

# DISSERTATION

## Transport und Injektion von Ladungsträgern in MOS-Strukturen mit der Monte-Carlo-Methode

ausgeführt zum Zwecke der Erlangung des akademischen Grades  
eines Doktors der technischen Wissenschaften

eingereicht an der Technischen Universität Wien  
Fakultät für Elektrotechnik

von

Michael Hackel



Wien, im August 1995



# Kurzfassung

## Transport und Injektion von Ladungsträgern in MOS-Strukturen mit der Monte-Carlo-Methode

Die Entwicklung hochintegrierter mikroelektronischer Schaltungen erfordert das Verständnis der mikroskopischen Vorgänge bei der Injektion von Elektronen von Silizium in Siliziumdioxid. Diese Arbeit untersucht den Ladungstransport in Siliziumdioxid und die Transmissionsraten am Übergang der Grenzschicht des MOS-Kanals zum Isolator. Eine Erweiterung dieser Transmissionsraten, um isotrope Mehrbandstrukturen bei der Simulation von Injektionsexperimenten konsistent zu berücksichtigen, wird vorgestellt und anhand von zwei MOS-Strukturen zur Berechnung der quantitativen Größe der Injektion von Elektronen angewandt.

Ausgehend von bestehenden Modellen für den Elektronentransport in Siliziumdioxid wird in dieser Arbeit eine Erweiterung auf nichtparabolische Bandstrukturen und isotrope, analytische Mehrbandmodelle vorgestellt, die aus numerischen Bandstrukturberechnungen extrahiert worden sind. Bei hohen Feldstärken wird festgestellt, daß nichtpolare akustische Phononenstreuung eine Stabilisierung der energieabhängigen Verteilungsfunktion bewirkt. Für die numerisch berechnete Driftgeschwindigkeit und Elektronenbeweglichkeit unter Einfluß niedriger und mittlerer elektrischer Feldstärken werden analytische Interpolationsformeln angegeben.

Zur Berechnung der Transmissionsrate von Elektronen an der Grenzfläche von Silizium und Siliziumdioxid wird die sogenannte Fowler-Nordheim-Näherung modifiziert, sodaß die vollständige quantenmechanische Natur der Elektronen berücksichtigt wird. Im Bereich des Oxids wird ein linear abfallendes elektrisches Potential mit endlicher räumlicher Ausdehnung verwendet. Diese Transmissionsraten werden für den Fall einer Injektion von Elektronen in Siliziumdioxid erweitert, indem ein Modell für die Übertrittswahrscheinlichkeit von Silizium in Siliziumdioxid vorgestellt wird. Die Abhängigkeit von den wichtigsten Parametern, also der Oxiddicke, der effektiven Elektronenmasse und des elektrischen Feldes wird untersucht und mit dem bestehenden Modell der Fowler-Nordheim-Näherung verglichen.

Anwendung einer Monte-Carlo-Simulation zur Ermittlung der Hochenergieverteilung der Elektronen und der Übergangswahrscheinlichkeit an der Grenzfläche zur isolierenden Oxidschicht ergeben für Elektronen gute Übereinstimmung mit den Meßergebnissen eines homogenen, stationären Injektionsexperiments, wobei das Verhältnis von Gate- zu Bulk-Strom ermittelt wird. Verglichen mit der Fowler-Nordheim-Näherung ergibt sich eine Reduktion der Injektionsrate, sowohl wenn nur direktes, quantenmechanisches Tunneln bei endlichen Ausdehnung des Oxids berücksichtigt wird, als auch wenn sogenannte thermionische Emission herangezogen wird, also Injektion in Siliziumdioxid und nachfolgender Oxidtransport der injizierten Elektronen.

Zur Berechnung des Gate-Stromes eines MOS-Transistors mit  $0.9\mu\text{m}$  Gate-Länge wird bei den Transmissionsraten das variierende elektrische Feld an der Si/SiO<sub>2</sub>-Grenzfläche berücksichtigt. Die Ergebnisse einer zweidimensionalen Monte-Carlo-Simulation werden vorgestellt. Abschließend wird noch der Einfluß verschiedener Grenzflächeneffekte, die während der Herstellung die Qualität einer deponierten Oxidschicht beeinträchtigen, diskutiert.

# Abstract

## Simulation of Electron Transport and Injection in MOS Structures with the Monte Carlo Method

Development and design of very large-scale-integrated circuits requires the basic understanding of microscopic principles of carrier injection. In this work the transport behavior of electrons in silicon dioxide and the transmission rates at the silicon/silicon dioxide interface are investigated. These transmission rates are extended to account consistently for numeric multi-band structures within simulations of injection experiments and are used to characterize two different MOS structures.

Proceeding from existing models for the electronic transport in silicon dioxide, non-parabolic and numerical multi-band structures are under investigation. It is observed that nonpolar acoustic phonon scattering prevents carriers from polar runaway and stabilizes the electronic distribution. For low and intermediate electrical fields applied to the insulator we present fitting formulae for the average drift velocity as well as for the electron mobility.

Analyzing the injection of electrons from silicon into silicon dioxide the Fowler-Nordheim approximation is modified taking into account the quantum mechanical nature of tunneling within a trapezoidal potential well across a finite isolating domain. These transmission rates are extended for the case of thermionic emission of carriers into the oxide. Carriers are injected into the oxide and a subsequent post-processing within the domain of the oxide can be performed. The dependence of the important parameters like the effective mass of electrons, the thickness of the oxide and the applied electric field are examined.

A combined Monte Carlo technique is applied to simulate stationary homogeneous injection experiments. Accounting for the transmission of electrons three different models are used to extract the injection rate defined as ratio of gate and bulk current. Compared with the Fowler-Nordheim approximation a reduction of the injection rate is observed, for quantum mechanical tunneling as well as in the case of thermionic emission with subsequent oxide transport of injected carriers.

In case of a  $0.9\mu m$  MOSFET a consequent inclusion of gradual channel approximation and of field dependent transmission rates for a full two-dimensional Monte Carlo simulation is presented. Also discussed are both, the degradation of the isolating qualities of the oxide layer and the impact of different interface effects on gate currents during fabrication of modern electronic devices.

# Danksagung

Diese Arbeit entstand am Institut für Mikroelektronik, an dem ich nun seit dreieinhalb Jahren tätig bin. Besonders bedanken möchte ich mich bei Prof. Dr. Siegfried Selberherr, der viel positiven Einfluß auf die Arbeit nahm und mich in jeder Hinsicht unterstützte, ohne dabei meine Entfaltungsmöglichkeiten einzuschränken. Seine außerordentlichen Kenntnisse, sein profundes Fachwissen sowie seine guten industriellen Kontakte und der daraus resultierende Einblick in Problemstellungen auf dem Gebiet der physikalischen Modellierung von Halbleiterbauelementen waren eine entscheidende Voraussetzung für den erfolgreichen Abschluß der vorliegenden Dissertation.

Allen meinen Kollegen bin ich für ihre Hilfsbereitschaft und für das angenehme Arbeitsklima am Institut sehr dankbar. Besonders hervorheben möchte ich hierbei meine Zimmerkollegen Dr. P. Habaš, der mit seinen umfangreichen Kenntnissen in bezug auf Grenzflächenmodellierung stets zu Diskussionen bereit war, Dr. H. Kosina, der mir bei allen Arbeiten, die Monte-Carlo-Methode betreffend, mit Rat zur Seite stand und mit seinem Kritikbewußtsein und Anregungsvorschlägen erheblichen Anteil zum Gelingen dieser Arbeit beitrug, und auch Dipl.-Ing. M. Knaipp, mit dem ich in vielen physikalischen Gesprächen Verbesserungsvorschläge für meine Arbeit gewonnen habe. Dr. C. Fischer und Dipl.-Ing. G. Schrom kann ich gar nicht genug Dank aussprechen, denn deren rasche Auffassungsgabe verbunden mit einem überdurchschnittlichen Wissen in allen Bereichen der Mikroelektronik waren unerlässlich für Einsichten der technischen Modellierung und haben meine Kenntnisse auf diesem Gebiet sicherlich erweitert. Der unermüdlichen Anstrengung meiner Kollegen, Dr. M. Stiftinger, Dr. F. Fasching, Dr. H. Pimingstorfer, Dipl.-Ing. G. Rieger, Dipl.-Ing. H. Puchner, Dipl.-Ing. W. Tuppa und Dipl.-Ing. T. Simlinger in bezug auf Betreuung und Instandhaltung des Computer-Netzes am Institut für Mikroelektronik sei nochmals recht herzlich gedankt. Dr. E. Strasser trug in vieler Hinsicht mit Ermunterungen und Anregungsvorschlägen zu einem konstruktiven Arbeitsklima bei, sodaß die Zeit meiner Dissertation unvergeßlich bleiben wird.

Ferner bin ich Dr. A. v. Schwerin und Dr. H. Jacobs für die Unterstützung meiner Dissertation in fachlicher Hinsicht zu Dank verpflichtet. Die interessante Aufgabenteilung und finanzielle Unterstützung von SIEMENS ermöglichte erst diese Disser-

tation. Dem Fonds zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung sei ebenfalls für die Bereitstellung eines Stipendiums Dank ausgesprochen, welches mir ermöglichte, Studien in Bologna durchzuführen. Prof. B. Riccò, Prof. E. Sangiorgi, Prof. F. Venturi, Prof. C. Jacoboni, Dr. L. Selmi, Dr. C. Fiegna haben mit Ihrem Fachwissen und der ständigen Bereitschaft zu Diskussionen einen wesentlichen Beitrag am Gelingen dieser Arbeit. Der Firma Digital Equipment Corporation bin ich für die Ausstattung mit modernen, leistungsfähigen Arbeitsplatzrechnern verbunden.

Allen meinen Freunden und Verwandten möchte ich noch meinen aufrichtigsten Dank aussprechen, wobei ich zuallererst meine Eltern erwähnen muß, die aufgrund der finanziellen und moralischen Unterstützung während der Zeit meines Studium stets eine hilfreiche und ermunternde Stütze waren. Rückblickend kann ich nur ein Wort von F. Torberg in den Mund nehmen: *“Es war schon eine tolle, tolle Zeit.”*



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1	Aufbau der Arbeit . . . . .	3
<b>2</b>	<b>Physikalische Grundlagen</b>	<b>5</b>
2.1	Die Boltzmann-Gleichung . . . . .	5
2.1.1	Ableitung der Boltzmann-Gleichung . . . . .	6
2.1.2	Gültigkeit der Boltzmann-Gleichung . . . . .	10
2.2	Die Monte-Carlo-Methode . . . . .	12
2.2.1	Grundlagen der Monte-Carlo-Methode . . . . .	13
2.2.2	Bewegungsgleichungen . . . . .	14
2.2.3	Streuprozesse . . . . .	19
2.2.4	Dauer des freien Fluges . . . . .	22
2.2.5	Numerische Aspekte . . . . .	23
2.3	Monte-Carlo-Poissonkopplung . . . . .	28
<b>3</b>	<b>Monte-Carlo-Simulationen</b>	<b>29</b>
3.1	Monte-Carlo-Simulationen in Silizium . . . . .	30
3.1.1	Bandstruktur in Silizium . . . . .	30
3.1.2	Streuprozesse in Silizium . . . . .	36
3.1.3	Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulation für Silizium . . . . .	42
3.2	Monte-Carlo-Simulationen in Siliziumdioxid . . . . .	45
3.2.1	Bandstruktur in Siliziumdioxid . . . . .	47
3.2.2	Streuprozesse in Siliziumdioxid . . . . .	50

3.2.3	Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulation für Siliziumdioxid . . .	53
3.2.4	Diskussion und Ergebnisse neuerer Experimente . . . . .	63
<b>4</b>	<b>Berechnung der Injektionswahrscheinlichkeit</b>	<b>67</b>
4.1	Das physikalische Modell . . . . .	68
4.2	Ableitung der Injektionswahrscheinlichkeit . . . . .	70
4.3	Ergebnisse . . . . .	73
<b>5</b>	<b>Ein Monte-Carlo-Modell zur Berechnung von Gate-Strömen</b>	<b>77</b>
5.1	Kopplung zweier Monte-Carlo-Simulatoren . . . . .	78
5.2	Ergebnisse . . . . .	81
5.2.1	Kalibrierung des Modells . . . . .	81
5.2.2	Anwendung im Fall eines nMOS-Transistors . . . . .	85
5.3	Diskussion der Ergebnisse . . . . .	91
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>94</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>98</b>
	<b>Eigene Veröffentlichungen</b>	<b>112</b>
	<b>Lebenslauf</b>	<b>114</b>

# Abbildungsverzeichnis

2.1	Änderung der Verteilungsfunktion . . . . .	8
2.2	Bewegung eines Teilchens in Impuls- und Ortsraum . . . . .	14
2.3	Flußdiagramm eines Einteilchen-Monte-Carlo-Programms . . . . .	15
2.4	Darstellung eines Normal- und Umklappprozesses . . . . .	21
2.5	Prinzip der Selbststreuung . . . . .	24
2.6	Wahl des Streuprozesses . . . . .	25
2.7	Schematische Darstellung von Multiplikationsalgorithmen . . . . .	26
3.1	Anordnung der Si-Atome in einem kubisch flächenzentrierten Gitter .	32
3.2	Brillouinzone eines kubisch flächenzentrierten Gitters . . . . .	33
3.3	Bandstruktur in Silizium . . . . .	33
3.4	Numerische Bandstruktur des isotropen Mehrbandmodells . . . . .	34
3.5	Zustandsdichte in Silizium . . . . .	35
3.6	Gruppengeschwindigkeit in Silizium . . . . .	35
3.7	Driftgeschwindigkeit und Energie in Silizium . . . . .	43
3.8	Vergleich der Verteilungsfunktion von Elektronen . . . . .	44
3.9	Brillouinzone in Siliziumdioxid . . . . .	48
3.10	Bandstruktur in Siliziumdioxid . . . . .	48
3.11	Numerische Bandstruktur und Zustandsdichte in Siliziumdioxid . . .	49
3.12	Berechnete Streurate in Siliziumdioxid für verschiedene Bandmodelle	54
3.13	Partielle, berechnete Streurate in Siliziumdioxid . . . . .	54
3.14	Mittlere Driftgeschwindigkeit der Elektronen in Siliziumdioxid . . . .	56
3.15	Mittlere Energie der Elektronen in Siliziumdioxid . . . . .	56
3.16	Thermalisierungslänge in Siliziumdioxid . . . . .	58

3.17	Temperaturabhängigkeit der Streurate . . . . .	58
3.18	Temperaturabhängigkeit der Energie in Siliziumdioxid . . . . .	59
3.19	Prozentuelle Temperaturabhängigkeit der Energie in Siliziumdioxid . . . . .	59
3.20	Temperaturabhängigkeit der Driftgeschwindigkeit in Siliziumdioxid . . . . .	60
3.21	Prozentuelle Temperaturabhängigkeit der Driftgeschwindigkeit in Siliziumdioxid. . . . .	60
3.22	Vergleich der berechneten Geschwindigkeit mit der Interpolation . . . . .	62
3.23	Zustandsdichte in amorphen Siliziumdioxid zwischen den Bändern . . . . .	65
4.1	Potentialprofil entlang der Grenzfläche . . . . .	69
4.2	Transmissionsrate mit verschiedenen Modellen . . . . .	74
4.3	Transmissionsrate für verschiedene Oxiddicken . . . . .	74
4.4	Transmissionsrate für verschiedene elektrische Felder . . . . .	75
4.5	Transmissionsrate für verschiedene effektive Massen . . . . .	75
5.1	Flußdiagramm der Kopplung von Monte-Carlo-Simulatoren . . . . .	79
5.2	Dotierung des Bauteils NPR5 . . . . .	83
5.3	Transmissionsrate bei Berücksichtigung der Bänder in Silizium . . . . .	83
5.4	Injektionsrate für homogene Injektion . . . . .	84
5.5	Transversales elektrisches Feld . . . . .	85
5.6	Dotierung des $0.9\mu\text{m}$ -Transistors . . . . .	86
5.7	Laterale elektrische Feldverteilung . . . . .	87
5.8	Energieverteilung der Elektronen . . . . .	88
5.9	Gate-Strom des $0.9\mu\text{m}$ -Transistor . . . . .	89
5.10	Gate-Stromdichte mit verschiedenen Transmissionsraten . . . . .	90
5.11	Gate-Stromdichte für verschiedene Gate-Spannungen . . . . .	91
6.1	Potentialverlauf für Elektroneneinfang . . . . .	96

# Tabellenverzeichnis

3.1	Streuparameter für das isotrope Mehrbandmodell . . . . .	42
3.2	Bandparameter für das Vierbandmodell . . . . .	49
3.3	Besetzung der einzelnen Bänder des Vierbandmodells . . . . .	53
5.1	Verwendete Streuparameter in Silizium bei homogener Injektion . . . . .	82
5.2	Prozentueller Anteil an zurückgestreuten Elektronen . . . . .	84
5.3	Verwendete Streuparameter in Silizium für den $0.9\mu\text{m}$ -Transistor . . . . .	88



# Kapitel 1

## Einleitung

In der modernen Mikroelektronik nimmt die Packungsdichte in integrierten Schaltkreisen zu. Damit verbunden ist eine Miniaturisierung der elektronischen Grundbausteine. Zum jetzigen Zeitpunkt sind Transistoren mit einer Kanallänge von  $0.5\mu m$  bereits in Verwendung und mit  $0.1\mu m$  Kanallänge in Untersuchung. Um zu einer weiteren Technologieverbesserung zu gelangen als auch die Fertigungskosten zu optimieren, ist es notwendig, den Herstellungsprozeß sowie das elektrische Verhalten dieser Bauteile ständig zu verbessern. Einsichten, die aufgrund von numerischen Simulationen gewonnen werden, ermöglichen ein tieferes Verständnis der physikalischen Vorgänge sowohl in der Herstellung als auch beim Einsatz in Schaltkreisen [1][2][3][4].

In der Bauelementsimulation werden Programme, die auf verschiedenen physikalischen Annahmen basieren, eingesetzt. Das Drift-Diffusions-Modell zur Lösung der Boltzmann-Gleichung, die das Transportverhalten von Ladungsträgern beinhaltet, wird industriell zur Vorhersage der Eigenschaften neu zu entwickelnder Transistoren verwendet. Die Funktionsweise von Dioden, Bipolar- und MOS-Transistoren konnte qualitativ und quantitativ richtig beschrieben werden. Die numerische Effizienz und Robustheit dieses Transportmodells und auch die vielfachen Erweiterungsmöglichkeiten in physikalischer Hinsicht haben sicherlich zur Verbreitung in der Entwicklung neuer Transistoren beigetragen.

Nichtlokale Effekte und die Modellierung von Verbindungshalbleitern führten zur Entwicklung des hydrodynamischen Modells, bei dem zusätzlich zum Ladungstransport auch der Energietransfer berücksichtigt wird. Wenn nun die energetische Verteilung der Ladungsträger stark vom Gleichgewicht abweicht, muß das hydrodynamische Modell angewandt werden, da im Gegensatz zum einfacheren Drift-Diffusions-Modell sich die Temperatur der Ladungsträger stark von derjenigen des elektronischen Bauteils unterscheidet, und auch die Beweglichkeit eine Funktion der mittleren Energie der Ladungsträger ist.

Die Simulation von Transportprozessen mit der Monte-Carlo-Methode empfiehlt sich dann, wenn im Bauteil das elektrische Feld stark variiert oder aber Hochenergieeffekte untersucht werden sollen. Dann sind Näherungslösungen zur Beschreibung des Transportverhaltens von Elektronen und Löchern nicht ausreichend. Insbesondere, wenn ein extremer Nichtgleichgewichtszustand vorliegt, kann eine hinreichend genaue Lösung der Boltzmann-Gleichung nur mit statistischen Verfahren gewonnen werden. In MOS-Feldeffekttransistoren findet der Ladungstransport hauptsächlich in der schmalen Inversionsschicht im Bereich der Halbleiter-Oxid-Grenzfläche statt. Wegen der hohen elektrischen Felder und der damit resultierenden Beschleunigung der Elektronen kann ein Eindringen der Ladungsträger in das isolierende Gate-Material nicht verhindert werden. Diese Elektronen verursachen einen unerwünschten, parasitären Strom in das Gate-Material.

Mit der Erkenntnis des Auftretens von Gate-Strömen wurden aber auch Bauteile entworfen, die sich dieses Effektes bemächtigen. Sogenannte *Electrically Erasable Programmable Read Only Memories* (EEPROM) sind darauf aufgebaut, daß während des Lese- und Schreibmechanismus Elektronen vom Substrat in das *floating gate*, beziehungsweise in umgekehrter Richtung injiziert werden [5][6][7][8][9][10][11][12][13][14].

Das physikalische Verhalten, weswegen Elektronen einen Gate-Strom hervorrufen, wird in zwei Kategorien unterteilt. Elektronen können in die Gate-Elektrode gelangen, wenn sie höhere Energie als die Potentialbarriere an der Grenzfläche aufweisen, oder aber entsprechend der quantenmechanischen Gesetzmäßigkeiten bei Energiewerten, die diese Potentialschwelle unterschreiten, aufgrund des Tunneleffekts zum Gate-Strom beitragen.

Das Degradationsverhalten von Transistoren wird von hochenergetischen Elektronen im Kanalbereich bestimmt. Dabei ist nicht nur der Gate-Strom von Bedeutung. Aufgrund von Stoßionisation werden vermehrt Minoritätsladungsträger erzeugt, die ein Ansteigen des Bulk-Stromes bewirken. Ein weiterer Effekt, der an der Grenzfläche zum Oxid auftritt ist Elektroneneinfang aufgrund von ungesättigten Bindungen an dieser Grenzfläche. Das impliziert eine Änderung der Beweglichkeit der Ladungsträger im Kanalbereich und ferner einen sogenannten *threshold voltage shift* während des Betriebs eines elektronischen Bauteils. Diese Effekte können die Strom-Spannungs-Charakteristik eines Transistors verändern und somit zu Schäden in der Schaltung führen oder aber Fehlverhalten des gesamten Schaltkreises verursachen.

Um Instabilitäten, die von hochenergetischen Ladungsträgern verursacht werden, zu vermeiden, kann die Zuverlässigkeit von modernen Schaltkreisen während der Fabrikation bei geeignetem Entwurf erhöht werden. In der Herstellung von isolierenden Materialien wird nicht nur Siliziumdioxid eingesetzt, sondern vielfach nitriertes (MNOS) [6] oder nitriertes und reoxidiertes Siliziumdioxid (MONOS) eingesetzt [15]. Moderne Fabrikationsschritte zur Erzeugung einer Oxidschicht bei extrem kur-



zer Aufheizung erlauben ferner auch die Reduktion von Fehlstellen in dünnen Isolatoren [16]. Jedoch ist es für die Entwicklung von elektronischen Bauelementen im Submikrometerbereich unerlässlich, sowohl über die qualitativen als auch über die quantitativen Mechanismen, welche eine Aufheizung der Elektronen und somit Elektroneninjektion bewirken, Bescheid zu wissen.

## 1.1 Aufbau der Arbeit

In Kapitel 2 wird auf die Grundlagen des semiklassischen Transports eingegangen. Die Boltzmann-Gleichung als Integro-Differentialgleichung kann das Transportverhalten von klassischen Teilchen beschreiben. Zur Lösung der Boltzmann-Gleichung wird die Monte-Carlo-Methode herangezogen. Deren Grundlagen, also die Bewegungsgleichung, die Berücksichtigung von Elektronenstößen als auch einige wichtige numerische Aspekte in Hinblick auf Reduzierung der Rechenzeit, werden erklärt.

Die Ergebnisse dieser Simulationen für Silizium und Siliziumdioxid werden in Kapitel 3 vorgestellt und mit experimentellen Daten als auch theoretischen Berechnungen anderer Forschungsgruppen verglichen. Aufgabe der vorliegenden Arbeit ist es, das Verhalten von Elektronen in MOS-Strukturen zu untersuchen. Der Schwerpunkt liegt dabei auf der Analyse des Transports von Elektronen in Siliziumdioxid bei hohen elektrischen Feldstärken mit der Monte-Carlo-Methode. Obwohl Siliziumdioxid isolierenden Charakter besitzt, tritt bei Feldstärken ab  $2MV/cm$  ein nicht zu vernachlässigender Stromtransport auf. Zusätzlich wird noch auf die neuesten Meßergebnisse und deren physikalische Deutung eingegangen. Für den Transport von Löchern in Siliziumdioxid muß aufgrund der großen effektiven Masse der Löcher die Verschiebung von Elektronenbindungen berücksichtigt werden, weswegen die Monte-Carlo-Methode nicht angewandt werden kann.

Die Transmissionswahrscheinlichkeit der Elektronen von Silizium in Siliziumdioxid wird in Kapitel 4 beschrieben. Ausgehend von der Analyse der physikalischen Eigenschaften des Oxids wird ferner die Injektionswahrscheinlichkeit bei Berücksichtigung des quantenmechanischen Charakters von Elektronenwellen an der Grenzfläche des Siliziumsubstrats und der Oxidschicht untersucht. Dabei wird der Einfluß des elektrischen Feldes, der effektiven Masse und die Abhängigkeit von der Oxiddicke analysiert.

In Kapitel 5 wird ein gekoppeltes Monte-Carlo-Modell vorgestellt, mit dem einerseits im Fall eines homogenen, stationären Injektionsexperiments das Verhältnis von Gate- zu Bulk-Strom berechnet wird, als auch andererseits der Gate-Strom und die dazugehörige Stromdichte an der Si/SiO<sub>2</sub>-Grenzfläche für einen Transistor mit  $0.9\mu m$  Gate-Länge. Anschließend werden die Resultate der theoretischen Simulationen diskutiert.

In der Zusammenfassung (Kapitel 6) werden die wichtigsten Ergebnisse dieser Arbeit nochmals kurz vorgestellt und interpretiert. Für den Einfluß von Verunreinigungen und Gitterfehlern an der Si/SiO<sub>2</sub>-Grenzfläche, die während des Herstellungsprozesses entstehen, wird abschließend eine physikalische, mikroskopische Behandlung schematisch vorgestellt und die damit verbundenen Schwierigkeiten diskutiert.

# Kapitel 2

## Physikalische Grundlagen

### 2.1 Die Boltzmann-Gleichung

Gegenstand einer Transporttheorie ist es, das zeitliche Verhalten von physikalischen Objekten zu beschreiben und die Änderung des Gesamtsystems, das verschiedenen Wechselwirkungen und Kräften ausgesetzt ist, zu ermitteln. Dabei sollen die physikalischen Grundprinzipien erfüllt sein, oder falls im Rahmen der Modellbildung zulässig, mit berechtigten Annahmen dermaßen vereinfacht werden, daß eine Vielzahl von verschiedenen Phänomenen damit erklärt werden kann.

Die kinetische Theorie, die das Fundament der Transporttheorie bildet, ist ein Sonderfall des allgemeineren Konzepts der Statistischen Mechanik, in der die thermodynamischen Gesetzmäßigkeiten eines Systems aus den jeweiligen Besonderheiten des atomaren Aufbaus erklärt werden. Dagegen beschäftigt sich die Kinetik mit Systemen in speziellen Zustandsbereichen, in denen die Wechselwirkung der untersuchten Teilchen nur in Form von Stößen auftritt, deren Wechselwirkungsenergie aber klein im Gegensatz zur Teilchenenergie sein muß.

Die Theorie der Kinetik gestattet nicht nur die Beschreibung von Gleichgewichtszuständen, sondern sie ermöglicht auch zu zeigen, wie sich ein System außerhalb des Gleichgewichtszustands verhält. Dies ist, da der Transport von Ladungsträgern in Halbleiterbauteilen als ein Nichtgleichgewichtsprozeß aufzufassen ist, von eminenter Bedeutung. In der klassischen Theorie kann die untersuchte physikalische Transportgröße mit einer einzigen Gleichung, der sogenannten Boltzmann-Gleichung, untersucht werden.

### 2.1.1 Ableitung der Boltzmann-Gleichung

Ein kinetisches System besteht aus Teilchen in einem fest definierten Volumen  $V$ , dessen physikalischen Eigenschaften sich zeitlich ändern und untersucht werden sollen. Diese Partikel erfahren aber Zusammenstöße und unterliegen dem Einfluß äußerer Kräfte, wobei eine Änderung des Teilchenzustands hervorgerufen wird. Die Energie, die aufgrund von Wechselwirkungen ausgetauscht werden kann, sei jedoch gering. Eine weitere Forderung besteht darin, daß die Wellenpakete der untersuchten Teilchen lokalisiert sein müssen, daß also deren Ausdehnung kleiner als der mittlere Teilchenabstand ist. Die de-Broglie-Wellenlänge  $\lambda_B$  muß also folgende Ungleichung

$$\lambda_B := \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mk_B T}} \ll \left(\frac{V}{N}\right)^{\frac{1}{3}} \quad (2.1)$$

erfüllen, da sonst nur eine ausschließlich quantenmechanische Betrachtung möglich ist. Man betrachtet also Teilchen bei hohen Temperaturen  $T$  oder niedriger Teilchenzahl  $N$ . Dabei stellt  $\hbar$  das reduzierte Planck'sche Wirkungsquantum,  $m$  die Masse des Teilchens und  $k_B$  die Boltzmannkonstante dar. Damit kann allen Teilchen sowohl ein Ort als auch ein Impuls und somit eine Geschwindigkeit hinreichend genau zugeordnet werden, und Ort und Impuls können unabhängig voneinander betrachtet werden. Wenn diese Forderung erfüllt ist, dann wird, kann ein System mit den klassischen Gesetzmäßigkeiten analysiert werden. Des weiteren wird ein System untersucht, bei dem nur eine einzige Teilchenart betrachtet werden muß, um die mathematische Ableitung möglichst einfach beschreiben zu können.

Die makroskopischen Eigenschaften eines physikalischen Systems werden bestimmt, indem man die Bewegung aller Teilchen verfolgt. Dies ist jedoch praktisch nicht möglich, da dabei die Bewegungsgleichung für jedes einzelne Teilchen berechnet werden muß und zusätzlich noch die Anfangsbedingungen für jedes einzelne Teilchen bekannt sein müssen. Man ist daher gezwungen, statistische Methoden zur Beschreibung des zeitlichen Verhaltens eines makroskopischen Systems zu gebrauchen. Statt der Bewegung eines einzelnen Partikels verfolgt man nun das zeitliche Verhalten der Verteilungsfunktion  $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$  in Abhängigkeit des Orts  $\mathbf{r}$ , der Geschwindigkeit  $\mathbf{v}$  und der Zeit  $t$ , die im sechsdimensionalen Volumenelement  $d^3r d^3v$  die mittlere Anzahl der Teilchen  $N$

$$d^6 N = f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3r d^3v \quad (2.2)$$

angibt. Diese mittlere Anzahl an Teilchen ist nun als Integral der Teilchendichte über das räumliche Volumen  $V$  und die Geschwindigkeit definiert,

$$N = \int_V \int_{\mathbf{R}_3} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3r d^3v. \quad (2.3)$$

Eine orts- und zeitabhängige Teilchendichte  $n(\mathbf{r}, t)$  erhält man durch Mittelung über die Geschwindigkeit,

$$n(\mathbf{r}, t) = \int_{\mathbf{R}_3} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3v. \quad (2.4)$$

Man kann den Mittelwert  $\bar{A}(\mathbf{r}, t)$  einer beliebigen physikalischen Größe  $A(\mathbf{r}, \mathbf{v})$  bei Kenntnis der Verteilungsfunktion mittels Integration über die Geschwindigkeit berechnen,

$$\bar{A}(\mathbf{r}, t) = \frac{\int_{\mathbf{R}_3} A(\mathbf{r}, \mathbf{v}) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3v}{\int_{\mathbf{R}_3} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3v}. \quad (2.5)$$

Mit derartigen Mittelwerten kann also auch ein System, das sich nicht im Gleichgewichtszustand befindet, beschrieben werden, vorausgesetzt, daß die Verteilungsfunktion bekannt ist.

Um die Verteilungsfunktion zu bestimmen, sollen vorderhand keine Kollisionen der Teilchen berücksichtigt werden. Dann wird sich die Lage dieser Funktion nach einem Zeitschritt  $dt$  um

$$\begin{aligned} \mathbf{r}' &= \mathbf{r} + \mathbf{v}dt + O(dt^2) \\ \mathbf{v}' &= \mathbf{v} + \frac{\mathbf{F}}{m}dt + O(dt^2) \end{aligned} \quad (2.6)$$

ändern, wobei  $\mathbf{F}$  eine geschwindigkeitsunabhängige äußere Kraft darstellt. Unter der getroffenen Annahme, daß keine Stöße stattfinden, werden sich alle Teilchen, die sich zur Zeit  $t$  im Phasenraum innerhalb  $d^3r d^3v$  befinden, zum Zeitpunkt  $t + dt$  im sechsdimensionalen Volumen  $d^3r' d^3v'$  anzutreffen sein. Dieser Sachverhalt kann mathematisch folgendermaßen

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{v}dt, \mathbf{v} + \frac{\mathbf{F}}{m}dt, t + dt) d^3r' d^3v' = f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3r d^3v \quad (2.7)$$

ausgedrückt werden. Das Volumenelement  $d^3r' d^3v'$  kann als Funktionaldeterminante

$$d^3r' d^3v' = \frac{\partial(\mathbf{r}', \mathbf{v}')}{\partial(\mathbf{r}, \mathbf{v})} d^3r d^3v \quad (2.8)$$

geschrieben werden, wenn die Koordinatentransformation von Gleichung 2.6 verwendet wird. Die Auswertung der Funktionaldeterminante ergibt, daß diese einschließlich der Glieder erster Ordnung in  $dt$  gleich eins ist,

$$\frac{\partial(\mathbf{r}', \mathbf{v}')}{\partial(\mathbf{r}, \mathbf{v})} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & dt & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & dt & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & dt \\ \frac{1}{m}F_x dt & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m}F_y dt & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{m}F_z dt & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = 1 + O(dt^2) \quad (2.9)$$

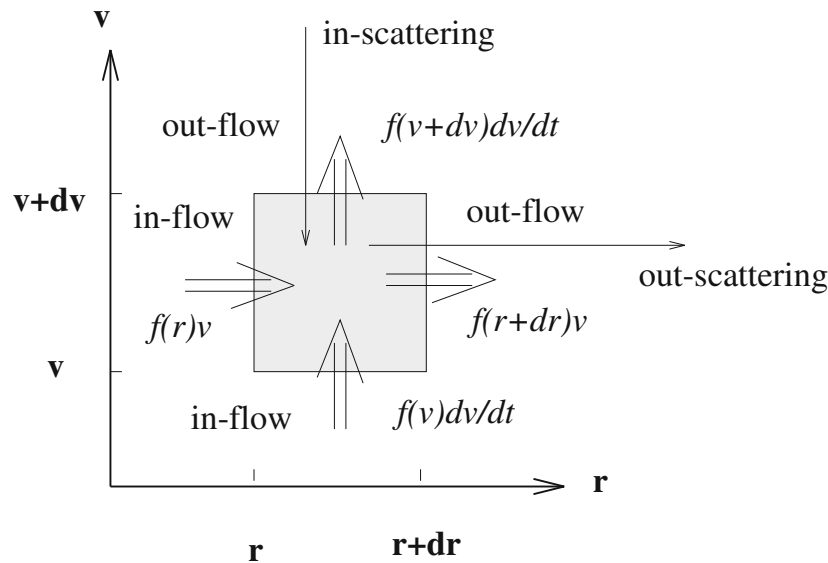


Abbildung 2.1: Diese Abbildung veranschaulicht die zeitliche Änderung der Verteilungsfunktion, wobei eine Zelle in einem zweidimensionalen Phasenraum betrachtet wird. Streuprozesse von Teilchen sind ebenfalls möglich.

Nach einem Zeitschritt ist also die Verteilungsfunktion unverändert,

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{v}dt, \mathbf{v} + \frac{\mathbf{F}}{m}dt, t + dt) = f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t). \quad (2.10)$$

Treten aber noch zusätzlich Stöße auf, dann kommen nicht alle Teilchen, die zum Zeitpunkt  $t$  im Phasenraum  $d^3r d^3v$  enthalten sind, in das zeitlich weiterbewegte Volumen  $d^3r' d^3v'$ , sondern werden durch Kollisionen in andere Phasenvolumenelemente gestreut, beziehungsweise können Teilchen durch Streuprozesse in dem neuen, zeitlich veränderten infinitesimalen Element enthalten sein. Dieser Sachverhalt ist in Abbildung 2.1 dargestellt. Um diese damit hervorgerufene Partikelschwankung zu berücksichtigen, wird ein sogenannter Stoßterm  $\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll}$

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{v}dt, \mathbf{v} + \frac{\mathbf{F}}{m}dt, t) = f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) + \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll} dt \quad (2.11)$$

definiert. Nun entwickelt man die linke Seite dieser Gleichung nach  $dt$ , wobei anschließend  $dt$  gegen Null streben soll. Die daraus resultierende Gleichung stellt die Bewegungsgleichung für die Verteilungsfunktion dar, wenn der Stoßterm explizit angegeben wird. Diese Gleichung wird als Boltzmann-Gleichung bezeichnet

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla_r + \frac{\mathbf{F}}{m} \nabla_v \right) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll}, \quad (2.12)$$

und findet in der Transporttheorie vielfach Anwendung. Die Operatoren  $\nabla_r$  und  $\nabla_v$  stellen den Gradienten in bezug auf den Ort beziehungsweise nach der Geschwindigkeit dar.

Um auch eine semiklassische Näherung der Quantenmechanik miteinzubeziehen, wird der klassische Impuls durch den Kristallimpuls zu ersetzt. Der Wellenvektor  $\mathbf{k}$  des Kristallimpulses wird nun als

$$\hbar\mathbf{k} \rightarrow m\mathbf{v}. \quad (2.13)$$

geschrieben. Man erhält dann die Boltzmann-Gleichung in Abhängigkeit des Wellenvektors,

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}(\mathbf{k})\nabla_r + \frac{1}{\hbar}\mathbf{F}\nabla_k \right) f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = \frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{coll}. \quad (2.14)$$

Dies ist nun diejenige Form, die zur Charakterisierung von Nichtgleichgewichtsprozessen der Festkörperphysik herangezogen wird [17].

Der sogenannte Streuterm wird unter Berücksichtigung der quantenmechanischen, differentiellen Streuwahrscheinlichkeit  $S(\mathbf{k}', \mathbf{k})$  als

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{coll} &= \int_{\mathbf{R}_3} \{ S(\mathbf{k}', \mathbf{k}) f(\mathbf{k}', \mathbf{r}) [1 - f(\mathbf{k}, \mathbf{r})] \\ &\quad - S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f(\mathbf{k}, \mathbf{r}) [1 - f(\mathbf{k}', \mathbf{r})] \} d^3 k' \end{aligned} \quad (2.15)$$

geschrieben. Die Streuwahrscheinlichkeit kann so interpretiert werden, daß ein Teilchen mit Zustand  $\mathbf{k}$  nach  $\mathbf{k}'$  gestreut wird. Der Streuterm dagegen wird als Differenz zwischen eintretenden und austretenden Teilchen im Impulsvolumenelement  $\mathbf{k}d^3k$  aufgefaßt. Die Annahme betreffs dieses Streuterm beinhaltet nur Zweierstöße. Da in einem Halbleiter Kollisionen dreier oder mehrerer Partikel<sup>1</sup> eine sehr geringe Wahrscheinlichkeit aufweisen, erscheint diese Näherung gerechtfertigt. Eine weitere Vereinfachung des Stoßterm ergibt sich unter der Annahme, daß sich die Fermikante weder in der Nähe noch überhalb des Leitungsbandes befindet und nur schwache Konzentrationen der betrachteten Teilchenart vorliegen. Dies ist bei schwacher bis mittlerer Dotierung zulässig. Damit kann auch das Pauliverbot,

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \ll 1 \Rightarrow 1 - f(\mathbf{k}', \mathbf{r}) \approx 1, \quad (2.16)$$

das eine doppelte Besetzung eines Elektronenzustands nicht zuläßt, vernachlässigt werden, und man kann den Stoßterm linear in der Verteilungsfunktion

$$\frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{coll} \doteq \int_{\mathbf{R}_3} [S(\mathbf{k}', \mathbf{k}) f(\mathbf{k}', \mathbf{r}) - S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f(\mathbf{k}, \mathbf{r})] d^3 k' \quad (2.17)$$

<sup>1</sup>Die Einführung von Stößen, bei denen mehr als zwei Teilchen beteiligt sind, führt zu einer hochgradig nichtlinearen Gleichung. Die Streurrate enthält zusätzlich so viele Impulsvariablen, als Teilchen am Stoß beteiligt sind. Ferner muß noch beachtet werden, daß die beteiligten Teilchen dem Pauliverbot unterliegen und somit mehrere quadratische Terme auftreten.

anschreiben. Die totale Streurrate  $\lambda(\mathbf{k})$  ist nun folgendermaßen

$$\lambda(\mathbf{k}) = \int_{\mathbf{R}_3} S(\mathbf{k}', \mathbf{k}) d^3 k' \quad (2.18)$$

definiert. Das Pauliprinzip wird nur bei stark entarteten Halbleitermaterialien berücksichtigt, die fast schon metallische Eigenschaften aufweisen.

### 2.1.2 Gültigkeit der Boltzmann-Gleichung

Als Transportgröße der Boltzmann-Gleichung werden die Träger der elektrischen Ladung im Festkörper angesehen [18]. Die Boltzmann-Gleichung soll also die Bewegung von Löchern im Valenzband als auch die der Elektronen im Leitfähigkeitsband näherungsweise als verdünntes Gas beschreiben. Man nimmt an, die Ladungsträgerzustände entsprechen einem quasifreiem Ladungsträgergas (Elektronengas). Nichtstationäre Effekte werden durch Verletzung der idealen Kristallstruktur hervorgerufen. Dazu zählen ionisierte Störstellen, Gitterschwingungen und andere Wechselwirkungen der Ladungsträger mit der Gesamtheit des betrachteten Systems. Jedoch wird angenommen, daß aufgrund dieser physikalischen Effekte nur ein schwacher, nicht allzu häufig auftretender Streuprozess verursacht wird [19].

Die Streuraten sollen von einer äußeren Kraft unbeeinflusst sein und nur Auswirkungen auf die Dynamik aufgrund eines Impuls- und Energieübertrages und einer damit verbundenen Richtungsänderung der Ladungsträger haben. Alle anderen möglichen Arten von Wechselwirkungen mit der Kristallstruktur seien unterbunden. Im Falle des elektrischen Transports wird diese Kraft durch elektromagnetische Felder verursacht.

Eine weitere wichtige Bedingung ergibt sich daher, daß makroskopische Systeme untersucht werden, deren räumliche Ausdehnung groß ist. Die Zeit  $\tau_c$ , die Ladungsträger beanspruchen, während sie dem Einfluß einer Wechselwirkung unterliegen, muß klein im Gegensatz zur mittleren freien Flugdauer  $\tau_f$  sein. Sonst ist ein Einfluß der Streuraten aufgrund des elektrischen Feldes nicht ausgeschlossen. Ebenso muß die mittlere Verweildauer  $\tau_m$  dieser Teilchen im Halbleiterbauteil groß gegenüber der jeweiligen freien Flugdauer sein. Dies bedingt räumlich ausgedehnte Systeme, in denen eine Quantisierung aufgrund der Geometrie ausgeschlossen ist. Man kann folgende Ungleichung [20] für die Kollisionsdauer, der freien Flugdauer und der mittleren Verweildauer

$$\tau_c \ll \tau_f \ll \tau_m \quad (2.19)$$

angeben.

Damit ergibt sich auch, daß Ladungsträger viele Stöße in einem makroskopischen System erfahren. Jeder Streuprozess kann innerhalb dieser Annahme als augenblicklich im Vergleich mit der freien Flugdauer angesehen werden. Die obige Gleichung



impliziert auch, daß Kollisionen örtlich lokalisiert sind, also nur ein sehr kleines Raumgebiet beanspruchen. Mit diesen Annahmen ist auch gewährleistet, daß ein Impulsübertrag des elektrischen Feldes auf die Teilchen nur einen unwesentlichen Einfluß auf die Streuraten hat. Streuprozesse können also aufgrund der kurzen Kollisionszeiten nur wenig Impuls und Energie von den Ladungsträgern austauschen. Diese Folgerung stellt sicher, daß die dynamischen Größen den bestimmenden Einfluß auf die Transporteigenschaften eines Systems haben.

