

論文97-34D-7-6

풀밴드 GaAs Monte Carlo 시뮬레이션을 위한 최적사면체격자의 발생

(Generation of a adaptive tetrahedral refinement mesh for GaAs full band Monte Carlo simulation)

鄭 鶴 起 *

(Hak Kee Jung)

요 약

본 연구에서는 풀밴드 GaAs Monte Carlo 시뮬레이션을 위한 최적사면체격자구조를 제시하고자 한다. 종래의 균등절단한 사면체격자구조에서는 에너지크기 및 에너지변화율에 관계없이 일정한 사면체를 사용하였다. 이때 Γ 밸리와같은 저에너지영역에서 계산의 정확성을 유지하기 위해선 조밀한 사면체가 필요하나 고에너지영역에서도 동일한 사면체를 사용하여야하므로 계산시간이 방대해진다는 문제점을 갖고 있다. 이와같은 문제점을 해결하기 위하여 본 연구에서는 브릴로우인영역내의 저에너지영역 및 에너지변화가 심한 영역에서만 조밀한 사면체를 구성하였으며 그이외의 영역에서는 상대적으로 큰 사면체로 절단한 격자를 이용하였다. 이 사면체격자구조의 타당성을 조사하기 위하여 상태밀도를 계산하여 균등사면체구조의 경우와 비교하였다. 결과적으로 균등격자구조보다 제공평균오차는 약 5배, 상관계수는 약 10배정도 향상되었다. 그러므로 본 연구에서 제시한 사면체구조는 향후 풀밴드 GaAs Monte Carlo 시뮬레이션의 기본격자로 사용할 수 있을 것이다.

Abstract

A adaptive refinement tetrahedron mesh has been presented for using in full band GaAs Monte Carlo simulation. A uniform tetrahedron mesh is used without regard to energy values and energy variety in case of the past full band simulation. For the uniform tetrahedron mesh, a fine tetrahedron is demanded for keeping up accuracy of calculation in the low energy region such as Γ -valley, but calculation time is vast due to using the same tetrahedron in the high energy region. The mesh of this study, therefore, is consisted of the fine mesh in the low energy and large variable energy region and rough mesh in the high energy. The density of states(DOS) calculated with this mesh is compared with the one of the uniform mesh. The DOS of this mesh is improved the five times or so in root mean square error and the ten times in the correlation coefficient than the one of a uniform mesh. This refinement mesh, therefore, can be used as the basic mesh for the full band GaAs Monte Carlo simulation.

1. 서 론

반도체물질의 물리적 특성 및 전기적 특성을 고찰하기 위하여 다양한 방법들이 제안되고 있다. 특히 3차원

적 공정 및 소자시뮬레이션에 대한 연구는 최근 상당한 진척을 보이고 있다.^[1,2] 그 중에서도 Monte Carlo 방법을 이용한 캐리어의 전송해석은 컴퓨터의 능력이 향상되면서 급속도로 연구개발되고 있으며 실리콘 뿐만이 아니라 화합물반도체에서도 그 적용범위를 확대해 나가고 있다.^[3,4]

캐리어의 반도체물질내 전송특성은 격자산란 및 불순물산란등 산란메카니즘에 매우 큰 영향을 받기 때문

* 正會員, 群山大學校 電子工學科

(Dept. of Electronic Engineering, Kunsan National University)

接受日字:1997年3月31日, 수정완료일:1997年5月31日

에 반도체내에서 발생할 수 있는 여러 산란율의 해석에 관심이 집중되고 있다. 그러나 산란모델은 E-k 관계에 따라 매우 큰 영향을 받으므로 반도체의 정확한 E-k 관계를 모델화하려고 노력하고 있다.^[5] 종래 E-k 관계는 포물선밴드(parabolic band) 및 비포물선밴드(nonparabolic band)의 해석학적 모델을 사용하였으나 이는 고에너지 영역에서 실제 E-k 관계와 매우 불일치하므로 충격이온화율등과 같이 고에너지영역에서 중요한 산란모델을 구하기 위해선 폴밴드 E-k 모델이 필수적이며 이를 이용하여 여러 가지 산란율을 계산하려는 노력이 최근 집중되고 있다.^[6]

폴밴드 E-k 관계를 유도하는 방법으로는 의사포텐셜 방법(empirical pseudopotential method)이 가장 광범위하게 사용되어지고 있다.^[7] 폴밴드 E-k 모델을 구하기 위해선 브릴로우인영역 전체를 그리드(grid)화하여 계산하여야 하므로 계산시간이 길며 또한 컴퓨터의 계산능력에 매우 커다란 영향을 받는다는 단점도 있다. 그러나 반도체의 전송특성 해석시 가장 실험값에 유사한 결과를 유도하기 위해선 폴밴드 E-k 모델이 필수적이며 최근 컴퓨터의 계산능력이 향상되면서 이에 대한 연구가 활발히 진행중에 있다.^[8]

