

# 폴밴드 모델을 이용한 77K Si의 포논산란 및 임팩트이온화에 관한 연구

유창관 · 고석웅 · 정학기 · 이종인

·군산대학교

## Phonon Scattering and Impact Ionization for Silicon using Full Band Model at 77K

Chang-kwan You · Seok-woong Ko · Hak-kee Jung · Jong-in Lee

·Kunsan National University

E-mail : youck@eltron.kunsan.ac.kr

### 요 약

포논산란과 임팩트이온화 모델은 폴밴드 모델과 페르미 황금법칙을 이용한 고에너지 영역에서 hot carrier 전송을 해석하기 위해서 제시되어 왔다. 본 연구에서는 77K와 300K에서 실제에너지 밴드 구조를 이용한 Si의 임팩트이온화 과정에 대해서 온도 의존성을 조사했다. 폴밴드 모델은 local form factors을 이용한 의사포텐셜방법에서 얻어지고, 산란율 계산에 이용된다. 정확한 임팩트이온화율 계산은 파동벡터와 주파수에 의존하는 유전함수를 필요로 한다. 포논 산란율은 상태밀도에 선형적으로 의존하기 때문에 포논산란율과 상태밀도의 비에 대한 선형함수 유도에 의해서 구해진다. 임팩트이온화율  $P_{ii}$ 는 first principle's theory로부터 계산되어지고, 수정된 Keldysh 공식에 의해서 최적화되었다.

### ABSTRACT

Phonon scattering and impact ionization models have been presented to analyze hot carrier transport in high energy region, using full band model and Fermi's golden rule. We have investigated temperature dependent properties for impact ionization process of Si using realistic energy band structures at 77K and 300K. The realistic full band model, obtained from the empirical pseudopotential method with local form factors, is used to calculate scattering rate. The accurate calculation of impact ionization rate requires the use of a wavevector- and frequency-dependent dielectric function  $\epsilon(\mathbf{q}, \omega)$ . The empirical phonon scattering rate  $P_{ph}$  is given by deriving from linear function for  $P_{ph}$  versus  $D(E)$  since the phonon scattering rate is linearly depended on density of states  $D(E)$ . Impact ionization rate  $P_{ii}$  is calculated from the first principle's theory, and fitted by modified Keldysh formula having power of above 2.

### 1. 서 론

임팩트이온화현상은 높은 운동에너지를 갖는 핫(hot)캐리어가 다른 산란매카니즘에 의하여 에너지손실이 발생하기 전에 전자정공쌍을 생성하는 과정으로써 지금까지는 임팩트이온화가 발생하는 문턱에너지  $E_{th}$ 와 임팩트이온화의 강도를 나타내는 척도인  $P$ 에 의하여 표시되는 Keldysh 공식이 이용되었다.[1] 즉, 임팩트이온화계수를 실험값과 정합시키기 위하여  $E_{th}$  및  $P$ 를 조정하였으며

특히 포논산란율도 함께 조정하여 임팩트이온화율을 구하였다. 그러나 Keldysh 공식은 포물선 에너지밴드(parabolic energy band)구조를 사용하였을 때 유도되는 공식으로써 에너지가 높은 영역에서 발생하는 임팩트이온화를 해석하는데에는 물리적의미를 갖지 못한다. 그러므로 본 연구에서는 페르미의 황금법칙과 Si의 full 에너지밴드를 이용하여 임팩트이온화율을 구한 후[2], 이 이론

화율과 에너지관계를 나타내는 해석학적 모델을 설정하였다.

## II. 본 론

실리콘의 에너지밴드구조를 구하기 위하여 경험적 의사포텐셜방법[3]을 사용하였다. 이는 form factor를 결정하고 식 (1)과 같은 해밀토니안의 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 factor는 steepest descent 방법[4]을 사용하여 결정하였다.

표 1. 의사포텐셜 form factor (Ry)

	$V_4^s$	$V_8^s$	$V_{11}^s$
300K	-0.225800	0.056980	0.070709
77K	-0.207480	0.049510	0.089600

계산에는 113개의 역격자벡터를 사용하였으며 그림 1에 본 연구에서 계산된 에너지 밴드구조 중 4개의 가전자대와 4개의 전도대에 해당하는 에너지밴드구조를 도시하였다. 본 연구에서는 local form factor만을 사용함으로써 nonlocal corrections와 스핀케도분리(0.04eV)에 의한 효과는 무시하였다.

