

GaAs의 임팩트이온화에 대한 온도의존특성

고석웅 · 유창관 · 정학기 · 이종인

군산대학교

The Temperature Dependent Properties for Impact Ionization of GaAs

Seok-woong Ko · Chang-kwan You · Hak-kee Jung · Jong-in Lee

Kunsan National University

E-mail : zenith@w3.kunsan.ac.kr

요 약

임팩트이온화율은 낮은 전자에너지에서는 이방성이지만, 임팩트이온화가 자주 발생하는 높은 에너지 영역에서는 등방성이 된다. 본 연구에서는 300K와 77K에서의 임팩트이온화율을 계산하기 위하여 의사포텐셜 방법으로 구한 full 에너지 밴드 구조와 페르미의 황금법칙을 사용하였다. 계산된 임팩트이온화율은 수정된 Keldysh공식을 사용하여 표현되었다. GaAs 임팩트이온화 모델의 타당성을 고찰하기 위해 Monte Carlo simulator를 제작하여 300K와 77K에서의 임팩트이온화 계수를 구하여 비교하였다. 시뮬레이션 결과, 300K에서 임팩트이온화 과정의 이방성특성이 관찰되었지만, 77K에서는 거의 임팩트이온화 계수가 일정함을 입증하였다.

특히, 77K에서 <110> 방향을 따라 적용된 전계에서는 이방성특성이 나타남을 입증하였다.

ABSTRACT

The impact ionization rate is highly anisotropic at low electron energy, while it becomes isotropic at higher energy range in which impact ionization events frequently occur. In this study, full energy band structure obtained by pseudopotential method and Fermi's golden rule is used to calculate impact ionization rate. The calculated impact ionization rate is well fitted to a modified Keldysh formula at 300K and 77K. Full band Monte Carlo simulator is made to investigate the validity of the GaAs impact ionization coefficients at 300K and 77K.

Impact ionization process is isotropic under the condition of steady state since anisotropy appears during very short time at 300K. Impact ionization coefficients is nearly constant and is anisotropic in electric field applied along the <110> direction at 77K.

1. 서론

임팩트이온화현상은 고전계하에서 고에너지를 얻은 캐리어간의 산란으로 소자들의 미소화가 이루어지고 있는 지금 중요한 연구분야가 되고 있다. 기존의 해석학적모델로는 이러한 임팩트이온화현상을 설명할 수가 없다. 따라서 고전계하에서의 전자전송을 해석하기 위해서는 full 에너지 밴드구조가 필요하게 되었다. 이를 위하여 본 연

구에서는 의사포텐셜방법을 사용하여 full 에너지 밴드구조를 구하였으며, 임팩트이온화율을 구하는데 수정된 Keldysh 공식을 사용하였다. 본 연구에서는 <100>, <110> 그리고 <111> 방향을 따라 적용된 고전계하에서 임팩트이온화과정을 조사하였다. 그리고 포논에너지분산관계, 포논산란율, 에너지 상태밀도등을 입력으로 하는 Monte Carlo

시뮬레이터를 제작하여 임팩트이온화계수를 구하였다. 결과를 타 실험값들과 비교하여 본 연구에서 구한 임팩트이온화모델의 타당성을 입증하였다.

모든 과정은 77K와 300K에서 실험하여 비교 분석하였다.

II. 본론

고에너지영역에서 전자들의 전송을 해석하기 위해서는 포물선모델이나 비포물선모델로는 설명하기 어렵기 때문에 full 밴드모델이 필수적이다. 그러므로 실험값과 일치하는 GaAs의 E-k 관계를 구하기 위하여 의사포텐셜방법(empirical pseudopotential method)을 이용하였다.[1]

다음과 같이 주어진 해밀토니안 $H^i(k)$ 의 고유값을 구함으로써 에너지밴드구조를 구하였다.

$$\begin{aligned}
 H^{i,j} &= \frac{\hbar^2}{2m_0} |\mathbf{k} + \mathbf{G}_i|^2 + V_s(0) \quad i = j \\
 &= V_s(\mathbf{G}_i - \mathbf{G}_j) \cos[(\mathbf{G}_i - \mathbf{G}_j) \cdot \mathbf{r}] \quad (1) \\
 &\quad + iV_A(\mathbf{G}_i - \mathbf{G}_j) \sin[(\mathbf{G}_i - \mathbf{G}_j) \cdot \mathbf{r}] \quad i \neq j
 \end{aligned}$$

