

論文2002-39SD-2-4

# 양자 우물 소자 모델링에 있어서 다중 에너지 부준위 Boltzmann 방정식의 Self-consistent한 해법의 개발

## (Self-consistent Solution Method of Multi-Subband BTE in Quantum Well Device Modeling)

李 殷 珠 \*

(Unjoo Lee)

## 요 약

양자 우물 반도체 소자 모델링에 있어서 양자 우물의 다중 에너지 부준위 각각에 대한 Boltzmann 방정식의 해를 직접적으로 구하는 self-consistent한 방법을 개발하였다. 양자 우물의 특성을 고려하여 Schrodinger 방정식과 Poisson 방정식 및 Boltzmann 방정식으로 구성된 양자 우물 소자 모델을 설정하였으며 이들의 직접적인 해를 유한 차분법과 Gummel-type iteration scheme에 의해 구하였다. Si MOSFET의 inversion 영역에 형성되는 양자 우물에 적용하여 그 시뮬레이션 결과로부터 본 방법의 타당성 및 효율성을 보여 주었다.

## Abstract

A new self-consistent mathematical model for semiconductor quantum well device was developed. The model was based on the direct solution of the Boltzmann transport equation, coupled to the Schrodinger and Poisson equations. The solution yielded the distribution function for a two-dimensional electron gas(2DEG) in quantum well devices. To solve the Boltzmann equation, it was transformed into a tractable form using a Legendre polynomial expansion. The Legendre expansion facilitated analytical evaluation of the collision integral, and allowed for a reduction of the dimensionality of the problem. The transformed Boltzmann equation was then discretized and solved using sparse matrix algebra. The overall system was solved by iteration between Poisson, Schrodinger and Boltzmann equations until convergence was attained.

## I. 서 론

반도체 소자의 마이크로공정 기술의 발달로 인하여 반도체 소자의 크기가 0.1 서브마이크론(submicron)의

\* 正會員, 翰林大學校 情報通信工學部  
(Information and Electronic Engineering Department, Hallym University)

接受日字:2001年7月9日, 수정완료일:2001年12月20日

체제로 도입되고 또한 헤테로 접합을 가지는 소자에 대한 관심이 높아짐에 따라, 양자 우물의 양자역학적인 물리 현상을 정확하게 이해하는 것이 절실히 요구되고 있다. 따라서, 이차원적인 전자 가스(2DEG: two-dimensional electron gas) 시스템을 가지는 양자 우물에 있어서 캐리어 전도 현상은 이론 및 실험적으로 많은 연구가 진행되어 오고 있으나<sup>[1-4]</sup>, 양자 우물이 가지는 2DEG 시스템 내에서의 캐리어 전도 현상은 그 상호 작용의 복잡성으로 인하여 이에 대한 이론적인 접근은 사실상 간단한 소자 모델이나 수치적으로 비효율

적인 해석방법에 국한되어 있는 실정이다.

반도체 소자의 동작 특성은 소자를 구성하고 있는 물질과 구조 내에서 캐리어의 전도 현상을 모델링하여 시뮬레이션해 봄으로써 그 예측이 가능하다. 캐리어의 전도 현상은 열역학 이론으로부터 유도될 수 있는데 가장 대표적인 것이 Boltzmann 전송 방정식(Boltzmann Transport Equation)이다<sup>[5]</sup>. Boltzmann 전송 방정식의 해는 캐리어 분포 함수이며, 이는 시간, 공간, 그리고 운동량에 대한 캐리어의 확률 밀도 함수로서 반도체 소자의 전기적인 현상들을 설명하는 데 아주 중요한 역할을 한다. 캐리어의 분포 함수를 이용하여 전자의 밀도, 평균 에너지, 및 평균 속도를 비롯하여 전자의 이동도, MOSFET 게이트 전류와 헤테로 접합 소자에서의 에너지 준위간의 천이 에너지 등 여러 가지 파라미터들을 정확하게 계산할 수 있다<sup>[6]</sup>. 기존의 반도체 소자 모델링에는 Drift-diffusion(DD) 방법<sup>[7]</sup>, Energy Transport(ET) 방법<sup>[8]</sup>, 그리고 Monte Carlo(MC) 방법이 있다<sup>[9]</sup>. DD 방법은 Boltzmann 방정식의 해를 직접적으로 구하지 않고 근사적인 방법으로 간단화된 연속 방정식(continuity equation)과 전류 방정식(current equation) 그리고 Poisson 방정식으로서 구성되어 있으며, 서브 마이크로 이상 크기를 가지는 소자의 모델링에 주로 사용되어 왔다. DD 모델에 Gummel 알고리즘을 적용하여 개발된 시뮬레이터로서 MINIMOS, PISCES 등이 있으며, 이들은 MOSFETs, MESFETs, HEMTs, 그리고 BJTs 등의 소자들의 동작을 시뮬레이션하는데 주로 사용되어 왔다. 그러나, DD 모델은 열평형 상태에서 캐리어들의 전도 현상을 고려하기 때문에 소자의 크기가 줄어들어 따라 일어나는 hot electron, velocity saturation, impact ionization, oxide charging 등과 같은 현상들을 예측할 수 없는 한계를 가진다. ET 모델은 DD 모델을 확장한 것으로서 Boltzmann 방정식을 에너지 보존의 법칙을 사용하여 근사화시킴으로써 유도되는 에너지 밸런스 방정식, 연속 방정식, 전류 방정식 그리고 Poisson 방정식으로서 구성되어 있어, ET 모델로부터 캐리어의 평균 에너지를 계산할 수 있으므로 velocity saturation, velocity overshoot 등과 같은 현상들을 예측할 수 있다. 그러나, DD 모델과 마찬가지로 캐리어의 정확한 분포 함수를 필요로 하는 oxide charging, substrate current 등과 같은 소자의 degradation 현상들을 예측할 수 없을 뿐만 아니라 사용되고 있는 변수의 수의 증가로 인하여 그 해석 방법이

용이하지 않다. MC 방법은 확률적으로 Boltzmann 방정식의 해를 직접 구하므로 그 해가 정확하나 너무 많은 실행 시간(CPU time)이 소요되므로 실용적이지 않은 단점을 가진다.

양자 우물은 에너지 준위가 1차원적으로 양자화되어 있는 2DEG 시스템인 다중(multiple) 에너지 부준위(subband)로써 구성되어 있으므로 그 내부에서의 캐리어 전도 현상을 정확하게 규명하기 위해서는 부준위 각각에 대한 캐리어 분포 함수를 필요로 한다. 따라서, 기존의 반도체 소자 모델링 기법으로는 양자 우물의 동작 특성을 정확하게 규명하는 것은 한계가 있다. 더구나 양자 우물이 가지고 있는 양자 역학적인 특성 때문에 Boltzmann 방정식의 해를 구하는 데 있어서 각 에너지 부준위와 그 파동 함수 및 에너지 부준위의 상호 영향에 대한 정보가 부가적으로 필요하다.

따라서, 본 논문은 양자 우물에 있어서, 양자역학적인 물리 현상을 고려하여 Schrodinger 방정식, Poisson 방정식과 Boltzmann 방정식으로 구성된 정확하고 효율적인 self-consistent한 수학적 모델을 설정하고 이들 방정식으로부터 양자 우물의 전자 분포 함수를 직접적으로 구하는 새로운 방법을 제시하였다. 본 방법에 있어서, 먼저 Schrodinger 방정식을 양자 우물의 전위, 에너지 부준위, 그리고 그 파동함수들의 항으로 전개하였다. Poisson 방정식의 전개에 있어서는, 에너지 부준위들의 파동함수와 캐리어 분포 함수를 전하 밀도의 항에 포함하였다. Boltzmann 방정식은 다중 에너지 부준위 각각에 대하여 acoustic phonon scattering, intervalley phonon scattering과 다중 에너지 부준위 사이의 intersubband phonon scattering을 포함하도록 전개되었다. 여기서, 모든 수식은 Legendre 다항식을 이용하여 전개하였고, nonparabolic band 구조에 적용될 수 있도록 유효 질량 근사법(effective-mass approximation) 및 starred space 변환 방법을 이용하였다<sup>[10-11]</sup>. 이들 수식들의 해는 유한 차등법(finite difference method)과 Gummel-type iteration scheme을 사용하여 수치적으로 구하였다. 본 방법은 Si-MOSFET 반전 영역(inversion layer)에 형성되는 양자 우물에 대하여 적용되었으며 그 시뮬레이션 결과로부터 본 방법의 타당성 및 실행 시간의 현저한 감소에 따른 효율성을 보여 주었다.

