

2차원 양자 역학적 해석에 의한 고속 통신용 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ HEMT 소자의 전자 농도 및 전위분포 계산

(Calculation of Electron concentration and Electrostatic potential profile for $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ HEMT device by 2-Dimensional Quantum Mechanical analysis)

宋榮珍*, 黃好正*

(Young Jin Song and Ho Jung Hwang)

要 約

본 논문에서는 최근 고속통신용소자로 각광을 받고 있는 pseudomorphic $\text{AlGaAs}/\text{GaInAs}/\text{GaAs}$ MODFET 구조에 대한 Schrödinger 및 Poisson 방정식의 2차원적 풀이를 제시하였다. Poisson 방정식에 있어서는 비균일 유한 차분법을 적용하였고, Schrödinger 방정식은 3점 유한 차분법에 의해 소자내의 일부 영역에서 1차원적 해를 구 하고 선형 보간법을 적용하여 나머지 구간에 대한 2차원적 data를 얻었다. Schrödinger 방정식의 이산화시 균일이산화 구간을 사용하지 않고 적절한 비균일 구간을 선택하여 수치적 풀이 과정에서 발생하는 비대칭 형태를 matrix transformation 방법에 의한 대칭행렬로 바꾸어 계산함으로써 컴퓨터 사용시 나타나는 문제점을 해결 하였다. 결국 이중 이중 접합시 양자우물에서 나타나는 양자역학 현상을 규명하여 전자농도를 계산하고 이를 토대로 포아송 방정식과 연계한 2차원 self-consistent 풀이를 적은 기억 용량 및 빠른 계산속도로 수행 가능한 방법을 보였다.

Abstract

We present a self-consistent, 2-dimensional solution of the Poisson and Schrödinger equation based on the finite difference method with a nonuniform mesh size for a $\text{AlGaAs}/\text{GaInAs}/\text{GaAs}$ HEMT device. During the iterative self-consistent calculation, however, we calculate Schrödinger equation only a some region of device, not a fully region in order to save the memory and the speed-up of computation, and then use the approximated data for the other region using by a interpolation method with a given values. Also we adopt the proper matrix transformation method that allows preservation of the symmetric form of the discretized Schrödinger equation, even with the use of a nonuniform mesh size, therefore, can reduce the computation time. We calculate the wavefunction, eigenstates and the electron concentration at channel layer under the thermal equilibrium and the biased conditions, respectively. Also, these parameters are used to solve 2-dimensional distribution of potential in the entire region of device. It is proved that the method is very efficient in finding eigenstates extending over relatively large spatial area without loss of accuracy. So, it can be used rather easily in any arbitrary modulation doped structure.

1. 서론

Esaki와 Tsu가 제안한 변조 도핑된 초격자 구조의 개념이 R. Dingle 등에 의해서 처음으로 실현된^[1,2] 이후 MBE, MOCVD 등과 같은 결정성장 기술의 급속한 발달로 인하여 다양한 형태의 이중 접합 구조의 반도체 소자들을 제작 발표하게 되면서 이들 소자에 대한 많은 연구가 진행되고 있다.^[3,4] MOD-FET(MODulation-Doped Field-Eff ect Transistor)는 이중에서도 가장 관심을 갖고 활발한 연구가 진행되고 있는 소자로서 기존의 단일 이중접합구조보다 그 물리적 특성상 우수한 동작 특성을 나타 내고 있어 고속 스위칭 소자 및 초고주파 통신용 소자로서의 이용이 기대되고 있다.^[5-11]

처음에는 비교적 제작이 용이하고 단순한 형태의 GaAs/AlGaAs와 같은 단일 이중 접합구조의 MODFET소자 등에 대한 많은 특성 연구 보고가 진행되어 왔으나 이들 단일 이중 접합구조의 경우 PPC(Persistent Photo Conductivity) 효과^[12,13], 온도에 따른 문턱 전압 변화^[14], current-voltage collapse^[15], G-R(Generation-recombination) noise^[16] 등의 단점이 알려지게 되었는데, 이러한 점들을 극복하기 위해서는 Al의 mole fraction을 20% 이내로 줄여야 한다. 그러나, 이렇게 할 경우 접합 부분의 band discontinuity의 감소로 인한 real space transfer 현상의 증가로 소자 특성이 변화하는 부작용이 발생하게 된다.^[17-22]

따라서, 이러한 단점을 없애고 이중접합 소자의 특성을 지닐수 있는 ternary 화합물을 이중으로 접합하는 구조에 관심을 갖게 되었다. 그 중에서도 특히 AlGaAs(또 는 AlInAs)/GaInAs/GaAs와 같은 strained-layer pseudomorphic 구조는 낮은 Aluminium의 mole fraction을 유지 하면서 이중의 ternary 화합물 접합으로 채널이 형성되는 부분에 높은 band discontinuity을 유지할 수 있어서 단일 이중접합 구조에서 나타날수 있는 여러가지 단점을 극복할 수 있는 소자로 각광을 받게되었다. 또한 이러한 이중 이중접합 형태는 bulk 방향으로의 밴드 불연속이 이중으로 존재하기 때문에 기판 전류 흐름을 제한시킬 수 있는 장점도 있다. 반면에 격자 상수의 불 일치로 인한 elastic strain의 문제가 발생할 수 가 있는데, 이는 200Å 이내의 계층구조에서는 dislocation의 문제가 크게 발생하지 않는 것으로 알려져 있다.^[9,10,23,24]

