
풀밴드 몬테카를로 방법을 이용한 GaAs 임팩트이온화의 온도 의존성에 관한 연구

고석웅*, 유창관*, 정חק기*

A Study on the Temperature dependent Impact Ionization for GaAs using the Full Band Monte Carlo Method

Suk-Woong Ko, Chang-Kwan You, Hak-Kee Jung

이 논문은 1999학년도 군산대학교 학술연구비에 의하여 지원되었음

국문요약

임팩트이온화현상은 소자의 크기가 점점 작아지면서, 높은 에너지에 있는 hot carrier 전송을 해석하기 위해 매우 중요하므로 소자의 시뮬레이션에 정확한 임팩트이온화모델이 필수적이다. 본 연구에서는 의사포텐셜방법을 사용하여 풀밴드모델을 구하고, 임팩트이온화율은 수정된 Keldysh 공식을 이용하여 유도하였다.

본 연구에서는 GaAs 임팩트이온화의 온도의존특성을 조사하기 위하여 Monte Carlo 시뮬레이터를 제작하여 임팩트이온화계수를 구하였다. 결과적으로, 임팩트이온화계수는 300K에서 실험값과 잘 일치하였다. 또한 에너지는 전계가 증가할수록 증가하고, 높은 온도에서는 포논 산란의 emission mode가 높기 때문에 에너지가 감소함을 알 수 있었다. 임팩트이온화의 대수 fitting 함수 식은 온도와 전계에 대해 2차식으로 표현하였다.

대수 fitting 함수의 오차는 대부분 5%이내에 머물렀다. 그러므로 대수식으로 표현된 임팩트이온화계수는 온도에 의존함을 알았고, 임팩트이온화계수를 구하는데 시간을 절약할 수 있다.

Abstract

As device dimensions are fastly scaled down, impact ionization(I.I.) events are very important to analyze hot carrier transport in high energy region, and the exact model of impact ionization is demanded on device

* 군산대학교 전자정보공학부 반도체 및 통신소자 분야
접수일자 : 2000년 6월 20일

simulation. We calculate full band model by empirical pseudopotential method and the impact ionization rate is derived from modified Keldysh formula.

We calculate impact ionization coefficients by full band Monte Carlo simulator to investigate temperature dependent characteristics of impact ionization for GaAs as a function of field. Resultly impact ionization coefficients are in good agreement with experimental values at 300K. We know energy is increasing along increasing the field, while energy is decreasing along increasing the temperature since the phonon scattering rates for emission mode are very high at high temperature. The logarithmic fitting function of impact ionization coefficients is described as a second orders function of temperature and field.

The residuals of the logarithmic fitting function are mostly within 5%. We know, therefore, the logarithm of impact ionization coefficients has quadratic dependence on temperature, and we can save time of calculating the temperature dependent impact ionization coefficients as a function of field.

I. 서론

반도체 소자의 크기가 점점 작아지면서 높은 에너지를 얻은 전자전송특성을 해석하기 위해서는 기존의 해석학적 모델로는 한계에 이르고 있으며, 보다 우수한 전송모델이 필요하게 되었다. 이를 위하여 풀밴드모델에 대한 관심이 고조되고 있으나 풀밴드를 이용한 산란율을 해석하기 위해서는 방대한 컴퓨터시스템과 계산시간이 소요되고 있어 아직 연구가 미흡한 상태이다. 본 연구에서는 GaAs의 전자전송해석을 위해 각 온도(4.2K, 77K, 300K, 400K, 500K)에 따른 풀밴드 모델을 제시하고 이 모델을 이용한 포논산란 및 임팩트이온화율을 계산하고 풀밴드 Monte Carlo 시뮬레이션에서 임팩트이온화계수를 구하여 임팩트이온화의 전계 변화에 따른 온도의존특성을 조사하고자 한다.

