
Monte Carlo 시뮬레이션을 이용한 Si 임팩트이온화계수의 온도 및 전계 특성

유창관^{*} · 고석웅 · 김재홍 · 정학기 · 이종인
^{*}군산대학교

The Temperature- and Field-dependent Impact Ionization Coefficient for Silicon using Monte Carlo Simulation

Chang-kwan You^{*} · Suk-woong Ko · Jae-hong Kim · Hak-kee Jung · Jong-in Lee

^{*}Kunsan National University

E-mail : youck@eltron.kunsan.ac.kr

요 약

임팩트이온화는 고전계하에서 고에너지를 지닌 캐리어간 산란으로써 전자전송해석에 필수적인 요소이다. 임팩트이온화율 계산은 풀밴드 E-k관계와 페르미의 황금법칙을 이용하였다. 본 연구에서는 풀밴드 Monte Carlo 시뮬레이션을 이용하여 온도 및 전계에 대한 Si 임팩트이온화계수를 조사하였다.

임팩트이온화 모델에 의해서 계산된 300K의 임팩트이온화계수는 실험값과 잘 맞았다. 온도상승에 따른 임팩트이온화계수와 전자의 에너지는 포논산란의 emission 모드의 증가 때문에 감소함을 알 수 있었다. 임팩트이온화계수의 대수는 온도와 전계에 대한 선형함수로 fitting 되었다. 이 선형함수의 오차는 5% 이내이다. 결과적으로 임팩트이온화계수의 대수는 선형적으로 온도와 전계에 의존함을 알 수 있었다.

ABSTRACT

The impact ionization(I.I.) is necessary to analyze carrier transport properties under the influence of high electric field. The full band E-k relation and Fermi's golden rule are used for the calculation of impact ionization rate. We have investigated the temperature- and field-dependent impact ionization coefficient for silicon using full band Monte Carlo simulation.

The impact ionization coefficients calculated by our impact ionization model are agreed with experimental data at 300K. We know that impact ionization coefficients and electron energies are decreasing along increasing temperature due to increase of phonon scattering, especially by emission. The logarithm of impact ionization coefficients are fitted to linear function for temperature and field. The residuals of linear function are within the error bound of 5%. We know logarithmic impact ionization coefficients are linearly dependent on temperature and field.

1. 서 론

임팩트이온화현상은 높은 운동에너지를 갖는 핫(hot) 캐리어가 다른 산란매카니즘에 의하여 에너지손실이 발생하기 전에 전자정공쌍을 생성하는 과정으로써 지금까지는 임팩트이온화가 발생하는 문턱에너지 E_{th} 와 임팩트이온화의 강도를 나타내는 척도인 P 에 의하여 표시되는 Keldysh 공식이 이용되었다[1]. 즉, 임팩트이온화계수를 실험

값과 정합시키기 위하여 E_{th} 및 P 를 조정하였으며 특히 포논산란율도 함께 조정하여 임팩트이온화율을 구하였다. 그러나 Keldysh 공식은 포물선 에너지밴드(parabolic energy band)구조를 사용하였을 때 유도되는 공식으로써 에너지가 높은 영역에서 발생하는 임팩트이온화를 해석하는 데에는 물리적의미를 갖지 못한다. 그러므로 본 연구

에서는 Si의 폴밴드 E-k관계와 페르미의 황금법칙을 이용하여 각 온도별로 임팩트이온화율을 구한 후[2], 이 이온화율과 에너지관계를 나타내는 해석식을 설정하여 Monte Carlo 시뮬레이션에 이용하였다. Monte Carlo 시뮬레이션에 의하여 임팩트이온화가 발생하는 에너지영역을 전계에 따라 구하였으며 온도 및 전계에 대한 임팩트이온화계수를 조사하였다.

