

GaAs 벌크에서 전자의 과도 전송 특성



A Study on the Transient Electron Transport in GaAs Bulk

임행삼*, 황의성*, 심재훈*, 이정일*, 홍순석**

(Haeng-Sam Lim, Eui-Sung Hwang, Jae-Hoon Shim, Jung-Il Lee, Soon-Seuk Hong)

Abstract

In this paper the transient electron transport in GaAs bulk is simulated by using ensemble Monte Carlo method. To analyze the transient electron transport the 10000 electrons in the Γ valley are simulated simultaneously for 10 picoseconds. The electric field-velocity relation is obtained. The high impurity density reduces the negative differential resistance effect. The result of transient average velocity shows the electron velocity in the transient state is faster than that in the steady state. This transient velocity overshoot is caused by the intervalley scattering mechanism. And we confirmed the fact that the energy relaxation time is longer than the momentum relaxation time.

Key Words(중요용어) : Ensemble Monte Carlo method(앙상블 몬테 카를로 방법), Transient velocity overshoot(과도 속도 오버슈트), Momentum relaxation time(운동량 이완 시간), Energy relaxation time(에너지 이완 시간), Intervalley scattering rate(계곡간 산란율).

1. 서 론

반도체 소자의 고속 동작 특성은 두 가지 중요한 요소에 의하여 결정되는데, 그 중 하나는 기생 정전 용량이나 기생 저항과 같은 회로 설계에서 발생하는 요소이고, 다른 하나는 반도체가 갖고 있는 고유한 전송 특성이다. 실리콘을 이용한 MOSFET는 공정 기술의 발전으로 인하여 점점 고속화되어 가고 있으나 실리콘 자체가 갖고 있는 전송 특성의 한계로 인하여 고속 동작을 필요로 하는 통신용 소자나 MMIC용 소자에 적용하는데 어려움이 있다. 한편, 실리콘의 대체 반도체로서 GaAs와 같은 화합물 반도체가 꾸준히 연구되어 왔으며, AlGaAs, InGaAs 등을 이용한 HEMT(High Electron Mobility Transistor), HBT(Heterojunction Bipolar Transistor)등이 차세대 소자로서 각광을 받고 있다.^{1,2)}

비평형 전송 특성이 잘 나타나는 서브미크론 소자의 전기적 특성에 대한 모델링 방법으로 표동-확

산 모델(drift-diffusion model)과 수력학적 모델(hydrodynamic model)은 열평형 상태에서 많이 벗어난 상태에 대한 해석에는 한계가 있다. 이에 반해 볼츠만 전송 방정식(Boltzmann transport equation)의 해를 푸는 한 방법으로서 몬테카를로 방법(MCM : Monte Carlo Method)이 많이 이용되고 있으며, 실험치에 매우 가까운 결과를 보여주고 있다.^{3,4,5)} 또한 이 방법은 소자의 단자 전류와 같은 전기적인 파라미터 추출에 이용될 뿐만 아니라 전자 속도와 같이 측정하기 어려운 미시적인 값들에 대한 정보도 얻을 수 있다. 이러한 이유 때문에 다른 반도체 소자 및 재료에 대한 연구 방법으로 광범위하게 이용되고 있다.^{6,7,8)} 몬테카를로 방법은 적용 범위에 따라 세가지로 분류할 수 있는데, 먼저 단일 입자 몬테카를로 방법(Single Particle MCM)은 반도체 벌크에서의 정상 상태 전송 특성 연구에 이용되고, 앙상블 몬테카를로 방법(Ensemble MCM)은 반도체 벌크에서의 과도 전송 특성 연구에 적용되고 있으며, 셀프컨시스턴트 앙상블 몬테카를로 방법(Self-Consistent Ensemble MCM)은 반도체 소자의 전기적 특성 연구에 이용된다.

