

Monte Carlo Method을 이용한 GaAs 전자전송특성의 온도의존성에 관한 연구

A Study on Temperature Dependence of the Electron Transport Properties of Gallium Arsenide using a Monte Carlo Method

이원진* 동국대학교 전기공학과
하성철 동국대학교 전기공학과

J.S.Yoon* Dept. of Electric Eng., Dongguk University

S.Ch.Ha Dept. of Electric Eng., Dongguk University

ABSTRACT

Electron transport properties of gallium arsenide in an electric field are simulated the drift velocity, Mn.energy, electron occupation, mobility in the temperature range 77K-500K using a Monte Carlo Method. Therefore it can be used for a GaAs MESFET design.

I. 서론

GaAs, InSb 등과 같은 III-V 족 화합물반도체는 Zincblende 결정구조를 가지고 있으며 특히 Ga과 As사이의 결합은 공유결합으로 단원소 반도체보다 더 큰 결합력을 갖는다. 이러한 결합력에 의해 GaAs는 격자진동이 단원소반도체보다 작게되므로 큰 전자이동도를 갖는다.

즉 현재까지 널리 사용되어온 Si의 전자이동도가 실온에서 1500[cm²/v.sec] 인데 비하여 GaAs는 Si의 5배를 초과하는 8800[cm²/v.sec]의 전자이동도를 갖는다.(1)

또한 III-V 족 화합물반도체는 직접전이의 밴드구조를 가지므로 빛의 흡수, 방출에 의한 전이나 전자-정공의 재결합과정이 광자(Phonon)에 의존하지 않으며, 외부의 큰 전계에 대해 GaAs내부의 전자들은 Intervalley Transfer가 일어나므로 고출력의 Microwave 발진이

가능하게 된다.

본 연구는 Intravalley Polar Optic, Acoustic, Equivalent Intervalley, Non-Equivalent Intervalley 을 고려하였으며, 이들의 물리적 관측량을 구하기 위해 Monte Carlo Method을 이용하여 시뮬레이션을 행하였다.

II. 이론

II-1 Intravalley Polar Optical 포논산란

주어진 온도와 저전계(Low Field) 일때 Polar Optical 포논산란은 (000)Valley 에서 발생하므로 파동벡터 K로부터 K'까지의 전이 비율(Transition Rate)은 식(1)로 표현할 수있다.(2,3)

$$S_0(K, K') = 2\pi \hbar B_0(K, K') \begin{cases} N_0 \delta[E(K') - E(K) - \hbar\omega_0] & \text{흡수} \\ (N_0 + 1) \delta[E(K') - E(K) + \hbar\omega_0] & \text{방출} \end{cases} \quad (1)$$

여기서, $B_0(K, K') = 2\pi e^2 \hbar \omega_0 / V |K - K'| (1/\epsilon_\infty - 1/\epsilon_0) G(K, K')$, N_0 : Optic 포논주파수, ϵ_∞ : 고주파수 상수, ϵ_0 : 정적유전체 상수, V : 체적, N_0 : Optical 포논점유수, $N_0 = [\exp(\hbar\omega_0 / k_B T) - 1]^{-1}$

또 식(1)에서 K 준위로부터 층 산란비율은 식(2)으로 표현할수있다.

$$\lambda e(K) = \exp(-\hbar \omega_0 / 2 \hbar (L/E_0 - L/E_0')) (1 + 2 \alpha E') / \gamma^*(E) F_0(E, E_0) \times \begin{cases} N_0 & \text{흡수} \\ (N_0 + 1) & \text{방출} \end{cases} \quad (2)$$

여기서 E' 은 Polar Optic 근사와 동일하며 $F_0(E, E_0)$ 는 $F_0(E, E') = C^{-1} (\Delta \ln \Gamma^*(E) - \gamma^*(E') / \gamma^*(E) - \gamma^*(E')) I + B$ 이다.