II. 본 론

실리콘의 에너지밴드구조를 구하기 위하여 의사포텐셜방법(empirical pseudopotential method) [3]을 사용하였다. 이는 form factor를 결정하고 식 (1)과 같은 해밀토니안의 고유값을 구하므로써 에너지밴드구조를 결정하는 방법으로 실험값에 가장 근사한 계산결과를 유도할 수 있다.

$$H^{i,j} = \frac{\hbar^2}{2m} |k + G_i|^2 + V_s(0) \quad i=j \quad (1)$$

$$= V_s(G_i - G_j) \cos[(G_i - G_j) \cdot \tau] \quad i \neq j$$

여기서 k는 브릴로우인영역내 파동벡터이며 G_i와 G_j는 역격자벡터, τ = a/8[111] (a:격자상수) 그리고 V_s는 대칭적 form factor이다. Form factor는 steepest descent 방법[4]을 사용하여 결정하였다.

표 1. 의사포텐셜 form factor [Ry]

	V ₃ ^z	V ₃ ^x	V ₁₁ ^z
77K	-0.207480	0.049510	0.089600
200K	-0.207430	0.049580	0.088896
300K	-0.225800	0.056980	0.070709
400K	-0.207290	0.049780	0.087050
500K	-0.206910	0.049710	0.086270
600K	-0.206740	0.049730	0.085370
700K	-0.206590	0.049810	0.084370
800K	-0.206470	0.049910	0.083360

계산에는 113개의 역격자벡터를 사용하였다. 본 연구에서는 local form factor만을 사용함으로써 nonlocal corrections와 스핀궤도분리(0.04eV)에 의한 효과는 무시하였다.

상태밀도는 모든 산란율을 구할 때 필요한 요소로써 산란율에 직접적인 영향을 미치므로 이의 정확한 결과를 유도하여 사용하여야만 한다. 폴밴드 E-k관계를 이용하여 전자의 상태밀도를 계산하기 위해서 브릴로우인 영역을 1/16(2π/a)으로 나눈 사면체방법[5]을 이용하였다.

포논산란율 P_{ph}(E)과 상태밀도 D(E)의 선형적인 관계 특성[6]을 이용하여 포논산란율을 구하였다.

즉,

$$P_{ph}(E) = (aE + b)D(E) \quad (2)$$

이때 a, b는 각 포논모드에 따라 결정되는 상수로서 0 < E < 6.0eV 구간에서의 a, b값을 표 2에 도시하였다.

표 2. 포논산란율 계수 [cm³sec⁻¹]

Temp.	Coeff.	Ac(ab.)	Ac(em.)	Op(ab.)	Op(em.)
77K	a	5.86 × 10 ⁻¹³	6.56 × 10 ⁻¹¹	2.86 × 10 ⁻¹⁴	1.74 × 10 ⁻¹⁰
	b	1.18 × 10 ⁻¹⁰	1.66 × 10 ⁻⁰⁹	4.04 × 10 ⁻¹³	1.55 × 10 ⁻⁰⁹
200K	a	2.56 × 10 ⁻¹²	4.68 × 10 ⁻¹¹	5.98 × 10 ⁻¹²	1.79 × 10 ⁻¹⁰
	b	8.22 × 10 ⁻¹⁰	2.44 × 10 ⁻⁰⁹	6.24 × 10 ⁻¹¹	1.62 × 10 ⁻⁰⁹
300K	a	3.09 × 10 ⁻¹¹	1.61 × 10 ⁻¹¹	1.58 × 10 ⁻¹¹	1.54 × 10 ⁻¹⁰
	b	1.42 × 10 ⁻⁰⁹	3.26 × 10 ⁻⁰⁹	2.20 × 10 ⁻¹⁰	1.95 × 10 ⁻⁰⁹
400K	a	2.00 × 10 ⁻¹¹	3.02 × 10 ⁻¹¹	3.77 × 10 ⁻¹¹	2.07 × 10 ⁻¹⁰
	b	2.19 × 10 ⁻⁰⁹	3.93 × 10 ⁻⁰⁹	3.78 × 10 ⁻¹⁰	1.94 × 10 ⁻⁰⁹
500K	a	3.30 × 10 ⁻¹¹	2.40 × 10 ⁻¹¹	5.75 × 10 ⁻¹¹	2.25 × 10 ⁻¹⁰
	b	2.89 × 10 ⁻⁰⁹	4.70 × 10 ⁻⁰⁹	5.79 × 10 ⁻¹⁰	2.14 × 10 ⁻⁰⁹
600K	a	4.63 × 10 ⁻¹¹	1.73 × 10 ⁻¹¹	7.82 × 10 ⁻¹¹	2.44 × 10 ⁻¹⁰
	b	3.59 × 10 ⁻⁰⁹	5.47 × 10 ⁻⁰⁹	7.93 × 10 ⁻¹⁰	2.36 × 10 ⁻⁰⁹
700K	a	5.88 × 10 ⁻¹¹	9.74 × 10 ⁻¹²	9.94 × 10 ⁻¹¹	2.64 × 10 ⁻¹⁰
	b	4.31 × 10 ⁻⁰⁹	6.26 × 10 ⁻⁰⁹	1.01 × 10 ⁻⁰⁹	2.59 × 10 ⁻⁰⁹
800K	a	7.06 × 10 ⁻¹¹	1.58 × 10 ⁻¹²	1.21 × 10 ⁻¹⁰	2.84 × 10 ⁻¹⁰
	b	5.03 × 10 ⁻⁰⁹	7.05 × 10 ⁻⁰⁹	1.24 × 10 ⁻⁰⁹	2.82 × 10 ⁻⁰⁹