본 연구에서는 앙상블 몬테카를로 방법을 이용하여 GaAs 벌크에서의 캐리어 전송에 대한 과도 특성을 연구하였다. 반도체 소자의 전기적 특성에 중

* : 홍익대학교 전자공학과

** : 홍익대학교 전자전산공학과

접수일자 : 1996년 10월 22일

심사완료 : 1997년 1월 28일

요한 영향을 미치는 전계에 대한 캐리어의 정상 상태 속도를 도우핑 농도를 파라미터로 하여 구하였다. 이 결과는 실험치⁵⁾와 몬테카를로 방법을 이용한 기존의 결과^{4,5)}와 잘 일치하였다. 또한 과도 전송 특성을 연구하기 위하여 전자의 속도와 계곡 점유율 등과 같은 미시적인 파라미터들의 시간에 따른 변화를 구하였다. 이를 통해 비평형 전송 효과인 과도 속도 오버슈트, 운동량/에너지 이완 시간(momentum/energy relaxation time)에 대하여 연구하였다.

2. 앙상블 몬테카를로 모델

앙상블 몬테카를로 방법은 반도체 벌크에서의 과도 전송 특성을 연구하는데 사용되며, 이 방법은 몬테카를로 입자로 모델링된 수천 또는 수만 개의 전자들의 운동을 정상 상태에 도달하는 시간 동안 시뮬레이션하면서 일정한 시간 간격마다 전자들에 대한 정보를 앙상블 평균하여 관심있는 물리량을 계산하는 것이다. 다음은 앙상블 몬테카를로 방법의 핵심인 전자에 대한 몬테카를로 입자 모델링에 대하여 언급하였다.

반도체 내의 전자의 상태는 공간 전하와 외부 바이어스 전압에 의한 전계와 산란 기구(scattering mechanism)에 의해 영향을 받는다. 반도체의 격자 구조에 따른 영향은 에너지 밴드(energy band) 모델에서의 유효 질량으로 나타난다. 몬테카를로 입자의 운동은 충돌간의 자유 비행과 충돌에 의한 급격한 운동 상태의 변화로 구분된다. 전자의 자유 비행 시간(free flight time)과 충돌 후의 운동량의 변화는 확률적으로 묘사하여 난수(random number) 발생을 통해 값이 결정된다.

에너지 밴드는 Γ , L , X 인 세 계곡을 고려하고 각 계곡에서의 비포물형 밴드(nonparabolic band) 형태로 다음과 같이 모델링된다.

$$E_{\mathbf{k}}(1 + \alpha E_{\mathbf{k}}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_d^*} \quad (1)$$

여기서, $E_{\mathbf{k}}$ 는 전자의 운동 에너지, α 는 비포물형 파라미터, \hbar 는 Planck 상수, \mathbf{k} 는 파수 벡터 \mathbf{k} 의 크기, m_d^* 는 상태 밀도 유효 질량(density-of-state effective mass)이다. 자유 비행 시간 동안의 파수 벡터의 변화는 다음 식으로부터 구해진다.

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -e\mathbf{F} \quad (2)$$

여기서, \mathbf{F} 는 전계이다. 전자의 운동량 $\hbar \mathbf{k}$ 에 따

른 전자의 위치 \mathbf{r} 와 속도 \mathbf{v} 의 시간에 따른 변화는 다음과 같다.

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v}(\mathbf{k}) \quad (3)$$

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m_d^*(1 + 2\alpha E_{\mathbf{k}})} \quad (4)$$

자유 비행 시간 τ 은 여러 가지 산란 기구에 대한 총 산란율과 가상 산란율(self-scattering rate)[5]을 합하여 전자의 에너지에 대해 일정한 산란율 Γ_0 를 가지고 다음 식으로부터 구해진다.

$$\tau = -\frac{\ln(r_1)}{\Gamma_0} \quad (5)$$

여기서, r_1 은 0과 1 사이의 난수이다. 충돌 후 전자의 운동량은 여러 산란 기구 중 새로운 난수에 의해 선택된 산란 기구에 의해 결정된다. 본 연구에서는 이온화된 불순물(ionized impurity) 산란, 음향 포논(acoustic phonon) 산란, 광학 포논(optical phonon) 산란, 극성 광학 포논(polar optical phonon) 산란, 계곡간 포논(intervalley phonon) 산란 등을 고려하였다.