II. 수학적 모델링

양자 우물은 양자화된 다중 에너지 부준위로 구성된 2DEG 시스템이다. 본 논문에서는 상기한 바와 같이 양자 우물 소자에 대하여 에너지 부준위 각각에 대한 Boltzmann 방정식과 다중 에너지 부준위를 고려한 Schrodinger 방정식 및 Poisson 방정식으로 구성된 수학적 모델을 설정하였다.

1. Schrodinger 방정식과 Poisson 방정식

Schrodinger 방정식은 Si이나 Ge 등과 같이 균일 에너지 표면(constant energy surface)이 비등방성(anisotropic)인 경우에 이를 등방적으로 취급하기 위해 유효 질량 근사(effective mass approximation)를 적용하여 아래의 식과 같이 나타내었다.

$$-\frac{\hbar}{2m_z} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi(z) - e\phi(z)\psi(z) = \epsilon\psi(z) \quad (1)$$

여기서,  $m_z$ 는 에너지 부준위의 양자화가 일어나는 방향에 대한 캐리어의 유효 질량,  $\psi$ 는 에너지 부준위의 파동함수,  $\epsilon$ 은 에너지 부준위의 레벨, 그리고  $\phi$ 는 양자 우물의 전위이며, 또한  $\psi$ 와  $\epsilon$ 는 각각 Schrodinger 방정식의 고유함수(eigenfunction)와 고유치(eigenvalue)이다. 에너지 부준위들의 파동함수와 캐리어 분포 함수를 전하 밀도의 항에 포함하여, 양자 우물의 전위,  $\phi$ 에 대한 Poisson 방정식은 아래의 식으로 나타내었다.

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} = -\frac{e}{\epsilon_s} (D(z) - N_s \sum_i N^i |\psi^i(z)|^2) \quad (2)$$

여기서,  $\epsilon_s$ 는 유전율(dielectric permittivity),  $D(z)$ 는 이온 불순물 도핑 밀도(ionized impurity doping density),  $i$ 는 다중 에너지 부준위의 색인,  $N_s \sum_i N^i |\psi^i(z)|^2$ 은 캐리어의 전하 밀도이다. 캐리어 전하 밀도는 양자 우물에서의 다중 에너지 부준위를 고려하여 양자 우물에서의 캐리어 밀도,  $N_s$ , Schrodinger 방정식의 해로부터 얻어지는  $i$  번째 에너지 부준위(고유치)의 파동함수(고유함수),  $\psi^i(z)$ ,  $i$  번째 에너지 부준위의 상대밀도,  $N^i$ 의 항으로써 주어져 있으며,  $i$  번째 에너지 부준위의 상대밀도,  $N^i$ 는 Boltzmann 방정식으로부터 구해지는 캐리어 분포 함수로부터 계산될 수 있으며 아래와 같이 Fermi-Dirac 분포 함수로 초기화하였다.

$$N^i = \frac{KT}{\pi \hbar N_s} n_{vi} m_{di} \ln[1 + e^{(\epsilon_i - \epsilon)/KT}] \quad (3)$$

여기서,  $n_{vi}$ 는 균일 에너지 표면의 degeneracy,  $m_{di}$ 는 유효 에너지 상태 밀도,  $\epsilon_i$ 는 페르미 에너지, 그리고  $\epsilon^i$ 는  $i$  번째 에너지 부준위를 나타낸다.

2. 다중 에너지 부준위 Boltzmann 방정식

양자 우물의 2DEG 시스템에 대한 Boltzmann 방정식의 일반적인 형태는 다중 에너지 부준위 Boltzmann 방정식(MS-BTE : Multi Subband BTE)로서, Liouville 방정식으로부터 chain rule과 Hamiltonian 특성 그리고 acoustic phonon scattering, intervalley phonon scattering, 그리고 에너지 부준위 간의 intersubband phonon scattering을 고려하여 각각의 에너지 부준위에 대하여 아래와 같이 나타내었다.

$$\left[ \frac{\partial F^i(k^*)}{\partial t} \right]_{fd} = -\frac{e}{\hbar} E \cdot \nabla_k F^i(k) \quad (4)$$

$$= \left[ \frac{\partial F^i(k)}{\partial t} \right]_{ac} + \left[ \frac{\partial F^i(k)}{\partial t} \right]_{iv} + \left[ \frac{\partial F^i(k)}{\partial t} \right]_{isub}$$

여기서  $F^i(k)$ 는  $i$  번째 에너지 부준위에서의 전자 momentum 분포 함수,  $E$ 는 균질 전기장의 세기, 윗첨자  $i$ 는 에너지 부준위의 색인, 그리고 아래첨자  $ac$ ,  $iv$ ,  $isub$ 는 각각 acoustic, intervalley, intersubband phonon scattering 항을 나타내기 위해 사용되었다. 균일 에너지 표면이 비등방성(anisotropic)인 경우를 고려하여 Herring-Vogt 변환 방법을 적용시켜 균일 에너지 표면이 등방적으로 나타내어지는 starred space에서 전자 momentum 분포 함수를 Legendre 다항식으로 전개하면

$$F^i(k^*) = f_0^i(\epsilon) + k^* g^i(\epsilon) \cos \theta \quad (5)$$

이고, dispersion relation은

$$\gamma(\epsilon) = \epsilon^i + \frac{\hbar^2 k^{*2}}{2m_0} \quad (6)$$

이다. 여기서,  $f_0^i(\epsilon)$ 은 캐리어 분포 함수의 대칭 성분,  $k^* g^i(\epsilon) \cos \theta$ 은 비대칭 성분, 그리고  $\theta$ 는  $E^*$ 와  $k^*$ 이 이루는 각이다. 식 (4)을 식 (5), (6)에서의 같이 starred space에서 Legendre 다항식으로 전개하고 각 항들을 대칭 성분과 비대칭 성분으로 분류한 다음 Legendre 다항식의 직교성을 적용하여 다음과 같이 대칭 성분으로만 구성되어 지는 MS-BTE를 구하였다(자세한 유도

과정은 부록 참조).

$$\begin{aligned}
& -\frac{(eE)^2 \tau^i(\epsilon)}{m_0} \left[ \frac{\partial f_0^i(\epsilon)}{\partial \epsilon} + (\epsilon - \epsilon^i) \frac{\partial^2 f_0^i(\epsilon)}{\partial \epsilon^2} \right] \\
& = \frac{4(m_d^i)^{1/2} m_0 Z_A^2}{\hbar^3 \rho} \left\{ f_0^i(\epsilon) + [K_0 T + (\epsilon - \epsilon^i)] \frac{\partial f_0^i(\epsilon)}{\partial \epsilon} \right. \\
& \quad \left. + K_0 T (\epsilon - \epsilon^i) \frac{\partial^2 f_0^i(\epsilon)}{\partial \epsilon^2} \right\} \\
& + \sum_{R \neq i, j=i} I_{ij}^2 \frac{(m_d^i)^{1/2} Z_R^2}{\rho \hbar^3 \omega_R} \times \\
& \quad \{ [(N_R + 1) f_0^i(\epsilon + \hbar \omega_R) - N_R f_0^i(\epsilon)] u_0(\epsilon - \epsilon^i + \hbar \omega_R) \\
& \quad + [N_R f_0^i(\epsilon - \hbar \omega_R) - (N_R + 1) f_0^i(\epsilon)] u_0(\epsilon - \epsilon^i - \hbar \omega_R) \} \\
& + \sum_{R \neq j, j \neq i} I_{ij}^2 \frac{(m_d^j)^{1/2} Z_R^2}{\rho \hbar^3 \omega_R} \times \\
& \quad \{ [(N_R + 1) f_0^j(\epsilon + \hbar \omega_R) - N_R f_0^j(\epsilon)] u_0(\epsilon - \epsilon^j + \hbar \omega_R) \\
& \quad + [N_R f_0^j(\epsilon - \hbar \omega_R) - (N_R + 1) f_0^j(\epsilon)] u_0(\epsilon - \epsilon^j - \hbar \omega_R) \}
\end{aligned} \quad (7)$$

여기서,  $Z_A$ 는 acoustical surface deformation potential,  $Z_R$ 는 단위 변위 당 유효 에너지 천이,  $\rho$ 는 mass density,  $\omega_R$ 는 phonon의 진동 주파수,  $I_{ij}$ 는 overlap integral,  $K_0$ 는 Boltzmann 상수,  $T$ 는 격자 온도, 그리고  $u_0(\epsilon)$ 은 단위 계단 함수이다. 그리고,  $\tau^i(\epsilon)$ 은 MS-BTE의 상기 비대칭 성분이 함축되어진 것으로서 아래의 식으로 나타내었다.

$$\frac{1}{\tau^i(\epsilon)} = \frac{1}{\tau_{ac}^i(\epsilon)} + \frac{1}{\tau_{iv}^i(\epsilon)} + \frac{1}{\tau_{isub}^i(\epsilon)} \quad (8)$$

식 (7)의 LHS는 MS-BTE의 drift, diffusion 항을 나타내고, RHS는 collision 항으로서 acoustic phonon scattering, intervalley phonon scattering, 그리고 intersubband phonon scattering 항을 포함하고 있다. 양자 우물에 대한 수학적 모델링으로서, 식(7)의 MS-BTE를 식 (1)의 Schrodinger 방정식, 식 (2)의 Poisson 방정식과 함께 결합하여 self-consistent한 연립 방정식을 형성하였다.

