

## HEMT 소자의 2차원 계곡간 산란율 시뮬레이션

이준하\* · 이흥주

### Simulation of Two-Dimensional Intervalley Scattering Rate in HEMT Device

Jun-Ha Lee\* and Hoong-Joo Lee

**요약** 본 논문은  $Al_xGa_{1-x}As/Ga_yIn_{1-y}As/GaAs$  이종접합 소자의 2차원적 산란율을 해석하였다. 사각 양자 우물의 전자 준위는 슈뢰딩거와 포아송 방정식의 연계풀이에 의해 수치해석적으로 해석하였다. 수치해석으로 얻어진 파동함수와 에너지 준위를 이용하여 이 구조에서 주요한 2차원 산란율들을 구하였다. 극성광학 포논, 음향 포논, 압전 산란, 이온화된 불순물 산란, 그리고 합금 산란이 첫 번째 두개의 하부 밴드에 대해 고려되었다. 또한 2차원에 대해 구하여진 이 결과는 같은 영역에서의 3차원 산란율과 비교하였다.

**Abstract** In this paper the two-dimensional scattering rates were calculated in pseudomorphic  $Al_xGa_{1-x}As/Ga_yIn_{1-y}As/GaAs$  heterostructure systems. The electronic states of the square quantum well were determined by the numerical self-consistent solution of Poisson's and Schrodinger's equations. The numerically obtained wave functions and energy levels were used to obtain the major two-dimensional scattering rates in this structure. Polar optical- and acoustic-phonon scattering, piezoelectric, ionized impurity and alloy scattering were considered for the first two sub-bands. The results were compared to the three-dimensional scattering rates also calculated in the same region.

**Key Words** : Intervally scattering, HEMT device, Two-dimensional simulation

## 1. 서 론

최근 MBE(Molecular-Beam Epitaxy), MOCVD (Metal Organic Chemical Vapor Deposition)와 같은 결정 성장기술의 발달로 인하여, 고이동도 트랜지스터 (High Electron Mobility Transistor : HEMT)와 같은 초고속 전계 효과 소자에 대한 많은 연구가 진행되었다 [1-2]. 이러한 HEMT 소자의 채널영역에서 도핑된 높은 밴드갭 층에서의 자유전자들은, 도핑되지 않은 낮은 밴드갭 층으로 확산하여 양자 우물 속에 구속된 2-DEG (2-Dimensional Electron Gas)를 형성하여 접합계면에 수직인 방향으로의 운동이 제한된 상태로 이동한다. 따라서 채널영역에서의 전송 특성은 벌크(bulk)영역에서의 특성과는 차이가 있다. 또한 소자에 높은 전계를 가할때, 전자는 큰 운동량을 가진 포논과 산란하기 때문에 전자의 등가 또는 비등가 계곡사이의 천이(계곡간

산란)를 무시할 수 없다. 본 논문은 초고속 HEMT 소자의 계곡간 산란율의 2차원적 모델과 시뮬레이션 기법을 제시한다.

## 2. 본 론

### 2.1 격자구조에서의 전자이동

반도체 격자내에서의 전자는, 원자핵에 의한 전위와 전자 자체들에 의한 전위로 구성된, 주기적인 격자 전위에 영향을 받는다. 격자내에서의 전자 전송을 고려할 때, 극히 복잡한 many-body problem을 고려해야한다. 물성적 특성이 다른 물질을 이종접합하게 되면 접합계면에서는 에너지 밴드의 구조 차이에 따라서 양자우물이 형성되고 양자 우물내에는 전자들이 갇히게 되는 현상이 생긴다. 이때 양자 우물에 갇힌 전자는 한쪽 방향으로 운동이 제약받고 2차원적으로만 거동이 자유스러운 형태가 되어 이를 2차원 전자가스(2-Dimensional Electron Gas : 2-DEG)라고 부른다. HEMT 구조의 반도체에서는 양자우물에 모이는 전자가 외력을 받아서 주어진 방향으로 운동하면서 나타나는 현상이 소자의

\* 상명대학교, 컴퓨터시스템공학전공  
Tel : 041-550-5362  
E-mail : junha@smu.ac.kr

전송특성을 좌우하게 된다. 운동하던 전자의 에너지가 우물언덕보다 높은 값을 가지면 언덕을 넘어가게 되어 3차원적 운동을 할 수도 있고, 위치에 따라서는 주어진 에너지밴드내의 다른 밸리로 천이되어 운동을 하는 성질을 나타낼 수도 있으므로 소자의 동작특성을 연구하는데 반드시 고려해야만 한다. 여기서는 이중이종접합을 가지는 HEMT 소자에서 양자 우물의 형태와 여기에 모이게 되는 전자의 농도 및 양자화 에너지 준위를 수치적 풀이에 의한 계산과정을 다루고자 한다.

