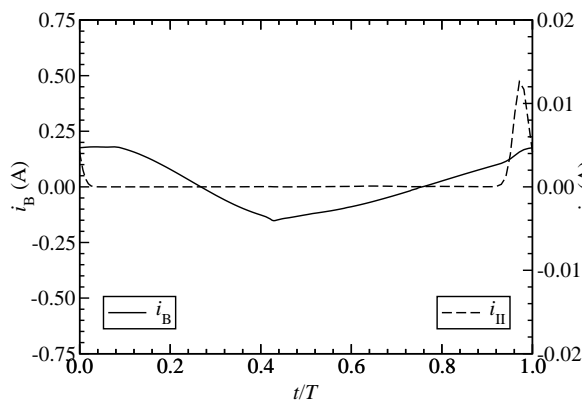
Tabelle 7.2: Parameter der Verstärkerschaltung



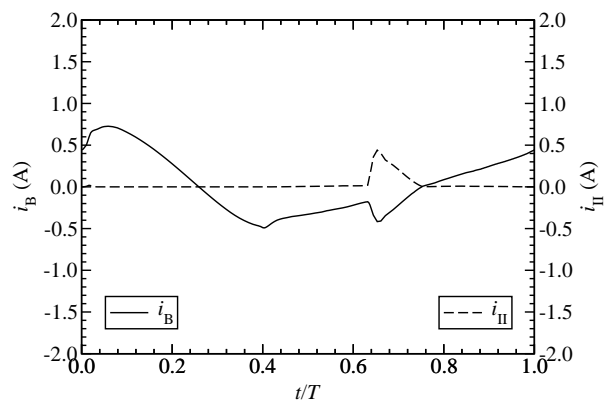
(a) Power Sweep. $P_{in}^{1dB} = 0.3$ dBm, $P_{out}^{1dB} = 24.0$ dBm



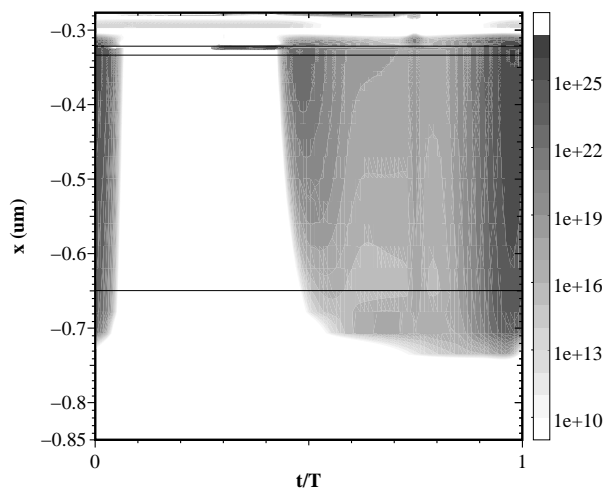
(b) Intermodulationsprodukte



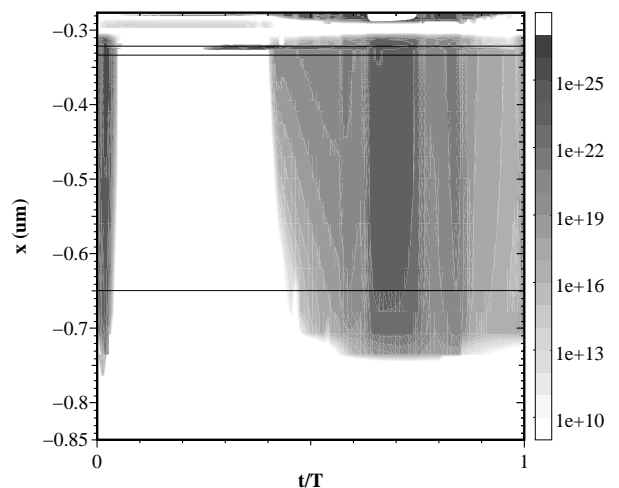
(c) Basisstrom und Stoßionisationsintegral bei max. PAE



(d) Basisstrom und Stoßionisationsintegral bei max. P_{in}

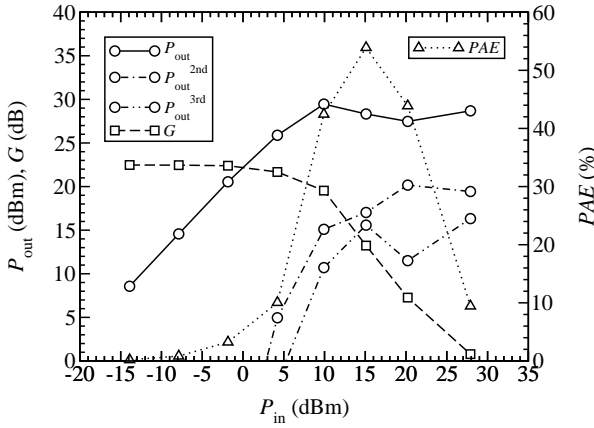


(e) Generationsrate ($\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}$) bei max. PAE

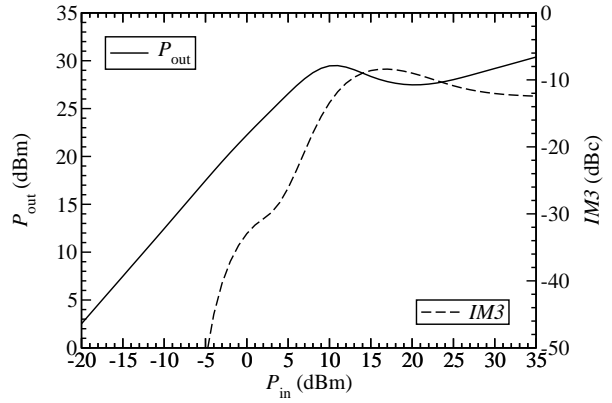


(f) Generationsrate ($\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}$) bei max. P_{in}

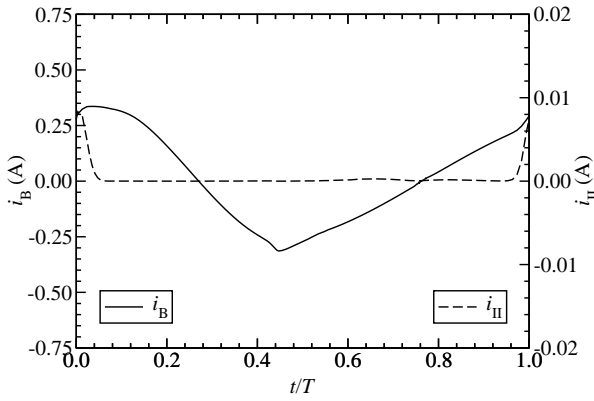
Abbildung 7.4: Simulationsergebnisse zum Leistungsverstärker, $f = 0.95$ GHz, $C_1 = 20$ pF