GaAs에서 캐리어의 전송특성을 해석하기 위해선 저에너지영역에서 중요한 역할을 하는 불순물산란, 극성광학포논(Polar optical phonon) 산란 및 플라즈몬(Plasmon) 산란등과 비교적 고에너지영역에서 중요한 비극성(Nonpolar) 포논산란 및 충격이온화율의 산란 모델이 요구된다.^[9] 그러나 일정한 간격으로 브릴로우인 영역을 분할한 격자를 사용하여 계산할때 저에너지 영역에서 정확한 산란율을 유도하기 위해선 매우 미세한 격자구조가 필요하나 이때 고에너지영역까지 미세한 격자를 적용하게 되므로 계산시간의 낭비문제가 발생하게 된다. 물론 저에너지 영역에서만 해석학적 모델을 사용할 수 있으나 MC 시뮬레이션시 전자 에너지는 전계에 따라 매우 광범위하게 변화하므로 전 브릴로우인 영역에 공히 적용될수 있는 격자구조와 산란율이 필요하게 된다.

이와같은 문제점을 해결하기 위하여 본 연구에서는 GaAs 반도체의 브릴로우인영역내 에너지분포에따른 최적격자구조를 제시하고자 한다. 이때 제안된 격자에서 구한 상태밀도와 종래의 균등한 격자를 사용하였을 때 구한 상태밀도를 비교분석하여 제안된 격자의 우수성을 밝힐 것이다.

II. 이론적 배경

1. 폴밴드 E-k 모델 및 상태밀도

본 연구에서는 form factor를 이용하여 실험적 E-k 관계에 접근시키는 의사포텐셜방법에 의하여 GaAs의 E-k 관계를 유도하였다. 의사포텐셜방법은 Cohen et al.에 의하여 제안된 방법으로써 폴밴드 E-k 관계를 구하기 위하여 가장 광범위하게 사용되어지고 있다.^[10] 이는 주기적인 Bloch 파동함수와 역격자 벡터 G 를 사용하고 있으며 본 연구에서는 113개의 G 벡터를 사용하여 계산하였다. 이때 사용한 form factor는 표 1과 같다. 또한 비교적 영향이 적은 nonlocal corrections 와 스핀궤도분리(spin-orbit splitting)에 의한 효과는 무시하였다.

표 1. 의사포텐셜 form factor (단위 : Ry)
Table 1. Empirical pseudopotential form factors in 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

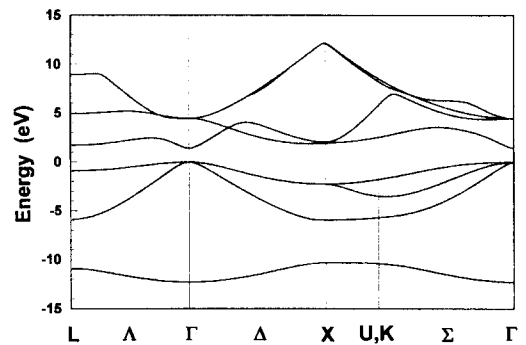


그림 1. 의사포텐셜방법에 의하여 구한 GaAs의 E-k 관계

Fig. 1. E-k relation for GaAs derived from empirical pseudopotential method.

그림 1에는 본 연구에서 계산한 GaAs E-k 관계중 4개의 가전자대와 4개의 전도대에 해당하는 값들을 도시하였다. 그림 내부에는 1/48 환산브릴로우인영역(Reduced Brillouin Zone; RBZ)을 도시하였으며 환산브릴로우인영역에서의 모든 에너지값 및 파동함수들을 이용하면 전체 브릴로우인 영역에서의 해당 값들을 구할 수 있으므로 본 연구에서는 전체 브릴로우인영역 대신 1/48 환산브릴로우인영역을 이용하여 상태밀도를

계산하고자 한다.

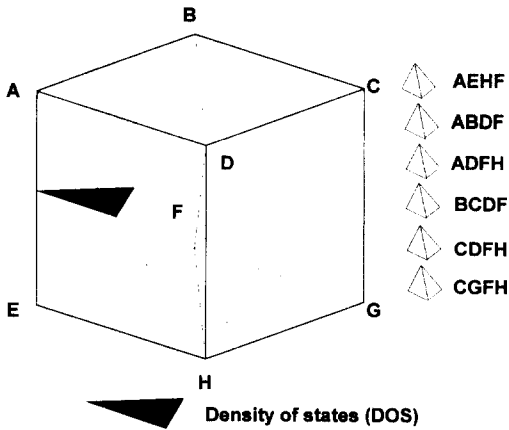


그림 2. 상태밀도를 구하기 위한 사면체구조
Fig. 2. Tetrahedron structure for the density of states.