Unter diesen Bedingungen kann die Boltzmann-Gleichung (2.14) bei Kenntnis der zugrundeliegenden physikalischen Streuprozesse und der korrespondierenden mathematischen Beschreibung der daraus resultierenden Streuwahrscheinlichkeit von Gleichung 2.15 herangezogen werden, um einen irreversiblen, vom Gleichgewicht stark abweichenden Transportprozeß hinreichend genau zu modellieren. Da für die Dynamik der Ladungsträger, sowohl der Elektronen als auch der Löcher die Bandtheorie verwendet wird, muß also dasjenige elektrische Feld, das von einem äußeren, angelegten Potential hervorgerufen wird, klein im Gegensatz zu den Feldstärken des Kristallpotentials sein, da sonst eine Beeinflussung der Kristallstruktur in Betracht gezogen werden muß und sich die Bandstruktur ändert. Aufgrund einer starker Verzerrung der Elektronenbindungen im Kristall kann der sogenannte Starkeffekt [21] hervorgerufen werden, und Abweichungen von der Dynamik freier Teilchen treten auf. Wenn die magnetischen Felder groß sind, tritt Landauquantisierung [22] ein und zwingt die Ladungsträger zu einer Bewegung auf geschlossenen Bahnen, die ebenfalls nicht der Dynamik freier Teilchen unterliegen.

Eine weitere Näherung, die nicht explizit die Boltzmann-Gleichung betrifft, bezieht sich auf die Paargeneration und Rekombination [23]. Diese beiden Prozesse werden im Streuintegral 2.15 vernachlässigt, da man sonst ein Gleichungssystem für die Ladungsträger erhält, in dem die Verteilungsfunktionen der Elektronen und Löcher gekoppelt sind. Dies ist insofern eine vertretbare Einschränkung, da die Monte-Carlo-Methode zumeist auf Bauelemente im eingeschalteten Zustand, in dem hohe Stromdichten auftreten, angewendet wird. Die Monte-Carlo-Methode ist zur Bestimmung des Sperrbereichs wenig geeignet, da Elektronen eine Barriere überwinden müssen und daher eine Erweiterung in Hinsicht auf Injektion über diese Schwelle erforderlich ist. Wie bereits im vorigen Kapitel angeführt worden ist, wird auch das Pauliverbot nicht berücksichtigt. Das bedeutet, daß Vielkörperwechselwirkungen die Verteilungsfunktion nicht beeinflussen dürfen, wie es bei hohen Trägerkonzentrationen gegeben ist.

## 2.2 Die Monte-Carlo-Methode

Zur Lösung der Boltzmann-Gleichung werden in der Bauteiltechnologie verschiedene numerische Verfahren angewandt. Am gebräuchlichsten und als numerisch effizienteste Methode hat sich das sogenannte Drift-Diffusionsmodell bewiesen [24][25]. Für das Drift-Diffusionsmodell werden die nullte Momentengleichung, die Information über die Teilchenerhaltung angibt, als auch die erste Momentengleichung, die die Impulserhaltung beschreibt, herangezogen. Aufgrund der Robustheit und der vielfältigen Erweiterungsmöglichkeiten in bezug auf physikalische Effekte (Elektroneneinfang und -freisetzung, Band-zu-Band-Tunneln) konnte das Drift-Diffusionsmodell in Verbindung mit der Poisson-Gleichung zur Simulation von modernen Bauelementen sehr erfolgreich angewandt werden. Das hydrodynamische Transportmodell [26][27][28][29][30][31][32][33] berücksichtigt im Gegensatz zum Drift-Diffusionsmodell zusätzlich noch die Energie der Ladungsträger. Beide Modelle sind auf sehr einfache, parabolische Bandstrukturen beschränkt.

Eine rigorose Auffindung der Verteilungsfunktion ist nur mit dem Einsatz von numerischen Techniken möglich, nämlich der Monte-Carlo-Methode [34] oder der iterativen Technik [35]. Die Monte-Carlo-Methode hat bei der Analyse von hochenergetischen Ladungsträgern das Verständnis in physikalischer Hinsicht entscheidend verbessert. Im Gegensatz zu den oben angeführten approximativen Verfahren kann die Monte-Carlo-Methode nicht direkt von der Boltzmann-Gleichung abgeleitet werden<sup>2</sup>. Stattdessen versucht man mittels Simulation, die Verteilungsfunktion eines oder mehrerer Teilchen in einem abgeschlossenen System nachzubilden, ohne daß zusätzliche Annahmen die Transportgleichung einschränken.

Da sich diese Arbeit fast ausschließlich mit Simulationen mit der Monte-Carlo-Methode beschäftigt, soll in den folgenden Kapiteln eine Einführung in die Grundlagen dieses stochastischen Verfahrens gegeben werden. Danach wird auf den Aufbau eines solchen Programmes erklärt und die wichtigsten Schritte zur Durchführung einer solchen Simulation näher beschrieben. Dazu zählen die Bewegungsgleichungen, die Dauer eines freien Fluges und die Streuprozesse. Anschließend wird noch die Monte-Carlo-Poissonkopplung kurz erläutert, weil sich mit den Ladungsträgerkonzentrationen auch die Feldverteilung ändert.

---

<sup>2</sup>Für Vielteilchen-Monte-Carlo-Algorithmen kann sogar gezeigt werden, daß sich eine Lösung sogar aus der allgemeineren Pfadintegraltechnik, eine Erweiterung der Boltzmann-Gleichung, herleiten läßt [20].

### 2.2.1 Grundlagen der Monte-Carlo-Methode

Die Monte-Carlo-Methode, wie sie zur Berechnung des Ladungstransports in der Halbleitertechnologie angewandt wird, besteht darin, die Trajektorie eines oder mehrerer Ladungsträger innerhalb eines Kristalls, die äußeren Kräften und vorgegebenen Streuprozessen unterworfen sind, zu simulieren. Dabei werden die Bahnen des Elektrons im Impuls- und Ortsraum rechnerisch (Abbildung 2.2) verfolgt. Die Dauer eines freien Fluges eines Teilchens zwischen zwei aufeinanderfolgenden Stößen wird stochastisch gewählt. Auch die Streuprozesse, die eine sprunghafte Änderung der Impulsbahnen verursachen, werden stochastisch bestimmt. Daher ist jede Monte-Carlo-Simulation abhängig von der Bildung von Zufallszahlen [35][36][37][38].

Zur Untersuchung des stationären Transports ist es ausreichend, die Trajektorie eines einzelnen Teilchens zu betrachten. Man verfolgt also den Pfad dieses einen Partikels über einen langen Zeitraum und kann danach auf die Verteilung des gesamten Elektronengases schließen. Aufgrund des Ergodentheorems kann ein zeitlicher Mittelwert mit dem Scharmittelwert des Elektronenensembles gebildet werden. Will man transiente Transportprozesse analysieren, dann muß man die Trajektorien vieler Elektronen berücksichtigen. Die Qualität einer Monte-Carlo-Simulation hängt von der Kenntnis des zu untersuchenden physikalischen Systems ab. Je genauer die Bewegungsgleichungen und die Streuprozesse definiert sind, umso realistischer wird die Zuverlässigkeit der ermittelten Ergebnisse sein.

Während einer Monte-Carlo-Rechnung muß die Trajektorie eines Teilchens genügend lange verfolgt oder aber die Bahnen vieler Ladungsträger simuliert werden. Der Bedarf an Rechenzeit ist im Gegensatz zum Drift-Diffusionsmodell sehr hoch. In der Bauteilsimulation wird man daher Monte-Carlo-Rechnungen bevorzugt dann anwenden, wenn man an der Verteilung hochenergetischer Elektronen und Löcher bei stark variierenden elektrischen Feldstärken interessiert ist und die Dynamik der Teilchen nicht durch zusätzliche Annahme vereinfacht werden soll. Der Vorteil der Monte-Carlo-Methode besteht darin, daß es wesentlich einfacher ist, Teilchentrajektorien zu berechnen, als die entsprechende Boltzmanngleichung zu lösen. In vielen Fällen ist man bei approximativen Modellen sogar gezwungen, weitere Annahmen zu treffen, um zu einer Lösung zu gelangen. Für den Hochenergetransport oder bei Verwendung komplizierter physikalischer Modelle sind geeignete Resultate nur mit statistischen Methoden zu erwarten.

Die Struktur eines Monte-Carlo-Programms ist in Abbildung 2.3 veranschaulicht. Zu Beginn jeder Simulation wird das physikalische System festgelegt, also die Größen für die Bandstruktur und für die Streuraten. Danach werden die Anfangsbedingungen des Teilchens bestimmt und zugleich diejenigen Mittelwerte, die ermittelt werden sollen, Null gesetzt. Danach beginnt die Hauptschleife des Algorithmus. Die Dauer eines freien Fluges und der Teilchenzustand vor der Streuung werden berechnet. Danach erfolgt ein Summationsschritt für die Mittelwertbildung. Ein Stoß verändert die

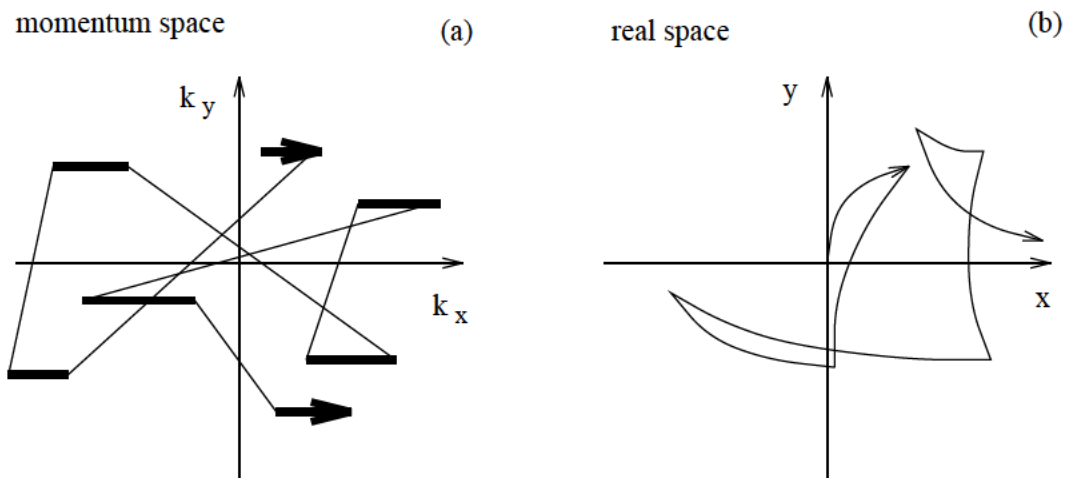


Abbildung 2.2: Die Bewegung eines Teilchens im Impuls- und Ortsraum wird schematisch dargestellt. Während sich die Koordinate im Impulsraum linear mit der Zeit ändert und bei Streuprozessen eine unstetige Änderung erfährt, verläuft eine Trajektorie im Ortsraum nichtlinear und bei Streuprozessen dagegen erfolgt keine unstetige Änderung. Stattdessen wird aufgrund der veränderten Impulskomponenten ein Richtungswechsel stattfinden. Die dicken Linien in Abbildung (a) repräsentieren den Anstieg des Impulses in Abhängigkeit der Zeit und entsprechen im Ortsraum einem parabelähnlichen freien Flug ohne Richtungsänderung. Dünne Linien in Abbildung (a) sind zur besseren Veranschaulichung.

Impulskomponenten des Ladungsträgers und wird ebenfalls statistisch untersucht. Diese Prozedur wird so lange fortgesetzt, bis genügend Streuprozesse stattgefunden haben. Danach erfolgt die Auswertung der Mittelwerte und die Ausgabe. Bei einem Vielteilchen-Monte-Carlo-Programm wird dagegen der Endzeitpunkt vorgegeben. Die Trajektorien einer großen Anzahl von Teilchen werden mit einem kleinen Zeitschritt  $\Delta t$  solange berechnet, bis der Endzeitpunkt (transiente Rechnung) oder aber Konvergenz (stationäre Rechnung) erreicht ist.

## 2.2.2 Bewegungsgleichungen

Ausgehend von der quantenmechanischen Betrachtung des gesamten Festkörpers sollen in diesem Kapitel die Bewegungsgleichungen des Ladungsträgertransports erarbeitet werden [39][40][41]. Ein Festkörper besteht aus der Gesamtheit von posi-

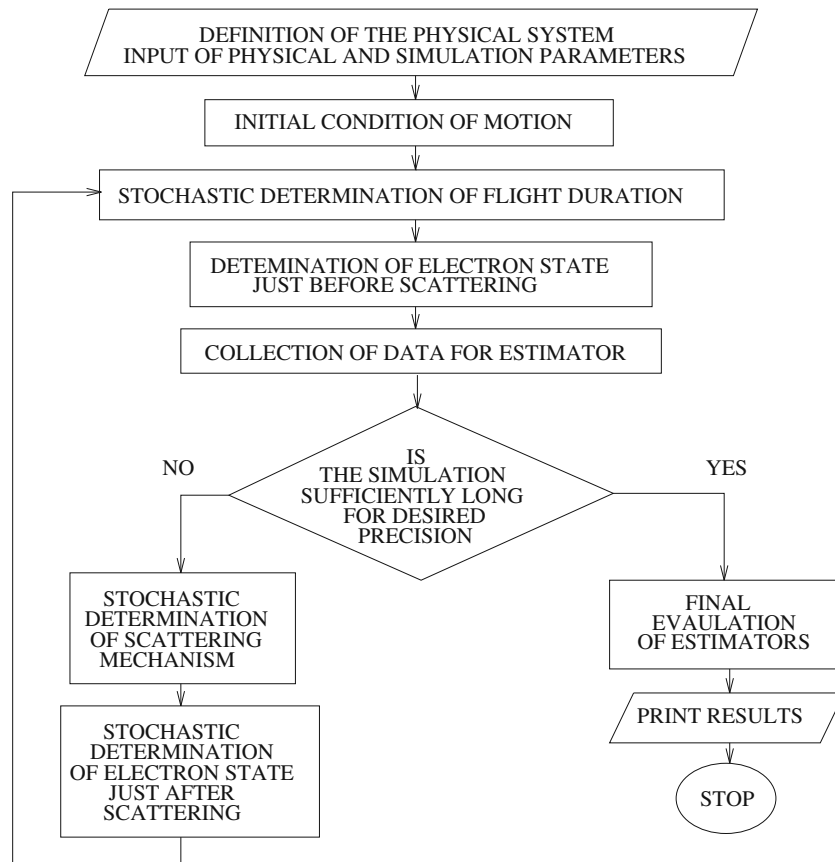


Abbildung 2.3: Das Flußdiagramm eines Einteilchen-Monte-Carlo-Programms.

tiv geladenen Gitterionen und Elektronen. Der Ladungsträgertransport wird aber fast ausschließlich von den Elektronen, die sich in höheren Bändern befinden, hervorgerufen. Das bedeutet, daß diejenigen Elektronen, die sich in abgeschlossenen Schalen befinden, zu Ionenrümpfen zusammengefaßt werden können und nicht zum Stromtransport beitragen. Als unabhängige Bestandteile betrachtet man nun die Gitterrümpfe und die Leitungselektronen. Wenn man nun die Gesamtenergie betrachtet, muß man folgende Beiträge berücksichtigen, nämlich die kinetische Energie der Gitterionen und die Wechselwirkung der Gitterionen  $H_{ion}$ , die kinetische Energie der Elektronen und die Wechselwirkung der Elektronen  $H_{el}$  untereinander als auch die Wechselwirkung der Elektronen und der Gitterionen  $H_{el-ion}$ . Zusätzlich beeinflußt eine äußere, angelegte Spannung, die in  $H_{ex}$  enthalten sein soll, die Dynamik des Gesamtsystems. In der quantenmechanischen Formulierung wird nun die Gesamtenergie mittels des Hamiltonoperators  $H$  als Summe aller einzelnen Energiebeiträge,

$$H = H_{el} + H_{ion} + H_{el-ion} + H_{ex}, \quad (2.20)$$

geschrieben. Eine rein quantenmechanische Lösung dieses gekoppelten Systems ist aufgrund der hohen Komplexität und der hohen Anzahl an Teilchen, die im Festkörper auftreten, nicht möglich. Das Gesamtsystem wird in zwei Teilsysteme aufgespalten, nämlich in ein Teilsystem der Elektronen in einem Kristallgitter<sup>3</sup> und ein Teilsystem der Ionen ohne Berücksichtigung der räumlichen Verteilung der Elektronen [42]. Die adiabatische Näherung besagt, daß sich die Elektronenkonfiguration aufgrund der niedrigen Masse der Valenzelektronen auf eine Verschiebung der Ionenlagen rasch einstellt, während die Ionen einer Verschiebung der Gesamtkonfiguration wegen der wesentlich höheren Masse im allgemeinen nur sehr langsam folgen können. Für die Elektronenbewegung ist also die augenblickliche Konfiguration der Ionen wichtig. Man erhält, da der Beitrag der kinetischen Energie der Ionen zum Stromtransport vernachlässigt werden kann, als relevanten Operator für die Gesamtenergie,

$$H = H_{el} + H_{el-ion} + H_{ex}, \quad (2.21)$$

der sich nur noch aus der Energie der Elektronen, der Wechselwirkung der Elektronen mit dem Gitter und des Energiebeitrags äußerer Einflüsse zusammensetzt. Da in dieser Schreibweise noch immer die Anteile aller Elektronen enthalten sind, die Gesamtwellenfunktion aus allen Elektronen zusammensetzt ist und einer praktischen Lösung nicht zugänglich ist, wird mit der Hartree-Fock-Näherung das Vielteilchenproblem auf ein Einteilchenproblem reduziert [42]. Anstatt eines Gesamtzustands, der die Konfiguration aller Elektronen aufweist, setzt sich die gesamte Elektronenkonfiguration näherungsweise als Produkt aus Einteilchenzuständen, die die kinetische Energie der Elektronen  $H_{kin}$  beinhalten. Die Wechselwirkung eines Elektrons mit allen anderen  $H_{el-el}$  ist dabei abgespalten werden [42],

$$H_{el} = H_{kin} + H_{el-el}. \quad (2.22)$$

Das bedeutet, daß man das gekoppelte Gesamtsystem aller Elektronen mit einer geeigneten Zusammensetzung von Einteilchenzuständen der einzelnen Elektronen beschreiben kann, wobei die Gesamtwellenfunktion in bezug auf Vertauschung zweier Einteilchenzustände antisymmetrisch sein muß. Der Hamiltonoperator für ein einziges Elektron setzt sich nun aus den folgenden Beiträgen zusammen,

$$H = H_{kin} + H_{el-el} + H_{el-ion} + H_{ex}, \quad (2.23)$$

wobei die kinetische Energie eines einzelnen Elektrons  $H_{kin}$ , die angelegten Spannungen  $H_{ex}$ , der Einfluß des Kristalls  $H_{el-ion}$  und Wechselwirkungen der Elektronen untereinander  $H_{el-el}$  auftreten. Dabei wird der Beitrag vom Gitter noch zusätzlich in

<sup>3</sup>Da bei den meisten Anwendungen in der Halbleitertechnologie die Spin-Bahn-Wechselwirkung der Elektronen nur einen unwesentlichen Beitrag zeigt, kann man diese vernachlässigen.

ein ungestörtes Gitterpotential  $H_C$  und in ein periodisches, um die Gleichgewichtslage oszillierendes Störpotential der einzelnen Ionen  $H_S$  aufgespalten,

$$H_{el-ion} = H_C + H_S. \quad (2.24)$$

Die Schrödingergleichung für die Wellenfunktion  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  hat damit folgendes Aussehen,

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + (H_{ex}(\mathbf{r}) + H_C(\mathbf{r}) + H_S(\mathbf{r}, t)) \Psi(\mathbf{r}, t) = -i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}, \quad (2.25)$$

wenn die Elektron-Elektron-Wechselwirkung aufgrund niedriger Konzentrationen vernachlässigt beziehungsweise als kleine Störung aufgefaßt wird. Dabei gibt der Ausdruck  $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$  die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen an. Die potentielle Energie setzt sich aus den am Festkörper angelegten Spannungen und den sogenannten "Built-in"-Potentialen  $H_{ex}(\mathbf{r})$ , dem periodischen Kristallpotential  $H_C(\mathbf{r})$  und einem Störpotential  $H_S(\mathbf{r}, t)$  zusammen. Die erste Komponente beschreibt sowohl die angelegte Spannung am Festkörper, der zweite Term diejenigen Wechselwirkungen, die von dem periodischen Potential auf die Elektronen einwirken. Der letzte Beitrag beschreibt die Störungen des idealen Kristalls und Streuung an Störstellen. Dieser Beitrag muß quantenmechanisch untersucht werden. Stoßionisation wird aufgrund phänomenologischer Gesetzmäßigkeiten bestimmt und ebenfalls als Störung behandelt.

Vernachlässigt man den ersten und dritten Term der potentiellen Energie ( $H_{ex}(\mathbf{r})$  und  $H_S(\mathbf{r}, t)$ ) in Gleichung 2.25 und betrachtet man nur stationäre Elektronenzustände, dann erhält man als Lösung dieser Schrödingergleichung die Wellenfunktion  $\Psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})$  der Elektronen in einem idealen Kristall als Blochfunktionen

$$\Psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V_0}} u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (2.26)$$

mit dem Bandindex  $n$  und dem Kristallvolumen  $V_0$  als Normierungskonstante. Die Funktion  $u_n(\mathbf{k}, \mathbf{r})$  enthält die Periodizität des Kristalls. Ein vollständiger Satz aller Energieeigenwerte  $\epsilon_n(\mathbf{k})$ , die für jeweils ein Band des Festkörpers kontinuierlich sind, und die verbotenen Zonen zwischen den einzelnen Bändern wird als Bandstruktur eines Materials bezeichnet.

Diese Blochfunktionen sind aber auch Eigenfunktionen zu dem folgenden Operator  $\epsilon_n(\mathbf{k})(-i\nabla_{\mathbf{k}})$  und es gilt

$$\epsilon_n(\mathbf{k})(-i\nabla_{\mathbf{k}})\Psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \epsilon_n(\mathbf{k})\Psi_n(\mathbf{k}, \mathbf{r}). \quad (2.27)$$

Nun kann die Schrödingergleichung 2.25 derart umgeformt werden, daß eine Beziehung zwischen dem Operator mit der kinetischen Energie und dem periodischen Kristallpotential auftritt,

$$(\epsilon_n(\mathbf{k})(-i\nabla_{\mathbf{k}}) + H_{ex}(\mathbf{r})) \Psi_n(\mathbf{r}, t) = -i\hbar \frac{\partial \Psi_n(\mathbf{r}, t)}{\partial t}, \quad (2.28)$$

In dieser Gleichung tritt also neben dem neuen Operator nur noch ein Term auf, der zum äußeren Potential proportional ist, wobei magnetische Felder vernachlässigt werden. Die Störung  $H_S$  wird im nächsten Kapitel behandelt. Ferner wird angenommen, daß das elektrische Feld zu schwach sei, um Übergänge zwischen den Bändern zu ermöglichen und zusätzlich, daß die Bänder nicht entartet sind<sup>4</sup>. Damit ist das periodische Kristallpotential direkt in die Eigenschaften des Elektrons inkorporiert. Das Elektron verhält sich also bei einem äußeren elektrischen Feld als freies Teilchen mit der negativen Elementarladung  $e$ , wobei dieses der durch die Bandstruktur gegebenen Dispersionsrelation für die Energie unterliegt. Die Dynamik dieser Kristallelektronen wird mit

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = -e \mathbf{E} \quad (2.29)$$

berechnet, wobei das elektrische Feld mit dem Potentialoperator  $H_{ex}(\mathbf{r}) = U_{ex}(\mathbf{r})$  in folgender Relation [42]

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{e} \nabla_r U_{ex}(\mathbf{r}). \quad (2.30)$$

steht. Die Ladung des Kristallelektrons wird mit  $e$  bezeichnet. Im Ortsraum kann nun die Bewegung der Ladungsträger mit der Gruppengeschwindigkeit

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{1}{\hbar} \nabla_k \epsilon_n(\mathbf{k}) \quad (2.31)$$

beschrieben werden. Ein vollbesetztes Band liefert also, wie bereits im Beginn dieses Kapitels gesagt worden ist, keinen Beitrag zum elektrischen Strom.

Halbleitermaterialien werden nun so charakterisiert, daß man das letzte Band, das bei einer Temperatur von  $0K$  besetzt ist, als Valenzband und das nächsthöher liegende als Leitfähigkeitsband bezeichnet. Zwischen diesen beiden Bändern befindet sich eine verbotene Zone mit einer Energiedifferenz  $\epsilon_g$ , in der sich auch die Fermienergie  $\epsilon_F$  befindet. Da Elektronen einer Fermi-Dirac-Statistik gehorchen, kann jeder Zustand nur ein einziges Mal besetzt werden. Bei einer Temperatur von  $0K$  sind alle Zustände unterhalb des Fermi-niveaus besetzt, und daher verhalten sich Halbleiter wie Isolatoren, da keine Elektronen im Leitfähigkeitsband anzutreffen sind. Erst bei höheren Temperaturen treten Elektronenzustände gemäß der Fermi-Dirac-Verteilungsfunktion in diesem Band auf, und somit kann Strom geleitet werden.

<sup>4</sup>Die hier getroffenen Annahmen müssen beim Transport von Elektronen und Löchern gesondert berücksichtigt werden, da sonst die semiklassische Näherung für Kristallelektronen nicht gültig ist. Einerseits verändert ein hohes elektrisches Feld die Bandstruktur (Starkeffekt), andererseits sind Regionen mit einem sehr hohen elektrischen Feld auf kleine Bereiche im Halbleiterbauelement beschränkt. Für entartete Bänder sollte in der Literatur eine Diskussion oder Abschätzung eines vom elektrischen Feld verursachten Bandüberganges zu finden sein. Jedoch konnte in keiner Veröffentlichung, die sich mit Bandstrukturen und deren Einfluß auf den Elektronentransport beschäftigt, eine nähere Untersuchung entdeckt werden. Es ist also hervorzuheben, daß eine Analyse dieser Problematik bisher noch ausständig ist.



Nichtbesetzte Zustände im Valenzband werden als Löcher bezeichnet und tragen ebenso zum Stromtransport bei, wobei diese mit entgegengesetzter Ladung zu den Elektronen angenommen werden. Mit der Dotierung von Halbleitern durch Akzeptoren und Donoren können die elektronischen Eigenschaften von Halbleitern verändert werden, da sich dadurch die Fermikante verschiebt. Das bedeutet, daß in  $n$ -dotierten Halbleitern mehr Elektronen aufgrund der niedrigeren Ionisierungsenergien der ungesättigten Bindungen der Dopanden im Leitfähigkeitsband gemäß der statistischen Verteilung vorhanden sein werden, falls die Temperatur höher als der absolute Nullpunkt ist. In Analogie sind daher bei  $p$ -dotierten Materialien nicht alle Zustände des Valenzbandes gefüllt und Ladungstransport wird von den Löchern verursacht.

### 2.2.3 Streuprozesse

In diesem Kapitel sollen die Grundlagen der Streuprozesse abgeleitet werden. Wie bereits gezeigt worden ist, sind einige, schwache Wechselwirkungen der Ladungsträger nicht in den Bewegungsgleichungen enthalten. Stattdessen erfahren Elektronen und Löcher aufgrund dieser Prozesse eine Ablenkung und somit eine abrupte Änderung ihres Impulses. Im folgenden wird auf Wechselwirkungen von Elektronen untereinander beziehungsweise von Löchern untereinander nicht eingegangen. Ladungsträger erleiden Stöße wegen der durch thermische Bewegung der Gitterionen hervorgerufenen Störung der idealen Kristallstruktur oder aufgrund der Wechselwirkung mit ionisierten Störstellen.

Ausgehend von der separierten Schrödingergleichung 2.25 für ein Elektron sei der Hamiltonoperator wie folgt

$$H_0 = H_{kin} + H_C + H_{ex} \quad (2.32)$$

$$H = H_0 + H_S \quad (2.33)$$

zusammengesetzt. Damit ergibt sich für die ungestörte Schrödingergleichung eines einzelnen Elektrons die folgende Form,

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla \Psi_n(\mathbf{r}, t) + (H_{ex}(\mathbf{r}) + H_C(\mathbf{r})) \Psi_n(\mathbf{r}, t) = -i\hbar \frac{\partial \Psi_n(\mathbf{r}, t)}{\partial t}, \quad (2.34)$$

wobei alle Wechselwirkungen der Elektronen mit dem Kristall gering im Vergleich mit den Termen des ungestörten Hamiltonoperators seien.

Der ungestörte Zustand des Systems  $|\mathbf{k}, c\rangle$ , also der Einelektronenzustand  $|\mathbf{k}\rangle$  und der Zustand des gesamten Kristalls  $|c\rangle$  werden als Produkt der Zustandsfunktion des einen Elektrons und der Zustandsfunktion des gesamten Kristalls zusammengesetzt,

$$|\mathbf{k}, c\rangle = |\mathbf{k}\rangle |c\rangle. \quad (2.35)$$

Dann kann, vorausgesetzt daß der ungestörte Hamiltonoperator zeitunabhängig und die Störung gleichfalls zeitunabhängig ist oder nur eine periodische Zeitabhängigkeit aufweist [21][43], die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit  $P(\mathbf{k}, c; \mathbf{k}', c')$  eines Zustands, die von einer kleinen Störung  $H_S$  hervorgerufen wird, in erster Ordnung mit der goldenen Regel von Fermi [21][35]

$$P(\mathbf{k}, c; \mathbf{k}', c') = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{k}', c' | H_S | \mathbf{k}, c \rangle|^2 \delta[\epsilon_{n'}(\mathbf{k}') - \epsilon_n(\mathbf{k}) \pm \Delta\epsilon(c', c)] \quad (2.36)$$

berechnet werden, wobei die  $\delta$ -Funktion die Energieerhaltung angibt. Die Energiedifferenz des Kristalls wird dabei als  $\Delta\epsilon(c', c)$  bezeichnet. Im allgemeinen ist der Hamiltonoperator  $H_S(\mathbf{r}, \mathbf{y})$  eine Funktion der Raumkoordinaten des Elektrons  $\mathbf{r}$  und der augenblicklichen Verschiebung der Ionenrümpfe aus deren Gleichgewichtslage  $\mathbf{y}$ . Es ist nun angebracht, die Fouriertransformierte des Hamiltonoperators bezüglich der Koordinate  $\mathbf{r}$  des Elektrons zu bilden, da der Elektronenzustand als ebene Welle angesetzt wird und der Hamiltonoperator sich in einen Term, der nur auf das Kristallsystem wirkt, und einen Term, der nur auf das Elektron wirkt, aufgespalten werden kann. Im allgemeinen wird die Abhängigkeit vom Elektronenzustand als  $\exp(i\mathbf{q}\mathbf{r})$  angesetzt. Man erhält für den Term in spitzen Klammern vom Zustand  $|\mathbf{k}, c\rangle$  in  $|\mathbf{k}', c'\rangle$

$$\langle \mathbf{k}', c' | H_S | \mathbf{k}, c \rangle = \frac{2\pi^{3/2}}{V_0} \sum_{\mathbf{q}} \langle c' | H_S | c \rangle \int_V d^3r \Psi_n^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \Psi_n(\mathbf{k}', \mathbf{r}), \quad (2.37)$$

wenn über das gesamte Volumen  $V$  des Materials integriert wird. Dabei soll die Impulserhaltung

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}' + \mathbf{q} \quad (2.38)$$

mit dem Wellenvektor des Kristalls  $\mathbf{q}$  erfüllt sein. Das Integral in Gleichung 2.37 wird nun mit der Transformation  $\mathbf{r}'' = \mathbf{r} - \mathbf{R}$  umgeformt. Der Vektor  $\mathbf{R}$  führt zu einer Zelle im Raumgitter,  $\mathbf{r}''$  gibt die Lage des Elektrons innerhalb dieser Zelle an. Außerdem sei die Wellenfunktion auf die Anzahl der Gitterzellen  $N_g$  normiert. Damit ergibt sich mit dem Volumen der Einheitszelle im Raumgitter  $V_{cell}$

$$\begin{aligned} \int_V d^3r \Psi_n^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \Psi_n(\mathbf{k}', \mathbf{r}) = \\ \sum_{\mathbf{R}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\mathbf{q})\mathbf{R}} \frac{1}{N_g} \int_{V_{cell}} d^3r'' u_n^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}'') u_n(\mathbf{k}', \mathbf{r}'') e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\mathbf{q})\mathbf{r}''}. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Bei näherer Betrachtung zeigt sich, daß man die Summe aller Zellen im Kristall als

$$\sum_{\mathbf{R}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\mathbf{q})\mathbf{R}} = \begin{cases} N_g & , \quad \mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{q} = n\mathbf{G} \\ 0 & , \quad \text{alle anderen Fälle} \end{cases} \quad (2.40)$$

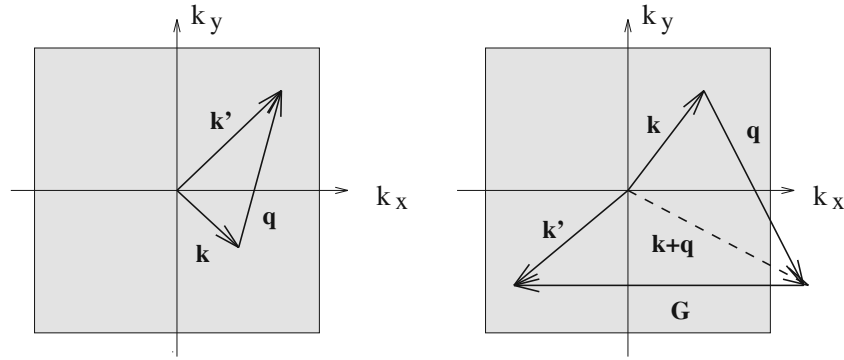


Abbildung 2.4: Ein Normalprozess ist in der linken Abbildung dargestellt. Im Gegensatz dazu veranschaulicht die rechte Abbildung einen Umklappprozess in einem zweidimensionalen quadratischen Gitter. Der reziproke Gittervektor  $\mathbf{G}$  ist gleich  $2\pi/a$ , wobei  $a$  die reale Gitterkonstante bezeichnet. Der Zustand  $\mathbf{k}'$  nach der Streuung befindet sich außerhalb der Brillouinzone, wird aber mittels geometrischer Verschiebung zurück in die Brillouinzone projiziert.

ausdrücken kann, wobei  $\mathbf{G}$  ein Gittervektor des reziproken Gitters ist. Die Prozesse können nun in Normalprozess, falls  $n$  gleich Null ist oder als Umklappprozess, falls  $n$  ungleich Null ist, unterteilt werden. Faßt man nun alle Beiträge zusammen, so kann man für die Übergangswahrscheinlichkeit folgendes Ergebnis

$$P(\mathbf{k}, c; \mathbf{k}', c') = \frac{(2\pi)^4}{\hbar V_0^2} \left| \sum_{\mathbf{q}} \langle c' | H_S | c \rangle \mathcal{G}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \delta[\epsilon_{n'}(\mathbf{k}') - \epsilon_n(\mathbf{k}) \pm \Delta\epsilon(c', c)] \right|^2 \quad (2.41)$$

anschreiben, wobei der Überlappungsfaktor als Integral

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \left| \int_{V_{cell}} d^3 r'' u_n^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}'') u_n(\mathbf{k}', \mathbf{r}'') e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\mathbf{q})\mathbf{r}''} \right|^2 \quad (2.42)$$

berechnet werden kann. Dieser Faktor wird, da in den meisten Fällen auch das Matrixelement  $\langle c' | H_S | c \rangle$  nicht genau bekannt ist, bei der Berechnung der Streuraten oft vernachlässigt, als konstant angesetzt oder aber in das Matrixelement einbezogen [35][36]. Jedoch wird angenommen, daß diese Korrektur Streuprozesse bei hohen Kollisionsenergien in einem starken Ausmaß beeinflusst und von der exakten Kenntnis der Wellenfunktion abhängig ist [22]. Eine Berechnung und Auswertung dieses Integrals für einfache Bandstrukturen findet sich bei [44].

Der nächste Schritt, um die totale Streurrate  $\lambda(\mathbf{k})$  zu erhalten, besteht aus der Summation über alle Endzustände  $\mathbf{k}'$ . Die Summe

$$\sum_{\mathbf{k}'} \rightarrow \frac{V_0}{2\pi^3} \int d^3 k' \quad (2.43)$$

wird in ein Integral umgewandelt, und man erhält für die totale Streurrate bei Verwendung der Definition von Gleichung 2.18

$$S(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \frac{V_0}{2\pi^3} P(\mathbf{k}', c'; \mathbf{k}, c), \quad (2.44)$$

$$\lambda(\mathbf{k}) = \int_{V_0} S(\mathbf{k}', \mathbf{k}) d^3 k'. \quad (2.45)$$

Eine weitere Auswertung der Streuprozesse hängt von den physikalischen Eigenschaften und von der verwendeten Bandstruktur für das jeweilige Material ab. Bei dieser Näherung erster Ordnung gilt die Energieerhaltung, und ferner hat die Wechselwirkung der Elektronen mit dem Kristall eine unendliche Lebensdauer. Eine rigorose Behandlung der Streuraten mithilfe von Green'schen Funktionen kann grundsätzlich durchgeführt werden [21], doch speziell deren Lösung mittels eines iterativen Verfahrens ist sehr rechenzeitintensiv. Für die meisten Anwendungen und wegen der hochgradigen Komplexität dieser iterativen Techniken beschränkt man sich üblicherweise auf eine Näherung erster Ordnung.

Um den Zustand des Elektrons nach der Streuung zu ermitteln, ist es notwendig, die Winkelverteilung des betrachteten Streuprozesses zu kennen. Gibt es keine Winkelabhängigkeit, so wird der Stoß isotrop verlaufen, andernfalls muß der polare Winkel gemäß dieser Verteilung berechnet werden. Der azimutale Winkel weist, da bei allen, in dieser Arbeit zu behandelnden Streumechanismen keine Abhängigkeit von diesem Winkel gegeben ist, immer eine isotrope Verteilung auf. Im nächsten Kapitel werden die einzelnen Prozesse sowohl für Silizium als auch für Siliziumdioxid diskutiert, die Streuraten und die daraus resultierende Winkelverteilung mathematisch ausgewertet.

### 2.2.4 Dauer des freien Fluges

Der Ausdruck  $\lambda(\mathbf{k}(t))dt$  gibt die Wahrscheinlichkeit an, daß ein Teilchen zur Zeit  $t$  im Intervall  $dt$  gestreut wird. Findet zum Zeitpunkt  $t = 0$  ein Streuprozess statt, dann gibt die Wahrscheinlichkeit  $P(t)$  an, daß das Teilchen keiner erneuten Streuung unterliegt,

$$P(t) = \begin{cases} 1 - \exp\left(-\int_0^t \lambda(\mathbf{k}(t')) dt'\right) & , \quad t \geq 0 \\ 0 & , \quad t < 0. \end{cases} \quad (2.46)$$

Die Funktion  $P(t)$  erfüllt folgende Bedingung,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P(t) = 1. \quad (2.47)$$

Man erzeugt nun eine im Intervall  $[0, 1]$  gleichverteilte Zufallszahl  $r$  und bestimmt die freie Flugzeit gemäß

$$P(t_f) = r. \quad (2.48)$$

Setzt man diese Gleichung in die Wahrscheinlichkeitsverteilung 2.46, so erhält man die Integralgleichung

$$\int_0^{t_f} \lambda(\mathbf{k}(t)) dt = -\log(1 - r). \quad (2.49)$$

Die rechte Seite der obigen Gleichung kann, da die Zufallszahl  $r$  im Intervall 0 und 1 gleichverteilt ist, durch  $-\log r$  ersetzt werden. Die Integration erfolgt also entlang einer Teilchentrajektorie  $\mathbf{k}(t)$ , die ihrerseits durch Integration der Bewegungsgleichungen gewonnen wird. In der Regel ist eine Auswertung dieses Integrals schwierig und sehr rechenzeitaufwendig.

## 2.2.5 Numerische Aspekte

### Das Prinzip der Selbststreuung

Da die Berechnung der freien Flugzeit  $t_f$  während einer Monte-Carlo-Simulation sehr oft durchgeführt wird, empfiehlt es sich, auf das Prinzip der Selbststreuung zurückzugreifen [37]. Man addiert zu der gesamten Streurrate einen fiktiven Term  $\Gamma_0 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ , sodaß sich eine konstante Streurrate

$$\Gamma = \lambda(\mathbf{k}) + \Gamma_0 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (2.50)$$

ergibt, wobei  $\Gamma_0$  eine geeignete Konstante ist. Der Zustand des Elektrons wird bei einer fiktiven Selbststreuung nicht verändert. Damit kann Gleichung 2.49 zu

$$\Gamma t_f = -\log r \quad (2.51)$$

vereinfacht werden. Aus dieser Gleichung kann nun die freie Flugzeit ermittelt werden. Wenn nun das Teilchen eine solche Selbststreuung unterläuft, dann ändert sich weder der Wellenvektor noch die Geschwindigkeit. Die einzige Forderung an die Konstante  $\Gamma$  ist die, daß

$$\Gamma > \lambda(\mathbf{k}(t)) \quad \forall t \in [0, t_f] \quad (2.52)$$

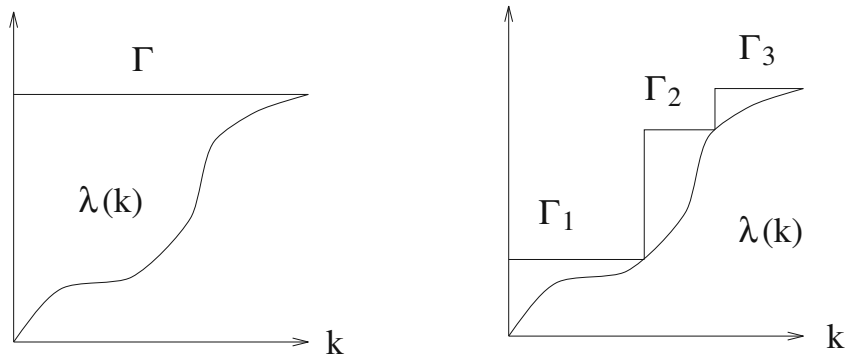


Abbildung 2.5: Das Prinzip der Selbststreuung. In der linken Abbildung ist eine einzige konstante Selbststrefunktion eingezeichnet. Für die meisten technischen Anwendungen wird jedoch eine treppenförmige Selbststreurate der rechten Abbildung gewählt.

gilt und  $\Gamma$  eine obere Schranke der Streurrate sein muß. Der Vorteil, der mit dieser Vereinfachung erzielt wird und auch die Anzahl der zusätzlichen, fiktiven Streuprozesse wird wegen des einfachen Lösungsalgorithmus mehr als aufgewogen. Der Beweis, daß mit Einführung dieser mathematischen Vereinfachung keine Änderung während einer Simulation bewirkt wird, findet sich in [36][37]. Dieses Verfahren wird in vielen Monte-Carlo-Programmen dahingehend erweitert, daß man statt einer einzigen konstanten Selbststreurate eine treppenförmig konstante Funktion einführt, um die Anzahl der Selbststreuungen gering zu halten. Abbildung 2.5 veranschaulicht diesen Sachverhalt.

Bei Bandstrukturen, in denen von einem einzigen nichtparabolischen Band ausgegangen wird und der betrachtete Energiebereich größer als die Phononenenergien ist, kann man mit der Funktion

$$\Gamma = a |\mathbf{k}|^2 + b \quad (2.53)$$

mit zwei geeigneten Konstanten  $a$  und  $b$  die Anzahl der Selbststreuungen verringern [45]. Man erhält anstatt einer linearen Gleichung eine Gleichung dritten Grades für die freie Flugzeit, die immer eine reelle Lösung hat, sofern  $a > 0$  ist.

### Wahl des Streuprozesses

Am Ende eines freien Fluges wird noch eine Zufallszahl  $r$  gewählt, die zwischen

$$0 \leq r \leq \lambda(\mathbf{k}) \quad (2.54)$$

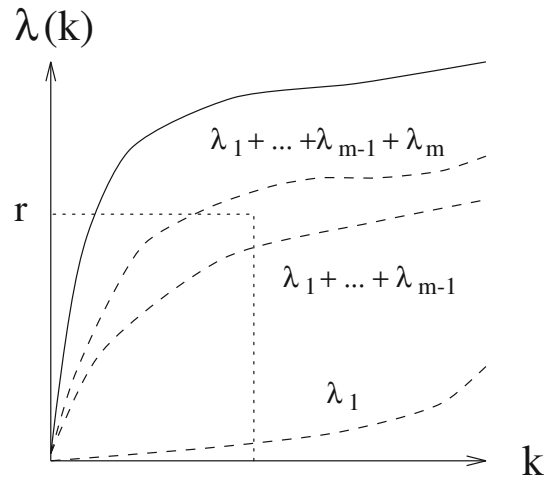


Abbildung 2.6: Wahl des Streuprozesses mithilfe einer gleichverteilten Zufallszahl  $r$  im Intervall  $[0, \lambda(\mathbf{k})]$ . Die Summe der partiellen Streuraten ist strichliert eingezeichnet.

gleichverteilt ist. Die gesamte Streurrate  $\lambda(\mathbf{k})$  setzt sich aus den Beiträgen der einzelnen Teilprozesse  $\lambda_i(\mathbf{k})$  zusammen,

$$\lambda(\mathbf{k}) = \sum_{i=1}^N \lambda_i(\mathbf{k}). \quad (2.55)$$

Der Streuprozess  $m$  wird ausgewählt, falls die Ungleichung

$$\sum_{i=1}^{m-1} \lambda_i(\mathbf{k}) \leq r \leq \sum_{i=1}^m \lambda_i(\mathbf{k}) \quad (2.56)$$

erfüllt ist und ist in Abbildung 2.6 schematisch eingezeichnet. Dabei kann zusätzlich zur physikalischen Streurrate auch noch die Selbststreuung zur gesamte Streuwahrscheinlichkeit beitragen. Der Zustand des gestreuten Teilchens wird im Einklang mit der Energiebilanz und der Winkelverteilung des betrachteten Streuprozesses berechnet.

