

GaAs 에너지밴드구조에 따른 임팩트이온화의 문턱에너지 이방성

정חק기 · 곁석웅 · 이종인

군산대학교 전자공학과

The anisotropic of threshold energy of impact ionization for energy band structure on GaAs

Hak-kee Jung · Seok-woong Ko · Jong-in Lee

Dept. of Electronic Eng., Kunsan National University

Email : 'zenith@zenith.sarang.net

요 약

디바이스 효율에 커다란 영향을 미치고 있는 임팩트이온화현상의 정확한 모델이 디바이스 시뮬레이션에 필수적인 요소가 되고 있다. 최근에는 정확한 GaAs 임팩트이온화 모델을 위해 각 에너지 범위에 따라서 7.8과 5.6의 지수를 갖는 수정된 Keldysh 공식이 사용되고 있다. 그러나 이 모델 또한 임팩트이온화의 방향성을 무시한 등방성 모델로서 저에너지에서 이방성을 보이는 임팩트이온화모델로서는 부적합하다. 임팩트이온화율은 낮은 전자에너지에서는 강한 이방성 성질을 나타내는 반면에, 임팩트이온화현상이 자주 발생하는 높은 에너지 범위에서는 등방성이 된다. 임팩트이온화율을 계산하기 위하여 Fermi 황금법칙과 의사 포텐셜방법에 의하여 계산된 full 에너지 밴드구조를 사용하였다. Form factor 및 실험값을 비교하였으며, 방향에 따른 전도대의 에너지 밴드 구조를 <100>, <110>, <111>의 방향에 대하여 조사하였다. 결과적으로, 임팩트이온화의 문턱에너지가 이방성을 갖음을 알 수 있었다. 또한 상대적으로 낮은 에너지 즉, 문턱에너지 근처에서 임팩트이온화율이 더욱 심하게 변화함을 알 수 있다.

ABSTRACT

The exact model of impact ionization events in which has influence on device efficiency, is to be necessary element for device simulation. Recently, a modified Keldysh formula with two set of power exponent of 7.8 and 5.6 is used to simulate carrier transport. This model is, however, not suitable as impact ionization model in low energy range since this ignore direction dependent properties of impact ionization. The impact ionization rate is highly anisotropic at low energy, while it becomes isotropic at higher energy range. Note that impact ionization events frequently occur in high energy range. For calculating impact ionization rate, we use full energy band structure derived from Fermi's golden rule and empirical pseudopotential method. We compare with calculated and experimental value, and investigate direction dependent conduction energy band structure along the direction of <100>, <110> and <111>. We know that the threshold energy of impact ionization is anisotropic and impact ionization rate is very deviated from modified Keldysh formula, in relatively low energy range.

1. 서 론

차세대 반도체소자의 크기가 계속 감소하고 있으며 이에 따른 내부 전계상승에 의한 임팩트이온화(impact ionization)현상의 증가는 디바이스 효율에 커다란 영향을 미치고 있다. 그러므로 임팩트이온화현상의 정확한 모델은 디바이스시뮬레

이션에 필수적인 요소가 되고 있다. 임팩트이온화는 높은 운동에너지를 갖는 핫(hot)캐리어가 다른 산란 메카니즘에 의하여 에너지 손실이 발생하기 전에 전자-정공쌍을 생성하는 과정으로써 포논산란과 함께 핫캐리어 전송에 중요한 메카니즘이다.

지금까지는 임팩트이온화가 발생하는 문턱에너지 E_{th} 와 임팩트이온화의 강도를 나타내는 척도인 P 에 의하여 표시되는 Keldysh 공식이 이용되었다.[1] 그러나 이 Keldysh 공식은 해석학적 포물선 에너지 밴드구조에서 유도된 2의 지수를 갖는 공식으로써 에너지가 높은 영역에서 발생하는 임팩트이온화를 해석하는 데에는 물리적 의미를 갖지 못한다. 그러므로 본 논문에서는 식 (1)과 같은 7.8 및 5.6의 지수를 갖는 수정된 Keldysh 공식을 사용하였다.[2]

$$S_{ii}(E)[\text{sec}] = 4.57 \times 10^{10} (E - 1.73)^{7.8} \quad 1.73\text{eV} \leq E \leq 3.55\text{eV}$$