3. 시뮬레이션 및 결과

본 연구에서 이루어진 앙상블 몬테카를로 시뮬레이션은 온도 300K에서 초기 조건으로 Γ 계곡에서 볼츠만 분포를 갖는 10000개의 전자들을 10ps 동안 시뮬레이션하였다. 시뮬레이션에 이용한 산란 기구들의 파라미터 값들은 표1에 나타내었다.

그림1은 불순물 농도가 $1 \times 10^{14} \text{cm}^{-3}$ 과 $1 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ 인 경우의 GaAs 벌크에서의 평균 속도와 전계와의 관계를 나타내었다. 임계 전계 이전까지 전자의 평균 속도는 급격하게 증가한 후, 임계 전계 이후부터 감소하고 있다. 이러한 현상은 유효 질량이 작은 Γ 계곡에 있던 전자들이 전계에 의해 얻은 운동 에너지가 증가하면서 계곡간 산란 기구에 의해 유효 질량이 큰 L 계곡으로 천이함에 따라 상대적으로 유효 질량이 큰 계곡에서의 전자 점유율이 증가하면서 전자의 평균 속도가 감소하는 것이다. 알려진 바와 같이 불순물 농도가 클수록 낮은 전계에서의 이동도가 적게 나타나고 있을 뿐만 아니라 부정 저항(negative differential resistance) 성분도 큰 불순물 농도에서 적어짐을 그림으로부터 알 수 있다.

그림2와 그림3은 여러 가지 균일 전계하에서 시간에 따른 전자들의 평균 속도와 평균 운동 에너지

표 1. GaAs 파라미터

Table 1. Parameters for GaAs

Bulk material parameter			
Mass density [Kg/m ³]	5.42 × 10 ³		
Sound velocity [m/s]	5.21 × 10 ³		
Low-frequency dielectric constant	12.90		
High-frequency dielectric constant	10.92		
Valley dependent parameter			
	<i>Γ</i> Valley	<i>L</i> Valley	<i>X</i> Valley
Effective mass ratio	0.067	0.350	0.430
Energy bandgap [eV]	1.425	1.714	1.888
Acoustic deformation potential [eV]	7.0	7.0	7.0
Optical deformation potential [eV]	0	3.0 × 10 ¹⁰	0
Optical phonon energy [eV]	0.0351	0.0351	0.0351
Number of equivalent valley	1	4	3
Intervalley phonon energy [eV]			
<i>Γ</i>	0	0.03	0.03
<i>L</i>	0.03	0.03	0.03
<i>X</i>	0.03	0.03	0.03
Intervalley deformation potential [eV/m]			
<i>Γ</i>	0	1.0 × 10 ¹¹	1.0 × 10 ¹¹
<i>L</i>	1.0 × 10 ¹¹	1.0 × 10 ¹¹	1.0 × 10 ¹¹
<i>X</i>	1.0 × 10 ¹¹	1.0 × 10 ¹¹	1.0 × 10 ¹¹

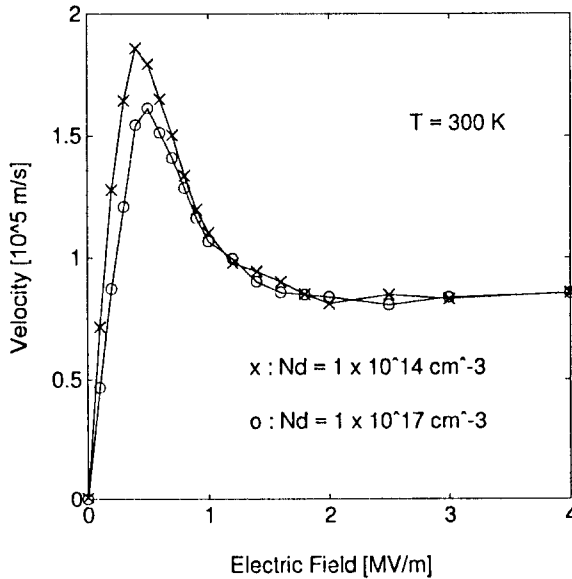


그림 1. 속도-전계 특성

Fig. 1. Velocity versus electric field characteristics.