### Gewichtung der Teilchen

Zur Simulation seltener Ereignisse ist es erforderlich, den Teilchen ein bestimmtes statistisches Gewicht zuzuordnen. Da bei einer Monte-Carlo-Simulation die tatsächliche Verteilungsfunktion mit einer Häufigkeitsverteilung nachgebildet wird, bedeutet ein niedriges Gewicht, daß das Teilchen nur selten in dieser Konfiguration anzutreffen sein wird. Daher kann eine Aufspaltung derart postuliert werden, daß

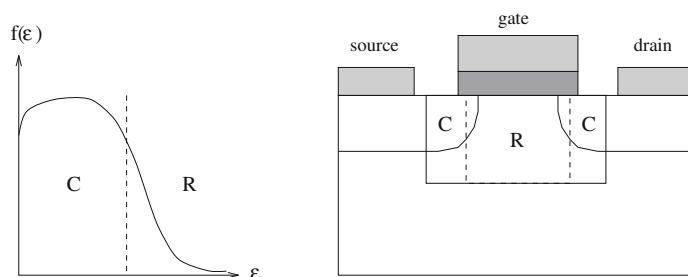


Abbildung 2.7: Die linke Abbildung veranschaulicht einen energieabhängigen Multiplikationsalgorithmus mit den beiden Bereichen C und R. Die Energie und der Faktor zur Vervielfachung der Trajektorie zur Bestimmung des Hochenergieanteils der Verteilungsfunktion  $f(\epsilon)$  können beliebig gewählt werden. In der rechten Zeichnung ist ein ortsabhängiges Multiplikationsschema dargestellt, wobei sich der Simulationsbereich einer Monte-Carlo-Rechnung nur auf ein Teilgebiet des gesamten Transistors erstreckt.

während einer Simulation Teilchen mit niedrigem statistischem Gewicht mittels eines geeigneten Verfahrens gesondert betrachtet werden.

Von Phillips und Price [37] ist ein Algorithmus vorgeschlagen worden, um die Verteilungsfunktion der Elektronen auch für hohe Energien hinreichend genau zu bestimmen. Dabei wird eine willkürliche Unterteilung im Energiebereich vorgenommen. Jener Teil des Phasenraumes, in dem die interessierenden seltenen Teilchenzustände auftreten, wird als R (aus dem englischen *rare*) bezeichnet, der andere Bereich als C (für *common*). Der Anfangszustand eines Teilchens ist immer im C-Bereich zu wählen. Tritt während eines freien Fluges dieses Partikel in den R-Bereich, so wird der Anfangszustand gespeichert und für dieses Teilchen werden  $N$  neue Trajektorien solange im R-Bereich berechnet, bis ein nochmaliger Eintritt in den C-Bereich erfolgt. Jede dieser so ermittelten Teilchenbahnen wird mit einem statistischen Gewicht  $1/N$  in bezug auf die Verteilungsfunktion berücksichtigt.

Eine andere Möglichkeit bezieht sich auf die Unterteilung des räumlichen Simulationsgebietes. Dabei wird besonderes Augenmerk auf diejenigen Ladungsträger gelegt, die vom Source-Bereich in den Kanal des Transistors beschleunigt werden. Die Gewichtung erfolgt ebenso wie im obigen Absatz beschrieben. Abbildung 2.7 zeigt eine Gegenüberstellung dieser beiden Multiplikationsverfahren. Die Verallgemeinerung dieses Verfahrens auf mehrere R-Bereiche ist möglich, indem man in jedem Bereich  $R_i$  eine Vervielfachung der Trajektorien zulässt. Damit kann die Häufigkeit seltener Ereignisse bei Beibehaltung der statistischen Gesetzmäßigkeiten sehr effizient erhöht werden.



### Berechnung von Mittelwerten

Der Zeitmittelwert einer physikalischen Observablen  $A(\mathbf{k}(t))$  wie der mittleren Teilchenenergie oder der mittleren Geschwindigkeit einer Monte-Carlo-Simulation [35] [36][46] ist gegeben als

$$\langle A(\mathbf{k}) \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T A(\mathbf{k}(t)) dt = \frac{1}{T} \sum_{i=1}^N \int_0^{t_i} A(\mathbf{k}(t)) dt. \quad (2.57)$$

Dabei wird die Trajektorie eines Teilchens bis zum Zeitpunkt  $T$  nachgebildet. In der Summendarstellung wird die Unterteilung der einzelnen freien Flugzeiten berücksichtigt. Da aber zu jedem freien Flug ein Integral ausgewertet werden muß, ist diese Art der Mittelwertbildung nicht empfehlenswert. Unter der Berücksichtigung, daß die stationäre Verteilungsfunktion proportional der Zahl der Ladungsträger  $n(\mathbf{k})\Delta\mathbf{k}$  ist, die sich zur Zeit  $t$  in einer Umgebung  $\Delta\mathbf{k}$  um  $\mathbf{k}$  befinden, kann die obige Formel einer Mittelwertberechnung als Summe des Produkts einer impulsabhängigen Verteilungsfunktion und der jeweiligen physikalischen Observablen [46][47]

$$\langle A(\mathbf{k}) \rangle = C \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) A(\mathbf{k}) \quad (2.58)$$

umgewandelt werden, wenn  $C$  eine Normierungskonstante darstellt. Bezieht man jetzt die Tatsache ein, daß die Elektronen ihre Zustände  $\mathbf{k}$  deterministisch ändern, so kann man die Elektronenverteilung mit

$$f(\mathbf{k}) = \frac{1}{\tau_0} f_b(\mathbf{k}) \lambda^{-1}(\mathbf{k}) \quad (2.59)$$

beschreiben [36][46], worin  $f_b(\mathbf{k})$  die Verteilungsfunktion des Teilchens unmittelbar vor der Streuung repräsentiert und proportional zu der Wahrscheinlichkeit ist, daß das Partikel in der Umgebung von  $(\mathbf{k}, \mathbf{r})$  anzutreffen sein wird. Dabei ist  $\tau_0$  eine geeignete, noch zu untersuchende Normierungskonstante, die mit der Streuwahrscheinlichkeit in Verbindung gebracht werden kann [36][46]. Die Berechnung der Mittelwerte beschränkt sich also auf die Summation der physikalischen Größen vor dem Stoß. Einsetzen der obigen Gleichung in die Beziehung 2.58 ergibt nun für den Mittelwert  $\langle A(\mathbf{k}) \rangle$  [46]

$$\langle A(\mathbf{k}) \rangle = \frac{\sum_{i=1}^N A_{bi} \lambda_{bi}^{-1}}{\sum_{i=1}^N \lambda_{bi}^{-1}}. \quad (2.60)$$

Im Fall, daß die gesamte Streurrate konstant ist,

$$\lambda_{bi} = \Gamma, \quad \forall i \leq N, \quad (2.61)$$

gehört der Mittelwert der folgenden Relation,

$$\langle A(\mathbf{k}) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N A_{bi}. \quad (2.62)$$

Da sich die Mittelwertbildung in der bisherigen Ableitung nur auf die Impulskoordinaten erstreckt, kann eine Erweiterung auf ortsabhängige Mittelwerte eingeführt werden, indem man annimmt, daß das Simulationsgebiet in eine Menge  $\{V_j\}$  von Diskretisierungsvolumina unterteilt ist. Innerhalb eines Volumen  $V_j$  wird dann räumlich gemittelt, wenn die Gleichung 2.60 in der erweiterten Form

$$\langle A(\mathbf{k}) \rangle (\mathbf{r}_j) = \frac{\sum_{r_{bi} \in V_j} A_{bi} \lambda_{bi}^{-1}}{\sum_{r_{bi} \in V_j} \lambda_{bi}^{-1}} \quad (2.63)$$

verwendet wird [23]. Will man den Mittelwert des gesamten Systems wissen, dann muß zusätzlich noch eine Mittelung im Ortsraum erfolgen.

## 2.3 Monte-Carlo-Poissonkopplung

Da in sehr kleinen Bauteilen aufgrund stark variierender elektrischer Feldstärken nichtlokale Effekte im Kanalbereich auftreten, kann aufgrund des Transports beweglicher Ladung eine veränderte Potentialverteilung erwartet werden, die wiederum den Ladungstransport beeinflusst. Daher ist es zweckmäßig, einen Simulator so zu konzipieren, daß die Transportgleichungen der Ladungsträger mit der Poissongleichung konsistent behandelt werden. Die Poissongleichung

$$\nabla \cdot (\bar{\epsilon}_0 \bar{\epsilon}_r \nabla \psi) = q(n - p - N_C) \quad (2.64)$$

legt die Potentialverteilung des Bauteils fest, wobei  $\bar{\epsilon}_0$  die Dielektrizitätskonstante des Vakuums,  $\bar{\epsilon}_r$  die materialabhängige Dielektrizitätskonstante,  $n$  die Elektronenkonzentration,  $p$  die Löcherkonzentration und  $N_C$  die Dotierung im Halbleiter darstellen. Das Standarditerationsverfahren besteht nun darin, die mithilfe der Monte-Carlo-Methode berechneten Konzentrationen für Elektronen und Löcher in die Poissongleichung einzusetzen, um mit der daraus gewonnenen Potentialverteilung eine erneute Monte-Carlo-Rechnung durchzuführen, bis das vorgegebene Konvergenzkriterium erfüllt ist. Eine genaue Darstellung dieser Problematik und der damit verbundenen Konvergenzeigenschaften findet sich in [23][47][48].

# Kapitel 3

## Monte-Carlo-Simulationen

Ein Monte-Carlo-Programm erfordert wegen des statistischen Charakters wesentlich mehr Rechenleistung zur Bestimmung der Verteilungsfunktion als analytische Modelle. Die einzelnen freien Flüge und Streuprozesse werden einzeln nachgebildet. Diese Methode wird zur mikroskopischen Untersuchung von materialabhängigen Teilcheneigenschaften wie etwa der mittleren Driftgeschwindigkeit und der mittleren Energie der Elektronen und Löcher als Funktion des elektrischen Feldes und der Temperatur verwendet.

Zur Untersuchung nichtlokaler Effekte, die von stark schwankenden Potentialverteilungen verursacht werden, wird gleichfalls die Monte-Carlo-Methode herangezogen. Da in diesem Bereich die Ladungsträger aufgrund des hohen elektrischen Feldes Teilchenenergien erhalten, die sogar ein Eindringen der Elektronen und Löcher in begrenzende Isolatoren zulassen, ist eine genaue Kenntnis dieser Hochenergieverteilung unerlässlich, um ein möglichst realistisches Injektionsmodell auf mikroskopischer Basis zu erstellen.

In diesem Kapitel werden einerseits die physikalischen Grundlagen zweier Materialien, Silizium und Siliziumdioxid erarbeitet und numerisch ausgewertet. Bei der Behandlung von Silizium liegt der Schwerpunkt bei der Ableitung eines isotropen Mehrbandmodells sowie der Analyse verschiedener Bandstrukturen und der daraus resultierenden Energieverteilungsfunktion "heißer" Elektronen. Der zweite Abschnitt dieses Kapitels beschäftigt sich mit dem Ladungstransport in Siliziumdioxid. Dabei wird auf bestehende Modelle eingegangen und die wichtigsten Unterschiede dargestellt. Danach wird ein physikalisches Modell für diesen technologisch wichtigen Isolator vorgestellt und zur Bestimmung der Materialeigenschaften herangezogen. Abschließend werden neueste experimentelle Messungen [49][50] im Oxid mit Elektronenenergien größer als  $10\text{eV}$  vorgestellt, und die Schwierigkeit, Löchertransport in Siliziumdioxid mit der Monte-Carlo-Methode zu simulieren, wird erläutert.

## 3.1 Monte-Carlo-Simulationen in Silizium

Im weiteren beschäftigt sich diese Arbeit ausschließlich mit dem Transport von Elektronen. Daher werden bei der Bandstruktur als auch bei den Streuprozessen nur die Eigenschaften von Elektronen des Leitfähigkeitsbandes. Eine Behandlung des Löchertransports in Halbleitern findet sich zum Beispiel in [35][36][51][52].

### 3.1.1 Bandstruktur in Silizium

Die Bandstruktur von Silizium und die möglichst allgemeine Implementierung in einem Monte-Carlo-Programm ist ganz entscheidend für die physikalische Aussagekraft der ermittelten Ergebnisse. Einerseits ist die Bandstruktur im allgemeinen anisotrop und setzt sich aus mehreren Bändern sowohl des Valenz- als auch des Leitfähigkeitsbandes zusammen und erfordert bei einer vollständigen Berücksichtigung der Dynamik einen sehr hohen Speicherbedarf und einen erhöhten Rechenbedarf zur Lösung der Bewegungsgleichungen, da stets in Richtung des elektrischen Feldes interpoliert werden muß. Andererseits muß man, um den Hochenergieanteil der Elektronen möglichst genau bestimmen zu können, die Aufspaltung in einzelne Bänder berücksichtigen. Die Bandstruktur beeinflusst nicht nur die Dynamik der einzelnen Ladungsträger, sondern darüberhinaus hängen auch die Streuraten von dem quantitativen Verhalten der Zustandsdichte ab.

Wenn das Verhalten von Elektronen nur bei kleinen Energien untersucht werden soll, so ist es ausreichend, das Leitfähigkeitsband in der Umgebung dessen Minimums  $\epsilon_0$  nach einer Taylorreihe zu entwickeln. Dabei erhält man folgende, parabolische Abhängigkeit der Energie vom Wellenvektor,

$$\epsilon = \epsilon_0 + \hbar^2 \mathbf{k}^T \frac{1}{2m^*} \mathbf{k} \quad (3.1)$$

mit der effektiven Masse  $m^*$ , die bei isotropen Materialeigenschaften als

$$\left( \frac{1}{m^*} \right) = \frac{1}{\hbar^2} \left. \frac{\partial^2 \epsilon}{\partial^2 k} \right|_{\mathbf{k}_0} \quad (3.2)$$

gegeben ist. Wählt man nun das Minimum des Leitfähigkeitsbandes als relativen Bezugspunkt, so kann  $\epsilon_0$  Null gesetzt werden. Eine sehr effiziente Erweiterung dieses Einbandmodells findet sich bei [53]. Mithilfe einer Störungsrechnung [53][54][55][56] kann folgende Näherung für die Energielation

$$\epsilon(1 + \alpha\epsilon) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*} \quad (3.3)$$

geschrieben werden, sodaß sich eine nichtparabolische Abhängigkeit ergibt. Die Konstante  $\alpha$  wird als Nichtparabolizitätskonstante bezeichnet und kann näherungsweise mit der Bandlücke  $\epsilon_g$  zwischen den Valenzband und dem Leitfähigkeitsband

$$\alpha \approx \frac{1}{\epsilon_g}(1 - m^*) \quad (3.4)$$

bestimmt werden.

In Silizium ist das Minimum des Leitfähigkeitsbandes nicht im Mittelpunkt der Brillouinzone lokalisiert. Man spaltet die effektive Masse des Elektrons in eine longitudinale  $m_l$  und eine transversale Komponente  $m_t$  auf, sodaß die Energie nun mit der Bandformfunktion  $\gamma$  als

$$\epsilon(1 + \alpha\epsilon) = \gamma = \frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{k_l^2}{m_l} + \frac{k_t^2}{m_t} \right) \quad (3.5)$$

geschrieben werden kann, wobei die effektive Masse nun als Tensor definiert ist,

$$\left( \frac{1}{m^*} \right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \epsilon}{\partial k_i \partial k_j} \Big|_{\mathbf{k}_0} \quad (3.6)$$

Man kann also Gleichung 3.5 auch in Tensorschreibweise

$$\gamma = \frac{\hbar^2}{2} k_i \left( \frac{1}{m^*} \right)_{ij} k_j \quad (3.7)$$

angeben, wobei

$$\left( \frac{1}{m^*} \right)_{ij} = \begin{pmatrix} \frac{1}{m_l} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m_t} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{m_t} \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

Zur Berechnung von hochenergetischen Elektronen ist dieses Verfahren nicht geeignet. Entweder bezieht man die volle anisotrope Bandstruktur mit ein, oder man entwickelt analytische Mehrbandmodelle, die im wesentlichen die Merkmale der Zustandsdichte in Silizium enthalten. Damit erreicht man, daß zwar die Dynamik der Elektronen nur isotrop berücksichtigt wird, jedoch die Abgeschlossenheit der einzelnen Bänder in bezug auf den Wellenvektor erhalten bleibt. Da die Zustandsdichte

$$D(\epsilon) = \frac{V_0}{2\pi^3} \int_0^{\mathbf{k}} \delta(\epsilon - \epsilon(\mathbf{k}')) d^3 k' \quad (3.9)$$

in die Streuraten eingeht, wird bei einem Einbandmodell im Hochenergiebereich die Streuraten schwer überschätzt.

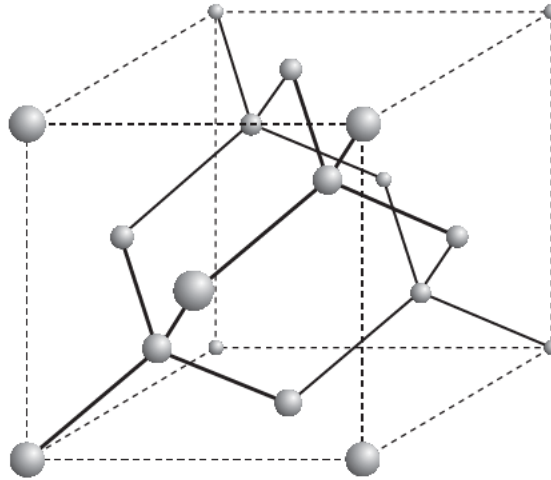


Abbildung 3.1: Anordnung der Si-Atome in einem kubisch flächenzentrierten Gitter

Ein analytisches Modell, das ein nichtparabolisches und drei parabolische Bänder auswertet, ist von R. Brunetti *et al.* [58] entwickelt worden. Die Nachbildung der Zustandsdichte mit mehreren, isotropen numerischen Bändern ist in [59] beschrieben. Ausgehend von dem Argument, daß, wenn man viele Elektronen mit einem Vielteilchen-Monte-Carlo-Algorithmus verfolgt, die Anisotropieeffekte einer Bandstruktur nahezu vernachlässigbar sind, beziehungsweise nicht stark ins Gewicht fallen, ist in [51][60] ein Verfahren dargestellt, mit dem sowohl die Zustandsdichte als auch die Ableitung der Energierelation numerisch behandelt wird. Dabei wird eine isotrope Gruppengeschwindigkeit  $u_{gn}^{iso}(\epsilon)$  zugleich mit einer isotropen Zustandsdichte  $D_n^{iso}(\epsilon)$

$$u_{gn}^{iso}(\epsilon) = \frac{1}{\hbar} \left| \frac{d\epsilon_n(k)}{dk} \right| \quad (3.10)$$

$$D_n^{iso}(\epsilon) = A \frac{Z_n^2}{k} \left| \frac{d\epsilon_n(k)}{dk} \right| \quad (3.11)$$

gelöst [51], wobei sich der Index  $n$  auf ein Band bezieht. In dieser Gleichung ist  $Z_n$  die Multiplizität eines Bandes und  $A$  ein Proportionalitätsfaktor. Da in dieser Darstellung zwei Differentialgleichungen für eine einzige Lösungsfunktion auftreten, sucht man mit einem willkürlichen Gewichtungsfaktor  $w$  eine Lösung derart, daß der relative Fehler  $\Delta$  minimiert wird. Man muß also diesen Fehler in der folgenden Beziehung mit der realen Zustandsdichte und Gruppengeschwindigkeit

$$\Delta = (1 - w) \left| \frac{D_n^{iso}(\epsilon) - D_n(\epsilon)}{D_n(\epsilon)} \right| + w \left| \frac{u_{gn}^{iso}(\epsilon) - u_{gn}(\epsilon)}{u_{gn}(\epsilon)} \right| \quad (3.12)$$

mit den zusätzlichen Bedingungen minimieren:

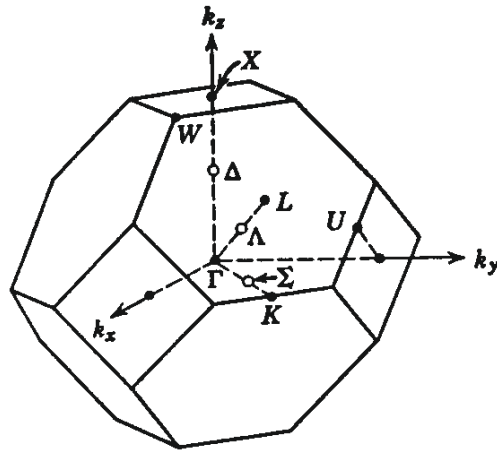


Abbildung 3.2: Brillouinzone eines kubisch flächenzentrierten Gitters

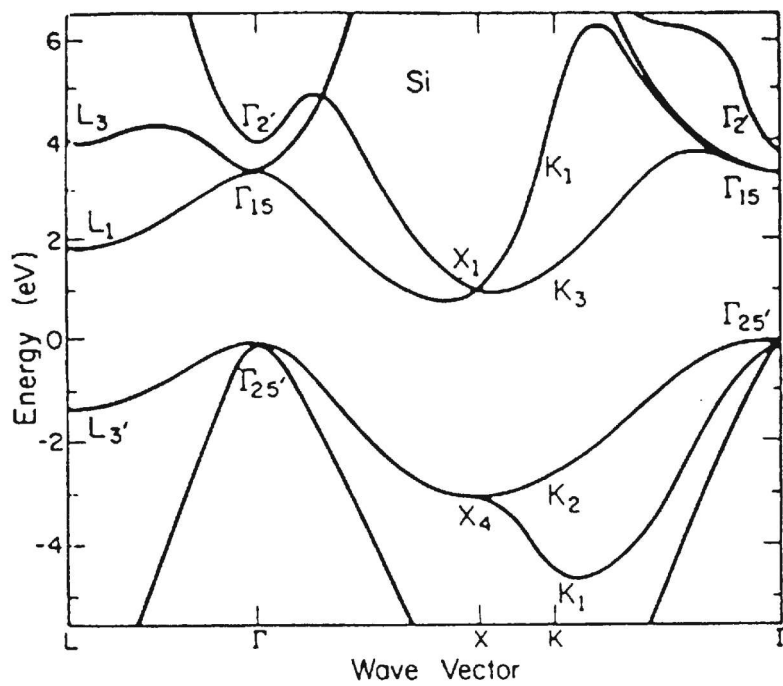


Abbildung 3.3: Anisotrope Vollbandstruktur in Silizium für ein kubisch flächenzentriertes Gitter nach Tang und Hess [57].

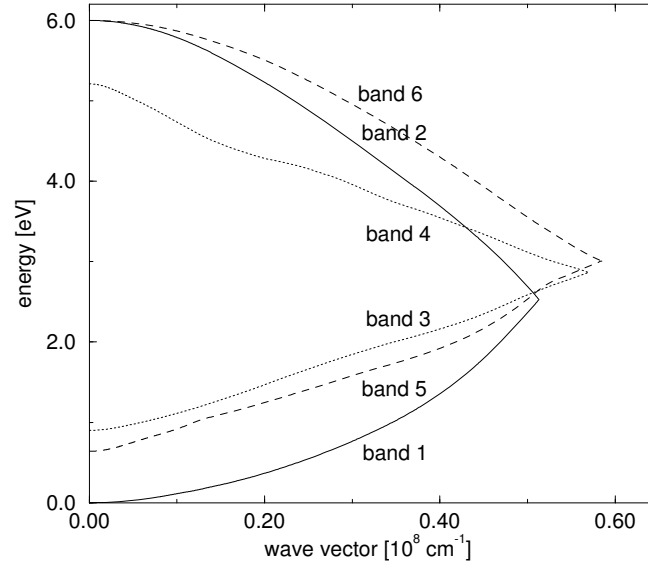


Abbildung 3.4: Bandstruktur des isotropen Mehrbandmodells mit sechs Leitfähigkeitsbändern. Der Gewichtungsfaktor beträgt  $w = 0.5$ .

- $k(\epsilon_n^{min}) = k(\epsilon_n^{max}) = 0$ , wobei  $\epsilon_n^{min}$  und  $\epsilon_n^{max}$  die jeweiligen Schranken des isotropen Bandes sind.
- $\epsilon_n(k)$  ist monoton steigend im Intervall  $\epsilon_n^{min} \leq \epsilon_n(k) \leq \epsilon_n(k_n^{max})$ , und  $\epsilon_n(k)$  ist monoton fallend im Intervall  $\epsilon_n(k_n^{max}) \leq \epsilon_n(k) \leq \epsilon_n^{max}$ .
- $\epsilon_n(k)$  ist stetig an der Stelle  $\epsilon_n(k_n^{max})$ .

Dabei wird jedes Band in zwei Subbänder unterteilt, wobei eines der Lösung mit  $\frac{d\epsilon_n}{dk} > 0$  und eines dem Fall  $\frac{d\epsilon_n}{dk} < 0$  entspricht.

Die Anordnung von Silizium in der Einheitszelle eines kubisch flächenzentrierten Gitters ist in Abbildung 3.1 veranschaulicht. Die Brillouinzone eines kubisch flächenzentrierten Gitters ist in Abbildung 3.2 mit den wichtigsten Symmetriepunkten und -achsen dargestellt und aus [41] entnommen. Der Punkt  $\Gamma$  repräsentiert den Mittelpunkt, lateinische Buchstaben einzelne Punkte an der Begrenzungsfläche und die griechischen Symbole stehen für die Symmetrieachsen. Die Koordinate des Punktes  $X$  beträgt  $\frac{2\pi}{a_0}(0, 0, 1)$  mit der Gitterkonstanten  $a_0 = 0.543nm$ . Eine anisotrope Vollbandstruktur und ein isotropes, aus sechs kugelsymmetrischen Leitfähigkeitsbändern bestehendes Mehrbandmodell, dessen Gewichtungsfaktor  $w = 0.5$  beträgt, sind in Abbildung 3.3 und 3.4 gegeben. Die Daten einer anisotropen Bandstruktur mit empirischen Pseudopotentialen für eine kubisch flächenzentrierte Symmetrie von Silizium



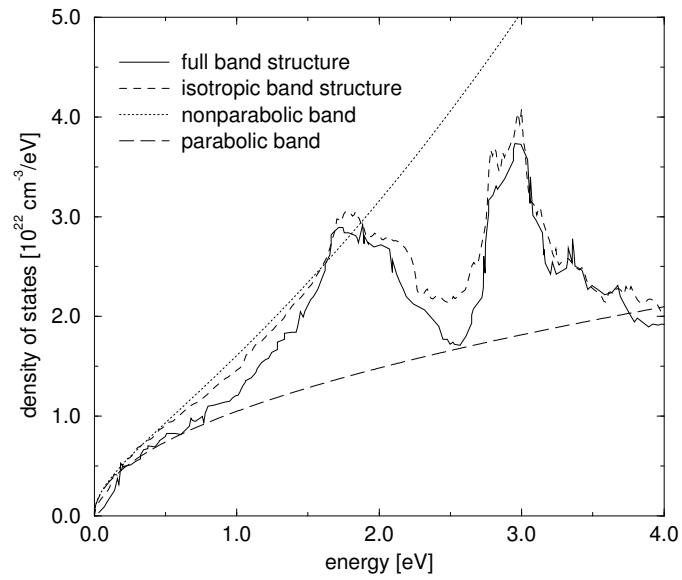


Abbildung 3.5: Zustandsdichte für verschiedene Modelle der Bandstruktur.

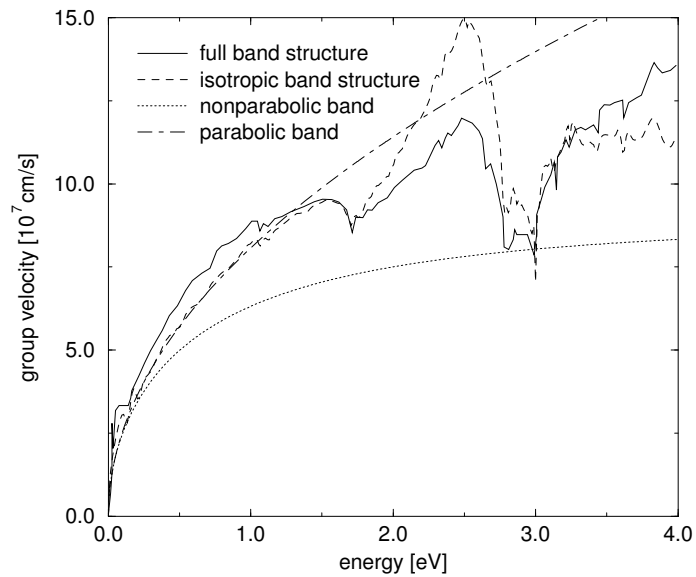


Abbildung 3.6: Gruppengeschwindigkeit für verschiedene Modelle der Bandstruktur.

sind [57][61] entnommen. Eine genaue Diskussion, inwieweit Spin-Bahn-Kopplung, nichtlokale Pseudopotentiale oder Hybridisierung die Bandstruktur beeinflussen, findet sich in [62][63][64]. Eine Zusammenfassung von Bandstrukturberechnungen von verschiedenen kristallinen und amorphen Materialien ist in [65] gegeben.

Die Zustandsdichte und die Gruppengeschwindigkeit verschiedener Modelle für die Bandstruktur sind in Abbildung 3.5 und 3.6 verglichen. Dabei sind diese Größen mit einem einzelnen parabolischen, einem einzelnen nichtparabolischen Bandmodell, einem isotropen Mehrbandmodell als auch mit einem anisotropen Vollbandmodell [66] berechnet worden. Bei den Einbandmodellen ist die effektive Masse als  $m_d = \sqrt[3]{m_l m_t^2} = 0.32m_0$  mit  $m_l = 0.91m_0$  und  $m_t = 0.19m_0$  gegeben [23][41]. Zusätzlich beträgt die Nichtparabolizität  $\alpha = 0.2eV^{-1}$ . Es zeigt sich, daß ein parabolisches Band nur im Minimum des jeweiligen Bandes mit einem realen Bandmodell übereinstimmt. Eine Erweiterung auf Nichtparabolizität kann bis zum ersten Maximum bei ungefähr  $1.8eV$  der tatsächlichen Zustandsdichte als geeignete Näherung verwendet werden. Die Gruppengeschwindigkeit  $u_g$  wird deutlich unterschätzt, je größer die Nichtparabolizität gewählt wird, da im Gegensatz zum parabolischen Einbandmodell noch ein zusätzlicher Divisor auftritt,

$$u_g = \frac{\hbar k}{m_d(1 + 2\alpha\epsilon)}. \quad (3.13)$$

Eine gute Näherung sowohl für die Zustandsdichte als auch für die Gruppengeschwindigkeit kann also nur dann erzielt werden, wenn der Nichtparabolizitätsparameter klein ist oder der effektiven Masse Tensoreigenschaften (Gleichung 3.8) zugeordnet werden. Hingegen wird bei einem isotropen Mehrbandmodell Zustandsdichte und Gruppengeschwindigkeit bis zu  $4.0eV$  richtig reproduziert. Da bei der Berechnung des Hochenergieanteils der Elektronen die Zustandsdichte bei den Streuraten Eingang findet und auch die Gruppengeschwindigkeit des isotropen Mehrbandmodell mit der realen übereinstimmt, ist mit einem isotropen Mehrbandmodell ein vertretbarer Kompromiß zwischen numerischer Effizienz und physikalischer Genauigkeit gegeben.

### 3.1.2 Streuprozesse in Silizium

In diesem Abschnitt sollen die Grundlagen der wichtigsten Streumechanismen, denen Elektronen in Silizium unterworfen sind, physikalisch erläutert und mathematisch ausgewertet werden. Da, wie bereits mehrfach erwähnt worden ist, die Kenntnis der Verteilungsfunktion hochenergetischer Elektronen zur Verifizierung eines Injektionsmodells unerlässlich ist, beschränkt sich die vorliegende Arbeit auf einfache störungstheoretische Ableitungen. Inwieweit weitere quantenmechanische Korrekturen die Streuraten beeinflussen und somit die Gültigkeit der im folgenden be-

schriebenen Näherungen in semiklassischen Modellen bei hohen elektrischen Feldern einschränken, wird in [19][22][67][68] behandelt.

Im wesentlichen unterscheidet man zwischen Kollisionen der Elektronen an Störstellen, Wechselwirkung der Elektronen mit dem Kristall und aufgrund von hochenergetische Ladungsträger hervorgerufenen Stoßionisation. Kurzreichweitige Ladungsträgerstreuung und Elektron-Plasmonwechselwirkungen werden nicht behandelt. Es wird aber auf die zahlreiche Literatur zu diesem Gebiet verwiesen [20][22][35][52][69][70][71]. Ebenfalls sei hier noch die Annahme aufgeführt, nämlich die, daß man den Phononen eine unendliche Lebensdauer zuordnet. Dies ist im Falle räumlich ausgedehnter Systeme, bei denen Quantenkorrekturen für eine Beschreibung der makroskopischen Größen ausreichend sind, zulässig [23].

### Ionisierte Störstellenstreuung

Ein Elektron, das in die Nähe einer ionisierten Störstelle gelangt, wird aufgrund dessen elektrischen Potentials abgelenkt werden, wobei diese Art von Kollision elastisch ist [35]. Das Problem der Störstellenstreuung ist in zwei verschiedenen Formulierungen behandelt worden. Einerseits wird ein abgeschirmtes Coulombpotential zur Beschreibung dieser Wechselwirkung herangezogen [72], andererseits wird die Wirkung des Coulombpotentials auf den mittleren Abstand zweier Stoßzentren beschränkt [73]. Diese Arbeit behandelt nur die Formulierung nach [72].

Das Streupotential, das eine ionisierte Störstelle umgibt, wird von den umgebenden Elektronen abgeschwächt und kann in der Form

$$H_S(\mathbf{r}) = \frac{Ze^2}{4\pi\bar{\epsilon}_0\bar{\epsilon}_r r} e^{-\beta_s r} \quad (3.14)$$

geschrieben werden. In dieser Gleichung bedeutet  $Z$  den Ionisierungsgrad der Verunreinigung,  $\bar{\epsilon}_0$  stellt die Dielektrizitätskonstante des Vakuums dar,  $\bar{\epsilon}_r$  die relative Dielektrizitätskonstante des Halbleiters, und  $\beta_s$  die inverse Abschirmlänge,

$$\beta_s = \sqrt{\frac{e^2 n(\mathbf{r})}{\bar{\epsilon}_0 \bar{\epsilon}_r k_B T_L}}, \quad (3.15)$$

wobei  $n(\mathbf{r})$  die lokale Trägerkonzentration und  $T_L$  die Temperatur des Kristallgitters angibt. Um die Streuwahrscheinlichkeit nach Gleichung 2.36 berechnen zu können, muß die Übergangswahrscheinlichkeit des Störungshamiltonoperators bestimmt werden,

$$|\langle \mathbf{k}', c' | H_S | \mathbf{k}, c \rangle| = \frac{1}{V_0} H_S(\mathbf{q}) = \frac{1}{V_0} \frac{Ze^2}{\bar{\epsilon}_0 \bar{\epsilon}_r} \frac{1}{\mathbf{q}^2 + \beta_s^2}. \quad (3.16)$$

Da dieser Prozeß elastisch ist, muß die Energie vor und nach der Kollision gleich sein. Der Impuls wird durch

$$\mathbf{k} - \mathbf{k}' = \mathbf{q} \quad (3.17)$$

bestimmt. Der Überlappungsfaktor wird auch hier gleich eins gesetzt. Mit der Übergangswahrscheinlichkeit ergibt sich für die Streurrate

$$S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{n(\mathbf{r})Z^2e^4}{4\pi^2\hbar\bar{\epsilon}_0^2\bar{\epsilon}_r^2} \frac{1}{\mathbf{q}^2 + \beta_s^2} \delta(\epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k}')). \quad (3.18)$$

Bei der Integration dieser Beziehung über alle möglichen Endzustände  $\mathbf{k}'$  muß die Bandstruktur berücksichtigt werden. Wird ein einziges isotropes, nichtparabolisches Band verwendet, dann gilt für die Energie-Impulsrelation und die Zustandsdichte,

$$\epsilon(1 + \alpha\epsilon) = \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m^*}, \quad (3.19)$$

$$D(\epsilon) = \frac{2m^{*3/2}}{\pi^2\hbar^3} \sqrt{\epsilon(1 + \alpha\epsilon)(1 + 2\alpha\epsilon)}. \quad (3.20)$$

Damit erhält man für die totale Streurrate

$$\lambda(\epsilon) = \frac{n(\mathbf{r})Z^2e^4m^{*3/2}}{2\pi\bar{\epsilon}_0^2\bar{\epsilon}_r^2\hbar^4\beta_s^4} \sqrt{\epsilon(1 + \alpha\epsilon)} \frac{1 + 2\alpha\epsilon}{1 + 4\frac{\gamma(\epsilon)}{\epsilon_s}}, \quad (3.21)$$

wobei  $\epsilon_s$  gleich

$$\epsilon_s = \frac{\hbar^2\beta_s^2}{2m^*} \quad (3.22)$$

ist.

Erweitert man nun die Bandstruktur auf ein isotropes Mehrbandmodell und schränkt die Störstellenstreuung auf dasjenige Band ein, in dem sich das Elektron aufhält, dann ergibt sich für die totale Streurrate

$$\lambda(k(\epsilon)) = \frac{16\pi n(\mathbf{r})Z^2e^4}{\bar{\epsilon}_0^2\bar{\epsilon}_r^2\hbar\beta_s^4} k^2 \left| \frac{dk}{d\epsilon} \right| \frac{1}{1 + 4\frac{k^2}{\beta_s^2}}. \quad (3.23)$$

Der Streuwinkel wird für nichtparabolische Bänder als auch für das isotrope Mehrbandmodell gemäß

$$\cos\theta = 1 - \frac{2(1 - r_1)}{1 + 4r_1\frac{k^2}{\beta_s^2}} \quad (3.24)$$

berechnet. Der azimutale Winkel wird als gleichverteilt

$$\phi = 2\pi r_2 \quad (3.25)$$

angenommen, wobei  $r_1$  und  $r_2$  zwei beliebige, zwischen 0 und 1 gleichverteilte Zufallszahlen sind.

Eine Erweiterung dieser Streuraten ist von Ridley gegeben [74], der eine formale Verbindung zwischen dem Modell von Conwell und Brooks herstellt. Ein zusammenfassender Artikel ist von Chattopahyay und Queisser [75] präsentiert. Neuere Arbeiten [76][77][78] beschäftigen sich mit der Berücksichtigung einer impulsabhängigen Abschirmlänge, Streuung aufgrund von Paaren von Verunreinigungen und einer Störungsrechnung zweiter Ordnung für die Streuraten. Damit kann die Kollision von Elektronen an Störstellen bei sehr hoch dotierten Halbleitern quantitativ gut vorausgesagt werden.

### Akustische Deformationspotentialstreuung

Gitterschwingungen, die aufgrund thermischer Anregung vorhanden sind, bewirken, daß sich das elektrische Feld zwischen den Rumpfen zeitlich ändert, und die Elektronen somit auf die einzelnen Schwankungen dieser Potentialverschiebung reagieren. Man unterscheidet zwischen akustischen Gitterschwingungen, bei denen benachbarte Ionen stets in gleicher Richtung schwingen, und optische Anregungsmoden, die entstehen, falls die Ionen einer Gitterzelle gegeneinander oszillieren [40].

Da akustische Gitterschwingungen die Auslenkung der einzelnen benachbarten Atome einbeziehen, kann das Potential als Gradient der Elongation  $u(\mathbf{r}, t)$  und einem konstanten Deformationspotential  $D_A$  angesetzt werden [35][36],

$$U_S(\mathbf{r}, t) = D_A \nabla u(\mathbf{r}, t). \quad (3.26)$$

Nach Auswertung der Übergangswahrscheinlichkeit mit der goldenen Regel von Fermi lautet die Streuraten aufgrund quantisierter akustischer Gitterschwingungen

$$S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2\pi D_A^2 k_B T_L}{\hbar V_0 \rho v_s^2} \delta(\epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k}')). \quad (3.27)$$

Die Schallgeschwindigkeit im Halbleiter wird mit  $v_s$  bezeichnet und die Dichte des Materials mit  $\rho$ . Ferner wird die temperaturabhängige Besetzung der Phononen für einen kleinen Impuls  $\mathbf{q}$  derart angenähert, daß für die Besetzungszahl mit der Phononenenergie  $\hbar\omega_{ac}$

$$N(q) = \frac{k_B T_L}{\hbar\omega_{ac}} \quad (3.28)$$

gilt. Die Dispersionsrelation wird als linear angenommen und weiters wird, da die Phononenenergie gering ist, dieser Streumechanismus als elastisch angenommen. Man erhält für die totale Streuraten für ein nichtparabolisches Band

$$\lambda(\epsilon) = 2 \frac{D_A^2 k_B T_L m^{*3/2}}{\sqrt{2\pi} \hbar^4 v_s^2 \rho} \sqrt{\epsilon(1 + \alpha\epsilon)(1 + 2\alpha\epsilon)}, \quad (3.29)$$

wobei zwischen Emission und Absorption nicht mehr unterschieden werden kann und daher die Streurrate doppelt so groß ist. Im Gegensatz zu einem nichtparabolischen Band ergibt sich für ein isotropes Mehrbandmodell

$$\lambda(k(\epsilon)) = 2 \frac{k_b T_L D_A^2}{\pi \hbar v_s^2 \rho} k^2 \left| \frac{dk}{d\epsilon} \right|. \quad (3.30)$$

Sowohl der polare als auch der azimutale Winkel sind isotrop verteilt. Symmetriebeziehungen, die im besonderen die Kristallstruktur behandeln, zeigen, daß in Silizium diese Streuung nur in longitudinalen Moden auftritt. Aufgrund des kleinen, vernachlässigbaren Energieübertrags und der Symmetrierauswahlregeln verbleiben Elektronen bei diesem Streuprozess im selben Band. Akustische Phononen haben also *Intravalley*-Charakter [22][36].

### Optische Zwischentalstreuung

Beim optischen Schwingungsmodus eines Kristalls oszillieren die einzelnen Bestandteile der Einheitszelle gegenphasig, wobei der Schwerpunkt der Elementarzelle nicht bewegt wird. Das Quantum dieses Schwingungsmodus wird als optisches Phonon bezeichnet. Wie bei den akustischen Phononen unterscheidet man auch hier zwischen longitudinalen und transversalen Schwingungen. Optische Moden können nur in solchen Zellen auftreten, bei denen mehr als ein Atom pro Einheitszelle auftritt. Im Falle von Silizium ist die Wigner-Seitz-Zelle aus zwei ineinander verschachtelten kubisch flächenzentrierten Gittern aufgebaut, die um ein Viertel der Raumdiagonale versetzt sind und acht Atome pro Einheitszelle aufweisen. Das Potential, das auf die Elektronen wirkt, ist proportional zur Auslenkung mit einem als konstant angenommenen Maß für die Stärke der Wechselwirkung ( $D_t K$ ) [79][80],

$$H_S(\mathbf{r}, t) = (D_t K) u(\mathbf{r}, t). \quad (3.31)$$

Im Gegensatz zur akustischen Deformationspotentialstreuung ist dieser Prozeß inelastisch. Elektronen können also Energie durch Emission eines Phonons an das Gitter abgeben oder aber bei Absorption aufnehmen. Die Dispersionsrelation kann in guter Näherung als konstant gegenüber  $\mathbf{q}$  angesetzt werden. Die Streurrate kann nun folgendermaßen geschrieben werden,

$$S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{\pi (D_t K)^2}{\sqrt{2} \hbar^3 \rho \omega_{op}} \left( N(q) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \delta(\epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k}') \pm \hbar \omega_{op}). \quad (3.32)$$

Da Phononen einen ganzzahligen Spin haben, unterliegen sie der Bose-Einstein-Statistik und gehorchen der folgenden Verteilung

$$N(q) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar \omega_{op}}{k_B T_L}\right) - 1}, \quad (3.33)$$

wobei vorausgesetzt wird, daß sich das Phononensystem im thermodynamischen Gleichgewicht mit dem Gitter befindet.