상태밀도는 모든 산란율을 구할 때 필요한 요소로써 산란율에 직접적인 영향을 미치므로 이의 정확한 결과를 유도하여 사용하여야만 한다. 폴밴드  $E-\mathbf{k}$ 관계를 이용하여  $E$ 와  $E+dE$ 간의 에너지에서 전자의 상태밀도를 계산하기 위해서 브릴로우인영역을  $1/16(2\pi/a)$ 으로 나눈 사면체방법[5]을 이용하였다.

포논산란율  $P_{ph}(E)$ 과 상태밀도  $D(E)$ 의 선형적인 관계 특성[6]을 이용하여 포논산란율을 구하였다. 즉,

$$P_{ph}(E) = (aE + b)D(E) \quad (2)$$

이며  $a, b$ 는 각 포논모드에 따라 결정되는 상수로서  $0 < E < 4.0eV$  구간에서의  $a, b$ 값을 표 2에 도시하였다.

표 2. 포논산란율 계수 ( $cm^3sec^{-1}$ )

Temp	Coeff	$Ac(ab)$	$Ac(em)$	$Op(ab)$	$Op(em)$
300K	a	$8.59 \times 10^{10}$	$1.78 \times 10^9$	$3.65 \times 10^{11}$	$3.38 \times 10^{10}$
	b	$4.89 \times 10^9$	$8.85 \times 10^9$	$1.85 \times 10^{10}$	$1.58 \times 10^9$
77K	a	$6.60 \times 10^{11}$	$1.02 \times 10^9$	$6.10 \times 10^{14}$	$3.11 \times 10^{10}$
	b	$5.10 \times 10^{10}$	$4.10 \times 10^9$	$3.89 \times 10^{13}$	$1.27 \times 10^9$

페르미의 황금법칙에 의하여 임팩트이온화율은

$$P_{ii}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1', \mathbf{k}_2') = \frac{2\pi}{\hbar} [ |M_d|^2 + |M_e|^2 + |M_d - M_e|^2 ] \times \delta(E_1 + E_2 - E_1' - E_2') \quad (3)$$

이며 여기서  $M$ 은 임팩트이온화의 행렬요소로써 임팩트이온화에 관여한 전자들의 스핀을 고려하여 direct항  $|M_d|^2$ 와 exchange항  $|M_e|^2$  그리고 상호간섭항  $|M_d - M_e|^2$ 로 구분된다. 또한 델타함수는 에너지보존을 나타낸다. 본 연구에서는 4개의 가전자대와 11개의 전도대에 대한 에너지·고유함수를 이용하여 유전함수를 계산하였다. 이렇게 구한  $P_{ii}$ 를 에너지만의 함수로 나타내기 위해 수정된 Keldysh공식을 이용하였다.

$$P_{ii}(E) [ /sec ] = 9.74 \times 10^{10} (E - 1.1)^{5.19} \quad \text{at } 300K$$

$$= 2.05 \times 10^{11} (E - 1.2)^{4.60} \quad \text{at } 77K \quad (4)$$

이차전자의 평균에너지를 Monte Carlo 시뮬레이션에서 사용하기 위하여 에너지에 대한 다음과 같은 선형함수를 구하여 이용하였다.

$$E (eV) = 0.323E - 0.420 \quad \text{at } 300K$$

$$= 0.319E - 0.424 \quad \text{at } 77K \quad (5)$$

## III. 결과고찰 및 결론

본 연구에서는 Si의 임팩트이온화율을 계산하기 위하여 페르미 황금법칙을 사용하였으며 full 에너지밴드 구조를 구하기 위하여 의사포텐셜방법을 이용하였다. 계산된 임팩트이온화율은 300K와 77K일 때 각각 5.19와 4.60의 지수를 가지는 수정된 Keldysh공식으로 표현하였으며 임팩트이온화 후, 이차전자의 에너지는 선형함수로 표현하여 Monte Carlo 시뮬레이션 프로그램 작성을 용이하게 하였다. 이와같은 해석학적 모델은 Monte Carlo 시뮬레이션시 전자의 전송특성해석에 사용될 수 있으리라 사료된다.