상태밀도는 모든 산란율을 구할 때 필요한 요소로써 산란율에 직접적인 영향을 미치므로 이의 정확한 결과를 유도하여 사용되어야만 한다. 폴밴드 E-k관계를 이용하여 E와 E+dE간의 에너지에서 전자의 상태밀도 N(E)를 계산할 때는 사면체방법(Tetrahedron method)을 이용하였다. 이 방법은 그림 2와 같이 브릴로우인영역내 하나의 정육면체를 6개의 입의 사면체로 분할하고 미소 사면체에 대하여 등에너지면을 구하며 이때 등에너지면이 사면체를 가로지르는 면적과 사면체의 체적을 이용하여 상태밀도를 구하는 방법으로써 Jepson et al. 등에 의하여 체계화되었으며^[11] 최근 폴밴드 E-k관계를 이용하여 상태밀도를 계산할 때 광범위하게 사용되어 지고 있다.^[12] 이는 풀기 어려운 체적적분을 해석학적으로 풀 수 있다는 장점이 있다. 즉 상태밀도 N(E)는

$$N(E) = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \sum_j \int_{E(\mathbf{k})=E} \frac{dA}{\nabla_{\mathbf{k}} E_j(\mathbf{k})} \quad (1)$$

와 같이 주어지는 체적적분으로써 폴밴드 E-k관계를 이용하여 계산하여야만 한다. 그러나 사면체방법에서는 각 사면체의 꼭지점에 해당하는 에너지를 E₁<E₂<E₃<E₄의 순서로 배열하면 표 2와 같은 해석학적 표현으로 쉽게 상태밀도를 구할 수 있다.

표 2에서 V는 사면체의 체적을 나타내며 Δ는 다음과 같은 관계식으로 표현할 수 있다.

$$\Delta = E_4 + E_3 - E_2 - E_1$$

$$\Delta_i = E - E_i$$

$$\Delta_{ij} = E_i - E_j$$

$$E_m = (E_4 E_3 - E_2 E_1) / \Delta$$

표 2. 사면체방법에서 상태밀도의 해석학적 표현

Table 2. Density of states for tetrahedron method.

E	N(E)
E ₁ > E	0
E ₁ ≤ E ≤ E ₂	3V Δ ₁ ² /Δ ₂₁ Δ ₃₁ Δ ₄₁
E ₂ ≤ E ≤ E ₃	3V Δ ⁻¹ [1-Δ ² Δ _m ² /Δ ₃₁ Δ ₄₁ Δ ₂₂ Δ ₄₂]
E ₃ ≤ E ≤ E ₄	3V Δ ₄ ² /Δ ₄₁ Δ ₄₂ Δ ₄₃
E ₄ < E	0

2. 사면체의 에너지분포

상태밀도를 구하기 위하여 분할한 각 미소사면체의 에너지에 대한 분포를 조사하였다. 즉 임의의 에너지에 대하여 상태밀도를 계산하기 위하여 사용된 사면체의 갯수분포를 구하였다. 이는 해당에너지에 대한 상태밀도의 정확도와 관계되며 일정한 간격의 커다란 격자구조를 사용하였을 때는 저에너지영역에서 매우 적은 양의 사면체밖에 존재하지않기 때문에 상태밀도를 정확히 구할 수 없으며 결국 산란율이 부정확하게 되는 것이다. 특히 실리콘과 달리 GaAs의 Γ밸리는 그림 1에서도 알 수 있듯이 매우 좁은 폭을 나타내고있기 때문에 상태밀도등의 계산결과에 매우 큰 영향을 미친다.

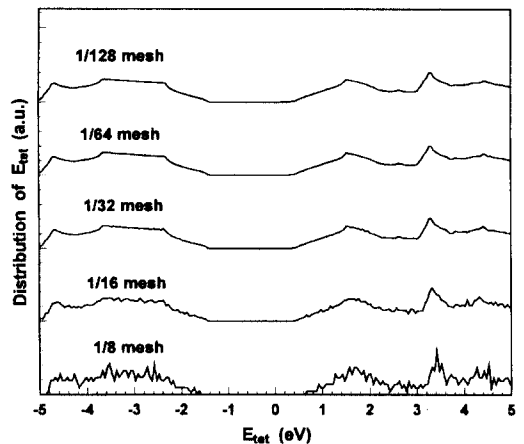
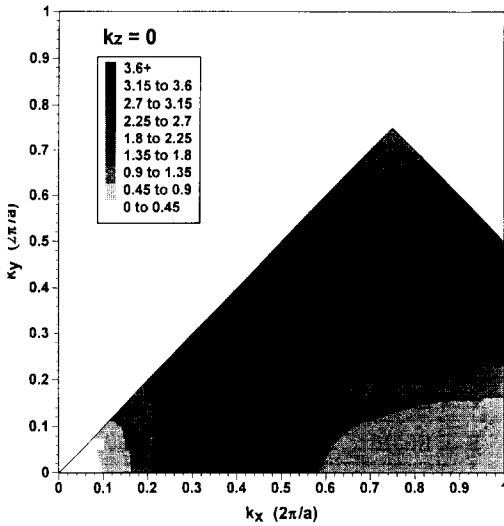
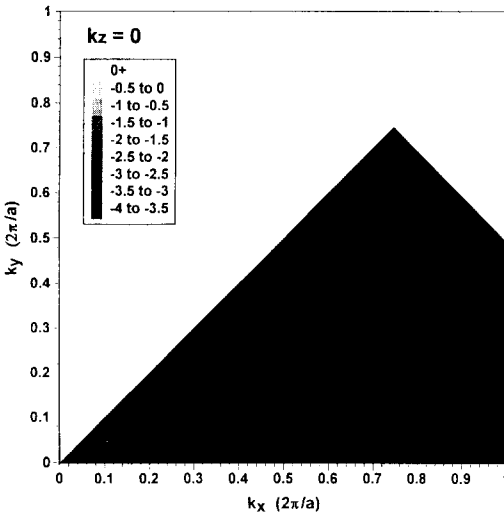


그림 3. 균등격자에서 E_{tet}의 분포
Fig. 3. Distribution of E_{tet} in a uniform mesh.