Pseudomorphic MODFET 소자의 정확한 물리적 이해와 동작 특성을 이해하기 위해서는 계면접합

근처에서 전자 친화력의 차이로 나타나는 사각 형태의 양자 우물구조와 이곳에 구속되는 2차원 전자 가스(two-dimensional electron gas:2-DEG)의 에너지 상태 및 농도에 의해 소자의 동작 특성이 좌우하게 되는데 이에 대한 연구가 요구된다.^[25-27]

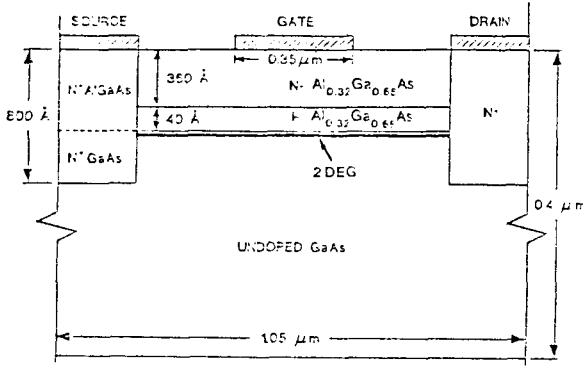
지금까지 단일 이중 접합구조에 있어서는 양자 우물 형태를 삼각우물 근사에서의 Airy함수를 이용한 해석적 방법과 슬레딩거 방정식의 수치해석적 방법들이 연구되어 왔다.^[3,4,28,31] 그러나, 사각 형태의 양자 우물구조에서는 삼각 우물 근사 방법을 적용 할 경우 우물 형태의 차이와 함수 자체가 Fermi level의 함수로 표현되기 때문에 이중 이중접합의 기술에는 어려움이 있고, 양자 역학적 개념을 이용한 self-consistent한 수치해석의 경우 소자의 깊이 방향에 대한 1차원적 연구 보고가 주종을 이루고 있는데, 양자 우물내의 전자의 상태 및 농도를 정확히 기술하기 위해서는 1차원적 연구보다는 드레인 및 소스전극의 인가 전압의 존재도 고려되어야 하는 2차원적 기술의 필요성이 있다.

따라서, 변조도핑된 이중 이중접합구조 반도체 소자의 정확한 전기적 특성을 해석하기 위해서는 전위 분포를 알기 위한 포아송 방정식과 정확한 전위 형태로 부터 양자 우물내의 전자의 상태 및 농도를 알기 위한 슬레딩거 방정식의 2차원적 연계 풀이가 필요한데 이는 상당한 계산시간과 컴퓨터의 기억용량 문제점 등에 의해 상당한 어려운 문제로 남아있다.^[29,30]

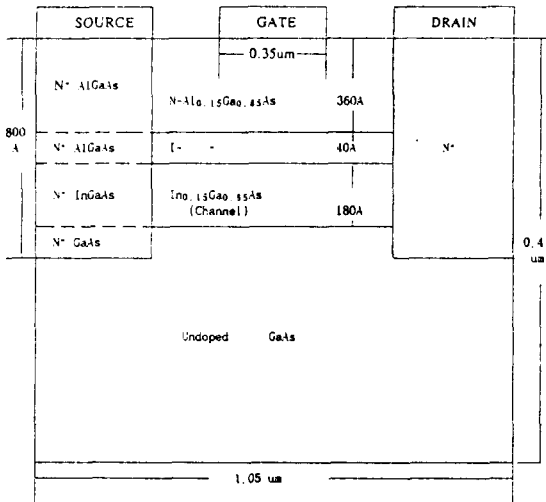
본 논문에서는 주어진 이중이중 접합형태의 MODFET소자에서 양자 우물내의 슬레딩거 방정식의 근사적인 2차원적 수치해석으로 전자의 농도, 부 밴드 에너지 상태, 전도대역 및 파동함수와 2차원적 전위 분포를 구하고자 한다. 근사적인 2차원 수치해석이란 연계적인 슬레딩거 방정식 풀이 시 기존에 알려진 Numerov 방법 등을 사용하지 않고 소자내의 일부 구간을 1차원 비균일 mesh를 사용하여 3점유한차분법으로 이산화 시켜 1차원적인 해를 구한 후 나머지 구간에 대해서는 선형 보간법을 이용하여 전자의 농도를 구하여 포아송 방정식의 2차원 풀이 과정에 이용하려 한다. 또한 슬레딩거 방정식의 이산화시 비균일 mesh를 사용하게 되면 이산화된 연립방정식의 행렬 풀이과정시 비대칭행렬을 구성하게 되는데 비균일 mesh의 적절한 간격 설정에 의해서 근사적인 대칭행렬로 변환하여 고유치, 고유함수를 작은 오차범위를 갖도록^[27] 계산할 수 있는 간단한 방법도 제시하고자 한다.