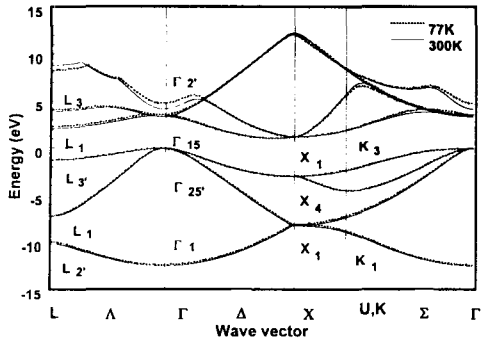


그림 1. 의사포텐셜방법으로 구한 에너지밴드구조

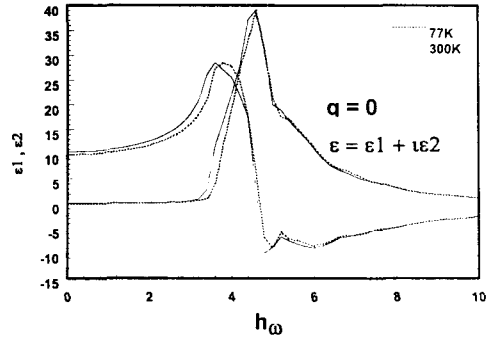


그림 4. 77K와 300K에서 구한 유전함수

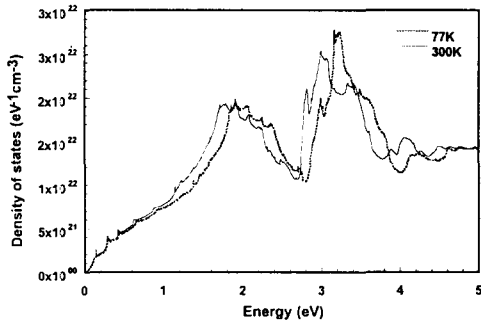


그림 2. 77K와 300K에서의 상태밀도

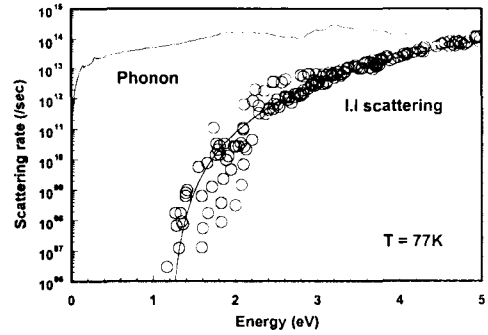
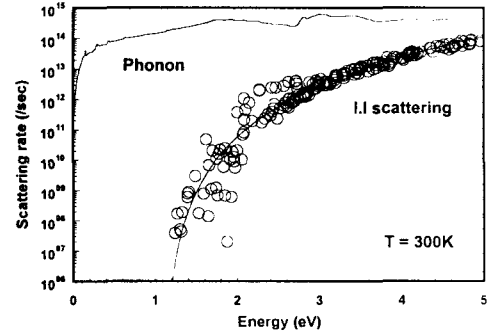


그림 5. 포논산란율과 임팩트이온화율

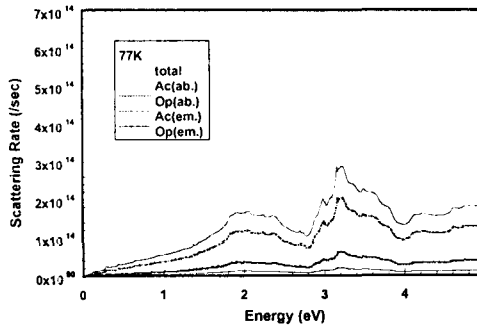
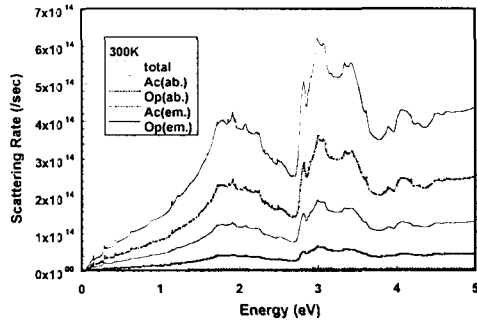


그림 3. 포논산란율

참고문헌

- [1] L.V.Keldysh, Sov. Phys. JETP, Vol. 21, p.113 5, 1965.
- [2] H.K.Jung, H.Nakano, K.Taniguchi, 6th international workshop on computational electronics, p.202, 1998.
- [3] M.L.Cohen, T.K.Bergstresser, Phys. Rev., 144, p.789, 1966.
- [4] H.H.Rosenbrock, Comput. J., 3, pp.175, 1960.
- [5] O.Jepson, O.K.Anderson, Solid State Comm, 9, pp.1763, 1970
- [6] H.Mizuno, K.Taniguchi and C.Hamaguchi, Phys. Rev. B, vol. 48, p.1512, 1516, 1993.