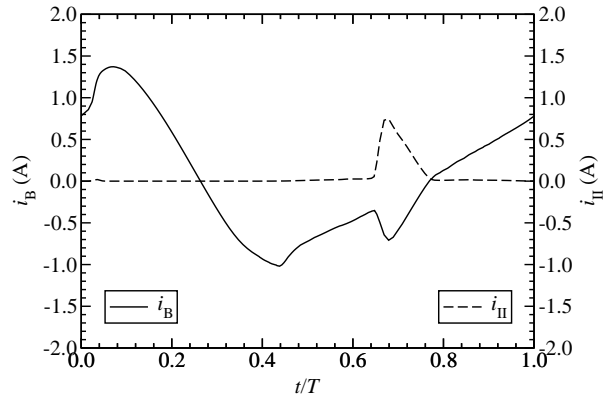
(a) Power Sweep. $P_{in}^{1\text{dB}} = 6.0\text{ dBm}$, $P_{out}^{1\text{dB}} = 27.4\text{ dBm}$



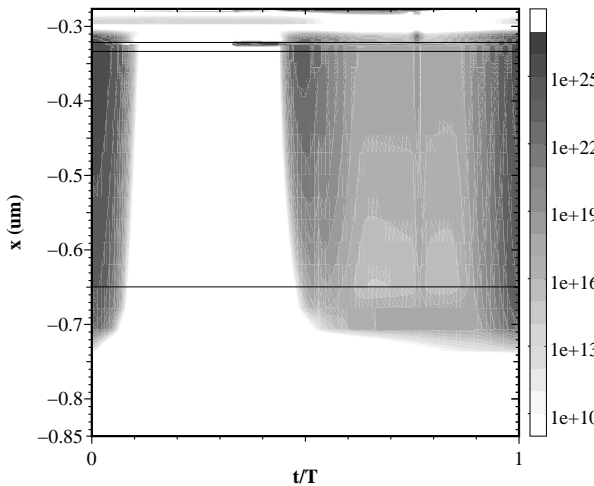
(b) Intermodulationsprodukte



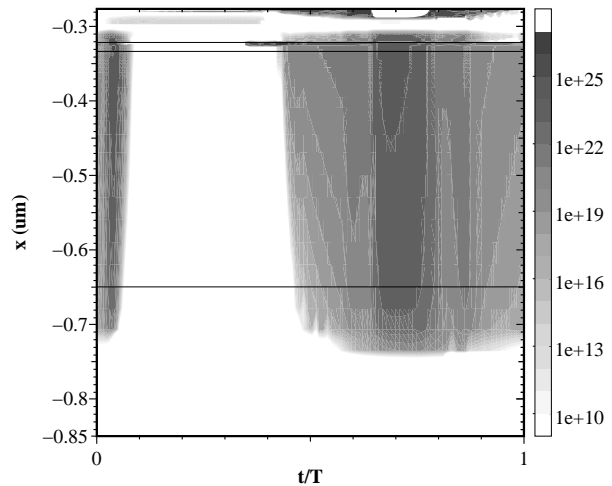
(c) Basisstrom und Stoßionisationsintegral bei max. PAE



(d) Basisstrom und Stoßionisationsintegral bei max. P_{in}

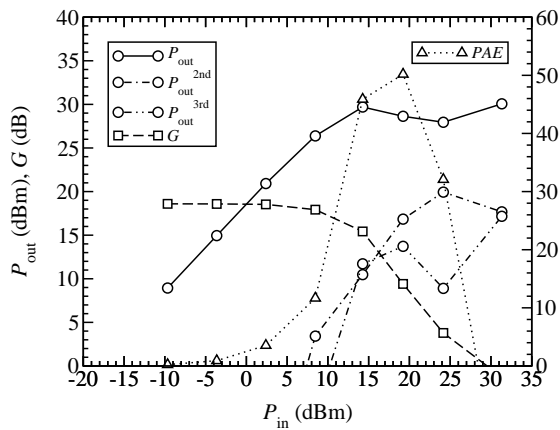


(e) Generationsrate ($\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}$) bei max. PAE

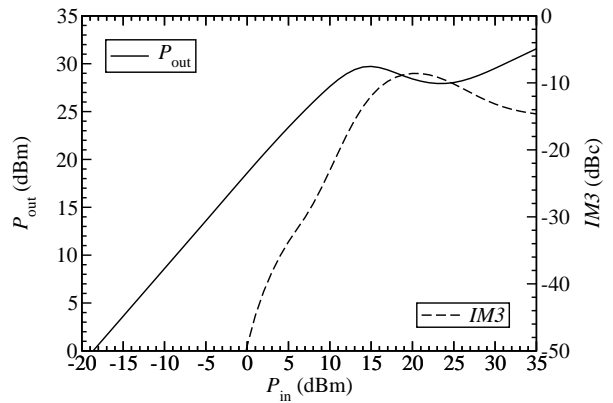


(f) Generationsrate ($\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}$) bei max. P_{in}

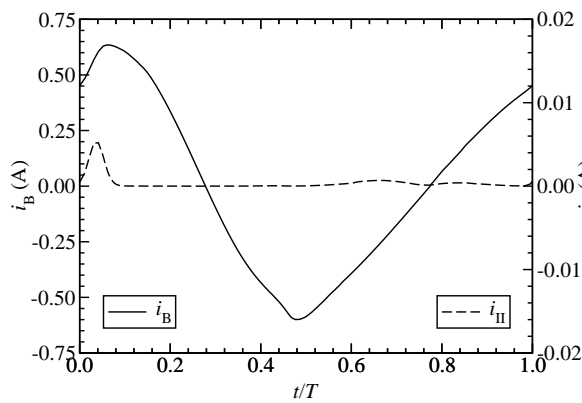
Abbildung 7.5: Simulationsergebnisse zum Leistungsverstärker, $f = 1.9\text{ GHz}$, $C_1 = 20\text{ pF}$



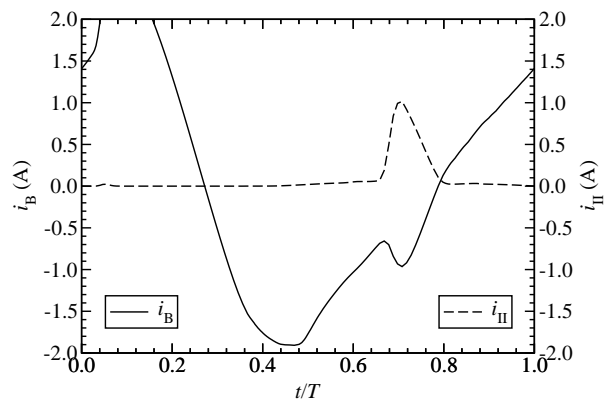
(a) Power Sweep. $P_{in}^{1\text{dB}} = 10.4\text{ dBm}$, $P_{out}^{1\text{dB}} = 28.0\text{ dBm}$



