

상태밀도와 overlap integral이 실리콘내 전자의 임팩트이온화율에 미치는 영향

정학기 · 유창관 · 이종인
군산대학교 전자공학과

Influence of the density of states and overlap integral on impact ionization rate for silicon

Hak-kee Jung · Chang-kwan You · Jong-in Lee
Dept.of Electronic Eng., Kunsan National University
E-mail : youck@eltron.kunsan.ac.kr

요 약

임팩트이온화는 고전계하에서 고에너지를 지닌 캐리어간 산란으로써 전자전송해석에 필수적인 요소이다. 그러나 포물선 또는 비포물선 E-k관계는 고에너지에서 실제 밴드구조와 매우 상이한 결과를 나타내므로 임팩트이온화에 대한 정확한 모델은 풀밴드 E-k관계와 페르미의 황금법칙을 이용하여 제시하고 있다. 본 연구에서는 풀밴드를 이용하여 실리콘 임팩트이온화율에 영향을 미치는 상태밀도와 에너지밴드구조 관계, overlap integral의 에너지에 대한 변화를 조사·분석하였다. 실리콘의 에너지밴드구조를 구하기 위하여 경험적 의사포텐셜방법을 사용하였으며 상태밀도를 구하기 위하여 사면체방법을 사용하였다. 또한 임팩트이온화율을 구하기 위하여 페르미의 황금법칙을 사용하였다. 결과적으로 상태밀도는 에너지증가에 따라 단조 증가하는 임팩트이온화율과 달리 에너지밴드구조에 따라 변화하였다. 그러나 overlap integral은 에너지증가에 따라 큰 값을 갖는 분포가 증가함으로써 임팩트이온화율에 직접 영향을 미치는 것을 알 수 있었다.

ABSTRACT

Impact ionization, which is a kind of a carrier-carrier interaction process occurring in a semiconductor under the influence of a high electric field, is necessary to analyse carrier transport properties. Since the parabolic or nonparabolic E-k relation is different from real band structure in high energy range, exact model of impact ionization have been presented using full band E-k relation and Fermi's golden rule. We have investigated relation of density of states, energy band structure and overlap integral. We make use of empirical pseudopotential method in order to calculate energy band structure of silicon, tetrahedron method in order to calculate density of states. We know density of states very depends on energy band structure and overlap integral depends on the primary electron energy.

1. 서 론

임팩트이온화는 고전계하에서 고에너지를 지닌 캐리어간 산란으로써 전자전송해석에 필수적인 요소이다. 그러나 포물선 또는 비포물선 E-k관계를 이용할 경우 고에너지에서 실제 밴드구조와 매우 상이한 결과를 나타내므로 임팩트이온화에 대한 정확한 모델은 풀밴드 E-k관계와 페르미의 황금법칙을 이용하여 제시하고 있다[1]. 본 연구에서는 풀밴드를 이용하여 실리콘 임팩트이온화율에 영향을 미치는 상태밀도와 에너지밴드구조 관계, overlap integral의 에너지에 대한 변화

를 분석할 것이다. 실리콘의 에너지밴드구조를 구하기 위하여 경험적 의사포텐셜방법(empirical pseudopotential method)[2]을 사용하였으며 상태밀도를 구하기 위하여 사면체방법(tetrahedron method)[3]을 사용하였다. 포물선 E-k관계에서는 overlap integral이 거의 1이므로 계산에 영향을 미치지 못하지만 풀밴드를 사용하여 계산할 때에는 에너지에 따라 크게 변화하므로 계산과정에 반드시 삽입하여야 할 것이다. 또한 상태밀도함수도 풀밴드 E-k관계에서 유도될 것이며 이것이

임팩트이온화율에 미치는 영향을 고찰할 것이다.

II. 본 론

실리콘의 에너지밴드구조를 구하기 위하여 경험적 의사포텐셜방법을 사용하였다. 이는 form factor를 결정하고 식 (1)과 같은 헤밀토니안의 고유값을 구하므로써 에너지밴드구조를 결정하는 방법으로써 실험값에 가장 근사한 계산결과를 유도할 수 있다.

$$H^{i,j} = \frac{\hbar^2}{2m_0} |\mathbf{k} + \mathbf{G}_i|^2 + V_s(0) \quad i=j \quad (1)$$

$$= V_s(\mathbf{G}_i - \mathbf{G}_j) \cos[(\mathbf{G}_i - \mathbf{G}_j) \cdot \boldsymbol{\tau}] \quad i \neq j$$

여기서 \mathbf{k} 는 브릴로우인영역내 파동벡터이며 \mathbf{G}_i 와 \mathbf{G}_j 는 역격자벡터, $\boldsymbol{\tau} = a/8[111]$ (a:격자상수) 그리고 V_s 는 대칭적 form factor이다. Form factor를 steepest descent 방법[4]을 사용하여 결정하였으며 $V_3^s = -0.2258Ry$, $V_8^s = 0.05698Ry$, $V_{11}^s = 0.070709Ry$ 의 값을 구하여 사용하였다. 계산에는 113개의 역격자벡터를 사용하였으며 그림 1에 본 연구에서 계산된 에너지 밴드구조 중 3개의 가전자대와 4개의 전도대에 해당하는 에너지밴드구조를 도시하였다. 본 연구에서는 local form factor만을 사용함으로써 nonlocal corrections와 스핀궤도분리(0.04eV)에 의한 효과는 무시하였다.