임팩트이온화는 hot carrier에 의한 산란에 의하여 전자-정공쌍을 생성하는 과정으로써 포논산란과 함께 hot carrier 전송에 중요한 메카니즘이다. 본 연구에서는 해석학적 포물선 에너지 밴드구조에서 유도된 Keldysh공식을 수정하여 임팩트이온화율을 구하고자 한다^[1]. 포논산란은 지금까지 임팩트이온화계수에 대한 실험값과 정합시키기 위하여 변형 포텐셜을 파라미터로 조정한 산란율을 사용하였으나, 변형포텐셜이 상수가 아님이 밝혀지면서 정확한 포논산란율을 구하기 위하여 변형포텐셜의 브릴로우인 영역에서의 변화를 고려한 포논산란율을 풀밴드에서 유도할 것이다.

산란을 해석시 파수 및 주파수에 의존하는 $\epsilon(q, \omega)$ 를 풀밴드모델을 이용하여 계산한 결과를 사용할 것이다. 또한 온도와 전계에 따른 임팩트이온화계수를 구하는 시간을 절약할 수 있는가에 대하여도 조사할 것이다.

II. 풀밴드 구조

높은 에너지를 갖고 있는 전자전송을 해석하기 위해서는 풀밴드모델이 필수적이다. 본 연구에서는 실험값과 일치하는 GaAs의 E-k관계를 구하기 위하여 의사포텐셜방법(empirical pseudopotential method)을 사용하였다^[2]. 여기에서는 113개의 역격자 벡터 G를 이용하여 다음과 같이 주어진 헤밀토니안 $H^{ij}(k)$ 의 고유값을 구함으로써 풀밴드 구조를 구하였다.

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

$$V_s(G_i - G_j) \cos[(G_i - G_j) \cdot r]$$

$$+ iV_a(G_i - G_j) \sin[(G_i - G_j) \cdot r] \text{ for } i \neq j$$

..... (1)

여기서 k는 브릴로우인 영역내의 파수이고, G_i와 G_j는 두 개의 역격자벡터를 나타낸다. 그리고 V_s와 V_a는 의사포텐셜 form factor의 대칭성과 비대칭성을 나타내는 함수로써

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

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

..... (2)

와 같이 주어지며 v_1 과 v_2 는 Ga과 As의 의사포텐셜 form factor를 나타내며, steepest descent 방법^[3]을 사용하여 구한 form factor를 표 1에 나타내었다.

표 1. 의사포텐셜 form factor
Table 1. Emperical pseudopotential form factor

	V_3^s	V_8^s	V_{11}^s	V_3^a	V_4^a	V_{11}^a
4.2K	-0.239	0.0185	0.0510	0.0783	0.0527	0.00649
77K	-0.236	0.0167	0.0505	0.0794	0.0532	0.0050
300K	-0.235	0.0164	0.05	0.0786	0.0525	0.0051
400K	-0.233	0.0163	0.0496	0.0783	0.0521	0.00502
500K	-0.230	0.0160	0.0490	0.0782	0.051	0.0048

Ⅲ. 포논산란

지금까지 포논산란율은 임팩트이온화율에 대한 실험값을 정합시키기 위하여 변형포텐셜을 상수로 적당히 조정하여 사용하였다. 그러나 이것은 높은 에너지영역에서 정확한 포논산란율이 요구되는 hot carrier 전송해석에는 적당하지 못하며 변형포텐셜이 상수가 아닌 경우라면 더욱 정확한 포논산란율이 Monte Carlo 시뮬레이션에서 요구되었다^[4]. 폴밴드 Monte Carlo 시뮬레이션에서 사용할 수 있는 포논산란율은 $P_{ph}(E)/D(E)$ 의 선형함수 $aE+b$ 를 구하여 이용하였다. 즉,

$$P_{ph}(E) = (aE + b)D(E) \dots\dots\dots (3)$$

여기서 a, b는 각 포논모드에 따라 결정되는 상수로 각 온도에 따라 표 2에 나타내었다. $D(E)$ 는 역격자 공간내의 미소체적에서 에너지상태를 나타내는 상태밀도로 폴밴드 모델을 이용하여 구하였으며, 상태밀도를 구하기 위하여 미소체적을 6개의 동일한 사면체로 분할하여 각 사면체에 대해 등에너지면을 구하는 사면체방법(tetrahedron method)를 이용하였다^[5].