Die totale Streurrate kann durch Integration über alle möglichen Endzustände  $\mathbf{k}'$  gewonnen werden und ist gleich

$$\lambda(\epsilon) = Z_{fi} \frac{m^{*3/2} (D_t K)^2}{\sqrt{2} \hbar^3 \rho \omega} \left( N(q) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \sqrt{\epsilon'(1 + \alpha\epsilon')(1 + 2\alpha\epsilon')}. \quad (3.34)$$

Der Faktor  $Z_{fi}$  gibt die Anzahl der möglichen Bänder nach der Streuung an. Dabei wird bei einer Emission die Energie vermindert, während bei einer Absorption sich die Energie um den Betrag  $\hbar\omega_{op}$  erhöht,

$$\epsilon' = \epsilon \pm \hbar\omega_{op}. \quad (3.35)$$

Die Besetzungszahl nimmt bei einer Emission um eins zu. Für ein isotropes Mehrbandmodell, bei dem die einzelnen Bänder um  $\Delta\epsilon_{fi}$  verschoben sind, kann dieser Sachverhalt als

$$\lambda(k(\epsilon)) = Z_{fi} \frac{(D_t K)^2}{2\pi \rho \omega_{op}} \left( N(q) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) k^2 \left( \left| \frac{dk}{d\epsilon} \right| \right)_{\epsilon \pm \hbar\omega - \Delta\epsilon_{fi}} \quad (3.36)$$

ausgedrückt werden. Der polare und azimutale Winkel werden als isotrop im Raum verteilt angesehen.

### Stoßionisation

Unter Stoßionisation versteht man die Freisetzung eines gebundenen Elektrons, das einem Atomrumpf aufgrund einer Kollision mit einem hochenergetischen Elektrons weggeschlagen wird. Die physikalischen Grundlagen dieses Prozesses sind in [81] zusammengefaßt. Dabei werden zwei neue Ladungsträger erzeugt, das freigesetzte Elektron sowie das Loch, das im Valenzband frei beweglich ist. Dadurch wird die Anzahl an neuen Ladungsträgern vervielfacht und führt zu einem nicht zu vernachlässigenden Beitrag der Hochenergieverteilung. In dem verwendeten Simulationsprogramm können Sekundärelektronen wahlweise mitberücksichtigt oder vernachlässigt werden.

Die Streurrate wird phänomenologisch behandelt. Ab einer Schwellenenergie  $\epsilon_{th}$ , die im allgemeinen der Energielücke von Valenz- und Leitfähigkeitsband entspricht, tritt eine quadratische Abhängigkeit von der Energie auf. Als Vorfaktor geht die Streurrate für optische Phononen  $\lambda_{op}(\epsilon_{th})$  ein,

$$\lambda(\epsilon) = \begin{cases} 0 & , \quad \epsilon \leq \epsilon_{th} \\ P \lambda_{op}(\epsilon) \left( \frac{\epsilon - \epsilon_{th}}{\epsilon_{th}} \right)^2 & , \quad \epsilon > \epsilon_{th} \end{cases} \quad (3.37)$$

<b>akustische Streuparameter</b>	
Schallgeschwindigkeit	$9.04 \times 10^5 \text{ cm/s}$
Deformationspotential für niedrige Energien	$7.9 \text{ eV}$
Einsetzen energetisch niedriger Deformationspotentialstreuung	$0.15 \text{ eV}$
Deformationspotential für hohe Energien	$4.0 \text{ eV}$
Einsetzen energetisch hoher Deformationspotentialstreuung	$0.35 \text{ eV}$
<b>optische Streuparameter</b>	
Frequenz	$7.855 \times 10^{13} \text{ Hz}$
Zwischentaldeformationspotential	$5.0 \times 10^8 \text{ eV/cm}$
Innertaldeformationspotential	$5.0 \times 10^8 \text{ eV/cm}$

Tabelle 3.1: Streuparameter für das isotrope Mehrbandmodell von Silizium.

wobei  $P$  ein freier Parameter ist, der an die experimentellen Daten angepaßt worden ist und gleich 0.57 ist [82].

Der Einfluß der Bandstruktur verschiedener Materialien wird in [57][66][83] untersucht. Eine numerische Beschreibung dieses Effekts zur Inkludierung in einem Monte-Carlo-Programm wird in [84] vorgestellt. Der umgekehrte Fall, Auger-Rekombination, nämlich daß ein Elektron in einen gebundenen Zustand übergeht, wird nicht berücksichtigt. Abschließend kann gesagt werden, daß Stoßionisation entscheidenden Einfluß auf das Rauschen eines Bauteils hat und zu einer starken Erhöhung des Drain-Stromes führen kann.

### 3.1.3 Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulation für Silizium

Die makroskopischen Eigenschaften von Silizium können in Abhängigkeit des elektrischen Feldes sehr genau bestimmt werden. Die Ergebnisse beziehen sich auf eine Bandstruktur, wie sie aus Gleichung 3.12 mit einem Gewichtungsfaktor  $w = 0.5$  extrahiert sind, da damit der Fehler bei der Bandstruktur als auch der Gruppengeschwindigkeit verglichen mit einer anisotropen Vollbandberechnung minimal sind [51]. Für eine Berechnung der wichtigsten Transportgrößen, wie die mittlere Elektronenenergie und die Driftgeschwindigkeit, müssen auch noch die Streuparameter angepaßt werden. In [85] ist eine Optimierung der optischen und akustischen Streuparameter vorgeschlagen, um das vorhandene Modell mit experimentellen Daten in Einklang zu bringen. Dabei ist ein Verfahren entwickelt worden, mit dem aufgrund von Gate- und Substrat-Stromberechnungen die Streuparameter entnommen werden können. Die einzelnen Parameter sind in Tabelle 3.1 angegeben.

Die Driftgeschwindigkeit in Silizium ist in Abbildung 3.7(a) dargestellt. Die Ergebnisse der Simulation sind mit den experimentellen Daten [86] verglichen. Bei



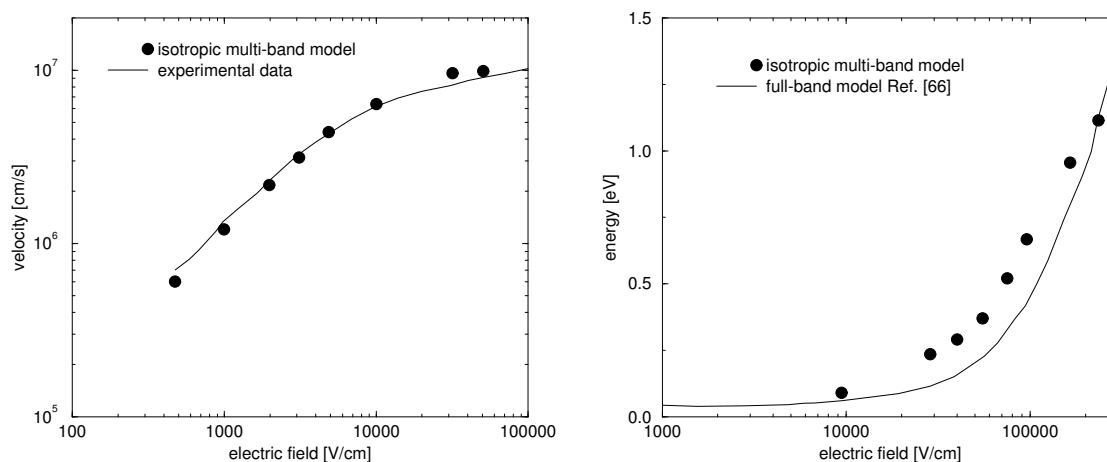


Abbildung 3.7: Die mittlere Driftgeschwindigkeit (a) und die Elektronenenergie (b) als Funktion des elektrischen Feldes.

niedrigen Feldern steigt die Geschwindigkeit stark an. Für sehr hohe Felder ist eine Sättigung der Geschwindigkeit festzustellen. Im Vergleich zu anderen isotropen Mehrbandmodellen [58][59] ist aber bei diesen hohen Feldstärken kein Abflachen der Geschwindigkeit zu erkennen. Dieser Sachverhalt kann damit erklärt werden, daß, im Gegensatz zu anderen Berechnungen [58][59], die Gruppengeschwindigkeit auch bei höheren Elektronenenergien nicht abrupt gegen Null strebt.

In Abbildung 3.7(b) wird die Abhängigkeit der mittleren Elektronenenergie vom elektrischen Feld gezeigt. Dabei werden die Resultate mit den Berechnungen von [66] verglichen. Obwohl Abweichungen sogar bei niedrigen Feldstärken augenscheinlich sind, ist wegen der verschiedenen Streupotentiale und der daraus entstehenden Abweichung selbst bei verschiedenen Vollbandmodellen ebenfalls keine exakte Übereinstimmung zu finden [52][87]. Die Energie ist bei niedrigen Feldern nahezu konstant, während bei einem elektrischen Feld der Größenordnung von  $10^4 V/cm$  ein starker Anstieg einsetzt. Bei elektrischen Feldstärken im Bereich von  $10^4 V/cm$  bis  $10^5 V/cm$  ist die Energie über den Werten einer Rechnung mit einer Vollbandstruktur. Dieser Unterschied wird, wie bereits erwähnt, von der Wahl der Streuparameter für die optische Deformationspotentialstreuung verursacht, die sogar bei Vollbandmodellen eine Schwankung der mittleren Elektronenenergie hervorruft [51][87].

Für die Elektroneninjektion an der Grenzfläche des Isolators zur Gate-Elektrode ist die genaue Kenntnis der Hochenergieverteilung der Elektronen sehr wichtig. Bei einer Vergleichsstudie [87] zeigt sich ganz deutlich, daß für nichtparabolische Einbandmodelle, bei denen die für die Streupotentiale akustischer und optischer Phononen vorgegebene Werte verwendet werden, sehr ähnliche Ergebnisse erhalten werden, so-

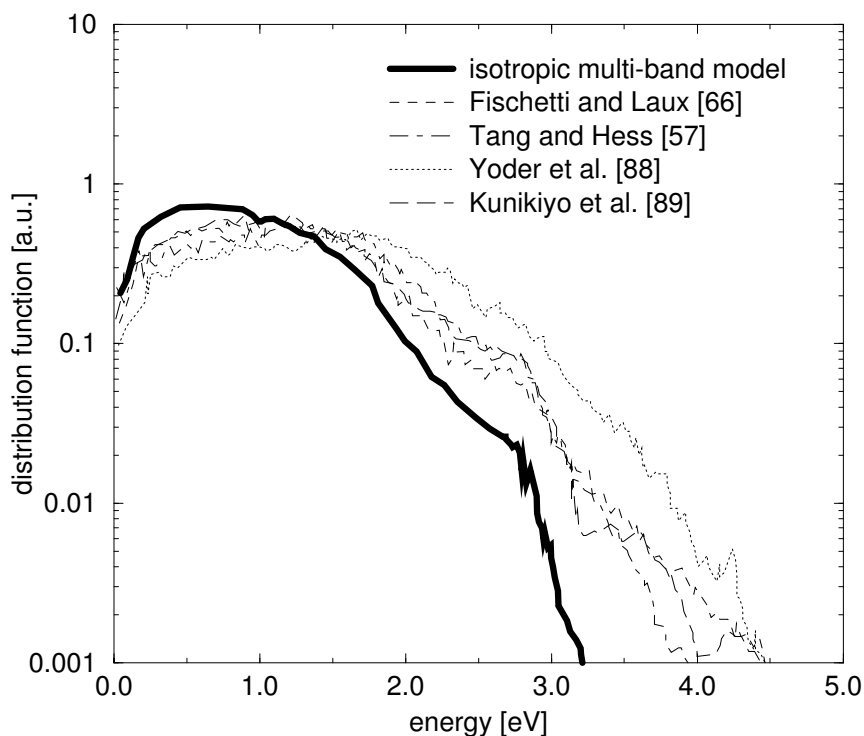


Abbildung 3.8: Vergleich der Verteilungsfunktion von Elektronen eines isotropen Mehrband-Monte-Carlo-Programms mit verschiedenen Monte-Carlo-Rechnungen mit einer anisotropen Vollbandstruktur.

wohl für die mittlere Energie als auch für die Verteilungsfunktion. Jedoch sind diese Modelle, wie schon mehrfach erwähnt worden ist, nur bis zu Elektronenenergien von ungefähr  $1.85\text{eV}$  gültig. Dagegen zeigen sich für Vollbandmodelle wie auch für numerisch angepaßte Modelle Abweichungen ab etwa  $2\text{eV}$ . Das kann damit erklärt werden, daß verschiedene Methoden zur Berechnung der Streuraten als auch der Bandstruktur verwendet werden. In Abbildung 3.8 werden vier verschiedene Vollbandmodelle mit den Daten des isotropen Mehrbandmodells dargestellt. Die Verteilungsfunktion in nichtdotiertem Silizium ist für ein elektrisches Feld von  $300\text{kV/cm}$  berechnet worden, wobei Stoßionisation nicht berücksichtigt wird. Die strichlierte Linie gibt eine Vollbandberechnung von Fischetti und Laux [66], die strichpunktiertere Linie die Rechnung des ersten Vollbandmodells von Tang und Hess [57], die punktierte Linie Berechnungen von Yoder *et al.* [88] und die lange strichlierte Linie enthält die Verteilungsfunktion eines Vollband-Monte-Carlo-Programmes von Kunikiyo *et al.* [89]. Die Ergebnisse des isotropen Mehrbandmodells sind mit der durchgezogenen Linie eingezeichnet.

Grundsätzlich kann gesagt werden, daß optischen Phononen den Hochenergietransport von Elektronen sicherlich in einem weit stärkeren Ausmaß modifizieren als anisotrope Bandstruktureffekte. Untersuchungen, inwieweit die quantenmechanische Näherung erster Ordnung für optische Streuprozesse beibehalten werden kann oder aber verbesserte Algorithmen zur Bestimmung dieser Streuwahrscheinlichkeit verwendet werden müssen, werden in [19][22] diskutiert. Dabei wird versucht, eine Herleitung, die die Energieabhängigkeit dieses Potentials, den Einfluß der Bandstruktur als auch eine vollständige quantentheoretische Behandlung miteinbezieht, anzugeben.

## 3.2 Monte-Carlo-Simulationen in Siliziumdioxid

Siliziumdioxid ist der wichtigste Isolator in der Halbleitertechnologie. Erste Berechnungen, um das Verhalten von Siliziumdioxid als auch das von Alkalihalogeniden unter dem Einfluß eines elektrischen Feldes zumindest qualitativ zu erläutern, wurden bereits um 1935 durchgeführt [90]. Dabei wurde derjenige Streumechanismus, der bei niedrigen Feldstärken den Elektronentransport kontrolliert, nämlich Gitterstreuung aufgrund von polar-optischen Phononen, angegeben. Das Potential dieses Prozesses wurde aufgrund des ionischen Charakters von Alkalihalogenidbindungen als coulombartig identifiziert. Das kritische Feld in solchen Verbindungen, das einen Materialzusammenbruch bewirkt, konnte abgeschätzt werden. Im Gegensatz dazu wurde ein Zusammenhang zwischen Elektronentransport und Stoßionisation hergeleitet [91]. Weitere Untersuchungen [92] von ionischen Kristallen zeigen, daß das kritische elektrische Feld unabhängig von der Kristallsymmetrie und der Richtung eine Degradation hervorruft. Inwieweit eine Temperaturabhängigkeit des Stromtransports und des kritischen Feldes auftritt, wurde in [93] erarbeitet. Dabei wird auch zum ersten Mal darauf hingewiesen, daß nichtpolare akustische Phononen den Transport beeinflussen. Eine Berechnung des Elektronentransports mittels einer vollständigen, nichtperturbativen quantenmechanischen Ableitung mit der Methode der Pfadintegrale wurde in [94][95] durchgeführt, wobei nur polar-optische Phononen berücksichtigt wurden.

Auswertungen experimenteller Arbeiten [96][97] zur Untersuchung des Raman-Spektrums in Siliziumdioxid lassen die Schlußfolgerung zu, daß zwei verschiedene Moden longitudinaler polar-optischer Phononen auftreten. Monte-Carlo-Rechnungen zur Studie des Elektronentransports wurden erstmals in [98][99] getätigt, um das kritische Feld bei Alkalihalogeniden zu bestimmen. Die Frage, ob nicht doch nichtpolare Phononen in die Energierelaxationszeit eingehen, wird in [100] aufgeworfen und dahingehend beantwortet, daß die Häufigkeit von Kollisionen deswegen stark erhöht wird und somit auch das Auftreten von Stoßionisation erst bei höheren elektrischen Feldern einsetzt.

Die Beweglichkeit von Elektronen in amorphem Siliziumdioxid ist erstmals in [101] behandelt worden, wobei für niedrige Feldstärken nur polar-optische Phononen verantwortlich sind. Eine qualitative rechnerische Abhandlung des Löchertransports findet sich in [102][103] mit Bezugnahme auf [104]. In dieser Arbeit wird der Stromtransport aufgrund der großen effektiven Masse von Löchern damit erklärt, daß sich die ungesättigten Elektronenbindungen mit Phononwechselwirkungen sprunghaft verschieben.

Zur Berechnung des kritischen Feldes wurde ab 1970 die Monte-Carlo-Methode verwendet. Dabei wurde der Materialzusammenbruch ab Feldstärken größer als ungefähr  $3MV/cm$  vorausgesagt [105][106][107]. Obwohl Ridley qualitativ eine Abschätzung der Energieabhängigkeit der nichtpolaren akustischen Phononenwechselwirkung angab und die Behauptung aufstellte, daß trotz des ionischen Charakters der Bindung in Alkalihalogeniden und Siliziumdioxid dieser Streumechanismus eine Stabilisierung des Elektronentransport bei höheren Feldstärken zulassen muß, wurde erstmals in [108] eine quantitative Auswertung dieses Streuprozesses in I-VII-Verbindungen durchgeführt. Das Resultat dieser Arbeiten hat die starke Energieabhängigkeit des postulierten Streuprozesses richtig wiedergegeben. Eine analoge Erweiterung auf Siliziumdioxid von Fischetti [109][110] führte dahingehend zu einer konsistenten Erklärung des Hochenergietransports in amorphen Quarz, daß die freie Weglänge als auch die Energierelaxationszeiten mit den Experimenten übereinstimmen. Die Ableitung eines quantenmechanischen Modells für diesen neuen Streuprozess [111] als auch eine Erweiterung auf quantenmechanischen Transport [110] brachte keine nennenswerten Modifikationen und ließ die Schlußfolgerung zu, daß mit der semiklassischen Monte-Carlo-Rechnungen zahlreiche experimentelle Ergebnisse [110][112] richtig erklärt werden können. Im Gegensatz dazu unternahmen Porod und Ferry [113][114] den Versuch, den Stromtransport im Oxid so zu beschreiben, daß verschiedene Täler vorhanden seien und eine optische Zwischentalstreuung die Energie der Elektronen niedrig hält, um die Stoßionisation bei elektrischen Feldern ab  $3MV/cm$  zu unterbinden.

Bei Speicherbauteilen wird in der Fertigungstechnologie die Nitridation verbunden mit der Reoxidation eingesetzt. Dabei werden in speziellen, mehrschichtigen Isolatorschichten aus dünnen Oxiden und relativ dicken Nitriden (MNOS, MONOS) die kondensatorähnlichen Eigenschaften zur Speicherung von Ladung ausgenutzt. Wegen dieser zusätzlichen Grenzfläche wird beim Schreib- und Löschyklus aufgrund hoher positiver oder negativer Gate-Spannungen ein weiteres Zentrum aus sogenannten *trapped electrons* auf beziehungsweise abgebaut. Um jedoch die isolierenden Eigenschaften von Siliziumdioxid in MOS-Strukturen zu optimieren, versucht man mit Aufdampfverfahren die Kristalldefekte in Siliziumdioxid möglichst gering zu halten. Prozeßtechnologien zur Reduktion dieser unerwünschten Effekte sind in [115] beschrieben. Experimentelle Messungen an Nitridschichten hingegen ( $Si_3N_4$ ) sind noch nicht durchgeführt worden. Ein Nitrid hat im Gegensatz zu Sili-

ziumdioxid eine kleinere Energielücke zwischen Valenz- und Leitfähigkeitsband von ungefähr  $5eV$  [116] und somit wird ein verstärkter Tunnelstrom zu erwarten sein. Die Dielektrizitätskonstante ist mit 7.5 dagegen fast doppelt so hoch wie in  $SiO_2$  [116]. Bis jetzt sind noch keine Bandstrukturberechnungen oder eine Analyse der zugrundeliegenden Streuprozesse vorhanden, obwohl man isolierende Eigenschaften ähnlich wie in Siliziumdioxid vermutet. Transportberechnungen für dieses Material sind ausständig.

### 3.2.1 Bandstruktur in Siliziumdioxid

Im Gegensatz zu Halbleitern unterscheiden sich Isolatoren wegen der großen Energielücke zwischen Valenz- und Leitfähigkeitsband. Im allgemeinen werden auch bei hohen Temperaturen nur wenig Elektronen im Leitfähigkeitsband anzutreffen sein. Berechnungen mit der Pseudopotentialmethode [117] und einem sogenannten *tight-binding*-Verfahren [118] ergeben eine Energiedifferenz von ungefähr  $9eV$  zwischen diesen beiden Bändern für  $\alpha$ -Quarz in einer hexagonalen Struktur. Die Brillouinzone einer hexagonal flächenzentrierten Struktur ist in Abbildung 3.9 eingezeichnet. Das direkte Gitter besteht aus drei Silizium- und sechs Sauerstoffatomen [119]. Abbildung 3.10 zeigt die einzelnen Bänder in Siliziumdioxid, die mit der Pseudopotentialmethode berechnet worden sind [117]. Der Nullpunkt entspricht dem Maximum des höchsten Valenzbandes. Das erste Leitfähigkeitsband erstreckt sich über  $4eV$  und wird somit den Elektronentransport in Siliziumdioxid wesentlich bestimmen. Die Anisotropie dieses Bandes, das im Mittelpunkt der Brillouinzone lokalisiert ist, kann als gering angesehen werden [109][110]. Da Siliziumdioxid als Gate-Isolator eine amorphe Struktur aufweist, wird in [120][121] darauf hingewiesen, daß die elektronischen Eigenschaften einer  $\alpha$ -Quarzstruktur sehr ähnlich sind. Die Zustandsdichte in Siliziumdioxid weist zwischen  $14$  und  $16eV$  ein scharfes Minimum auf. In Berechnungen von Titaniumdioxid, das strukturelle und kristallspezifische Ähnlichkeiten mit Siliziumdioxid hat, ist die Zustandsdichte für das Leitfähigkeitsband eingezeichnet [122]. Ein Minimum ist dort genau dann festzustellen, wenn innerhalb der Bandstruktur eine Lücke auftritt.

Zur Berechnung der Bandstruktur [123] wird einerseits ein sphärisch parabolisches, ein sphärisch nichtparabolisches als auch ein analytisches Vierbandmodell [58] verwendet. In Tabelle 3.2 sind die einzelnen Parameter angegeben. Für das nichtparabolische Band beträgt die Nichtparabolizität  $\alpha = 0.15eV^{-1}$ . Die Energiereaktionen in Abhängigkeit des Wellenvektors lauten

$$\epsilon(1 + \alpha\epsilon) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_i^*} \quad \text{für } 0 \leq k \leq k_{max} \quad \text{Band 1,} \quad (3.38)$$

$$\epsilon = \epsilon_0 \pm \frac{\hbar^2 k^2}{2m_i^*} \quad \text{für } 0 \leq k \leq k_{max} \quad \text{Band 2, 3, 4.} \quad (3.39)$$

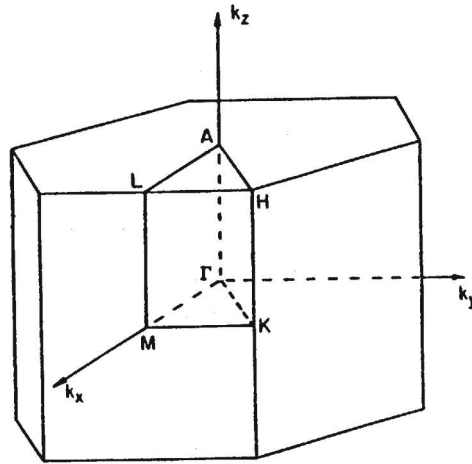


Abbildung 3.9: Brillouinzone in Siliziumdioxid für eine flächenzentrierte hexagonale Gitterstruktur nach Calabrese und Fowler [119].

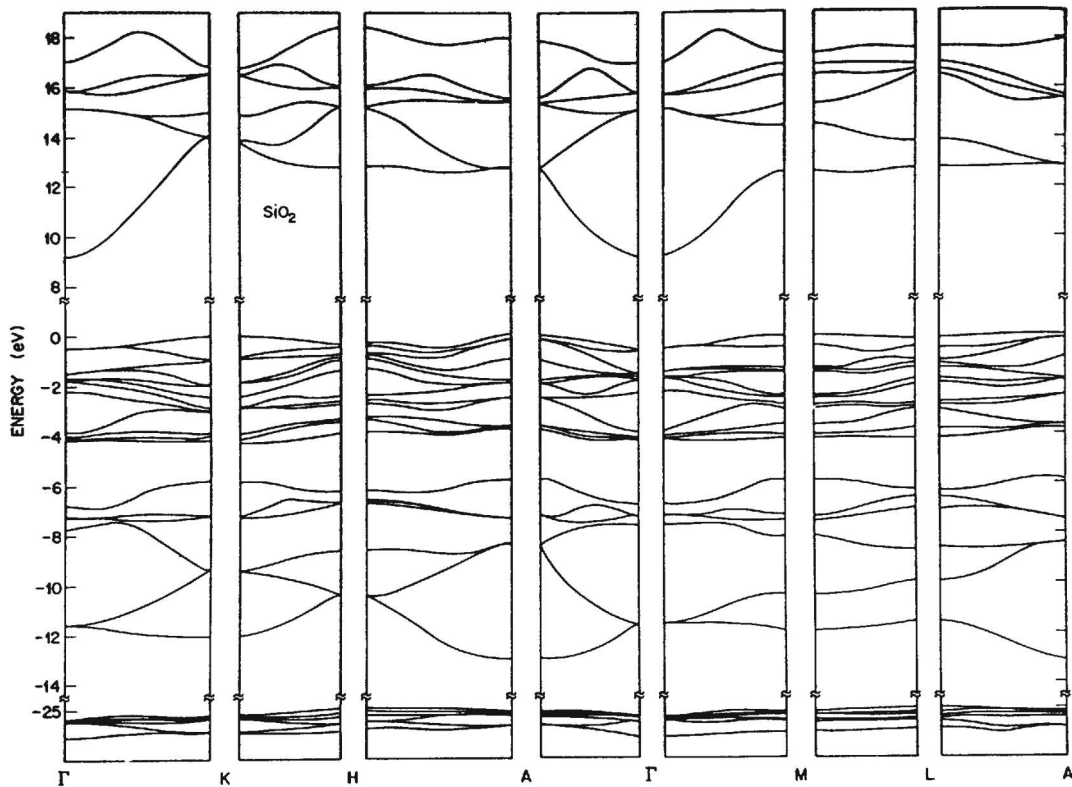


Abbildung 3.10: Bandstruktur in Siliziumdioxid für eine flächenzentrierte hexagonale Gitterstruktur nach Berechnungen von Chelikowsky und Schlüter [117].

Band	$m^*$ [ $m_0$ ]	$\epsilon_{min}$ [eV]	$\epsilon_{max}$ [eV]	$k_{max}$ [ $nm^{-1}$ ]
1	0.50	0.00	5.52	11.54
2	1.34	5.52	9.31	11.54
3	1.05	7.00	9.00	7.42
4	1.05	9.00	11.00	7.42

Tabelle 3.2: Bandparameter für das Vierbandmodell.

Das Vierbandmodell und die dazugehörige Zustandsdichte ist in Abbildung 3.11 dargestellt und mit einem parabolischen und nichtparabolischen Einbandmodell verglichen. Mit der Wahl des ersten Bandes ist das zweite eindeutig festgelegt [58]. Die Wahl des dritten und vierten Bandes erfolgt mit einer numerischen Approximation der einzelnen Bänder der vollen Bandstruktur, wobei die Tatsache berücksichtigt wird, daß bei  $7eV$  ein Minimum auftritt. Für das dritte und vierte Band sind einfache Berechnungen zur Reproduktion der tatsächliche Zustandsdichte ausgeführt worden.

Experimentelle Arbeiten [124][125], bei denen die Streurrate extrahiert worden ist, lassen Rückschlüsse auf die Zustandsdichte zu. Ein Minimum der Streurrate wird zwischen  $6eV$  und  $9eV$  festgestellt. Ein zweites Maximum ist erst bei sehr hohen Energien ( $> 10eV$ ) angegeben<sup>5</sup>. Dieses Maximum kann für elektrische Feldstärken unter  $10MV/cm$  vernachlässigt werden. In [124] liegt das Hauptaugenmerk auf Elektronen mit Energien von mehr als  $10eV$ . Es wird ein tief inelastischer Streuprozess postuliert, der bei Elektronen für einen Energieverlust von ungefähr  $2.5eV$  verantwortlich ist. Als Erklärung für diesen Prozeß wird Elektron-Elektronwechselwirkung vorgeschlagen. Eine detaillierte Untersuchung dieses Streumechanismus' ist ausständig.

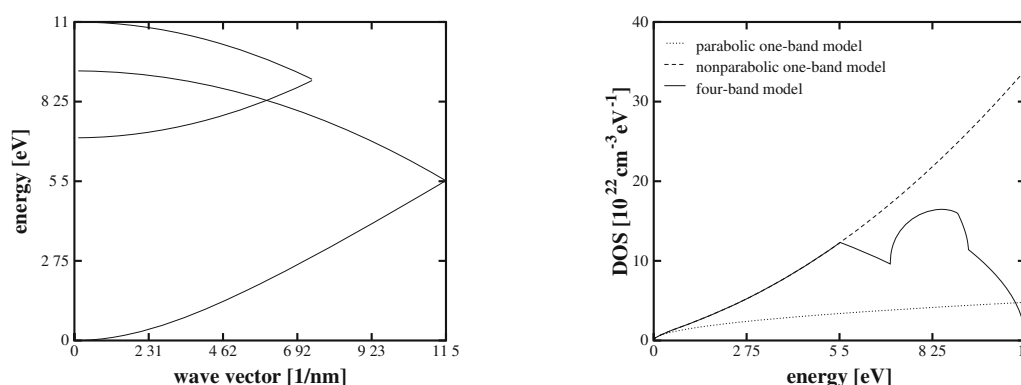


Abbildung 3.11: Die linke Abbildung stellt die verwendete Bandstruktur für Siliziumdioxid, die rechte die Zustandsdichte der verwendeten Bandstrukturen dar.

<sup>5</sup>Das dritte und vierte Band sind somit unterschätzt worden. Die Berechnung der Bandstruktur des Leitfähigkeitsbandes in Abbildung 3.10 ist auf  $9eV$  ab dem Leitfähigkeitsband beschränkt.

### 3.2.2 Streuprozesse in Siliziumdioxid

Für die Evaluierung der makroskopischen Größen werden nur Wechselwirkungen mit dem Gitter betrachtet. Materialverunreinigungen, welche zweifellos bei der Degradation wichtig sind, werden aufgrund nicht bekannter örtlicher Verteilungen oder aber wegen der mangelnden Kenntnis der zugrunde liegenden physikalischen Prozesse vernachlässigt. Deren Einfluß auf die mittlere Teilchenenergie und Driftgeschwindigkeit wird jedoch als sehr gering angenommen [110].

Zu diesen Streuprozessen zählen Elektroneneinfang und -freisetzung, Verunreinigung durch Wasserstoff und anderer Metalle der ersten Hauptgruppe sowie ungesättigte Bindungen aufgrund von Gitterdeformationen. Für diese Wechselwirkungen, wie oben erwähnt, ist zumindest eine genauere Kenntnis des mikroskopischen Vorgangs erforderlich. Ebenso wird das Auftreten von Stoßionisation bei Elektronenenergien ab ungefähr  $9eV$  nicht berücksichtigt [109][110][126].

#### Polar-optische Streuung

Da die chemische Bindung von Silizium und Sauerstoff einen starken ionischen Charakter aufweist, ist eine Wechselwirkung der Elektronen mit der oszillierenden elektrischen Dipolverteilung der Gitterionen in Siliziumdioxid derjenige Mechanismus, der bei niedrigen Feldstärken für den hohen Energieverlust der Elektronen verantwortlich ist.

Die Wechselwirkung hat aufgrund des ionischen Charakters von Silizium und Sauerstoffbindungen ein coulombartiges Potential. Die Streuwahrscheinlichkeit [44][90] kann als

$$S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2\pi e^2}{q^2} \left( \frac{1}{\bar{\epsilon}_<} - \frac{1}{\bar{\epsilon}_>} \right) \left( N(q) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \delta(\epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k}') \pm \hbar\omega_{LO}). \quad (3.40)$$

für Absorption (+) und Emission (-) geschrieben werden. Die Besetzungszahl  $N(q)$  für polar longitudinale optische (LO) Phononen ist gleich

$$N(q) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_{LO}}{k_B T_L}\right) - 1}. \quad (3.41)$$

Dabei ist  $\omega_{LO}$  die Kreisfrequenz der Phononen und  $\bar{\epsilon}_<$  und  $\bar{\epsilon}_>$  repräsentieren die statische und die optische Dielektrizitätskonstante. Integration über alle erlaubten Zustände  $\mathbf{k}'$  ergibt die totale Streurrate für ein nichtparabolisches Band<sup>6</sup>

$$\lambda(\epsilon) = \frac{e^2 \omega_{LO}}{4\sqrt{2} m^{*1/2}} \left( \frac{1}{\bar{\epsilon}_<} - \frac{1}{\bar{\epsilon}_>} \right) \left( N(q) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \frac{1 + 2\alpha\epsilon'}{\sqrt{\gamma}} \log \frac{\sqrt{\gamma} + \sqrt{\gamma'}}{\pm\sqrt{\gamma} \mp \sqrt{\gamma'}}. \quad (3.42)$$

<sup>6</sup>Wenn ein parabolisches Band verwendet wird, dann kann für die Bandformfunktion die Energie eingesetzt werden. Für das Vierbandmodell muß zusätzlich noch die Energiedifferenz zwischen den einzelnen Bändern miteinbezogen werden.



Dabei stellt  $\gamma$  die energieabhängige Bandformfunktion dar und die Energiebilanz ist durch

$$\epsilon' = \epsilon \pm \hbar\omega_{LO} \quad (3.43)$$

gegeben. Die Dispersionsrelation für longitudinale Phononen wird als konstant angenommen.

Dieser Mechanismus bevorzugt kleine Streuwinkel, und der polare Ablenkungswinkel kann numerisch mit der statistischen Verteilungsfunktion des Streuwinkels  $P(\theta)$  ermittelt werden,

$$P(\theta) = \frac{(\sqrt{\gamma\gamma'} + \alpha\epsilon\epsilon' \cos \theta)^2}{\gamma + \gamma' - 2\sqrt{\gamma\gamma'} \cos \theta} \sin \theta d\theta. \quad (3.44)$$

Der azimutale Winkel ist isotrop verteilt. Aufgrund von Symmetrieüberlegungen sind transversale Moden sehr viel schwächer als die longitudinalen [110].

### Nichtpolare akustische Streuung

Bei niedrigen Energien tritt für Elektronen Streuung aufgrund von akustische Phononen auf. Dabei kann für niedrige Energien die für Silizium beschriebene Näherung der Deformationspotentialstreuung verwendet werden. Wenn aber der Wellenvektor die Hälfte des maximal erlaubten Wellenvektors im reziproken Gitter überschreitet, dann sind Umklappprozesse möglich [74][108][109]. Dabei erfolgt ein großer Impulsübertrag auf das Gitter. Im Gegensatz zu den polar-optischen Phononen wird eine Streuung um große Winkel eintreten. Da in amorphem Siliziumdioxid keine Kristallstruktur vorliegt, kann dieser Streuprozess als isotrop angesehen werden.

Der Übergang eines Elektrons im Kristall mit dem Zustand  $|\mathbf{k}, c\rangle$  in  $|\mathbf{k}', c'\rangle$  kann in erster Näherung als

$$|\langle \mathbf{k}', c' | H_S | \mathbf{k}, c \rangle|^2 = \frac{\hbar}{2\rho\omega(\mathbf{q})} |S(\mathbf{q})|^2 \quad (3.45)$$

angeschrieben werden. Im Grenzfall großer Phononenimpulse kann der Faktor  $S(\mathbf{q})$  mit einem differentiellen Wirkungsquerschnitt  $\sigma(\mathbf{q})$  angeschrieben werden, der mit dem Formfaktor des Kristallgitters in Zusammenhang gebracht werden kann, und in Relation mit dem kristallimpulsabhängigen Faktor  $S_q(\mathbf{q})$  gilt [108],

$$|S(\mathbf{q})|^2 = \frac{\pi\hbar^4 N^2 q^2}{m^{*2}} \sigma(\mathbf{q}). \quad (3.46)$$

In dieser Gleichung ist  $N$  die atomare Dichte von Siliziumdioxid. Ferner wird die Dispersionsrelation mit

$$\omega(\mathbf{q}) = \omega_{BZ} = v_s q_{BZ} \quad (3.47)$$

mit der Schallgeschwindigkeit  $v_s$  angenähert, wobei  $q_{BZ}$  den Phononenimpuls des Randes der Brillouinzone darstellt. Eine weitere Vereinfachung ergibt sich, wenn statt der Dichte nun der Quotient aus Masse des schwersten Konstituenten der Einheitszelle  $M_{>}$  des Moleküls und der Volumens der Kristallzone verwendet wird<sup>7</sup>. Eine Abhängigkeit des Wirkungsquerschnitts vom Phononenimpuls wird vernachlässigt und daher als konstant angenommen,  $\sigma = \sigma(\mathbf{q})$ . Die Energie nach der Kollision berechnet sich wie folgt,

$$\epsilon = \epsilon' \pm \hbar v_s q_{BZ}. \quad (3.48)$$

Berücksichtigt man alle drei Äste des akustischen Phononenspektrums, dann erhält man für die totale Streurrate mit der Bandformfunktion  $\gamma_{BZ}$  an der Stelle des Impulses an der Bandkante  $q_{BZ}$

$$\lambda(\epsilon) = \frac{8\pi^3 N^2 \sigma}{m^* M_{> \omega_{BZ}}} \left( N(q) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) (1 + 2\alpha\epsilon') \left( \frac{\gamma}{\gamma_{BZ}} \right)^{3/2}, \quad (3.49)$$

$$N(q) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_{BZ}}{k_B T_L}\right) - 1}. \quad (3.50)$$

In der obigen Gleichung tritt eine sehr starke Energieabhängigkeit der Streurrate auf. Inwieweit die Approximation, daß der Wirkungsquerschnitt konstant ist, den tatsächlichen Sachverhalt richtig wiedergibt, kann nicht beantwortet werden. In der Arbeit von Arnold *et al.* [49] wird dieses Problem angeschnitten. Da sich aber bei löcherähnlichen Bändern die Streurrate mit ansteigender Elektronenenergie vermindert, ist es nicht möglich, die richtige Impulsabhängigkeit anzugeben.

### Nichtpolare optische Streuung

Die nichtpolare optische Streuung ermöglicht Übergänge zwischen den einzelnen Bändern. Jedoch wird bei dieser Streuung der impulsabhängige Faktor  $S(\mathbf{q})$  als konstant angenommen. Deswegen hat diese Art von Wechselwirkung nur eine untergeordnete Bedeutung in Siliziumdioxid. Die mathematische Behandlung ist dieselbe wie Kapitel 3.1.2.

Eine andere Erklärung des Elektronentransports in Siliziumdioxid ist von Porod und Ferry [113][114] vorgeschlagen worden. Dabei werden ähnlich wie bei Galliumarsenid verschiedene Täler im Leitfähigkeitsband angenommen. Optische Zwischentalstreuung wird dabei herangezogen, um ein unbegrenztes Anwachsen der Elektronenenergie bei hohen elektrischen Feldstärken zu verhindern. Jedoch ist, wenn man die Bandstruktur von Abbildung 3.10 betrachtet, nur eine schwache Anisotropie festzustellen. Weiters gibt es in einem Energiebereich von ungefähr 5eV ab der Untergrenze des Leitfähigkeitsbandes keine Anzeichen für Satellitentäler.

<sup>7</sup>In der Arbeit von Sparks *et al.* [108] wird stattdessen die atomare Masse des Moleküls verwendet.

### 3.2.3 Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulation für Siliziumdioxid

Bei niedrigen Feldstärken und daher kleinen Elektronenenergien wird aufgrund der starken ionischen Bindung in Siliziumdioxid von polar-optischen Phononen ein starker dissipativer Mechanismus in Gang gesetzt, sodaß freie Elektronen die Energie des Feldes an das Gitter abgeben. Zwei Moden [97] tragen zu einer Stabilisierung des Ladungstransports bei. Dabei absorbiert das Gitter entweder eine Energie von  $\epsilon_{LO_1} = 0.143eV$  oder aber im zweiten Schwingungsmodus  $\epsilon_{LO_2} = 0.063eV$ . Falls jedoch die Geschwindigkeit der Ladungsträger aufgrund höherer Felder weiterhin ansteigt, kann das Gitter der Bewegung der Elektronen nicht länger folgen. Die Rate, mit welcher die Elektronen nun das Gitter polarisieren, nimmt ab. Elektronen nehmen also ab einem elektrischen Feld von ungefähr  $2MV/cm$  mehr Energie auf, als sie an das Gitter abgeben können.

Alle Experimente zur Messung der Elektronenenergie bei hohen Feldstärken zeigen aber, daß die mittlere Elektronenenergie wesentlich höher als die Energie der polaren, longitudinalen optischen Phononen ist. Ein zweiter wichtiger Streuprozess muß also stattfinden [74][108][110]. Akustische Phononen sind bereits für den Hochenergie-transport von Alkalihalogeniden vorgeschlagen worden. Da Stoßionisation aufgrund der Differenz zwischen Valenz- und Leitfähigkeitsband erst bei sehr hohen Energien einsetzt, stabilisiert diese Wechselwirkung der Elektronen mit dem Gitter die Energieverteilung und verhindert einen dielektrischen Zusammenbruch (*polar runaway*). In Abbildung 3.12 sind die Streuraten des Vierbandmodells mit einem parabolischen als auch einem nichtparabolischen Einbandmodell verglichen. Im niedrigen Energiebereich ist die Streurrate fast ausschließlich aus der Streurrate der beiden polar-optischen Moden zusammengesetzt.

$E$ [MV/cm]	band 1 [%]	band 2 [%]	band 3 [%]	band 4 [%]
1	100.000	0.000	0.000	0.000
2	100.000	0.000	0.000	0.000
3	99.995	0.005	0.000	0.000
4	99.982	0.108	0.000	0.000
5	99.219	0.780	0.001	0.000
6	97.233	2.759	0.006	0.002
7	92.777	6.200	0.018	0.005
8	89.133	10.810	0.040	0.017
9	84.188	15.716	0.070	0.026
10	79.132	20.717	0.106	0.045

Tabelle 3.3: Besetzung der einzelnen Bänder des Vierbandmodells.

