

Mark Isler

---

**Hochfeld-Transporteffekte in  
Heterostruktur-Feldeffekttransistoren  
und ihr Einfluss  
auf das Hochfrequenzverhalten**

---



Cuvillier Verlag Göttingen

**Hochfeld-Transporteffekte in  
Heterostruktur-Feldeffekttransistoren  
und ihr Einfluss  
auf das Hochfrequenzverhalten**

Vom Promotionsausschuss  
der Technischen Universität Hamburg-Harburg  
zur Erlangung des akademischen Grades

**Doktor-Ingenieur**  
genehmigte Dissertation

von  
**Mark Isler**  
aus Hamburg

**2003**

## **Bibliografische Information Der Deutschen Bibliothek**

Die Deutsche Bibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.ddb.de> abrufbar.

1. Aufl. - Göttingen : Cuvillier, 2003

Zugl.: Hamburg-Harburg, Univ., Diss., 2003

ISBN 3-89873-717-9

Berichterstatter:     1. Prof. Dr.–Ing. K. Schünemann  
                          2. Prof. Dr.–Ing. W. Krautschneider  
                          3. Prof. Dr. rer. nat. K. Heime

Vorsitzender des

Prüfungsausschusses: Prof. Dr. rer. nat. U. Killat

Tag der mündlichen Prüfung: 28.03.2003

© CUVILLIER VERLAG, Göttingen 2003

Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen

Telefon: 0551-54724-0

Telefax: 0551-54724-21

[www.cuvillier.de](http://www.cuvillier.de)

Alle Rechte vorbehalten. Ohne ausdrückliche Genehmigung des Verlages ist es nicht gestattet, das Buch oder Teile daraus auf fotomechanischem Weg (Fotokopie, Mikrokopie) zu vervielfältigen.

1. Auflage, 2003

Gedruckt auf säurefreiem Papier

ISBN 3-89873-717-9

---

# Danksagung

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Arbeitsbereich Hochfrequenztechnik der Technischen Universität Hamburg-Harburg. Dazu beigetragen hat eine Vielzahl von Personen auf direkte und indirekte Weise. Aufgrund der schwer überschaubaren Vielzahl von Beiträgen der letzteren Art kann diese Danksagung keinen Anspruch auf Vollständigkeit erheben. Was mir bleibt, ist zumindest der Versuch, Vollständigkeit anzustreben.

Herrn Prof. Klaus Schünemann, dem Leiter des Arbeitsbereichs Hochfrequenztechnik, gebührt mein Dank für die Förderung dieser Arbeit sowie für den Gestaltungsraum während der Arbeit, der entscheidend für die Entwicklung der physikalischen Modelle war. Eine weitere, wichtige Voraussetzung für das Gelingen dieser Arbeit waren die Arbeiten von Herrn Dipl.-Phys. Dennis Liebig sowie die zu Beginn der Arbeit mit ihm geführten zahlreichen Diskussionen. Ihm gilt deshalb mein besonderer Dank. Im Übrigen sei allen auf dem Gebiet der Halbleitersimulation tätig gewesenen, ehemaligen Institutsmitglieder gedankt, die mit Ihren Arbeiten in gewisser Weise zu dieser Arbeit beigetragen haben.

Herrn Prof. W. Krautschneider und Herrn Prof. K. Heime danke ich für die bereitwillige Übernahme und schnelle Durchführung des Korreferates.

Herrn C. Gässler sowie Herrn C. Wölk vom Daimler-Chrysler Forschungszentrum in Ulm bin ich zu Dank verpflichtet für die mir zur Verfügung gestellten Messdaten an InP-HEMTs, die eine praxisnahe Validierung der Bauelementsimulation ermöglicht haben. *I would also like to thank Prof. C. R. Bolognesi and Dr. M. W. Dvorak from the Compound Semiconductor Device Laboratory (CSDL), Simon Fraser University, Burnaby, Canada, for their S-parameter measurements of InAs channel HFETs.*

Allen Kollegen am Arbeitsbereich Hochfrequenztechnik danke ich für das freundliche und produktive Arbeitsklima sowie die permanente Hilfsbereitschaft. Hervorheben möchte ich hierbei Herrn Dr.-Ing. Michael Höft und Herrn Dipl.-Ing. Bert Schumann, die in der Vergangenheit maßgeblich an einem (nahezu) reibungslosen Rechnerbetrieb beteiligt waren. In der Gegenwart ist diesbezüglich das Engagement von Frau Dipl.-Ing. Viki Müllerwiebus und Herrn Andreas Kronberger, cand. el., zu betonen. Des Weiteren möchte ich Frau Dipl.-Ing. Stefanie Hirsch, Frau Claudia Bredehöft, Frau Elke Prauß, Herrn Dipl.-Ing. Jürgen Winkelmann und Herrn Dr.-Ing. Martin Jenett für deren Hilfe und Unterstützung im Institutsalltag danken. Mein spezieller Dank gilt meinem Zimmerkollegen Herrn Dipl.-Ing. Miguel Palacios für die sehr angenehme Arbeitsatmosphäre während der letzten anderthalb Jahre.

Unverzichtbar für die Fertigstellung der Arbeit waren Frau Dipl.-Ing. Tara Schneider, Herr Dr. Felix Menden, mein Bruder Tim Isler, Rechtsreferendar, sowie meine Freundin Petra Berg,

Dipl.-Ing., die die mühevollle Aufgabe der Durchsicht des Manuskripts auf sich nahmen. Ihnen allen sei noch einmal herzlich gedankt. Zu guter Letzt möchte ich mich bei meinen Eltern Christel und Günter Isler und meiner Freundin Petra für die kontinuierliche Unterstützung während der letzten Jahre bedanken, ohne die diese Arbeit nicht möglich gewesen wäre.

Ellerbek, im April 2003.