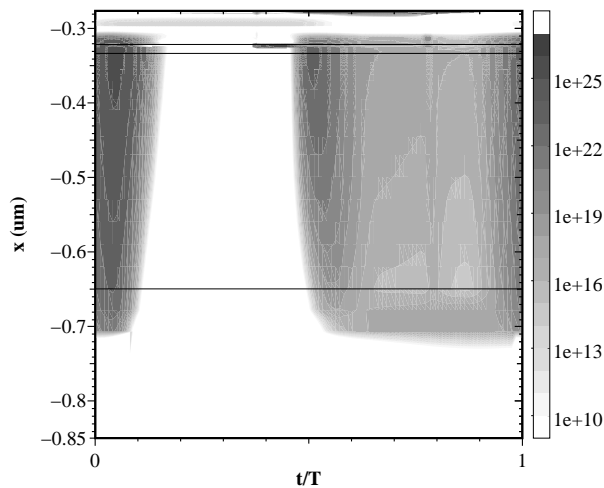
(b) Intermodulationsprodukte



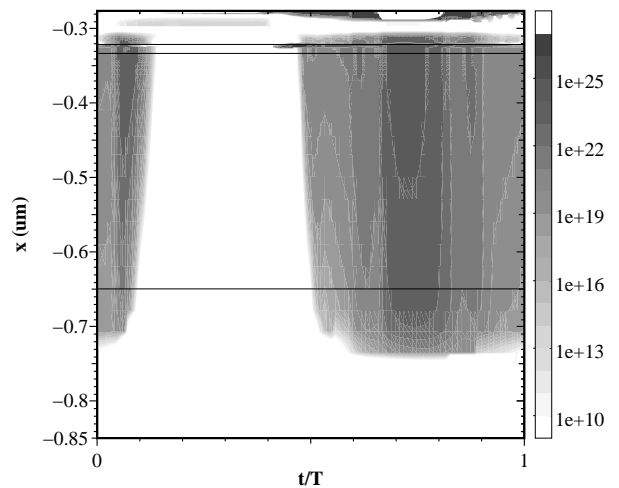
(c) Basisstrom und Stoßionisationsintegral bei max. PAE



(d) Basisstrom und Stoßionisationsintegral bei max. P_{in}

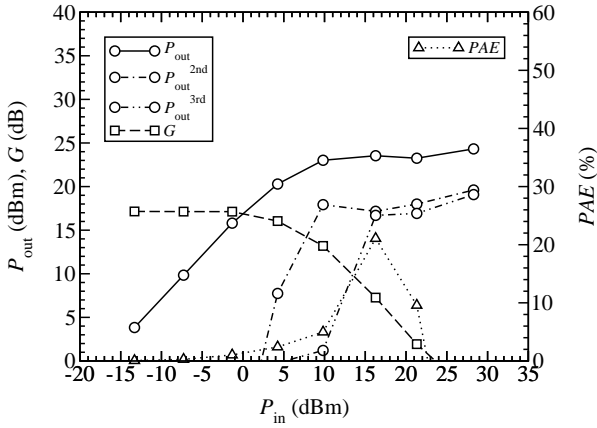


(e) Generationsrate ($\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}$) bei max. PAE

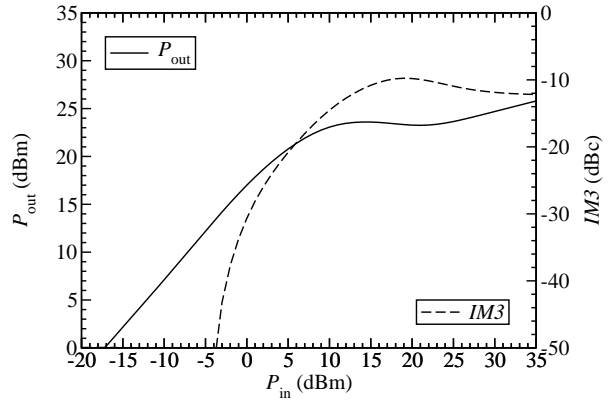


(f) Generationsrate ($\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}$) bei max. P_{in}

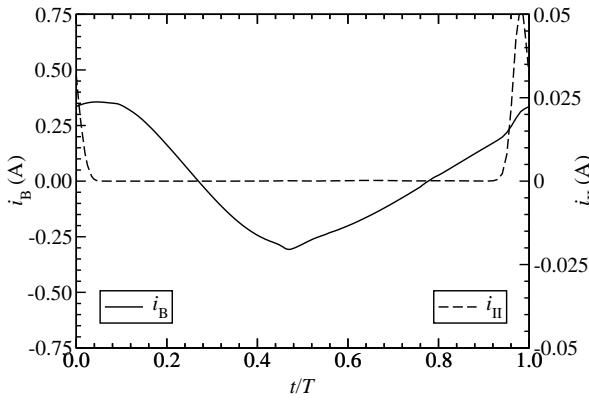
Abbildung 7.6: Simulationsergebnisse zum Leistungsverstärker, $f = 3.8\text{ GHz}$, $C_1 = 20\text{ pF}$



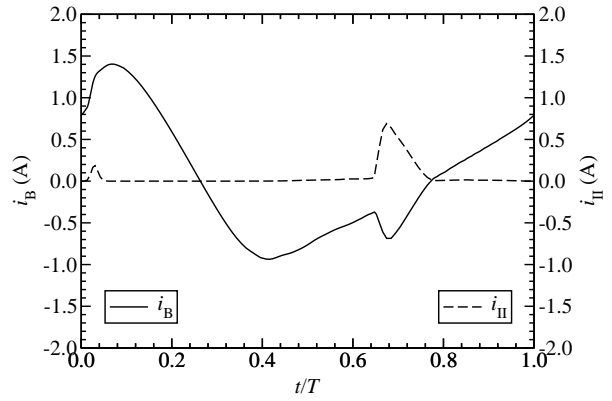
(a) Power Sweep. $P_{in}^{1\text{dB}} = 4.1\text{ dBm}$, $P_{out}^{1\text{dB}} = 20.2\text{ dBm}$



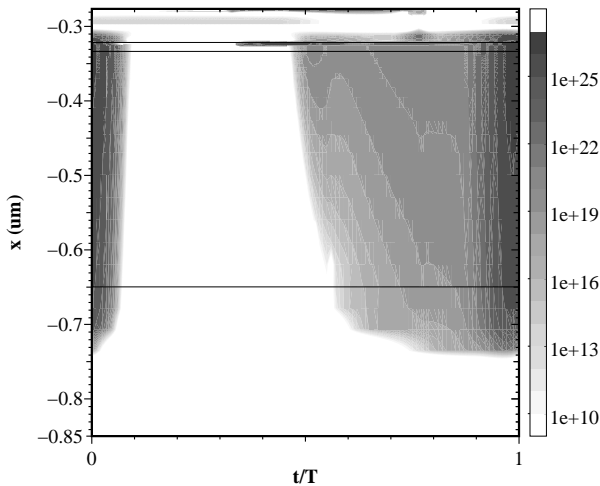
(b) Intermodulationsprodukte



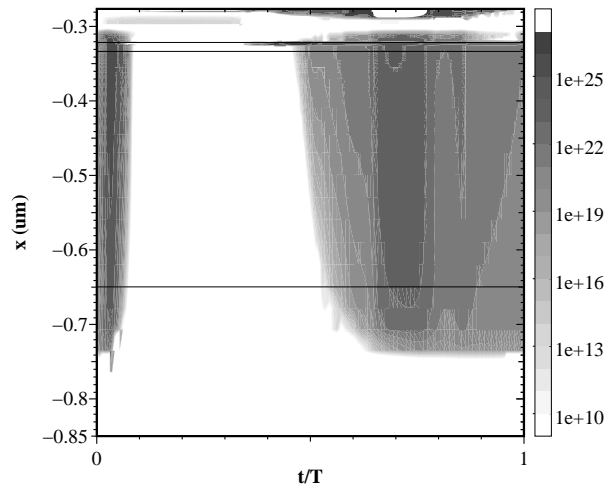
(c) Basisstrom und Stoßionisationsintegral bei max. PAE