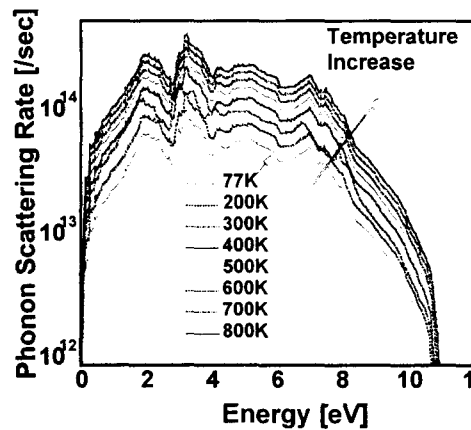


그림 1. 포논산란율

그림 1에서 포논산란은 온도증가와 함께 증가함을 알 수 있다.

페르미의 황금법칙에 의하여 임팩트이온화율은

$$P_{ii}(k_1, k_2, k_1', k_2') = \frac{2\pi}{\hbar} [|M_d|^2 + |M_e|^2 + |M_d - M_e|^2] \times \delta(E_1 + E_2 - E_1' - E_2') \quad (3)$$

이며 여기서 M 은 임팩트이온화의 행렬요소로서 임팩트이온화에 관여한 전자들의 스핀을 고려하여 direct항 $|M_d|^2$ 와 exchange항 $|M_e|^2$ 그리고 상호간섭항 $|M_d - M_e|^2$ 로 구분된다. 또한 델타함수는 에너지보존을 나타낸다. 본 연구에서는 4개의 가전대와 11개의 전도대에 대한 에너지·고유함수를 이용하여 유전함수를 계산하였다. 이렇게 구한 P_{ii} 를 에너지만의 함수로 나타내기 위해 수정된 Keldysh공식을 이용하였다.

$$\begin{aligned} P_{ii}(E) [\text{/sec}] &= 2.05 \times 10^{11} (E-1.2)^{4.60} \\ &\quad \text{at } 77K \\ &= 1.16 \times 10^{11} (E-1.1)^{5.10} \\ &\quad \text{at } 200K \\ &= 9.74 \times 10^{10} (E-1.1)^{5.19} \\ &\quad \text{at } 300K \\ &= 1.60 \times 10^{11} (E-1.1)^{4.81} \\ &\quad \text{at } 400K \\ &= 1.97 \times 10^{11} (E-1.1)^{4.63} \\ &\quad \text{at } 500K \\ &= 2.21 \times 10^{11} (E-1.1)^{4.56} \\ &\quad \text{at } 600K \\ &= 2.35 \times 10^{11} (E-1.07)^{4.34} \\ &\quad \text{at } 700K \\ &= 3.01 \times 10^{11} (E-1.07)^{4.11} \\ &\quad \text{at } 800K \quad (4) \end{aligned}$$