# Inhaltsverzeichnis

Verwendete Symbole und Abkürzungen	ix
<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2 Modellierung des Ladungsträgertransports in Halbleitern</b>	<b>6</b>
2.1 Das semiklassische Bild . . . . .	6
2.1.1 Die Ein-Teilchen-Verteilungsfunktion . . . . .	6
2.1.2 Die Boltzmann-Transportgleichung . . . . .	7
2.2 Die Monte-Carlo-Methode . . . . .	11
2.2.1 Freier Flug und Streuung . . . . .	11
2.2.2 Zeit- und Ensemblemittelwerte . . . . .	13
2.3 Das Zelluläre-Automaten-Verfahren . . . . .	14
2.3.1 Diskretisierung des Wellenvektorraumes und 'ab-initio'-Berechnung der Streutabellen . . . . .	15
2.3.2 Das Mehrfachstreukonzept . . . . .	17
2.4 Modellierung der Bandstruktur und der Streumechanismen . . . . .	19
<b>3 Hochfeldtransport: Heiße Ladungsträger I</b>	<b>23</b>
3.1 Transportgrößen der Verbindungshalbleiter InAlAs, InGaAs und InP . . . . .	23
3.1.1 Driftgeschwindigkeit und mittlere Energie . . . . .	23
3.1.2 Stoßionisationsrate und Stoßionisationskoeffizient . . . . .	27
3.2 Stoßionisation der Elektronen in $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ . . . . .	31
3.2.1 Phononenunterstützte Stoßionisation . . . . .	32
3.2.2 Einfluss der Gittertemperatur auf die Stoßionisation . . . . .	41
<b>4 Hochfeldtransport: Heiße Ladungsträger II</b>	<b>46</b>
4.1 Generation und Rekombination an tiefen Störstellen . . . . .	46
4.1.1 Einfangen und Emission als Multiphononübergänge . . . . .	47

4.1.1.1	Das Konfigurationskoordinaten-Diagramm . . . . .	47
4.1.1.2	Die Multiphonon-Einfangwahrscheinlichkeit . . . . .	49
4.1.1.3	Die Multiphonon-Emissionswahrscheinlichkeit . . . . .	54
4.1.2	Berücksichtigung von Einfang- und Emissionsprozessen in der Transport- simulation . . . . .	56
4.1.3	Einfangen heißer Ladungsträger am Beispiel von InP:Fe . . . . .	59
4.1.4	Emission als phononenunterstützter Tunnelprozess . . . . .	64
4.1.4.1	Übergangsrate des phononenunterstützten Tunnelns . . . . .	64
4.1.4.2	Einfangen und Emission von Elektronen am Defekt E3 in GaAs . .	67
<b>5</b>	<b>InAlAs/InGaAs-Heterostrukturen</b>	<b>71</b>
5.1	Zweidimensionales Elektronengas (2DEG) . . . . .	71
5.1.1	Selbstkonsistente Lösung der Schrödinger- und Poissongleichung . . . . .	71
5.1.2	Energieniveaus und Wellenfunktionen des 2DEG . . . . .	73
5.2	InAlAs/InGaAs-Heterostrukturen mit variablem Indium-Anteil . . . . .	75
5.2.1	DX-Donator-Modell . . . . .	76
5.2.2	DX-Zentren im Materialsystem InAlAs . . . . .	78
<b>6</b>	<b>Simulation von InAlAs/InGaAs-HFETs</b>	<b>84</b>
6.1	Kopplung der Partikelbewegung und der Poissongleichung . . . . .	84
6.2	Ortsaufgelöste Berücksichtigung der Entartung . . . . .	90
6.2.1	Modellierung des Pauli-Prinzips . . . . .	90
6.2.2	Ohmsche Zuleitungsbereiche: Einfluss der Entartung . . . . .	93
6.3	Das Ausgangskennlinienfeld des HFET . . . . .	95
6.4	Das Hochfrequenzverhalten des HFET . . . . .	100
6.4.1	Berechnung der Hochfrequenzeigenschaften des Bauelements . . . . .	100
6.4.2	Das Kleinsignal-Ersatzschaltbild des HFET . . . . .	105
6.4.3	Vergleich der Simulationsergebnisse mit Messdaten: Streu-Parameter . . . .	108
6.4.4	Bestimmung der Frequenzgrenzen und Kleinsignalparameter . . . . .	110
6.5	Ortsaufgelöste Transportgrößen . . . . .	115
6.5.1	2D-Verteilungen im Bauelement . . . . .	115
6.5.2	Transportgrößen im Kanal . . . . .	119
6.5.3	Arbeitspunktabhängigkeit des elektrischen Feldprofils . . . . .	121
<b>7</b>	<b>Dual-Gate-HFETs</b>	<b>124</b>
7.1	Ausgangskennlinienfeld und Übertragungscharakteristik . . . . .	126