그림 1은 식(3)에서 구한 상수들을 이용하여 에너지가 0~5eV까지의 포논산란율을 각 온도별로 나타낸 것이며 그림 내부에 300K일 때의 상태밀도 함수도 함께 도시하였다. 그림에서 알 수 있듯이 온도가 증가할수록 포논산란율이 증가함을 알 수

있다. 이것은 온도가 증가할수록 높은 포논산란율에 의하여 그만큼 임팩트이온화가 발생될 확률이 적어짐을 보여주고 있는 것이다.

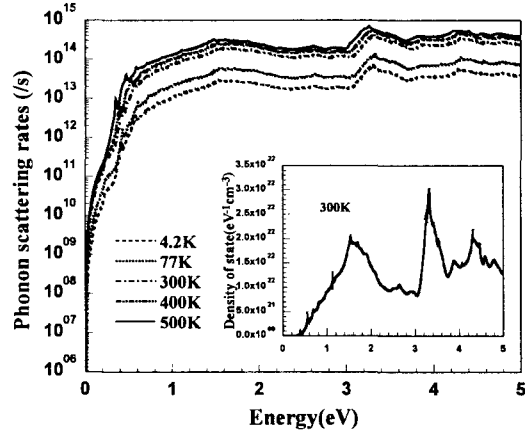


그림 1. 식(3)으로 계산된 포논산란율
Figure 1. Phonon scattering rate calculated by Eq. (3)

표 2. 포논모드에 따른 계수 값 (cm³sec⁻¹)

Table 2. Coefficients value of phonon scattering mode

Temp	Coe.	Optic(ab.)	Optic(em.)	Acoustic(ab.)	Acoustic(em.)
4.2K	a	2.793×10^{-30}	1.154×10^{-10}	1.78×10^{-14}	3.479×10^{-10}
	b	-4.207×10^{-37}	1.781×10^{-10}	1.302×10^{-13}	5.555×10^{-10}
77K	a	2.468×10^{-12}	1.169×10^{-10}	1.875×10^{-10}	5.277×10^{-10}
	b	3.897×10^{-12}	1.821×10^{-10}	4.305×10^{-10}	1.011×10^{-10}
300K	a	6.524×10^{-11}	1.766×10^{-10}	1.027×10^{-10}	1.357×10^{-10}
	b	1.065×10^{-10}	2.889×10^{-10}	2.408×10^{-10}	3.0×10^{-10}
400K	a	9.89×10^{-11}	2.088×10^{-10}	1.468×10^{-10}	1.803×10^{-10}
	b	1.669×10^{-10}	3.53×10^{-10}	3.26×10^{-10}	3.847×10^{-10}
500K	a	1.356×10^{-10}	2.468×10^{-10}	1.788×10^{-10}	2.114×10^{-10}
	b	2.29×10^{-10}	4.163×10^{-10}	4.31×10^{-10}	4.925×10^{-10}

Ⅳ. 임팩트이온화

임팩트이온화는 전도대의 전자(상태 1)가 가전자대의 전자(상태 2)와 충돌하여 전자-정공쌍이 생성되며 결과적으로 전도대에 두 개의 전자(상태1'와 2')와 가전자대에 정공(상태 2)을 남기게 되는 과정으로 임팩트이온화율을 구하기 위하여 Fermi의

황금법칙과 폴밴드모델을 이용하여 다음과 같은 식을 이용하였다.

$$S_{ii}(k_1, k_2, k_1', k_2') = \frac{2\pi}{\hbar} (|M_d|^2 + |M_e|^2 + |M_d - M_e|^2) \dots (4) \times \delta(E_1 + E_2 - E_1' - E_2')$$

여기서 행렬요소 $|M_d|$ 는 direct항, $|M_e|$ 는 exchange 항 그리고 $|M_d - M_e|$ 는 상호간섭항이다. 또한 δ 함수는 에너지보존을 나타낸다. 행렬요소 계산시 전도대 내의 전자와 가전자대의 전자사이의 상호작용은 다음식과 같이 표시되는 쿨롱포텐셜을 이용하였다.

$$V(r_1, r_2) = \frac{1}{\Omega} \sum_q \frac{e^2}{\epsilon_0 \epsilon(q, \omega) q^2} e^{iq \cdot (r_1 - r_2)} \dots (5)$$