## 2.2 Self-Consistent 풀이 방법

수치 해석방법에 있어서 단일 매질을 갖는 소자의 경우에는 주어진 방정식을 전체 영역에 대하여 한번의 풀이에 의한 간단히 해결이 가능하지만 이중접합 물질의 경우 계면의 물성적 차이로 인해 새로운 경계 조건이 필요하다[3].

먼저 슈뢰딩거 방정식의 경계조건은 전위 에너지에 의한 전자의 상태를 기술하는 문제로서 소자에 인가한 전압과 물질의 에너지 밴드에 의한 입력변수가 결정된다. 즉, 전위 장벽이 곧 경계조건이 된다. 포아송 방정식에 있어서는 인가전압 및 전극과 반도체 물질과의 전자 친화력의 차이로 나타나는 일함수와 이중 접합 계면의 친화력 차이로 나타나는 전하의 이동이 문제가 된다. 본 연구에서 포아송 방정식의 2차원적 풀이 시 bulk 방향과 전극물질 이외의 소자 양옆 방향은 수직전위 기울기가 zero인 neumann경계 조건을 주었고, 전극(ohmic contact)은 인가한 값을 나타내는 dirichlet 경계조건을 주었고, 게이트단자(Schottky contact)는 아래와 같은 경계조건을 주었다.

$$V_c = \begin{cases} V_{ds} = V_{ss} & \text{for Drainor Source} \\ q_{m-s} \Phi - V_{gs} + \frac{1}{q}(E_g - E_{fi}) & \text{for Gate} \end{cases} \quad (2.1)$$

여기서,  $V_{ds}$ ,  $V_{ss}$  및  $V_{gs}$ 는 각 단자별 인가전압이고,  $E_g$ 은 표층물질의 에너지 갭을  $E_{fn}$ 는 전하 중심 영역에서의 페르미 준위를 나타내고,  $\Phi_{m-s}$ 는 반도체와 금속물질과의 일함수 차이를 나타낸다.

또한 이중 물질 접합구조의 추가적인 경계조건으로 접합 계면의 조건이 주어지는데 아래와 같은 두 계면 경계조건을 적용하였다.

$$\epsilon_{AlGaAs} \frac{\partial \Phi}{\partial z} \Big|_{z^+} + qn_s = \epsilon_{GaInAs} \frac{\partial \Phi}{\partial z} \Big|_{z^-} \quad (2.2)$$

$$\epsilon_{GaInAs} \frac{\partial \Phi}{\partial z} \Big|_{z^+} + qn_s = \epsilon_{GaAs} \frac{\partial \Phi}{\partial z} \Big|_{z^-} \quad (2.3)$$

기준 전위는 페르미 준위를 0값으로 하였다.

## 2.3 산란을 계산

산란현상은 격자내에서 운동하던 전자의 운동궤적 및 에너지가 변하는 것으로서, 보통 반고전적 전송에서 전자 상호작용은 인가된 전계와 무관하다고 가정하며, 그 충돌은 순간적으로 일어난다고 본다[4]. 2-DEG 시스템에 대하여, 산란율은 3차원의 경우와 마찬가지로 페르미의 황금율로부터 계산된다. 이 과정에서는 행렬 요소의 계산이 필요하고, 2-DEG에 대한 전자상태와 포논의 성질에 대한 사전지식이 필요하다. 이중접합구조에서 전계는 접합 경계면으로부터의 거리에 따라 변하므로, 정확한 파동함수와 고유치를 구하기 위해서 슈뢰딩거와 포아송 방정식의 연계풀이로부터 얻어진 파동함수를 사용한다. 여기에서는 2-DEG의 비포물형 인자를 고려한 두개의 부밴드만 취급하기로 하고, 계면에서의 포논은 격자정합 이중접합 구조를 고려하여 벌크에서의 포논과 같은 성질을 갖는 것으로 취급한다[5-6].

2차원 산란에 대한 행렬 요소의 제공은 다음과 같이 주어진다.

$$|M_{mn}|^2 = \int |M(Q, q)|^2 |I_{mn(q)}|^2 dq \quad (2.4)$$

여기서  $M(Q, q)$ 은 3차원산란에 대한 행렬요소를 나타내고,  $Q$ 와  $q$ 는 각각 포논 파동벡터의 접합계면에 평행한 성분과 수직인 성분을 나타내고,  $m$ 과  $n$ 은 부밴드 지표로  $m=n$ 이면 부밴드내 천이(Interband transition)를,  $m \neq n$ 이면 부밴드간 천이를 의미한다. 윗 식에서의 중첩 성분  $I_{mn}$ 은 다음과 같다.

$$I_{mn} = \int F_m(z) F_n(z) \exp(iqz) dz \quad (2.5)$$

여기서  $F(z)$ 는 각 에너지 준위에서의 정규화된 포락 파동함수(Envelope Wavefunction)이다.