여기서 k 는 브릴로우인 영역내의 파수(wave number)이다. G_i 와 G_j 은 두 개의 역격자벡터로 여기서는 113개의 역격자벡터를 이용하였다. $\tau = a/8[111]$ 이며, a 는 GaAs의 격자상수이다. V_s 와 V_A 는 의사포텐셜 form factor로 각각 대칭성과 비대칭성을 나타낸다.

$$\begin{aligned}
 V_s(G) &= \frac{1}{2} [v_1(G) + v_2(G)] \\
 V_A(G) &= \frac{1}{2} [v_1(G) - v_2(G)] \quad (2)
 \end{aligned}$$

본 연구에서는 실험값과 일치하는 form factor를 얻기 위하여 steepest descent 방법[2] 에 의한 의사포텐셜 form factor를 77K와 300K에서 각각 구하였다.

표 1. 의사포텐셜 form factor (Ry)

	V_3^s	V_8^s	V_{11}^s	V_3^a	V_4^a	V_{11}^a
300K	-0.2350	0.0164	0.0500	0.0786	0.0526	0.0051
77K	-0.2400	0.0184	0.0510	0.0780	0.0525	0.0065

표 2. 실험값과 계산값의 에너지 비교 (eV)

State	Esperimental value		Present calculation	
	77K	300K	77K	300K
$\Gamma_{8v} - \Gamma_{6c}$	1.50	1.42	1.50	1.42
$\Gamma_{8v} - L_{6c}$	1.81	1.71	1.81	1.71
$\Gamma_{8v} - X_{6c}$	2.03	1.90	2.03	1.91

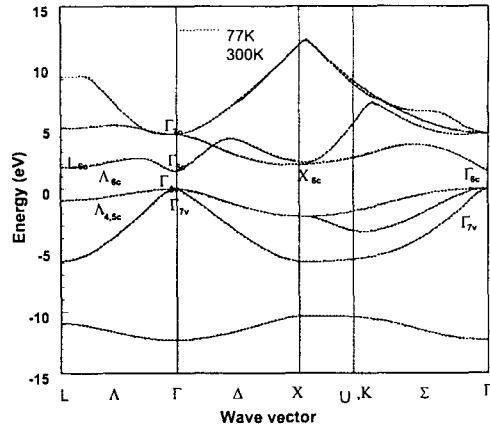


그림 1. 의사포텐셜방법으로 구한 에너지밴드구조

표2 에는 77K와 300K에서 실험값과 계산값을 비교하였다. Γ, X 그리고 L 밸리에서 매우 일치하는 결과를 유도하였으며, 그림 1 에는 브릴로우인 영역내의 주요 방향에 따른 E-k 관계를 도시하였다.

역격자 공간내의 미소체적에서 에너지상태를 나타내는 상태밀도 $D(E)$ 를 full 밴드모델과 사면체방법 [3]을 사용하였다. 이 사면체방법은 8개의 점으로 이루어진 정육면체를 6개의 동일한 사면체로 분할하여 총 12288개의 사면체에 대하여 체적적분을 하는 것이다. 즉 상태밀도는

$$D(E) = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \sum_j \int_{E_j(\mathbf{k})=E} \frac{dA}{\nabla_k} E_j(\mathbf{k}) \quad (3)$$

식(3) 처럼 나타나며 적분을 full 밴드모델에서 구한 에너지값을 이용하였다. 그림 2에 77K와 300K에서의 상태밀도를 도시하였다.

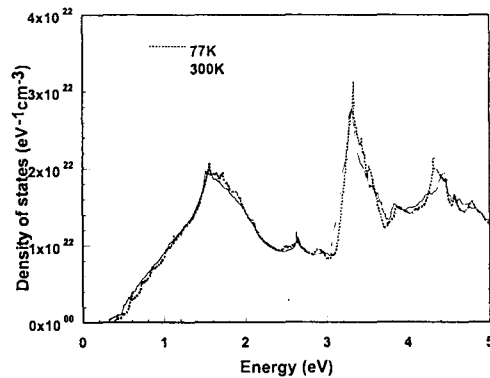


그림 2. 77K와 300K에서의 상태밀도

지금까지 포논산란은 임팩트이온화계수에 대한 실험값과 정합시키기 위하여 변형포텐셜을 파라미터로 조정한 산란율을 사용하였다.[4] 그러나 Zollner et al. 에 의하여 변형포텐셜은 브릴로우인 영역내에서 상수가 아님이 밝혀지면서 더욱 정확한 포논산란율이 Monte Carlo 시뮬레이션에서 요구되었다.[5] Full 밴드에서 포논산란율을 구하기 위하여 변형포텐셜의 브릴로우인 영역내에서의 변화를 고려한 rigid pseudoion 모델을 이용하였다.[6] 포논산란율은 다음과 같은 식으로부터 유도되었다.