(a)



(b)

그림 4. $k_z=0$ 면에서 에너지분포 (a) 첫 번째 전도대의 경우 (b) 첫 번째 가전자대의 경우

Fig. 4. Energy distribution at $k_z=0$. (a) for 1st conduction band (b) for 1st valence band

그림 3은 Γ -X간을 각각 8, 16, 32, 64, 128개로 균등하게 격자를 절단하였을 때 사면체의 중심에너지를 E_{tet} 라 하고 그 분포를 나타낸 그림이다. $E_{tet}=0\text{eV}$ 는 전도대의 최소에너지를 나타내도록 도시하였다. 그림 3에서 알 수 있듯이 균등격자의 경우 분할하는 격자수가 증가할수록 분포가 일정해지며 모든 분포가 결국 상태밀도와 동일한 분포형태를 가지고 있다는 것을 알 수 있다.^[13] 그러므로 상태밀도가 낮은 영역 즉, 낮은

에너지영역에서는 등에너지면을 형성하는 사면체의 수가 매우 적기 때문에 정확한 상태밀도를 구할 수 없으며 또한 산란율의 정확도도 떨어지게 되는 것이다.

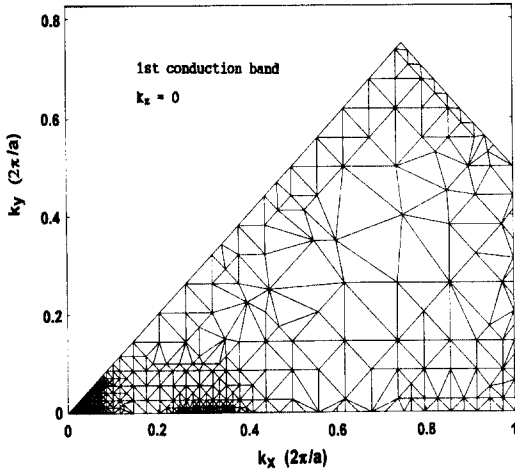
종래 주로 사용되어왔던^[14,15] 균등격자의 문제점을 해결하기 위하여 본 연구에서는 환산브릴로우인영역내의 에너지분포에 따라 격자간격을 조정된 최적사면체 격자를 제시하고자 한다. 그림 4(a)(b)에 $k_z=0$ 인 평면에서의 4번째(첫번째 가전자대)와 5번째(첫번째 전도대) 에너지밴드의 에너지분포를 각각 도시하였다.

그림 4(a)에서 알 수 있듯이 전도대의 Γ 밸리와 X밸리에서 낮은 에너지를 가지며 W밸리에서 매우 높은 에너지분포를 갖는다.(L밸리는 나타나지 않았다.) 그러므로 Γ 밸리 및 X밸리 근처에서 조밀한 격자간격이 요구됨을 알 수 있다. 또한 에너지분포의 변화가 심한 영역에서도 조밀한 격자간격이 요구되므로 이와같은 조건을 만족하도록 최적사면체격자를 구성하였다. 가전자대보다 전도대 에너지분포의 변화가 더욱 크다는 것을 그림에서 쉽게 알 수 있으며 이 때문에 전도대에서 더욱 조밀한 사면체가 필요하게 된다.

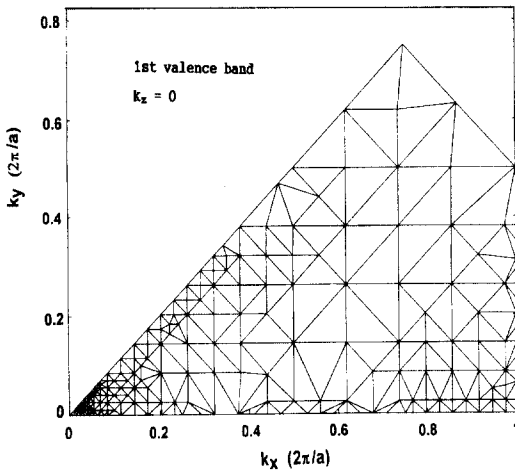
그림 5(a)(b)에 위와같은 조건을 만족하도록 구성된 환산브릴로우인영역에서의 사면체분포를 첫번째 전도대와 가전자대에 대하여 도시하였다. 사면체구조는 낮은 에너지영역과 에너지변화가 심한 영역을 선택하여 조밀하게 분포시켰으며 그이외의 영역에서는 계산시간 및 계산결과의 정확도를 고려하여 보다 큰 사면체구조를 분포시켰다. 가장 작은 격자간격은 $(2\pi/a)/512$ 이며 가장 큰 격자간격은 $(2\pi/a)/8$ 이다. 그림에서 알 수 있듯이 전도대의 사면체가 가전자대의 사면체보다 매우 조밀하게 분포되어 있다. 특히 전도대의 Γ 밸리에서는 매우 조밀한 격자구조를 보이며 Γ -X사이의 0.2-0.4구간도 X밸리보다 매우 조밀한 것을 알 수 있다. 이는 그림 1과 그림 4(a)에서 알 수 있듯이 에너지의 변화가 심하게 일어나는 영역이기 때문이다. 상대적으로 단순한 에너지분포를 보이는 가전자대에서는 Γ , X밸리 등 낮은 에너지를 갖는 영역에서 조밀한 사면체를 갖도록 구성하였으며 정확성이 그리 요구되지 않는 영역에서는 불필요한 계산량을 줄이기위하여 비교적 커다란 사면체를 사용하였다. 그림에는 나타나지 않았지만 L밸리와 심한 에너지변화를 보이는 영역에 대해서도 조밀한 사면체를 사용하였다.