II. 이론

아래에 일반적인 단일 이종접합 구조와 이중 이종 접합 구조의 차이를 나타냈다.



(a)



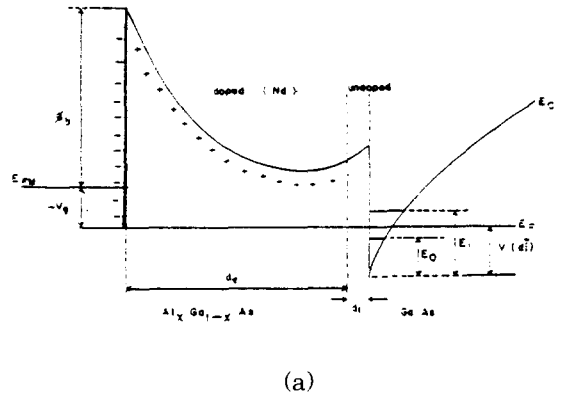
(b)

그림 1. 소자 구조

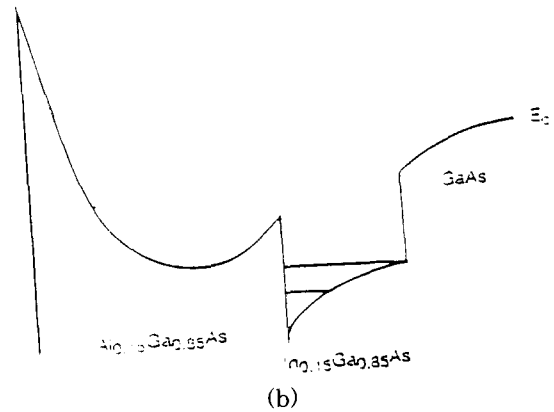
- (a) 단일 이종 접합 구조
- (b) 이중 이종접합 구조

Fig. 1. Device structure.

- (a) Cross-sectional view of the single-heterojunction structure.
- (b) Cross-sectional view of the double-heterojunction structure.



(a)



(b)

그림 2. 에너지 밴드 모델

- (a) 단일 이종 접합 구조
- (b) 이중 이종 접합 구조

Fig. 2. Schematic drawing of the conduction band structure.

- (a) of the single-heterojunction structure.
- (b) of the double-heterojunction structure.

위 그림에서도 나타났듯이 단일 이종 접합구조 MODFET소자의 경우 전자의 전송 채널이 기판에 해당되는 GaAs영역에서 이루어 지는데 비하여 pseudomorphic MODFET의 경우는 중간에 성장시킨 GaInAs층내에서 전자의 이동이 이루어 지기 때문에 전자의 유효질량이 작고 높은 전달구동력을 얻을 수 있으며^[33] 서론에서 언급한 여러가지의 장점들을 나타낸다. 그림2는 위 두 구조에 대한 전도대 에너지 밴드 구조로써 양자 우물내의 부밴드 모양과 채널 부위를 나타냈다. 기존의 소자 구조에서는 에너지

를 크게 얻은 전자가 양자 우물을 뛰어 넘어 게이트 쪽으로 움직 이든지, 혹은 substrate 쪽으로 이동할 수 있는 반면에 pseudomorphic MODFET 소자는 게이트 방향의 보다 큰 밴드 불연속과 substrate 쪽으로의 또 다른 밴드 불연속에 의한 에너지 장벽으로 인하여 구속을 받아서 실공간 전송현상이나 기판 전류와 같은 기생효과를 억제시킬 수 있다.

1. 기본 방정식

이중 접합 계면에 평행한 파동함수는 평면파라고 가정하고 계면에 수직인 방향 (y)에 대한 1차원적인 슈레딩거 방정식은 아래와 같이 나타낼 수 있다.

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dy} \frac{1}{m^*(y)} \frac{d}{dy} \Phi_n(y) + v(y)\Phi_n(y) = E_n \Phi_n(y) \quad (1)$$

단, $m^*(y)$ 은 각 물질에 대한 유효질량이고, Φ_n (y)과 E_n 은 n번째 부밴드의 파동 함수 및 에너지 준위를 나타내고, \hbar 은 reduced Plank 상수이며 v (y)는 깊이 방향의 potential energy 로써 아래와 같이 나타낼 수 있다.

$$v(y) = -q\psi(y) + \Delta E_c(y) + V_{xc}(y) \quad (2)$$

$\Delta E_c(y)$ 는 계면에서의 band offset으로 이중 이종 접합의 경우 2곳에서 나타나며, $V_{xc}(y)$ 는 상호 전하들간에 작용하는 local exchange-correlation effects이며 [28], $\psi(y)$ 는 전위로써 아래에서 주어지는 포아송 방정식의 해에서 주어진다.

$$\nabla(\epsilon_s(y,z) \cdot \nabla)\psi(y,z) = -\frac{q(N_s(y,z) - n(y,z))}{\epsilon_0} \quad (3)$$

$\epsilon_s(y,z)$ 는 물질의 dielectric constant이고, N_s (y,z)는 주입시킨 물질의 이온화 농도(Acceptor 또는 Donor), $n(y,z)$ 는 전자 농도로서 슈레딩거 방정식의 해로부터 얻어지는 고유 에너지 및 파동 함수의 관계로부터 아래와 같이 구할 수 있다.

$$n(y) = \sum_{k=1}^m \Phi_k^*(y)\Phi_k(y)n_k \quad (4)$$

$$n_k = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \int_{E_k}^{\infty} \frac{1}{1 + e^{(E_k - E)/kT}} dy \quad (5)$$

여기서 m은 boundstate의 수이고, E_k 는 고유에너지이다.