### III. Numerical Solution Method

상기한 바와 같이 본 연구에서는 양자 우물의 수학적 모델링으로서 다중 에너지 부준위에 각각 대한 MS-BTE, Schrodinger 방정식, 그리고 Poisson 방정식으로 구성되어 있는 연립방정식을 설정하고 이들의 해를 Gummel-type 반복법을 적용하여 수치적으로 구하였다. 먼저 다중 에너지 부준위와 그 파동함수들의 초

기치들을 구하기 위해 Fermi-Dirac 분포함수를 가정하고 Schrodinger 방정식 (1)과 Poisson 방정식 (2)의 해를 유한 차분법과 Newton's method를 적용하여 수치적으로 구하였다. 다중 에너지 부준위의 초기값을 이용하여 MS-BTE의 해를 유한 차분법과 sparse matrix algebra를 이용하여 구한 다음 그 결과의 비선형적인 분포 함수를 다음 반복(iteration)에서 Schrodinger 방정식과 Poisson 방정식의 해를 구하는 데 사용하였다. 이와 같은 과정을 Schrodinger 방정식과 Poisson 방정식 그리고 MS-BTE의 해들이 소정의 오차 범위 내에서 수렴할 때까지 반복하였다.

#### 1. Schrodinger 방정식과 Poisson 방정식

Schrodinger 방정식과 Poisson 방정식의 해를 구하기 위하여 유한 차분법을 적용하여, 1차원 공간에서 에너지 준위의 양자화가 일어나는  $z$ 축을  $N$  개의  $\Delta z$  크기의 미소 구간으로 나누고, 경계 영역을 제외한  $N-1$ 개의 노드에 대하여 각각 차분 방정식을 구하였다. 이 때,  $j$  번째 노드에 대한 Schrodinger 방정식과 Poisson 방정식의 차분 방정식은 각각

$$-\frac{\hbar^2}{2m_z} \frac{\phi_{j+1} - 2\phi_j + \phi_{j-1}}{\Delta z^2} - e\phi_j \phi_j = \epsilon \phi_j \quad (9)$$

$$\frac{\phi_{j+1} - 2\phi_j + \phi_{j-1}}{\Delta z^2} = -\frac{e}{\epsilon_s} (D_j - N_s \sum_r N^r |\phi_j^r|^2) \quad (10)$$

이다. 여기서,  $\phi_j^i = \psi^i(j\Delta z)$ ,  $\phi_j = \phi(j\Delta z)$ , 그리고  $D_j = D(j\Delta z)$ 이다. 경계 영역에 대해서는 Si-MOSFET의 반전 영역의 경우에 대하여 유전층과 반전 영역의 특성을 고려하여 다음과 같이 경계조건을 설정하였다.

B.C. :  $\phi(0) = \phi_1 = 0$ ,  $\phi(\infty) = \phi_N = 0$

$$\phi(0) = \phi_1 = 0, \quad \frac{d\phi_j}{dz} \Big|_{\infty} = \frac{d\phi_j}{dz} \Big|_N = 0 \quad (11)$$

일반적으로  $N$ 의 값은 100에서 1000 사이의 값을 가지도록 하였고  $\Delta z$ 는 0.1nm의 크기를 가지도록 설정하였다. 식(9)에 의해 주어진  $N$ 개의 Schrodinger 차분 방정식은  $N \times N$ 의 크기를 가지는 대칭 tri-diagonal matrix의 eigensystem으로서  $A\phi = \lambda\phi$ 의 형태로 나타낼 수 있으며, matrix  $A$ 는  $N \times N$ 의 linear operator,  $\lambda$ 는 eigenvalue, 그리고  $\phi$ 는 eigenfunction이다. Recursive relation을 이용하여 determinant의 근을 구하고 다음의 알고리즘에 의해 eigenvalue를 구하였다<sup>[12]</sup>.

$$d\lambda = (\lambda_{\max} - \lambda_{\min})/N$$

set  $\lambda = d\lambda$

for  $i=1, N$

$$pDS\lambda = \lambda$$

label : check the number of sign changes (n<sub>sign</sub>) of the series of the subdeterminant (from recursive relation)

if  $n_{\text{sign}} \geq i \Rightarrow \lambda = \lambda - 1/2\lambda$

else  $\lambda = \lambda + 1/2\lambda$

if  $|p\lambda - \lambda| < \epsilon \Rightarrow$  next  $i$

else goto label

여기서,  $\lambda_{\max}$ 와  $\lambda_{\min}$ 의 값은 Gerschgorin Cycle에 근거한 Gerschgorin's bound를 아래와 같이 적용하였다 [12].

$$\begin{aligned} \lambda &\geq \min_i \left\{ A_{ii} - \sum_{j=1, j \neq i}^N |A_{ij}| \right\} \\ \lambda &\leq \max_i \left\{ A_{ii} + \sum_{j=1, j \neq i}^N |A_{ij}| \right\} \end{aligned} \quad (12)$$

Eigenvector를 구하기 위해서는 inverse vector 반복법에 근거한 표준 Lanczos 알고리즘을 이용하였다. 위의 알고리즘들에 의하여 구한 eigenvalue와 eigenvector를 식 (10)에 대입하고 LU decomposition matrix solution method를 적용하여 Poisson 방정식의 해를 구하였으며 extrapolated convergence factor method를 사용하여 구한 새로운 전위값을 다음 반복에서 Schrodinger 방정식에서의 전위값으로 대입하는 과정을 Schrodinger 방정식과 Poisson 방정식의 해가 소정의 오차 범위 이내로 수렴될 때까지 반복하였다.

## 2. Boltzmann 방정식

식 (7)의 MS-BTE는 second order differential/difference 방정식이다. 2DEG 시스템을 가지는 양자 우물에 있어서 다중 에너지 부준위 각각에 대해 식 (7)과 같은 방정식을 세우고 에너지 부준위 간의 coupling effect를 intersubband phonon scattering의 항으로 나타내었다. 방정식의 해를 구하기 위해 Schrodinger 방정식과 Poisson 방정식의 경우와 마찬가지로 에너지 영역을  $\Delta\epsilon$  크기를 가지는  $N$  개의 미소 구간으로 나누어 유한 차분법을 적용하여 다음과 같이  $j$  번째 에너지 부준위의  $l$  번째 노드에 대한 MS-BTE를 다음과 같이 구하였다.

$$\begin{aligned} & - \frac{(eE)^2 \tau (\Delta\epsilon)}{m_0} \left[ \frac{f_{l+1}^i - f_{l-1}^i}{2\Delta\epsilon} + (\epsilon - \epsilon^i) \right. \\ & \quad \left. \frac{f_{l+1}^i - 2f_l^i + f_{l-1}^i}{\Delta\epsilon^2} \right] \\ & = \frac{4(m_d^i)^{\frac{1}{2}} m_0 Z_A^2}{\hbar^3 \rho} \left\{ f_l^i + [K_0 T + (l\Delta\epsilon - \epsilon^i)] \frac{f_{l+1}^i - f_{l-1}^i}{2\Delta\epsilon} \right. \\ & \quad \left. + K_0 T (l\Delta\epsilon - \epsilon^i) \frac{f_{l+1}^i - 2f_l^i + f_{l-1}^i}{\Delta\epsilon^2} \right\} \\ & + \sum_{R \neq l, j \neq i} f_{ij}^2 \frac{(m_d^i)^{1/2} Z_R^2}{\rho \hbar^3 \omega_R} \frac{1}{e^{\hbar\omega_R/K_0 T} - 1} \times \\ & \left\{ [e^{\hbar\omega_R/K_0 T} f_{l+l_R}^i - f_l^i] u_0 (l\Delta\epsilon - \epsilon^i + \hbar\omega_R) \right. \\ & \quad \left. + [f_{l-l_R}^i - e^{\hbar\omega_R/K_0 T} f_l^i] u_0 (l\Delta\epsilon - \epsilon^i - \hbar\omega_R) \right\} \\ & + \sum_{R \neq l, j \neq i} f_{ij}^2 \frac{(m_d^i)^{1/2} Z_R^2}{\rho \hbar^3 \omega_R} \frac{1}{e^{\hbar\omega_R/K_0 T} - 1} \times \\ & \left\{ [e^{\hbar\omega_R/K_0 T} f_{l+l_R}^i - f_l^i] u_0 (l\Delta\epsilon - \epsilon^i + \hbar\omega_R) \right. \\ & \quad \left. + [f_{l-l_R}^i - e^{\hbar\omega_R/K_0 T} f_l^i] u_0 (l\Delta\epsilon - \epsilon^i - \hbar\omega_R) \right\} \end{aligned} \quad (13)$$