(d) Basisstrom und Stoßionisationsintegral bei max. P_{in}

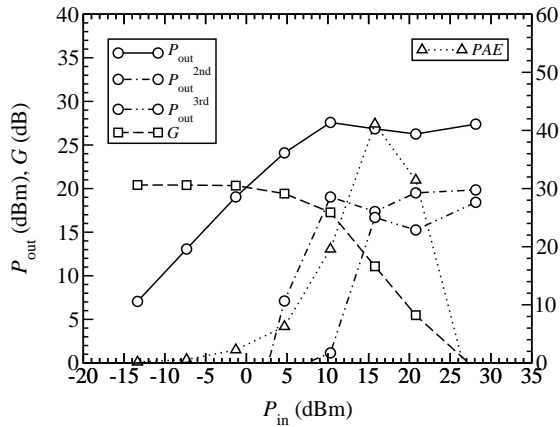


(e) Generationsrate ($\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}$) bei max. PAE

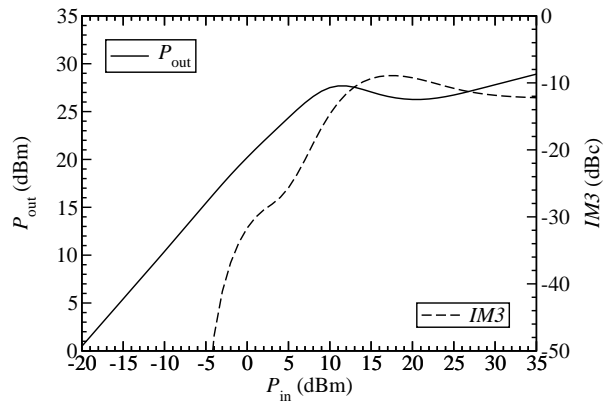


(f) Generationsrate ($\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}$) bei max. P_{in}

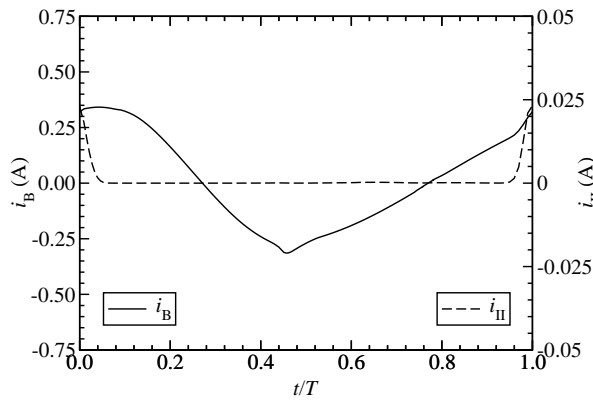
Abbildung 7.7: Simulationsergebnisse zum Leistungsverstärker, $f = 1.9\text{ GHz}$, $C_1 = 5\text{ pF}$



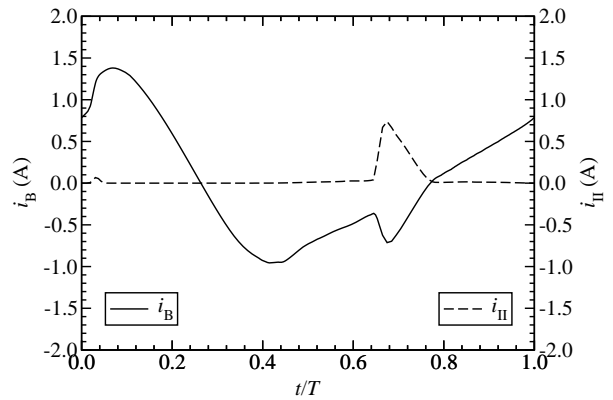
(a) Power Sweep. $P_{in}^{1\text{dB}} = 5.0\text{ dBm}$, $P_{out}^{1\text{dB}} = 24.4\text{ dBm}$



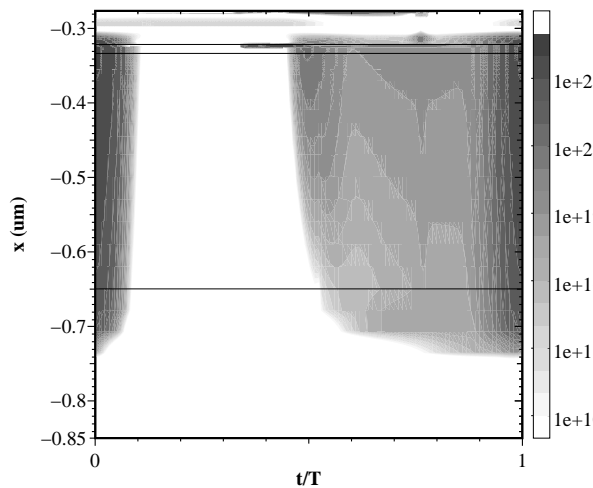
(b) Intermodulationsprodukte



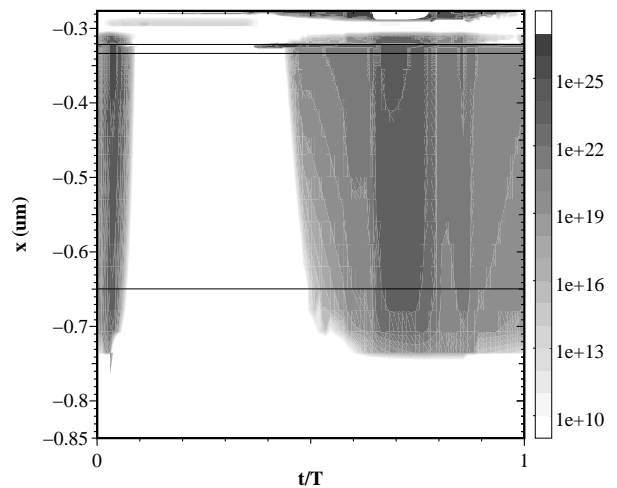
(c) Basisstrom und Stoßionisationsintegral bei max. PAE



(d) Basisstrom und Stoßionisationsintegral bei max. P_{in}



(e) Generationsrate ($\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}$) bei max. PAE



(f) Generationsrate ($\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}$) bei max. P_{in}

Abbildung 7.8: Simulationsergebnisse zum Leistungsverstärker, $f = 1.9\text{ GHz}$, $C_1 = 10\text{ pF}$