II-2 Intravalley Acoustic 포논산란

Acoustic 포논산란도 (000)Valley 에서 발생하지만 이때의 에너지는 KBT 와 비교해서 무시 할수있을 정도로 작으며 Absorption 과 Emission 모두를 고려한다면 전이비율은 식(3) 으로 표현 할수있다. (4)

$$S_a(K, K') = 2 \pi / \hbar B_a(K, K') N_a \delta[E(K') - E(K)] \quad (3)$$

여기서, $B_a(K, K') = 2 \hbar \epsilon_a / 2 \rho \sqrt{V} |K - K'| G(K, K')$

$$N_a = [\exp(\hbar \epsilon_a(K, K') / KBT) - 1]^{-1} \approx KBT / \hbar \epsilon_a(K, K')$$

N_a : 포논 점유수, ρ : 밀도, ϵ_a : 소리속도, ϵ_a : Acoustic Deformation Potential 이고, 모든 K' 에 대해 식(3) 을 적분하면 총 산란비율은 식(4) 로 나타낼수있다.

$$\lambda_a(K) = \{ 2 \pi \hbar^{-1} KBT \epsilon_a^{-2} / 2 \pi \rho \sqrt{V} \} \gamma^*(E) (1 + 2 \alpha E) F_a(E) \quad (4)$$

여기서, $F_a(E) = (1 + \alpha E) / (1 + \alpha E)^2 / (1 + 2 \alpha E)$ 이다

II-3 Equivalent Intervalley 산란

(100)Valley 에서 일어나는 산란을 고려 할때도 (000)Valley 에서 사용한 동일한 공식을 이용하며 어느곳에서나 $\alpha = 0$ 로 놓는다 또한 Parabolic, Spherical Valley 사이의 전이비율은 식(5) 으로 표현될수 있다. (5, 6)

$$S_e(K, K') = 2 \pi / \hbar B_e(K, K') \times \begin{cases} N_e \delta[E(K') - E(K) - \hbar \omega_e] & \text{흡수} \\ (N_e + 1) \delta[E(K') - E(K) + \hbar \omega_e] & \text{방출} \end{cases} \quad (5)$$

여기서, $B_e(K, K') = (Z_e - 1) \hbar / 2 \rho W_e V \epsilon_a$, $N_e = [\exp(\hbar W_e / KBT) - 1]^{-1}$, W_e : Intervalley 포논주파수, ϵ_a : Deformation 전위, Z_e : E quivalent Valley Number 이고, (100) Valley 가 Brillouin Zone 의 가장자리 라고 하면 $Z_e = 3$ 이다. 이때 N_e 는 단위 포논형태의 열평형수 이다. 모든 K' 에 대해 식 $B_e(k, K')$ 을 적분하면 총산란비율은 식(6) 으로 표현 할수있다.

$$\lambda_e(K) = (Z_e - 1) \hbar^{-1} \epsilon_a^{-2} / 2 \rho W_e V \gamma^*(E) \times \begin{cases} N_e & \text{흡수} \\ (N_e + 1) & \text{방출} \end{cases} \quad (6)$$

여기서 E' 은 Equivalent Intervalley 근사 이다.

II-4 Non-Equivalent Intervalley 산란

(000)Valley 와 (100)Valley 사이의 산란에 의한 전이비율을 계산하기 위해서 두형태의 Valleys 를 i 와 j 로 구별하는것이 편리하다 i Valley 의 K 로 부터 j Valley 의 K' 까지 전이를 할때 S_{ij} 는 식(7) 으로 표현 될수있다.

$$S_{ij}(K, K') = 2 \pi / \hbar B_{ij}(K, K') \times \begin{cases} N_{ij} \delta[E_j(K') - E_i(K) + \Delta_j - \Delta_i - \hbar \omega_{ij}] & \text{흡수} \\ (N_{ij} + 1) \delta[E_j(K') - E_i(K) + \Delta_j - \Delta_i + \hbar \omega_{ij}] & \text{방출} \end{cases} \quad (7)$$

여기서, $B_{ij}(K, K') = Z_j \hbar / 2 \rho W_{ij} V \epsilon_a \Xi_{ij} G_{ij}(K, K')$
 $N_{ij} = [\exp(\hbar \omega_{ij} / KBT) - 1]^{-1}$, ω_{ij} : Intervalley 포논주파수, Z_j : j 형태의 Valley수, Ξ_{ij} : Intervalley Deformation 전위, N_{ij} : Intervalley 포논점유수, K' 에 대해 식(7) 을 적분하면 총산란비율은 식(8) 로 표현된다.

$$\lambda_{ij}(K) = Z_j \{ m_j^* \hbar^{-1} \epsilon_a^{-2} / 2 \rho W_{ij} V \} \gamma^*(E) (1 + 2 \alpha E) F_{ij}(K) \times \begin{cases} N_{ij} & \text{흡수} \\ (N_{ij} + 1) & \text{방출} \end{cases} \quad (8)$$

여기서 $F_{ij}(E, E') = G_{ij}(K, K')$ 이며 $E' = E_j$ 는 식(9) 로 표현 할수있다.

$$E' = \begin{cases} E_i - \Delta_j + \Delta_i + \hbar \omega_{ij} & \text{흡수} \\ E_i - \Delta_j + \Delta_i - \hbar \omega_{ij} & \text{방출} \end{cases} \quad (9)$$

또한 아래 그림(1) 은 Monte Carlo Method을 시뮬레이션한 순서도이다.