의 변화를 각각 나타내었다. 전자들의 평균 속도가 정상 상태에 도달하기 전에 높은 전계에서 큰 과도 오버슈트(transient overshoot)가 나타나는데, 이것은 상대적으로 유효 질량이 큰 *L* 계곡에서의 전자 점유율이 증가하면서 나타나는 현상이다. 이로 인해 채널 길이가 짧은 소자의 경우 정상 상태에서의 속도보다 높은 속도를 가지고 채널을 이동하게 되

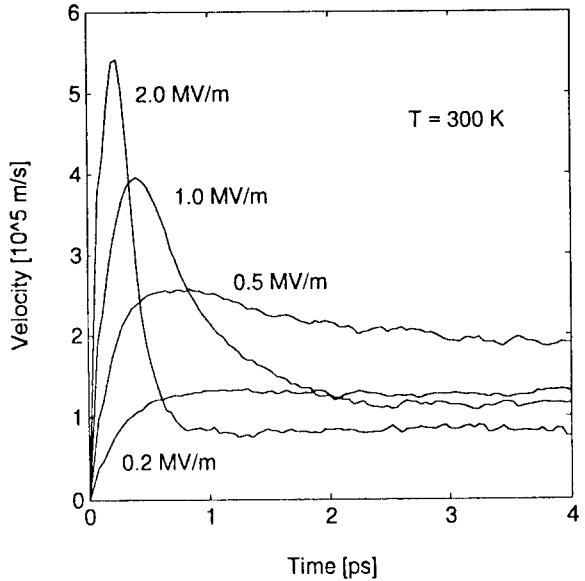


그림 2. 시간에 따른 평균 속도

Fig. 2. Time evolution of the mean velocity.

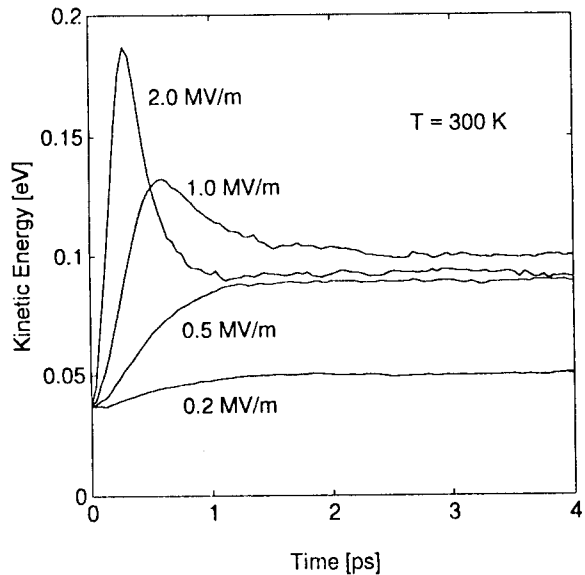


그림 3. 시간에 따른 평균 운동 에너지

Fig. 3. Time evolution of the mean kinetic energy.

므로 소자의 성능 향상을 기대할 수 있는 것이다. 두 그림에서 과도 상태를 지나 정상 상태에 이르는 시간을 비교해 보면 속도에 대해서 보다 빨리 정상 상태에 도달함을 할 수 있다. 이는 각각 전자의 운동량 이완 시간(momentum relaxation time)과 에

너지 이완 시간(energy relaxation time)에 관련되어진다.