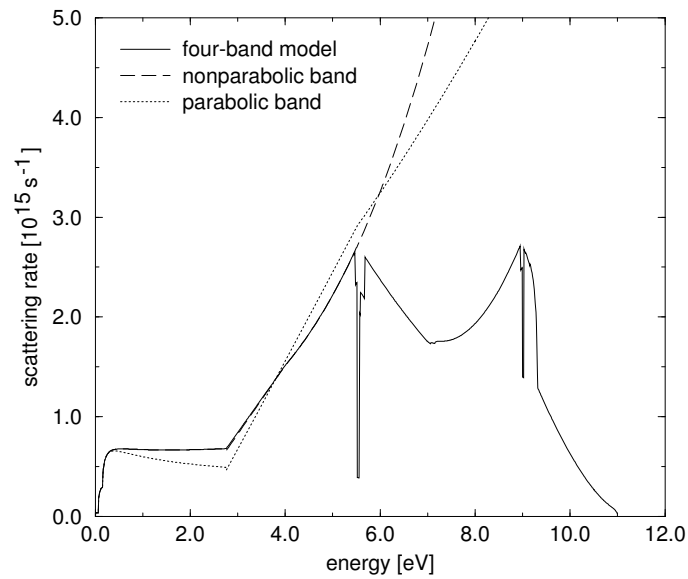


Abbildung 3.12: Berechnete Streurrate in Siliziumdioxid für verschiedene Bandmodelle

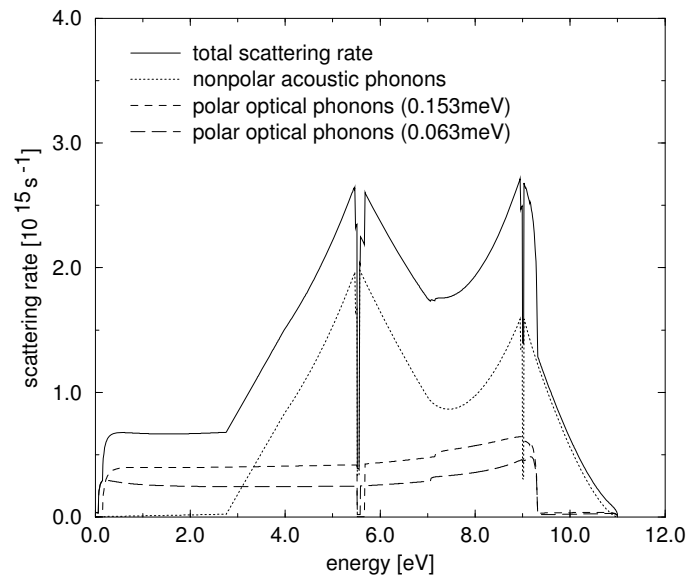


Abbildung 3.13: Partielle, berechnete Streurrate in Siliziumdioxid für das Vierbandmodell

Akustische Deformationspotentialstreuung kann nahezu vernachlässigt werden. Aufgrund der starken Energieabhängigkeit der nichtpolaren akustischen Phononenstreuung (U-Prozesse) steigt die Streuwahrscheinlichkeit sehr stark an. Für ein nichtparabolisches Band erkennt man deutlich im Gegensatz zu einem parabolischen Band die Tendenz zu starkem Anwachsen. Beim Vierbandmodell nimmt die Streurrate wegen des löcherähnlichen zweiten Bandes wieder ab. Die einzelnen Beiträge der Prozesse sind ebenfalls in Abbildung 3.13 eingezeichnet. Ab einer Energie von  $3eV$  wird die totale Streurrate von den akustischen Phononen dominiert. Die Unstetigkeiten an den Spitzen sind aufgrund der Einschränkung auf Innertalstreuung bedingt. Nichtpolare optische Phononen sind nahezu unbedeutend und tragen nur zur Zwischentalstreuung und somit zur Besetzung der höheren Bänder bei.

Das akustische Deformationspotential ist für die Normal- und Umklappprozesse gleich  $3.0eV$  [110] bei nichtparabolischem Band und  $5.0eV$  bei einem parabolischen Band. Zwischen  $2.76eV$ , also der Hälfte des ersten Bandes, und  $4eV$  ist die Streurrate linear interpoliert [109]. Für die polar-optischen Phononen wird jeweils die effektive Elektronenmasse verwendet, im dritten und vierten Band ist dieser Prozeß unterdrückt. Die optische Zwischentalstreuung hat ein Potential ( $D_iK$ ) von  $5 \times 10^8 eV/cm$  [107]. In Tabelle 3.3 ist die Besetzung der einzelnen Bänder gegeben. Bis zu einer Feldstärke von ungefähr  $7MV/cm$  wird der Transport fast ausschließlich vom ersten Band bestimmt, erst danach trägt das zweite Band zum Elektronentransport bei. Das dritte und vierte Band haben bei allen Feldstärken nur einen geringen Einfluß und können bis zu elektrischen Feldern von ungefähr  $10MV/cm$  vernachlässigt werden. Jedoch ist zu berücksichtigen, daß mit einer höheren optischen Deformationspotentialstreuung auch die Besetzung der höheren Bänder zunimmt. Für Anwendungen im Transistorbereich, bei denen maximal Feldstärken bis zu  $7MV/cm$  auftreten, ist es ausreichend, ein einzelnes nichtparabolisches Band zu verwenden.

Zur Bestimmung der mittleren Geschwindigkeit und der Energie sind drei verschiedene experimentelle Meßmethoden verwendet worden. Das sogenannte Elektrolumineszenzverfahren ermöglicht eine indirekte Bestimmung der mittleren Elektronenenergie an der Grenzfläche Siliziumdioxid-Metallelektrode. Die Elektronen verursachen eine Plasmonemission im Metall und die Kopplung von Photonen und Plasmonen bedingt eine verstärkte Lumineszenz. Dieses Photonenspektrum wiederum läßt Rückschlüsse auf die Energie zu, die die Elektronen bei Eintritt in die Gate-Elektrode haben [121]. Die zweite experimentelle Technik, die Ladungsträgerseparation [127], erlaubt eine indirekte Messung der Elektronenenergie, die bei hohen elektrischen Feldstärken von der Gate-Elektrode ins Silizium beschleunigt werden. Da diese Ladungsträger im Siliziumsubstrat sehr hohe Energien aufweisen, werden dort verstärkt Elektron-Lochpaare erzeugt. Löcher und Elektronen können unabhängig voneinander gezählt werden, indem man den Source- und/oder Drainstrom eines MOS-Transistors mißt. Je heißer die Elektronen sind, desto mehr Paare werden generiert. Wenn nun das Verhältnis der Ladungsträger bestimmt wird, kann diejeni-

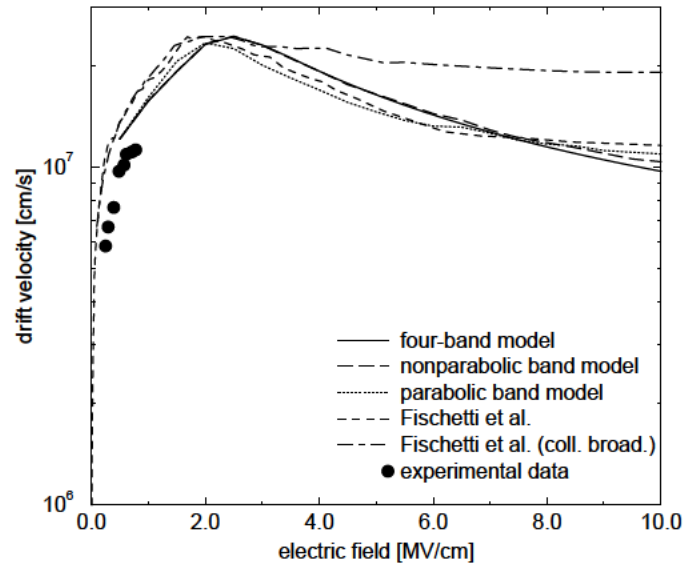


Abbildung 3.14: Mittlere Driftgeschwindigkeit der Elektronen in Siliziumdioxid

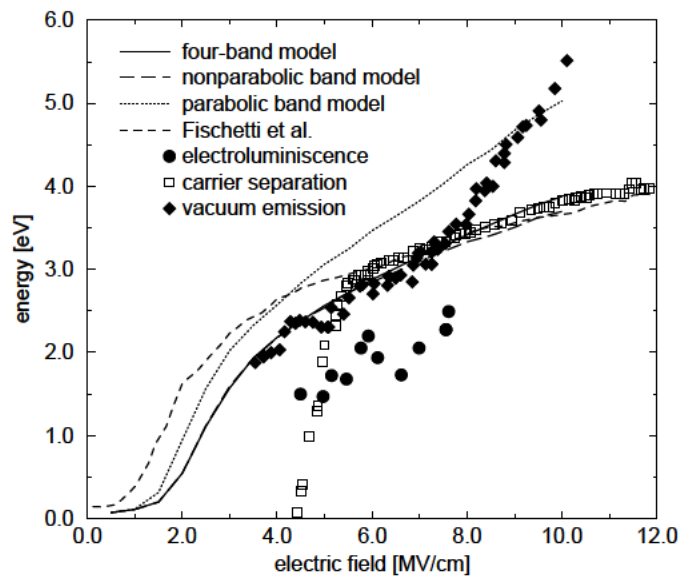


Abbildung 3.15: Mittlere Energie der Elektronen in Siliziumdioxid

ge mittlere Elektronenenergie ermittelt werden, die die Elektronen beim Verlassen des Oxids haben. Bei der Vakuumemission kann direkt auf die mittlere Energie als auch auf die Energieverteilung der Elektronen geschlossen werden. Dabei werden die Elektronen vom Substrat injiziert, gelangen zur Gate-Elektrode und werden in einer Vakuumkammer analysiert [128].

In Abbildung 3.14 ist die Driftgeschwindigkeit als Funktion des elektrischen Feldes bei Raumtemperatur dargestellt. Die experimentellen Daten sind dem Vakuumemissionsverfahren entnommen [110]. Die Geschwindigkeit wächst solange an, bis die nichtpolaren akustischen Phononen, die eine Streuung um große Winkel bevorzugen, eine starke Umverteilung der Impulsbestandteile gewährleisten. Vergleich der verschiedenen theoretischen Berechnungen ergibt, daß die beiden parabolischen Einbandmodelle eine Abweichung aufweisen, die auf die effektive Masse in Siliziumdioxid zurückzuführen ist. Obwohl in [110] die Tatsache bekannt ist, daß die effektive Masse  $0.5m_0$  des ersten Leitfähigkeitsbandes in Siliziumdioxid beträgt, wird diese gleich der Elektronenmasse angenommen. Aufgrund von quantenmechanischen Korrekturen der Streurate zeigt sich eine konstante Driftgeschwindigkeit bei hohen Feldern. Das nichtparabolische und das Vierbandmodell ergeben niedrigere mittlere Geschwindigkeiten bei schwachen Feldstärken und liegen näher bei den experimentellen Daten. Aufgrund der stark ansteigenden Streurate eines nichtparabolischen Bandes flacht die Geschwindigkeit bei  $E = 7MV/cm$  nicht ab. Die Elektronenbeweglichkeit hat bei niedrigen Feldstärken den von Hughes [102] vorhergesagten Wert von  $25cm^2/Vs$  und fällt danach in exponentieller Darstellung nahezu linear ab. In Abbildung 3.15 ist die Elektronenenergie eingezeichnet und mit experimentellen Messungen verglichen. Die Übereinstimmung mit den Daten des Vakuumemissionsexperiments ist für ein Feld zwischen  $3.5MV/cm$  und  $8MV/cm$  ausgezeichnet. Ebenso sind Energiewerte des Ladungsträgerseparationsexperiments in einem Bereich von  $5MV/cm$  bis  $10MV/cm$  nahezu identisch. Das späte Ansteigen der Energiedaten wird in [127] wegen eines eingeschränkten Meßbereichs erklärt. Die Daten, die mit dem ältesten Verfahren, der Elektrolumineszenz, ermittelt worden sind, liegen unter den theoretischen Berechnungen. Bei den Simulationen ist das Anwachsen der Elektronenenergie bei verschiedenen Feldstärken festzustellen. Eine Erklärung hierfür liefert die unterschiedliche effektive Masse. Mit einem parabolischen Einbandmodell und einer effektiven Masse von  $m^* = 0.5m_0$  kann eine Stabilisierung der Energie nur dann erreicht werden, falls der Faktor  $S_q$  im Gegensatz zu einem nichtparabolischen Band von  $3.0eV$  auf  $5.0eV$  erhöht wird.

Die Thermalisierungslänge wird als diejenige Länge definiert, die ein Elektron benötigt, um seine Durchschnittsenergie anzunehmen. Diese Länge ist sowohl von der Feldstärke als auch der injizierten Elektronenenergie abhängig. Bei niedrigen Injektionsenergien schwankt dieser Bereich zwischen  $16nm$  für niedrige Feldstärken und  $12nm$  für hohe Feldstärken. Die linke Abbildung 3.16 gibt diesen Sachverhalt für eine Injektionsenergie  $\epsilon_{inj} = 0.1eV$  für verschiedene elektrische Felder wieder. Wird

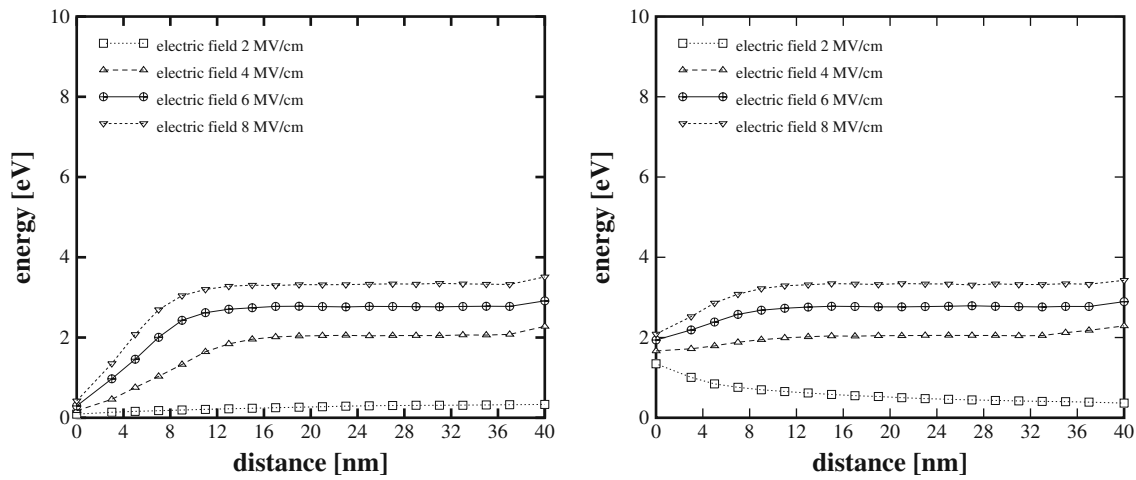


Abbildung 3.16: Verhalten von injizierten Elektronen mit einer unterschiedlichen Anfangsenergie. Links wird ein Elektron mit der Energie von  $0.1\text{eV}$  injiziert. Rechts derselbe Sachverhalt, wenn die Anfangsenergie des Elektrons  $2\text{eV}$  beträgt.

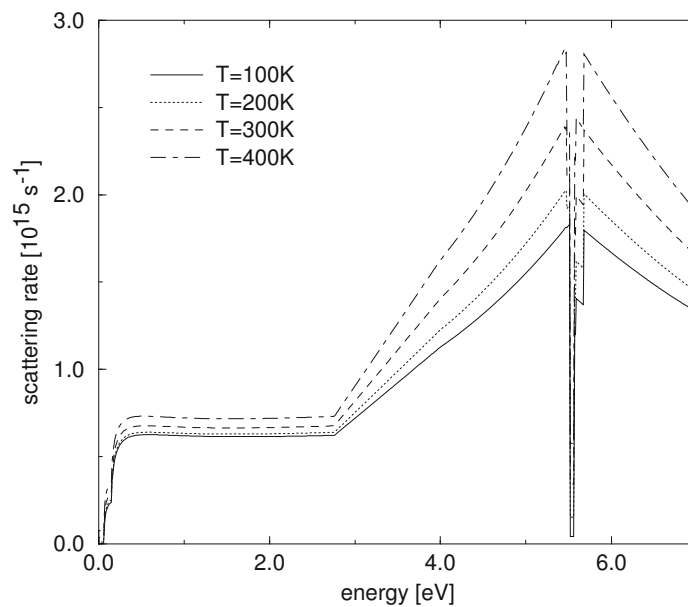


Abbildung 3.17: Temperaturabhängigkeit der Streurrate in  $\text{SiO}_2$ .



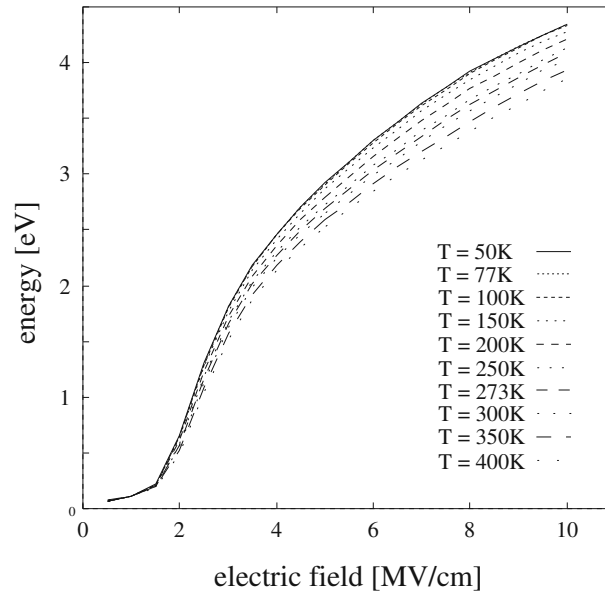
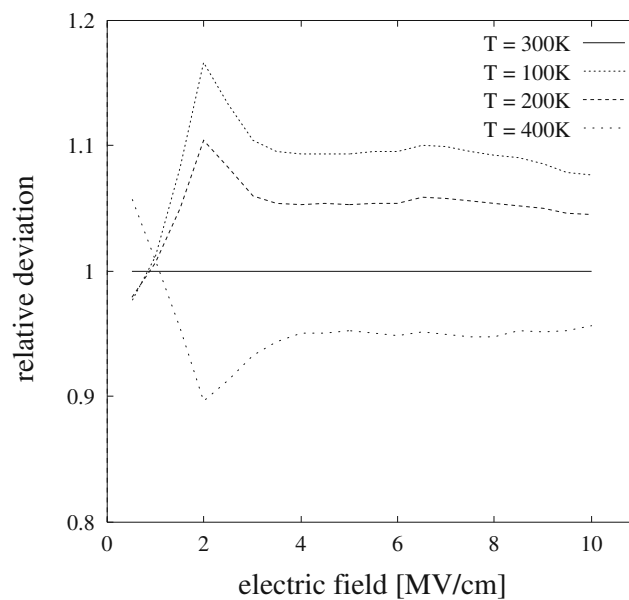


Abbildung 3.18: Temperaturabhängigkeit der Energie in Siliziumdioxid.

Abbildung 3.19: Prozentuelle Abweichung der Energie von der Referenztemperatur  $T = 300K$ .

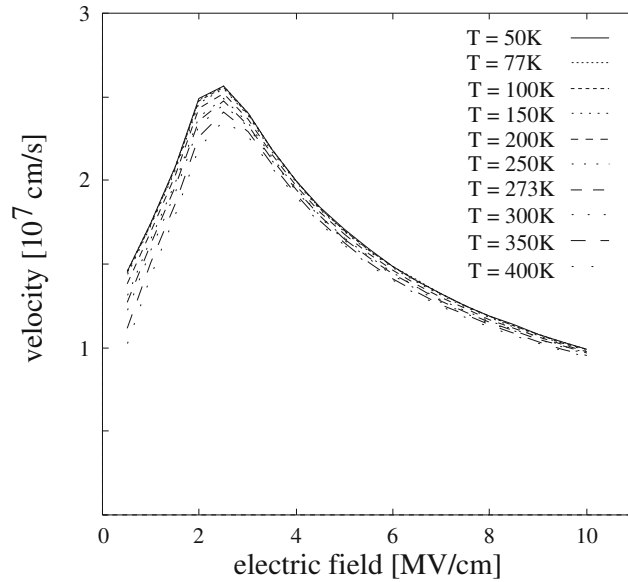


Abbildung 3.20: Temperaturabhängigkeit der Driftgeschwindigkeit in Siliziumdioxid

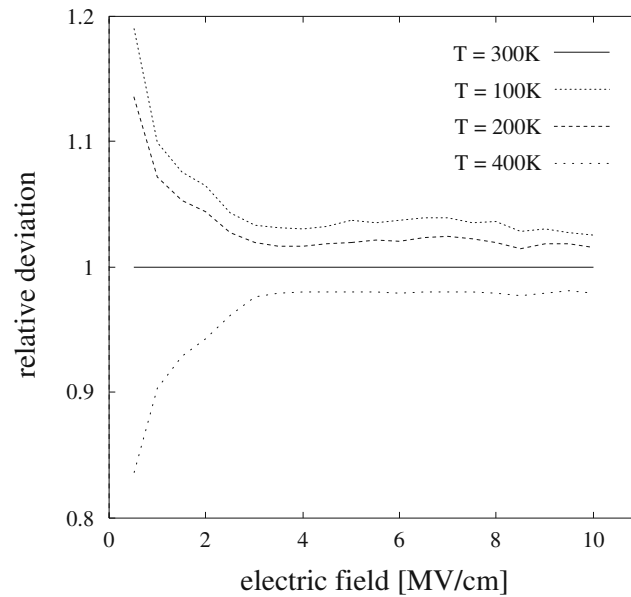


Abbildung 3.21: Prozentuelle Abweichung der Driftgeschwindigkeit von der Referenztemperatur  $T = 300K$ .

nun ein Elektron mit  $2eV$  injiziert, so verringert sich die Thermalisierungslänge. Bei hohen Feldern hat das Elektron bereits nach  $8nm$  die Durchschnittsenergie angenommen. Vermindert man das Feld, wird diese Länge auf ungefähr  $12nm$  anwachsen.

Eine Untersuchung der Temperaturabhängigkeit ist in den Abbildungen 3.17, 3.18 und 3.20 gegeben. Die totale Streurrate der longitudinalen polar-optischen Phononen ist im Vergleich mit den akustischen Phononen bei höherer Energie gering. Dabei ist die Streurrate nur für den interessanten Energiebereich bis  $6eV$  eingezeichnet. Die Energie, in Abbildung 3.18 festgehalten, hat bei niedrigen Feldstärken eine umso höhere Energie, je höher die Temperatur ist. Bei niedrigen Feldern überwiegt die thermische Energie, zusätzlich nehmen noch die polar-optischen Phononen viel Energie auf. Steigt nun das elektrische Feld, so wird ein Elektron bei niedriger Kristalltemperatur eine höhere Energie aufweisen, da die Streuraten geringer sind. Die maximale prozentuelle Abweichung ergibt sich knapp vor dem Einsetzen der akustischen Phononenstreuung (Abbildung 3.19). Bei weiterem Anwachsen der Feldstärke wird also aufgrund der höheren Streurrate bei größerer Temperatur eine niedrigere Energie zu erwarten sein. Die Geschwindigkeit hat für niedrige Energie immer einen kleineren Wert. Es zeigt sich, daß die relative Abweichung bei geringen elektrischen Feldstärken am größten ist (Abbildung 3.21), da die thermische Energie den Hauptbeitrag liefert und somit auch die mittlere Geschwindigkeit unkorreliert ist.

Die Driftgeschwindigkeit kann durch eine analytische Formel angeschrieben werden. Man unterteilt die Driftgeschwindigkeit als Funktion des elektrischen Feldes in drei Unterbereiche für niedrige, mittlere und hohe Feldstärken. Die Geschwindigkeit wird dann mit den einzelnen Geschwindigkeitsbeiträgen wie folgt

$$\frac{1}{v(E)^t} = \frac{1}{v_1(E)^t} + \frac{1}{v_2(E)^t} + \frac{1}{v_3(E)^t} \quad (3.51)$$

$$v_1(E) = \mu_0^{(1)} E \quad (3.52)$$

$$v_2(E) = \mu_0^{(2)} (E + E_2) \quad (3.53)$$

$$v_3(E) = \frac{v_3}{1 + \frac{E}{E_3}} \quad (3.54)$$

angesetzt. Die einzelnen freien Parameter sind dabei in der folgenden Tabelle aufgelistet:

$\mu_0^{(1)}$	=	25.0	$cm^2/Vs$	Beweglichkeit bei niedriger Feldstärke
$\mu_0^{(2)}$	=	7.4	$cm^2/Vs$	Beweglichkeit bei mittlerer Feldstärke
$t$	=	10.0		exponentieller Gewichtungsfaktor
$E_2$	=	1.2	$MV/cm$	Abszissenschnittpunkt des zweiten Bereichs
$E_3$	=	2.06	$MV/cm$	Stützstelle für den dritten Bereich
$v_3$	=	$5.63 \times 10^7$	$cm/s$	doppelte Maximalgeschwindigkeit

Die beiden Konstanten  $\mu_0^{(1)}$  und  $\mu_0^{(2)}$  können als die jeweiligen Beweglichkeiten im Intervall kleiner und mittlerer Felder aufgefaßt werden. Die einzelnen Bereiche ent-

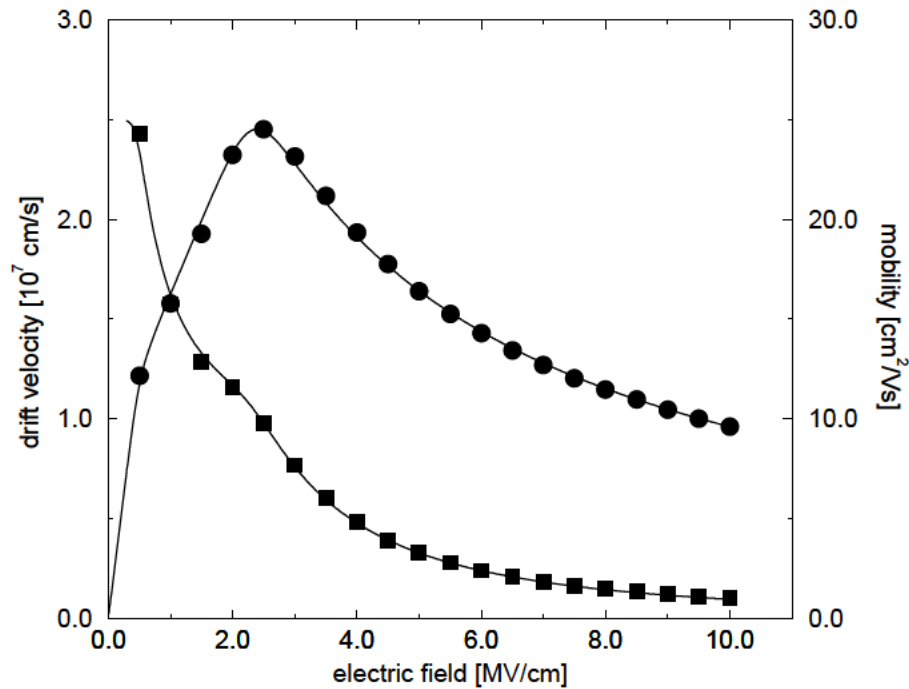


Abbildung 3.22: Die simulierte Driftgeschwindigkeit ist mit schwarzen Kreisen eingezeichnet und mit den interpolierten Daten (durchgezogene Linie) bei einer Temperatur  $T = 300\text{K}$  verglichen. Die Beweglichkeit (schwarze Quadrate) ist ebenfalls dargestellt und mit den interpolierten Werten verglichen.

sprechen immer einem dominanten Streuprozeß. Im ersten Intervall sind die polaroptischen Phononen mit einer Energie von  $0.063\text{eV}$  bedeutend, im zweiten kommt der erste Schwingungsmodus hinzu, während im dritten der Elektronentransport hauptsächlich von den akustischen Phononen bestimmt wird. Der dritte Parameter  $t$  ist ein exponentieller Gewichtungsfaktor. Der negative Schnittpunkt der linearen Funktion  $\mu_0^{(2)}(E + E_2)$  im zweiten Bereich mit der Abszisse wird mit  $E_2$  dargestellt. Der dritte Bereich wird mit einer Curie-Weiss'schen Funktion angenähert. Dabei entspricht  $E_3$  einem Normierungspunkt und  $v_3$  nahezu der doppelten Maximalgeschwindigkeit. Die Beweglichkeit ist als Quotient von Geschwindigkeit und dem elektrischen Feld,

$$\mu(E) = \frac{v(E)}{E} \quad (3.55)$$

gegeben. In Abbildung 3.22 sind die theoretisch ermittelten Werte mit der oben angeführten Formel angepaßt. Für sehr kleine Feldstärken muß aber Materialver-

unreinigung durch Wasserstoff oder Gitterfehler und Versetzungen, die sicherlich einen Grenzwert in der Nullfeldbeweglichkeit zur Folge haben werden, gesondert berücksichtigt werden. Für niedrige elektrische Felder ist eine Beweglichkeit von  $25\text{cm}^2/\text{Vs}$  gemessen worden [101].

Die Abhängigkeit von der Temperatur kann nun in der Nullfeldbeweglichkeit  $\mu_0^{(1)}$ , der Beweglichkeit bei mittleren Feldstärken  $\mu_0^{(2)}$  und dem Parameter für den Bereich hoher Felder  $v_3$  als Funktion des Verhältnisses  $T/T_0$  eingeführt werden,

$$\mu_0^{(1)} = 30.2 + 1.35 \left(\frac{T}{T_0}\right) - 6.7 \left(\frac{T}{T_0}\right)^2 \quad (3.56)$$

$$\mu_0^{(2)} = 7.88 + 0.30 \left(\frac{T}{T_0}\right) - 0.82 \left(\frac{T}{T_0}\right)^2 \quad (3.57)$$

$$v_3 = 5.98 \times 10^7 - 0.38 \times 10^7 \left(\frac{T}{T_0}\right) + 0.045 \times 10^7 \left(\frac{T}{T_0}\right)^2, \quad (3.58)$$

wobei  $T_0 = 300\text{K}$  als Referenztemperatur gewählt wird. Die Beweglichkeiten  $\mu_0^{(1)}$  und  $\mu_0^{(2)}$  sind in  $[\text{cm}^2/\text{Vs}]$  gegeben, die Geschwindigkeit  $v_3$  in  $[\text{cm}/\text{s}]$ . Der Gültigkeitsbereich der Temperatur erstreckt sich von  $77\text{K}$  bis  $400\text{K}$ .

### 3.2.4 Diskussion und Ergebnisse neuerer Experimente

In diesem Abschnitt sollen zuerst die wichtigsten Annahmen in bezug auf Bandstruktur, Parameter der Streuraten, Einfluß von quantenmechanischen Korrekturen der Streuraten und der Gegensatz von amorphem und kristallinem Siliziumdioxid besprochen werden. Danach wird der Einfluß von Verunreinigungen und deren Auswirkung auf den Elektronentransport diskutiert. Ansätze zur Modellierung des Löchertransports, soweit sie in der Literatur gegeben sind, werden erläutert und qualitativ abgeschätzt. Aufgrund von experimentellen Messungen soll die Abhängigkeit der Elektronenenergie als Funktion des Materials der Gate-Elektrode und der Dicke der Oxidschicht untersucht werden. Abschließend werden die experimentellen Daten neuerer Messungen und deren Auswirkung auf den Elektronentransport bei sehr hohen elektrischen Feldern besprochen.

Bandstrukturberechnungen in  $\alpha$ -Quarz [117] zeigen deutlich, daß das erste Leitfähigkeitsband in Siliziumdioxid entscheidenden Einfluß auf den Elektronentransport hat. Die effektive Masse dieses Bandes wird mit ungefähr  $0.5m_0$  [129] angegeben. Ebenso zeigt die Silizium-Sauerstoff-Bindung teils kovalenten und teils ionischen Charakter. Der Bindungswinkel wird mit  $144^\circ$  angegeben. Bandstrukturberechnungen als auch experimentelle Messungen bestätigen eindeutig, daß die Zustandsdichte zwischen  $6$  und  $9\text{eV}$  ein Minimum aufweist. Damit kann auch die fallende Tendenz der Streuraten ab  $5.52\text{eV}$  erklärt werden. Zur Berechnung der Zustandsdichte bei höheren Energien gibt es widersprüchliche Aussagen. Es wird zwar stets betont, daß

ein weiteres Maximum vorhanden sein muß, jedoch sowohl die Größe als auch der Energiewert unterscheiden sich quantitativ in der Literatur stark. Ferner muß bei kleinen Feldern der Elektronentransport von lokalisierten Zuständen in amorphen Strukturen berücksichtigt werden. Dies kann aber nicht im Rahmen einer Monte-Carlo-Rechnung erfolgen, da dabei freie Elektronen vorausgesetzt werden. Es wird jedoch in [129] darauf hingewiesen, daß diese lokalisierten Elektronenzustände nur in einem sehr geringen Ausmaß zu einer Modifikation der physikalischen Observablen bei makroskopischer Betrachtung beitragen und vielfach von Verunreinigungen überlagert sind. Weiters wird die Behauptung aufgestellt, daß amorphes Siliziumdioxid im wesentlichen die Bandstruktur von  $\alpha$ -Quarz hat [110][129].

Bei den Streuraten der longitudinalen optischen Phononen wird eine Erhöhung der effektiven Masse aufgrund der Polaronbildung erwartet, wobei man annimmt, daß das Elektron, das im Potential der nächsten Gitterrümpfe gestreut wird, zusätzlich die Polarisierung des gesamten Gitters mit sich führt [110][130],

$$m_{pol}^* = \frac{m^*}{(1 - \frac{\beta}{6})}. \quad (3.59)$$

Dadurch wird die Streurrate reduziert [90][110][130], wobei  $\beta$  mit störungstheoretischen Korrekturen zweiter Ordnung bestimmt werden kann und ungefähr gleich 1.35 ist. In [110] wird gezeigt, daß diese Erweiterung vernachlässigt werden kann. Zur Berechnung der Streurrate von nichtpolaren akustischen Phononen ist die genaue Kenntnis der Lage der Atome in amorphem Siliziumdioxid wichtig. In allen Arbeiten, die diesen Streumechanismus behandeln, wird aber nicht näher darauf eingegangen, stattdessen wird dieser Prozeß als isotrop angesehen. Da auch die Stärke der Wechselwirkung unbekannt ist, sollte bei mittleren Energien die Streurrate aufgrund der Nichtparabolizität festgelegt sein und konsequenterweise die Streuraten stärker beeinflussen als quantenmechanische Korrekturen, die die Übergangswahrscheinlichkeit modifizieren. Da jedoch mit dem zweiten Band in Siliziumdioxid eine Abnahme der Streuraten festgestellt werden kann, ist die Aussage zulässig, daß die Bandstruktur für den Elektronentransport sicherlich von größerer Bedeutung ist. Zusätzlich ist die Energieabhängigkeit der Übergangswahrscheinlichkeit mit der Annahme eines impulsunabhängigen Wirkungsquerschnitts [108][109][110] in Gleichung 3.45 schwer unterschätzt. Damit könnte ebenfalls eine Reduktion der totalen Streurrate verbunden sein.

Obwohl schon erwähnt worden ist, daß Verunreinigungen zur Bestimmung der mittleren Teilchenenergie vernachlässigt werden können, trifft dies nicht zu, wenn man Degradationsprozesse analysiert. Einerseits erhöht eine hohe Wasserstoffkonzentration die Bildungsrate von sogenannten *bulk traps*, die wiederum Grenzflächenladungen am Übergang des Oxids zum Substratmaterial erzeugen, andererseits kann wegen des Transports eines ionisierten Wasserstoffatoms die Ausbreitung von ungesättigten Bindungen in Verbindung mit der damit verbundenen Freisetzung von

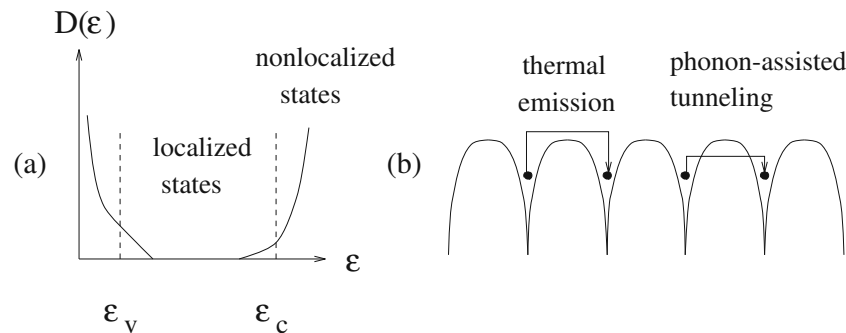


Abbildung 3.23: Zustandsdichte bei amorphen Siliziumdioxid. Zwischen der Valenzband- und Leitfähigkeitskante sind nur lokalisierte Zustände möglich (Abbildung a). Der Löchertransport ist wegen der großen effektiven Masse der Löcher ebenfalls stark lokalisiert. Abbildung (b) zeigt die verschiedenen Möglichkeiten, wie sich die Bindung verschiebt.

Elektronen und Löchern im Oxid verstärkt werden. Diese Zerstörung von Bindungen zwischen Silizium und Sauerstoff führt dann zur Auflösung der mikroskopischen Struktur der Oxidschicht und resultiert in weiterer Folge in einem Ansteigen des Gate-Stromes. Andere Verunreinigungen, jedoch in geringerem Ausmaß, sind Metalle der ersten Hauptgruppe, die aber die gleichen Auswirkungen haben. Sicherlich ist in MOS-Strukturen auch die Bildung von sogenannten *interface traps* für eine Änderung der Potentialverteilung verantwortlich. Aufgrund der Grenzschicht muß man annehmen, daß sich ungesättigte Bindungen sowohl im Silizium als auch im Oxid befinden. Diese können einerseits aufgrund von Kollisionen mit Elektronen des Substrats freigesetzt werden oder aber Elektronen in einen gebundenen Zustand überführen. Lebensdauer, Wirkungsquerschnitte und Bilanzgleichungen wie auch die Klassifikation solcher Einfangmechanismen für Elektronen (“schnell”, “langsam”, “shallow”) sind Gegenstand experimenteller und theoretischer Untersuchungen [16][131][132][133][134][135][136][137].

Im Gegensatz zu Elektronen können die Löcher in den Valenzbändern nicht als frei aufgefaßt werden. Diese Elektronen sind stark lokalisiert. Im allgemeinen wird bei amorphem Siliziumdioxid die Zustandsdichte nicht exakt den Wert Null an den Bandkanten annehmen, sondern darüber hinausreichen. Diese Zustände sind ebenfalls lokalisiert. Der Löchertransport erfolgt nun aufgrund der Verschiebung der einzelnen ungesättigten Elektronenbindungen. Dabei unterscheidet man thermionische Verschiebungen als auch phononeninduzierte Prozesse. Der Unterschied dieser beiden Mechanismen ist in Abbildung 3.23 erläutert. Dieser Transportvorgang kann nun thermisch angeregt werden, indem die Barriere überwunden wird, oder auf-

grund einer Gitterwechselwirkung des Elektrons eine tunnelähnliche Verschiebung des lokalisierten Zustands bewirken. Die Wahrscheinlichkeit dieses Prozesses [16] kann bei Raumtemperatur als

$$P \approx \exp \frac{E_a}{k_B T} \quad (3.60)$$

ermittelt werden, wobei  $E_a$  diejenige Energiebarriere darstellt, die überwunden werden muß. Diese kann theoretisch bestimmt werden. Damit kann für die Beweglichkeit

$$\mu \approx \frac{e}{k_B T} a^2 P \quad (3.61)$$

abgeleitet werden, mit  $a$  als der sogenannten *Hopping*-Distanz. Bei niedrigen Temperaturen ( $T < 200K$ ) wird ein schwächerer Anstieg als das  $1/T$ -Verhalten beobachtet [16][102]. Eine physikalische Behandlung dieses Transportphänomens findet sich in [104][129].

Im stationären Fall ist in Siliziumdioxid keine Abhängigkeit der Ladungsträgerenergie von der Dicke des Oxids gegeben [138][139][140][141]. Auch das Material der Gate-Elektrode verändert die mittlere Energie oder die Driftgeschwindigkeit nicht. Experimente zur Untersuchung der Elektronenenergie in der Größe der Energiedifferenz zwischen Valenz- und Leitfähigkeitsband ergeben, daß die besprochenen Streumechanismen von Elektronen nicht ausreichen, um einen Durchbruch zu verhindern [49][142]. Stattdessen nimmt die Stoßionisation zu und ein weiterer stark inelastischer Streuprozess wird postuliert. Indizien deuten darauf hin, daß es sich dabei um Elektron-Elektronwechselwirkungen handelt. Als zusätzliche Schwierigkeit kommt bei so hohen Energien die nur ungenügende Kenntnis der Bandstruktur und der Streuraten hinzu. Jedoch sind diese hohen Teilchenenergien bei normalem Transistorbetrieb kaum nachzuweisen. Im allgemeinen wird die Anzahl derjenigen Elektronen in Siliziumdioxid, die Energien von mehr als  $8eV$  im Leitfähigkeitsband annehmen, äußerst gering sein, sodaß alle Effekte, die die makroskopischen Variablen betreffen, fast gar keine Änderungen verursachen und somit gerechtfertigterweise vernachlässigt werden können.



# Kapitel 4

## Berechnung der Injektionswahrscheinlichkeit

Silizium und Siliziumdioxid weisen verschiedene physikalische Bandstrukturen des Leitfähigkeitsbandes auf, und somit ist eine unterschiedliche Dynamik der Ladungsträger impliziert. Da an einer idealen Grenzfläche keine stetige Fortsetzung des Leitfähigkeitsbandes vorhanden ist, tritt für Elektronen eine Potentialbarriere auf, die ein Eindringen der Ladungsträger in den Isolator verhindert. Jedoch läßt die Quantenmechanik aufgrund der Stetigkeit der Wellenfunktion eine endliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit in klassisch verbotenen Zonen zu, sodaß ein Elektron, das mithilfe einer Wahrscheinlichkeitswelle beschrieben wird, dennoch im Oxid beobachtet werden kann. Ein Elektron kann also einerseits in Siliziumdioxid emittiert werden aber auch direkt in die Gate-Elektrode injiziert werden und zu einem kleinen, jedoch unerwünschten, parasitären Gate-Strom beitragen.

Das Verhalten von Elektronen in Anwesenheit einer Potentialbarriere und unter Einfluß eines hohen elektrischen Feldes ist erstmals von Fowler und Nordheim untersucht worden [143]. Zur Berechnung der Gate-Ströme wird diese Näherung adaptiert [144][145]. Die sogenannte Fowler-Nordheim-Näherung bestimmt die Injektionswahrscheinlichkeit in Anwesenheit eines elektrischen Feldes gemäß

$$P_{Si-G}(\epsilon_n) = \begin{cases} \exp\left(-\frac{4}{3\hbar}\sqrt{2m_{OX}^*}(\Phi_B - \epsilon_n)^{3/2}/eE_{OX}\right) & , \quad \epsilon_n < \Phi_B \\ 1 & , \quad \epsilon_n \geq \Phi_B \end{cases} \quad (4.1)$$

wobei zur besseren Unterscheidung nun die effektive Masse der Elektronen im Oxid mit  $m_{OX}^*$  bezeichnet wird,  $E_{OX}$  das transversale elektrische Feld im Oxid und  $\Phi_B$  die Energieschwelle an der Si/SiO<sub>2</sub>-Grenzfläche darstellen und die Normalkomponente der Energie in bezug auf die Potentialbarriere mit  $\epsilon_n$  bezeichnet wird. Die Schwelle  $\Phi_B$  wird zusätzlich noch aufgrund des sogenannten *image force barrier lowering* erniedrigt [145][146],

$$\Phi_B = \Phi_{OX}^{(0)} - \beta E_{OX}^{1/2} - \alpha E_{OX}^{2/3}, \quad (4.2)$$

mit der Potentialschwelle  $\Phi_{OX}^{(0)} = 3.15eV$  und den beiden empirischen Konstanten  $\beta = 2.59 \times 10^{-4} e(V cm)^{1/2}$  und  $\alpha = 10^{-5} e(V cm^2)^{1/3}$ . Die Injektionswahrscheinlichkeit setzt sich aus zwei Anteilen zusammen. Wenn die Energie normal zur Grenzfläche kleiner als die Potentialbarriere ist, dann besteht die Wahrscheinlichkeit, daß Elektronen diese durchtunneln. Ist die Energie jedoch größer als die Schwelle, so wird das Teilchen gemäß den klassischen Prinzipien behandelt, und die Injektionswahrscheinlichkeit ist gleich eins.

Neuere Experimente, die von Maserjian und Zamani [147] durchgeführt wurden, zeigen, daß Elektronen nicht nur an der Si/SiO<sub>2</sub>-Grenzfläche, sondern ebenfalls an der Grenzfläche des Oxids und der Gate-Elektrode reflektiert werden können. Aufgrund der Injektion von ballistischen Elektronen in dünne Oxidschichten sind bei der Stromdichte Oszillationen festgestellt worden. Dies führte zu der Annahme, daß Interferenzerscheinungen bei der Injektion hochenergetischer Elektronen stattfinden müssen. In [148] wurde erwähnt, daß die Interferenzerscheinungen in dickeren Oxiden schwächer sind als in dünnen, da Elektronen in dickeren Schichten zusätzlich Wechselwirkungen mit dem Kristall unterworfen sind. Ferner kann die Kohärenz der Wahrscheinlichkeitswellen der Ladungsträger aufgrund einer rauen Grenzfläche an der Gate-Elektrode gestört werden und die Interferenzerscheinungen vermindern.