여기서,  $f_l^i = f_l^i(\epsilon_l) = f_l^i(l\Delta\epsilon)$ 이고  $l_R$ 은  $\hbar\omega/\Delta\epsilon$ 에 가장 가까운 정수이다. MS-BTE의 해를 구하는 데 있어서 세 가지 경우의 경계조건을 고려하였다. 첫째는, 분포함수의 정규화에 관한 것으로써 아래의 식으로 나타내었다.

$$n = \frac{1}{2\pi^2} \sum_{l=1}^N \sum_i f_l^i h^i(\epsilon_l) \Delta\epsilon \quad (14)$$

여기서,  $n$ 은 시스템 내에 존재하는 캐리어의 전체 밀도이고  $h^i(\epsilon)$ 은  $i$  번째 에너지 부준위의 에너지 상태 밀도로써 아래와 같다.

$$h^i(\epsilon) = \frac{2\pi m_d^i}{\hbar^2} u_0(\epsilon - \epsilon^i) \quad (15)$$

둘째, 정상 상태에서 각 에너지 부준위에서의 캐리어 분포 함수가 평형을 이루므로 intersubband scattering rate는 0의 값을 갖게 되므로,  $i$  번째 에너지 부준위에 대해

$$\sum_{R \neq l, j \neq i} \int \left( \frac{\partial F^i(k)}{\partial t} \right)_{\text{isub}} dk = 0 \quad (16)$$

와 같이 나타내었다. 셋째, 무한 값의 에너지 상태에 존재하는 전자의 수는 0이라는 조건을 이용하여, 모든 에너지 부준위  $i=1, 2, 3, \dots$ 에 대해

$$f_N^i = 0 \quad (17)$$

와 같이 나타내었다. 따라서,  $M$  개의 에너지 준위를 갖는 양자 우물에 대하여  $M \times (N-2)$ 의 크기를 가지는 차분 방정식과 함께 1 개의 정규 조건,  $M-1$  개의 정상 상태 조건, 그리고  $M$  개의 무한 값 에너지 조건을 경계 조건으로 가지게 되어 최종적으로  $M \times N$  개의 서로 결합된 선형 차분 방정식으로 구성되는 MS-BTE를 설정하였으며, SPARSPAK이라는 응용 프로그램을 사용하여 방정식의 해로서 각 에너지 준위에 대한 이산 분포 함수  $f^i = (f_1^i, \dots, f_j^i, \dots, f_N^i)$ 를 구하였다.

IV. 결 과

본 연구의 방법을 (100) Si MOSFET의 반전 영역에 형성되는 양자 우물에 적용하였다. Si은 <100> 방향으로 6 개의 타원형을 가지는 비등방적인 균일 에너지 표면을 가지고 있다. 따라서, 양자 우물이 형성되는 방향에 따라 에너지 준위의 구조가 다르다. 표 1은 Si과 Ge에 있어서, 세 가지 surface 방향 각각에 대하여 설정되는 캐리어 유효 질량과 균일 에너지 표면의 degeneracy  $n_v$ 를 보여주고 있다. (100) Si MOSFET의 경우 양자 우물이 형성되는 방향으로 6 개의 균질 에너지 표면 중에서 2 개는 longitudinal 유효 질량  $m_l$ 을 그리고 나머지 4 개의 균질 에너지 표면은 transverse 유효 질량  $m_t$ 을 가지는 두 가지 형태의 에너지 준위 구조가 형성된다. 따라서, 본 연구에서는 두 가지 형태의 에너지 준위 구조에 대해 식 (1)에  $m_z = m_l$ ,  $m_x = m_t$ 를 각각 대입하여 Schrodinger 방정식과 Poisson 방정식의 해를 구하였다.

그림 1에는 본 방법을 적용하여 구한 (100) Si MOSFET 양자 우물의 전위와 에너지 준위를 나타내었으며, 그림 2에는 그림 1의 에너지 준위들 각각의 파동 함수의 제곱값들을 각각 양자 우물 표면으로부터의 거리,  $z$ 의 함수로서 도시하였다. 그림 1과 2에서,  $N_s = 10^{13} \text{cm}^{-2}$ ,  $T = 300 \text{K}$ 이며, 실선은 양자 우물이 형성되는 방향의 유효 질량이  $m_l$ 인 경우를, 점선은  $m_t$ 인 경우를 각각 도시하였다. 그림 1과 2에서 유효 질량이  $m_l$ 인 경우의 에너지 준위가  $m_t$ 인 경우의 에너지 준위 보다 상대적으로 낮은 값을 보여주었으며 이는 Stern의 결과와 일치하였다<sup>[13]</sup>. 양자 우물에서의 전자의 전체 밀도의 값을  $10^{12} \text{cm}^{-2}$ 부터  $10^{13} \text{cm}^{-2}$  사

표 1. Si과 Ge에 있어서, {100}, {110}, {111} 세 가지 surface 방향에 각각에 대한 유효 질량과 균일 에너지 표면의 degeneracy

Table 1. Effective masses and the degeneracy of the set of ellipses for three surface directions in Si.

Si				
Surface orientation	$m_l$	$m_2$	$m_3$	$n_v$
{100}	$m_t$	$m_t$	$m_l$	2
	$m_t$	$m_l$	$m_t$	4
{110}	$m_t$	$(m_t+m_l)/2$	$2m_t m_l / (m_t+m_l)$	4
	$m_t$	$m_l$	$m_t$	2
{111}	$m_t$	$(m_t+2m_l)/3$	$3m_t m_l / (m_t+2m_l)$	6

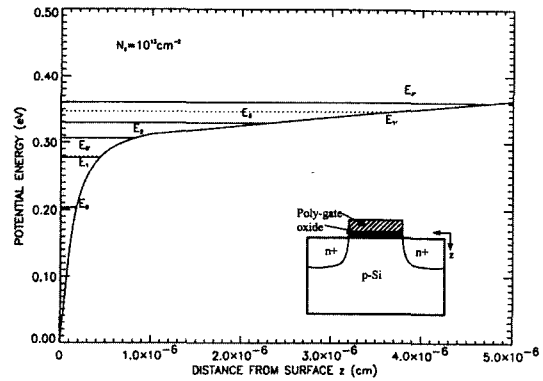


그림 1. Si (100) 양자 우물의 전위와 에너지 준위의 구조

Fig. 1. Electron potential energy in Si (100) quantum well and the multiple subband energy levels.

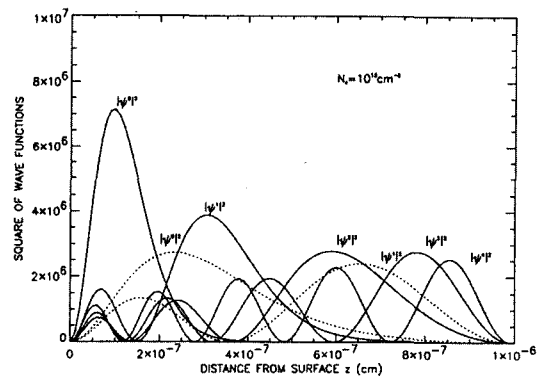


그림 2. 그림 1에서 주어진 에너지 준위들의 파동함수

Fig. 2. The square of the wave functions obtained by the self-consistent calculation for the case of Fig. 1.

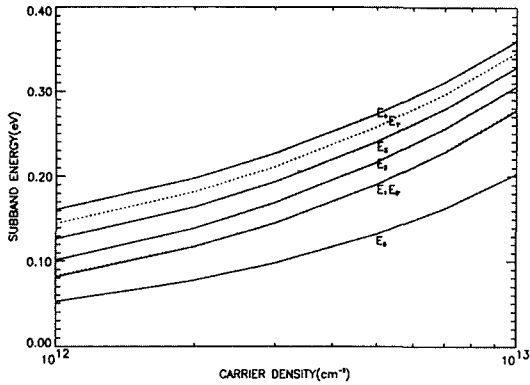


그림 3. 전체 전자 밀도의 변화에 따른 에너지 부준위  
Fig. 3. Subband energy vs. carrier density.