$$= 1.66 \times 10^{11} (E - 1.73)^{5.6} \quad 3.55\text{eV} \leq E \quad (1)$$

종래 산란모델해석에서 주로 사용되었던 비포물선 $E-k$ 관계는 임팩트이온화와 같이 고에너지에서 발생하는 산란을 해석할 때는 부적합하다. 그러므로 본 논문에서는 Fermi 황금법칙과 GaAs의 full 에너지밴드를 이용하여 임팩트이온화율을 구한 후, 이 이온화율과 에너지를 나타내는 해석식을 설정하여 Monte Carlo 시뮬레이션에 이용하였다. 이때 유전함수는 파수 및 주파수에 의존하는 $\epsilon(\mathbf{q}, \omega)$ 를 구하여 사용하였으며, umklapp 항도 포함하였다.[3] 여기서 full 밴드를 구하기 위하여 경험적 의사포텐셜방법(empirical pseudopotential method)을 이용하였다.

그러나 수정된 모델 또한 임팩트이온화의 방향성을 무시한 등방성 모델로서 저에너지에서 이 방향성을 보이는 임팩트이온화 모델로서는 부적합하다. 이에 본 논문에서는 임팩트이온화가 발생하는 문턱에너지의 방향성에 대하여 살펴볼 것이다.

II. 본 론

포논 산란과 함께 핫캐리어 전송에 중요한 메카니즘인 임팩트이온화는 핫캐리어에 의한 산란에 의하여 전자-정공쌍을 생성하는 과정으로써 전도대와 가전자대의 전자가 산란하여 전도대에 2개의 전자와 가전자대에 1개의 정공을 생성, 캐리어의 전송에 영향을 미친다. 그림 1에 임팩트이온화의 과정을 간략화해서 나타내었다. 전자 1이 전자 2와 충돌하여 전자 1' 와 2', 그리고 정공 2가 생성되는 과정이다. 산란모델의 해석에 가장 필수적인 요소는 $E-k$ 관계일 것이다. Full 밴드 $E-k$ 관계를 구하기 위하여 경험적 의사포텐셜방법을 사용하였으며, 이를 이용하여 임팩트이온화율을 구하였다. 이는 Cohen et al.에 의하여 제시된 방법[4]으로서 주기적인 Bloch 파동함수와 역격자 벡터 G 를 사용하고 있다. 여기서는 113개의 G 벡터를 이용하여 식 (1)과 같이 주어진 Hamiltonian $H^{ij}(\mathbf{k})$ 의 고유값을 구함으로써 밴드구조를 구하였다.

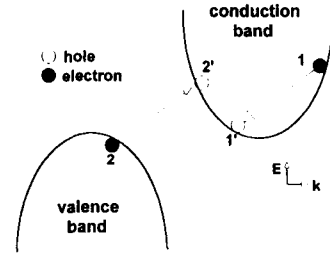


그림 1. 임팩트이온화의 개략도

$$H^{i,j}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar}{2m} |\mathbf{k} + \mathbf{G}_i| + V_s(0) \quad \text{for } i=j$$

$$V_s(\mathbf{G}_i - \mathbf{G}_j) \cos[(\mathbf{G}_i - \mathbf{G}_j) \cdot \boldsymbol{\tau}] + iV_a [(\mathbf{G}_i - \mathbf{G}_j) \sin(\mathbf{G}_i - \mathbf{G}_j) \cdot \boldsymbol{\tau}] \quad \text{for } i \neq j \quad (2)$$

여기서 k 는 브릴로우인 영역내의 파수(wave number)이다. G_i 와 G_j 는 두 개의 역격자벡터이고 $\boldsymbol{\tau} = a/16[111]$ 이며 a 는 GaAs의 격자상수이다. V_s 와 V_a 는 의사포텐셜 form factor의 대칭성과 비대칭성을 나타내는 함수로써

$$V_s(\mathbf{G}) = \frac{1}{2} [v_1(\mathbf{G}) + v_2(\mathbf{G})]$$

$$V_a(\mathbf{G}) = \frac{1}{2} [v_1(\mathbf{G}) - v_2(\mathbf{G})] \quad (3)$$

와 같이 주어지며 v_1 과 v_2 는 Ga 와 As의 의사포텐셜 form factor를 표시한다.[2] Nonlocal corrections 와 스핀궤도분리(spin-orbit splitting)에 의한 효과(0.33eV 정도)는 무시하였으며 최적의 form factor를 구하기 위하여 steepest descent방법[5]에 의하여 의사포텐셜 form factor를 구하여 full 밴드 에너지구조를 계산할 때 사용하였다. 본 논문에서 구한 form factor 및 실험값과의 비교를 표 1 과 2에 도시하였다.