2. 기본 방정식의 이산화

포아송 방정식의 비균일 mesh에 대한 2차원적인 이산화는 여러 문헌에서 자세히 기술되어 있으므로 생략하기로 하고 슈레딩거 방정식에 대한 이산화 및 행렬 변환에 관해서만 기술한다.

위에서 언급한 식(1)을 1차원적인 3점 유한차분법을 사용하면 아래와 같이 이산화 할 수 있다.

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{2(\Phi_i + 1 - \Phi_i)}{m_i + 1/2h_i(h_i + h_{i-1})} - \frac{2(\Phi_i - \Phi_i - 1)}{m_i - 1/2h_i(h_i + h_{i-1})} \right] = \lambda \Phi_i \quad (6)$$

위 식에서 주어진 첨자 및 변수는 간편을 위해 생략했다. 이것을 아래와 같이 Matrix 형태로 바꾸어 표현하면

$$\sum_{j=1}^n A_{ij} \Phi_j = \lambda \Phi_i \quad (7)$$

되고, 행렬 A_{ij} 는

$$A_{ij} = \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{2}{m^*i + 1/2} \frac{1}{h_i(h_i + h_{i-1})} \right] & \text{if } j = i + 1, \\ -\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{2}{m^*i - 1/2} \frac{1}{h_{i-1}h_i} \right] & \text{if } j = i - 1, \\ -A_{ii} + 1 - A_{ii} - 1 + V_i & \text{if } j = i, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (8)$$

이다. Index i는 격자 점이고, h_i 는 격자간의 거리를 $i-1/2$ 는 격자점 사이의 중간 위치를 나타낸다. 여기서 주어지는 tridiagonal matrix는 격자간의 간격 h_i 가 균일 격자를 사용하였을 경우에는 대칭행렬이 되지만 비균일 격자를 사용했을 경우에는 비대칭 행렬이 되어 계산시에 복잡성이 다르게 된다.

그러나, 위 식은 다음과 같은 변수를 사용하여

$$L_i^2 = (h_i + h_{i-1}) / 2, \quad (9)$$

행렬 A_{ij} 를 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$A_{ij} = \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{1}{m^*i + 1/2} \frac{1}{h_i} \right] \frac{1}{L_i^2} & \text{if } j = i + 1, \\ -\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{1}{m^*i - 1/2} \frac{1}{h_{i-1}} \right] \frac{1}{L_i^2} & \text{if } j = i - 1, \\ -A_{ii} + 1 - A_{ii} + V_i & \text{if } j = i, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (10)$$

또한, $B_{ij} = L_i^2 A_{ij}$ 를 써서 행렬 표기로 하면

$$B = M A \tag{11}$$

과 같이 쓸 수 있고, M은 matrix element L_i^2 를 가지는 대각행렬이다. 마찬가지로 B행렬은 삼각대각 행렬과 대각 행렬의 곱으로써 삼각대각 행렬을 유지한다. 따라서 위 두식(9) 과 (10)로부터 행렬 B는 대칭(즉, $B_{i+1,j} = B_{j,i+1}$)이된다는 것을 알 수 있다. 이러한 사실로부터 아래와 같은 관계에 의해 행렬의 변화를 시킬 수 있다.

$$B\psi = MA\phi = M\psi \tag{12}$$

유한 차분법으로 구한 행렬 M은 대각행렬로써 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$M = LL \tag{13}$$

마찬가지로 L은 행렬 요소가 L_i 인 대각행렬이다. 결국 위 식(11)을 사용하면 아래와 같이 나타낼 수 있다.

$$L^{-1}BL^{-1}\psi = L^{-1}LLA\psi = \lambda L^{-1}\psi \tag{14}$$

이고,

$$H\phi = \lambda \phi \tag{15}$$

여기서,

$$H = L^{-1}BL \tag{16}$$

$$\phi = L^{-1}\psi$$

행렬B는 대칭이고 L이 대각 행렬이므로 $H = H^T$ 관계가 성립하고, 행렬 H는 대칭 이며 삼각 대각 행렬이된다.

따라서 식(15)로 부터 고유치 및 고유 함수를 구하고 식(16)에 의해서 원래의 고 유치 및 고유함수를 계산할 수 있다.