7.2	Ortsaufgelöste Transportgrößen . . . . .	128
7.2.1	Potentialverlauf bei zwei Gate-Kontakten . . . . .	128
7.2.2	Profil der mittleren Energie und Driftgeschwindigkeit im Kanal . . . . .	130
7.3	Einfluss des zweiten Gate-Kontaktes auf die HF-Eigenschaften . . . . .	133
7.3.1	Admittanz-Parameter . . . . .	133
7.3.2	Kleinsignal-Ersatzschaltbildelemente . . . . .	135
7.3.3	Frequenzgang der Verstärkung . . . . .	139
<b>8</b>	<b>Durchbruchverhalten von (InGa)As-Kanal-HFETs</b>	<b>142</b>
8.1	Ortsaufgelöste Untersuchung der Stoßionisation . . . . .	143
8.1.1	Stoßionisation im Kanal versus 'real space transfer' . . . . .	143
8.1.2	Einfluss der Gate-Spannung auf den Ort der Stoßionisation . . . . .	145
8.2	Durchbruchcharakteristik: Vergleich mit Messdaten . . . . .	147
8.3	Durchbruchverhalten bei zwei Gate-Kontakten . . . . .	150
8.3.1	Wahl der Arbeitsgeraden für maximale Ausgangsleistung: 1 Gate kontra 2 Gates	150
8.3.1.1	Bestimmung der Durchbruchspannung und der Arbeitsgeraden . . . . .	150
8.3.1.2	Bestimmung der maximalen Ausgangsleistung . . . . .	152
8.3.1.3	Dual-Gate-HFET kontra Single-Gate-HFET . . . . .	152
8.3.2	Einfluss der Stoßionisation auf die Steilheit . . . . .	156
8.4	Tunnelprozesse der Löcher . . . . .	157
8.4.1	Modellierung des Tunneleffekts . . . . .	157
8.4.2	Einfluss des Tunnelns der Löcher im Gate-Bereich . . . . .	158
8.5	Raumladungseffekt der durch Stoßionisation erzeugten Löcher . . . . .	160
8.5.1	Raumladungseffekt im Dual-Gate-HFET . . . . .	160
8.5.2	Raumladungseffekt im Single-Gate-HFET unter InAs-ähnlichen Stoßionisationsbedingungen . . . . .	165
8.6	Einfluss der Stoßionisation auf die Hochfrequenzeigenschaften . . . . .	168
8.6.1	Frequenzdispersion der Kleinsignalparameter . . . . .	168
8.6.2	Um Stoßionisationseffekte erweitertes Kleinsignal-Ersatzschaltbild . . . . .	170
8.6.3	Einfluss der Stoßionisation auf die Y-Parameter bei starkem Raumladungseffekt	175
8.6.4	Hochfrequenzverhalten von InAs-HFETs . . . . .	178
<b>9</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>184</b>
	<b>Anhang</b>	<b>189</b>
<b>A</b>	<b>Materialparameter für InGaAs, InAlAs und InP</b>	<b>189</b>



<b>B Übergangswahrscheinlichkeiten der Streuprozesse</b>	<b>191</b>
<b>C Kleinsignalmodellierung der Dual-Gate-HFET-Kaskode</b>	<b>193</b>
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>195</b>
<b>Im Rahmen dieser Arbeit entstandene Veröffentlichungen</b>	<b>209</b>

## Verwendete Symbole und Abkürzungen

$Av_n$	thermische Mittelung über vibronische Zustände $n$
$a$	Gitterkonstante
$a_B$	effektiver Bohrradius
$\mathbf{B}$	Vektor der magnetischen Induktion
$C_{ij}$	Kapazitätsmatrix
$C_{gs}$	Gate-Source-Kapazität
$C_{gd}$	Gate-Drain-Kapazität (Rückkoppelkapazität)
$C_{ds}$	Drain-Source-Kapazität
$C_{ds}^{HF}$	Drain-Source-Kapazität bei hohen Frequenzen
$C_{ds}^{LF}$	Drain-Source-Kapazität bei niedrigen Frequenzen
$c_n$	Elektronen-Einfangrate
$D(\varepsilon)$	(energieabhängige) Zustandsdichte
$\mathbf{E}$	elektrischer Feldvektor
$E$	(Gesamt-)Energie
$E_a$	Aktivierungsenergie zur Emission
$E_B$	Einfangbarriere
$E_C$	Leitungsbandkante
$E_d$	Donator-Energieniveau
$E_{DX}$	DX-Energieniveau pro Elektron
$E_F$	Ferminiveau
$E_{F,surf}$	Oberflächen-Ferminiveau
$E_G$	Bandlücke
$E_{hd}$	wasserstoffähnliches Donator-Energieniveau
$E_{HO}$	Energieniveau der Hybrid-Orbitalbindung
$E_R$	Gitter-Relaxationsenergie
$E_T$	Ionisationsenergie der tiefen Störstelle
$E_t$	Störstellen-Energieniveau
$E_{th}$	Schwellen-Energie der Stoßionisation
$E_V$	Valenzbandkante

---

$e$	Elementarladung
$e_n$	Elektronen-Emissionsrate
$F$	Betrag der elektrischen Feldstärke
$f$	Frequenz
$f_T$	Frequenzgrenze der Stromverstärkung
$f_{max}$	Frequenzgrenze der Leistungsverstärkung
$f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$	semiklassische Ein-Teilchen-Verteilungsfunktion
$\mathbf{G}$	reziproker Gittervektor
$g$	Entartungsfaktor
$g_{ds}$	Ausgangsleitwert
$g_{ds}^{HF}$	Ausgangsleitwert bei hohen Frequenzen
$g_{ds}^{LF}$	Ausgangsleitwert bei niedrigen Frequenzen
$g_m$	Steilheit
$g_{m1/2,ii}$	Leitwerte der Stoßionisation
$H$	Hamiltonoperator
$H_{21}$	Kurzschluss-Stromverstärkung
$h$	Planck'sche Konstante
$\hbar$	Planck'sches Wirkungsquantum
$I$	Strom
$I_D$	Drain-Strom
$I_G$	Gate-Strom
$I_G(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$	Überlappintegral zwischen Blochzuständen
$I_m$	Besselfunktion $m$ -ter Ordnung
$I_{particle}$	Partikelstrom
$I_{displ}$	Verschiebungsstrom
$i_{Dii}$	Kleinsignal-Stoßionisationsstrom am Drain-Kontakt
$i$	Imaginäre Einheit (Bezeichnung der Physiker)
$j$	Imaginäre Einheit (Bezeichnung der Ingenieure)
$K$	Stabilitätsfaktor
$\mathbf{k}$	Wellenvektor
$k_B$	Boltzmann-Konstante