이차전자의 평균에너지를 Monte Carlo 시뮬레이션에서 사용하기 위하여 에너지에 대한 다음과 같은 선형함수를 구하여 이용하였다.

$$\begin{aligned} E (eV) &= 0.319E - 0.424 \quad \text{at } 77K \\ &= 0.318E - 0.417 \quad \text{at } 200K \\ &= 0.323E - 0.420 \quad \text{at } 300K \\ &= 0.319E - 0.404 \quad \text{at } 400K \\ &= 0.320E - 0.399 \quad \text{at } 500K \\ &= 0.321E - 0.393 \quad \text{at } 600K \\ &= 0.320E - 0.381 \quad \text{at } 700K \\ &= 0.321E - 0.376 \quad \text{at } 800K \quad (5) \end{aligned}$$

본 연구에서 제시한 포논산란율과 임팩트이온화율의 타당성여부를 조사하기 위하여 폴밴드 Monte Carlo 시뮬레이션을 행하였다[7]. 이때 입력데이터는 의사포텐셜방법에 의하여 구한 폴밴드 E-k관계, 포논에너지분산 및 포논산란율과 임팩트이온화율 등이다. 포논산란율은 5mV 간격으로 구하였으며 극성포논(polar phonon)산란은 임

팩트이온화가 발생하는 고에너지에서는 무시할 수 있으므로 무시하였다. 폴밴드 시뮬레이션을 위하여 브릴로우인 영역을 $1/10(2\pi/a)$ 로 균등하게 나누어 총 4,481점에 대하여 시뮬레이션하였다.

임팩트이온화계수는 단위길이당 발생하는 임팩트이온화의 횟수로서 그림 2는 온도가 300K일 때의 실험값과 시뮬레이션값을 비교한 그래프이다.

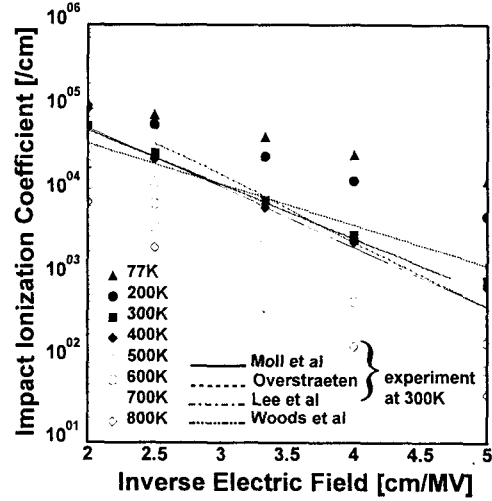


그림 2. 임팩트이온화 계수

본 연구에서 제시한 임팩트이온화계수 값이 전체 전계범위에서 실험값과 잘 일치함을 알 수 있다. 결과적으로 본 연구에서 제시한 포논산란율 및 임팩트이온화율이 타당하다고 사료된다. 또한 온도상승에 따른 임팩트이온화계수값이 포논산란의 증가로 인해 감소함을 알 수 있었다.

그림 3은 산란후 전자의 평균에너지를 도시한 것이다.