표 1. 경험적 의사포텐셜방법에서 사용된 form factors(Ry)

V_3^s	V_8^s	V_{11}^s	V_3^a	V_4^a	V_{11}^a
-0.2350	0.0164	0.0500	0.0786	0.0526	0.0051

표 2. 에너지밴드갭에서 실험값과의 비교(eV)

State	Experimental[6]	Calculated
$\Gamma_{6c} - \Gamma_{8v}$	1.42	1.42
$L_{6c} - \Gamma_{8v}$	1.71	1.71
$X_{6c} - \Gamma_{8v}$	1.90	1.91

Γ , X, L벨리에 해당하는 에너지밴드갭에서는 매우 일치하는 결과를 유도하였다. 단원자 반도체인 실리콘과 달리 대칭적 form factor 뿐만이 아니라 비대칭적 form factor 도 존재함을 알 수 있다.

III. 계산결과 및 고찰

본 논문에서는 $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ 그리고 $\langle 111 \rangle$ 의 방향에 대하여 조사하였다. 방향에 따른 전도대의 에너지밴드구조를 그림 2에 도시하였다.

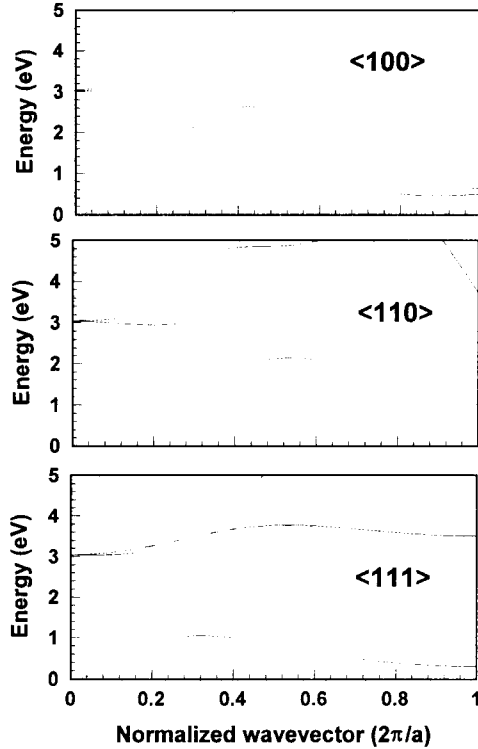


그림 2. 경험적 의사포텐셜방법에 의하여 계산된 GaAs의 전도대 E-k관계

이렇게 구한 GaAs의 에너지 밴드구조와 Fermi 황금법칙을 이용하여 임팩트이온화율을 계산하였다. 이때 임팩트이온화율은

$$S_{ii}(1, 2, 1', 2') = \frac{2\pi}{\hbar} [|M_d|^2 + |M_e|^2 + |M_d - M_e|^2] \times \delta(E_1 + E_2 - E_{1'} - E_{2'}) \quad (4)$$

와 같이 표현되며 1, 2, 1', 2'는 각각 그림 1에 도시한 바와같이 임팩트이온화에 관여한 전자와 정

공이다. M은 임팩트이온화의 행렬요소로

$$M_d = \left\langle \phi_{1'}(\mathbf{r}_1) \phi_{2'}(\mathbf{r}_2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon(\mathbf{q}, \omega)} \right| \phi_1(\mathbf{r}_1) \phi_2(\mathbf{r}_2) \right\rangle$$

$$M_e = \left\langle \phi_{2'}(\mathbf{r}_1) \phi_{1'}(\mathbf{r}_2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon(\mathbf{q}, \omega)} \right| \phi_1(\mathbf{r}_1) \phi_2(\mathbf{r}_2) \right\rangle \quad (5)$$

이며, 여기서 첨자 d와 e는 각각 direct항과 exchange항이다. 상태 1로부터 모든 가능한 상태로의 산란율을 계산하기 위하여 1', 2, 2'에 대한 평균을 구하였다.