여기서 Ω 는 시료의 체적, $\epsilon(q, \omega)$ 는 파수와 주파수에 의한 유전함수를 나타내고 있다. 식(5)에서 사용된 유전함수 $\epsilon(q, \omega)$ 는 다음식에 의하여 계산하였다^[6].

$$\epsilon(q, \omega) = 1 + \frac{e^2}{\epsilon_0 q^2 \Omega} \sum_k \sum_v \sum_c \langle c, k+q | e^{iq \cdot r} | v, k \rangle \times \{ [E_c(k+q) - E_v(k) - \hbar\omega - i\zeta]^{-1} + [E_c(k+q) - E_v(k) + \hbar\omega + i\zeta]^{-1} \} \dots (6)$$

여기서 v 와 c 는 가전자대와 전도대를 각각 표시

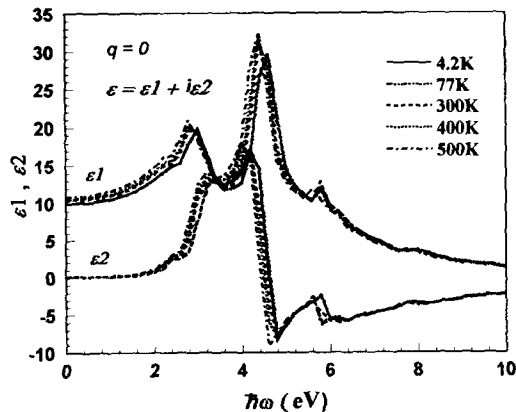


그림 2. q=0일 때 주파수에 의존하는 유전함수
Figure 2. Frequency dependence of the dielectric function when q=0

하며, ζ 는 양의 극소치이다. 그림 2에 각 온도별로 파수와 주파수에 의존하는 유전함수 $\epsilon(q, \omega)$ 를 나타내었다.

상태 1로부터 모든 가능한 상태로의 산란율을 계산하기 위하여 k_1, k_2, k_2' 에 대한 평균을 구하였다.

$$P_{ii}(k_1) = \frac{1}{2} \sum_{k_1'} \sum_{k_2} \sum_{k_2'} P_{ii}(k_1, k_2, k_1', k_2') \dots (7)$$

$P_{ii}(k_1, k_2, k_1', k_2')$ 와 $P_{ii}(k_1, k_2, k_2, k_1')$ 는 동일한 과정이나 실제 계산에서는 두 번 계산되므로 1/2로 나누어 주었다. 이렇게 구한 P_{ii} 를 에너지에 대한 함수로 나타내기 위하여 수정된 Keldysh공식을 사용하였다. 즉, 식 (8)처럼 보다 정확한 값을 Monte Carlo 시뮬레이션에 사용하기 위하여 각 온도에 대하여 두 개의 에너지영역으로 나누어 fitting시켰다.

그림 3은 수정된 Keldysh공식을 통해 얻은 임팩트이온화율을 각 온도에 따라 나타내었다. 심볼은 계산을 통하여 얻은 결과이며, 선들은 식 (8)에 의하여 fitting된 결과를 나타내고있다.

$$P_{ii}(E) / \text{sec} = 5.73 \times 10^{10} (E - 2.09)^{5.5} \quad \text{at } 4.2K$$