표 3에 각 밴드에 따른 환산브릴로우인영역내의 사면체수와 격자점의 수를 표시하였다. 전도대의 세 번

째 및 네 번째 밴드의 분포는 동일하게 사용하였다. 균등격자의 경우 격자간격이 $1/x$ 이라면 환산브릴로우 인영역내 사면체의 수는 $x^3/2$ 이므로 표 3의 격자구조를 사용하였을 때 계산량은 약 21간격으로 균등절단한 경우와 동일하다는 것을 알 수 있다.



(a)



(b)

그림 5. 본 연구에서 제시한 격자구조 (a) 첫 번째 전도대의 경우 (b) 첫 번째 가전자대의 경우
Fig. 5. Mesh structure presented in this study. (a) for 1st conduction band (b) for 1st valence band.

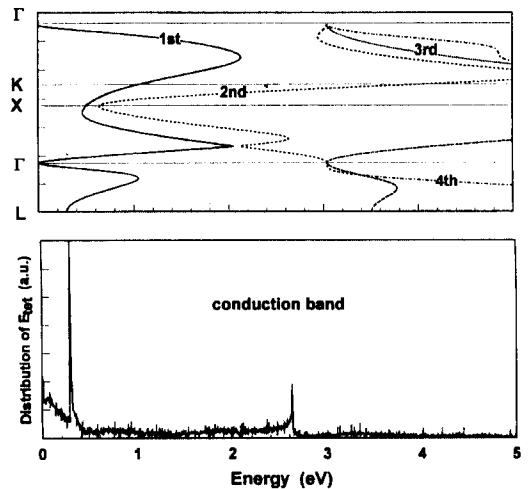
그림 5(a)(b)와 같은 격자구조를 사용하였을 때 E_{tet} 의 분포를 구하였다. 전술한 바와같이 낮은 에너지영역과 에너지의 변화가 심한 영역에서 상태밀도의 정확성을 증가시키기 위하여 조밀한 사면체를 사용하였다.

그림 6(a)(b)에 사면체의 에너지 즉, E_{tet} 의 분포를 E-k관계와 함께 도시하였다. 그림 6(a)에서 Γ , L, X 밸리와 같이 낮은 에너지영역에서는 높은 분포율을 가지며 에너지가 증가할수록 분포율은 감소한다. 또한 에너지변화가 심한 곳에서 분포율이 다소 높아지는 것을 알 수 있다. L밸리에서 매우 높은 분포율을 보이는데 이는 L밸리의 사면체분포뿐만이 아니라 Γ 밸리의 사면체분포효과까지 포함하기 때문이다.

표 3. 각 밴드에따른 사면체 및 격자점의 분포
Table 3. Tetrahedrons and points for each band.

밴드	종류	격자점의 수	사면체의 수
1st conduction		3424	13349
2nd "		1661	5924
3rd "		411	1442
4th "		411	1442
1st valence		803	2820
2nd "		1212	4383
3rd "		938	3460

그림 6(b)의 가전자대분포는 가전자대의 최대값을 0으로 설정하고 도시하였으며 Γ 밸리를 제외하곤 모든 영역에서 거의 동일한 사면체분포를 이루도록 구성하였다. 가전자대는 전도대보다 단순한 에너지대구조를 보이므로 표 3에서도 알 수 있듯이 적은 수의 사면체만을 사용하여 상태밀도를 계산하였다.