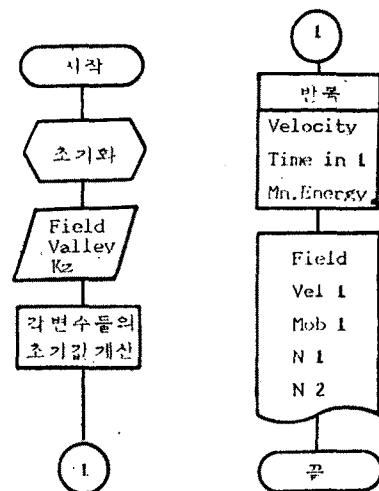


그림 1. 시뮬레이션 순서도

III 결과 및 고찰

본 연구는 전계가 0~10(KV/cm)인 범위에서 GaAs의 전자전송특성을 컴퓨터 시뮬레이션했다. 그림(2)은 전계에 대한 전자의 드리프트속도(Drift Velocity)를 나타낸 것이다. 온도가 변화됨에 따라 속도는 77°K에서 3.12×10^7 (cm/sec)로부터 500°K에서 1.55×10^7 (cm/sec)까지는 전자의 속도는 증가하나 임계전계 이후에는 감소함을 알 수 있다.

그림(3)은 평균에너지(MN.Energy)를 나타낸 것이다. 전계와 온도에 따라 전자의 평균에너지는 0~0.15, 0.17(eV)의 값을 가지며 증가하였다. 이것은 (000)Valley에서의 전자의 유효질량은 (100)Valley에서의 유효질량에 비해 작으므로 관성이 작아서 전계에 의한 가속을 크게 받으므로 (100)Valley의 전자에 비해 쉽게 에너지를 얻는다. 따라서 전계에 의해서 얻는 에너지는 (100)Valley에서 보다 크게 된다. 전계가 약할 때는 작은 에너지를 포논방출로써 잃어버려 전자의 에너지는 감소하며 전계가 강할 때에는 방출과정이 Source로부터 공급받는 에너지의 증가를 좋아하지 못하므로 전자의 평균에너지는 점점 증가한다.

그림(4)과(5)는 전자의 드리프트속도를 지배하는 (000)Valley와 (100)Valley에서 전자 점유율을 나타낸 것이다. 전자가 (100)Valley로 전이하여 그곳에 존재하는 전자의 수가 전계의 세기 3.1(KV/cm)에서 3.9(KV/cm)를 넘어서면 (000)Valley의 전자수보다 많아 진다는 것을 나타내며 그로인해 운송속도는 감소하는 것을 알 수 있다.

즉 포물선밴드인 경우에는 Polar Optical 포논산란 비율이 작기 때문에 상대적으로 전자가 적어 전자는 뜨거워져서 Intervalley 산란을 많이 일으키므로 (100)Valley의 전자의 점유율이 큰 값을 갖게 된다. 따라서 (100)Valley에 존재하는 전자의 점유율이 큰 값을 가지므로 그림(2)에서 본 바와같이 속도가 감소함을 알 수 있다.

그림(6)은 (000)Valley에서 이동도 특성을 나타내고 있다. GaAs내에서 전자가 운동할 때 에너지가 0.35(eV)보다 커져서 Intervalley 산란으로 인하여 전자가 뜨거워지면 $1/\langle v \rangle$ 로 결정되는 평균충돌시간이 저전계일 때 보다 감소하므로 전계와 더불어 이동도가 감소하게 됨을 알 수 있다