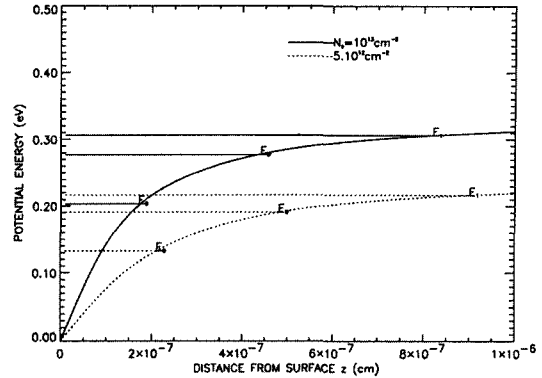


그림 6. 서로 다른 전체 전자 밀도에 대한 양자 우물의 전위 및 에너지 부준위 구조  
Fig. 6. The electric potential energies and the associated subband energies for  $N_s = 1.0 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  and  $N_s = 5.0 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ .

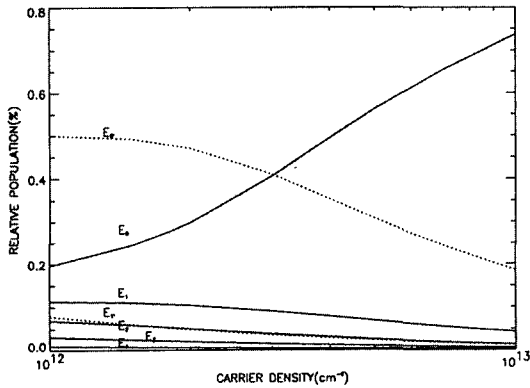


그림 4. 전체 전자 밀도에 따른 에너지 부준위의 상대 전자 밀도의 백분율  
Fig. 4. Relative population of electron vs. carrier density.

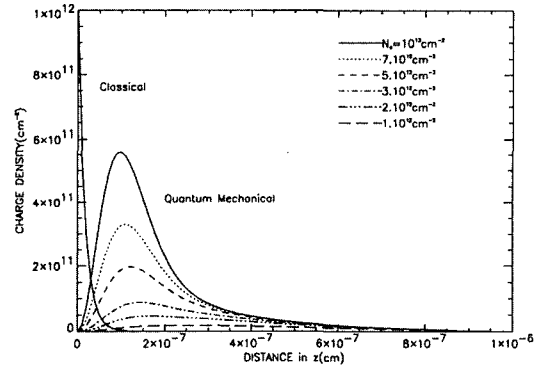


그림 7. 양자역학적인 전하 분포와 고전역학적인 전하 분포  
Fig. 7. Quantum mechanical and classical charge densities.

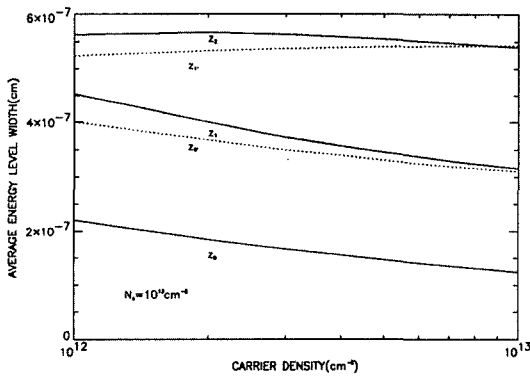


그림 5. 전체 전자 밀도에 따른 에너지 부준위 폭  
Fig. 5. The average subband energy level width vs. carrier density.

이의 여러 가지 값으로 가변시켰을 때 에너지 부준위의 구조 변화를 그림 3에 나타내었다. 양자 우물의 전

위는 양자 우물에서의 전자의 전체 밀도에 비례하여 증가하므로 양자 우물에서의 전자 전체 밀도가 증가함에 따라 전위의 기울기가 높아지고 따라서 에너지 부준위의 값들도 상대적으로 높아짐을 보여주었다. 또한 전자의 전체 밀도가 증가함에 따라 가장 낮은 에너지 부준위,  $E_0$ 와 다음 레벨의 에너지 부준위  $E_1$ 와  $E_2$  사이의 간격도 상대적으로 증가하여  $E_0$ 의 전자의 상대 밀도가 증가할 것이라는 것을 예측하게 하였다. 그림 4에는 양자 우물에서의 전자의 전체 밀도의 값을  $10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 부터  $10^{13} \text{ cm}^{-2}$  사이의 여러 가지 값으로 가변시켰을 때 에너지 부준위 각각에 대한 전자의 상대 밀도를 전자의 전체 밀도에 대한 백분율로 나타내었다. 그림 3에서 예측할 수 있었던 바와 같이 전자의 전체

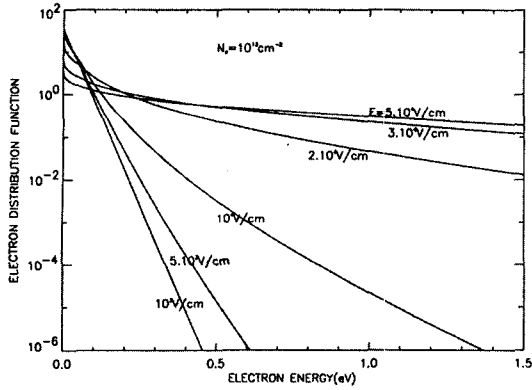


그림 8. 여러 가지 전장의 세기에 대한 전자 에너지 분포 함수(logarithmic scale at  $N_s = 10^{13} \text{cm}^{-2}$ )

Fig. 8. Electron distribution function vs. energy on a logarithmic scale for different fields at  $N_s = 10^{13} \text{cm}^{-2}$ .

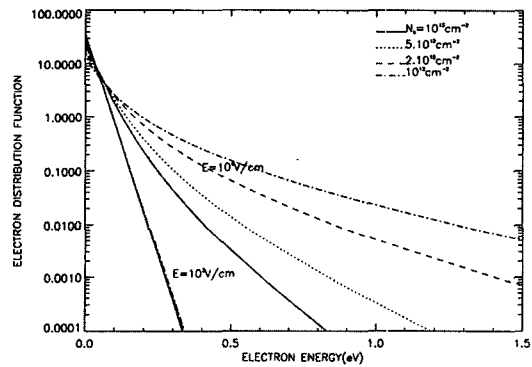


그림 9. 여러 가지 전자 밀도에 대한 전자 에너지 분포 함수( logarithmic scale at  $E = 1, 10 \text{kV/cm}$ )

Fig. 9. Electron distribution function vs. energy on a logarithmic scale at  $E = 1, 10 \text{kV/cm}$ .

밀도의 값이 증가함에 따라 에너지 부준위  $E_0$ 에서의 전자의 상대 밀도가 증가함을 보여 주었다. 그림 5에는 전자의 전체 밀도의 값이 증가함에 따라 양자 우물 표면으로부터 양자 우물의 깊이 방향으로의 전자 분포를 나타내기 위하여 전자의 전체 밀도의 값을  $10^{12} \text{cm}^{-2}$ 부터  $10^{13} \text{cm}^{-2}$  사이의 여러 가지 값으로 가변시켰을 때 에너지 부준위 각각의 폭을 에너지 부준위 파동함수부터  $\langle z \rangle = \int z \psi^2(z) dz$ 와 같이 계산하여 나타내었다. 전자의 전체 밀도가 증가함에 따라 양자 우물의 폭은 감소하며 상대적으로 높은 전자 밀도를 가지는 에너지 부준위에 대해서 두드러지는 현상임을 보여주고, 이는 2DEG 시스템의 에너지 부준위 구조의 중요한 특성이

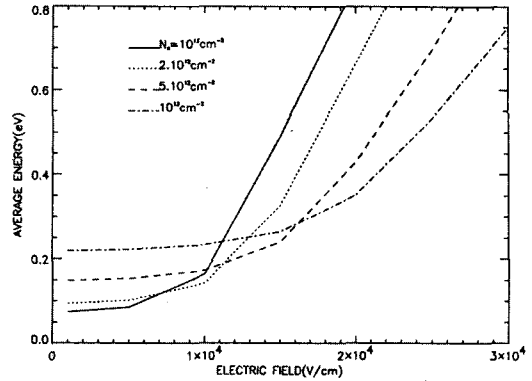


그림 10. 여러 가지 전자 밀도에 대한 전자 평균에너지 vs. 전장의 세기

Fig. 10. Electron average energy plotted as a function of the electric field for various electron density.