Abbildungen

2.1	Die Brillouinzone	13
2.2	Pseudopotential–Bandstruktur des unverspannten Si	13
2.3	Diskretisierung des ersten Leitungsbandes	17
2.4	Diskretisierung des ersten Valenzbandes	17
2.5	Symmetrisches Gitter der LUWK–Ebene	18
2.6	Tetraeder mit Äquienergieebene	19
2.7	Äquienergieflächen im dreidimensionalen Impulsraum	20
2.8	Zustandsdichte der Elektronen	21
2.9	Konturplot des schweren Lochbandes im unverspannten <i>Si</i>	22
2.10	Konturplot des schweren Lochbandes im verspannten <i>SiGe</i>	22
2.11	Bandenergien der Valenzbänder im unverspannten <i>Si</i> und verspannten <i>SiGe</i>	23
2.12	Zustandsdichte der Löcher für Silizium	23
2.13	Zustandsdichte der Löcher für verspanntes <i>SiGe</i>	23
2.14	Dotierungsabhängige <i>Anpassung</i> des Störstellenstreumodells von Elektronen an Beweglichkeitsmessungen bei Raumtemperatur für Minoritäten von Sproul <i>et al.</i> [33], Dziewior und Silber [34] und Swirhun <i>et al.</i> [35] sowie für Majoritäten von Thurber <i>et al.</i> [36].	30
2.15	Dotierungsabhängige <i>Anpassung</i> des Störstellenstreumodells von Löchern an Beweglichkeitsmessungen bei Raumtemperatur für Minoritäten von Sproul <i>et al.</i> [33] und Swirhun <i>et al.</i> [37] (zum Vergleich sind auch die Daten von Dziewior und Silber [34] gezeigt) sowie für Majoritäten von Thurber <i>et al.</i> [38, 39]	30
2.16	Anpassungsfaktor für das Störstellenmodell zur Reproduktion der experimentellen a) Elektronen– und b) Löcherbeweglichkeit.	31
2.17	Stoßionisationskoeffizient für Elektronen	31
2.18	Bandgap in verspanntem SiGe	33
2.19	Bandgap in relaxiertem SiGe	33
2.20	Leitungsband– und Valenzbandoffset im verspannten <i>SiGe</i>	35
2.21	Typ–I–Heteroübergang	35
2.22	Effektive Zustandsdichte N_v und N_c	36
3.1	Inverse Elektronenmasse für verspanntes <i>SiGe</i>	40
3.2	Inverse Löchermasse für verspanntes <i>SiGe</i>	40
3.3	Elektronenbeweglichkeit für undotiertes verspanntes <i>SiGe</i>	41
3.4	Löcherbeweglichkeit für verspanntes <i>SiGe</i>	41
3.5	Dotierungsabhängige Elektronenbeweglichkeit für unverspanntes <i>SiGe</i>	42
3.6	Dotierungsabhängige Löcherbeweglichkeit für unverspanntes <i>SiGe</i>	43
3.7	Driftgeschwindigkeiten der Elektronen für verspanntes <i>Si</i>	43
3.8	Driftgeschwindigkeiten der Löcher für verspanntes <i>Si</i>	44
4.1	Zur Indizierung der Quadrantengrößen	46
4.2	Monte–Carlo–Algorithmus	48
4.3	Grenzbedingung für Heteroübergänge	49
4.4	Dotierung der N^+NN^+ -Struktur	50
4.5	Potential, Elektronendichte und –energie der N^+NN^+ -Struktur für 0,0 und 1,0 Volt	50
4.6	Relative Besetzungswahrscheinlichkeit der drei Hauptachsen in %	52

4.7	53
4.8	Dotierungsprofil der HBT-Struktur	53
4.9	Potential, Elektronendichte, -geschwindigkeit und -temperatur des HBTs bei $U_{CB} = 1.0\text{ V}$, $U_{BE} = 0.75\text{ V}$.	54
4.10	Simulationsgitter der HBT-Struktur	55
4.11	Dotierungsprofil der HBT-Struktur	56
4.12	Germaniumprofil in der Basis der HBT-Struktur	56
4.13	Relative Besetzungswahrscheinlichkeit der transversalen und longitudinalen Bandstrukturtälern in %	57
4.14	Potential, Elektronendichte, -geschwindigkeit und -temperatur des HBTs bei $U_{CB} = 2.0\text{ V}$, $U_{BE} = 0.75\text{ V}$.	58
4.15	Bandkantensprung des Leitungs- und Valenzbandes	60
4.16	Elektrisches Potential für $V_{CB} = 2.0\text{ V}$ und $V_{BE} = 0.65\text{ V}, 0.70\text{ V}, 0.75\text{ V}$.	60
4.17	Elektronendichte für $V_{CB} = 2.0\text{ V}$ und $V_{BE} = 0.65\text{ V}, 0.70\text{ V}, 0.75\text{ V}$.	61
4.18	Driftgeschwindigkeit der Elektronen für $V_{CB} = 2.0\text{ V}$ und $V_{BE} = 0.65\text{ V}, 0.70\text{ V}, 0.75\text{ V}$.	61
4.19	Dynamische Temperatur der Elektronen für $V_{CB} = 2.0\text{ V}$ und $V_{BE} = 0.65\text{ V}, 0.70\text{ V}, 0.75\text{ V}$.	62
4.20	Energieverteilungsfunktion der Elektronen für $V_{CB} = 2.0\text{ V}$ und $V_{BE} = 0.75\text{ V}$.	63
4.21	Potential, Elektronentemperatur und Generationsrate des HBTs bei $U_{CB} = 3.0 - -8.0\text{ V}$, $U_{BE} = 0.75\text{ V}$.	65
4.22	Vergleich der Generationsrate des HBTs bei $U_{CB} = 2.0$ und 3.0 V .	66
4.23	Vergleich der Generationsrate des HBTs bei $U_{CB} = 4.0$ und 5.0 V .	66
4.24	Vergleich der Generationsrate des HBTs bei $U_{CB} = 6.0$ und 7.0 V .	67
5.1	Germanium (getrichelt) und Dotierungsprofil des in [9] verwendeten Bauelementes	72
5.2	Transitfrequenz für das DD-, HD- und MC-Modell. Für drei ausgewählte Punkte ist zusätzlich der Verlauf der Leitungsbandkante (in eV) gezeigt.	72
5.3	Verlauf der Elektronendichte ohne Quantenpotential für das DD- und MC-Modell bei gleichem Stromniveau von etwa $0.9\text{ mA}/\mu\text{m}^2$.	73
5.4	Verlauf der Elektronendichte mit Quantenpotential für das DD- und MC-Modell bei gleichem Stromniveau von etwa $0.97\text{ mA}/\mu\text{m}^2$.	73
5.5	Verlauf der Elektronengeschwindigkeit ohne Quantenpotential für das DD- und MC-Modell bei gleichem Stromniveau von etwa $0.9\text{ mA}/\mu\text{m}^2$.	74
5.6	Verlauf der Elektronengeschwindigkeit mit Quantenpotential für das DD- und MC-Modell bei gleichem Stromniveau von etwa $0.97\text{ mA}/\mu\text{m}^2$.	74
5.7	Vergleich von $\left. \frac{dn}{dI_C} \right _{U_{CE}=\text{const}}$ für das DD-, HD- und MC-Modell bei gleichem Stromniveau von etwa $1.06\text{ mA}/\mu\text{m}^2$ ohne Berücksichtigung des Quantenpotentials.	75
5.8	Vergleich von $\left. \frac{dn}{dI_C} \right _{U_{CE}=\text{const}}$ für das DD-, HD- und MC-Modell bei gleichem Stromniveau von etwa $0.97\text{ mA}/\mu\text{m}^2$ mit Berücksichtigung des Quantenpotentials.	75
6.1	Elektronbeweglichkeiten (Majoritäten) in Abhängigkeit vom Germaniumgehalt in verspanntem SiGe.	80