---

$k$	Betrag des Wellenvektors
$L_d$	Drain-Zuleitungsinduktivität
$L_{Rec}$	Länge des Recessbereichs zwischen Gate(fuß) und Deckschicht
$L_G$	Gate-Länge
$L_g$	Gate-Zuleitungsinduktivität
$L_s$	Source-Zuleitungsinduktivität
$L_{tu}$	Tunnellänge
$M$	Matrizelement
$MAG$	maximale verfügbare Leistungsverstärkung
$MSG$	maximale stabile Leistungsverstärkung
$m^*$	effektive Masse
$m_e$	Elektronmasse
$N$	Anzahl der Elektronen
$N_D$	Dotierungskonzentration
$N_{DX}$	Konzentration der DX-Zentren
$N_d^+$	Konzentration ionisierter Donatoren
$N_d^0$	Konzentration neutraler Donatoren
$N_{ph}$	mittlere Phononenbesetzung
$N_t$	Konzentration tiefer Störstellen
$\mathbf{n}$	Einheitsvektor in Normalenrichtung
$n$	Index (ggf. Quantenzahl) der Energie-Eigenzustände
$n_e$	Elektronendichte
$P_{cap}$	Multiphonon-Einfangwahrscheinlichkeit (pro Zeiteinheit und Ladungsträger)
$P_{emi}$	Multiphonon-Emissionswahrscheinlichkeit (pro Zeiteinheit und Energieintervall)
$P_{max}$	maximale Ausgangsleistung
$P(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$	Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit der Streuprozesse
$Q$	normierte Gitterkoordinate
$\mathbf{q}$	Wellenvektor eines Phonons
$q$	Ladung
$R_{ii}$	Stoßionisationsrate
$R_g$	Gate-Widerstand

---

$R_{gd}$	Gate-Drain-Widerstand
$R_{gd,ii}$	Gate-Drain-Widerstand der Stoßionisation
$R_{gs}$	Gate-Source-Widerstand
$R_{gs,ii}$	Gate-Source-Widerstand der Stoßionisation
$R_d$	Drain-Widerstand
$R_s$	Source-Widerstand
$\mathbf{r}$	Ortsvektor
$S$	Huang-Rhys-Kopplungskonstante
$S_{ij}$	Streu-Parameter
$T$	absolute Temperatur
$t$	Zeit
$U$	unilaterale Leistungsverstärkung
$u$	Ionisierungsgrad tiefer Störstellen
$u_l$	longitudinale Schallgeschwindigkeit
$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$	gitterperiodischer Anteil der Blochwellenfunktion
$V$	Volumen
$V(\mathbf{r})$	potentielle Energie
$V_{GS}$	Gate-Source-Spannung
$V_{DS}$	Drain-Source-Spannung
$\mathbf{v}$	Geschwindigkeit
$v_{gs}$	Kleinsignal-Gate-Source-Spannung
$v_{dg}$	Kleinsignal-Drain-Gate-Spannung
$v_{ds}$	Kleinsignal-Drain-Source-Spannung
$W$	Gate-Weite
$Y_{ij}$	Admittanz-Parameter
$Z$	Ladungszahl (in Einheiten von $e$ )
$\alpha$	Nichtparabolizität
$\alpha_n$	Stoßionisationskoeffizient der Elektronen
$\alpha_p$	Stoßionisationskoeffizient der Löcher
$\beta$	Debye-Abschirmlänge
$\chi$	Gitter-Wellenfunktion

---

$\Delta E_C$	Leitungsbanddiskontinuität
$\Delta E_V$	Valenzbanddiskontinuität
$\Delta I_D$	Stromamplitude am Ausgang
$\Delta t$	Zeitschrittweite
$\Delta V_{DS}$	Spannungsamplitude am Ausgang
$\Delta V$	Spannungsänderung
$\epsilon$	Dielektrizitätskonstante
$\epsilon_0$	Dielektrizitätskonstante des Vakuums
$\epsilon_s$	relative statische Dielektrizitätskonstante
$\epsilon_\infty$	relative optische Dielektrizitätskonstante
$\epsilon$	Elektronen-Energie
$\lambda$	Wellenlänge
$\nu$	Phononen-Frequenz
$\omega$	Kreisfrequenz
$\phi$	elektrostatishes Potential
$\psi$	Elektronen-Wellenfunktion
$\rho$	Ladungsdichte
$\sigma$	Einfangwirkungsquerschnitt
$\tau$	Zeitkonstante
$\tau_{g2}$	mit dem zweiten Gate-Kontakt verknüpfte Zeitkonstante
$\tau_{ii}$	Zeitkonstante der Stoßionisation
2DEG	zweidimensionales Elektronengas
AlGaAs	Aluminium-Gallium-Arsenid
AlSb	Aluminium-Antimonid
FET	Feldeffekttransistor
DG-HFET	Dual-Gate-HFET
ESB	Ersatzschaltbild
Fe	Eisen
GaAs	Gallium-Arsenid
HF	Hochfrequenz

HFET	Heterostruktur-Feldeffekttransistor
Im	Imaginärteil
InAs	Indium-Arsenid
InAlAs	Indium-Aluminium-Arsenid
InGaAs	Indium-Gallium-Arsenid
InP	Indium-Phosphid
Re	Realteil
SG-HFET	Single-Gate-HFET
Si	Silizium
SiN	Silizium-Nitrid

# Kapitel 1

## Einleitung

Ein wesentliches Merkmal heutiger Gesellschaftsformen ist der steigende Austausch an Informationen jeglicher Art. Dies erfordert die Verarbeitung und Übertragung von riesigen Informationsmengen in möglichst kurzer Zeit. Die damit einhergehenden Forderungen nach hohen Übertragungsraten in der Kommunikation und nach steigender Leistungsfähigkeit der beteiligten elektronischen Schaltkreise haben in der Halbleitertechnik zur Realisierung von immer kleineren Bauelementen geführt. Während mikroelektronische Schaltkreise auf Silizium-Basis in elektronischen Geräten dominieren, sind für Anwendungen im Hochfrequenz- und Optoelektronikbereich aufgrund ihrer Materialeigenschaften Verbindungshalbleiter aus den Elementen der III. und V. Gruppe des Periodensystems besser geeignet. In der Hochfrequenztechnik beispielsweise werden für Verstärker-, Oszillator- und Mischerschaltungen rauscharme Bauelemente mit hohen Grenzfrequenzen benötigt. Dabei zählen Heterostruktur-Feldeffekttransistoren aus III-V-Verbindungshalbleitern zu den Transistoren mit den bisher höchsten Frequenzgrenzen. Die Realisierung der zugrunde liegenden Halbleiter-Heterostrukturen mit Schichtdicken von wenigen Nanometern ist durch fortwährende Verbesserung der Herstellungsverfahren ermöglicht worden. Zu nennen sind hier vor allem die MOVPE ('metalorganic vapor phase epitaxy') und MBE ('molecular beam epitaxy').