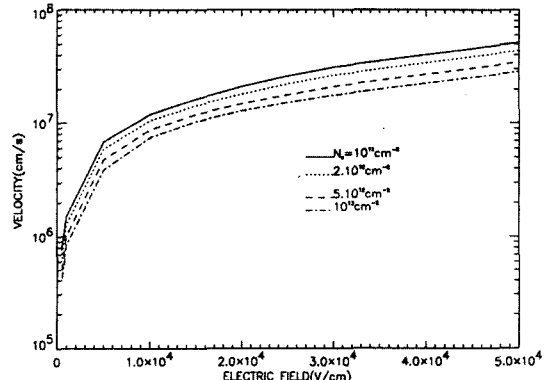


그림 11. 여러 가지 전자 밀도에 대한 전자의 drift velocity vs. 전장의 세기

Fig. 11. Electron drift velocity as a function of the electric field for various electron density.

다. 에너지 부준위 구조의 전체 전자 밀도에 대한 의존성을 더욱 명확하게 보여주기 위해 그림 6에는 서로 다른 값의 전체 전자 밀도에 대하여 양자 우물의 전위와 에너지 부준위의 구조를 같은 도면상에 나타내었다. 이 그림에서, 실선은 전체 전자 밀도  $N_s$ 가  $10^{13} \text{cm}^{-2}$ 인 경우를, 점선은  $5.0 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-2}$ 인 경우를 각각 나타내었다. 그림 6에서 보여지는 바와 같이 전체 전자 밀도가 상대적으로 높은 경우에는 양자 우물의 전위의 기울기와 에너지부준위들이 상대적으로 더 높은 값을 가지고 또한 에너지 부준위들 사이의 간격이 더욱 증가하였다. 따라서, 그림 4와 5에서 보여진 바와 같이 낮은 값의 에너지 부준위에 대한 상대 밀도의 증가와 폭의 감소가 전체 전자 밀도가 상대적으로 높은 경우에 대하여



두드러지는 현상을 뒷받침하였다. 그림 7에는 본 연구 방법에 의해 얻어진 Si MOSFET 양자우물에서의 전하 밀도 분포를 기존의 방법에 의해 구한 결과와 비교하여 보여주었다. 또한, 여러 가지 전체 전자 밀도에 대한 양자 우물의 전하 밀도를 같은 도면상에 도시하였다. 여기서, 양자 우물이 형성되는 방향에 수직한 방향으로 존재하는 전기장의 세기가 같고, 양자 우물이 형성되는 방향에 평행한 방향의 전기장의 세기가 여러 가지로 가변되는 경우를 양자 우물에 존재하는 전체 전자 밀도를 가변시켜 고려하였다. 그리고, 세로축에는 전하 밀도를 나타내었고, 가로축에는 양자 우물이 형성되는 방향인 z 축 상의 거리, 즉 양자 우물의 깊이를 나타내었다. 그림 7로부터 알 수 있는 바와 같이 본 연구의 방법은 기존의 방법이 제시하지 못하는 MOSFET 반전 영역에서의 실제적인 전하의 분포를 잘 나타내고 있다. 또한 MOSFET 반전 영역에 형성되는 양자 우물에서의 전체 전자 밀도가 증가함에 따라, 즉 양자 우물의 전위가 높음에 따라 양자 우물의 폭이 감소한다. 따라서 반전 영역에 형성되는 전하 분포의 최고치가 Si-SiO<sub>2</sub>의 경계면 쪽으로 이동하는 현상을 보여주었다. 그림 8에는 양자 우물의 전체 전자 밀도의 값을 10<sup>13</sup>cm<sup>-2</sup>으로 고정하고, 전장의 세기를 1kV/cm부터 50 kV/cm의 범위에서 가변시켰을 때 본 연구 방법에 의해 구한 전자의 에너지 분포 함수를 보여주었다. 그림 3과 4에서 제시한 바와 같이 전장의 세기가 증가함에 따라 전자의 에너지 분포 영역이 상대적으로 높은 에너지 영역으로 확산되는 양상을 보여주었다. 그림 9에는 서로 다른 전장의 세기에 대하여 전체 전자의 밀도를 가변시켰을 때 양자 우물의 에너지 부준위에서의 에너지 분포 함수를 보여주었다. 전장의 세기가 10<sup>3</sup>V/cm의 작은 값을 가질 경우에는 전체 전자의 밀도가 10<sup>12</sup>cm<sup>-2</sup>로부터 10<sup>13</sup>cm<sup>-2</sup>로 증가되어도 전자의 에너지분포 함수의 변화는 거의 없으나, 전장의 세기가 10<sup>4</sup>V/cm의 경우에는 전체 전자 밀도의 변화에 따라 에너지 분포 함수의 변화가 상당함을 보여주었다. 본 논문에서 제시하고 있는 바와 같이 Boltzmann 방정식, Schrodinger 방정식, 그리고 Poisson 방정식으로 구성되는 연립 방정식의 해를 수치적인 방법으로 구하여 얻은 양자 우물의 에너지 부준위 구조 및 전자의 분포 함수를 이용하여 양자 우물에서의 전자의 평균 에너지와 평균 drift 속도를 다음 식에 주어진 것과 같이 계산하여 그림 10과 11에 각각 도시하였다.

$$\langle \epsilon \rangle = \sum_i \frac{1}{2\pi^2 n} \int_{\epsilon_i}^{\infty} \epsilon f_0(\epsilon) h^i(\epsilon) d\epsilon \quad (18)$$

$$\langle v \rangle = \sum_i \left[ \frac{\langle n^x v^x \rangle + \langle n^y v^y \rangle + \langle n^z v^z \rangle}{n^x + n^y + n^z} \right]_i \quad (19)$$

여기서, 위 첨자 x, y, z는 좌표 공간 상의 좌표를 나타내는 데 <n<sup>x</sup>v<sup>x</sup>>은 x 축 상의 균등 에너지 표면에 형성되는 에너지 부준위의 전자 밀도에 의한 평균 속도 성분을 나타내었고, <n<sup>y</sup>v<sup>y</sup>> 및 <n<sup>z</sup>v<sup>z</sup>>는 y축 및 z 축 상의 균등 에너지 표면에 형성되는 에너지 부준위의 전자 밀도에 의한 평균 속도 성분을 나타내었다. 그림 10과 11로부터 알 수 있는 바와 같이 전체 전자 밀도가 낮을수록 평균 에너지는 전장의 세기가 증가함에 따라 신속하게 증가하고 평균 속도가 높다. 반면, 전체 전자 밀도가 높을수록 scattering의 영향으로 전장의 세기가 증가함에 따라 평균 에너지의 증가가 둔화되고 평균 속도가 상대적으로 낮음을 보여주어 양자 우물에서의 에너지 부준위 구조 변화에 따른 소자 특성을 잘 나타내었다.

### V. 결 론

양자 우물의 2DEG 시스템의 특성을 고려하여 Schrodinger 방정식, Poisson 방정식, 그리고 Boltzmann 방정식으로 구성된 수학적인 모델을 설정하였다. 이들 방정식의 해를 Gummel의 block iteration method를 적용하여 수치 해석적으로 양자 우물의 다중 에너지 부준위, 파동 함수, 양자 우물의 전위, 그리고 캐리어 에너지 분포 함수들을 직접 구하는 self-consistent한 방법을 제시하였다. 먼저, 캐리어 에너지 분포 함수를 Fermi-Dirac 분포 함수를 사용하여 초기화하고 Schrodinger 방정식과 Poisson 방정식에 유한 차분법과 extrapolated convergence factor method, 그리고 Newton method를 적용하여 양자 우물의 에너지 부준위 구조와 그 파동함수들 그리고 양자 우물의 전위를 구하였다. 그리고, 그 결과들을 Boltzmann 방정식에 적용하여 새로운 에너지 분포 함수를 구하고 이를 다음 반복 실행 시 Schrodinger 방정식과 Poisson 방정식의 해를 구하는 데 사용하였다. 이와 같은 과정을 전체 방정식의 해가 소정의 오차 범위 내로 수렴할 때까지 반복하였다. Si MOSFET의 반전 영역에 형성되는 양자 우물에 적용하여 얻은 시뮬레이션의 결과로부터

알 수 있는 바와 같이 본 방법을 사용하면 양자 우물의 특성을 정확하게 잘 나타낼 수 있었으며 또한 MC 방식에 비해 그 실행 시간이 현저히 줄일 수 있었다. 따라서, 본 연구의 방법은 서브마이크론 레벨의 소자의 시뮬레이션 툴(tool)로써 유용하게 사용될 수 있을 것으로 사료된다.