6.2	Elektronbeweglichkeiten (Minoritäten) in Abhängigkeit vom Germaniumgehalt in verspanntem SiGe.	80
6.3	Löcherbeweglichkeiten (Majoritäten) in Abhängigkeit vom Germaniumgehalt in verspanntem SiGe.	81
6.4	Löcherbeweglichkeiten (Minoritäten) in Abhängigkeit vom Germaniumgehalt in verspanntem SiGe.	81
6.5	Elektronbeweglichkeiten (Majoritäten) in Abhängigkeit von der Temperatur in verspanntem SiGe.	82
6.6	Elektronbeweglichkeiten (Minoritäten) in Abhängigkeit von der Temperatur in verspanntem SiGe.	82
6.7	Löcherbeweglichkeiten (Majoritäten) in Abhängigkeit von der Temperatur in verspanntem SiGe.	83
6.8	Löcherbeweglichkeiten (Minoritäten) in Abhängigkeit von der Temperatur in verspanntem SiGe.	83
6.9	Driftgeschwindigkeit der Elektronen (Majoritäten) in Abhängigkeit vom elektrischen Feld in verspanntem SiGe bei einer Temperatur von 250 K. Durchgezogene Kurven: Germaniumgehalt 30%, gestrichelte Kurven: Germaniumgehalt 0%.	84
6.10	Driftgeschwindigkeit der Elektronen (Majoritäten) in Abhängigkeit vom elektrischen Feld in verspanntem SiGe bei einer Temperatur von 300 K. Durchgezogene Kurven: Germaniumgehalt 30%, gestrichelte Kurven: Germaniumgehalt 0%.	84
6.11	Driftgeschwindigkeit der Elektronen (Majoritäten) in Abhängigkeit vom elektrischen Feld in verspanntem SiGe bei einer Temperatur von 400 K. Durchgezogene Kurven: Germaniumgehalt 30%, gestrichelte Kurven: Germaniumgehalt 0%.	85
6.12	Driftgeschwindigkeit der Elektronen (Majoritäten) in Abhängigkeit vom elektrischen Feld in verspanntem SiGe bei einer Temperatur von 500 K. Durchgezogene Kurven: Germaniumgehalt 30%, gestrichelte Kurven: Germaniumgehalt 0%.	85
6.13	Driftgeschwindigkeit der Löcher (Majoritäten) in Abhängigkeit vom elektrischen Feld in verspanntem SiGe bei einer Temperatur von 250 K. Durchgezogene Kurven: Germaniumgehalt 30%, gestrichelte Kurven: Germaniumgehalt 0%.	86
6.14	Driftgeschwindigkeit der Löcher (Majoritäten) in Abhängigkeit vom elektrischen Feld in verspanntem SiGe bei einer Temperatur von 300 K. Durchgezogene Kurven: Germaniumgehalt 30%, gestrichelte Kurven: Germaniumgehalt 0%.	86
6.15	Driftgeschwindigkeit der Löcher (Majoritäten) in Abhängigkeit vom elektrischen Feld in verspanntem SiGe bei einer Temperatur von 400 K. Durchgezogene Kurven: Germaniumgehalt 30%, gestrichelte Kurven: Germaniumgehalt 0%.	87
6.16	Driftgeschwindigkeit der Löcher (Majoritäten) in Abhängigkeit vom elektrischen Feld in verspanntem SiGe bei einer Temperatur von 500 K. Durchgezogene Kurven: Germaniumgehalt 30%, gestrichelte Kurven: Germaniumgehalt 0%.	87

6.17	Mittlere Energie der Elektronen (Majoritäten) in Abhängigkeit vom elektrischen Feld in verspanntem SiGe bei einer Temperatur von 300 K.	88
6.18	Mittlere Energie der Elektronen (Majoritäten) in Abhängigkeit vom elektrischen Feld in verspanntem SiGe bei einer Temperatur von 500 K.	88
6.19	Mittlere Energie der Löcher (Majoritäten) in Abhängigkeit vom elektrischen Feld in verspanntem SiGe bei einer Temperatur von 300 K.	89
6.20	Mittlere Energie der Löcher (Majoritäten) in Abhängigkeit vom elektrischen Feld in verspanntem SiGe bei einer Temperatur von 500 K.	89
6.21	Energierelaxationszeit der Elektronen (Majoritäten) in Abhängigkeit vom elektrischen Feld in verspanntem SiGe bei einer Temperatur von 300 K. . .	90
7.1	Aktuelle Simulationsstruktur	94
7.2	Modellverifikation bei $\vartheta = 31.9^\circ\text{C}$, HD	95
7.3	Schaltung des Leistungsverstärkers	96
7.4	Simulationsergebnisse zum Leistungsverstärker, $f = 0.95\text{ GHz}$, $C_1 = 20\text{ pF}$.	97
7.5	Simulationsergebnisse zum Leistungsverstärker, $f = 1.9\text{ GHz}$, $C_1 = 20\text{ pF}$.	98
7.6	Simulationsergebnisse zum Leistungsverstärker, $f = 3.8\text{ GHz}$, $C_1 = 20\text{ pF}$.	99
7.7	Simulationsergebnisse zum Leistungsverstärker, $f = 1.9\text{ GHz}$, $C_1 = 5\text{ pF}$. .	100
7.8	Simulationsergebnisse zum Leistungsverstärker, $f = 1.9\text{ GHz}$, $C_1 = 10\text{ pF}$.	101

Tabellen

2.1	Anzahl der Gitterpunkte N^{knot} , Tetraeder N^{tet} und Speicherplatzbedarf . . .	18
2.2	Parameter der Phononstreuung in SiGe (<i>inter</i>)	26
2.3	Parameter der Phononstreuung in SiGe (<i>intra</i>)	27
2.4	Parameter der Legierungsstreuung	27
2.5	29
2.6	29
2.7	Parameter des temperaturabhängigen Bandgaps	32
3.1	Longitudinale Masse m_l und transversale Masse m_t	40
4.1	Statistik der Transmission und Reflektion am Heteroübergang	51
4.2	Vergleich der Rechenzeit (FB–MC und analytische MC)	53
4.3	Vergleich der simulierten und gemessenen Kollektorströme	62
4.4	67
7.1	Übersicht der durchgeführten Simulationen	91
7.2	Parameter der Verstärkerschaltung	96