III. 경계 조건

수치 해석방법에 있어서 단일 매질을 갖는 소자의 경우에는 주어진 방정식을 전체 영역에 대하여 한번의 풀이에 의해서 간단히 해결이 가능하지만 이종접합 물질의 경우 계면의 물성적 차이로 인해 새로운 경계 조건이 필요하다. 본 연구에서 주어진 두개의

방정식의 경계조건은 슬레딩저 방정식의 경우 주어진 전위에 의한 에너지 장벽에 의해서 전자의 상태를 기술하기 때문에 커다란 문제가 없지만, 포아송 방정식의 경우에는 인가 전압 및 전극과 반도체 물질과의 전자 친화력의 차이로 나타나는 일함수와 이종 접합 계면의 친화력 차이로 나타나는 전하의 이동이 문제가 된다. 본 연구에서는 포아송 방정식의 2차원적 풀이시 bulk 방향과 전극물질의 소자의 양옆 방향은 수직전위 기울기가 0인 neumann 경계 조건을 주었고, 전극(ohmic contact)은 인가한 값을 나타내는 dirichlet경계조건을 적용하였고, 게이트단자(Schottky contact)는 아래와 같은 경계 조건을 주었다. [32, 33, 38]

$$V_c = V_{ds} = V_{ss} \quad \text{for Drain or Source}$$

$$V_c = q\phi_{m-s} - V_{gs} + 1/q * (E_g - E_n) \quad \text{for Gate} \tag{17}$$

여기서, V_{ds}, V_{ss} 및 V_{gs} 는 각 단자별 인가 전압이고, E_g 은 표층물질의 에너지 갭을 E_n 는 전하 중성 영역에서의 페르미 준위를 나타내고, ϕ_{m-s} 는 반도체와 금 속물질과의 일함수 차이를 나타낸다. 또한 이종물질 접합구조의 추가적인 경계조건으로 접합 계면의 조건이 주어지는데 아래와 같은 두 계면 경계조건을 적용하였다. [33, 34]

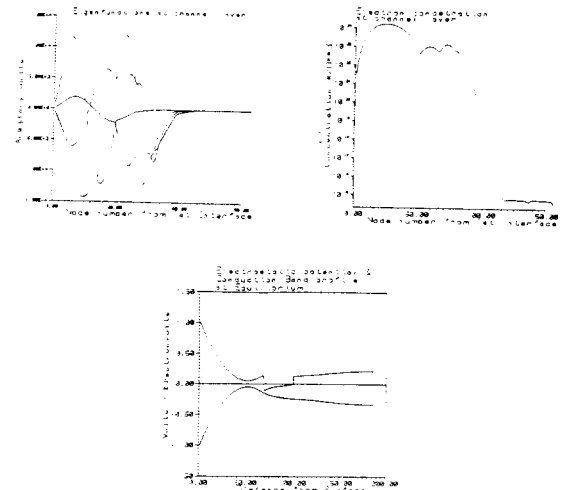


그림 3. Pseudomorphic AlGaAs/GaInAs/GaAs HEMT구조의 1차원적 해석
Fig. 3. 1-dimensional analysis of the pseudomorphic AlGaAs/GaInAs/GaAs HEMT structure.

$$\begin{aligned} \epsilon(\text{AlGaAs}) \frac{\partial \psi}{\partial x} \Big|_{y_1+qn_s} &= \epsilon(\text{InGaAs}) \frac{\partial \psi}{\partial x} \Big|_{y_1} \\ \epsilon(\text{InGaAs}) \frac{\partial \psi}{\partial x} \Big|_{y_1+qn_s} &= \epsilon(\text{GaAs}) \frac{\partial \psi}{\partial x} \Big|_{y_1} \end{aligned} \quad (18)$$

포아송 방정식에서 전체 영역을 3부분으로 나누어 게이트 단자쪽으로 부터 기판 영역 부분방향으로 각 영역에 대해 미지값을 구하게 되는데, 표층부분의 풀이시 위식(18)의 경계조건을 가지고 해를 구하고, 그 다음 중간 층을 해석시에는 표층영역 에서 구한 값을 사용한다. 이때 전자의 농도는 슈레딩거 방정식과 포아송 방정식의 연계 풀이 과정시 한번의 반복과정내에서 얻어진 값에 의해서 이루어진다. 이 때 기준 전위는 페르미 준위를 0으로 하였다.

이러한 과정의 타당성을 위하여 1차원적으로 두 방정식에 대한 연계풀이 결과를 아래에 보였다.

IV. 결과 및 고찰

본 연구에서 시뮬레이션한 그림 1 (b)의 소자 구조에 대한 2차원적 해석을 하기 위하여 아래와 같이 절점 구간을 나누었다.

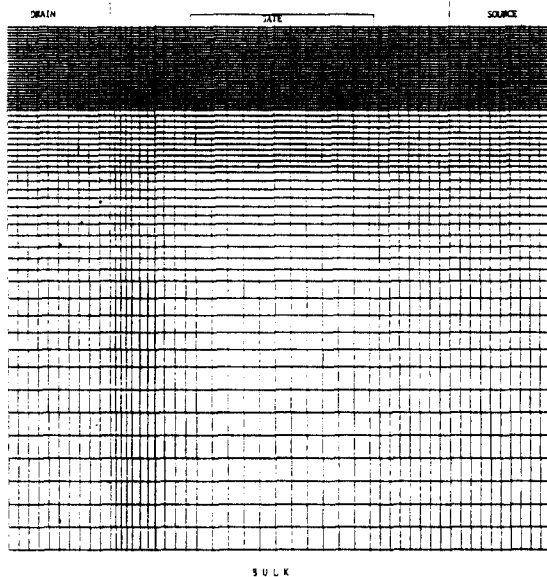


그림 4. 절점 구간 구조
Fig. 4. Structure of mesh discretization.