$$S_{ii}(1) = \frac{1}{2} \sum_1 \sum_2 \sum_{2'} S_{ii}(1, 2, 1', 2') \quad (6)$$

의사포텐셜방법에서 구한 113개의 밴드구조를 모두 사용하여 계산하면 보다 정확한 값을 얻을 수 있으나 15개의 밴드구조 이상을 사용하였을 때 행렬요소의 값은 거의 일정하므로[3] 본 연구에서는 3개의 가전자대와 3개의 전도대에 대한 에너지와 15개의 고유함수를 이용하였다. 식 (4)에서 $|M_d|$ 와 $|M_e|$ 는 이온화에 참여한 두 캐리어의 스핀이 동일할 때이며 $|M_d - M_e|$ 는 스핀이 상이할 때의 상호간섭항이다. 식 (4)을 계산하기 위하여 브릴로우인 영역을 그리드 크기 $1/16(2\pi/a)$ (a는 GaAs의 격자상수)으로 등분하여 총 17,585개의 점에 대한 에너지 및 파동함수를 구하고 8개의 점으로 이루어진 정육면체를 6개의 동일한 체적을 갖는 사면체로 나누어 총 98,304개의 사면체에 대하여 체적적분하였다. 이와같은 사면체방법[6]은 Jepson et al.에 의하여 체계화된 방법으로써 수치적분을 해석학적 모델로 표현할 수 있다는 장점이 있다. 이는 미소체적을 6개의 동일한 사면체로 분할하여 각 사면체에 대하여 등에너지면을 구하며 이때 등에너지면이 사면체를 가로지르는 면적과 사면체의 체적을 이용하는 방법이다.

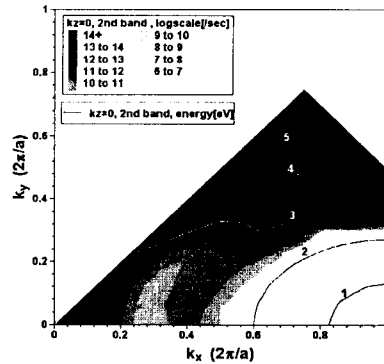


그림 3. 브릴로우인 영역($k_z=0$)에서 두 번째 전도대의 에너지와 임팩트이온화율의 분포

그림 3은 본 연구에서 구한 임팩트이온화율로서 1/48 브릴로우인영역중 $k_z=0$ 인 면에 대한 임팩트 이온화율을 두 번째 전도대의 에너지와 함께 도시하였다. 결과에서도 알 수 있듯이 각 방향별로 임팩트이온화가 발생하는 분포도가 다르다는 것을 알 수 있으며 이는 임팩트이온화가 이방성을 갖음을 알 수 있다. 또한 상대적으로 낮은 에너지에서 즉, 문턱에너지 근처에서 임팩트이온화율이 더욱 심하게 변화함을 알 수 있다. 좀더 자세히 각 방향에 대한 문턱에너지의 변화를 고찰 하기 위하여 그림 4와 같이 식 (6)을 이용하여 전자에 에너지 및 방향에 따른 임팩트이온화율의 변화를 도시하였다.

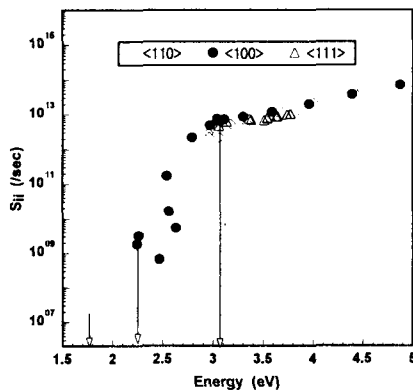


그림 4. 페르미황금법칙에 의하여 계산된 임팩트이온화율

그림 5에서 알 수 있듯이 <100> 방향은 약 2.2eV, <110>방향은 약 1.7eV, 그리고 <111> 방향은 약 3eV의 문턱에너지값을 갖는다. 그림 1의 임팩트이온화의 개략도에서 알 수 있듯이 에너지가 보존되면서 임팩트이온화가 발생되기 위해선 최소한 에너지밴드갭 이상의 에너지를 지녀야 하며 운동량까지 보존되기 위해선 약 1.7eV의 에너지를 지녀야 함을 알 수 있다. 또한 그림 2에서 알 수 있듯이 <111> 방향에서는 3eV까지 임팩트 이온화가 발생할 수 없으며 <110> 방향에 대해서도 약 2.1eV에서 2.9eV까지는 임팩트이온화가 발생할 수 없음을 알 수 있다.