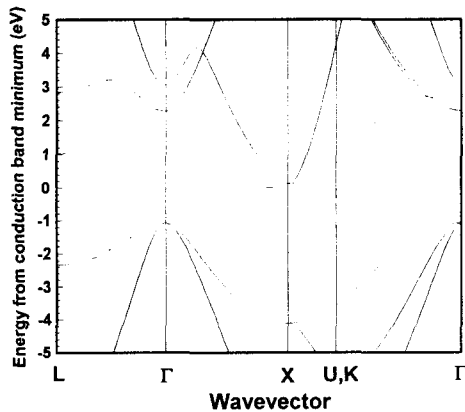


그림 1. 경험적 의사포텐셜방법에서 계산된 실리콘의 에너지밴드 구조

상태밀도는 모든 산란율을 구할 때 필요한 요소로써 산란율에 직접적인 영향을 미치므로 이의 정확한 결과를 유도하여 사용해야만 한다. 폴밴드 $E-k$ 관계를 이용하여 E 와 $E+dE$ 간의 에너지에서 전자의 상태밀도 $N(E)$ 를 계산하기 위해서 사면체방법을 이용하였다. 이 방법은 그림 2와

같이 브릴로우인영역을 $1/16(2\pi/a)$ 으로 균등하게 나누어 격자를 형성한 후 각 정육면체를 6개의 균등한 사면체로 분할하고 미소 사면체에 대하여 등에너지면을 구하며 이때 등에너지면이 사면체를 가로지르는 면적과 사면체의 체적을 이용하여 상태밀도를 구하는 방법으로써 최근 폴밴드 $E-k$ 관계를 이용하여 상태밀도를 계산할 때 광범위하게 사용되어 지고 있다.

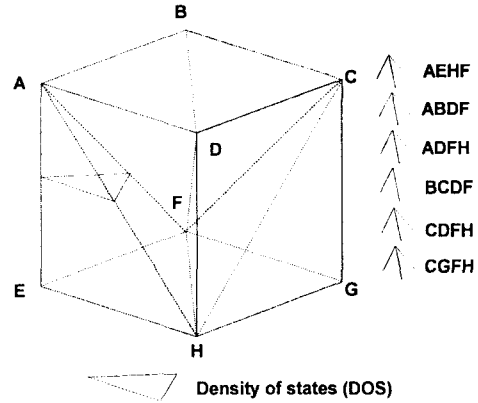


그림 2. 상태밀도를 구하기 위한 사면체 구조

이는 풀기 어려운 체적적분을 해석학적으로 풀 수 있다는 장점이 있다. 즉 상태밀도 $N(E)$ 는

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

와 같이 주어지는 체적적분으로써 폴밴드 $E-k$ 관계를 이용하여 계산하여야 한다. 그러나 사면체 방법에서는 각 사면체의 꼭지점에 해당하는 에너지를 $E_1 < E_2 < E_3 < E_4$ 의 순서로 배열하면 표 1과 같은 해석학적 표현으로 쉽게 상태밀도를 구할 수 있다. 표 1에서 V 는 사면체의 체적을 나타내며 Δ 는 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 1. 사면체방법에서 상태밀도의 해석학적 표현

E	$N(E)$
$E_1 > E$	0
$E_1 \leq E \leq E_2$	$3V \Delta_1^2 / \Delta_{21} \Delta_{31} \Delta_{41}$
$E_2 \leq E \leq E_3$	$3V \Delta^{-1} [1 - \Delta^2 \Delta_m^2 / \Delta_{31} \Delta_{41} \Delta_{32} \Delta_{42}]$
$E_3 \leq E \leq E_4$	$3V \Delta_4^2 / \Delta_{41} \Delta_{42} \Delta_{43}$
$E_4 < E$	0

전도대의 전자(상태 1)가 가전자대의 전자(상태 2)와 충돌하여 전자·정공 쌍이 생성되며 결과적으로 전도대에 두 개의 전자(상태 1' 와 2')와 가전자대에 정공(상태 2)을 남기게 되는 과정이 임팩트이온화이다. 페르미의 황금법칙에 의하여 임팩트이온화율은