$$2.5 \times 10^{10} (E - 1.71)^{8.64} \quad 1.71 \leq E \leq 3.41$$

$$7.1 \times 10^{10} (E - 1.71)^{5.67} \quad 3.41 \leq E \quad \text{at } 77K$$

$$7.0 \times 10^{10} (E - 1.73)^{7.85} \quad 1.73 \leq E \leq 3.39$$

$$1.1 \times 10^{11} (E - 1.73)^{5.0} \quad 3.39 \leq E \quad \text{at } 300K$$

$$9.0 \times 10^{10} (E - 1.73)^{7.59} \quad 1.73 \leq E \leq 3.36$$

$$3.1 \times 10^{11} (E - 1.73)^{5.66} \quad 3.36 \leq E \quad \text{at } 400K$$

$$2.0 \times 10^{11} (E - 1.72)^{8.62} \quad 1.72 \leq E \leq 3.55$$

$$5.5 \times 10^{11} (E - 1.72)^{3.27} \quad 3.55 \leq E \quad \text{at } 500K$$

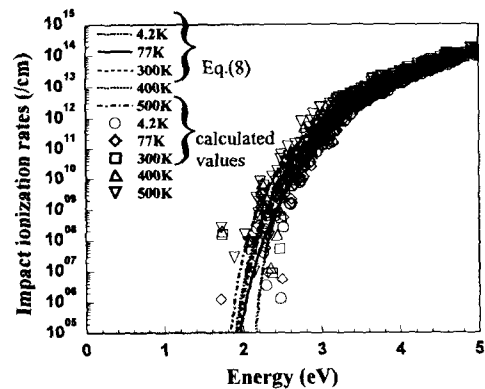


그림 3. 계산된 임팩트이온화율
Figure 3. Impact ionization rate calculated in this study

그림에서 알 수 있듯이 임팩트이온화는 앞에서 구한 포논산란의 경우와는 달리 온도에 큰 영향을 받지 않음을 알 수 있다. 또한 낮은 에너지 영역에서는 매우 큰 폭으로 변화하므로 비등방성특성을 보이거나 높은 에너지로 갈수록 등방성특성이 나타남을 알 수 있다.

V. Monte Carlo Simulation

풀밴드에서 계산된 각 산란율과 포논분산관계, 에너지 상태밀도등을 입력값으로 하는 Monte Carlo 시뮬레이터를 제작하여 임팩트이온화계수를 구하였다. 이때 각 온도별로 안정된 결과를 얻을 수 있는 전자수를 사용하였으며, 4psec까지 시뮬레이션하여 2psec이후의 값을 이용하였다. 또한 임팩트이온화가 일어난후 2차전자의 평균에너지를 온도와 전계별로 각각 구하였으며, 이것을 그림 4와 5에 나타내었다.

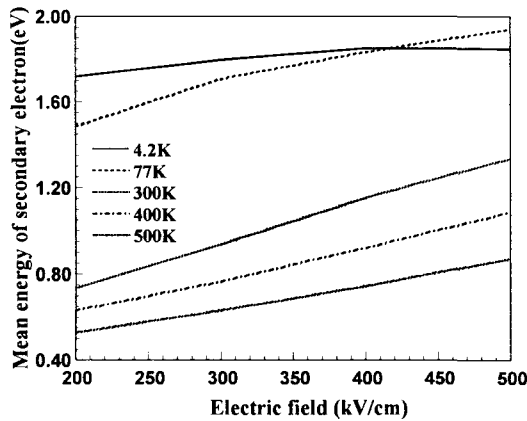


그림 4. 전계에 따른 평균에너지
Figure 4. Mean energy of secondary electron as a function of the electric field

본 연구에서는 임팩트이온화계수를 구하는데 많은 시간이 소비되는 것을 줄이기 위하여 온도와 전계에 따른 임팩트이온화계수를 대수로 fitting시켜 다음과 같은 2차식을 얻었다.

$$\log[I.I.(T, F)] = \sum_{i=0}^2 \sum_{j=0}^2 a_{ij} b_{ij} \dots\dots\dots (9)$$

여기서 T 는 온도(K)이고 F 는 전계(kV/cm)이다. 그리고 a_{ij} parameter값들과 b_{ij} 를 표 3에 나타내었다.

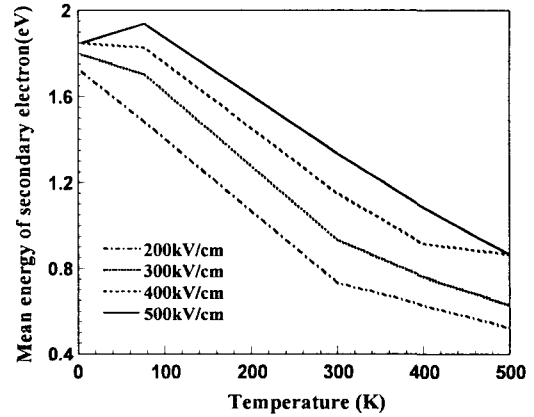


그림 5. 온도에 따른 평균에너지
Figure 5. Mean energy of secondary electron as a function of the temperature