(a)

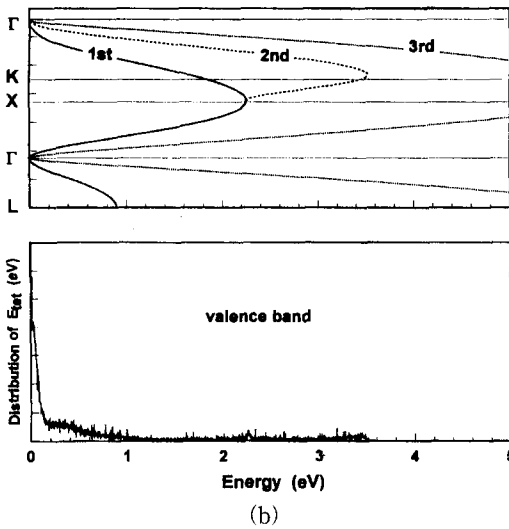


그림 6. 본 연구에서 제시한 격자구조에서 E_{tet} 의 분포. (a) 전도대의 경우 (b) 가전자대의 경우
Fig. 6. Distribution of E_{tet} for mesh structure presented in this study (a) for conduction band (b) for valence band.

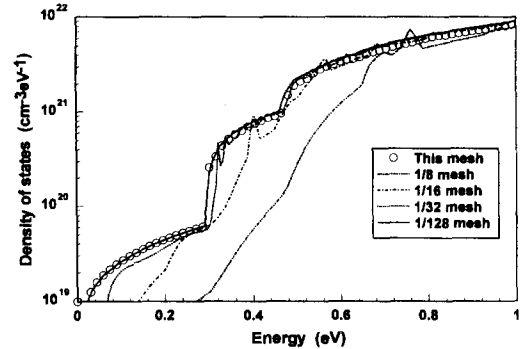
그림 3의 균등격자와 비교해 보면 매우 상이한 E_{tet} 분포를 보이고 있음을 알 수 있다. 즉, 환산브릴로우인 영역내에 약 100만개의 사면체를 가진 1/128 균등격자의 경우조차도 저에너지영역에서 상대적으로 적은 수의 사면체에너지 E_{tet} 의 분포를 갖는 것을 알 수 있으나 본 연구에서 제시한 사면체구조의 경우는 낮은 에너지영역에서 높은 분포율을 보이고 있음을 알 수 있다.

III. 상태밀도 비교분석

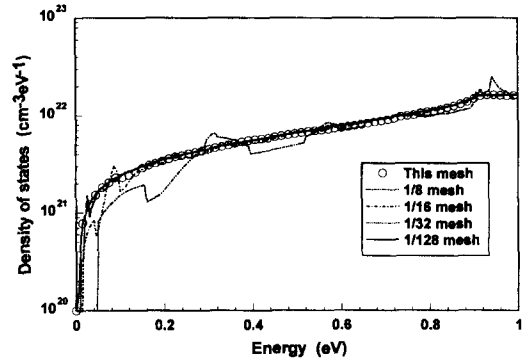
본 연구에서 제시한 격자구조를 사용하여 계산한 상태밀도와 균등격자구조에서의 상태밀도를 비교분석하였다. 그림 7(a)(b)에 가전자대와 전도대의 에너지에 대한 상태밀도계산결과를 도시하였다.

약 1eV까지의 상태밀도계산 결과에서 알 수 있듯이 전도대의 상태밀도는 Γ 밸리, L밸리 및 X밸리로 에너지가 증가할수록 상태밀도가 증가하며 Γ 밸리에서는 그림 1에서 알 수 있듯이 밸리구조상 폭이 매우 좁기 때문에 특히 낮은 상태밀도를 보이고 있는 것을 알 수 있다. 그림 7(a)에서 알 수 있듯이 여러 연구에서 광범위하게 사용되어왔던 1/8격자구조는 약 0.7eV까지 과소추정되고 있다는 문제점을 나타내고 있다. 이는 저에너지영역에서 중요한 역할을 하는 극성포논산란 및 불순물산란등의 계산에서 1/8격자구조를 사용할 수

없다는 것을 의미한다. 균등격자의 경우 사면체의 제한된 구조 때문에 곳곳에 피크를 나타내는 문제점이 도출되며 이는 1/128격자간격정도의 좁은 그리드를 사용하였을 때 비로서 사라지는 것을 알 수 있다. 그러나 1/128격자간격을 사용하였을 때 계산량은 매우 방대하게 된다는 문제점이 있다.



(a)

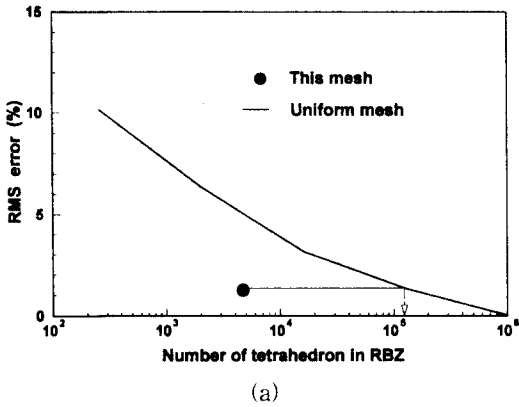


(b)