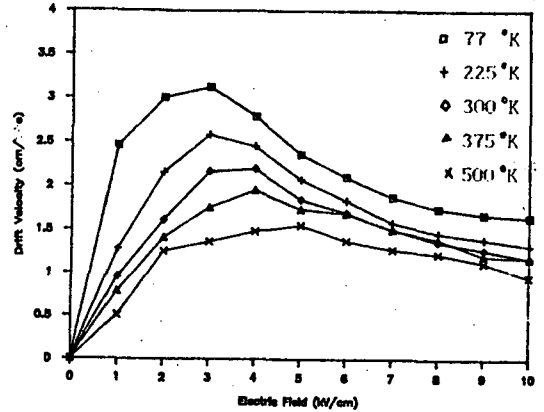


그림 2. Intrinsic GaAs에서 전계-온도에서의 드리프트속도

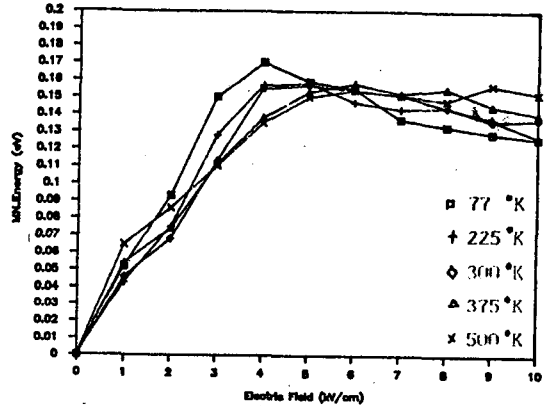


그림 3. 전계와 온도에 따른 평균에너지

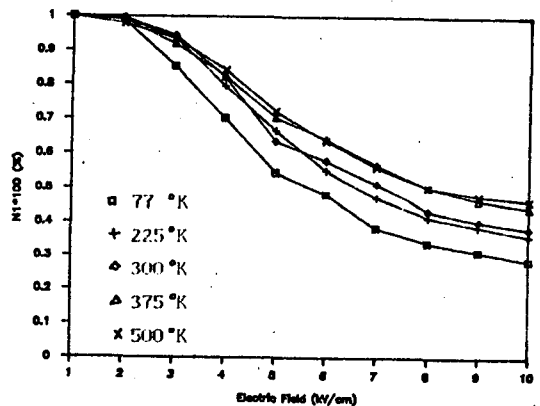


그림 4. 주어진 온도에서 (000)Valley의 전자 점유율

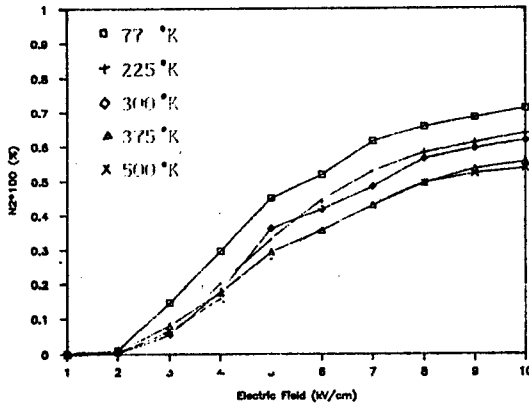


그림 5. 77K-500K에서 (100)Valley의 전자점유

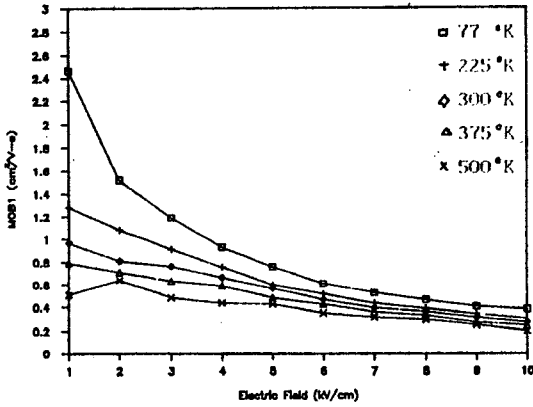


그림 6. 전계-운동도함수로서 (000)Valley의 이동도

IV 결론

위와같이 Monte Carlo Method를 이용하여 GaAs의 물리적 관측량인 드리프트 속도, 평균 에너지, 전자점유율, 그리고 이동도를 고찰하였다. 이러한 특성은 GaAs MESFET 을 설계하는데 이용할수 있다.

참고문헌

1. Ernst O.Gaebel, O laf Hilde brande, K.Lohnert, IEEE Jour.Q-E, QE-13, 10, 848(1977)
2. EHRENREICH H., J.Phys.Chem.Solids 2.131(1957)
3. EHRENREICH H., J.Phys.Chem.Solids 9.129(1959)
4. PAIGE E.G.S., Prog.Semicond.8.62(1964)

5. BUTCHER P.N., Rep.Prog.Phys.30.97(1967)
6. CONWELL E.M. and VASSELL M.O., Phys.Rev.166.797(1968) and references to previous work t-herein