그림4에서는 전계를 파라미터로 하여 시간에 따른 L 계곡에서의 전자 점유율의 변화를 나타내었다. 초기 상태에서 Γ 계곡에 있던 전자가 에너지를 얻으면서 계곡간 산란 기구에 의해 L 계곡으로 전이함에 따라 L 계곡에서의 전자 점유율이 증가된다. 1MV/m 이상의 강전계가 걸리는 경우 L 계곡에서의 전자 점유율이 Γ 계곡에서의 전자 점유율을 초과한다. 이로 인해 그림1에서와 같이 높은 전계에서의 전자의 평균 속도는 낮은 전계에서 보다 낮은 값을 갖게 되면서 부정 저항 성분이 나타나는 것이다.

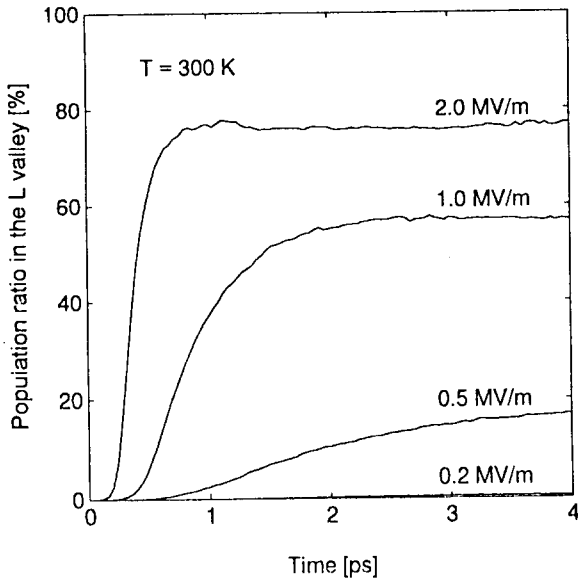


그림 4. 시간에 따른 전자의 L계곡 점유율
Fig. 4. Population ratio in the L valley versus time.

그림5는 초기에 Γ 계곡에 있던 전자가 1MV/m의 전계하에서 10ps 동안 시뮬레이션한 후 파수 벡터 공간에서의 분포를 그린 것이다. 그림4에서 알 수 있듯이 약 57%의 전자들이 L 계곡에 해당하는 [1,1,1] 방향의 Brillouin zone 경계 부분에 분포되어 있다. 이 그림을 그리기 위하여 8개의 등가 계곡(equivalent valley)에서의 각 점유율은 균일하게 하였다. X 계곡에 있는 전자는 시뮬레이션한 10000개의 전자 중 2개에 불과하였다.

그림 6는 그림 2에서의 1MV/m 전계에 대한 전자들의 평균 속도의 변화 중에서 초기 상태, 평균

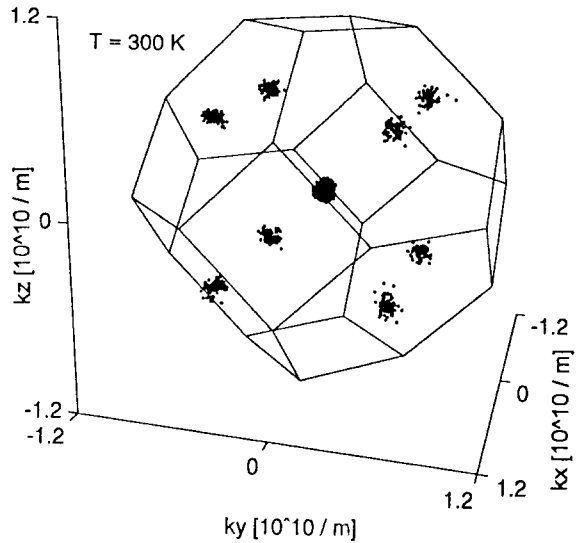


그림 5. 파수벡터 공간에서의 전자 분포
Fig. 5. Distribution of electrons in the Brillouin-zone.