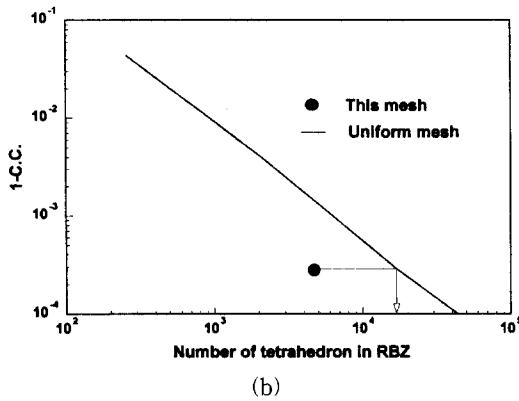
그림 7. 각 격자구조에 대한 상태밀도의 비교 (a) 전도대의 경우 (b) 가전자대의 경우
Fig. 7. Comparison of density of states for each mesh structure. (a) for conduction band (b) for valence band

본 연구에서 제시한 격자의 경우 짧은 시간내에 1/128격자의 경우와 매우 유사한 결과를 도출할 수 있었다. 동일한 알고리즘을 사용하였을 때, 계산시간은 결국 사면체의 수에 비례할 것이다. 그림 7(a)(b)의 상태밀도를 계산하기 위하여 사용된 RBZ내 격자점의 수 및 사면체의 수를 표 4에 나타내었다. 표 4에서 “본 연구의 격자”란에는 각 밴드의 격자점 및 사면체 수에 대한 평균값을 나타내었다. 표에서도 알 수 있듯이 본 연구에서 제시한 격자구조의 경우 1/128균등격자구조보다 약 220배정도 빨리 상태밀도를 계산할 수

있다는 장점을 보인다.



(a)



(b)

그림 8. 균등격자와 본 연구의 격자에 대한 상태밀도 비교 (a) 제곱평균오차 (b) 상관계수

Fig. 8. Comparison of density of states for uniform mesh and this mesh. (a) root mean square errors (b) correlation coefficients

표 4. 계산에 사용된 사면체의 수

Table 4. Number of tetrahedron used in calculation.

격자의 구조	RBZ내 격자점수	RBZ내 사면체의 수
1/8 격자	89	256
1/16 격자	505	2048
1/32 격자	3345	16384
1/128 격자	184129	1048576
본 연구의 격자	1266	4689

가전자대의 에너지구조는 그림 1에서 알 수 있듯이, 전도대보다 매우 단순하며 Γ 밸리, L밸리 및 X밸리간의 에너지차이도 크기 때문에 그림 7(b)와 같이 상태 밀도가 매우 간단하게 계산된다. 그러나 1/8격자의 경우 전도대에서와 마찬가지로 피크가 나타나는 문제점을 보이고 있다. 본 연구에서 제시한 격자구조와

1/128격자구조의 결과가 매우 유사한 것을 알 수 있다. 즉, 1/220정도의 계산시간으로 1/128격자의 경우와 거의 동일한 결과를 유도할 수 있는 것이다.

본 연구에서 계산한 여러 가지 상태밀도를 1/128격자구조의 경우를 기준으로 비교하였다. 즉, 각 상태밀도가 1/128격자구조에서의 상태밀도와 어느정도의 오차를 보이는지 조사하기 위하여 제곱평균(Root Mean Square; RMS)오차를 계산하였으며 각 상태밀도의 곡선형태를 비교하기 위하여 상관계수(Correlation Coefficient; C.C.)를 계산하였다. x 를 1/128격자에서의 상태밀도, y 를 비교하고자하는 격자구조의 상태밀도라고 하면, 상관계수 r 은

$$r = \frac{n \sum xy - \sum x \sum y}{\sqrt{(n \sum x^2 - (\sum x)^2)(n \sum y^2 - (\sum y)^2)}} \quad (2)$$

와 같이 표현된다.

그림 8(a)(b)에서 균등격자의 경우 RBZ내의 사면체수에 대한 오차와 상관계수를 실선으로 도시하였다. ●는 본 연구에서 제시한 격자구조에 대한 오차와 상관관계를 표시한 기호이다. 오차의 비교를 분석해 보면 4689개의 사면체를 가진 본 연구의 격자구조에 대한 오차가 약 130000개의 사면체를 가진 균등격자구조에서의 오차와 동일하며 상관관계에서는 약 18000개의 사면체를 가진 균등격자의 경우와 동일한 상관관계를 보임을 알 수 있다. 또한 RMS오차는 동일한 사면체수를 가진 균등격자의 경우보다 약 5배 향상되며 상관계수는 약 10배정도 향상된다. 이와같이 본 연구에서 제시한 사면체격자구조는 균등격자구조보다 우수한 결과를 보이는 것을 알 수 있다.