IV. Monte Carlo simulation

이방성 임팩트이온화의 정상상태(steady state) 분석을 위해 Monte Carlo 시뮬레이션을 사용하여 임팩트이온화계수를 구하였다. 이를 위해 포논산란율과 포논분산관계를 사용하였다.[2] 본 연구에서는 GaAs의 임팩트이온화의 특성을 조사하기

위하여 서로 다른 방향에 따라 전계가 적용되는 4ps 후에 임팩트이온화계수를 구하였다.

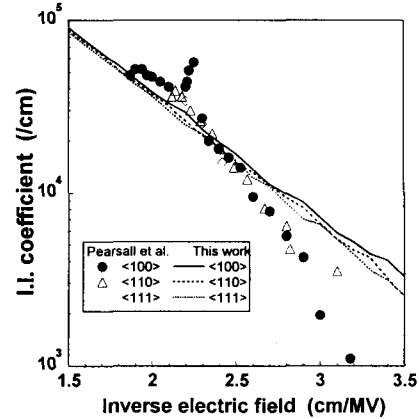


그림 5. 임팩트이온화계수

그림 5에 <100>, <110> 그리고 <111> 방향에 따라 구한 임팩트이온화계수와 실험결과[7]를 비교하여 도시하였다. 그림에서 알 수 있듯이 임팩트 이온화계수가 Monte Carlo 시뮬레이션에서는 이방성을 보이지 않음을 알 수 있으며, 이는 임팩트 이온화의 이방성이 정상상태가 경과한 뒤에는 사라지지 때문이다.

V. 결론

임팩트이온화가 주로 발생하는 고에너지에서의 임팩트이온화율은 등방성특성을 가지므로 앞에서 기술된 수정된 Keldysh공식에 의하여 표현될 수 있지만, 저에너지 영역에서는 각 방향에 따라 문턱에너지 값이 상이함을 알았다. 즉, <100> 방향은 약 2.2eV, <110>방향은 약 1.7eV, 그리고 <111> 방향은 약 3eV의 문턱에너지값을 갖는다. 이를 위해 경험적 의사포텐셜방법을 사용하여 full 밴드 E-k관계를 계산하였으며, 이를 이용하여 방향에 따른 GaAs의 에너지밴드 구조를 구하였다. 또한 사면체방법을 통해 구한 상태밀도는 저에너지 영역에서 정확한 값을 갖게 하기 위하여 그리드 간격을 조밀하게 하였으며 임팩트이온화의 에너지 간격 또한 조밀하게 하여 보다 정확한 결과를 얻었다. 결과적으로, 임팩트이온화의 문턱 에너지는 에너지밴드구조에 매우 의존하며 방향에 따라 임팩트이온화율을 구한 결과 문턱에너지가 이방성임을 입증하였다. 또한 Monte Carlo 시뮬레이션을 사용하여 임팩트이온화계수를 구함으로써 정상상태 도달 후 임팩트이온화의 이방성은 사라지며, 등방성특성이 나타남을 알 수 있었다.

참고문헌

- [1]. L.V.Keldysh, Sov. Phys. JETP, Vol. 21, p.1135, 1965.
- [2]. H.K.Jung, K.Taniguchi and C.Hamaguchi, J. Appl. Phys. Vol. 79, p.2473, 1996.
- [3]. Y.Kamakura, H.Mizuno, M.Yamaji, M.Morifuji, K.Taniguchi and C.Hamaguchi, J. Appl. Phys. Vol. 75, p.3500-3506, 1994.
- [4]. M.L.Cohen, T.K.Bergstresser, Phys. Rev. 144, p.789, 1966.
- [5]. H.H.Rosenbrock, Comput. J., Vol. 3, p.175, 1960.
- [6]. L.Reggiani : *Hot Electron Transport in Semiconductor* (Springer-Verlag, New York, 1985)
- [7]. T.P.Pearsall, F.Capasso, R.E.Nahory and A.Pollack : Solid State Elec. Vol. 21, p.297, 1978.