Die Herstellung von Halbleiter-Heterostrukturen hat u. a. zur Umsetzung des Konzepts der Modulationsdotierung geführt, bei dem die freien Ladungsträger und deren Dotieratome durch eine Heterobarriere räumlich voneinander getrennt sind. Durch die damit verbundene Reduzierung der Störstellenstreuung werden hohe Mobilitäten, kurze Driftzeiten und folglich hohe Grenzfrequenzen erreicht. Heterostruktur-Feldeffekttransistoren (HFET) mit einer Modulationsdotierung bezeichnet man deshalb auch als HEMT ('high electron mobility transistor') oder als MODFET ('modulation doped FET'). Die Diskontinuität im Bandverlauf der Heterostrukturen führt darüber hinaus zu einer hohen freien Ladungsträgerdichte im Kanal, die in Heterostruktur-Feldeffekttransistoren einen hohen steuerbaren Strom ermöglicht. Aufgrund der hohen Elektronenbeweglichkeit in  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$  und der hohen Leitungsbanddiskontinuität zwischen  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$  und  $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$  (ca. 0.5 eV) zeigen



Bauelemente basierend auf dem Materialsystem InAlAs/InGaAs/InP ein hohes Leistungspotential im Bereich der Hochfrequenztechnik und Optoelektronik. Die hervorragenden Hochfrequenz- und Rauscheigenschaften von InAlAs/InGaAs-HFETs sind Gegenstand zahlreicher Publikationen, siehe z. B. [1]. Im Mittelpunkt aktueller Forschung stehen auch Transistoren, die auf dem Materialsystem (InAlGa)N basieren [2, 3]. Es bleibt abzuwarten, ob diese Nitrid-basierten HFETs für vergleichbar hohe Betriebsfrequenzen geeignet sind wie InAlAs/InGaAs-HFETs.

Obwohl InAlAs/InGaAs-HFETs bereits vielfach hergestellt und charakterisiert worden sind, ist eine weitere Verbesserung und ein tieferes Verständnis dieser Transistoren erforderlich. Dies betrifft vor allem die hohen Gate-Leckströme [4], die hohen Ausgangsleitwerte [5] und die niedrigen Durchbruchspannungen [6], die diese Transistoren aufweisen. Diese Effekte beschränken die Leistungsverstärkung und die maximale Ausgangsleistung und sind zu einem erheblichen Teil der Stoßionisation der Elektronen im Kanalmaterial  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$  zuzurechnen, die durch die geringe Bandlücke dieses Materials (ca. 0.75 eV) begünstigt wird. Neben diesen Auswirkungen auf das Bauelementverhalten zeigt der Stoßionisationsprozess der Elektronen in  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$  eine anormale Abhängigkeit von der Gittertemperatur [7, 8] und der elektrischen Feldstärke [7, 9], welche bisher nicht vollständig geklärt werden konnte. Die Stoßionisation der Elektronen in  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$  und ihr Einfluss auf das elektrische Verhalten von InAlAs/InGaAs-HFETs bildet deshalb die Hauptmotivation dieser Arbeit. Diesbezügliche Einblicke wären insbesondere für das Verständnis und die Optimierung von AlSb/InAs-HFETs von großer Bedeutung, da in diesen Bauelementen Stoßionisationseffekte in noch stärkerer Form als in InAlAs/InGaAs-HFETs auftreten. Die Herstellung und Charakterisierung von AlSb/InAs-HFETs ist Bestandteil aktueller Forschung [10, 11]. Die Entwicklung dieser HFETs ist letztlich die Fortführung des Trends zu Kanälen mit einem hohen Indium-Anteil. Aufgrund der höheren Elektronenbeweglichkeit in InAs verglichen mit der in  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$  sind für AlSb/InAs-HFETs entsprechend höhere Grenzfrequenzen zu erwarten.

Die zunehmende Miniaturisierung der Bauelemente führt zum Auftreten von hohen inhomogenen elektrischen Feldern im Bauelement. Diese Feldgradienten wiederum bewirken bei einem Stromfluss ein nichtstationäres, nichtlokales Transportverhalten, bei dem die Ladungsträger sich lokal nicht im Gleichgewicht mit dem Gitter befinden, da die Relaxation durch Streuprozesse eine endliche Zeit benötigt. Exemplarisch für solche nichtstationären Effekte ist der 'velocity overshoot': Die mittlere Ladungsträgerschwindigkeit zeigt beim Anlegen eines elektrischen Feldes ein zeitliches "Überschwingen", ehe die Wechselwirkung mit dem Gitter zu einem stationären Zustand führt. Die zunehmende Bedeutung von solchen Effekten heißer Ladungsträger wie der 'velocity overshoot' und die Stoßionisation auf das elektrische Bauelementverhalten erfordert geeignete Methoden zur Bauelementmodellierung, wie z. B. eine mikroskopische Behandlung des Ladungsträgertransports mit Hilfe der Monte-Carlo-Methode [12]. Diese Methode stellt ein stochastisches Verfahren zur Lösung der Boltzmann-Transportgleichung dar und liefert direkt die Verteilungsfunktion der Ladungsträger im

Phasenraum. Die Anwendung dieser rechenzeitintensiven Methode zur Bauelementsimulation wird durch den Einsatz von immer schnelleren und leistungstärkeren Rechnern ermöglicht.