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

이며 여기서 M 은 임팩트이온화의 행렬요소로서 임팩트이온화에 관여한 전자들의 스핀을 고려하여 direct항 $|M_d|$ 와 exchange항 $|M_e|$ 그리고 상호간섭항 $|M_d - M_e|$ 로 구분된다. 또한 델타함수는 에너지보존을 나타낸다. 행렬요소는

$$M_d = \int \int \phi_1^*(r_1) \phi_2^*(r_2) V(r_1, r_2) \times \phi_1(r_1) \phi_2(r_2) d^3r_1 d^3r_2 \quad (3)$$

$$M_e = \int \int \phi_2^*(r_1) \phi_1^*(r_2) V(r_1, r_2) \times \phi_1(r_1) \phi_2(r_2) d^3r_1 d^3r_2$$

로 표시되며 여기서 전도대내의 전자와 가전자대의 전자사이의 상호작용은 다음식과 같이 표시되는 쿨롱포텐셜을 이용하였다.

$$V(r_1, r_2) = \frac{1}{\Omega} \sum_q \frac{e^2}{\epsilon_0 \epsilon(q, \omega) q^2} e^{iq \cdot (r_1 - r_2)} \quad (4)$$

여기서 Ω 는 시료의 체적, $\epsilon(q, \omega)$ 는 파수와 주파수에 의한 유전함수를 표기한다. 식 (4)에서 파동함수 ϕ 는 역격자벡터에 의한 다음 함수를 사용한다.

$$\phi_\xi(r) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{G_\xi} A_\xi(G_\xi + k_\xi) e^{i(G_\xi + k_\xi) \cdot r} \quad (5)$$

여기서 $A(G_\xi)$ 는 의사포텐셜방법에 의하여 계산된 고유함수이다. 식 (4)와 (5)을 식 (3)에 대입시키면

$$M_i = \frac{e^2}{\epsilon_0 \Omega} \sum_G \frac{1}{\epsilon(q_i, \omega_i) q_i^2} \times A_1(G_1 + k_1) A_2(G_2 + k_2) \times A_1^*(G_1 + k_1) A_2^*(G_2 + k_2) \times \delta_{k_1 + k_2, k_1' + k_2' + G_0} \quad (i=d \text{ or } e)$$

$$q_d = k_1 + G_1 - k_1' - G_1 \quad \omega_d = (E_1' - E_1)/\hbar$$

$$q_e = k_2 + G_2 - k_1' - G_1 \quad \omega_e = (E_1' - E_2)/\hbar$$

이며 여기서 델타함수는 운동량보존을 표시한다.

$G_0 = G_1 + G_2 - G_1 - G_2$ 이며 $G_0 = 0$ 일 때 뿐만 아니라 $G_0 \neq 0$ 인 umklapp항을 15개 포함하여 계산하였다.

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

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

$P_{ii}(k_1, k_2, k_1', k_2')$ 와 $P_{ii}(k_1, k_2, k_2', k_1')$ 는 동일한 과정이나 실제 계산에서 두 번 계산되므로 1/2로 나누어 주었다.

III. 계산결과 및 고찰

임팩트이온화계산에서 가장 시간이 소요되는 부분은 overlap integral계산 부분이며 각 그리드에 대하여 113개의 파동함수를 사용할 수 있으나 그림 3에서 알 수 있듯이 15개의 파동함수를 사용할 때에도 거의 동일한 결과를 유도할 수 있으므로 본 연구에서는 계산시간을 단축시키기 위하여 15개의 파동함수만을 사용하여 계산하였다.

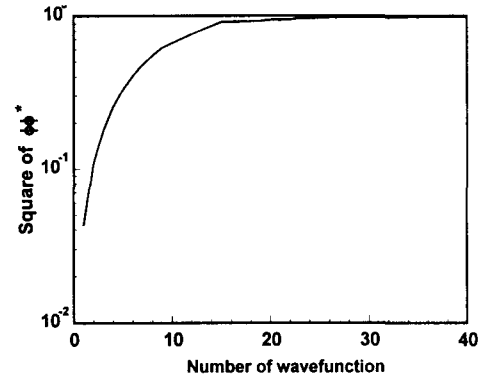


그림 3. 계산에 사용한 파동함수의 수와 곱의 관계

그림 4에 이와 같은 과정을 통하여 구한 실리콘의 임팩트이온화율을 $1/8(2\pi/a)$ 로 균등격자를 구성한 후 계산한 Kamakura et al.[5]의 결과와 함께 도시하였다. 결과적으로 거의 동일한 결과를 유도할 수 있었으나 격자크기에 따라 약간의 차이가 발생함을 알 수 있었다. 또한 방향성에 따라 임팩트이온화의 문턱에너지가 이방성을 보이는 GaAs와는 달리 문턱에너지가 거의 등방성을 보이면서 약 1.2-1.6 eV의 값을 갖음을 알 수 있었

다.