IV. 결론

본 연구에서는 폴밴드 GaAs의 전송특성을 조사하기 위한 사면체격자구조를 제안하였다. 즉, 폴밴드 E- k 관계를 이용하여 Monte Carlo 시뮬레이션할 때 저에너지영역과 고에너지영역에서 동시에 사용될 수 있는 산란율계산 및 전송특성분석을 위한 사면체구조를 제안하였다. 종래 주로 사용되어왔던 균등격자의 경우, 저에너지영역의 산란율을 계산하기 위해선 조밀한 사면체를 사용하여야만 하나 이는 브릴로우인 영역 전체에 대한 계산시 방대한 계산시간을 필요로하게 된다는 문제점이 발생한다. 이를 해결하기 위하여 본 연구에서는 에너지 영역에 관계없이 사용될 수 있는 최

적사면체격자구조를 제안하였다. 제안된 사면체격자구조의 유용성을 조사하기 위하여 8, 16, 32, 128로 균등절단한 격자구조와 상태밀도를 비교분석하였다. 본 연구에서 제시한 사면체구조는 RBZ 내에 4689개의 사면체를 가지며 이는 21개로 균등절단한 격자의 경우와 동일한 갯수이다. 상태밀도는 산란율계산에서 매우 중요한 역할을 하는 요소로써 고에너지영역에서는 해석학적모델을 이용하였을때와 매우 상이한 결과를 나타내므로 반드시 폴밴드 E-k관계를 이용하여야만한다. 균등격자구조의 경우 각 사면체에 해당하는 에너지의 분포에서 알 수 있듯이 절단간격이 조밀할수록 분포가 일정함을 알 수 있다. 즉, 절단간격이 큰 격자구조에서는 특히 저에너지영역에서 부정확한 계산값을 도출하는 문제점을 나타낸다. 128개로 절단한 격자구조에서도조차 저에너지영역의 사면체갯수가 고에너지영역과 비교할 때 상대적으로 매우 적은 것을 알 수 있다.

본 연구에서는 환산브릴로우인영역내에서의 에너지분포를 이용하여 사면체격자구조를 제안하였다. 환산브릴로우인영역에서의 에너지분포를 보면 가전자대가 전도대보다 매우 간단한 구조를 보이며 결과적으로 적은 수의 사면체구조만으로도 우수한 계산결과를 유도할 수 있다는 것을 알 수 있다. 또한 전도대에서 Γ밸리, L밸리 및 X밸리와 같이 저에너지영역뿐만이아니라 에너지의 변화가 심한 영역에서도 조밀한 사면체구조를 사용함으로써 계산오차를 줄였다. 즉, 본 연구에서 제시한 사면체격자구조에 대한 사면체의 에너지분포에서 알 수 있듯이 저에너지영역 및 에너지변화가 심한 영역에서 보다 많은 사면체를 분포시킴으로써 계산값의 정확도를 증가시켰다.

균등격자와의 상태밀도비교에서 알 수 있듯이 4689개의 사면체갯수만으로도 128개로 조밀하게 절단하여 약 100만개의 사면체를 가진 격자구조와 유사한 결과를 도출할 수 있었다. 결과적으로 균등절단한 격자구조보다 제곱평균오차는 약 5배, 상관계수는 약 10배정도 향상되는 것을 확인할 수 있었다. 그러므로 본 연구에서 제시한 격자구조는 향후 폴밴드 GaAs Monte Carlo 시뮬레이션을 이용한 전송특성 해석시 기본 격자구조로써 유용하게 사용할 수 있으리라고 사료된다.

참 고 문 헌

- [1] J.H.Chern, J.T.Maeda, L.A. Arledge, P. Yang, IEEE Trans. CAD, vol. 8 pp. 516-527,1989.
- [2] Y.Kamakura, H.Mizuno, M.Yamaji, M. Morifuji, K.Taniguchi, C.Hamaguchi, J. Appl. Phys., vol. 75, p. 3500, 1994.
- [3] H.K.Jung, K.Taniguchi, C.Hamaguchi, J. Appl. Phys., vol. 79, pp. 2473-2480, 1996.
- [4] H.K.Jung, H.Ohtsuka, K.Taniguchi, C.Hamaguchi, J. Appl. Phys., vol. 79, pp. 2559-2565, 1996.
- [5] J.R.Chelikowsky, M.L.Cohen, Phys. Rev. B, vol. 14, p. 556, 1976.
- [6] N.Sano, A.Yoshii, J. Appl. Phys., vol. 77 pp. 2020-2025, 1995.
- [7] C.Moglestue, *Monte Carlo Simulation of Semiconductor Devices*, Chapman & Hall, 1993.
- [8] E.Cartier, M.V.Fischetti, E.A.Eklund, F.R. McFeely, Appl. Phys. Lett. vol. 62, p. 3339 1993.
- [9] 정학기, 대한전자공학회, vol. 33A, pp. 2258-2265, 1996
- [10] J.P.Walter, M.L.Cohen, Phys. Rev. B, vol 5, pp. 3101-3110, 1972.
- [11] O.Jepson, O.K.Anderson, Solid State Comm., vol. 9, pp. 1763-1767, 1971.
- [12] T.Kunikiyo, M.Takenaka, Y.Kamakura, M.Yamaji, H.Mizuno, M.Morifuji, K. Taniguchi, C.Hamaguchi, J. Appl. Phys., vol. 75, pp. 297-312, 1994.
- [13] M.V.Fischetti, S.E.Laux, Phys. Rev. B, vol 38, pp. 9721-9745, 1988.
- [14] M.V.Fischetti, IEEE Electron Devices, vol. 38, p. 634, 1991.
- [15] J.Kolnik, Y.Wang, I.H.Oguzman, K. Brennam, J. Appl. Phys., vol. 76, p. 3542, 1994.