In dieser Arbeit wird eine Zelluläre-Automaten-Methode zur mikroskopischen Modellierung des Ladungsträgertransports angewandt. Sie ist physikalisch äquivalent zur Monte-Carlo-Methode, gestattet aber gegenüber letzterer eine Effizienzsteigerung, die durch ein so genanntes Mehrfachstreuungskonzept und die Benutzung von vorab erstellten Verknüpfungstabellen zur Behandlung der Streuprozesse ermöglicht wird. Ausgehend vom semiklassischen Bild, das dem Zellulären-Automaten-Verfahren und der Monte-Carlo-Methode als physikalische Grundlage dient, werden beide Methoden in Kapitel 2 dargestellt.

Die Kapitel 3 und 4 sind den Hochfeld-Transporteffekten, d. h. den Effekten heißer Ladungsträger, gewidmet und beruhen auf dem Transport unter räumlich homogenen Bedingungen. Dabei werden in Kapitel 3 zunächst die Transportgrößen in den Materialien InAlAs, InGaAs und InP berechnet und, soweit möglich, anhand von experimentellen Messdaten aus der Literatur validiert. Darüber hinaus wird in diesem Kapitel ausführlich der Stoßionisationsprozess der Elektronen in  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$  betrachtet, wobei zur Erklärung der experimentell beobachteten anormalen Temperaturabhängigkeit ein phononenunterstützter Stoßionisationsprozess vorgeschlagen wird. Zur Berechnung wird dabei die quantenmechanische Störungstheorie zweiter Ordnung benutzt. Bei einem Vergleich mit Stoßionisationsprozessen ohne direkte Mitwirkung von Phononen wird insbesondere auf den Einfluss der Bandstruktur eingegangen, um die Unterschiede im Stoßionisationsverhalten der Elektronen in GaAs und  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$  zu erklären.

Weiterer Schwerpunkt dieser Arbeit neben der Stoßionisation ist der Einfluss von Einfangstellen und Defekten im Halbleiterkristall. Solche Störstellen sind häufig die Ursache für Abweichungen des theoretisch berechneten und experimentell gemessenen Bauelementverhaltens. Als Kink bezeichnete Anomalien im Ausgangskennlinienfeld von InAlAs/InGaAs-HFETs beispielsweise werden neben der Stoßionisation auf den Einfluss von tiefen Störstellen zurückgeführt [13–15]. Wohlbekannte Einfangstellen für heiße Elektronen sind die mit der Dotierung verknüpften DX-Zentren, auf die eine Verschlechterung der Bauelementeigenschaften von AlGaAs/GaAs-HFETs zurückgeführt wird [16, 17]. Ein verstärktes Einfangen heißer Elektronen findet experimentellen Studien zufolge [18] auch in Fe-dotiertem InP statt. Die Ursache hierfür war trotz der Bedeutung von InP:Fe als semiisolierendes Substrat für InAlAs/InGaAs-HFETs bisher nicht bekannt. Aus diesen Gründen wird in dieser Arbeit der Einfluss tiefer Störstellen, insbesondere von DX-Zentren, untersucht und modelliert.

Der Generations-Rekombinationsmechanismus an tiefen Störstellen wird in Kapitel 4 betrachtet, wobei das nicht strahlende Einfangen und die Emission von Ladungsträgern an der Störstelle als Multiphononübergänge behandelt werden. Mit Hilfe der Störungstheorie werden in dieser Arbeit die Einfang- und Emissionswahrscheinlichkeiten in Abhängigkeit von der Energie des freien Ladungsträgers formuliert. Dadurch kann im Gegensatz zu konventionellen Generations-

Rekombinationsmodellen wie das Shockley-Read-Hall-Modell [19] der Effekt heißer Ladungsträger auf Generations-Rekombinationsprozesse in der Transportsimulation berücksichtigt werden. Das entwickelte Modell bildet die Grundlage für die sich anschließende Untersuchung des bei hohen elektrischen Feldern verstärkten Einfangens von Elektronen in InP:Fe. Darüber hinaus wird in Kapitel 4 gezeigt, wie der bei hohen elektrischen Feldern dominante Tunnelemissionsprozess [20] im entwickelten Modell mit nur einem zusätzlichen Parameter berücksichtigt werden kann.

Die Ausbildung des zweidimensionalen Elektronengases (2DEG) in Halbleiter-Heterostrukturen wird in Kapitel 5 betrachtet. Durch selbstkonsistente Lösung der Schrödinger- und der Poisson-Gleichung wird die Dichte des 2DEG in InAlAs/InGaAs-Heterostrukturen berechnet, wobei zur Optimierung der Indium-Anteil variabel gehalten wird. Solche Strukturen lassen sich auf GaAs mit Hilfe eines metamorphen Puffers, mit dem die Gitteranpassung der aktiven InAlAs/InGaAs-Schichten und des Substrates vorgenommen wird, realisieren [21]. Durch Vergleich der berechneten und gemessenen [21] Werte für die Dichte des 2DEG wird die Existenz und der Einfluss tiefer Störstellen und DX-Zentren in InAlAs untersucht, wobei letztere mit Hilfe des in dieser Arbeit entwickelten DX-Donator-Modells bei der selbstkonsistenten Lösung von Schrödinger- und Poisson-Gleichung berücksichtigt werden.

Die Simulation von InAlAs/InGaAs-Heterostruktur-Feldeffekttransistoren, bei der effiziente Methoden zur Berücksichtigung der Entartung und zur Berechnung der Hochfrequenzeigenschaften zum Einsatz kommen, ist Gegenstand von Kapitel 6. Das berechnete Gleichspannungs- und Hochfrequenzverhalten wird anhand von Messungen, die am Daimler-Chrysler-Forschungszentrum in Ulm vorgenommen wurden, validiert. Um einen detaillierten Einblick in den Transport im HFET bei kurzen Gate-Längen zu geben, werden die Transportgrößen im betrachteten 120-nm-Gate-InAlAs/InGaAs-HFET orts aufgelöst untersucht.