시뮬레이션에서 사용한 도핑 농도는 GaAs 와 GaInAs영역은 $1.5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, AlGaAs는 $1.5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 으로 하였고, ternary 화합물의 mole

fraction ratio는 $x=0.15$ 로 하였고, 각 물질파라미터는 J.S.Blakemore와 O.Madelung 등^[35-37]이 제시한 값을 사용하였으며, local exchange correlation effectsdms 생략하였다.^[31]

비 균일 간격 5점 유한 차분법으로 이산화 한 포아송 방정식의 풀이시 mesh크기 는 24 Å에서 부터 150 Å로 하였고, 영역 전체의 mesh수는 드레인과 소스사이를 101개와 게이트에서 기판 방향으로 86개로 나누었다.

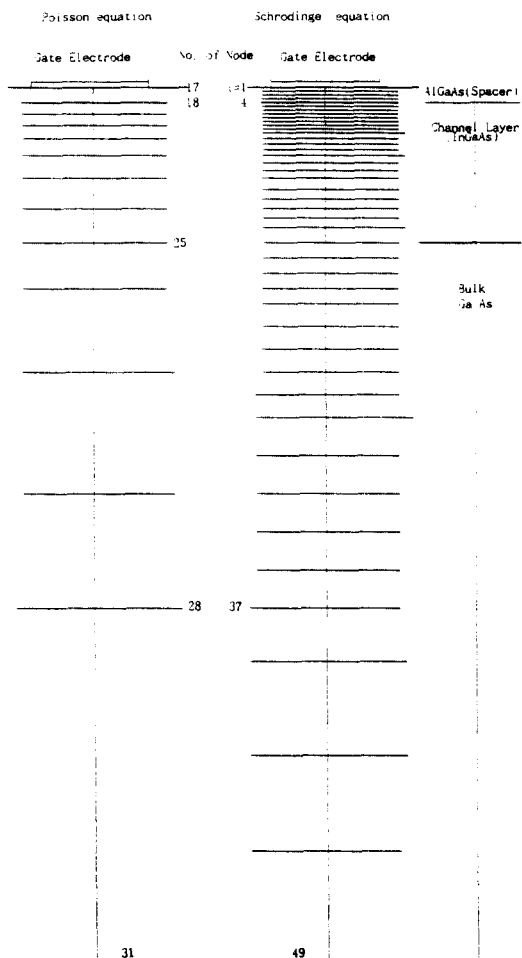


그림 5. 포아송 및 슈레딩거 방정식풀이시 절점 구간 비교
Fig. 5. Comparison of mesh size between Poisson and Schrodinger equation's solver.

5열 비대칭 대각행렬의 근사풀이 방법은 방정식의 이

산화시 발생하는 오차가 반복적인 풀이과정시 축적되는 것을 방지할 수 있는 SSOR(double Sweep Successive Over-Relaxation)방법을 사용 하였다. 슬레딩거 방정식의 이산화는 포아송 방정식과 달리 mesh크기에 따라서 해의 정확도가 크게 좌우되기 때문에 포아송 방정식에서 얻어진 전위구간을 그대로 사용하지 않고 한 구간을 보간법을 이용하여 다시 여러 구간으로 세분화한 데이터를 입력으로 하여 풀었다. 슬레딩거 방정식과 포아송 방정식에 대한 이산화구간은 49개로 하였고, 두 가지 구간 모양을 아래에 도시하였다.

쇼트키 접촉부분의 일함수 차이는 게이트전극을 Aluminum으로 간주하여 1.0eV로 하였고, 전도대의 에너지 불연속은 연구 논문에 따라서는 0.85 eV 혹은 0.67 eV의 값이 주류를 이루고 있는데 본 연구에서는 전자의 값을 사용하였다.

아래에 본 시뮬레이션에 대한 흐름도를 나타냈다.

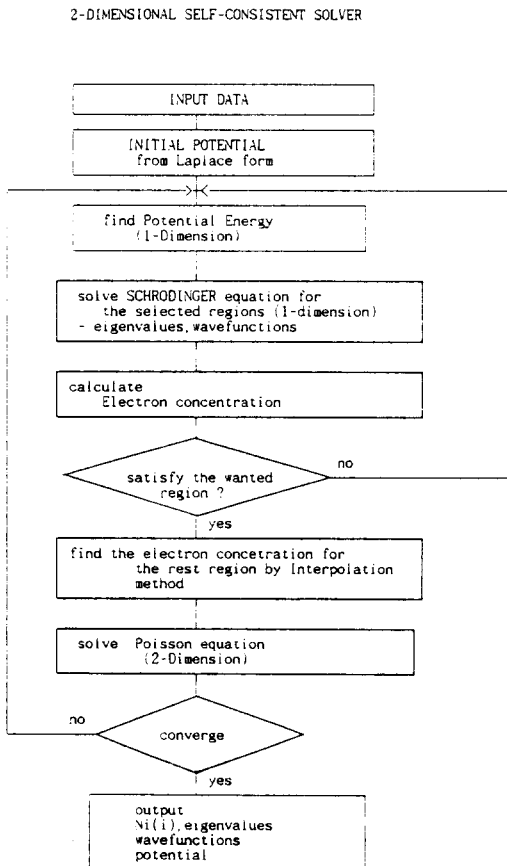


그림 6. 시뮬레이션 흐름도

Fig. 6. Flow chart of the calculation of selfconsistent solver.