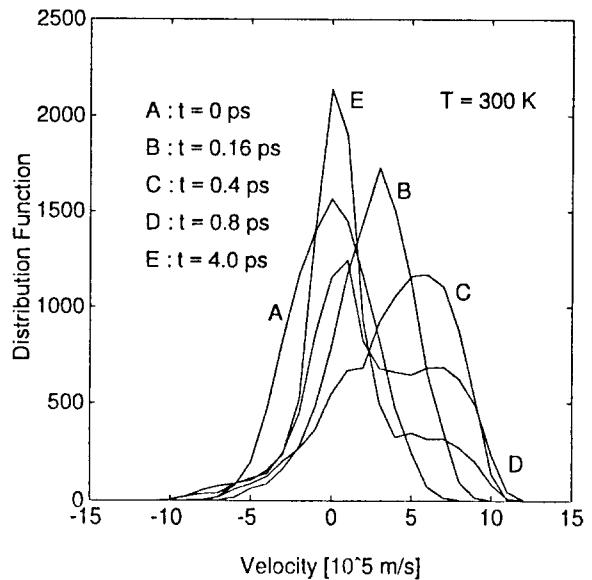


그림 6. 전자의 속도 분포 함수
Fig. 6. Distribution function for electrons.

속도가 2.5×10^5 m/s인 시점(0.16ps, 0.8ps), 평균 속도가 최고치인 시점(0.4ps), 정상 상태인 시점에서의 속도 분포를 그린 것이다. 초기에 맥스웰 분포 형태에서 과도 상태를 지나 정상 상태에서는 맥스웰 분포와는 다른 형태를 보여주고 있다. 이러한 분포 함수 형태는 강전계에서의 속도-전계 관계식에

대한 해석적인 유도를 어렵게 만드는 요인이 된다.

그림 7은 전자의 초기 분포를 맥스웰 분포로 하고 5ps동안 1MV/m의 전계가 인가된 후 전계를 제거하여 평균 운동량과 평균 총 에너지의 시간에 따른 변화를 나타낸 것이다. 이 그림은 운동량 이완 시간과 에너지 이완 시간을 나타내는 것으로 운동량 이완 시간이 에너지 이완 시간보다 적음을 보여 주고 있다. 이러한 두 이완 시간의 불일치는 과도 속도 오버슈트 현상의 원인을 제공하며, 실리콘의 경우 특정 조건에서 과도 속도 오버슈트 현상의 발생의 주 원인으로 해석되어진다²⁾.

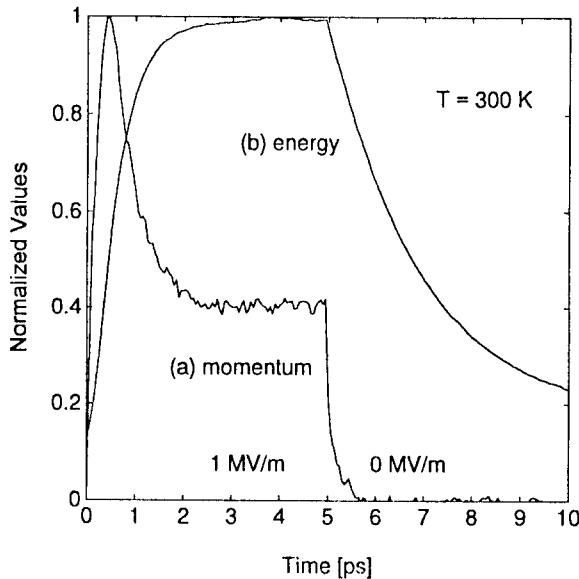


그림 7. 시간에 따른 평균 운동량(a)과 평균 에너지 (b)의 변화

Fig. 7. Time evolution of the mean momentum(a) and the mean energy(b)

4. 결 론

본 연구에서는 앙상블 몬테카를로 방법을 이용하여 GaAs 벌크에서의 전계-속도 관계, 비평형 전송 효과인 과도 속도 오버슈트, 운동량/에너지 이완 시간 등을 연구하였다. 전자의 과도 전송 특성을 분석하기 위하여 10000개의 전자들을 10ps 동안 시뮬레이션하였다. 시간에 따른 전자의 평균 속도에 대한 결과로부터 과도 속도 오버슈트 현상을 확인하였다. 이러한 현상이 계곡간 산란 기구에 의한 것이며, 시간에 따른 계곡간의 전자 점유율을 통해 확인할 수 있었다. 전계의 급격한 변화를 줌으로써 에너지 이완 시간이 운동량 이완 시간보다 크다는 것을

알 수 있었으며, 불순물 농도를 크게 함으로써 부정 저항 성분을 줄일 수 있음을 확인하였다.