표 3. a_{ij} parameter값과 b_{ij}

Table 3. Parameters of a_{ij} and b_{ij}

		parameter values		
a_{ij}	a_{00}	4.33657	-0.0276128	2.65675×10^{-3}
	a_{01}	0.0029222	0.000110949	-1.57221×10^{-7}
	a_{02}	-2.369×10^{-6}	-1.148×10^{-7}	1.8776×10^{-10}
b_{ij}	b_{00}	1	T	T^2
	b_{01}	F	TF	$T^2 F$
	b_{02}	F^2	TF^2	$T^2 F^2$

식(9)에 온도와 전계값들을 대입시켜 얻은 임팩트이온화계수와 Monte Carlo 시뮬레이션을 통해 얻은 임팩트이온화계수를 그림 6에 나타내었고, 이들의 오차를 구해본 결과 대부분 5%이내에 머물렀으며, 그림 7에 그 결과를 나타내었다.

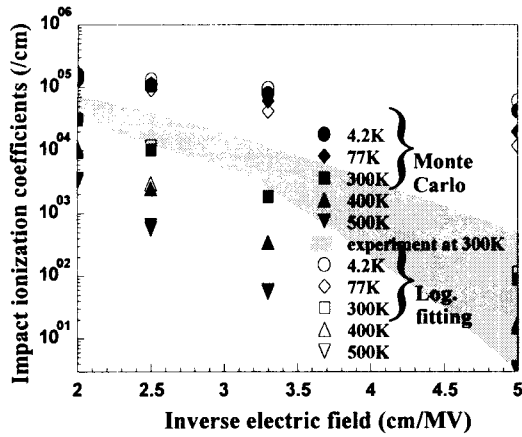


그림 6. Monte Carlo시뮬레이션 결과와 대수 fitting 임팩트이온화계수의 비교

Figure 6. Comparison of the Monte Carlo simulation with the logarithmic fitting function for impact ionization coefficients

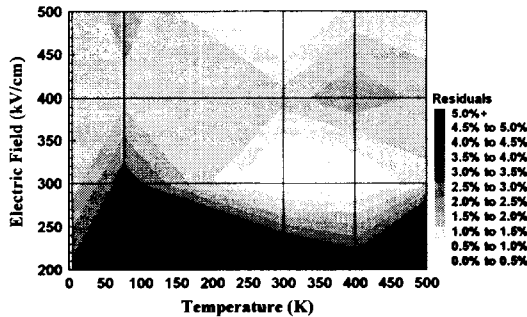


그림 7. Monte Carlo시뮬레이션과 대수 fitting의 오차

Figure 7. Residuals of the Monte Carlo simulation and logarithmic fitting

결과적으로 300K에서 실험값과 일치하는 결과를 얻었으며^{[7]-[10]}, 낮은 온도에서는 임팩트이온화가 자주 발생하지만 온도가 높아질수록 임팩트이온화가 일어날 확률이 적어짐을 알 수 있다. 또한 전계가 증가할수록 임팩트이온화율이 증가하며 온도가 증가할수록 포논산란율의 emission mode의 증가로 에너지가 감소하지만, 전계가 증가할수록 에너지는 증가함을 알 수 있다.

VI. 결론

GaAs 임팩트이온화의 온도 의존특성을 전계에 따라 알아보기 위하여 의사포텐셜방법을 사용하여 풀밴드구조를 구하였으며, 각 산란율과 포논분산관계, 그리고 에너지 상태밀도등을 풀밴드에서 구해 Monte Carlo시뮬레이션을 행하여 임팩트이온화계수를 구하였다. 포논산란율을 구한 결과 온도가 증가할수록 포논산란이 증가함을 알 수 있었으며, 4가지 포논모드중 emission 모드 값이 높아짐을 알 수 있었다. 이로 인하여 시뮬레이션 결과 임팩트이온화계수는 온도가 높아질수록 작아짐을 알 수 있었다. 또한 300K에서 임팩트이온화계수는 실험 값들에 포함되어지므로 본 논문에서 구한 임팩트이온화가 타당함을 입증하였다. 또한 임팩트이온화후 이차전자의 평균에너지를 온도와 전계에 대하여 구한 결과 온도가 높아짐에 따라 포논산란중 emission 모드의 증가로 인하여 작아지는 반면, 전계가 증가할수록 이차전자의 평균에너지는 점점 증가함을 알 수 있었다. 즉, 높은 포논산란율에 의하여 임팩트이온화가 일어날 확률이 적어 온도에 상당히 의존하고 있음을 알았으며, 또한 전계가 증가하면서 임팩트이온화가 많이 일어나 전계에도 의존하고 있음을 알았다.