Als Optimierungsstudie werden in Kapitel 7 InAlAs/InGaAs-HFETs mit zwei Gate-Kontakten betrachtet. Solche Dual-Gate-HFETs sind u. a. zur Reduzierung von Kurzkanaleffekten (wie z. B. des hohen Ausgangsleitwerts) vorgeschlagen worden [22, 23], um dadurch die Leistungsverstärkung zu erhöhen. Dabei erstrecken sich die bisherigen Untersuchungen vornehmlich auf das elektrische Verhalten bei niedrigeren Frequenzen ( $< 40$  GHz) [23–26] bzw. auf das Gleichspannungsverhalten [23, 27, 28]. In dieser Arbeit wird deshalb, ausgehend vom Einfluss des zweiten Gate-Kontaktes auf die orts aufgelösten Transportgrößen, insbesondere das elektrische Verhalten des Dual-Gate-HFET bei hohen Frequenzen untersucht. Dabei liegt eine Dual-Gate-HFET-Struktur mit einem kurzen Abstand der beiden Gate-Kontakte zugrunde, für die eine Beschreibung durch zwei getrennte FET-Ersatzschaltbilder in Kaskodenschaltung nicht mehr angemessen ist.

Kapitel 8 beinhaltet schließlich eine detaillierte Untersuchung des Durchbruchverhaltens von InAlAs/InGaAs-HFETs, welche wie die Kapitel 3 und 4 zu neuen Einsichten und Erkenntnissen geführt hat. Ausgehend von einer Validierung des berechneten Durchbruchverhaltens anhand von

experimentellen Messdaten wird die Stoßionisation im InAlAs/InGaAs-HFET ortsaufgelöst untersucht. Darüber hinaus wird der Einfluss eines zweiten Gate-Kontaktes auf das Durchbruchverhalten mit den sich daraus ergebenden Auswirkungen auf die Wahl der Arbeitsgeraden für eine maximale Ausgangsleistung analysiert. Durch Computereperimente wird ferner der Einfluss der Raumladung der bei der Stoßionisation erzeugten Löcher und die damit verbundene positive Rückwirkung auf den Eingang demonstriert und dadurch die Bedeutung des Raumladungseffekts im Durchbruchverhalten entschlüsselt. In diesem Zusammenhang wird auch die Bedeutung des Tunneleffekts der Löcher unter dem Gate aufgezeigt, dessen Berücksichtigung in der Bauelementsimulation erst realistische Resultate z. B. für die stoßionisationsbedingte Steilheit ermöglicht. Des Weiteren wird die Durchbruchdynamik anhand des Einflusses der Stoßionisation auf die frequenzabhängigen Zweitorparameter untersucht. Dabei wird ein neuartiges Kleinsignal-Ersatzschaltbild entwickelt, mit dessen Hilfe erstmals starke Stoßionisationseffekte, wie sie z. B. in AlSb/InAs-HFETs auftreten, auf das Hochfrequenzverhalten berücksichtigt werden können. Eine Zusammenfassung bildet den Abschluss dieser Arbeit.

## Kapitel 2

# Modellierung des Ladungsträgertransports in Halbleitern

## 2.1 Das semiklassische Bild

### 2.1.1 Die Ein-Teilchen-Verteilungsfunktion

Die Elektronenzustände im Halbleiterkristall lassen sich bekannterweise durch Blochzustände der Form

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (2.1)$$

ausdrücken. Hierbei bezeichnet  $n$  den Bandindex,  $\hbar\mathbf{k}$  den Quasiimpuls der Elektronen und  $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  eine gitterperiodische Funktion. Bei genügend hohen Temperaturen können die Elektronen im Halbleiter in vielen Fällen als klassisches Elektronengas betrachtet werden. Damit die Elektronen als klassische Teilchen mit einem scharfen Impuls und einem scharfen Ort beschrieben werden können, müssen sich die Elektronenzustände als Linearkombinationen von Blochzuständen darstellen lassen, deren Breite sowohl im Orts- als auch im Impulsraum gering ist. Allerdings erfordert eine kleine Impulsunschärfe  $\Delta k \ll (2\pi)/a$  nach der Unschärferelation eine Ortsunschärfe, die im Vergleich zur Gitterkonstanten  $a$  groß ist. Um den Elektronen trotzdem einen festen Ort zuschreiben zu können, dürfen elektrische oder magnetische Felder räumlich nicht stärker variieren als die De-Broglie-Wellenlänge der Elektronen  $\lambda = 2\pi/k$ . Entsprechend müssen die charakteristischen Strukturgrößen der betrachteten Halbleiterstrukturen größer als die De-Broglie-Wellenlänge sein.

Da hier nicht die Trajektorie eines einzelnen Elektrons von Interesse ist, sondern vielmehr das Verhalten der Gesamtheit, wird das Teilchen-Ensemble durch eine Ein-Teilchen-Verteilungsfunktion  $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$  beschrieben. Die Verteilungsfunktion  $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$  ist so definiert, dass  $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) d\mathbf{r} d\mathbf{k}$  die Anzahl der Elektronen angibt, deren Position sich zur Zeit  $t$  innerhalb des Volumenelements  $d\mathbf{r}$  um  $\mathbf{r}$  und deren Wellenvektoren sich innerhalb des Volumenelements des Wellenvektorraumes  $d\mathbf{k}$  mit Zentrum