부밴드  $m$ 의  $k$ 상태를 점유하고 있는 전자가 부밴드  $n$ 의  $k'$ 상태로 천이할 확률은 다음 식으로 주어진다.

$$W_{mn}(k, k') = \frac{2\pi}{h} |M_{mn}|^2 \delta(E_n(k') - E_m(k)) \quad (2.6)$$

2차원 산란율은 윗식을 다음과 같이 적분함으로써 계산된다.

$$S_{mn}(E) = \frac{V_c}{8\pi^3} \int W_{mn}(k', k) d^2k' \quad (2.7)$$

여기서,  $d^2k' = k' \sin \theta_r dk' d\theta_r$ 로 쓸 수 있고, 다시  $k'dk'$ 을 2-DEG에 대한 에너지-

파동벡터 관계식을 이용하면,

$$k'dk' = \frac{m^*}{h^2}(1 + 2\alpha E)dE \quad (2.9)$$

로 된다. 여기에서 전도대 비포물형 효과를 알아보기 위해  $\alpha=0$ 으로 두면,  $k'dk' \propto dk'$ 이 되므로, 3차원 산란의 경우에서와 마찬가지로 전도대의 비포물형을 고려하는 것은 산란율의 증가를 가져오게 된다는 것을 알 수 있다.

### 2.4 시뮬레이션 결과

그림 1은 연계플리로부터 얻은 파동함수와 에너지

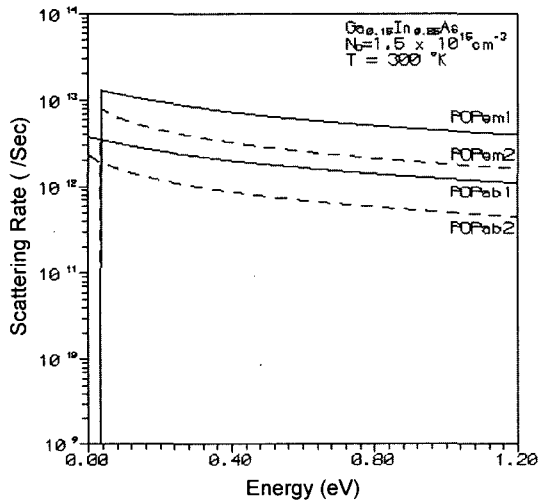


그림 1. 가장 낮은 첫번째(POPem1, POPab1)와 두 번째(POPem2, POPab2) 부밴드에서의 에너지에 따른 2차원 극성광학 포논 산란율

준위를 이용하여, 사각 양자 우물에 구속된 2-DEG에 대하여 가장 낮은 첫번째(POPem1, POPab1)와 두 번째(POPem2, POPab2) 부밴드에서의 에너지에 따른 2차원 극성광학 포논 산란율을 나타낸다. 또한 그림 2는 가장 낮은 첫번째(AL1)와 두번째(AL2) 부밴드에서의 에너지에 따른 2차원 음향 포논 산란율을 계산한 것이다. 그림 3에서 나타낸 것과 같이 가장 낮은 첫번째 부밴드내 산란(intersubband scattering) 이 두번째 부밴드에서 보다 우세한 것으로써 거의 모든 전자가 첫번째 부밴드에 집중한다는 것을 증명한다. 그림 4에서는 첫번째 부밴드에서의 2-D와 3-D의 총 산란율을 비교하였