## 부 록

식 (7) MS-BTE의 유도 :

다중 에너지 부준위 구조를 가지는 양자 우물에 대하여, Boltzmann 방정식을 에너지 부준위 각각에 대해 설정하고, 이들 방정식을 에너지 부준위 사이의 상호 작용인 intersubband phonon scattering 항으로서 결합하였다. 식 (4)에서 전기장의 세기를 포함하고 있는 항인 LHS을 식 (5)에 주어진 바와 같이 starred space에서 파동 벡터  $k^*$ 를 전기장  $E^*$ 과 평행한 성분  $k_{\parallel}^*$ 과 직교하는 성분  $k_{\perp}^*$ 으로 분리한 다음 Legendre 다항식으로 전개하면,

$$\left[ \frac{\partial F^i(k^*)}{\partial t} \right]_{fd} = -\frac{e}{\hbar} E^* \cdot \nabla_{k^*} [f_0^i(\varepsilon) + k_{\parallel}^* g^i(\varepsilon)] \quad (A1)$$

와 같이 나타낼 수 있다. 식 (A1)에 식 (6)과 chain rule을 적용하면

$$\left[ \frac{\partial F^i(k^*)}{\partial t} \right]_{fd} = \frac{-e}{\hbar} E^* \left[ \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^*}{m_0} \frac{\partial f_0^i(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} + g^i(\varepsilon) + (\varepsilon - \varepsilon^i) \frac{\partial g^i(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right] \quad (A2)$$

로 변환되고, 식 (4)의 RHS를 하나의 collision 항으로 표현하고 LHS과 마찬가지로  $E^*$ 과 평행한 성분  $k_{\parallel}^*$ 과 직교하는 성분  $k_{\perp}^*$ 으로 분리하고 Legendre 다항식의 직교성을 적용하면 식 (4)는 다음과 같이 나타내어진다.

$$-\frac{e}{\hbar} E^* \left[ g^i(\varepsilon) + (\varepsilon - \varepsilon^i) \frac{\partial g^i(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right] = \left[ \frac{\partial f_0^i(\varepsilon)}{\partial t} \right]_{\infty} \quad (A3)$$

$$g^i(\varepsilon) = \frac{e\hbar E^* r^i(\varepsilon)}{m_0} \frac{\partial f_0^i(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \quad (A4)$$

위 식 (A3)와 (A4)를 다시 식 (A2)에 대입하여 다음의 식과 같이 MS-BTE를 나타내었다.

$$\left[ \frac{\partial f_0^i(\varepsilon)}{\partial t} \right]_{fd} = \frac{-(eE)^2 r^i(\varepsilon)}{m_0} \left[ \frac{\partial f_0^i(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right]_{\infty} \quad (124)$$

$$+ (\varepsilon - \varepsilon^i) \frac{\partial^2 f_0^i(\varepsilon)}{\partial \varepsilon^2} \Bigg] = \left[ \frac{\partial f_0^i(\varepsilon)}{\partial t} \right]_{\infty} \quad (A5)$$

식(A5)의 RHS은 collision에 관한 것으로서 acoustic, intervalley, intersubband phonon scattering 항들을 포함하였다. Collision 항을 Fermi's golden rule과 deformation 이론에 의해 일반적인 수식으로 표현을 하면 다음과 같이 네 항들로 구성된다.

$$\begin{aligned} \left[ \frac{\partial F(k^*)}{\partial t} \right]_{\infty} = & \frac{2\pi}{\hbar} \sum_q [ (|k^* N_{q^*} + \mathbb{1}| H|k^* + q^*, N_{q^*})|^2 \\ & \times \delta(\varepsilon_{k^*} - \varepsilon_{k^*+q^*} + \hbar \omega_{q^*}) F(k^* + q^*) \\ & + (|k^* N_{q^*} - \mathbb{1}| H|k^* - q^*, N_{q^*})|^2 \\ & \times \delta(\varepsilon_{k^*} - \varepsilon_{k^*-q^*} - \hbar \omega_{q^*}) F(k^* - q^*) \\ & + (|k^* - q^*, N_{q^*} + \mathbb{1}| H|k^*, N_{q^*})|^2 \\ & \times \delta(\varepsilon_{k^*-q^*} - \varepsilon_{k^*} + \hbar \omega_{q^*}) F(k^*) \\ & + (|k^* + q^*, N_{q^*} - \mathbb{1}| H|k^*, N_{q^*})|^2 \\ & \times \delta(\varepsilon_{k^*+q^*} - \varepsilon_{k^*} - \hbar \omega_{q^*}) F(k^*) ] \end{aligned} \quad (A6)$$

여기서,  $|k^* N_{q^*} + \mathbb{1}| H|k^* + q^*, N_{q^*})$ 은  $k^* + q^*$  상태와  $k^*$  상태 사이의 perturbing potential의 matrix element를 나타내고, 첫 번째 항은 캐리어가  $k^* + q^*$  상태에서부터 phonon scattering에 의해 phonon 에너지  $\hbar \omega_{q^*}$ 를 방출하고  $k^*$  상태로 들어오는 경우, 둘째 항은 캐리어가  $k^* - q^*$  상태에서부터 phonon scattering에 의해 phonon 에너지  $\hbar \omega_{q^*}$ 를 흡수하여  $k^*$  상태로 들어오는 경우, 셋째 항은 캐리어가  $k^*$  상태에서부터 phonon scattering에 의해 phonon 에너지  $\hbar \omega_{q^*}$ 를 방출하고  $k^* - q^*$  상태로 들어오는 경우, 넷째 항은 캐리어가  $k^*$  상태에서부터 phonon scattering에 의해 phonon 에너지  $\hbar \omega_{q^*}$ 를 흡수하여  $k^* + q^*$  상태로 들어오는 경우를 각각 나타낸다.

2DEG 시스템인 양자 우물의 다중 에너지 부준위 구조에 대하여 collision 항들을 구하기 위해 starred space에서 다음과 같은 space 변환을 식 (A6)에 적용하였다.

$$\sum_q F(q^*) \Rightarrow \int_{q^*=0}^{q_0} \int_{\phi^*=0}^{2\pi} \frac{A}{(2\pi)^2} F(q^*) q^* d\phi^* dq^* \quad (A7)$$

Acoustic phonon scattering의 matrix element는

$$|k^* N_{q^*} + \mathbb{1}| H|k^* + q^*, N_{q^*})|^2 = \frac{Z_A^2 \hbar \omega_{q^*}}{2\rho A u_i^2} (N_{q^*} + 1) \delta_{k^*, k^*+q^*} \quad (A8)$$

으로 나타내어진다. 여기서,  $u_l$ 은 longitudinal sound velocity,  $N_{q^*}$ 는 phonon occupation number이고,  $\omega_{q^*}$ 와  $N_{q^*}$ 는 각각  $\omega_{q^*} = u_l^* q^*$ ,  $N_{q^*} + 1 = \frac{K_0 T}{\hbar u_l^* q^*}$ 이다. 그리고, Areal mass density,  $\rho$ 는 Schrodinger 방정식의 해로부터 계산되어지는 에너지 부준위 폭을 이용하여  $\rho = \rho_m \int \psi^i \psi^j dz$ 의 식을 이용하여 계산하였다. Acoustic phonon scattering 항에 대하여 식 (A6)을 식 (A7)에서 주어진 space 변환을 하면 다음과 같이 나타내어진다.

$$\begin{aligned} & \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{q^*} [ (|k^* N_{q^*} + 1| \hbar |k^* + q^*, N_{q^*})|^2 \\ & \times \delta(\varepsilon_{k^*} - \varepsilon_{k^* + q^*} + \hbar \omega_{q^*}) F(k^* + q^*) \\ & = \frac{(m_d^i)^{\frac{1}{2}} Z_A^2}{2\pi \hbar^2 \rho u_l^*} \int d^* dq^* dph^i \times \quad (A9) \\ & \delta(q^* + q^*) (N_{q^*} + 1) [f_0^i(\varepsilon + \hbar u_l^* q^*) + \\ & (K_{||}^* + q_{||}^*) g^i(\varepsilon + \hbar u_l^* q^*)] \end{aligned}$$

식(A9)에서  $f_0^i(\varepsilon + \hbar u_l^* q^*)$ 을 Taylor 급수로 전개하고 적분을 행하여 정리하면 전기장의 방향에 대칭한 성분의 acoustic phonon scattering 항은 아래와 같이 나타낼 수 있다.

$$\begin{aligned} \left[ \frac{\partial f_0^i(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right]_{ac} &= \frac{4(m_d^i)^{\frac{1}{2}} m_0 Z_A^2}{\hbar^3 \rho} \times \\ & \left\{ f_0^i(\varepsilon) + [K_0 T + (\varepsilon - \varepsilon^i)] \frac{\partial f_0^i(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right. \\ & \left. + K_0 T (\varepsilon - \varepsilon^i) \frac{\partial^2 f_0^i(\varepsilon)}{\partial \varepsilon^2} \right\} \quad (A10) \end{aligned}$$

그리고, 전기장의 방향에 비대칭한 성분의 acoustic phonon scattering 항으로부터

$$\frac{1}{\tau_{ac}^i(\varepsilon)} = \frac{(m_d^i)^{1/2} Z_A^2 K_0 T}{\hbar^3 \rho u_l^{*2}}$$

으로 나타낼 수 있다.