$$P_{ph}^{\nu}(k, k') = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{ph}|^2 \delta(E_k \mp \Omega_q - E_{k'}) \quad (4)$$

이식은 ν 번째 전도대에서 파수 k 에너지 E_k 인 전자가 파수가 q 이고 η 의 포논모드를 갖는 포논과 산란될 확율을 표시한다. 상하부호는 각각 포논의 방출과 흡수를 나타낸다. Ω_q 는 포논의 에너지이며 umklapp 과정을 포함시키기 위하여 $k' = k \pm q + G$ 를 이용하였다. 그리고 전자와 포논간의 행렬요소 $|M_{ph}|$ 는

$$|M_{ph}| = \frac{|\langle \nu, k', n_q \mp 1 | H_{ph} | \nu, k, n_q \rangle|}{\sqrt{\frac{\hbar}{2M_x N \omega_q} D(\nu, k', \nu) \sqrt{n_q + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}}}} \quad (5)$$

이며 M_x 는 원자의 질량, x 는 Ga과 As를 표시한다. N 은 원자밀도, ν 와 ν' 는 산란전후의 에너지 밴드이다. H_{ph} 는 전자-포논간의 헤밀토니안이며, n_q 는 Ω_q 의 에너지를 갖는 포논의 수 Bose Einstein 통계를 이용하면 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$n_q = [\exp(\Omega_q / k_B T) - 1]^{-1} \quad (6)$$

에너지에 대한 등방성산란율은 k 에 대하여 다음과 같이 평균값을 구하여 사용하였다.

$$P_{ph}(E) = \frac{1}{D(E)} \sum_k P_{ph}(k) \delta(E - E_k) \quad (7)$$

본 연구에서는 포논산란율이 상태밀도와 선형적인 관계를 갖는다는 특성을 이용하였다. 즉, full 밴드 Monte Carlo 시뮬레이션에서 사용할 수 있는 포논산란율은 $P_{ph}(E)/D(E)$ 의 선형함수 $aE + b$ 를 구하여 이용하였다. 즉,

$$P_{ph}(E) = (aE + b)D(E) \quad (8)$$

여기서 a 와 b 는 각 포논모드에 따라 결정되는 상수이며 표3에 그 값을 77K와 300K에서 각각 나타내었다.

표 3. 포논산란율계수

Temp.	Coeff.	Op(ab.)	Op(em.)	Ac(ab.)	Ac(em.)
77K	a	1.58×10^{-11}	7.47×10^{-10}	1.08×10^{-9}	3.16×10^{-9}
	b	2.39×10^{-11}	1.12×10^{-9}	2.92×10^{-9}	6.70×10^{-9}
300K	a	4.04×10^{-10}	1.09×10^{-9}	6.73×10^{-9}	8.85×10^{-9}
	b	6.83×10^{-10}	1.85×10^{-9}	1.45×10^{-9}	1.81×10^{-9}

임팩트이온화현상은 전도대의 전자가 가전자대의 전자와 충돌하여 전자-정공쌍이 생성되어 결과적으로 전도대에 두 개의 전자와 가전자대에 정공을 만드는 과정이다. 페르미 황금법칙에 의하여 임팩트이온화율은

$$P_{ii}(k_1, k_2, k_1', k_2') = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{ii}|^2 \delta(E_1 + E_2 - E_1' - E_2') \quad (9)$$

여기서 M_{ii} 는 임팩트이온화의 행렬요소로

$$|M_{ii}|^2 = |M_d|^2 + |M_e|^2 + |M_d - M_e|^2 \quad (10)$$

이다. 그리고 M_d 와 M_e 는 각각 direct항, exchange항을 나타내며 행렬요소는

$$M_d = \int \int \psi_i^*(r_1) \psi_i^*(r_2) \times V(r_1, r_2) \psi_i(r_1) \psi_i(r_2) d^3 r_1 d^3 r_2$$

$$M_e = \int \int \psi_i^*(r_1) \psi_i^*(r_2) \times V(r_1, r_2) \psi_i(r_1) \psi_i(r_2) d^3 r_1 d^3 r_2$$