## 4.1 Das physikalische Modell

An der Grenzschicht zwischen Silizium und Siliziumdioxid ist die Bandkante des untersten Leitfähigkeitsbandes in SiO<sub>2</sub> um ungefähr 3.15eV im Vergleich mit dem Minimum in Silizium verschoben. Das bedeutet, daß Elektronen, die in Silizium sich unterhalb dieser Schwelle befinden, klassisch nicht in den Isolator eindringen können. Erst wenn die Elektronenenergie größer als die Potentialschwelle ist, dann können Elektronentrajektorien auch im Oxid fortgesetzt werden. In der quantenmechanischen Formulierung dagegen, die Teilchen Welleneigenschaften zuordnet und eine endliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit im gesamten Raumbereich bedingt, muß nun das Potential, in dem sich das Teilchen befindet, bestimmt werden. In Abbildung 4.1(a) ist die potentielle Energie normal zur Grenzfläche für direktes Tunneln eingezeichnet. Elektronen werden in Silizium mit einer einfallenden und einer reflektierten Welle repräsentiert. Die Energie dieser Elektronen wird vom Minimum des Leitfähigkeitsbandes gezählt. An der Grenzschicht zum Oxid ( $x = 0$ ) tritt nun eine Barriere auf, die aufgrund eines hohen, konstanten elektrischen Feldes stark abfällt. Der Übergang zur Gate-Elektrode an der Stelle  $t_{OX}$  hat einen weiteren starken Potentialabfall an dieser Grenzschicht zur Folge. In diesem Fall wird nur eine Lösung angenommen, da direktes Tunneln vom Gate ins Substrat sehr gering ist und in der weiteren Rechnung vernachlässigt wird. Die Tunnelwahrscheinlichkeit gibt nun diejenige Wahrscheinlichkeit an, mit der ein Elektron vom Kanal in die Gate-Elektrode

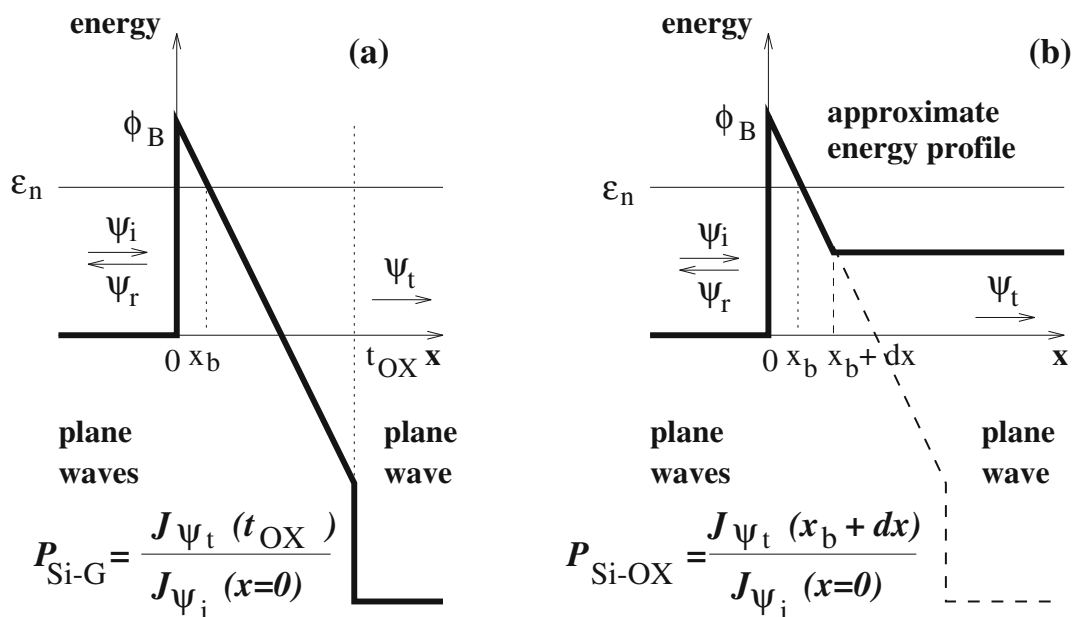


Abbildung 4.1: Profil des Potentials normal zur Si/SiO<sub>2</sub>-Gate-Grenzfläche für direktes Tunneln (a) und für den Fall einer Emission (b) in SiO<sub>2</sub>. Zur besseren Veranschaulichung sind die Wellenfunktionen im Substrat als einfallende  $\psi_i$  und reflektierte Welle  $\psi_r$  eingezeichnet. Im Bereich der Gate-Elektrode wird die transmittierte Welle mit  $\psi_t$  bezeichnet.

injiziert wird, und ist als Quotient des transmittierten und einfallenden Wahrscheinlichkeitsflusses definiert.

Abbildung 4.1(b) stellt ein Modell für die Injektion von Elektronen in das Oxid dar. Die Energie normal zur Potentialbarriere wird mit  $\epsilon_n$  bezeichnet. Ist nun die Normalenergie niedriger als die Potentialbarriere, dann wird ein Elektron in SiO<sub>2</sub> an der Stelle  $x_b + dx$  injiziert, wobei  $dx$  eine willkürliche, kleine numerische Konstante ist. Überschreitet jedoch die Energie den Wert der Potentialschwelle, dann wird ein Elektron, falls eine Injektion stattfindet, an der Stelle  $dx$  im Siliziumdioxid anzutreffen sein.

Messungen [146][148] ergaben, daß die Potentialschwelle an beiden Grenzflächen nahezu ideal ist und sich nur über einige Zehntel Nanometer erstreckt. Damit kann die Potentialbarriere in guter Näherung als abrupt einsetzend angenommen werden. Weiters, da die Oxiddicke verglichen mit den Abmessungen des gesamten Bauteils sehr gering ist und keine Ladungen im Oxid vorhanden sind, kann zusätzlich noch das elektrische Feld im Oxid als konstant angesehen werden.

## 4.2 Ableitung der Injektionswahrscheinlichkeit

Die stationäre Schrödingergleichung für ein Elektron, das sich im Bereich der Barriere an der Grenzfläche befindet, lautet

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(\mathbf{x}) \right] \Psi(\mathbf{x}) = \epsilon \Psi(\mathbf{x}), \quad (4.3)$$

wobei das Potential von Abbildung 4.1(a) folgende mathematische Form aufweist,

$$V(\mathbf{x}) = V(x) = \begin{cases} 0 & , \quad x < 0 \\ \Phi_B - eE_{OX}x & , \quad 0 < x < t_{OX} \\ \Phi_B - eE_{OX}t_{OX} - \Phi_G & , \quad x > t_{OX}. \end{cases} \quad (4.4)$$

Das Potential soll nur auf die Normalkomponente des Impulses wirken. Mit  $\Phi_G$  wird den verschiedenen Minima der Leitfähigkeitsbänder am Übergang vom Oxid zum Gate-Material Rechnung getragen. Da im Bereich des Substrats und in der Gate-Elektrode ein konstantes Potential angenommen wird, kann die Wellenfunktion als ebene Welle angenommen werden. Dabei gilt im Kanalbereich in x-Richtung

$$\psi_1(x) = A_1 \exp(ik_1x) + A_2 \exp(-ik_1x), \quad (4.5)$$

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m^*\epsilon_n}{\hbar^2}}, \quad (4.6)$$

wohingegen für den Bereich der Gate-Elektrode die Wellenfunktion folgendes Aussehen hat,

$$\psi_3(x) = C_1 \exp(ik_3x), \quad (4.7)$$

$$k_3 = \sqrt{\frac{2m_G^*(\epsilon_n - \Phi_B + eE_{OX}t_{OX} + \Phi_G)}{\hbar^2}}. \quad (4.8)$$

Dabei wird eine parabolische Energie-Impulsrelation vorausgesetzt. Die unterschiedlichen effektiven Massen werden in Silizium mit  $m^*$  und für den Gate-Bereich mit  $m_G^*$  geschrieben. Die Konstanten  $A_1$ ,  $A_2$  und  $C_1$  werden aufgrund der Stetigkeit der Wellenfunktion und deren Ableitung bestimmt. Im Gegensatz zu Silizium wird in der Gate-Elektrode nur die transmittierte Welle berücksichtigt.

Im Oxid wird die dreidimensionale Wellenfunktion  $\psi_2(\mathbf{x})$  folgendermaßen separiert,

$$\Psi_2(\mathbf{x}) = \psi_2(x) e^{ik_y y} e^{ik_z z}. \quad (4.9)$$

Einsetzen dieser Funktion ergibt nun die Differentialgleichung für die gesuchte, eindimensionale Wellenfunktion  $\psi_2(x)$ ,

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m_{OX}^*} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi_2(x) = \left[ \epsilon - \frac{\hbar^2}{2m_{OX}^*} (k_y^2 + k_z^2) \right] \psi_2(x). \quad (4.10)$$

Der Term in den eckigen Klammern auf der rechten Seite kann nun als die Normalkomponente der Energie  $\epsilon_n$  in bezug auf die Grenzschicht aufgefaßt werden.

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi_2(x) + \left[ \frac{2m_{OX}^* e E_{OX}}{\hbar^2} \left( x - \frac{\Phi_B - \epsilon_n}{e E_{OX}} \right) \right] \psi_2(x) = 0. \quad (4.11)$$

Wenn die Relation  $\epsilon_n > \Phi_B$  gilt, dann kann man die folgende Transformation definieren,

$$\zeta = \left( \frac{2m_{OX}^* e E_{OX}}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} \left( \frac{\epsilon_n - \Phi_B}{e E_{OX}} + x \right). \quad (4.12)$$

Wählt man nun für die Funktion  $\psi_2(x)$  einen geeigneten Ansatz,

$$\psi_2(x) = \sqrt{\zeta} u \left( \frac{2}{3} \zeta^{\frac{3}{2}} \right), \quad (4.13)$$

erhält man als Ergebnis die Besselsche Differentialgleichung der Ordnung 1/3,

$$\left( \frac{2}{3} \zeta^{\frac{3}{2}} \right)^2 u'' \left( \frac{2}{3} \zeta^{\frac{3}{2}} \right) + \left( \frac{2}{3} \right) \zeta^{\frac{3}{2}} u' \left( \frac{2}{3} \zeta^{\frac{3}{2}} \right) + u \left( \frac{2}{3} \zeta^{\frac{3}{2}} \right) \left[ \left( \frac{2}{3} \zeta^{\frac{3}{2}} \right)^2 - \left( \frac{1}{3} \right)^2 \right] = 0. \quad (4.14)$$

Die Lösung der obigen Gleichung sind die Besselfunktionen der Ordnung 1/3, die in der Literatur auch vielfach Airy-Funktionen genannt werden. Die gesamte Lösungsfunktion in x-Richtung kann dann mit den beiden Normierungskonstanten  $B_1$  und  $B_2$  als

$$\psi_2(x) = B_1 \sqrt{\zeta} J_{\frac{1}{3}} \left( \frac{2}{3} \zeta^{\frac{3}{2}} \right) + B_2 \sqrt{\zeta} J_{-\frac{1}{3}} \left( \frac{2}{3} \zeta^{\frac{3}{2}} \right) \quad (4.15)$$

geschrieben werden. Falls nun die Normalenergie kleiner als die Potentialbarriere ist,  $\epsilon_n < \Phi_B$ , dann führt man statt der Definition in Gleichung 4.12 für den Bereich  $0 < x < x_b$

$$\xi = \left( \frac{2m_{OX}^* e E_{OX}}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} \left( x - \frac{\Phi_B - \epsilon_n}{e E_{OX}} \right) \quad (4.16)$$

ein. Analog zur obigen Ableitung erhält man als Lösungsfunktion die modifizierten Besselfunktionen der Ordnung 1/3,

$$\psi_2(x) = B_1 \sqrt{\xi} I_{\frac{1}{3}} \left( \frac{2}{3} \xi^{\frac{3}{2}} \right) + B_2 \sqrt{\xi} I_{-\frac{1}{3}} \left( \frac{2}{3} \xi^{\frac{3}{2}} \right). \quad (4.17)$$

Am Schnittpunkt der Normalenergie mit dem abfallenden Potential im Oxid erfordert die Kontinuität der Wellenfunktion die folgenden Übergangsbedingungen für die Amplituden  $B_1$  und  $B_2$  der regulären Besselfunktionen der Ordnung 1/3

$$B_1' = -B_1 \quad \text{und} \quad B_2' = B_2 \quad (4.18)$$

und somit für den Bereich  $x_b < x < t_{OX}$

$$\psi_2(x) = -B_1 \sqrt{\zeta} J_{\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}\zeta^{\frac{3}{2}}\right) + B_2 \sqrt{\zeta} J_{-\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}\zeta^{\frac{3}{2}}\right), \quad (4.19)$$

wobei das Argument  $\zeta$  der obigen Funktion gemäß Gleichung 4.12 gegeben ist.

Die Amplituden  $A_{1,2}$ ,  $B_{1,2}$  und  $C_1$  werden nun aufgrund der Stetigkeit der Wellenfunktion und deren Ableitung bestimmt. Man erhält also das folgende Gleichungssystem zur Berechnung der fünf Normierungskonstanten,

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \quad (4.20)$$

$$\frac{d}{dx}\psi_1(0) = \frac{d}{dx}\psi_2(0) \quad (4.21)$$

$$\psi_2(t_{OX}) = \psi_3(t_{OX}) \quad (4.22)$$

$$\frac{d}{dx}\psi_2(t_{OX}) = \frac{d}{dx}\psi_3(t_{OX}). \quad (4.23)$$

Damit sind vier Normierungskonstanten festgelegt und können durch eine einzige ausgedrückt werden. Die Wahrscheinlichkeitsflußdichte  $J(x)$  wird nun mithilfe der komplex konjugierten Wellenfunktion gebildet,

$$J(x) = \psi(x)\nabla\psi^\dagger(x) - \psi^\dagger\nabla\psi(x). \quad (4.24)$$

Die Transmissionswahrscheinlichkeit berechnet sich nun als Quotient aus der transmittierten und der einfallenden Wahrscheinlichkeitsflußdichte

$$P_{Si-G} = \frac{J_t(t_{OX})}{J_i(x=0)}, \quad (4.25)$$

wobei zur besseren Unterscheidung die Indizes  $i$  für die einfallende und  $t$  für die transmittierte Flußdichte verwendet werden.

Für den Fall, daß man die Injektion von Elektronen in Siliziumdioxid nach Abbildung 4.1(b) berechnen will, muß die Wellenfunktion im Oxid bis zum Schnittpunkt der potentiellen Energie mit der Normalkomponente der Energie an der Stelle  $x_b$  entweder nach Gleichung 4.15 oder Gleichung 4.17 berechnet werden, abhängig davon, ob die Energie größer oder kleiner als die Potentialbarriere am Übergang von Silizium zu Siliziumdioxid ist. Die Wellenfunktion für den dritten Bereich wird nun mit den Parametern des Oxids angeschrieben,

$$\psi_3(x) = C_1 \exp(ik_3x), \quad (4.26)$$

$$k_3 = \sqrt{\frac{2m_{OX}^*(\epsilon_n - \Phi_B + eE_{OX}(x_b + dx))}{\hbar^2}}. \quad (4.27)$$

Die Übergangsbedingungen müssen nun ebenfalls im Oxid an der Stelle  $x_b$  anstatt  $t_{OX}$  berechnet werden. Ist die Energie größer als die Barriere, dann wird  $x_b$  gleich

Null gesetzt. Die Transmissionswahrscheinlichkeit ist dann analog zu Gleichung 4.25 zu bestimmen,

$$P_{Si-Ox} = \frac{J_t(x_b + dx)}{J_i(x = 0)}. \quad (4.28)$$

### 4.3 Ergebnisse

Die Transmissionsraten für Fowler-Nordheim-Tunneln, direktes Tunneln und Injektion in das Oxid sind in Abbildung 4.2 dargestellt. Das elektrische Feld beträgt  $5MV/cm$ , die Oxiddicke  $t_{OX} = 30nm$  und als effektive Masse wird in allen drei Bereichen der besseren Veranschaulichung wegen  $m^* = m_{OX}^* = m_G^* = 0.5m_0$  gewählt. An der Grenzfläche zur Gate-Elektrode wird die Potentialbarriere  $\Phi_G$  Null gesetzt. Die Wahrscheinlichkeit, daß ein Elektron die Potentialbarriere durchtunnelt, ist bei niedrigen Energien  $\epsilon < 2.1eV$  für alle Modelle annähernd gleich groß. Ab einer Energie von  $2.1eV$  setzt ein starker exponentieller Anstieg der Fowler-Nordheim-Tunnelwahrscheinlichkeit ein. Für Energien, die größer als die Potentialbarriere  $\Phi_B = 3.15eV$  sind, ist die Transmissionsrate gleich eins. Oszillationen im Fall, daß das Elektron direkt tunnelt, sind klar erkennbar. Im Gegensatz zum Fowler-Nordheim-Tunneln ist auch im Fall hoher Injektionsenergien eine geringe Wahrscheinlichkeit vorhanden, daß ein Elektron an der Grenzfläche reflektiert wird. Wird ein Teilchen nun ins Oxid emittiert, dann sind in der Transmissionsrate keine Oszillationen zu erkennen. Diese entstehen, weil am Übergang zur Gate-Elektrode Reflexionen möglich sind und so Interferenzerscheinungen der Transmissionsrate verursachen.

Oszillationen in der Transmissionsrate für direktes Tunneln sind stark von der Oxiddicke abhängig und nehmen mit abnehmender Dicke zu. In Abbildung 4.3 wird dieser Sachverhalt bestätigt. Dabei werden mit Ausnahme des elektrischen Feldes ( $E = 3MV/cm$ ) die gleichen Parameter wie in Abbildung 4.2 verwendet. Die Abhängigkeit der Transmissionsraten vom angelegten elektrischen Feld ist in Abbildung 4.4 gezeigt. Bei höherem elektrischen Feld werden mehr Elektronen mit niedrigerer Energie injiziert und bei hohen Energien ist die Wahrscheinlichkeit annähernd gleich, daß ein Teilchen im Substrat reflektiert wird. Der Einfluß der effektiven Masse wird in Abbildung 4.5 gezeigt und hat nur geringe Auswirkung auf die Transmissionsrate.

Der Einfluß des sogenannten *image force barrier lowering* resultiert in einer Reduktion der Potentialschwelle und damit auch in einem Anstieg der Transmissionsrate bei niedrigen Energien. Wenn Gleichung 4.2 verwendet wird, dann wird die Potentialbarriere an der Si/SiO<sub>2</sub>-Grenzfläche für ein elektrisches Feld von  $5MV/cm$  auf  $2.28eV$  vermindert, und Elektronen mit einer Energie von  $\approx 1.9eV$  können bereits

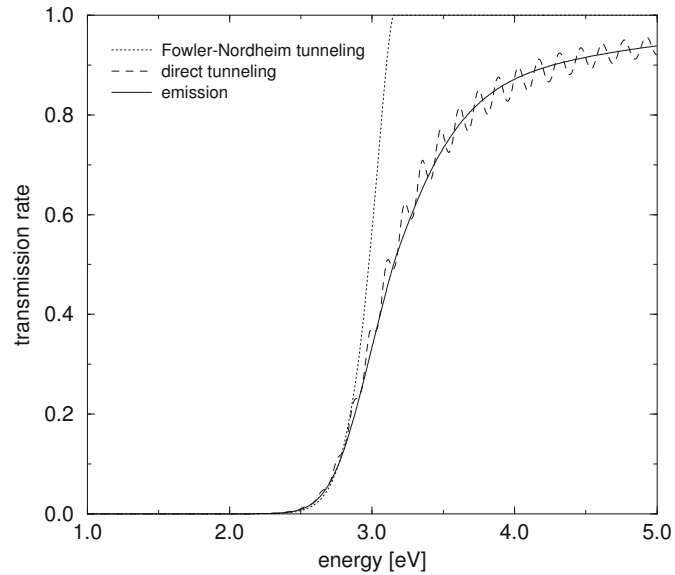


Abbildung 4.2: Transmissionsrate für Tunneln nach der Fowler-Nordheim-Näherung (punktierte Linie), für direktes Tunneln (strichlierte Linie) und für den Fall einer Emission in  $\text{SiO}_2$  (durchgezogene Linie).

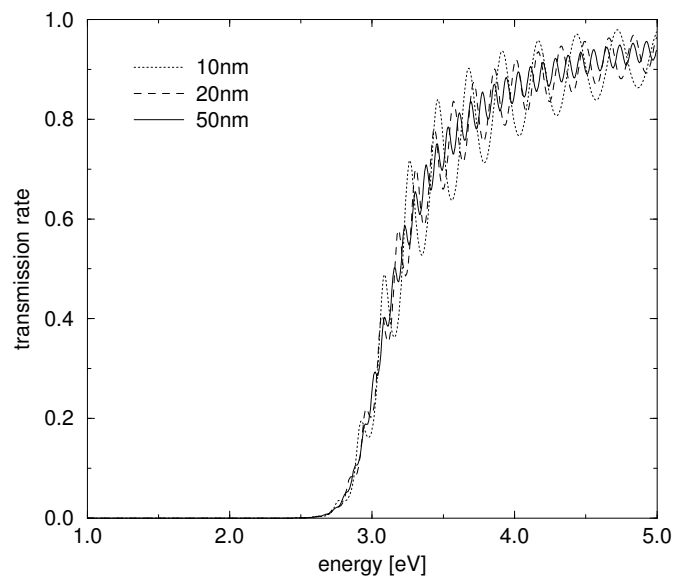


Abbildung 4.3: Transmissionsrate für direktes Tunneln im Fall verschiedener Oxiddicken.



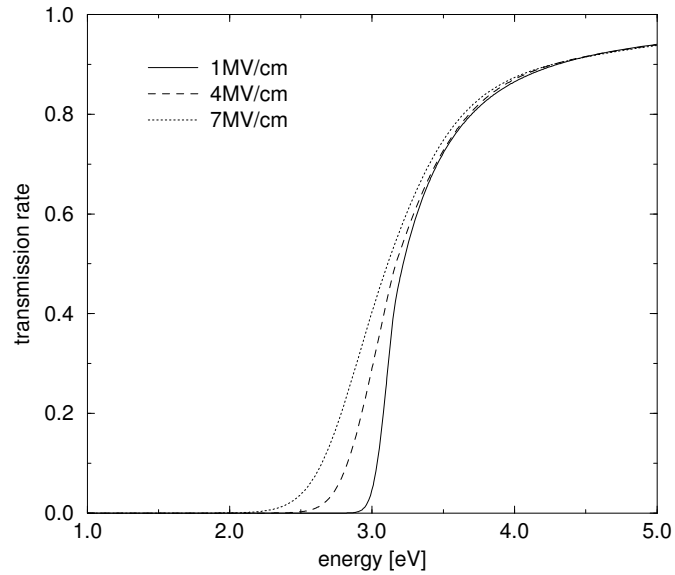


Abbildung 4.4: Transmissionsrate an für Emission in  $\text{SiO}_2$  im Fall verschiedener elektrischer Feldstärken.

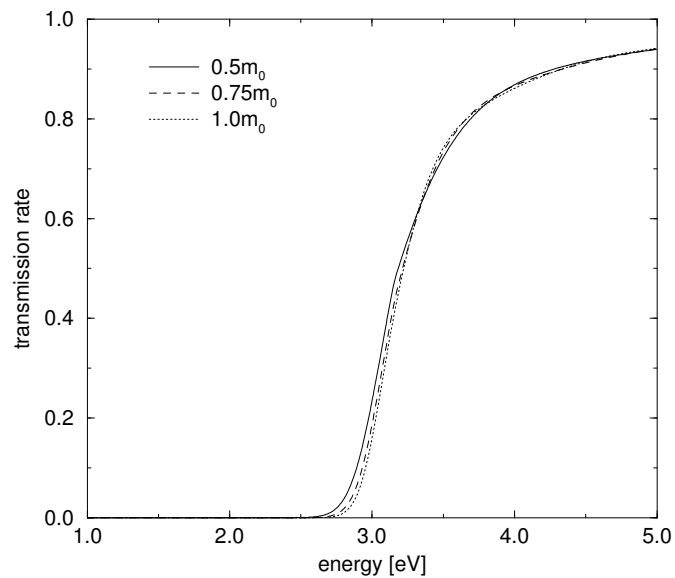


Abbildung 4.5: Transmissionsrate an für Emission in  $\text{SiO}_2$  im Fall verschiedener effektiver Massen im Oxid.

injiziert werden. Alle Publikationen [82][147][148], die die Injektion von Ladungsträgern mit einem Potentialprofil nach Abbildung 4.1 berechnen, vernachlässigen diesen Effekt. Ferner sei darauf hingewiesen, daß in [146] diese Erniedrigung der Schwelle für relativ kleine Felder im Oxid ( $< 1.2MV/cm$ ) eingeführt worden ist, um Anomalien der experimentellen Ergebnisse der photoneninduzierten Injektion richtig zu interpretieren. Zusätzlich wird in [149] das Argument aufgeworfen, daß bei hohen Feldstärken eine Erniedrigung der Potentialschwellen geringer ist und die beiden Parameter in Gleichung 4.2 an die experimentellen Meßergebnisse angepaßt werden müssen.

Zur jetzigen Zeit ist das Vorhandensein beziehungsweise die Stärke dieses Effekts Anlaß von kontroversiellen Standpunkten. In [150][151] wird aufgrund von experimentellen Messungen und einer theoretischen Auswertung der Injektionsraten von Gate- und Bulk-Strom bestritten, daß die Potentialbarriere signifikant erniedrigt wird. Dagegen wird in [152] angeführt, daß die Arbeit von Berglund und Powell [146] doch den Beweis erbracht hat, daß *image force potential lowering* an der Si/SiO<sub>2</sub>-Grenzfläche vorhanden ist. Dieser Beweis wiederum wird von Puri und Schaich [153] nicht anerkannt. Ob *image force barrier lowering* tatsächlich auftritt, kann nur mit direkten experimentellen Messungen oder aber mit theoretischen Berechnungen der Potentialverteilung an der Grenzfläche geklärt werden. Da Elektroneninjektion in einem nMOS-Transistor hauptsächlich in der Nähe der Drain-Sperrschicht auftritt, das Feld aber, solange die Drain-Spannung die Gate-Spannung nicht überschreitet, verhältnismäßig gering ist, kann von Simulationen zur Bestimmung des Gate-Stromes nicht direkt auf eine Verminderung der Potentialbarriere und der Existenz dieses Effektes geschlossen werden, da der Einfluß des *barrier lowering* nur sehr klein ist. Stattdessen ist aber die Annahme berechtigt, daß bei der Herstellung der Oxidschicht ungesättigte Oxidbindungen in SiO<sub>2</sub> auftreten, die Grenzfläche somit von der idealen Form abweicht und sich, anstatt sprunghaft einzusetzen, über einige Zehntel Nanometer erstreckt. Damit ist sicherlich ein Abflachen der Potentialschwelle zu erklären, jedoch nicht das quantitative Ausmaß.

## Kapitel 5

# Ein Monte-Carlo-Modell zur Berechnung von Gate-Strömen

Zur Berechnung von Gate-Strömen ist bereits vielfach die Monte-Carlo-Methode herangezogen worden. Dabei werden die Trajektorien der Elektronen beziehungsweise der Löcher an der Si/SiO<sub>2</sub>-Grenzfläche zusätzlich entweder gemäß der empirischen Formel von Fowler-Nordheim (4.1) [47][85][150][154] oder aber gemäß der sich von dem Potentialprofil in Abbildung 4.1(a) im Oxid ergebenden Transmissionswahrscheinlichkeit [82] gewichtet. Damit kann der Gate-Strom oder aber die Injektionswahrscheinlichkeit, die als Verhältnis von Gate- zu Drain- oder Gate- zu Bulk-Strom definiert ist, ermittelt werden. Man ist jedoch gezwungen, zahlreiche Näherungen in bezug auf die Bandstruktur, die elektrische Feldverteilung an der Grenzfläche, die Verteilung der hochenergetischen Elektronen und der Streuraten für optische Deformationspotentialstreuung einzuführen.

Der Einfallswinkel der Ladungsträger wird als Verhältnis der Normalkomponente  $k_n$  und des Betrages des Wellenvektors  $k_n/|\mathbf{k}|^2$  bestimmt [82]. Zur Berechnung der Transmissionswahrscheinlichkeit werden zusätzlich im Kanalbereich die Leitfähigkeitsbänder parabolisch angenähert, indem vorausgesetzt wird, daß an der Grenzfläche ein abrupter, unstetiger Übergang der Bänder von Silizium zu Siliziumdioxid gegeben ist. Im Oxid und für das Material der Gate-Elektrode wird diejenige effektive Masse eingesetzt, die dem untersten Leitfähigkeitsband entspricht. Grenzflächeneffekte wie Ladungsträgereinfang und -freisetzung (*trapping/detrapping*) und die damit verbundene Potentialänderung, die zumeist in einem kleineren elektrischen Feld normal zur Grenzfläche resultiert [155], werden vernachlässigt. Ebenso können Defekte im Siliziumdioxid zum Aufbau einer anomalen positiven Ladung an der Grenzschicht [71][156] führen und das elektrische Feld vermindern. Diese Effekte können bei einer Monte-Carlo-Simulation des Substrats nicht berücksichtigt werden, beeinflussen aber die quantitative Größe des Gate-Stromes stark. Um dieser Verminderung der elektrischen Normalfeldstärke und der damit verbundenen

Reduktion des Gate-Stromes im Fall eines Transistors Rechnung zu tragen, wird ein adaptiver Parameter eingeführt, sodaß das Feld an der Grenzfläche nach der Drain-Sperrschichtzone skaliert werden kann, um bessere Übereinstimmung mit den experimentellen Daten zu erzielen.

Da die Potentialbarriere am Übergang von Silizium zu Siliziumdioxid ungefähr  $3.15eV$  beträgt, ist die Hochenergieverteilung der Elektronen sehr wichtig. Diese wird nicht nur von der Bandstruktur in Silizium bestimmt, sondern ist auch von den Streuprozessen, nämlich der optischen Deformationspotentialstreuung und der Stoßionisation abhängig, da diese beiden Mechanismen bei großen Energien eine hohe Streuwahrscheinlichkeit für Elektronen aufweisen. Das Deformationspotential beziehungsweise die Kopplungskonstante für optische Deformationspotentialstreuung ist nur für niedrige Elektronenenergien konstant, muß aber für höhere Elektronenenergien sowohl als Zwischental- und Innertalstreuung im Einklang mit der jeweiligen Wellenfunktion berechnet werden [22]. Ferner müssen bei Verwendung einer anisotropen Vollbandstruktur neben der Energieabhängigkeit des Deformationspotentials noch die Symmetrieregeln berücksichtigt werden, um verbotene Übergänge auszuschließen. In der Literatur wird bei Monte-Carlo-Programmen mit Mehrbandmodellen dieses Deformationspotential bei höheren Bändern als frei wählbarer Parameter angesehen [51][57][66][157].

## 5.1 Kopplung zweier Monte-Carlo-Simulatoren

Gate-Ströme werden mit zwei aufeinanderfolgenden Monte-Carlo-Rechnungen für Silizium und Siliziumdioxid berechnet. Da Monte-Carlo-Rechnungen sehr zeitaufwendig sind und nur zur Bestimmung des Hochenergieanteils der Ladungsträger benötigt werden, wird eine Anfangslösung mit einem Drift-Diffusionsmodell (MINIMOS 6.0 [158]) ermittelt. Danach werden mit dem Monte-Carlo-Simulator BEBOP 3.2 [47][51] diejenigen Elektronen extrahiert, die an der Grenzfläche zu Siliziumdioxid emittiert worden sind. Von diesen Elektronen ausgehend wird mit einem Monte-Carlo-Programm für Siliziumdioxid derjenige Anteil an Elektronen bei stationären Betrieb des Transistors bestimmt, dessen Trajektorien in der Gate-Elektrode enden. Der Ablauf dieses Simulationsflusses ist in Abbildung 5.1 festgehalten.

Zur Berechnung desjenigen Anteils des Gate-Stromes, dessen Beiträge sich aus direktem Tunneln nach der Approximation von Fowler und Nordheim (Gleichung 4.1) oder der Transmissionsrate von Gleichung 4.25 gemäß dem Potentialprofil nach Abbildung 4.1(a) zusammensetzen, werden alle Elektronen, die die Grenzfläche erreichen, berücksichtigt und danach reflektiert. Der Gate-Strom wird nun so ermittelt, daß die Ladung der Elektronen gewichtet ist, dabei aber zusätzlich noch mit der

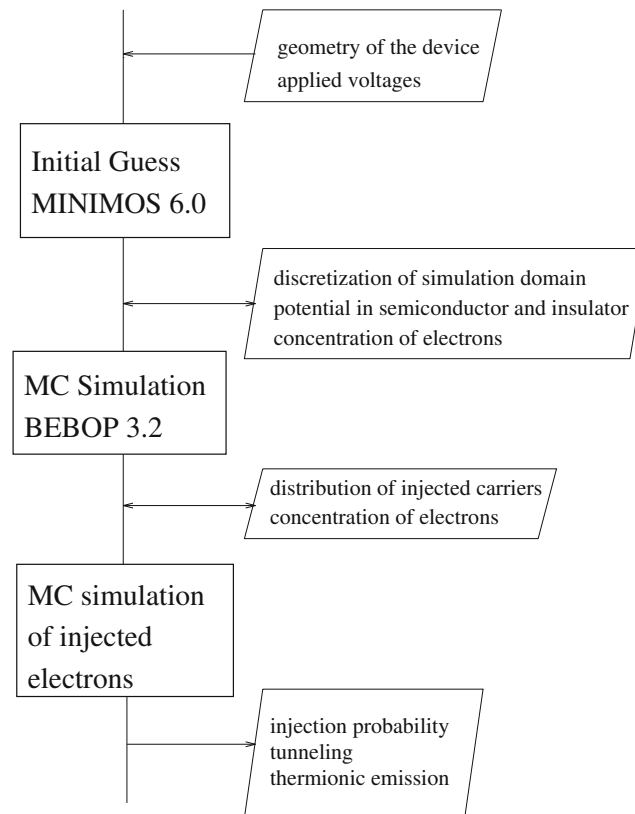


Abbildung 5.1: Flußdiagramm der Kopplung der einzelnen Simulatoren zur Berechnung von Gate-Strömen.

Transmissionsrate multipliziert wird,

$$I_G = -\frac{e}{t_{ges}} \sum_i w_i P_{Si-G}(\epsilon_n), \quad (5.1)$$

wobei  $t_{ges}$  die Simulationszeit darstellt, die im allgemeinen bei stationären Berechnungen sehr groß sein muß. Das Gewicht des einzelnen Elektrons wird mit  $w_i$  bezeichnet.

Zur Bestimmung, ob ein Elektron in Siliziumdioxid emittiert wird, muß zuerst die Transmissionswahrscheinlichkeit der Normalkomponente des Impulses und näherungsweise die mit dem Verhältnis von Normalimpuls und Betrag des Wellenvektors extrahierte Energie normal zur Grenzfläche ermittelt werden. Danach wird die Transmissionsrate mit einer Zufallszahl verglichen. Der Beitrag des  $i$ -ten Elektrons, das an der Grenzfläche angetroffen wird, ist nun

$$I_G = -\frac{e}{t_{ges}} \sum_i i_G^{(i)} \quad (5.2)$$

$$i_G^{(i)} = \begin{cases} w_i & , \quad r \geq P_{Si-OX}(\epsilon_n) \\ 0 & , \quad r < P_{Si-OX}(\epsilon_n). \end{cases} \quad (5.3)$$

Ist die Transmissionswahrscheinlichkeit, wie sie aus Abbildung 4.1(b) und Gleichung 4.28 gegeben ist, größer als die Zufallszahl, dann wird das Elektron als injiziert betrachtet und von der Simulation des Substrats entfernt; andernfalls wird das Teilchen reflektiert. In der anschließenden Monte-Carlo-Rechnung im Siliziumdioxid wird nun einerseits der Beitrag der Elektronen, die direkt in die Gate-Elektrode injiziert werden, als auch derjenige Bruchteil ermittelt, deren Trajektorien am Übergang zum Kanal enden, bestimmt. Damit ergibt sich dann der Anteil derjenigen Ladung, die wiederum vom Oxid ins Substrat zurückgestreut wird, als auch der Anteil, der in die Gate-Elektrode injiziert worden ist.

Bei der Injektion von Elektronen vom Kanal in Siliziumdioxid wird der Injektionsvorgang als augenblicklich angesehen und elastisches Tunneln wird angenommen. Damit muß die Energieerhaltung erfüllt sein. Im Gegensatz dazu ist es weder bei anisotropen Vollbandmodellen noch bei approximativen, isotropen Mehrbandmodellen möglich, auch den Kristallimpuls zu konservieren [112][152]. Zusätzlich ergeben sich mit einer semiklassischen Näherung, die alle erlaubten Zustände zuläßt, keine Beschränkungen in bezug auf den Elektronenzustand im injizierten Material. Daher wird zur Bestimmung des Zustands der Elektronen im Oxid wie folgt vorgegangen.

- Sind sowohl die Energie als auch deren Normalkomponente im Kanalbereich größer als die Potentialbarriere  $\Phi_B$ , dann wird die Energie im Oxid um  $\Phi_B$  vermindert. Der neue Wellenvektor wird gemäß der Energie-Impulsrelation in  $\text{SiO}_2$  berechnet. Zur Bestimmung der Komponenten des Wellenvektors im Oxid werden dann der polare und azimutale Winkel im Substrat herangezogen. Das Elektron beginnt den freien Flug im Oxid direkt an der Grenzfläche.
- Falls nun nur die Gesamtenergie größer als die Potentialbarriere ist, die Normalkomponente der Energie jedoch kleiner als  $\Phi_B$ , dann wird die Gesamtenergie um den Betrag der Potentialbarriere erniedrigt, wobei das Elektron aber wiederum Energie vom elektrischen Feld aufnimmt,

$$\epsilon_{OX} = \epsilon_{Si} - \Phi_B + eE_{OX}x_b. \quad (5.4)$$

Der Impuls normal zur Grenzfläche wird Null gesetzt. Die beiden parallelen Komponenten des Wellenvektors werden gemäß des Verhältnisses im Kanalbereich bestimmt. Das Elektron beginnt den freien Flug nun am Schnittpunkt der Normalenergie mit dem abfallenden elektrischen Potential  $x_b$  des Oxids. Wenn aufgrund eines kleinen Potentials kein Schnittpunkt möglich ist, dann tunnelt das Elektron direkt in die Gate-Elektrode.

- Sind nun sowohl die Normalkomponente der Energie als auch die Gesamtenergie kleiner als die Potentialbarriere, das Teilchen jedoch aufgrund der quantenmechanischen Wahrscheinlichkeit injiziert, dann ist die Energie in  $\text{SiO}_2$  gleich Null, und das Elektron beginnt seine Trajektorie in  $x_b$ . Wenn kein Schnittpunkt vorhanden ist, dann tunnelt das Elektron auch in diesem Fall direkt in die Gate-Elektrode.

Die Transmissionsraten sind für die Berechnung eines  $0.9\mu\text{m}$ -Transistors derart erweitert, daß die Feldabhängigkeit an der Grenzfläche berücksichtigt wird. Elektronen haben nur dann eine endliche Transmissionswahrscheinlichkeit, wenn die Normalkomponente des elektrischen Feldes größer Null ist, andernfalls werden Elektronen am Übergang von Silizium zu Siliziumdioxid reflektiert und setzen ihre Trajektorien im Substrat fort. In Siliziumdioxid wird angenommen, daß die Begrenzungen an der Source- und Drain-Seite ideal reflektierend seien, der Gate-Kontakt als auch die Grenzfläche von  $\text{Si}/\text{SiO}_2$  stellen ideal absorbierende Randbedingungen dar. Das bedeutet, daß ein Teilchen auf dieses zweidimensionale Simulationsgebiet eingeschränkt ist.

## 5.2 Ergebnisse

### 5.2.1 Kalibrierung des Modells

Das im vorherigen Abschnitt beschriebene Modell wird nun für die Beschreibung eines stationären, homogenen Injektionsexperiments herangezogen. Der für diese Zwecke konzipierte Transistor ist am Source- und Drain-Kontakt geerdet. Eine sehr hohe negative Gate-Source-Spannung ( $-35\text{V}$ ) und eine positive Source-Bulk-Spannung zur Steuerung der Injektionsrate werden angelegt [145][159]. Elektronenlochpaare werden nun durch einfallende Photonen erzeugt. Dabei werden die Elektronen aufgrund des hohen elektrischen Feldes zum Gate-Kontakt beschleunigt, während die Löcher zum Bulk abgesaugt werden. Die Injektionsrate berechnet sich nun als Verhältnis von injiziertem Gate-Strom und Bulk-Strom. Das Feld im Oxid wird nur von der Gate-Source-Spannung festgelegt und wird für alle Rechnungen konstant gehalten [159],  $E_{OX} = 5.3\text{MV}/\text{cm}$ . Die Oxiddicke beträgt  $654\text{nm}$ . Das Gate-Material ist  $n$ -Polysilizium. Die Dotierung ist in Abbildung 5.2 dargestellt.

Die Berechnung der Injektionsrate erfolgt nun als Quotient der injizierten und gesamten Ladung an der Grenzfläche. Da näherungsweise ebenso viele Elektronen wie Löcher vorhanden sein müssen, wird diese Simulation nur mit den Elektronen durchgeführt. Da nur eine sehr geringfügige Kanaldotierung vorliegt, wird Elektronenstreuung an ionisierten Störstellen vernachlässigt. Die einzelnen Parameter für optische und akustische Streuung sind in Tabelle 5.1 angegeben. Der Vorfaktor für

<b>akustische Streuparameter</b>	
Schallgeschwindigkeit	$9.04 \times 10^5 \text{ cm/s}$
Deformationspotential für niedrige Energien	$7.9 \text{ eV}$
Einsetzen energetisch niedriger Deformationspotentialstreuung	$0.15 \text{ eV}$
Deformationspotential für hohe Energien	$4.0 \text{ eV}$
Einsetzen energetisch hoher Deformationspotentialstreuung	$0.35 \text{ eV}$
<b>optische Streuparameter</b>	
Frequenz (Band 1, ..., 6)	$7.855 \times 10^{13} \text{ Hz}$
Zwischentaldeformationspotential (Band 1)	$5.4 \times 10^8 \text{ eV/cm}$
Innertaldeformationspotential (Band 1)	$5.4 \times 10^8 \text{ eV/cm}$
Zwischentaldeformationspotential (Band 2, ..., 6)	$6.2 \times 10^8 \text{ eV/cm}$
Innertaldeformationspotential (Band 2, ..., 6)	$6.2 \times 10^8 \text{ eV/cm}$

Tabelle 5.1: Streuparameter für das isotrope Mehrbandmodell für ein homogenes Injektionsexperiment.

Stoßionisation gemäß Gleichung 3.37 hat einen Wert von 0.41 [82]. Die Nullfeldbeweglichkeit für Elektronen beträgt  $1423.6 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  und ist in guter Übereinstimmung mit experimentellen Werten.

Die Transmissionsraten sind wie bereits im Kapitel 4 erläutert worden ist, dahingehend erweitert, daß die Bandstruktur der einzelnen Bänder des Substrats und deren Verschiebung von der untersten Kante des Leitfähigkeitsbandes als auch die effektiven Massen berücksichtigt werden. In Abbildung 5.3 sind die Transmissionsraten für die einzelnen Paare von Bändern in Silizium nach Abbildung 3.4 dargestellt. Dabei wird die Energie eines Elektrons vom jeweiligen Minimum des Bandes gezählt. Jeweils ein Band mit elektronähnlichem und lochähnlichem Charakter wird zu einem Paar zusammengefaßt. Der unterschiedliche Anstieg der Transmissionsrate in bezug auf die einzelnen, zu Paaren zusammengefaßten Bänder ist ersichtlich. Somit ergeben sich im Fall von 6 Leitfähigkeitsbändern in Silizium, die gemäß der approximativen, isotropen Bandstruktur nach Abbildung 3.4 zur Berechnung der Energieverteilung im Substrat verwendet werden, drei verschiedene Transmissionsraten. Zur Berechnung der Transmissionsraten bei direktem Tunneln ist ebenfalls diese Näherung benützt worden, im Fall der Fowler-Nordheim-Näherung sind Bandstruktureffekte bei der Transmissionsrate nicht berücksichtigt worden.