Literatur

- [1] C. Jungemann, S. Yamaguchi, and H. Goto, "Efficient full band Monte Carlo hot carrier simulation for silicon devices," in *Proc. ESSDERC*, vol. 26, (Bologna), pp. 821–824, 1996.
- [2] C. Jungemann, B. Heinemann, K. Tittelbach-Helmrich, and B. Meinerzhagen, "An accurate, experimentally verified electron minority carrier mobility model for Si and SiGe," in *IEDM Tech. Dig.*, (to be presented at IEDM, San Francisco (USA)), 2000.
- [3] F. M. Bufler, P. Graf, B. Meinerzhagen, G. Fischer, and H. Kibbel, "Hole transport investigation in unstrained and strained SiGe," *J. Vac. Sci. Technol. B*, vol. 16, pp. 1667–1669, 1998.
- [4] M. Bartels, S. Decker, B. Neinhüs, K. H. Bach, A. Schüppen, and B. Meinerzhagen, "Comprehensive hydrodynamic simulation of an industrial SiGe heterobipolar transistor," in *Proc. BCTM*, (Minneapolis (Minnesota, USA)), pp. 105–108, 1999.
- [5] F. M. Bufler, P. Graf, and B. Meinerzhagen. Abschlußbericht zum BMBF–Förderungsvorhaben 01 M 2416 A: Monte-Carlo-Bauelementsimulator für Si/SiGe–Heterobipolartransistoren.
- [6] P. Graf, "Entwicklung eines Monte Carlo Bauelementsimulators für Si/SiGe–Heterobipolartransistoren," Dissertation, Universität Bremen, Bremen, 1999. (H. Utz Verlag Wissenschaft, München: 1999).
- [7] C. Jungemann, B. Meinerzhagen, S. Decker, S. Keith, S. Yamaguchi, and H. Goto, "Is physically sound and predictive modeling of NMOS substrate currents possible?," *Solid-State Electron.*, vol. 42, pp. 647–655, 1998.
- [8] C. Jungemann, S. Keith, and B. Meinerzhagen, "Full-band Monte Carlo simulation of a 0.12 μm -Si-PMOSFET with and without a strained SiGe-channel," in *IEDM Tech. Dig.*, (San Francisco (USA)), pp. 897–900, 1998.
- [9] 1. Zwischenbericht zum BMBF–Förderungsvorhaben 01 M 2416 C: Monte-Carlo-Bauelementsimulationen für verspanntes Si/SiGe und Heterobipolartransistoren.
- [10] J. R. Chelikowsky and M. L. Cohen, "Nonlocal pseudopotential calculations for the electronic structure of eleven diamond and zinc-blende semiconductors," *Phys. Rev. B*, vol. 14, pp. 556–582, 1976.
- [11] M. M. Rieger and P. Vogl, "Electronic-band parameters in strained $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ alloys on $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ substrates," *Phys. Rev. B*, vol. 48, pp. 14276–14287, 1993.
- [12] M. V. Fischetti and S. E. Laux, "Monte Carlo analysis of electron transport in small semiconductor devices including band-structure and space-charge effects," *Phys. Rev. B*, vol. 38, pp. 9721–9745, 1988.
- [13] P. D. Yoder, J. M. Higman, J. Bude, and K. Hess, "Monte Carlo simulation of hot electron transport in Si using a unified pseudopotential description of the crystal," *Semicond. Sci. Technol.*, vol. 7, pp. B357–B359, 1992.

-
- [14] S. Keith, "Transportuntersuchungen mit Monte-Carlo Methoden bei der Verwendung einer vollständigen Bandstruktur," Diplomarbeit, RWTH Aachen, 1993.
- [15] T. Kunikiyo, M. Takenaka, Y. Kamakura, M. Yamaji, H. Mizuno, M. Morifuji, K. Taniguchi, and C. Hamaguchi, "A Monte Carlo simulation of anisotropic electron transport in silicon including full band structure and anisotropic impact-ionization model," *J. Appl. Phys.*, vol. 75, pp. 297–312, 1994.
- [16] J. Bude and R. K. Smith, "Phase-space simplex Monte Carlo for semiconductor transport," *Semicond. Sci. Technol.*, vol. 9, pp. 840–843, 1994.
- [17] E. X. Wang, M. D. Giles, S. Yu, F. A. Leon, A. Hiroki, and S. Odanaka, "Recursive M-tree method for 3-D adaptive tetrahedral mesh refinement and its application to Brillouin zone discretization," in *Proc. SISPAD*, (Tokyo), pp. 67–68, Sept. 1996.
- [18] B. Fischer and K. R. Hofmann, "Discretization of the Brillouin zone by an Octree/Delaunay method with application to full-band Monte Carlo transport simulation," in *Proc. SISPAD*, (Leuven (Belgium)), pp. 181–184, 1998.
- [19] C. Jungemann, S. Keith, M. Bartels, and B. Meinerzhagen, "Efficient full-band Monte Carlo simulation of silicon devices," *IEICE Trans. on Electronics*, vol. E82-C, no. 6, pp. 870–879, 1999.
- [20] C. Jungemann, S. Keith, and B. Meinerzhagen, "Full-band Monte Carlo device simulation of a Si/SiGe-HBT with a realistic Ge profile," *IEICE Trans. on Electronics*, vol. E83-C, no. 8, pp. 1228–1234, 2000.
- [21] S. Keith, C. Jungemann, S. Decker, B. Neinhüs, M. Bartels, and B. Meinerzhagen, "Full-band Monte Carlo device simulation of a Si/SiGe-HBT with a realistic Ge profile," in *Proc. SISPAD*, (Kyoto (Japan)), pp. 219–222, Sept. 1999.
- [22] O. Madelung, *Introduction to Solid State Theory*. Berlin: Springer, 1978.
- [23] R. Braunstein, A. R. Moore, and F. Herman, "Intrinsic optical absorption in germanium-silicon alloys," *Phys. Rev.*, vol. 109, pp. 695–710, 1958.
- [24] H. Ibach and H. Lüth, *Festkörperphysik: Einführung in die Grundlagen*. Berlin: Springer, 1981.
- [25] W. Brauer and H. W. Streitwolf, *Theoretische Grundlagen der Halbleiterphysik*. Braunschweig: Vieweg, 2nd ed., 1977.
- [26] C. Jacoboni and L. Reggiani, "The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with application to covalent materials," *Rev. Mod. Phys.*, vol. 55, pp. 645–705, 1983.
- [27] C. Jacoboni and P. Lugli, *The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation*. Wien: Springer, 1989.
- [28] F. M. Bufler, "Full-Band Monte Carlo Simulation of Electrons and Holes in Strained Si and SiGe," Dissertation, Universität Bremen, Bremen, 1997. (H. Utz Verlag Wissenschaft, München: 1998).