포아송 방정식의 풀이시 좌·우향의 몇 order에 해당하는 상당한 크기의 값 차이에 의해서 수렴상에 문제가 발생하는 것을 방지하기 위하여 Polak-Marokwicz가 제시한 scaling방법을 이용하였고^[36]. 또한 반복법에 의한 근사해를 얻고자 할때 가능한 정해에 가까운 초기값을 주어지는 것이 빠른 수렴도를 얻을 수 있는 점을 고려하여 포아송 방정식의 오른쪽항의 전자 농도를 0으로 하여 1차적인 해를 구한 후 연계풀이 과정을 실시하였고, 이때 두 방정식의 연계풀이시 수렴도는 가장 오차가 큰 mesh point의 상대적인 값을 0.005로 하였고 포아송 방정식의 반복법에 의한 수렴도는 0.05로 하였다. 그림7은 게이트 전극에는 전압을 인가하지 않고 드레인에 1.0 volts를 가했을 경우의 전위 모양을 나타냈고, 그림8은 선택한 위치에서 슬레딩거 방정식의 풀이로부터 구한 파동 함수를 나타냈다.

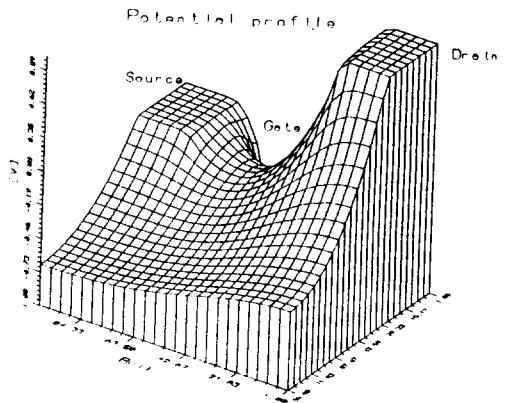
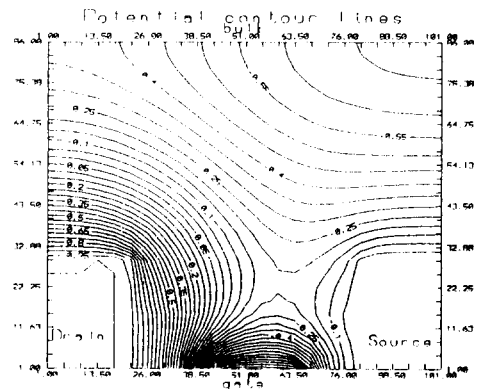


그림 7. 2차원적 전위 분포 모양

Fig. 7. Profile of 2-dimensional electrostatic potential.

이때 부밴드 에너지는 E_0, E_1 및 E_2 의 세개를 선택하였는데, 이는 세개의 부밴드에 의해서 약 97% 이상의 전자가 점유되는 점에 근거하여 나머지 부밴드는 생략하였다. 그림에서 알 수 있듯이 양자우물내에 파동함수가 국한 되지 않고 전도대의 에너지 불연속면을 침투하는 것은 에너지 장벽이 무한히 크지 않기 때문이다.

여기서 얻어진 부밴드에너지 값을 게이트 단자 밑 node의 페르미 준위를 기준으로 하여 아래의 도표에 표시하였다.

표 1. 주어진 구간에서의 부밴드 에너지 준위 E_0, E_1, E_2

Table 1. The values of subband energy level on the selected region.

Eig. Val Position	E_0	E_1	E_2
1	-0.40975	-0.36107	-0.29963
2	-9.2829E-2	-5.1604E-2	1.09503E-2
3	-2/5610E-2	1.52763E-2	7.78816E-2
4	-1.9272E-2	2.14027E-2	8.38835E-2
5	-0.104275	-6.29459E-2	-1.1226E-3