$\mathbf{k}$  befinden. Die Größe der betrachteten Volumenelemente ist dabei so gewählt, dass jedes eine große Anzahl von Teilchen beinhaltet, so dass die Teilchendichte von Volumenelement zu Volumenelement nicht stark variiert. In diesem Fall kann die Verteilungsfunktion als stetige Funktion ihrer Argumente betrachtet werden. Der sechsdimensionale Raum, der von  $\mathbf{r}$  und  $\mathbf{k}$  aufgespannt wird, wird auch als Phasenraum bezeichnet. Die Verteilungsfunktion wird gewöhnlich so normiert, dass

$$\frac{2}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \int d\mathbf{r} f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = N, \quad (2.2)$$

wobei  $N$  die Anzahl der Elektronen im Kristall angibt.  $2/(2\pi)^3 d\mathbf{k} d\mathbf{r}$  gibt die maximale Anzahl von Zuständen an, die für Elektronen im Volumenelement  $d\mathbf{k} d\mathbf{r}$  des Phasenraumes unter Berücksichtigung des Pauli-Ausschlussprinzips zur Verfügung stehen. Ist die Verteilungsfunktion bekannt, so können alle makroskopischen Größen wie Dichte oder Driftgeschwindigkeit durch Integration bzw. Mittelung der Verteilungsfunktion über den dreidimensionalen Wellenvektorraum berechnet werden. Die mittlere Geschwindigkeit  $\langle \mathbf{v} \rangle$  des Teilchen-Ensembles erhält man z. B. aus:

$$\langle \mathbf{v} \rangle = \frac{2}{(2\pi)^3 n_e} \int \mathbf{v}(\mathbf{k}) f(\mathbf{k}) d\mathbf{k}, \quad (2.3)$$

wobei die Dichte  $n_e$  gegeben ist durch:

$$n_e = \frac{2}{(2\pi)^3} \int f(\mathbf{k}) d\mathbf{k}. \quad (2.4)$$

Diese Größen sind im Allgemeinen orts- und zeitabhängig.

### 2.1.2 Die Boltzmann-Transportgleichung

Die zeitliche Änderung der Ein-Teilchen-Verteilungsfunktion  $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$  wird durch die Boltzmann-Transportgleichung beschrieben:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \dot{\mathbf{r}} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \dot{\mathbf{k}} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll}. \quad (2.5)$$

Diese Gleichung stellt die Bewegungsgleichung der Verteilungsfunktion dar und folgt aus der Erhaltung der Teilchenzahl im Phasenraum. Sie kann durch Bilanzierung der Teilchenflüsse für ein Volumenelement des Phasenraumes abgeleitet werden [29]. Der zweite Term in Gl. (2.5) erfasst dabei die mit der Trägheit der Teilchen verknüpfte Translation im Ortsraum, z. B. durch Diffusion. Der dritte Term berücksichtigt die Translation im Wellenvektorraum aufgrund elektrischer oder magnetischer

Felder. Dies wird deutlich, wenn die Bewegungsgleichung der Elektronen betrachtet wird:

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}). \quad (2.6)$$

Dabei bezeichnet  $e$  die Elementarladung,  $\mathbf{E}$  den elektrischen Feldvektor und  $\mathbf{B}$  den Vektor der magnetischen Induktion. Für die Bauelementsimulation ist die Wechselwirkung der Ladungsträger mit dem magnetischen Feld meist von untergeordneter Bedeutung, so dass in diesen Fällen die Lorentzkraft in Gl. (2.6) vernachlässigt werden kann. Die Gruppengeschwindigkeit  $\mathbf{v}$  ist durch

$$\mathbf{v} = \dot{\mathbf{r}} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) \quad (2.7)$$

gegeben. Dabei stellt  $\varepsilon(\mathbf{k})$  die Dispersionsrelation des Leitungsbandes (für Löcher des Valenzbandes) dar. Diese Bandstruktur bildet die Grundlage für die Transporteigenschaften des Halbleiters.

Der Term auf der rechten Seite von Gl. (2.5) gibt die Änderung der Verteilungsfunktion durch Stöße bzw. Streuprozesse an:

$$\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} = -\frac{V}{(2\pi)^3} \int \{f(\mathbf{k})P(\mathbf{k}, \mathbf{k}')(1 - f(\mathbf{k}')) - f(\mathbf{k}')P(\mathbf{k}', \mathbf{k})(1 - f(\mathbf{k}))\} d\mathbf{k}'. \quad (2.8)$$

Hierbei erfasst der erste Term innerhalb der Klammer die Beiträge durch Streuungen aus dem betrachteten Element des Phasenraums  $(\mathbf{r}, \mathbf{k})$  in andere Volumenelemente des Phasenraumes  $(\mathbf{r}, \mathbf{k}')$ , während der zweite Term die Streuungen von anderen Phasenraumelementen  $(\mathbf{r}, \mathbf{k}')$  in das betrachtete Element  $(\mathbf{r}, \mathbf{k})$  beschreibt. Die Faktoren  $(1 - f)$  geben die Anzahl freier Endzustände an, so dass eine Streuung in besetzte Zustände nicht erlaubt ist. Damit wird das Pauli-Prinzip berücksichtigt, dem zufolge ein Quantenzustand mit maximal einem Elektron besetzt sein darf. Das Pauli-Prinzip ist besonders bei entarteten Halbleitermaterialien von Bedeutung. Die Größe  $P(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$  gibt die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit durch Streuprozesse an. Dabei bezeichnet  $\mathbf{k}$  den Ausgangszustand und  $\mathbf{k}'$  den Endzustand des Elektrons im Wellenvektorraum. Während die Ladungsträger zwischen zwei Streuungen als klassische punktförmige Teilchen betrachtet werden, werden die Streuprozesse quantenmechanisch mit Hilfe der Störungstheorie erster Ordnung beschrieben. Aus diesem Grund spricht man auch vom semiklassischen Bild des Halbleitertransports.

Die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit  $P(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$  lautet nach der Störungstheorie erster Ordnung (Fermis Goldene Regel):

$$P(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i). \quad (2.9)$$

Dabei gibt  $M_{fi}$  das Matrixelement des Übergangs an.  $E_i$  bzw.  $E_f$  bezeichnet die Gesamtenergie