- [29] J. W. Harrison and J. R. Hauser, "Theoretical calculations of electron mobility in ternary III-V compounds," *J. Appl. Phys.*, vol. 47, pp. 292–300, 1976.
- [30] H. Brooks, "Scattering by ionized impurities in semiconductors," *Phys. Rev.*, vol. 83, p. 879, 1951.
- [31] F. M. Bufler, P. Graf, S. Keith, and B. Meinerzhagen, "Full band Monte Carlo investigation of electron transport in strained Si grown on $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ substrates," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 70, pp. 2144–2146, 1997.
- [32] D. M. Caughey and R. E. Thomas, "Carrier mobilities in silicon empirically related to doping and field," *Proc. IEEE*, vol. 55, pp. 2192–2193, 1967.
- [33] A. B. Sproul, M. A. Green, and A. W. Stephens, "Accurate determination of minority carrier- and lattice scattering-mobility in silicon from photoconductance decay," *J. Appl. Phys.*, vol. 72, pp. 4161–4171, 1992.
- [34] J. Dziewior and D. Silber, "Minority-carrier diffusion coefficients in highly doped silicon," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 35, pp. 170–172, 1979.
- [35] S. E. Swirhun, Y.-H. Kwark, and R. M. Swanson, "Measurement of electron lifetime and electron mobility, band-gap narrowing in heavily doped p-type silicon," in *IEDM Tech. Dig.*, pp. 24–27, 1986.
- [36] W. R. Thurber, R. L. Mattis, and Y. M. Liu, "Resistivity-dopant density relationship for phosphorus-doped silicon," *J. Electrochem. Soc.*, vol. 127, pp. 1807–1812, 1980.
- [37] S. E. Swirhun, J. A. del Alamo, and R. M. Swanson, "Measurement of hole mobility in heavily doped n-type silicon," *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 7, pp. 168–171, 1986.
- [38] W. R. Thurber and B. S. Carpenter, "Boron determination in silicon by the nuclear track technique," *J. Electrochem. Soc.*, vol. 125, pp. 654–657, 1978.
- [39] W. R. Thurber, R. L. Mattis, and Y. M. Liu, "Resistivity-dopant density relationship for boron-doped silicon," *J. Electrochem. Soc.*, vol. 127, pp. 2291–2294, 1980.
- [40] R. Thoma, H. J. Peifer, W. L. Engl, W. Quade, R. Brunetti, and C. Jacoboni, "An improved impact-ionization model for high-energy electron transport in Si with Monte Carlo simulation," *J. Appl. Phys.*, vol. 69, pp. 2300–2311, 1991.
- [41] D. J. DiMaria, T. N. Theis, J. R. Kirtley, F. L. Pesavento, and D. W. Dong, "Electron heating in silicon dioxide and off-stoichiometric silicon dioxide films," *J. Appl. Phys.*, vol. 57, pp. 1214–1238, 1985.
- [42] R. van Overstraeten and H. de Man, "Measurement of the ionization rates in diffused silicon p-n junctions," *Solid-State Electron.*, vol. 13, pp. 583–608, 1970.
- [43] M. A. Green, "Intrinsic concentration, effective densities of states, and effective mass in silicon," *J. Appl. Phys.*, vol. 67, pp. 2944–2954, 1990.

- [44] D. J. Robbins, L. T. Canham, S. J. Barnett, A. D. Pitt, and P. Calcott, "Near-band-gap photoluminescence from pseudomorphic $Si_{1-x}Ge_x$ single layers on silicon," *J. Appl. Phys.*, vol. 71, pp. 1407–1414, 1992.
- [45] J. C. Bean, "Silicon-based semiconductor heterostructures: Column IV bandgap engineering," *Proc. IEEE*, vol. 80, pp. 571–587, 1992.
- [46] D. Nuernbergk, "Simulation des Transportverhaltens in Si/Si_{1-x}Ge_x/Si-Heterobipolartransistoren," Dissertation, Technische Universität Ilmenau, Ilmenau, 1999. (H. Utz Verlag Wissenschaft, München: 1999).
- [47] J. Weber and M. I. Alonso, "Near-band-gap photoluminescence of Si-Ge alloys," *Phys. Rev. B*, vol. 40, pp. 5683–5693, 1989.
- [48] R. J. E. Huetting, J. W. Slotboom, A. Pruijboom, W. B. de Boer, C. E. Timmering, and N. E. B. Cowern, "On the optimization of SiGe-base bipolar transistors," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 43, pp. 1518–1524, 1996.
- [49] A. Schüppen, U. Erben, A. Gruhle, H. Kibbel, and H. Schumacher, "Enhanced Si-Ge heterojunction bipolar transistor with 160 GHz - f_{\max} ," in *IEDM Tech. Dig.*, pp. 743–746, 1995.
- [50] R. Stratton, "Diffusion of hot and cold electrons in semiconductor barriers," *Phys. Rev.*, vol. 126, pp. 2002–2013, 1962.
- [51] C. Jungemann, "Efficient Full-Band Monte Carlo Simulation for Device Engineering," Habilitationsschrift, Universität Bremen, 2000.
- [52] H.-J. Peifer, "Monte-Carlo Simulation des Hochenergietransports von Elektronen in submikron MOS-Strukturen," doctor thesis, RWTH Aachen, Aachen, 1992. Augustinus Buchhandlung.
- [53] C. Jungemann, M. Bartels, S. Keith, and B. Meinerzhagen, "Efficient methods for Hall factor and transport coefficient evaluation for electrons and holes in Si and SiGe based on a full-band structure," in *Proc. IWCE*, (Osaka (Japan)), pp. 104–107, 1998.
- [54] M. Nedjalkov and P. Vitanov, "Iteration approach for solving the Boltzmann equation with the Monte Carlo method," *Solid-State Electron.*, vol. 32, pp. 893–896, 1989.
- [55] R. Thoma, A. Emunds, B. Meinerzhagen, H. J. Peifer, and W. L. Engl, "Hydrodynamic equations for semiconductors with nonparabolic bandstructures," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 38, pp. 1343–1352, 1991.
- [56] C. Jungemann, S. Decker, R. Thoma, W.-L. Engl, and H. Goto, "Phase space multiple refresh: a general purpose statistical enhancement technique for Monte Carlo device simulation," *IEEE J. Tech. Comp. Aided Design*, no. 2, 1997.
- [57] H. Kim, H. S. Min, T. W. Tang, and Y. J. Park, "An extended proof of the Ramo-Shockley theorem," *Solid-State Electron.*, vol. 34, pp. 1251–1253, 1991.

-
- [58] P. D. Yoder, K. Gärtner, U. Krumbein, and W. Fichtner, "Optimized terminal current calculation for Monte Carlo device simulation," *IEEE Trans. Computer-Aided Des.*, vol. 16, pp. 1082–1087, 1997.
- [59] C. Jungemann and B. Meinerzhagen, "Efficiency and stochastic error of Monte Carlo device simulations," in *IEDM Tech. Dig.*, (to be presented at IEDM, San Francisco (USA)), 2000.
- [60] A. Schüppen, H. Dietrich, U. Seiler, H. von der Ropp, and U. Erben, "A SiGe RF technology for mobile communication systems," *Microwave Engineering Europe*, vol. June, pp. 39–46, 1998.
- [61] J. M. Higman, K. Hess, C. G. Hwang, and R. W. Dutton, "Coupled Monte Carlo-drift diffusion analysis of hot-electron effects in MOSFET's," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 36, pp. 930–937, 1989.
- [62] H. Tsuchiya and T. Miyoshi, "Quantum transport modeling of ultrasmall semiconductor devices," *IEICE Trans. on Electronics*, vol. E82-C, no. 6, pp. 880–888, 1999.
- [63] 5. Zwischenbericht zum BMBF-Förderungsvorhaben 01 M 2416 C: Monte-Carlo-Bau-elementsimulationen für verspanntes Si/SiGe und Heterobipolartransistoren.
- [64] M. Bartels and B. Meinerzhagen, "Investigation of time step control for the mixed-level device/circuit simulation of SiGe bipolar microwave power amplifiers," in *Proc. SCEE (to be published)*, (Warnemünde (Germany)), 2000.
- [65] M. Bartels and B. Meinerzhagen, "Design of RF power amplifiers based on mixed-level device/circuit simulation," in *ITG-Fachbericht "Mikroelektronik für die Informationstechnik"*, vol. 162, (Berlin/Offenbach (Germany)), pp. 51–54, VDE Verlag, 2000.
- [66] S. C. Cripps, *RF Power Amplifiers for Wireless Communications*. Boston, Massachusetts: Artech House, 1999.