※ 본 연구는 1995년도 홍익대학교 학술연구 조성비에 의하여 연구되었음.

참 고 문 헌

1. M. B. Das, "Millimeter-wave performance of ultrasubmicrometer-gate field effect transistors: A comparison of MODFET, MESFET, and PBT structure," *IEEE Trans. Electron Dev.*, vol. ED-34, no.7, pp.1429-1440, July 1987.
2. D. Widiger, I. C. Kizilyalli, K. Hess, and J. J. Coleman, "Two-dimensional transient simulation of an idealized high electron mobility transistor," *IEEE Trans Electron Dev.*, vol. ED-32, pp.1092-1102, June 1985.
3. C. Jacoboni and L. Reggiani, "The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with application to covalent materials," *Rev. of Mod. Phys.*, vol. 55, pp.645-705, 1983.
4. W. Fawcett, A.D. Boardman, and S. Swian, "Monte Carlo determination of electron transport properties in Gallium Arsenide," *J. Phys. Chem. Solids*, vol. 31, pp.1963-1990, 1970.
5. C. Moglestue, *Monte Carlo Simulation of Semiconductors Devices*, Chapman & Hall, 1993.
6. U. Ravaioli and D. K. Ferry, "MODFET ensemble Monte Carlo Model including the quasi-two-dimensional electron gas," *IEEE Trans Electron Dev.* vol. ED-33, no. 5, pp. 677-681, May 1986.
7. K. Tomizawa and N.Hshizume, "Ensemble Monte Carlo simulation of an AlGaAs/GaAs heterostructure Mis-like FET," *IEEE Trans Electron Dev.*, vol. 35, no. 7, pp.849-856, July 1988.
8. M. Lundstrom, *Fundamentals of Carrier Transport*, Vol. X of the Modular Series on Solid State Devices, Addison-Wesley, Reading, MA, 1990.

9. S. Adachi, "GaAs, AlAs, and $Al_xGa_{1-x}As$: Material parameters for use in research and

device application," *J. Appl. Phys.*, vol. 58, pp.R1-R29, August 1985.

시사소개

임형삼



1966년 12월 11일생. 1990년 2월 홍익대학교 전자공학과 공학사. 1992년 2월 동대학교 대학원 전자공학과 공학석사. 1992년 2월- 현재 홍익대학교 대학원 전자공학과 박사과정.

이정일



1954년 9월 17일생. 1985년 2월 서울산업대학 전자공학과 공학사. 1988년 2월 건국대학교 대학원 전자공학과 공학석사. 1993년-현재 홍익대학교 대학원 전자공학과 박사과정. 1995년-현재 경민전문대학 전산정보처리과 교수.

황의성



1971년 2월 23일생. 1995년 2월 홍익대학교 전자전산공학과 공학사. 1996년-현재 홍익대학교 대학원 전자공학과 석사과정.

홍순석



1964년-1971년 인하대학교 전기공학과 졸업. 1972년-1974년 동 대학교 대학원 전기공학과 공학석사. 1989년-1993년 동 대학교 대학원 전자공학과 공학박사. 1996년-현재 홍익대학교 전자전산공학과 교수.

심재훈



1968년 2월 7일생. 1991년 2월 홍익대학교 전자공학과 공학사. 1993년 2월 동 대학교 대학원 전자공학과 공학석사. 1993년-현재 홍익대학교 대학원 전자공학과 박사과정.