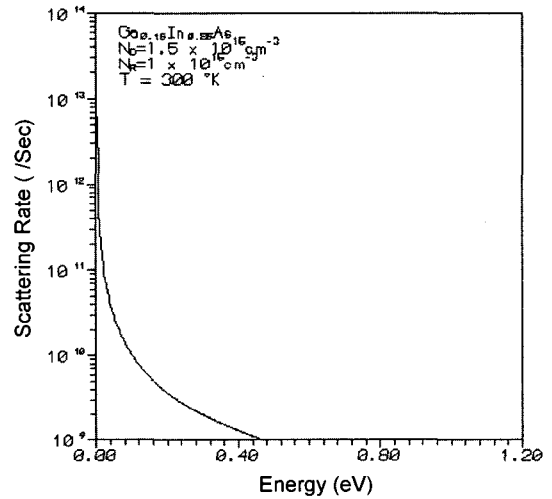


그림 3. 가장 낮은 부밴드에서의 에너지에 따른 2차원 이온화된 불순물 산란율

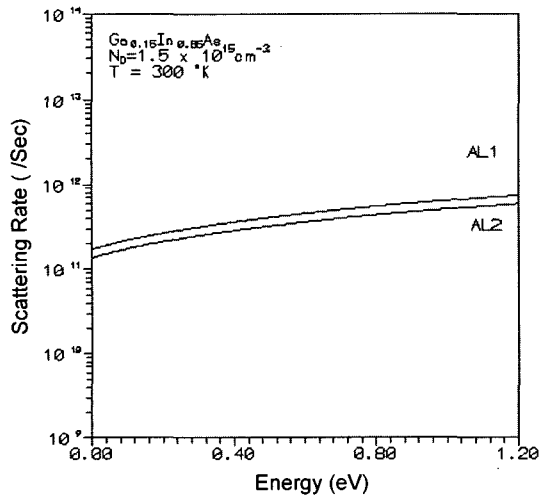


그림 2. 가장 낮은 첫번째(AL1)와 두번째(AL2) 부밴드에서의 에너지에 따른 2차원 음향 포논 산란율

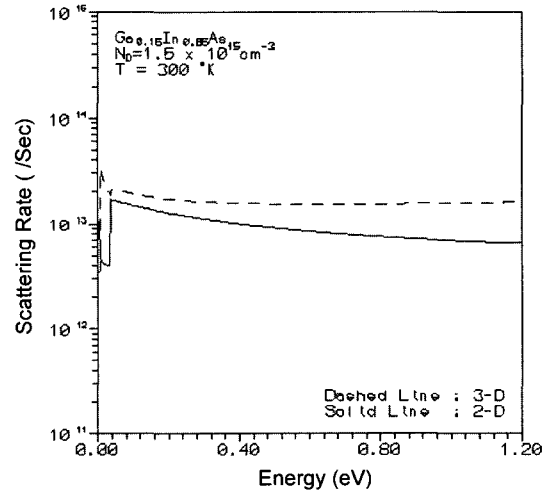


그림 4. 가장 낮은 부밴드에서의 에너지에 따른 2차원과 3차원의 총산란율

다. 2-D 산란율이 3-D보다 작다는 결과로 이러한 산란율 감소는 이동도의 증가를 가져오며, 결국 전류량의 변화를 초래하여 양자 우물내에 구속된 2차원 전자가스의 특성에 의한 향상된 전도를 예측할 수 있다.

### 3. 결 론

슈뢰딩거와 포아송 방정식의 연계풀이에 의해 수치 해석적으로 구한 파동함수와 에너지 준위를 이용하여 300K에서 사각우물을 형성하는  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{Ga}_y\text{In}_{1-y}\text{As}/\text{GaAs}$  HEMT 소자 채널 영역에서의 극성광학 포논, 음향 포논, 압전 산란, 이온화된 불순물 산란, 그리고 합금 산란에 대한 2차원 산란율을 계산하여, 같은 영역에서의 3차원 산란율과 비교하였다. 그 결과 bulk영역에서 가장 우세한 이온화된 불순물 산란이, 2-DEG 시스템에서 크게 감소되었음을 알 수 있었는데, 이는 변조도평에 의하여 이온화된 불순물을 2-DEG가 존재하는 채널영역의 불순물 양을 감소시켰기 때문으로 해석된다. 전체적으로 2-DEG에대한 운동의 자유도(freedom of motion)가 1차원 감소함으로 인해 2차원 총산란율은 3차원 총산란율 보다 작아진다는 것을 알 수 있었다. 이러한 결과로부터 산란율의 감소는 이동도의 증가를 가져오고 결국 전류량의 변화를 초래할 것이며, 또한 Schrodinger 방정식과 Poisson 방정식의 연계풀이 과정에서 이산화 에너지 준위와 파동함수를 구함으로써 사각 양자우물에서의 보다 정확한 전자 전송 특성의 해석

이 가능하다고 본다. 앞으로 본 연구로부터 계산한 2차원 산란율 고려하여 보다 정확한 pseudomorphic HEMT 소자의 전송특성 해석을 할 수 있을 것으로 기대된다.

### 참고문헌

- [1] J. J. Duderstadt and J. R. Martin, "Transport Theory", John Wiley and Sons, New York, 1979.
- [2] Di Martino, et. al., "Statistical nonlinear model of MESFET and HEMT devices", IEE Proceedings - Circuits, Devices & Systems, Vol. 150, Issue 2, p95, Apr., 2003.
- [3] B. Vinter, "Influence of charged impurities on Si inversion-layer electrons", J. Phys. Rev. B, vol, 26, pp. 6808-6825, 1982.
- [4] I-H. Tan, G. L. Snider et al., "A Self-consistent Solution of Schrodinger-Poisson equations using a Non-uniform Mesh", J. Appl. Phys., vol, 68(8), pp. 4071-4076, 1990.
- [5] B.R. Nag, "Electron Transport in Compound Semiconductors", Springer Series in Solid-State Sciences 11, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, 1980.
- [6] Zanoni, et. al., "Factors Limiting the Maximum Operating Voltage of Microwave Devices", International Journal of High Speed Electronics & Systems, Vol. 10 Issue 1, p.119, Mar., 2000.