MS-BTE의 intervalley phonon scattering 항의 유도는 acoustic phonon scattering 항의 유도 과정과 비슷하다. Intervalley phonon scattering에 대한 matrix element는

$$\begin{aligned} & |k^* N_{q^*} + 1| \hbar |k^* + q^*, N_{q^*})|^2 = \quad (A11) \\ & \frac{Z_R^2 \hbar}{2\rho A \omega_R} |I_{ij}^2| (N_{q^*} + 1) \delta_{k^*, k^* + q^*} \end{aligned}$$

이다. 여기서, overlap integral  $|I_{ij}^2|$ 은 Schrodinger 방정식의 해로부터 다음과 같이 계산할 수 있다.

$$|I_{ij}^2| = \int_0^\infty \psi^i(z) \psi^j(z) dz \quad (A12)$$

여기서, 위첨자 i와 j는 collision에 의해 정해지는 전자의 초기 에너지 상태와 나중 에너지 상태를 각각 나타낸다. Intervalley phonon의 matrix element는 일차적으로는 에너지의 함수가 아니고 phonon 에너지,  $\hbar \omega_R$ 에 상수이므로 intervalley phonon scattering 항의 대칭 성분은 식 (A6)로부터

$$\begin{aligned} \left[ \frac{\partial f_0^i(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right]_{iv} &= \sum_{R \neq i, j=i} |I_{ij}^2| \frac{(m_d^i)^{\frac{1}{2}} Z_R^2}{\rho \hbar^2 \omega_R} \times \\ & \{ (N_R + 1) u_0(\varepsilon - \varepsilon^i + \hbar \omega_R) \\ & [f_0^i(\varepsilon + \hbar \omega_R) - f_0^i(\varepsilon)] \\ & + N_R u_0(\varepsilon - \varepsilon^i - \hbar \omega_R) \\ & [f_0^i(\varepsilon - \hbar \omega_R) - f_0^i(\varepsilon)] \} \quad (A13) \end{aligned}$$

이 된다. 여기서,  $N_R$ 은 Bose-Einstein occupation factor로서,  $N_R = 1/(e^{\hbar \omega_R / K_0 T} - 1)$ 와 같다. Acoustic phonon scattering 항과 마찬가지로 전기장의 방향에 비대칭한 성분의 intervalley phonon scattering 항으로부터

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_{iv}^i(\varepsilon)} &= \sum_{R \neq i, j=i} |I_{ij}^2| \frac{(m_d^i)^{1/2} Z_R^2}{\rho \hbar^2 \omega_R} \\ & \{ (N_R + 1) u_0(\varepsilon - \varepsilon^i + \hbar \omega_R) \\ & + N_R u_0(\varepsilon - \varepsilon^i - \hbar \omega_R) \} \end{aligned}$$

으로 나타낼 수 있다.

Intersubband phonon scattering 항의 유도 과정은 scattering에 의해 전자의 이전 에너지 상태와 이후 에너지 상태가 서로 다른 에너지 부준위를 나타내는 것을 제외하면 intervalley phonon scattering 항의 유도 과정과 동일하다. 따라서, intersubband phonon scattering 항의 대칭 성분은 식 (A13)에 주어진 것과 유사하게

$$\begin{aligned} \left[ \frac{\partial f_0^i(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right]_{isub} &= \sum_{R \neq i, j=i} |I_{ij}^2| \frac{(m_d^i)^{1/2} Z_R^2}{\rho \hbar^2 \omega_R} \times \\ & \{ (N_R + 1) u_0(\varepsilon - \varepsilon^j + \hbar \omega_R) \\ & [f_0^i(\varepsilon + \hbar \omega_R) - f_0^i(\varepsilon)] \} \end{aligned}$$

$$+ N_R u_0(\varepsilon - \varepsilon^j - \hbar \omega_R) \quad (A14)$$

$$[f_0^i(\varepsilon - \hbar \omega_R) - f_0^j(\varepsilon)]$$

으로 나타낼 수 있으며, 비대칭 성분에 대하여.

$$\frac{1}{\tau_{issb}^i(\varepsilon)} = \sum_{R \neq j, j \neq i} |I_{ij}|^2 \frac{(m_d^j)^{1/2} Z_R^2}{\rho \hbar^2 \omega_R}$$

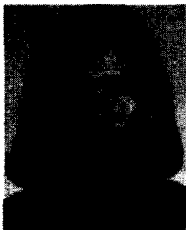
$$\{ (N_R + 1) u_0(\varepsilon - \varepsilon^j + \hbar \omega_R) + N_R u_0(\varepsilon - \varepsilon^j - \hbar \omega_R) \}$$

와 같이 나타낼 수 있다.

### 참 고 문 헌

- [1] Thomas G. Pedersen, Kjeld Pedersen and Thomas B. Kristensen, "Optical second-harmonic generation as a probe of quantum well states in ultrathin Au and Ag films deposited on Si(111)", Thin Solid Films, vol. 364, 1-2 pp. 86-90, 2000.
- [2] YC Yeo, TC Chong, MF Li, WJ Fan, "Electronic band structures and optical gain spectra of strained wurtzite GaN-AlxGal-xN quantum-well lasers", IEEE Journal of Quantum Electronics vol. 34 no. 3, pp.526-534, 1998.
- [3] R. Tsu, "Silicon-based quantum wells", Nature, Vol. 364, 1 July 1993.
- [4] M.S. Boris Gelmont and C. Moglestue, "Theory of Junction Between Two-Dimensional Electron Gas and p-Type Semiconductor", IEEE Trans. on ED. vol. 39, no. 5, pp. 1216-1223, 1992.
- [5] R. L. Liboff, Introduction to the Theory of Kinetic Equations. New York : John Wiley & Sons, 1969.
- [6] Q. L., S.-L. Wang, N. Goldsman and J. Frey, "RELY : A physics-Based CAD Tool for Predicting Time-Dependent Hot Electron Induced Degradation in MOSFETs", Solid-State Electronics, vol. 36, pp. 833-841, 1993.
- [7] C. E. Korman and I. D. Mayergoyz, "A Globally Convergent Algorithm for the Solution of the Steady-State Semiconductor Device", Journal of Applied Physics, vol. 68, no. 3, pp. 1324, 1990.
- [8] W. Quade, M. Rudan, and E. Scholl, "Hydrodynamic Simulation of Impact-Ionization Effects in P-N Junctions", IEEE Trans. Computer-Aided Design, vol. 10, no. 10, pp. 1287-1294, 1991.
- [9] S. E. Laux and M. V. Fischetti, "Monte Carlo Study of Velocity Overshoot in a 0.1-Micron CMOS Inverter", in Proceedings, 1995 IEDM, pp. 877-880, December 1997.
- [10] Blachman, N., "Mathematica : a Practical Approach", 2nd ed, Prentice Hall(Upper Saddle River, N.J), 1999.
- [11] E. M. Conwell, "High Field Transport in Semiconductors", Solid State Physics, Suppl. 9. Academic Press, New York, 1967.
- [12] B. N. Parlett, "The Symmetrical Eigenvalue Problem", Prentice Hall, 1980.
- [13] F. Stern and W. E. Howard, "Properties of Semiconductor Surface Inversion Layers in the Electric Quantum Limit", Physics Review, vol. 163, no. 3, 1967.

### 저 자 소 개



李 殷 珠(正會員)

1983년 2월 : 경북대학교 전자공학과 학사. 1985년 2월 : 경북대학교 전자공학과 석사. 1995년 5월 : University of Maryland, College Park, Ph.D. of Electrical Engineering. 2000년 9월~현재 : 한림

대학교 연구원임 재직중. <주관심분야> 나노 스케일

소자 모델링 및 시뮬레이션, 생체 신호 및 의용전자 소자 모델링