로 표시된다. 여기서 쿨롱포텐셜 $V(r_1, r_2)$ 는

$$V(r_1, r_2) = \frac{1}{\Omega} \sum_q \frac{e^2}{\epsilon_0 \epsilon(q, \omega) q^2} e^{iq(r_1 - r_2)} \quad (12)$$

이다. Ω 는 시료의 체적, $\epsilon(q, \omega)$ 는 파수와 주파수에 의한 유전함수를 나타낸다. 행렬요소식에서 파동함수 ψ 는

$$\psi_{\nu, k} = \sqrt{\frac{1}{V_0}} \sum_G A_{\nu, k}(G) e^{i(k+G)r} \quad (13)$$

쿨롱포텐셜식과 파동함수식을 행렬요소식에 대입하면

$$M_i = \frac{e^2}{\epsilon_0 \Omega} \sum_G \frac{1}{\epsilon(q_i, \omega) q_i^2} A(G_1 + k_1) \times A^*(G_1 + k_1) A^*(G_2 + k_2) \delta_{k_1 + k_2, k_1' + k_2' + G_i} \quad (14)$$

$$q_d = k_1' + G_1 - k_1 - G_1, \quad \omega_d = (E_1' - E_1)/\hbar,$$

$$q_e = k_1' + G_1 - k_2 - G_2, \quad \omega_e = (E_1' - E_2)/\hbar,$$

가 된다.

상태 1로부터 모든 가능한 상태로의 산란율을

계산하기 위하여 k_1, k_2, k_2' 에 대한 평균을 구하면

$$P_{ii}(k_1) = \frac{1}{2} \sum_{k_1'} \sum_{k_2} \sum_{k_2'} P_{ii}(k_1, k_2, k_1', k_2') \quad (15)$$

가 된다. 임팩트이온화를 구하는데 사용된 유전함수 $\epsilon(q, \omega)$ 는 다음식에 의하여 계산되었다.[7]

$$\epsilon(q, \omega) = 1 + \frac{e^2}{\epsilon_0 q^2 \Omega} \sum_c \sum_v \sum_c \langle c, k+q | e^{i\mathbf{a} \cdot \mathbf{r}} | v, k \rangle \times \{ [E_c(k+q) - E_v(k) - \hbar\omega - i\xi]^{-1} + [E_c(k+q) - E_v(k) + \hbar\omega + i\xi]^{-1} \} \quad (16)$$

식(16)에서 4개의 가전자대와 11개의 전도대에 대한 에너지와 고유함수를 사용하였다. 그림 3에 77K와 300K에서 구한 유전함수를 도시하였다.

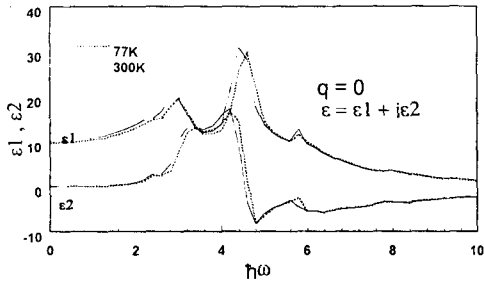


그림 3. 유전함수

그림에서 보듯이 유전함수가 주파수에 의존한다는 것을 알 수 있다.

본 연구에서는 수정된 Keldysh공식의 형태로 에너지에 대한 함수를 구하여 사용하였다. 그리고 임팩트이온화후 이차전자의 에너지를 계산하기 위하여 이차전자의 평균에너지를 다음식에 의하여 계산하였다.

$$E_1(E_1) = \frac{1}{2} \sum_{k_1'} E_1 \frac{\sum_{k_2, k_2'} \sum_{k_1, k_1'} P_{ii}(1, 2, 1', 2')}{P_{ii}(1)} \quad (17)$$

Monte Carlo 시뮬레이션에서 사용하기 위하여 에너지에 대한 선형함수를 구하여 사용하였다. 이렇게 구한 임팩트이온화율과 포논산란율을 그림 4에 각각 도시하였다.