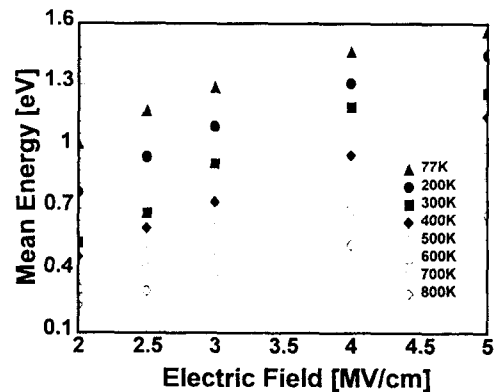


그림 3. 평균에너지

온도상승에 따른 전자의 에너지는 포논산란의 e-mission 모드 증가 때문에 감소함을 알 수 있었다.

임팩트이온화계수의 대수는 다음과 같이 온도와 전계에 대한 선형함수로 fitting 되었다.

$$\log [I.I.(T, F)] = \sum_{i=0}^1 \sum_{j=0}^1 a_{ij} b_{ij} \quad (6)$$

여기서 T 는 절대온도[K]이고 F 는 전계이다. a_{ij} 의 파라미터 값은 $a_{00} = 3.82128$, $a_{01} = 3.23145E-03$ [cm/kV], $a_{10} = -4.77045E-03$ [/K], $a_{11} = 6.21162E-06$ [cm/K·kV]이다. b_{ij} 는 $b_{00} = 1$, $b_{01} = F$, $b_{10} = T$, $b_{11} = FT$ 로 나타낸다. 이 선형함수의 오차는 5% 이내이다. 결과적으로 임팩트이온화계수의 대수는 선형적으로 온도와 전계에 의존함을 알 수 있었다.

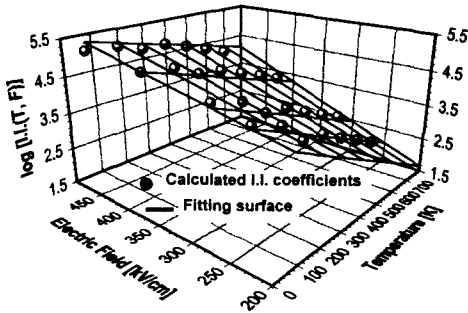


그림 4. 임팩트이온화계수의 대수 fitting

참고문헌

- [1] L. V. Keldysh, Sov. Phys. JETP, Vol. 21, pp 1113, 1965.
- [2] H. K. Jung, H. Nakano, K. Taniguchi, Physica B, Vol. 272, Nos. 1-4, pp 244-246, 1999
- [3] M. L. Cohen, T. K. Bergstresser, Phys. Rev., Vol. 144, pp 789-796, 1966.
- [4] H. H. Rosenbrock, Comput. J., Vol. 3, pp 175, 1960.
- [5] O. Jepsen, O. K. Anderson, Solid State Comm., Vol. 9, pp 1763-1767, 1971.
- [6] H. Mizuno, K. Taniguchi and C. Hamaguchi, Phys. Rev. B, Vol. 48, pp 1512-1516, 1993.
- [7] Y. Kamakura, K. Taniguchi et al., J. Appl. Phys., Vol. 75, No7, pp 3500-3506, 1994

III. 결 론

의사포텐셜방법에 의하여 폴밴드 E-k 관계를 계산하였으며 사면체방법을 이용하여 상태밀도를 구하였다. 포논산란율과 상태밀도의 선형적인 관계 특성에 의하여 포논산란율을 계산하였으며 임팩트이온화율은 폴밴드 E-k관계와 페르미의 황금법칙을 이용하였다. 이의 타당성을 Monte Carlo 시뮬레이션을 통하여 조사하였다.

온도상승에 따른 임팩트이온화계수값이 포논산란의 증가로 인해 감소했고, 산란 후 전자의 평균 에너지는 포논산란의 emission 모드 증가 때문에 감소하였다. 임팩트이온화계수의 대수는 온도와 전계에 대한 선형함수로 fitting 되었다. 따라서 임팩트이온화계수의 대수는 선형적으로 온도와 전계에 의존하는 것을 알 수 있었다.

결론적으로 본 연구에서 제시한 선형함수를 이용하면 임팩트이온화율의 계산소요시간을 많이 줄일 수 있으리라 사료된다.