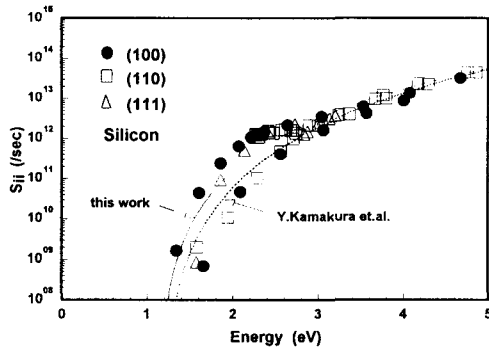


그림 4. 실리콘내 전자의 임팩트이온화율

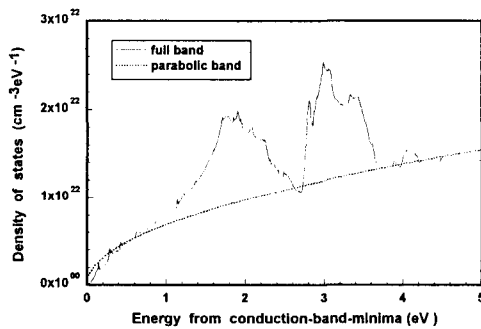


그림 5. 실리콘의 상태밀도함수

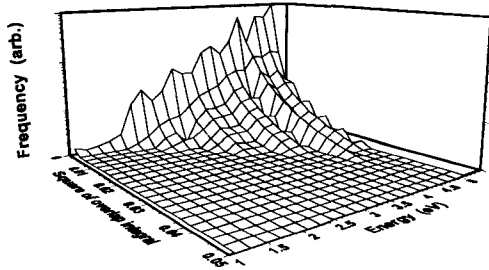


그림 6. Overlap integral의 분포도

이러한 임팩트이온화율에 영향을 미치는 상태 밀도와 overlap integral을 구하여 그림 5과 6에 도시하였다. 상태밀도는 고에너지에서 포물선 $E - k$ 관계를 이용한 결과와 매우 상이한 결과를 유도하였으며 또한 에너지증가에 따라 단조증가하는 임팩트이온화율과 달리 에너지밴드구조에 따라 변화함을 알 수 있었다. 그러나 overlap

integral은 에너지증가에 따라 큰 값을 갖는 분포가 증가하므로 임팩트이온화율과 동일한 증가율을 보이는 것을 알 수 있다.

IV. 결 론

본 연구에서는 실리콘 임팩트이온화율에 영향을 미치는 상태밀도함수와 overlap integral에 대하여 조사·분석하였다. 즉, 폴밴드와 페르미의 황금법칙을 이용한 임팩트 이온화율에 영향을 미치는 상태밀도와 에너지밴드구조 관계, overlap integral의 에너지에 대한 변화를 조사·분석하였다. 실리콘의 에너지밴드구조를 구하기 위하여 경험적 의사포텐셜방법을 사용하였으며 상태밀도를 구하기 위해서 브릴로우인영역을 $1/16(2\pi/a)$ 로 균등하게 나누어 격자를 형성한 후 각 정육면체를 6개의 균등한 사면체로 분할한 사면체 방법을 이용하였다. 또한 임팩트이온화율을 계산하기 위해서 페르미의 황금법칙을 이용하였으며 본 연구에서는 계산시간을 단축시키기 위하여 15개의 파동함수만을 사용하여 계산하였다. 그리하여 에너지 증가에 대한 임팩트이온화율과 overlap integral의 에너지에 대한 변화를 구하였다. 결과적으로 상태밀도함수는 에너지밴드구조에 따라 변화하며 overlap integral은 에너지가 증가함에 따라 큰 값을 갖는 분포가 증가함으로써 임팩트이온화율에 직접 영향을 미치는 것을 알 수 있었다. 이와 같은 결과는 임팩트이온화의 정확한 모델제시에 사용될 수 있으리라 사료된다.

참고문헌

- [1] H.K.Jung, H.Nakano, K.Taniguchi, *6th international workshop on computational electronics*, pp.202, 1998.
- [2] M.L.Cohen, T.K.Bergstresser, *Phys. Rev.*, 144, p.789, 1966.
- [3] O.Jepson, O.K.Anderson, *Solid State Comm.*, 9, pp.1763, 1970
- [4] H.H.Rosenbrock, *Comput. J.*, 3, pp.175, 1960.
- [5] Y.Kamakura, H.Mizuno, M.Yamaji, M.Morifuji, K.Taniguchi, C.Hamaguchi, *J. App. Phys.*, 75, pp.3500, 1994.