Die experimentellen Daten für das untersuchte Bauteil (NPR5) sind [159][160] entnommen und in Abbildung 5.4 als Kreise eingezeichnet. Für niedrige Source-Substrat-Spannungen steigt die Injektionsrate exponentiell an, bei hohen ist dagegen ein Abflachen zu beobachten. Die punktierte Linie repräsentiert die Berechnung der Injektionsrate aufgrund von Tunneln und thermischer Emission ins Gate-Material mit der Fowler-Nordheim-Näherung. Dabei wird die Injektionsrate deutlich überschätzt



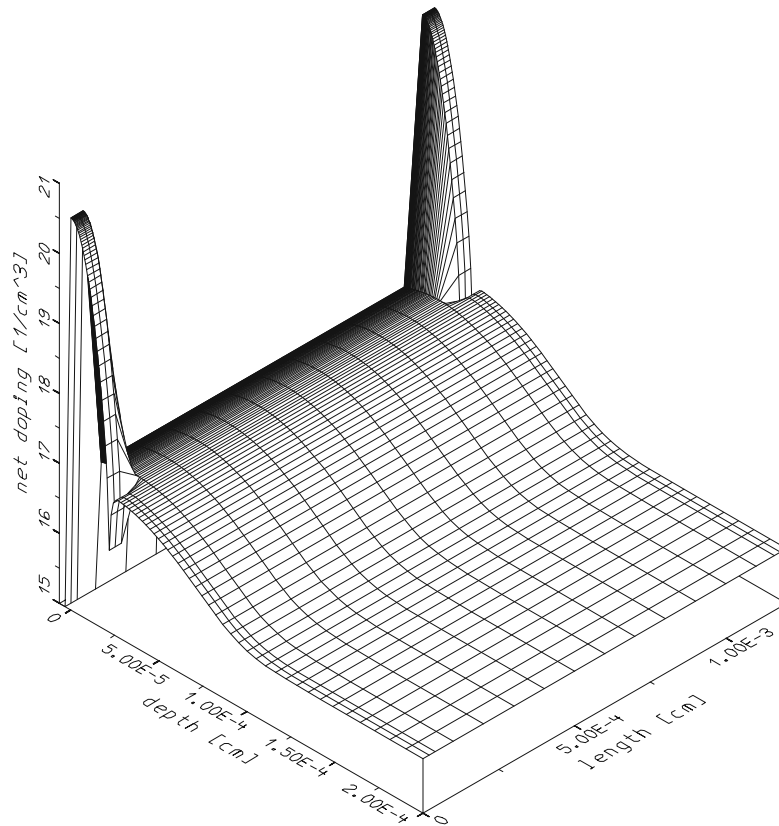
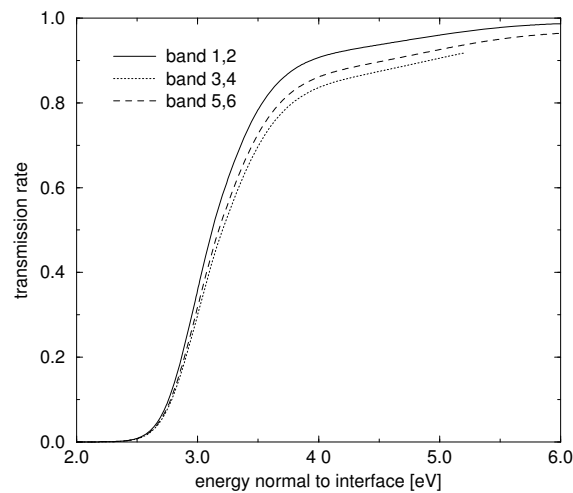


Abbildung 5.2: Dotierungsprofil in logarithmischer Darstellung

Abbildung 5.3: Transmissionsrate für Emission in  $\text{SiO}_2$  nach dem in Kapitel 4 vorgestellten Modell und bei Berücksichtigung der Bandstruktur in Silizium.

$U_{SB}$ [V]	$n_b$ [%]	$\epsilon_{inj}$ [meV]	$\langle \epsilon \rangle$ [meV]
2	12.03	104.413	2344.7
3	22.11	134.949	2374.6
4	28.35	171.680	2384.5
5	29.05	228.194	2369.4
10	30.22	444.146	2402.5

Tabelle 5.2: Prozentueller Anteil der zurückgestreuten Elektronen  $n_b$ , mittlere Injektionsenergie in  $\text{SiO}_2$  und mittlere Energie in  $\text{SiO}_2$  als Funktion der Source-Bulk-Spannung  $U_{SB}$ .

und liegt bei hohen Source-Bulk-Spannungen eine Größenordnung über den experimentellen Daten. Direktes Tunneln (strichlierte Linie) in die Gate-Elektrode und Simulationen zur Emission von Elektronen (durchgezogene Linie) ins Oxid mit nachfolgender Monte-Carlo-Rechnung in  $\text{SiO}_2$  ergeben eine bessere Übereinstimmung von theoretischen Rechnungen und experimentellen Meßergebnissen. Bei der Simulation der Elektronen in  $\text{SiO}_2$  stellt sich ferner heraus, daß direktes Tunneln nicht vorkommt, sondern daß stattdessen alle Ladungsträger ins Oxid injiziert werden. Der Vergleich mit direkten Tunneln und Emission ins Oxid ergibt eine weitere Reduktion der Injektionsrate und wird damit erklärt, daß ein Teil der injizierten Elektronen mit niedriger Energie und niedrigem Wellenvektor in Normalrichtung, jedoch mit großer Impulskomponente parallel zur Grenzfläche in  $\text{SiO}_2$  eintritt und durch Streuprozesse

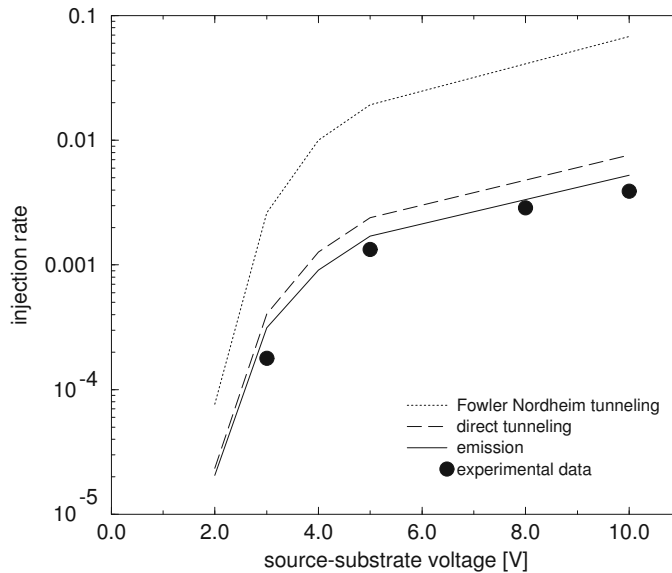


Abbildung 5.4: Injektionsrate als Verhältnis von Gate- zu Bulk-Strom bei verschiedenen Source-Bulk-Spannungen.

im Oxid wieder zurück ins Substratmaterial gelangt. In Tabelle 5.2 ist dieser Anteil an Elektronen  $n_b$  dargestellt ebenso wie die Energie der injizierten Elektronen  $\epsilon_{inj}$  und die mittlere Energie in Siliziumdioxid  $\langle\epsilon\rangle$ . Dabei wird die Energie vom untersten Leitfähigkeitsband in  $\text{SiO}_2$  gezählt. Da die Dicke der isolierenden Oxidschicht relativ groß ist, strebt der Mittelwert der mittleren Energie stets gegen den Mittelwert im homogenen Fall. Kleine Schwankungen werden wegen der unterschiedlichen Injektionsenergie verursacht.

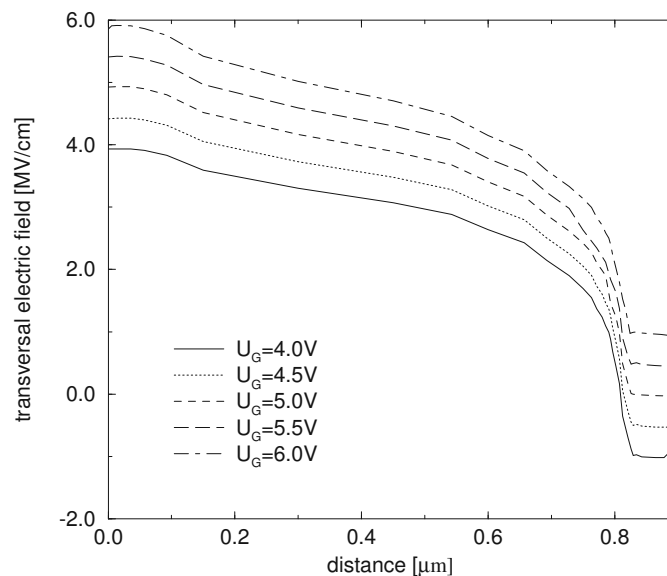


Abbildung 5.5: Transversales elektrisches Feld im Oxid an der  $\text{Si}/\text{SiO}_2$ -Grenzfläche.

### 5.2.2 Anwendung im Fall eines nMOS-Transistors

Die Monte-Carlo-Methode wird zur Berechnung von Gate-Strömen herangezogen, wobei für einen Transistor mit  $0.9\mu\text{m}$  Gate-Länge,  $10\text{nm}$  Oxiddicke und  $5\mu\text{m}$  Weite drei verschiedene Modelle für die vom transversalen elektrischen Feld an der  $\text{Si}/\text{SiO}_2$ -Grenzfläche abhängigen Transmissionsraten verwendet werden. In Abbildung 5.5 ist das transversale elektrische Feld für eine Drain-Spannung  $U_D = 5\text{V}$  bei variabler Gate-Spannung als Funktion des Abstands vom Source dargestellt. Im Bereich des Übergangs zur Sperrschicht im Drain-Bereich fällt das transversale elektrische Feld deutlich ab und wird sogar negativ, falls  $U_G \leq U_D$  ist. In Abbildung 5.6 ist die Dotierung des  $0.9\mu\text{m}$  Transistors festgehalten. Das laterale elektrische Feld (Abbildung 5.7) für  $U_D = 5\text{V}$  und  $U_G = 6\text{V}$  zeigt einen starken Abfall in der Kanalzone, wodurch Elektronen in diesem Bereich sehr stark in Richtung Drain

beschleunigt werden. Da eine Monte-Carlo-Rechnung mit 50000 Teilchen sehr zeit-aufwendig ist, wird das Simulationsgebiet auf diejenige Region eingeschränkt, in der Hochenergieeffekte nicht mehr zu vernachlässigen sind. Die Elektronenenergie ist mit einem isotropen Mehrbandmodell berechnet worden und in Abbildung 5.8 für  $U_G = 5V$  und  $U_D = 6V$  dargestellt. Dabei ist ersichtlich, daß in der Nähe der Drain-Sperrschichtzone die betrachteten Ladungsträger eine sehr hohe durchschnittliche Energie aufweisen und somit an dieser Stelle verstärkt Injektion in das Gate-Oxid zu erwarten sein wird.

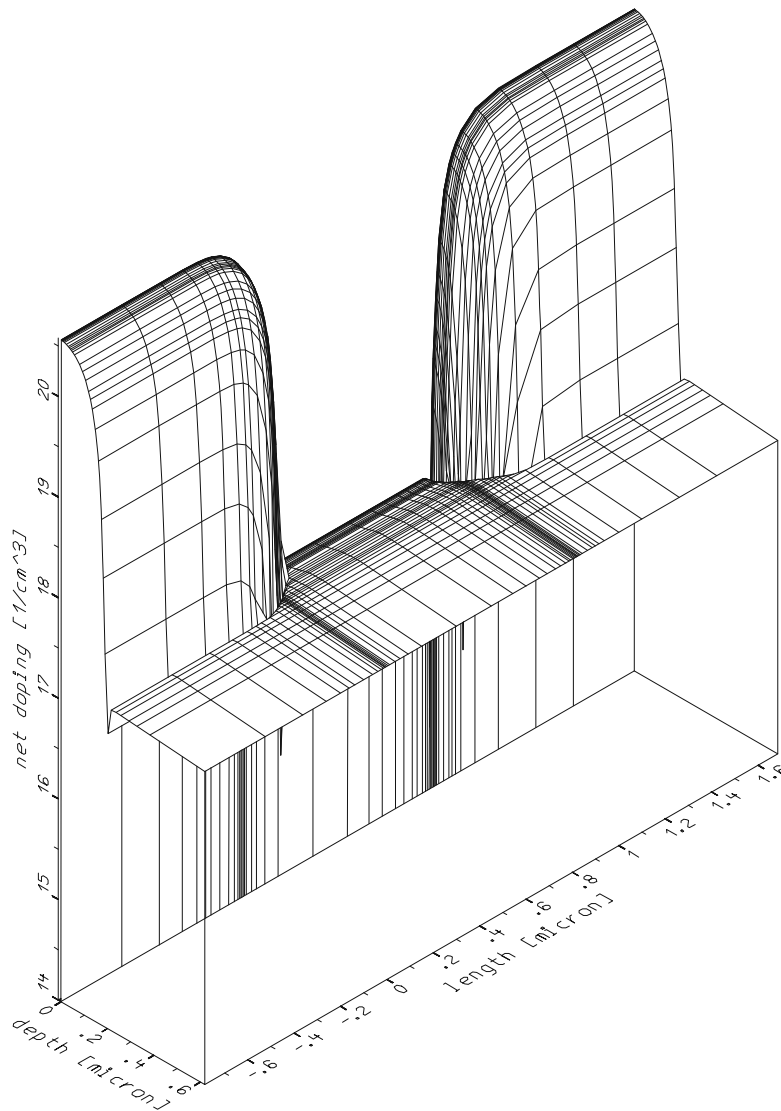


Abbildung 5.6: Dotierungsprofil des  $0.9\mu m$ -Transistor logarithmischer Darstellung.

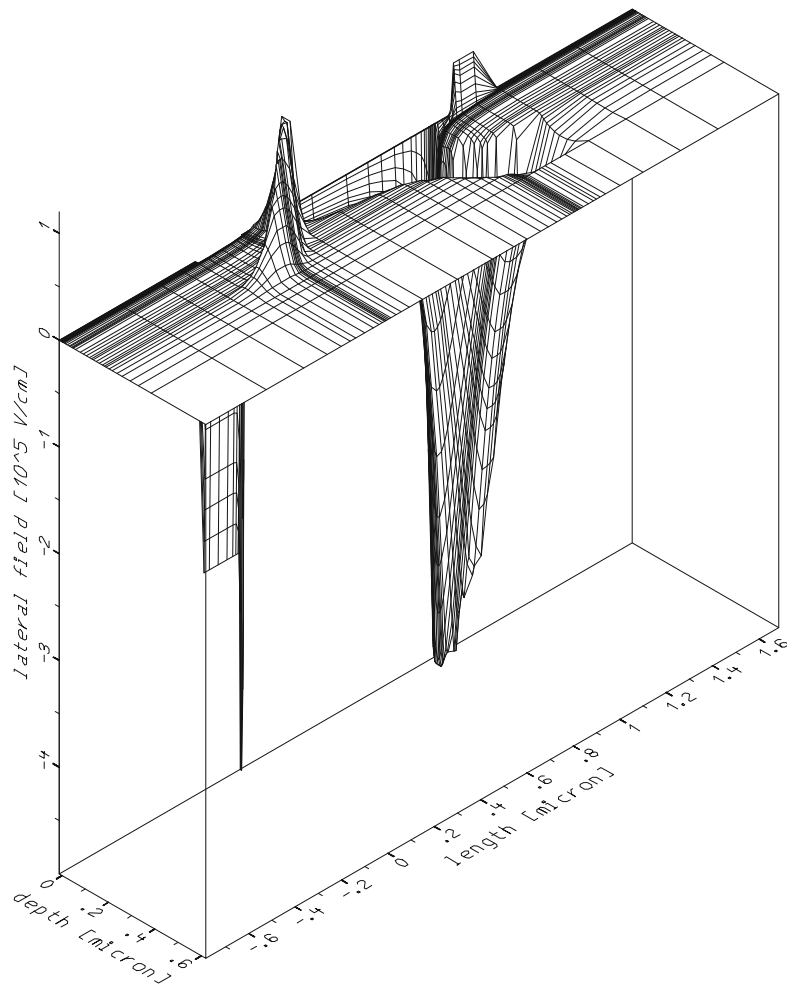


Abbildung 5.7: Laterale elektrische Feldverteilung.

<b>akustische Streuparameter</b>	
Schallgeschwindigkeit	$9.04 \times 10^5 \text{ cm/s}$
Deformationspotential für niedrige Energien	$7.9 \text{ eV}$
Einsetzen energetisch niedriger Deformationspotentialstreuung	$0.15 \text{ eV}$
Deformationspotential für hohe Energien	$4.0 \text{ eV}$
Einsetzen energetisch hoher Deformationspotentialstreuung	$0.35 \text{ eV}$
<b>optische Streuparameter</b>	
Frequenz (Band 1, ..., 6)	$7.855 \times 10^{13} \text{ Hz}$
Zwischentaldeformationspotential (Band 1,3,5)	$5.1 \times 10^8 \text{ eV/cm}$
Innertaldeformationspotential (Band 1,3,5)	$5.1 \times 10^8 \text{ eV/cm}$
Zwischentaldeformationspotential (Band 2,4,6)	$7.5 \times 10^8 \text{ eV/cm}$
Innertaldeformationspotential (Band 2,4,6)	$7.5 \times 10^8 \text{ eV/cm}$

Tabelle 5.3: Streuparameter für das isotrope Mehrbandmodell für den  $0.9 \mu\text{m}$ -Transistor.

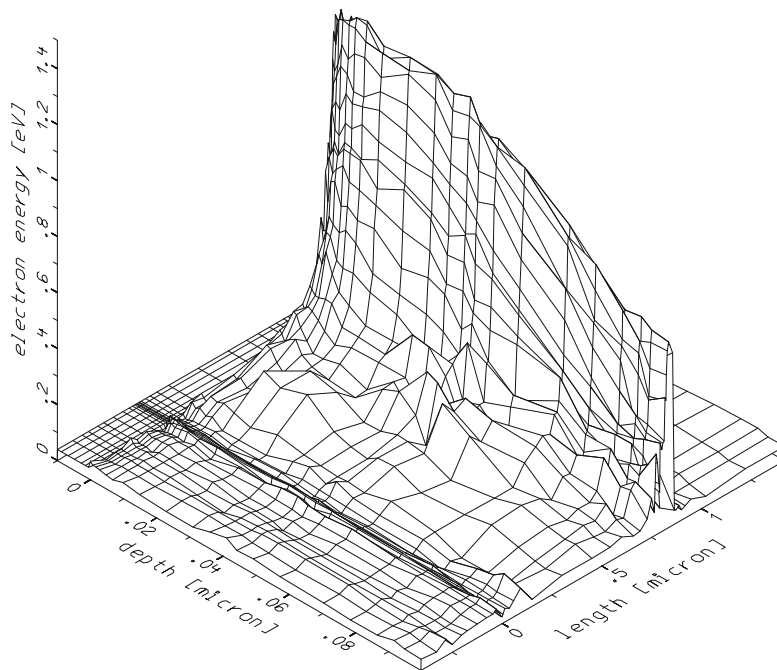


Abbildung 5.8: Räumliche Energieverteilung der Elektronen innerhalb des Monte-Carlo-Fensters.

Die Parameter für die einzelnen Phononenstreuprozesse sind in Tabelle 5.3 angegeben. Zusätzlich wird noch Störstellenstreuung und Stoßionisation berücksichtigt, wobei der Vorfaktor dieses Streumechanismus' gleich 0.57 [51] ist und ebenfalls zur Adjustierung verwendet wird. Im Gegensatz zur Simulation homogener Injektion (Tabelle 5.1) sind die Streuparameter der höherliegenden, löcherähnlichen Bänder der optischen Deformationspotentialstreuung erhöht worden. Das Monte-Carlo-Fenster ist so gewählt, daß sich das Simulationsgebiet in x-Richtung vom Source- bis zum Drain-Bereich und in y-Richtung bis zur Depletionszone erstreckt. Erreicht ein Elektron die Si/SiO<sub>2</sub>-Grenzfläche, dann wird es, sofern es aufgrund des Vergleichs der Transmissionsrate mit einer Zufallszahl injiziert wird, der Rechnung entzogen, andernfalls wird es reflektiert. Zur besseren Übereinstimmung mit den experimentellen Daten wird ein Skalierfaktor, der das transversale elektrische Feld nach dem pn-Übergang ( $0.79\mu\text{m}$ ) um 30% erniedrigt, eingeführt.

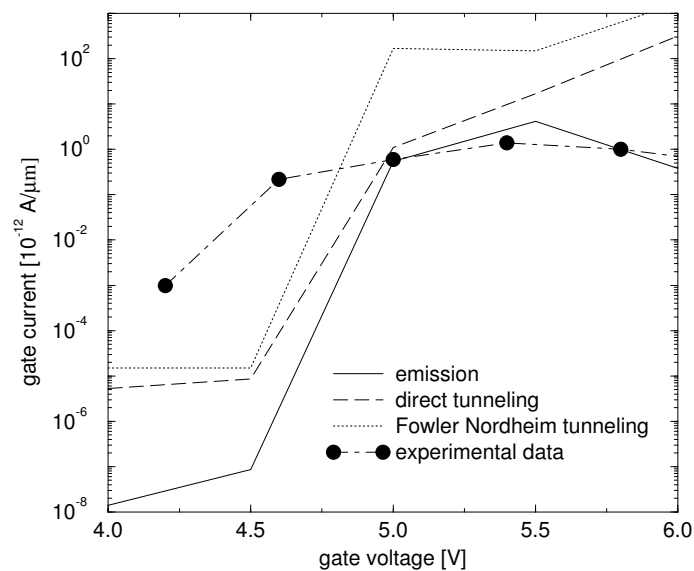


Abbildung 5.9: Gate-Strom für einen  $0.9\mu\text{m}$ -Transistor für verschiedene Injektionsmechanismen und einer Oxiddicke  $t_{OX} = 10\text{nm}$  bei  $U_D = 5\text{V}$ .

Zur Gate-Stromberechnung in Abbildung 5.9 mit der Fowler-Nordheim-Näherung und mit dem Modell des direkten, quantenmechanischen Tunnelns wird die Transmissionsrate mit dem Gewicht des die Grenzfläche erreichenden Elektrons multipliziert. Deswegen tragen bei diesen Modellen alle Elektronen zum Gate-Strom bei und resultieren in einem deutlich höheren Strom als im Fall der Emission, bei der ein Elektron in SiO<sub>2</sub> injiziert und danach dessen Trajektorie im Oxid simuliert wird. Für Gate-Spannungen, die kleiner als die Drain-Spannung sind, kann keine gute Über-

einstimmung mit den experimentellen Daten erzielt werden, der Gate-Strom wird stark unterschätzt und schwankt trotz hoher Statistik nur innerhalb der Größenordnung. Da das transversale, elektrische Feld im Bereich nach der Sperrschicht negativ ist, wird bei der Simulation Injektion ausgeschlossen. Das ist möglicherweise die Ursache, daß der Gate-Strom unter den experimentellen Daten liegt. Wenn nun die Gate-Spannung näherungsweise gleich der Drain-Spannung ist, steigt der Gate-Strom sehr stark an und strebt gegen die experimentellen Werte. Im Bereich von  $U_G > 5V$  und einer Drain-Spannung von  $U_D = 5V$  kann mit der in dieser Arbeit entwickelten Methode der Emission von Elektronen der Gate-Strom quantitativ richtig erklärt werden (Abbildung 5.9). Experimentelle Daten sind Referenz [161] entnommen. Beschränkt man sich bei den Transmissionsraten nur auf Tunneln, so ist der Gate-Strom deutlich über den experimentell gemessenen Werten und auch qualitativ kann ein Abflachen des Gate-Stromes nicht beobachtet werden, falls die Gate-Spannung die Drain-Spannung übersteigt. Die Simulation des Gate-Stromes, bei dem die Transmissionsraten nach der Approximation von Fowler-Nordheim berechnet werden, ist höher als im Vergleich mit quantenmechanischen, direkten Tunneln.

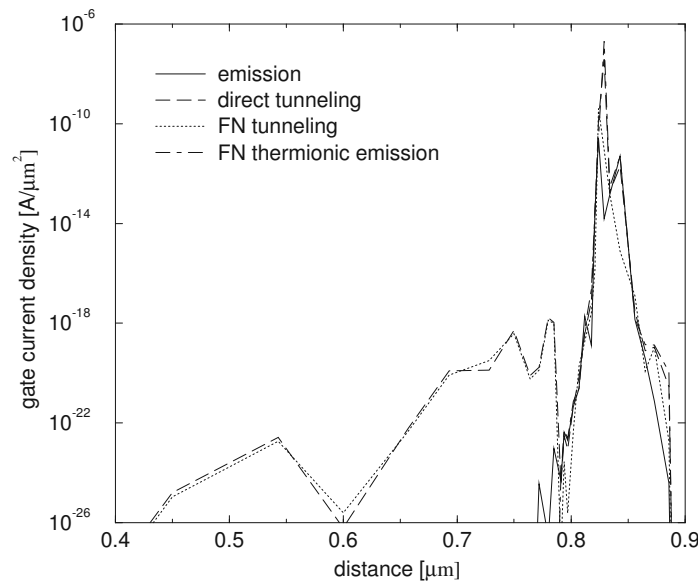


Abbildung 5.10: Die Stromdichte der einzelnen Modelle für die Injektion von Ladungsträgern ist dargestellt.

Die Stromdichte an der Si/SiO<sub>2</sub>-Grenzfläche der einzelnen Modelle ist in Abbildung 5.10 festgehalten. Zur besseren Veranschaulichung wird die Transmissionsrate der Fowler-Nordheim-Näherung in die beiden Komponenten Tunneln und thermionische Emission unterteilt. Tunneln tritt ein, falls die Energie normal zur Grenz-



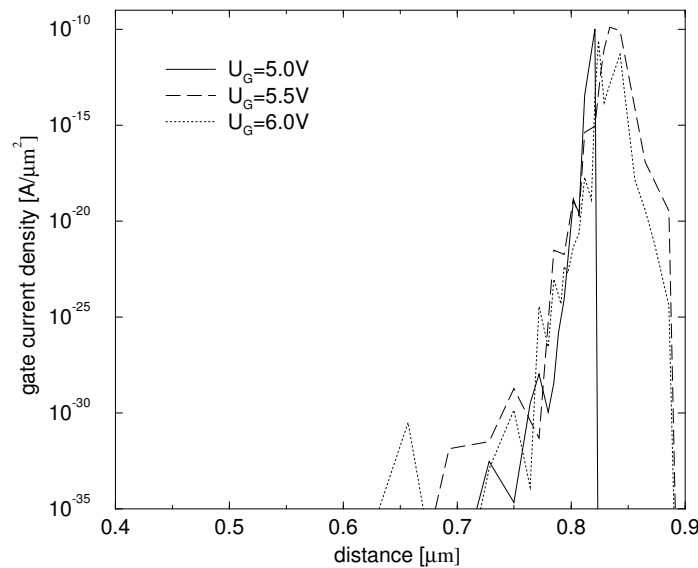


Abbildung 5.11: Gate-Stromdichte für verschiedene Gate-Spannungen bei  $U_D = 5V$  im Fall der Emission ins Oxid.

fläche kleiner als die Potentialbarriere ist, thermionische Emission dagegen, falls die Energie normal zur Grenzfläche größer als die Potentialschwelle ist. Links vor der Drain-Verarmungszone ( $0.79\mu m$ ) trägt nur Tunneln zur Gate-Stromdichte bei. Die Anteile des Gate-Stromes, die mit der Fowler-Nordheim-Näherung als auch mit dem quantenmechanischen Tunnelmodell berechnet werden, weisen quantitativ und qualitativ sehr ähnliches Aussehen auf. Im Bereich nach der Verarmungszone trägt zusätzlich auch thermionische Emission zur Gate-Stromdichte bei. Transmissionsraten, denen ein quantenmechanisches Modell zugrunde liegt, werden nicht unterteilt, da auch oberhalb der Potentialschwelle Reflexionen möglich sind. Abbildung 5.10 zeigt die Gate-Stromdichte für verschiedene Gate-Spannungen. Da das transversale Feld für eine Gate-Spannung  $U_G = 5V$  bei ungefähr  $0.83\mu m$  sehr klein wird, fällt die Stromdichte auf Null ab, wobei das Maximum kurz nach der Verarmungszone auftritt. Wenn die Gate-Spannung erhöht wird, erstreckt sich die Stromdichte vom pn-Übergang bis zum drain-seitigen Ende der Oxidschicht. Das Maximum der Stromdichte liegt immer bei ungefähr  $0.83\mu m$ .

### 5.3 Diskussion der Ergebnisse

Zur Berechnung der Injektionsraten im Fall homogener, stationärer Injektion kann eine Monte-Carlo-Rechnung aufgrund der ausgezeichneten Übereinstimmung der ex-

perimentellen Meßergebnisse mit den Werten der Simulation erfolgreich angewandt werden. Wenn eine Monte-Carlo-Rechnung zur Bestimmung des Gate-Stromes herangezogen wird, treten hingegen einige Schwierigkeiten auf. Erstens ist der Gate-Strom bei kleinen Gate-Spannungen niedriger, als es von Messungen zu erwarten wäre. Weil vor der Inversionszone das elektrische Feld an der Grenzfläche zum Oxid verhältnismäßig hoch ist, sollte Injektion von Ladungsträgern bei kleineren Energien möglich sein (vergleiche Abbildung 4.4). Das bedeutet, daß das sogenannte *image force barrier lowering* entscheidenden Einfluß haben könnte. Zweitens ist in der Verarmungszone, falls die Gate-Spannung höher als die Drain-Spannung ist, verstärkt Injektion von Elektronen festzustellen. Da jedoch aufgrund von Gitterfehlern noch andere physikalische Prozesse mit der Injektion von Ladungsträgern bei kleinen Elektronenenergien konkurrieren, wird dieser Beitrag zum Gate-Strom höchstwahrscheinlich kleiner sein. Ferner wird das elektrische Feld im Substrat bei Anwesenheit von Grenzflächenstörstellen (*trapping/detrapping*) oder anderen die Elektronenkonzentration modifizierende Effekte, der Bildung einer Inversionszone oder einer Zone, in der sich die Ladungsträger anhäufen, stark beeinflußt. Dieser Tatsache wird dadurch Rechnung getragen, daß nach dem Drain-Übergang ein zusätzlicher Parameter eingeführt wird, sodaß die Injektion von Elektronen nach der Sperrschichtzone skaliert werden kann. Da das Feld in diesem Bereich stark abfällt, die Injektion von Ladungsträgern bei niedrigen Energien jedoch fast ausschließlich vom elektrischen Feld bestimmt wird, kommt dieser Größe entscheidende Bedeutung zur Berechnung des Gate-Stromes zu.

In einer kürzlich erschienene Publikation [149], werden die Faktoren für das *image force barrier lowering* als frei wählbare Parameter verwendet. Dabei werden diese erniedrigt, um Übereinstimmung mit experimentellen Messungen zu erzielen. Statt den Werten, die von Ning *et al.* [145] angegeben sind, wird stattdessen (Gleichung 4.2)  $\beta = 8.6 \times 10^{-5} e(Vcm)^{1/2}$  und  $\alpha = 10^{-6} e(Vcm^2)^{1/3}$  angesetzt, wobei diese Werte eine Größenordnung kleiner sind und in einer schwächeren Reduktion der Potentialschwelle resultieren. Um gleichzeitig Degradationseffekte des Drain-Stromes und des Gate-Stromes zu modellieren, wird von Wen *et al.* [155] in einem hydrodynamischen Modell das sogenannte *trapping/detrapping* betrachtet.

In [162][163] wird zur Untersuchung des *threshold-voltage shift* ein Monte-Carlo-Modell, das Ladungsträgereinfang und -freisetzung an der Grenzfläche simuliert, entworfen. Jedoch wird dieser physikalische Prozeß nicht mikroskopisch sondern heuristisch behandelt. Eine Erweiterung zur Berechnung von Gate-Strömen oder aber eine theoretische Untersuchung des zugrunde liegenden Mechanismus und der für eine Monte-Carlo-Rechnung notwendig ist, wird weder erwähnt noch durchgeführt.

Um Degradationseffekte miteinbeziehen zu können, dürfen jedoch die bereits erwähnten Effekte im Rahmen einer Monte-Carlo-Rechnung nicht vernachlässigt werden [50][126][135]. Sowohl Elektroneneinfang an der Grenzfläche als auch aufgrund von Gitterfehlern in Siliziumdioxid führen zu einer anomalen Ladungsverschiebung

[133][135][136][164][165][166] und damit verbundenen zur Änderung des elektrischen Feldes. Ferner ist auch noch die Zeitabhängigkeit dieser Mechanismen wichtig für die Bestimmung des Degradationsverhalten. In einer Monte-Carlo-Rechnung ist es aber notwendig, den zugrundeliegenden mikroskopischen Prozeß zu analysieren. Da Degradation nach neueren experimentellen Erkenntnissen nicht auf einen intrinsischen Materialzusammenbruch des Oxids [50] zurückgeführt werden kann, ist bereits in einigen Arbeiten die Formulierung eines sogenannten *scattering matrix approach* [148] vorgeschlagen worden, um die physikalischen Prozesse und deren quantitativen Einfluß auf den Gate-Strom feststellen zu können. Eine Reduktion sowohl der Elemente der ersten Hauptgruppe (besonders Wasserstoff) als auch eine Verminderung der ungesättigten Sauerstoffbindungen an der Grenzfläche erhöhen die Stabilität und Lebensdauer eines Transistors entscheidend.

# Kapitel 6

## Zusammenfassung und Ausblick

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der Injektion und dem Transport von Ladungsträgern in MOSFET-Strukturen und gliedert sich im wesentlichen in drei Abschnitte, nämlich den Ladungstransport in Silizium und Siliziumdioxid mit der Monte-Carlo-Methode, eine quantenmechanische Ableitung der Injektion an einer Grenzfläche zweier verschiedener Materialien mit einer linear abfallenden elektrischen Potentialbarriere und Anwendungen im Fall eines homogenen stationären Injektionsexperiments einerseits und eines nMOS-Transistors andererseits.

Ausgehend von der Ableitung der Boltzmann-Gleichung wird die Gültigkeit dieser klassischen Transportgleichung und eine Erweiterung für eine semiklassische Beschreibung der Elektronen behandelt. Um den Ladungstransport in Silizium und die sich aufgrund der anisotropen Bandstruktur ergebende Hochenergieverteilung modellieren zu können, wird ein Monte-Carlo-Programm verwendet, in dem die Zustandsdichte und die Gruppengeschwindigkeit derart angepaßt sind, sodaß die wichtigsten Charakterzüge einer Vollbandstruktur enthalten sind. Da ferner die Streuparameter der nichtpolaren optischen Inner- und Zwischentalstreuung nur im Minimum des jeweiligen Bandes bestimmt sind und ihre Energieabhängigkeit jedoch vernachlässigt wird, sind diese bei höheren Leitfähigkeitsbändern als frei wählbare Parameter anzusehen. Dennoch kann die energetische Verteilungsfunktion zufriedenstellend wiedergegeben werden.

Zur Berechnung des Transportverhaltens physikalischer Observabler in Siliziumdioxid ist ein Monte-Carlo-Programm entwickelt worden, das die wichtigsten physikalischen Eigenschaften dieses Gate-Isolators wiedergibt. Streuprozesse mit polaroptischen Phononen, die wegen der coulombartigen Wechselwirkung der Silizium-Sauerstoffbindungen bei niedrigen Elektronenenergien für den hohen Energieverlust der Elektronen verantwortlich sind, verhindern einen dielektrischen Zusammenbruch. Bei höheren elektrischen Feldern tragen nichtpolare akustische Phononen zur Stabilisierung des Elektronentransports bei.

Um die Transmissionswahrscheinlichkeit von Elektronen in Siliziumdioxid zu ermitteln, wird entlang der Si/SiO<sub>2</sub>-Grenzfläche ein einfaches, lineares Potentialprofil angenommen. Die Injektion von Elektronen, also Tunneln und thermionische Emission können damit bestimmt werden, wobei die Welleneigenschaften der Elektronen nicht vernachlässigt werden. Der quantitative Einfluß verschiedener physikalischer Parameter, nämlich des elektrischen Felds, der effektiven Elektronenmasse und der Oxiddicke ist untersucht worden. Um den Übertritt von Elektronen von Silizium in Siliziumdioxid zu gewährleisten, werden geeignete Anschlußbedingungen postuliert, sodaß eine Monte-Carlo-Simulation in beiden Bereichen möglich ist.

Die Anwendung von Monte-Carlo-Simulationen zur Berechnung der Injektionswahrscheinlichkeit bei homogenen, stationären Bedingungen, zeigt ausgezeichnete Übereinstimmung mit den Meßergebnissen. Eine Erweiterung dieses Modells zur Simulation von Gate-Strömen für einen nMOS-Transistor ergibt, daß die Mehrheit der Elektronen nach dem *pn*-Übergang bei der Drain-Seite ins Oxid injiziert wird, obwohl das elektrische Feld in diesem Bereich sehr stark abnimmt. Da Degradationseffekte in Transistoren nicht auf intrinsische Materialeigenschaften zurückgeführt werden können, wird der qualitative Einfluß dieser Grenzflächeneffekte diskutiert und der Einfluß auf den Gate-Strom abgeschätzt.

Um eine realistische Modellierung der Gate-Ströme zu ermöglichen, sollten folgende Verbesserungen und Erweiterungen sowohl in physikalischer und numerischer Hinsicht vorgenommen werden. Heiße Ladungsträger im Substrat, also hochenergetische Elektronen, müssen mit einer anisotropen Vollbandstruktur modelliert werden. Dabei ist aber der Einfluß der einzelnen Streuparameter dahingehend zu modifizieren, daß in den Streuraten die Energieabhängigkeit dieser Parameter Eingang findet und die korrespondierende Wellenfunktion in der Übergangswahrscheinlichkeit berücksichtigt wird. Ferner sollte auch eine quantenmechanische Störungsrechnung höherer Ordnung durchgeführt werden, oder mit dem Formalismus der Selbstenergie Wechselwirkungen der Phononen untereinander, endliche Linienbreite bei hohen Gitteranregungen berücksichtigt werden. Zum jetzigen Zeitpunkt sind die Streuparameter nur für das Minimum des Leitfähigkeitsbandes bestimmt.

Wenn die Transmissionsraten bezüglich der numerischen Effizienz und der Einfachheit der mathematischen Darstellung betrachtet werden, so ist die Fowler-Nordheim-Näherung ausreichend. Jedoch kann bei Approximationen, die nur auf der quantitativen Größe der Energie basieren, weder die Richtungsabhängigkeit der einfallenden Elektronenwelle noch die des Wellenvektors in einer konsistenten Betrachtung einbezogen werden. Man ist gezwungen, die Bandstruktureffekte an der Si/SiO<sub>2</sub>-Grenzfläche zu vernachlässigen. In der Fowler-Nordheim-Näherung wird die Energie-Impuls-Relation der Wellenfunktion der Elektronen nicht benötigt, da nur die Energie des einfallenden Teilchens Eingang findet. Damit ist ein hoher Informationsverlust verbunden. Berechnung der Transmissionsraten unter quantenmechanischer Betrachtungsweise sollte bei Kenntnis der möglichen Energieniveaus in Silizium, Siliziumdi-

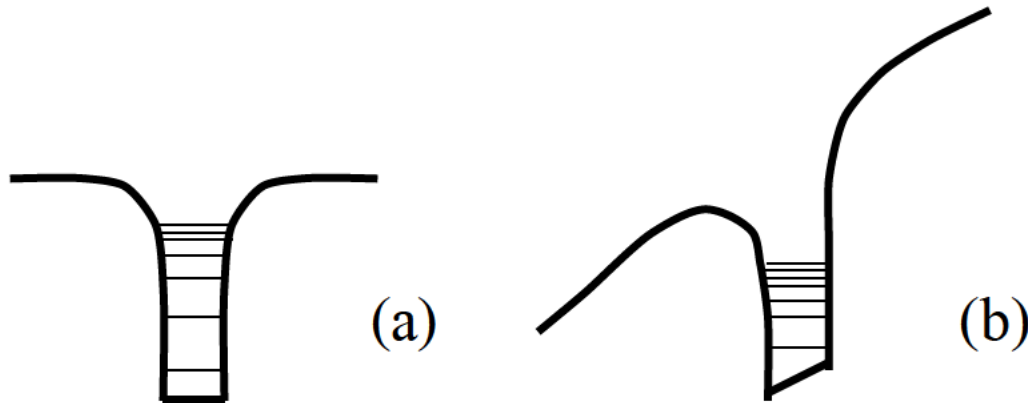


Abbildung 6.1: In Bild (a) ist der qualitative Potentialverlauf für Elektroneneinfang und -freisetzung für einen einzelnen Defekt an der  $\text{SiO}_2$ -Grenzfläche gegeben. Ist jedoch zusätzlich ein elektrisches Feld vorhanden (b), dann verschieben sich die Kanten. Die möglichen gebundenen Elektronenzustände sind mit dünnen Linien eingezeichnet.

oxid und des Gate-Materials Bandstruktureffekte als auch die Wellenfunktion konsistent berücksichtigen können. Um eine konsistente Schrödinger-Poisson-Kopplung an der Grenzfläche zu realisieren, ist ein hoher Aufwand in physikalischer Hinsicht erforderlich. Fischetti *et al.* [148] haben einen sogenannten *scattering matrix approach* vorgeschlagen, bei dem das Hauptaugenmerk auf der Analyse der Transmissionsraten liegt. Ferner wäre eine Erweiterung auf zweidimensionale, nichtkonstante elektrische Felder wünschenswert.

Grenzflächeneffekte und deren Einfluß in bezug auf Elektroneninjektion müssen gesondert modelliert werden. Einerseits ist dabei auf die örtliche Verteilung von Materialverunreinigungen wie ungesättigte Oxidbindungen oder Bildung einer positiven Grenzflächenladung zu achten, andererseits sind die mikroskopischen Grundlagen dieser Prozesse noch weitgehend unerforscht. Elektroneneinfang und -freisetzung an der Grenzfläche können bei Kenntnis der räumlichen Verteilung gemäß dem in Abbildung 6.1 vorgestellten nichtlinearen Potentialverlauf quantitativ berechnet werden, jedoch wäre es erstrebenswert, auch die mikroskopischen Grundlagen zu erarbeiten. Ob mit mikroskopischen Modellen für Defekte an der Grenzfläche und in Siliziumdioxid ein solches Potential näherungsweise ermittelt werden kann, ist Gegenstand weiterer Forschungsarbeiten.

Der zugrundeliegende Prozeß für anomale positive Ladungsbildung an der Grenzfläche ist ebenfalls Anlaß von kontroversiellen Standpunkten. Einerseits wird Elektron-Plasmongeneration als Erklärung herangezogen [110], andererseits werden Silizium-Wasserstoffbindungen an der  $\text{SiO}_2$ -Gate-Grenzfläche aufgebrochen. Diese Was-

serstoffionen werden zum Substrat beschleunigt und verursachen weitere Schäden im Oxid. Ebenso sollte eine mikroskopisch und experimentell fundierte Erforschung des sogenannten *image force potential* Aufschluß über die quantitative Erniedrigung der Potentialschwelle zwischen Silizium und Siliziumdioxid geben. Mit all diesen Effekten ist eine Potentialänderung verbunden, welche die Elektroneninjektion ins Oxid nachhaltig beeinflusst. Die Ausbildung einer sogenannten Inversionsschicht im Substrat hat nur geringen Einfluß auf die Hochenergieverteilung der Elektronen im Substrat [112], führt jedoch im Substratbereich nach Beginn des drain-seitigen pn-Übergangs zu einer quantitativen Änderung des transversalen Feldes.

Simulationen in Siliziumdioxid sind von der verwendeten Bandstruktur, die bei Monte-Carlo-Programmen besonders wichtig ist, abhängig. Da dünne Oxidschichten, wie sie in MOS-Strukturen als Isolator verwendet werden, amorphe Materialeigenschaften aufweisen, ist eine numerische Analyse der Bandstruktur notwendig. Ferner sollte die Energieabhängigkeit der nichtpolaren akustischen Phononenstreuung theoretisch untersucht werden. Zur Verbesserung der isolierenden Eigenschaften werden nitrierte Oxidschichten oder mehrschichtige Isolatoren, bestehend aus  $\text{Si}_3\text{N}_4$  und  $\text{SiO}_2$  verwendet. In der Literatur sind weder Bandstrukturberechnungen noch die wichtigsten physikalischen Streumechanismen aufgeführt, stattdessen wird nur die Ähnlichkeit dieser beiden Materialien erwähnt. Es treten eine oder mehrere zusätzliche Grenzflächen auf und erschweren eine quantitative Berechnung in numerischer Hinsicht.

