

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

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
1 Einleitung	1
2 Modellierung des Ladungsträgertransports in Halbleitern	6
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 Mehrfachstreuikonzept	17
2.4 Modellierung der Bandstruktur und der Streumechanismen	19
3 Hochfeldtransport: Heiße Ladungsträger I	23
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
4 Hochfeldtransport: Heiße Ladungsträger II	46
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
5	InAlAs/InGaAs-Heterostrukturen	71
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
6	Simulation von InAlAs/InGaAs-HFETs	84
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
7	Dual-Gate-HFETs	124
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
8	Durchbruchverhalten von (InGa)As-Kanal-HFETs	142
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
9	Zusammenfassung	184
	Anhang	189
A	Materialparameter für InGaAs, InAlAs und InP	189

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

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)
α	Nichtparabolizität
α_n	Stoßionisationskoeffizient der Elektronen
α_p	Stoßionisationskoeffizient der Löcher
β	Debye-Abschirmlänge
χ	Gitter-Wellenfunktion

ΔE_C	Leitungsbanddiskontinuität
ΔE_V	Valenzbanddiskontinuität
ΔI_D	Stromamplitude am Ausgang
Δt	Zeitschrittweite
ΔV_{DS}	Spannungsamplitude am Ausgang
ΔV	Spannungsänderung
ϵ	Dielektrizitätskonstante
ϵ_0	Dielektrizitätskonstante des Vakuums
ϵ_s	relative statische Dielektrizitätskonstante
ϵ_∞	relative optische Dielektrizitätskonstante
ϵ	Elektronen-Energie
λ	Wellenlänge
ν	Phononen-Frequenz
ω	Kreisfrequenz
ϕ	elektrostatishes Potential
ψ	Elektronen-Wellenfunktion
ρ	Ladungsdichte
σ	Einfangwirkungsquerschnitt
τ	Zeitkonstante
τ_{g2}	mit dem zweiten Gate-Kontakt verknüpfte Zeitkonstante
τ_{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-Ausschließungsprinzips 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