본 연구에서는 임팩트이온화계수를 구하기 위한 시간을 줄이기 위하여 Monte Carlo 시뮬레이션을 통해 얻은 임팩트이온화계수 값들을 온도와 전계에 대하여 2차식을 갖는 대수함수식으로 fitting시켰다. 그 결과 오차는 대부분 5%이내에 머물렀다. 그러므로 이 대수함수식을 이용하여 온도와 전계값을 대입해주면 그동안 임팩트이온화계수를 구하기 위해 소비했던 많은 시간을 절약할 수 있을 것이다. 앞으로 이 오차의 범위를 줄여 보다 정확한 임팩트이온화계수를 구할 수 있도록 노력할 것이다.

참고문헌

[1] H. K. Jung, K. Taniguchi, C. Hamaguchi, "Impact ionization model for full band Monte Carlo simulation in GaAs", J. Appl. Phys., vol. 79, pp.2473-2480, 1996

[2] M. L. Cohen and T. K. Bergstresser, "Band structures and pseudopotential form factors for fourteen semiconductors of the diamond and zinc-blend structures" Phys., Rev., vol. 141, pp.789-796, 1966

[3] H. H. Rosenbrock: Comput. J. vol. 3, p.175, 1960

[4] S. Zollner, S. Gopalan and M. Cardona, "Microscopic theory of intervalley scattering in GaAs: k dependence of deformation potentials and scattering rates" J. Appl. Phys., vol. 68, pp.1682-1693, 1990

[5] O. Jepsen and O. K. Anderson, "The electronic structure of h.c.p. ytterbium", Solid State Comm., vol. 9, pp.1763-1767, 1971

[6] J. P. Walter and M. L. Cohen, Phys. Rev. B, vol. 5., pp.3101-3110, 1972

[7] G. E. Bulman, V. M. Robbins, K. F. Brennan, K. Hess, and G. E. Stillman, "Experimental determination of impact ionization coefficient in <100> GaAs", IEEE Electron Device Lett., EDL-4, no. 6, pp.181-185, June 1983

[8] M. Ito, S. Kagawa, T. Kaneda, and T. Yamaoka, "Ionization rates for electrons and holes in GaAs", J. Appl. Phys., vol. 49B, pp.4607-4608, 1978

[9] H. D. Law and C. A. Lee, "Interband scattering effects on secondary ionization coefficients on GaAs", Solid State Electron, vol. 21, pp.331-340, 1978

[10] H. K. Jung, H. Nakano, K. Taniguchi, "Numerical of crystallographic direction-dependent impact ionization process on GaAs", Physica B, vol. 272, pp.243-246, 1999



정 학 기(鄭鶴起)

1983년 2월 아주대학교 전자공학
학과 졸업(BS)
1985년 2월 연세대학교 대학원
전자공학과 석사과정
졸업(MS)

1990년 8월 연세대학교 대학원 전자공학과 박사과
정 졸업(Ph. D.)

1994년 7월 ~ 1995년 7월 일본 오사카대학 객원
연구원

1996년 3월 ~ 군산대학교 전자공학과 부교수

1999년 3월 ~ 현 군산대학교 공과대학 교학부장겸임



고 석 웅(高錫雄)

1999년 2월 군산대학교 전자공
학과 졸업

1999년 3월 ~ 군산대학교 대학
원 전자공학과 석사
과정중



유 창 관(劉昌官)

1999년 2월 군산대학교 전자공
학과 졸업

1999년 3월 ~ 군산대학교 대학
원 전자공학과 석사
과정중