Da die numerische Ermittlung von Gate-Strömen als auch das Degradationsverhalten eines Transistors von allen, in diesem Kapitel aufgezählten Prozessen stark beeinflusst wird, kann abschließend nur darauf hingewiesen werden, daß ein qualitatives und quantitatives Verständnis dieser beiden Effekte zur Weiterentwicklung von Submikrometer-MOSFETs unerlässlich sein wird. Inwieweit bei Simulationen alle Prozesse berücksichtigt werden können und welche Schwierigkeiten in numerischer Hinsicht damit verbunden sind, kann nur in zukünftigen Forschungsarbeiten geklärt werden.

# Literaturverzeichnis

- [1] D.C. COLE, E.M. BUTURLA, S.S. FURKAY, K. VARAHRAMYAN, J. SLINKMAN, J.A. MANDELMAN, D.P. FOTY, O. BULA, A.W. STRONG, J.W. PARK, T.D. LINTON JR., J.B. JOHNSON, M.V. FISCHETTI, S.E. LAUX, P.E. COTTRELL, H.G. LUSTIG, F. PILEGGI, D. KATCOFF. The Use of Simulation in Semiconductor Technology Development. *Solid-State Electronics*, Vol. 33, No. 6, 1990, pp. 591–623.
- [2] W. LEE, S.E. LAUX, M.V. FISCHETTI, G. BACCARANI, A. GNUDI, J.M.C. STORK, J.A. MANDELMAN, E.F. CRABBÉ, M.R. WORDMAN, F. ODEH. Numerical Modeling of Advanced Semiconductor Devices. *IBM Journal of Research and Development*, Vol. 36, No. 2, 1992, pp. 208–232.
- [3] H. KOSINA, E. LANGER, S. SELBERHERR. Device Modelling for the 1990s. *Microelectronics Journal*, Vol. 26, No. 2/3, 1995, pp. 217–233.
- [4] H. STIPPEL, E. LEITNER, CH. PICHLER, H. PUCHNER, E. STRASSER, S. SELBERHERR. Process Simulation for the 1990s. *Microelectronics Journal*, Vol. 26, No. 2/3, 1995, pp. 203–215.
- [5] M.B. CHANG, K.M. CHANG, C. KUO, S.K. CHENG. A New Scalable Floating-Gate EEPROM Cell. *Solid-State Electronics*, Vol. 35, No. 10, 1992, pp. 1521–1528.
- [6] S. MINAMI, Y. KAMAGAKI. New Scaling Guidelines for MNOS Nonvolatile Memory Devices. *IEEE Transactions on Electron Devices*, Vol. 38, No. 11, 1991, pp. 2519–2526.
- [7] J.G. ROLLINS, V. AXELRAD, S.J. MOTZNY. Carrier Temperature Dependent Gate Current Modeling for EEPROM Simulation. *Microelectronic Engineering*, Vol. 19, 1992, pp. 265–268.
- [8] M.B. CHANG, U. SHARMA, S.K. CHENG. An Improved Model for the Erase Operation of a FLOTOX Cell. *Solid-State Electronics*, Vol. 35, No. 10, 1992, pp. 1513–1520.



- [9] C. PAPADAS, G. GHIBAUDO, G. PANANAKAKIS, C. RIVA. Numerical Transient Simulation of the Programming Window Degradation in FLOTOX EEPROM Cells. *Solid-State Electronics*, Vol. 36, No. 9, 1993, pp. 1303–1311.
- [10] A. CONCANNON, S. KEENEY, A. MATHEWSON, R. BEZ, C. LOMBARDI. Two-Dimensional Numerical Analysis of Floating Gate EEPROM Devices. *IEEE Transactions on Electron Devices*, Vol. 40, No. 7, 1993, pp. 1258–1262.
- [11] S. KENNEY, R. BEZ, D. CANTARELLI, F. PICCININI, A. MATHEWSON, L. RAVAZZI, C. LOMBARDI. Complete Transient Simulation of Flash EEPROM Devices. *IEEE Transactions on Electron Devices*, Vol. 39, No. 12, 1992, pp. 2750–2757.
- [12] K. SAN, C. KAYA, D. LIU, T. MA, P. SHAH. A New Technique for Determining the Capacitive Coupling Coefficients in Flash EEPROMs. *IEEE Electron Device Letters*, Vol. 13, No. 6, 1992, pp. 328–331.
- [13] J. VAN HOUDT, L. HASPELAGH, D. WELLEKENS, L. DEFERM, G. GROESENEKEN, H. MAES. HIMOS — A High Efficiency Flash EEPROM Cell for Embedded Memory Applications. *IEEE Transactions on Electron Devices*, Vol. 40, No. 12, 1993, pp. 2255–2263.
- [14] J. VAN HOUDT, G. GROESENEKEN, H. MAES. An Analytical Model for the Optimization of High Injection MOS Flash EEPROM Devices. *Microelectronic Engineering*, Vol. 19, 1992, pp. 257–260.
- [15] S. MINAMI, Y. KAMIGAKI. A Novel MONOS Nonvolatile Memory Device Ensuring 10-Year Data Retention after  $10^7$  Erase/Write Cycles. *IEEE Transactions on Electron Devices*, Vol. 40, No. 11, 1993, pp. 2011–2017.
- [16] P. HEREMANS. *Hot-Carrier Phenomena in MOS Field-Effect Transistors: Analysis, Techniques, Injection Mechanism and Degradation Models*. Dissertation, IMEC, Katholieke Universiteit Leuven, 1990.
- [17] C.M. SNOWDEN. *Semiconductor Device Modelling*. Peter Peregrinus Ltd., 1988.
- [18] G. ADAM, O. HITTMAIR. *Wärmethorie*. Vieweg, 1977.
- [19] D.K. FERRY, J.R. BARKER, C. JACOBONI. *Physics of Nonlinear Transport in Semiconductors*. Plenum Press, 1980.
- [20] D.K. FERRY. *Semiconductors*. Macmillan Publishing Company, 1991.
- [21] O. HITTMAIR. *Einführung in die Quantentheorie*. Verlag Karl Thiemig, 1972.

- [22] K. HESS. *Monte Carlo Device Simulation: Full Band and Beyond*. Kluwer, 1991.
- [23] H. KOSINA. *Simulation des Ladungstransportes in elektronischen Bauelementen mit Hilfe der Monte-Carlo-Methode*. Dissertation, Institut für Mikroelektronik, Technische Universität Wien, 1992.
- [24] S. SELBERHERR. MOS Device Modeling at 77K. *IEEE Transactions on Electron Devices*, Vol. 36, No. 8, 1989, pp. 1464–1474.
- [25] M.R. PINTO. *PISCES IIB*. Stanford University, 1985.
- [26] G. BACCARANI, M.R. WORDEMAN. An Investigation of Steady-State Velocity Overshoot in Silicon. *Solid-State Electronics*, Vol. 28, No. 4, 1985, pp. 407–416.
- [27] R.K. COOK, J. FREY. An Efficient Technique for Two-Dimensional Simulation of Velocity Overshoot Effects in Si and GaAs Devices. *Computational Electronics*, Vol. 1, No. 2, 1982, pp. 65–87.
- [28] C.L. GARDNER. Numerical Simulation of a Steady-State Electron Shock Wave in a Submicron Semiconductor Device. *IEEE Transactions on Electron Devices*, Vol. 38, No. 2, 1991, pp. 392–398.
- [29] A. GNUDI, F. ODEH. An Efficient Discretization Scheme for the Energy-Continuity Equation in Semiconductors. In Proceedings: *Simulation of Semiconductor Devices and Processes III*, 1988, pp. 387–390.
- [30] N. GOLDSMAN, J. FREY. Efficient and Accurate Use of the Energy Transport Method in Device Simulation. *IEEE Transactions on Electron Devices*, Vol. 35, No. 9, 1988, pp. 1524–1529.
- [31] M. RUDAN, F. ODEH. Multi-Dimensional Discretization Scheme for the Hydrodynamical Model of Semiconductor Devices. *Computational Electronics*, Vol. 6, No. 3, 1986, pp. 149–183.
- [32] W. HÄNSCH, M. MIURA-MATTAUSCH. The Hot-Electron Problem in Small Semiconductor Devices. *Journal of Applied Physics*, Vol. 60, No. 2, 1986, pp. 650–656.
- [33] B. MEINERZHAGEN, W.L. ENGL. The Influence of the Thermal Equilibrium on the Accuracy of Classical Two-Dimensional Numerical Modeling of Silicon Submicrometer MOS Devices. *IEEE Transactions on Electron Devices*, Vol. 35, No. 5, 1988, pp. 689–697.

- [34] H. REES. Calculations of Steady State Distribution Functions by Exploiting Stability. *Physics Letters A*, Vol. 26, No. 9, 1968, pp. 416–417.
- [35] C. JACOBONI, L. REGGIANI. The Monte Carlo Method for the Solution of Charge Transport in Semiconductors with Application to Covalent Materials. *Review of Modern Physics*, Vol. 55, No. 3, 1983, pp. 645–705.
- [36] C. JACOBONI, P. LUGLI. *The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation*. Springer-Verlag, 1989.
- [37] A. PHILLIPS, P.J. PRICE. Monte Carlo Calculation on Hot Electron Energy Tails. *Applied Physics Letters*, Vol. 30, No. 10, 1977, pp. 528–530.
- [38] P.J. PRICE. Calculation of Hot Electron Phenomena. *Solid-State Electronics*, Vol. 21, 1978, pp. 9–16.
- [39] O. MADELUNG. *Festkörpertheorie I*. Springer-Verlag, 1972.
- [40] C. KITTEL. *Einführung in die Festkörperphysik*. Oldenburg, 1988.
- [41] C. KITTEL, C.Y. FONG. *Quantentheorie der Festkörper*. Oldenburg, 1988.
- [42] O. MADELUNG. *Festkörpertheorie II*. Springer-Verlag, 1972.
- [43] A. MESSIAH. *Quantenmechanik II*. de Gruyter, 1979.
- [44] W. FAWCETT, A.D. BOARDMAN, S. SWAIN. Monte Carlo Determination of Electron Transport in Gallium Arsenide. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, Vol. 31, 1970, pp. 1963–1990.
- [45] H. KOSINA, S. SELBERHERR. A Hybrid Device Simulator that Combines Monte Carlo and Drift-Diffusion Analysis. *IEEE Transactions on CAD*, Vol. 13, No. 2, 1994, pp. 201–210.
- [46] E. SANGIORGI, B. RICCO, F. VENTURI. MOS<sup>2</sup>: An Efficient Monte Carlo Simulator for MOS Devices. *IEEE Transactions on CAD*, Vol. 7, No. 2, 1988, pp. 259–271.
- [47] F. VENTURI, R.K. SMITH, E. SANGIORGI, M.R. PINTO, B. RICCO. A General Purpose Device Simulator Coupling Poisson and Monte Carlo Transport with Application to Deep Submicron MOSFET's. *IEEE Transactions on CAD*, Vol. 8, No. 4, 1989, pp. 360–369.
- [48] F. VENTURI, R.K. SMITH, E. SANGIORGI, M.R. PINTO, B. RICCO. A New Coupling Scheme for a Self-Consistent Poisson and Monte Carlo Device Simulator. In Proceedings: *Simulation of Semiconductor Devices and Processes III*, 1988, pp. 383–386.

- [49] D. ARNOLD, E. CARTIER, D.J. DIMARIA. Acoustic-Phonon Runaway and Impact Ionization by Hot Electrons in Silicon Dioxide. *Physical Review B*, Vol. 45, No. 3, 1992, pp. 1477–1480.
- [50] D.J. DIMARIA, E. CARTIER, D. ARNOLD. Impact Ionization, Trap Creation, Degradation, and Breakdown in Silicon Dioxide Films on Silicon. *Journal of Applied Physics*, Vol. 73, No. 7, 1992, pp. 3367–3384.
- [51] A. ABRAMO, F. VENTURI, E. SANGIORGI, J.M. HIGMAN, B. RICCO. A Numerical Method to Compute Isotropic Band Models from Anisotropic Semiconductor Band Structures. *IEEE Transactions on CAD*, Vol. 12, No. 9, 1993, pp. 1327–1336.
- [52] M.V. FISCHETTI. Monte Carlo Simulation of Transport in Technologically Significant Semiconductors of the Diamond and Zinc-Blende Structures—Part I: Homogeneous Transport. *IEEE Transactions on Electron Devices*, Vol. 38, No. 3, 1991, pp. 634–649.
- [53] E.O. KANE. Band Structure of Indium Antimonide. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, Vol. 1, 1956, pp. 249–261.
- [54] E.O. KANE. Zener Tunneling in Semiconductors. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, Vol. 12, 1959, pp. 181–188.
- [55] E.O. KANE. Theory of Tunneling. *Journal of Applied Physics*, Vol. 32, No. 1, 1961, pp. 83–91.
- [56] P.N. ARGYRES. Theory of Tunneling and its Dependence on a Longitudinal Magnetic Field. *Physical Review*, Vol. 126, No. 4, 1962, pp. 1386–1393.
- [57] J.Y. TANG, K. HESS. Impact Ionization of Electrons in Silicon (steady state). *Journal of Applied Physics*, Vol. 54, No. 9, 1983, pp. 5139–5144.
- [58] R. BRUNETTI, C. JACOBONI, F. VENTURI, E. SANGIORGI, B. RICCO. A Many Band Silicon Model for Hot-Electron Transport at High Energies. *Solid-State Electronics*, Vol. 32, No. 12, 1989, pp. 1663–1667.
- [59] T. VOGELSANG, W. HÄNSCH. A Novel Approach for Including Band Structure Effects in a Monte Carlo Simulation of Electron Transport in Silicon. *Journal of Applied Physics*, Vol. 70, No. 3, 1991, pp. 1493–1499.
- [60] A. ABRAMO, F. VENTURI, J.M. HIGMAN, C. FIEGNA, B. RICCO. A Numerical Method to Compute Isotropic Band Models From Anisotropic Band Structures. In Proceedings: *Workshop on Numerical Modeling of Processes and Devices for Integrated Circuits IV*, 1992, pp. 85–90.

- [61] H. SHICHIJO, K. HESS, G.E. STILLMAN. Simulation of High-Field Transport in GaAs Using a Monte Carlo Method and Pseudopotential Band Structures. *Applied Physics Letters*, Vol. 38, 1981, pp. 89–91.
- [62] J.R. CHELIKOWSKY, M.L. COHEN. Electronic Structure of Silicon. *Physical Review B*, Vol. 10, No. 12, 1974, pp. 5095–5107.
- [63] J.R. CHELIKOWSKY, M.L. COHEN. *Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors*. Springer-Verlag, 1989.
- [64] R.W. JANSEN, O.F. SANKEY. *Ab initio* linear Combination of Pseudo-Atomic-Orbital Scheme for the Electronic Properties of Semiconductors: Results for Ten Materials. *Physical Review B*, Vol. 36, No. 12, 1987, pp. 6520–6531.
- [65] J. ROBERTSON. Electronic Structure of Amorphous Semiconductors. *Advances in Physics*, Vol. 32, No. 2, 1983, pp. 361–452.
- [66] M.V. FISCHETTI, S.E. LAUX. Monte Carlo Analysis of Electron Transport in Small Semiconductor Devices Including Band-Structure and Space-Charge Effects. *Physical Review B*, Vol. 38, No. 14, 1988, pp. 9721–9745.
- [67] J.R. BARKER. Quantum Transport Theory of High-Field Conduction in Semiconductors. *Journal of Physics C*, Vol. 6, 1973, pp. 2663–2684.
- [68] J.R. BARKER. High Field Collision Rates in Polar Semiconductors. *Solid-State Electronics*, Vol. 21, 1978, pp. 267–271.
- [69] M.V. FISCHETTI, S.E. LAUX. Monte Carlo Simulation of Transport in Technologically Significant Semiconductors of the Diamond and Zinc-Blende Structures—Part II: Submicrometer MOSFET's. *IEEE Transactions on Electron Devices*, Vol. 38, No. 3, 1991, pp. 634–649.
- [70] A. ABRAMO, R. BRUNETTI, C. JACOBONI, F. VENTURI, E. SANGIORGI. Monte Carlo Simulation of Carrier-Carrier Interaction for Silicon Devices. In Proceedings: *Simulation of Semiconductor Devices and Processes V*, 1993, pp. 181–184.
- [71] M.V. FISCHETTI. Effect of the Electron-Plasmon Interaction on the Electron Mobility in Silicon. *Physical Review B*, Vol. 44, No. 11, 1991, pp. 5527–5534.
- [72] H. BROOKS. Scattering by Ionized Impurities in Semiconductors. *Physical Review*, Vol. 83, 1951, pp. 879–887.
- [73] E. CONWELL, V.F. WEISSKOPF. Theory of Impurity Scattering in Semiconductors. *Physical Review*, Vol. 77, No. 3, 1950, pp. 388–390.

- [74] B.K. RIDLEY. Reconciliation of the Conwell-Weisskopf and Brooks-Herring formulae for Charged-Impurity Scattering in Semiconductors: Third-Body Interference. *Journal of Physics C*, Vol. 10, 1977, pp. 1589–1593.
- [75] D. CHATTOPADHYAY, H.J. QUEISSER. Electron Scattering by Ionized Impurities in Semiconductors. *Review of Modern Physics*, Vol. 53, No. 4, 1981, pp. 745–768.
- [76] J. DEWEY, A. OSMAN. Ionized Impurity Scattering Model for Monte Carlo Calculations. In Proceedings: *International Workshop for Computational Electronics*, 1993, pp. 231–236.
- [77] L.E. KAY, T.-W. WANG. An Improved Ionized-Impurity Scattering Model for Monte Carlo Simulations. *Journal of Applied Physics*, Vol. 70, No. 3, 1991, pp. 1475–1482.
- [78] L.E. KAY, T.-W. TANG. Monte Carlo Calculation of Strained and Unstrained Electron Mobilities in  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  using an Improved Ionized-Impurity Model. *Journal of Applied Physics*, Vol. 70, No. 3, 1991, pp. 1483–1488.
- [79] J. BARDEEN, W. SHOCKLEY. Deformation Potentials and Mobilities in Non-Polar Crystals. *Physical Review*, Vol. 80, No. 1, 1950, pp. 72–80.
- [80] W.A. HARRISON. Scattering of Electrons by Lattice Vibrations in Nonpolar Crystals. *Physical Review*, Vol. 104, No. 5, 1956, pp. 1281–1290.
- [81] D.J. ROBINS. Aspects of the Theory of Impact Ionization in Semiconductors. *Physica status solidi (b)*, Vol. 97, No. 9, 1980, pp. 9–50.
- [82] A. GHETTI, L. SELMI, E. SANGIORGI, A. ABRAMO, F. VENTURI. A Combined Transport-Injection Model for Hot-Electron and Hot-Hole Injection in the Gate Oxide of MOS Structures. In Proceedings: *International Electron Devices Meeting*, 1994, pp. 363–366.
- [83] T.P. PEARSALL, F. CAPASSO, E. NAHORY, A. POLLACK, J.R. CHELIKOWSKY. The Band Structure Dependence of Impact Ionization by Hot Carriers in Semiconductors: GaAs. *Solid-State Electronics*, Vol. 21, 1978, pp. 297–302.
- [84] R. THOMA, H.J. PFEIFER, W.L. ENGL. An Improved Impact-Ionization Model for High-Energy Electron Transport in Si with Monte Carlo Simulation. *Journal of Applied Physics*, Vol. 69, No. 4, 1990, pp. 2300–2311.
- [85] C. FIEGNA, E. SANGIORGI, F. VENTURI, A. ABRAMO, B. RICCO. Modeling of High Energy Electrons in n-MOSFETs. In Proceedings: *International Electron Devices Meeting*, 1991, pp. 119–122.

- [86] C. CANALI, C. JACOBONI, F. NAVA, G. OTTAVIANI, A.A. QUARANTA. Electron Drift Velocity in Silicon. *Physical Review B*, Vol. 12, No. 4, 1975, pp. 2265–2284.
- [87] A. ABRAMO, L. BAUDRY, R. BRUNETTI, R. CASTAGNE, M. CHAREF, F. DESSENNE, P. DOLLFUS, R. DUTTON, W.L. ENGL, R. FAUQUEMBERGUE, C. FIEGNA, M.V. FISCHETTI, S. GALDIN, N. GOLDSMAN, M. HACKEL, C. HAMAGUCHI, K. HESS, K. HENNACY, P. HESTO, J.M. HIGMAN, T. IIZUKA, C. JUNGEMANN, Y. KAMAKURA, H. KOSINA, T. KUNIKIYO, S.E. LAUX, H. LIN, C. MAZIAR, H. MIZUNO, H.J. PEIFER, S. RAMASWAMY, N. SANO, P.G. SCROBOHACI, S. SELBERHERR, M. TAKENAKA, T.-W. TANG, K. TANIGUCHI, J.L. THOBEL, R. THOMA, K. TOMIZAWA, M. TOMIZAWA, T. VOGELSANG, S.-L. WANG, X. WANG, C.-S. YAO, P.D. YODER, A. YOSHII. A Comparison of Numerical Solutions of the Boltzmann Transport Equation for High-Energy Electron Transport in Silicon. *IEEE Transactions on Electron Devices*, Vol. 41, No. 9, 1994, pp. 1646–1654.
- [88] P.D. YODER, J.M. HIGMAN, J. BUDE, K. HESS. Monte Carlo Simulation of Hot Electron Transport in Si Using a Unified Pseudopotential Description of the Crystal. *Semiconductor Science and Technology*, Vol. 7, 1992, pp. B357–359.
- [89] T. KUNIKIYO, T. KAMAKURA, M. YAMAJI, H. MIZUNO, M. TAKENAKA, K. TANAGUCHI, C. HAMAGUCHI. Adjustable-Parameter-Free Monte Carlo Simulation in Silicon for Electron Transport in Silicon Including Full Band Structure. In Proceedings: *International Workshop on VLSI Process and Device Modeling*, 1993, pp. 40–41.
- [90] H. FRÖHLICH. Theory of Electrical Breakdown in Ionic Crystals. *Proceedings of the Royal Society A*, Vol. 160, 1937, pp. 230–241.
- [91] R.J. SEEGER, E. TELLER. On the Electric Breakdown of the Alkali Halides. *Physical Review*, Vol. 54, 1938, pp. 515–519.
- [92] H.B. CALLEN. Electric Breakdown in Ionic Crystals. *Physical Review*, Vol. 76, No. 9, 1949, pp. 1394–1402.
- [93] R. STRATTON. The Influence of Interelectronic Collisions on Conduction and Breakdown in Polar Crystals. *Proceedings of the Royal Society A*, Vol. 246, 1958, pp. 406–422.
- [94] K.K. THORNBUR, R.P. FEYNMAN. Velocity Acquired by an Electron in a Finite Electric Field in a Polar Crystal. *Physical Review B*, Vol. 1, No. 10, 1970, pp. 4099–4114.

- [95] K.K. THORNER. High-Field Electronic Conduction in Insulators. *Solid-State Electronics*, Vol. 21, 1978, pp. 259–256.
- [96] F.L. GALEENER, G. LUCOVSKY. Longitudinal Optical Vibrations in Glasses: GeO<sub>2</sub> and SiO<sub>2</sub>. *Physical Review Letters*, Vol. 37, No. 22, 1976, pp. 1474–1478.
- [97] W.T. LYNCH. Calculation of Electric Field Breakdown in Quartz Determined by Dielectric Dispersion Analysis. *Journal of Applied Physics*, Vol. 43, No. 8, 1972, pp. 3274–3278.
- [98] J. LLACER, E.L. GARWIN. Electron-Phonon Interaction in Alkali Halides. I. The Transport of Secondary Electrons with Energies between 0.25 and 7.5 eV. *Journal of Applied Physics*, Vol. 40, No. 7, 1969, pp. 2766–2775.
- [99] J. LLACER, E.L. GARWIN. Electron-Phonon Interaction in Alkali Halides. II. Transmission Secondary Emission from Alkali Halides. *Journal of Applied Physics*, Vol. 40, No. 7, 1969, pp. 2776–2792.
- [100] L.H. HOLWAY, D.W. FRADIN. Electron Avalanche Breakdown by Laser Radiation in Insulating Crystals. *Journal of Applied Physics*, Vol. 46, No. 1, 1975, pp. 279–291.
- [101] R.C. HUGHES. Charge-Carrier Transport in Amorphous SiO<sub>2</sub>: Direct Measurement of the Drift Mobility and Lifetime. *Physical Review Letters*, Vol. 30, No. 26, 1973, pp. 1333–1336.
- [102] R.C. HUGHES. High Field Electronic Properties of SiO<sub>2</sub>. *Solid-State Electronics*, Vol. 21, 1978, pp. 251–258.
- [103] R.C. HUGHES. Time-Resolved Hole Transport in *a*-SiO<sub>2</sub>. *Physical Review B*, Vol. 15, No. 4, 1977, pp. 2012–2020.
- [104] D. EMIN. Phonon-Assisted Transition Rates I. Optical Phonon-Assisted Hopping in Solids. *Advances in Physics*, Vol. 24, 1974, pp. 305–349.
- [105] H. KÖSTNER JR., K. HÜBNER. Statistics and Transport Behaviour of Electrons in SiO<sub>2</sub>. *Physica status solidi (b)*, Vol. 118, 1983, pp. 293–301.
- [106] D.K. FERRY. Electron Transport and Breakdown in SiO<sub>2</sub>. *Journal of Applied Physics*, Vol. 50, No. 3, 1979, pp. 1422–1427.
- [107] H.-J. FITTING, J.-U. FRIEMANN. Monte-Carlo Studies of the Electron Mobility in SiO<sub>2</sub>. *Physica status solidi (a)*, Vol. 69, 1982, pp. 349–358.
- [108] M. SPARKS, D.L. MILLS, A.A. MARADUDIN, L.J. SHAM, E. LOH JR., D.F. KING. Theory of Electron-Avalanche Breakdown in Solids. *Physical Review B*, Vol. 24, No. 6, 1981, pp. 3519–3536.



- [109] M.V. FISCHETTI. Monte Carlo Solution to the High-Field Heating in SiO<sub>2</sub>. *Physical Review Letters*, Vol. 53, No. 18, 1984, pp. 1755–1758.
- [110] M.V. FISCHETTI, D.J. DIMARIA, S.D. BRORSON, T.N. THEIS, J.R. KIRTLEY. Theory of High-Field Transport in Silicon Dioxide. *Physical Review B*, Vol. 31, No. 11, 1985, pp. 8124–8142.
- [111] M.V. FISCHETTI, D.J. DIMARIA. Quantum Monte Carlo Simulation of High-Field Electron Transport: An Application to Silicon Dioxide. *Physical Review Letters*, Vol. 55, No. 22, 1985, pp. 2475–2478.
- [112] M.V. FISCHETTI, D.J. DIMARIA. Hot Electron in SiO<sub>2</sub>: Ballistic to Steady-State Transport. *Solid-State Electronics*, Vol. 31, No. 3/4, 1988, pp. 629–634.
- [113] W. POROD, D.K. FERRY. Monte Carlo Study of High-Energy Electrons in Silicon Dioxide. *Physical Review Letters*, Vol. 54, No. 11, 1985, pp. 1189–1191.
- [114] W. POROD, D.K. FERRY. Monte Carlo Study of High Electric Field Quantum Transport in SiO<sub>2</sub>. *Physica B*, Vol. 134, 1985, pp. 137–141.
- [115] G. SCHUMICKI, P. SEEGBRECHT. *Prozeßtechnologie*. Springer-Verlag, 1991.
- [116] S.M. SZE. *Physics of Semiconductor Devices*. John Wiley, 1981.
- [117] J.R. CHELIKOWSKY, M. SCHLÜTER. Electron States in  $\alpha$ -Quartz: A Self-Consistent Pseudopotential Calculation. *Physical Review B*, Vol. 15, No. 8, 1977, pp. 4020–4029.
- [118] PH.M. SCHNEIDER, W.B. FOWLER. One-Electron Energy Bands of Silicon Dioxide in the Ideal  $\beta$ -Cristolite Structure. *Physical Review B*, Vol. 18, No. 12, 1978, pp. 7122–7133.
- [119] E. CALABRESE, W.B. FOWLER. Electronic Energy-Band Structure of  $\alpha$ -Quartz. *Physical Review B*, Vol. 18, No. 6, 1978, pp. 2888–2896.
- [120] T.N. THEIS, J.R. KIRTLEY, D.J. DIMARIA, D.W. DONG. Light Emission from Electron-Injector Structures. *Physical Review Letters*, Vol. 50, No. 10, 1983, pp. 750–754.
- [121] T.N. THEIS, D.J. DIMARIA, J.R. KIRTLEY, D.W. DONG. Strong Electric Field Heating of Conduction-Band Electrons in SiO<sub>2</sub>. *Physical Review Letters*, Vol. 52, No. 16, 1984, pp. 1445–1448.
- [122] K.M. GLASSFORD, J.R. CHELIKOWSKY. Structural and Electronic Properties of Titanium Oxide. *Physical Review B*, Vol. 46, No. 3, 1991, pp. 1284–1298.

- [123] M. HACKEL, H. KOSINA, S. SELBERHERR. Electron Transport in Silicon Dioxide at Intermediate and High Electric Fields. In Proceedings: *Simulation of Semiconductor Devices and Processes V*, 1993, pp. 65–68.
- [124] E. CARTIER, F.R. MCFEELY. Hot-Electron Transport Studies in SiO<sub>2</sub> Using Soft X-ray Induced Internal Photoemission. In Proceedings: *Insulating Thin Films on Semiconductors*, 1991, Ed. by W. ECCLESTON, M. UREN, Proceedings from the 7<sup>th</sup> Biennial European Conference, Adam Hilger, pp. 43–51.
- [125] E. CARTIER, F.R. MCFEELY. Hot-Electron Dynamics in SiO<sub>2</sub> using Soft-X-Ray Core Level Photoemission. *Physical Review B*, Vol. 44, No. 19, 1991, pp. 10689–10704.
- [126] M.V. FISCHETTI, S.E. LAUX, D.J. DIMARIA. The Physics of Hot-Electron Degradation of Si MOSFETs: Can We Understand it? *Applied Surface Science*, Vol. 39, 1989, pp. 578–596.
- [127] D.J. DIMARIA, T.N. THEIS, J.R. KIRTLEY, F.L. PESAVENTO, D.W. DONG, S.D. BRORSON. Electron Heating in Silicon Dioxide and Off-Stoichiometric Silicon Dioxide Films. *Journal of Applied Physics*, Vol. 5, No. 4, 1985, pp. 1214–1238.
- [128] S.D. BRORSON, D.J. DIMARIA, M.V. FISCHETTI, P.M. SOLOMON, D.W. DONG. Direct Measurement of the Energy Distribution of Hot Electrons in Silicon Dioxide. *Journal of Applied Physics*, Vol. 58, No. 3, 1985, pp. 1302–1313.
- [129] S.D. PANTELIDES. *The Physics of SiO<sub>2</sub> and its Interfaces*. Pergamon Press, 1978.
- [130] H. FRÖHLICH. Electrons in Lattice Fields. *Advances in Physics*, Vol. 3, 1954, pp. 325–361.
- [131] P. HABAŠ. *Analysis of Physical Effects in Small Silicon MOS Devices*. Dissertation, Institut für Mikroelektronik, Technische Universität Wien, 1993.
- [132] Y. NISSAN-COHEN, J. SHAPPIR, F. FROHMAN-BENTCHKOWSKI. Dynamic Model of Trapping-Detrapping in SiO<sub>2</sub>. *Journal of Applied Physics*, Vol. 58, No. 6, 1985, pp. 2252–2261.
- [133] Y. NISSAN-COHEN, J. SHAPPIR, F. FROHMAN-BENTCHKOWSKI. Trap Generation and Occupation Dynamics in SiO<sub>2</sub> under Charge Injection Stress. *Journal of Applied Physics*, Vol. 60, No. 6, 1986, pp. 2024–2035.

- [134] D.A. BUCHANAN, D.J. DIMARIA. Interface and Bulk Trap Generation in Metal-Oxide-Semiconductor Capacitors. *Journal of Applied Physics*, Vol. 67, No. 12, 1990, pp. 7439–7452.
- [135] D.J. DIMARIA, J.W. STASIAK. Trap Creation in Silicon Dioxide Produced by Hot Electrons. *Journal of Applied Physics*, Vol. 65, No. 6, 1989, pp. 2342–2356.
- [136] J.F. ZHANG, S. TAYLOR, W. ECCLESTON. Electron Trap Generation in Thermally Grown SiO<sub>2</sub> under Fowler-Nordheim Stress. *Journal of Applied Physics*, Vol. 71, No. 2, 1992, pp. 725–734.
- [137] D.J. DIMARIA, J.H. STATHIS. Trapping and Trap Creation Studies on Nitrided and Reoxidized-Nitrided Silicon Dioxide Films on Silicon. *Journal of Applied Physics*, Vol. 70, No. 3, 1991, pp. 1500–1509.
- [138] M.V. FISCHETTI, D.J. DIMARIA, E. TIERNEY, S.D. BRORSON. Direct Observation of the Threshold for Electron Heating in Silicon Dioxide. *Physical Review Letters*, Vol. 56, No. 12, 1986, pp. 1284–1286.
- [139] D.J. DIMARIA, M.V. FISCHETTI, J. BATEY, L. DORI, E. TIERNEY, J. STASIAK. Direct Observation of Ballistic Electrons in Silicon Dioxide. *Physical Review Letters*, Vol. 57, No. 25, 1986, pp. 3213–3216.
- [140] D.J. DIMARIA, M.V. FISCHETTI. Vacuum Emission of Hot Electrons From Silicon at Low Temperatures. *Journal of Applied Physics*, Vol. 64, No. 9, 1988, pp. 4683–4691.
- [141] D.J. DIMARIA, M.V. FISCHETTI, M. ARIENZO, E. TIERNEY. Electron Heating Studies in Silicon Dioxide: Low Fields and Thick Films. *Journal of Applied Physics*, Vol. 50, No. 5, 1986, pp. 1719–1726.
- [142] D. ARNOLD, E. CARTIER, D.J. DIMARIA. Soft X-Ray Induced Core Level Photoemission as a Probe of Hot Electron Dynamics in SiO<sub>2</sub>. *Physical Review Letters*, Vol. 65, No. 15, 1990, pp. 1937–1940.
- [143] R.H. FOWLER, L. NORDHEIM. Electron Emission in Intense Electric Fields. *Proceedings of the Royal Society*, Vol. 119, 1928, pp. 173–180.
- [144] M. LENZINGER, E.H. SNOW. Fowler-Nordheim Tunneling into Thermally Grown SiO<sub>2</sub>. *Journal of Applied Physics*, Vol. 40, No. 1, 1969, pp. 278–283.
- [145] T.H. NING, C.M. OSBURN, H.N. YU. Emission Probability of Hot Electrons from Silicon into Silicon Dioxide. *Journal of Applied Physics*, Vol. 48, No. 1, 1977, pp. 286–293.

- [146] C.N. BERGLUND, R.J. POWELL. Photoinjection into SiO<sub>2</sub>: Electron Scattering in the Image Force Potential Well. *Journal of Applied Physics*, Vol. 42, No. 2, 1970, pp. 573–579.
- [147] J. MASERJIAN, N. ZAMANI. Behavior of the Si/SiO<sub>2</sub> Interface by Fowler-Nordheim Tunneling. *Journal of Applied Physics*, Vol. 53, No. 1, 1982, pp. 559–567.
- [148] M.V. FISCHETTI, D.J. DIMARIA, L. DORI, J. BATEY, E. TIERNEY, J. STASIAK. Ballistic Electrons in Thin Silicon Dioxide Films. *Physical Review B*, Vol. 35, No. 9, 1987, pp. 4404–4415.
- [149] S.N. MOHAMMAD, G. FIORENZA, A. ACOVIC, J.B. JOHNSON, R.L. CARTER. Fowler-Nordheim Tunneling of Carriers in MOS Transistors: Two-Dimensional Simulations of Gate Current Employing FIELDAY. *Solid-State Electronics*, Vol. 38, No. 4, 1995, pp. 807–814.
- [150] C. FIEGNA, L. SELMI, E. SANGIORGI. Oxide-Field Dependence of Electron Injection from Silicon into Silicon Dioxide. *IEEE Transactions on Electron Devices*, Vol. 40, No. 11, 1993, pp. 2018–2022.
- [151] C. FIEGNA, L. SELMI, E. SANGIORGI. Author's Reply. *IEEE Transactions on Electron Devices*, Vol. 41, No. 9, 1994, pp. 1681–1683.
- [152] M.V. FISCHETTI. Comments on Oxide-Field Dependence of Electron Injection from Silicon into Silicon Dioxide. *IEEE Transactions on Electron Devices*, Vol. 41, No. 9, 1994, pp. 1680–1681.
- [153] A. PURI, W.L. SCHAICH. Comparison of the Image-Potential Theories. *Physical Review B*, Vol. 28, No. 3, 1983, pp. 1781–1784.
- [154] C. HUANG, T. WANG, C.N. CHEN, J. FU. Modeling Hot-Electron Gate Currents in Si MOSFETs Using a Coupled Drift-Diffusion and Monte Carlo Method. *IEEE Transactions on Electron Devices*, Vol. 39, No. 11, 1992, pp. 2562–2568.
- [155] K.S. WEN, H.-H. LI, C.-Y. WU. A New Gate Current Simulation Technique Considering Si/SiO<sub>2</sub> Interface Trap Generation. *Solid-State Electronics*, Vol. 38, No. 4, 1995, pp. 851–859.
- [156] M.V. FISCHETTI, Z.A. WEINBERG, J.A. CALISE. The Effect of Gate Metal and SiO<sub>2</sub> Thickness on the Generation of Donor States at the Si-SiO<sub>2</sub> Interface. *Journal of Applied Physics*, Vol. 57, No. 2, 1985, pp. 418–425.

- [157] J.Y. TANG, K. HESS. Theory of Hot Electron Emission from Silicon into Silicon Dioxide. *Journal of Applied Physics*, Vol. 54, No. 9, 1983, pp. 5145–5151.
- [158] C. FISCHER, P. HABAŠ, O. HEINREICHBERGER, H. KOSINA, PH. LINDORFER, P. PICHLER, H. PÖTZL, C. SALA, A. SCHÜTZ, S. SELBERHERR, M. STIFTINGER, M. THURNER. *MINIMOS 6.0 User's Guide*. Technische Universität Wien, 1994.
- [159] L. SELMI, E. SANGIORGI, R. BEZ B. RICCO. Measurement of the Hot Hole Injection Probability from Si into SiO<sub>2</sub> in p-MOSFETs. In *Proceedings: International Electron Devices Meeting*, 1993, pp. 200–203.
- [160] L. SELMI. Experimental Data for Device NPR5. Private communication, 1995.
- [161] A. v. SCHWERIN. Experimental Data for a 0.9 $\mu$ m-nMOS Transistor. Private communication, 1995.
- [162] R.L. KAMOCSAI, W. POROD. Hot Electrons and Traps in a-SiO<sub>2</sub>. *Solid-State Electronics*, Vol. 32, No. 12, 1989, pp. 1825–1829.
- [163] R.L. KAMOCSAI, W. POROD. A Monte Carlo Model of Hot Electron Trapping and Detrapping in SiO<sub>2</sub>. *Journal of Applied Physics*, Vol. 69, No. 4, 1991, pp. 2264–2275.
- [164] A. v. SCHWERIN. *Oxiddegradation von MOS-Transistoren durch heiÙe Ladungsträger*. Dissertation, Institut für Experimentalphysik, Karl-Franzens-Universität Innsbruck, 1989.
- [165] F. WANG, R. SCHWARZ. High-Temperature Annealing Behavior of  $\mu\tau$  Products of Electrons and Holes in a-Si:H. *Journal of Applied Physics*, Vol. 71, No. 2, 1992, pp. 791–795.
- [166] L. REGGIANI, V. MITIN. Recombination and Ionization Processes at Impurity Centers in Hot-Electron Semiconductor Transport. *Revista del Nuovo Cimento*, Vol. 12, No. 11, 1989, pp. 1–90.

## Eigene Veröffentlichungen

- [12] M. HACKEL, A. GHETTI, G. SCHROM, L. SELMI, S. SELBERHERR. Simulation of Electron Injection and Transport in MOS Structures. Part II: Transmission Rates and Applications. Submitted to *Solid-State Electronics*.
- [11] M. HACKEL, H. KOSINA, S. SELBERHERR. Simulation of Electron Injection and Transport in MOS Structures. Part I: Transport in SiO<sub>2</sub>. Submitted to *Solid-State Electronics*.
- [10] A. ABRAMO, L. BAUDRY, R. BRUNETTI, R. CASTAGNE, M. CHAREF, F. DESSENNE, P. DOLLFUS, R. DUTTON, W. ENGL, R. FAUQUEMBERGUE, C. FIEGNA, M. FISCHETTI, S. GALDIN, N. GOLDSMAN, M. HACKEL, C. HAMAGUCHI, K. HESS, K. HENNACY, P. HESTO, J. HIGMAN, T. IIZUKA, C. JUNGEMANN, Y. KAMAKURA, H. KOSINA, T. KUNIKIYO, S. LAUX, H. LIN, C. MAZIAR, H. MIZUNO, H. PFEIFER, S. RAMASWAMY, N. SANO, P. SCSOBOHACI, S. SELBERHERR, M. TAKENAKE, T. TANG, K. TANIGUCHI, J. THOBEL, R. THOMA, K. TOMIZAWA, M. TOMIZAWA, T. VOGLSANG, S. WANG, X. WANG, C. YAO, P. YODER, A. YOSHII. A Comparison of Numerical Solutions of the Boltzmann Transport Equation for High-Energy Electron Transport in Silicon. *IEEE Transaction on Electron Devices* Vol. 41, No. 9, 1994, pp.1646-1655.
- [9] M. HACKEL, H. KOSINA, S. SELBERHERR. Steady-State Electron Transport in Silicon Dioxide Employing Different Band-Structures. In Proceedings: *International Workshop on Computational Electronics*, 1993, pp.186-191.
- [8] M. HACKEL, H. KOSINA, S. SELBERHERR. Electron Transport in Silicon Dioxide at Intermediate and High Electric Fields. In Proceedings: *Simulation of Semiconductor Devices and Processes V*, 1993, pp.65-68.
- [7] W. BÜRGER, M. FABER, M. HACKEL, H. MARKUM, M. MÜLLER. Surface Energy and Chiral Interface of a Coexisting Quark-Hadron System. In Proceedings: *Particle Production in Highly Exited Matter Conference*, 1992, pp. 239-241.

- [6] M. HACKEL, M. FABER, H. MARKUM, M. MÜLLER. Interface Tension and Chiral Order Parameter Profile with Dynamical Quarks. *Physical Review D*, Vol. 46, No. 12, 1992, pp. 5648-5654.
- [5] M. HACKEL, M. FABER, H. MARKUM, M. MÜLLER. Chiral Interface for QCD with Dynamical Quarks, *International Journal of Modern Physics C*, Vol. 3, No. 5, 1992, pp. 961-970.
- [4] W. BÜRGER, M. FABER, M. HACKEL, H. MARKUM, M. MÜLLER. Inhomogeneous Universes from Lattice QCD with Dynamical Quarks. In Proceedings: *International Symposium on Nuclear Astrophysics*, 1992, pp. 441-446.
- [3] W. BÜRGER, M. FABER, M. HACKEL, H. MARKUM, M. MÜLLER. Surface Energy in the Early Universe within Lattice QCD. In Proceedings: *9<sup>th</sup> International Conference on Ultrarelativistic Nucleus-Nucleus Collisions*, 1991, pp. T35.
- [2] M. HACKEL, M. FABER, H. MARKUM, H. OBERHUMMER. Inhomogeneous Universes in the Framework of Lattice QCD. In Proceedings: *Primordial Nucleosynthesis and Evolution of the Early Universe of the International Conference in Tokyo*, 1991, pp. 127-129.
- [1] M. HACKEL, M. FABER, H. MARKUM, M. MÜLLER. Hadronic Bubble Formation in the Early Universe within Lattice QCD. In Proceedings: *International Symposium on Nuclear Astrophysics*, 1990, pp. 44-48.

# Lebenslauf

██████████	Geboren in Wien, Eltern Ingeborg und Ernst Hackel
September 1971	Eintritt in die Volksschule Waltergasse, 1040 Wien
September 1975	Eintritt in das realistische Gymnasium des Instituts der Neulandschulen, Ludwig-von-Höhnel-Gasse, 1100 Wien
18. Juni 1983	Matura
Oktober 1983	Beginn des Studiums der Technischen Physik an der Technischen Universität Wien
28. November 1991	Sponson zum Diplom-Ingenieur
Dezember 1991	Beginn des Doktoratsstudiums am Institut für Mikroelektronik
April 1994	Dreimonatiger Forschungsaufenthalt an der Universität in Bologna



