

# 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Carlo device and bulk simulators for strained SiGe structures, previously developed in the BMBF project 01M2416A, have been replaced by an experimentally verified and computationally efficient full band Monte Carlo simulator.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

<b>Zusammenfassung</b>	<b>5</b>
<b>Veröffentlichungen</b>	<b>9</b>
<b>1 Full-Band-Monte-Carlo-Bauelementsimulator</b>	<b>11</b>
1.1 Einführung . . . . .	11
<b>2 Bandstruktur von <math>Si_{1-x}Ge_x</math>-Legierungen</b>	<b>12</b>
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
<b>3 Full-Band-Monte-Carlo-Simulation homogener Transportparameter</b>	<b>37</b>
3.1 Ohmsche Beweglichkeiten . . . . .	37
3.2 Massentensor . . . . .	38
3.3 Driftgeschwindigkeiten . . . . .	42
<b>4 Full-Band-Monte-Carlo-Simulationen von SiGe-HBTs</b>	<b>44</b>
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
<b>5 Genauigkeitsprüfung des DD- und HD-Modells für HBTs</b>	<b>69</b>
5.1 Tunneleffekte . . . . .	69
5.2 Fazit . . . . .	70
<b>6 Transportparametersimulation für verspanntes SiGe</b>	<b>77</b>
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

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

## 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 Bauelementsimulation 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.