III. Monte Carlo 시뮬레이션에 의한 임팩트이온화계수

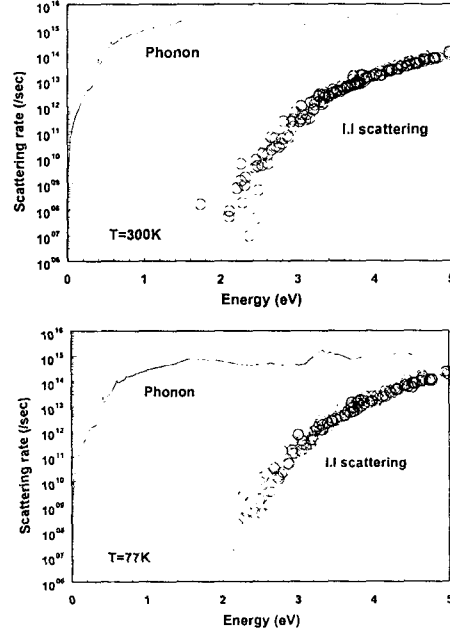


그림 4. 포논산란율과 임팩트이온화율

본 연구에서는 <100>, <110> 그리고 <111> 방향에 따른 임팩트이온화과정을 보다 자세히 조사하기 위하여 full 밴드 Monte Carlo 시뮬레이터를 제작하여 임팩트이온화계수를 구하였다. 임팩트이온화계수는 단위길이당 발생하는 임팩트이온화의 횟수로서 그림 5에 그 결과를 도시하였다.

그림에서 넓게 분포한 영역은 300K일 때 여러 실험값[8,9,10]을 나타내며 구한 임팩트이온화 모델이 300K에서 잘 일치함을 알 수가 있다. 임팩트이온화과정은 300K에서 아주 짧은 시간동안은 이방성특성을 보이지만 정상상태하에서는 등방성특성이 나타남을 알 수 있었다. 그러나 77K에서는 전계가 상대적으로 낮지만 보다 낮은 포논산란율로 임팩트이온화과정이 자주 발생하므로 임팩트이온화계수가 거의 일정함을 알 수가 있다. 또한 77K에서 <110>방향을 따라 적용된 전계에서는 임팩트이온화계수가 이방성특성을 보여주고 있다.

IV. 결론

77K와 300K에서 full 밴드 Monte Carlo 시뮬레이션과 에너지 밴드구조를 사용하여 GaAs의 임팩트이온화에 대한 이방성특성과 온도의존특성을 조사하였다. 임팩트이온화계수는 Monte Carlo 시뮬레이션에 의하여 계산되었다.

결과적으로 300K에서는 임팩트이온화과정의 이

방성특성을 관찰할 수 없었지만, 77K에서는 특히 <110> 방향을 따라 적용된 전계에서는 이방성특성이 관찰되었다. 77K에서 보다 낮은 포논산란율과 보다 강한 전계의 영향으로 이방성특성이 나타남을 알 수 있었다.

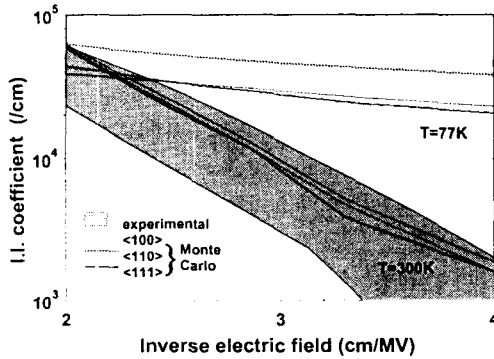


그림 5. 임팩트이온화계수

참고문헌

- [1] M. L. Cohen and T. K. Bergstresser, *Phys. Rev.*, vol. 141, pp.789-796, 1966.
- [2] H. H. Rosenbrock, *Comput. J.*, vol. 3, p.175, 1960.
- [3] O. Jepsen and O. K. Anderson, *Solid State Comm.*, vol. 9, pp.17763-1767, 1971.
- [4] Y. Wang and Kevin F. Brennan, *J. Appl. Phys.*, vol. 71, pp.2736-2740, 1992.
- [5] S. Zollner, S. Gopalan and M. Cardona, *J. Appl. Phys.* vol. 68, pp.1682-1693, 1990.
- [6] D. C. Herbert, *J. Phys. C*, vol. 6, p2278, 1973.
- [7] J. P. Walter and M. L. Cohen, *Phys. Rev. B*, vol. 5, pp.3101-3110, 1972.
- [8] H. David Law and Charles A. Lee, *Solid State Electron.*, vol. 21, p.331, 1978.
- [9] M. Ito, S. Kagawa, T. Kaneda and T. Yamaoka, *J. Appl. Phys.*, vol. 49, p.4607, 1978.
- [10] S. N. Shabde and C. Yeh, *J. Appl. Phys.*, vol. 41, p.4743, 1970.