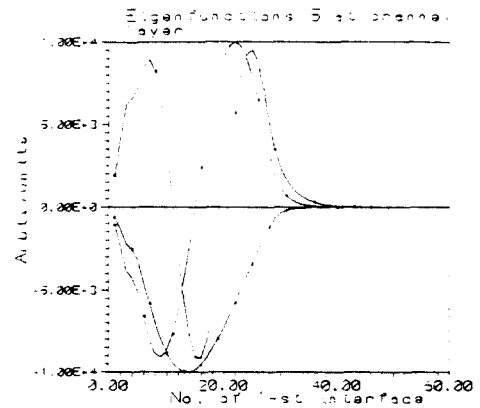
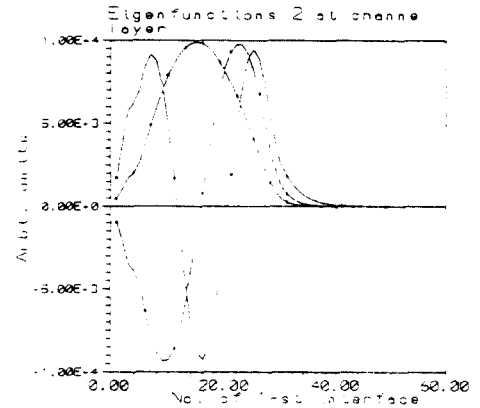
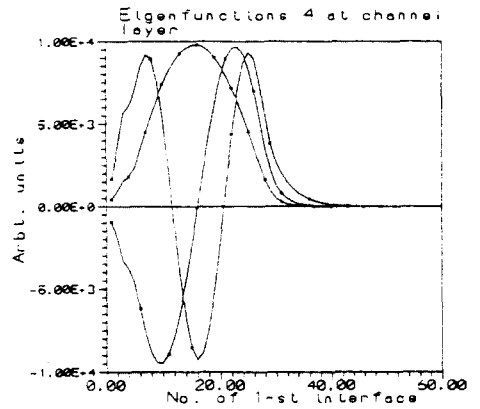
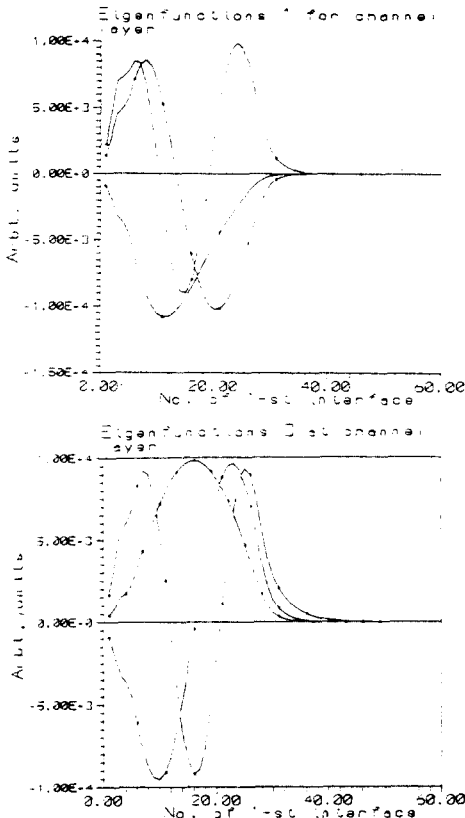


그림 8. 주어진 위치에서 파동 함수
Fig. 8. Wavefunctions at the selected position.

그림 9는 포아송 방정식에 의해 구한 전위를 바탕으로 한 전도대 에너지 밴드모양을 나타냈다.

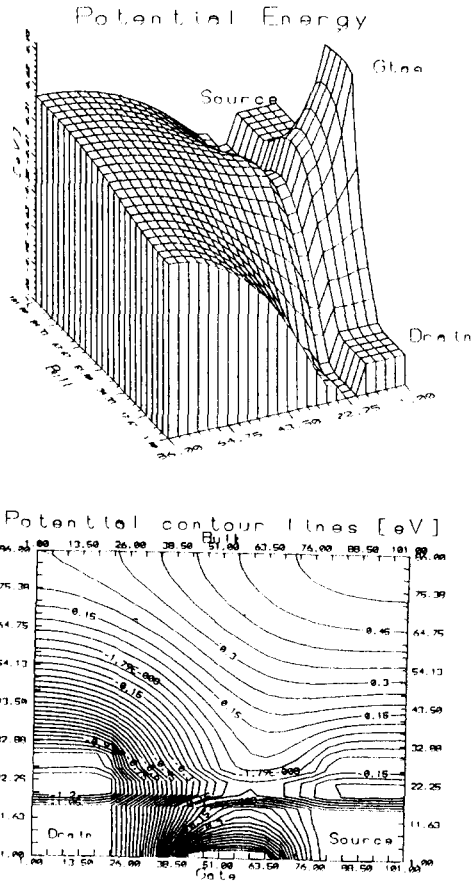


그림 9. 전도대 에너지 밴드 모양
Fig. 9. Profile of conduction energy band.

드레인 단자에 1.0 volt를 가했을때의 전도대 에너지 밴드 모양을 나타낸 것으로 그림에서 중간부분의 들어간 부분이 전도 채널을 형성하는 곳으로 bulk방향과 게이트 방향으로 에너지 장벽이 위치하였고, 드레인 부분이 아래로 내려간 것은 단자에 양의 전압을 인가했기 때문이다.

그림10은 주어진 구간(급격한 전위분포 변화 위치)에서 슈레딩거 방정식을 풀어서 얻은 값을 이용하여 나머지 구간에 대해 선형 보간법을 적용하여 구한 전자의 농도를 나타냈다.

그림으로 부터 알 수 있듯이 드레인부분의 전자의 농도가 줄어드는 모양을 알 수 있는데 이는 전자의 농도계산시 페르미 준위와 부밴드 준위의 차이에 의해 결정되는데 전극에 가해진 전위에 의해서 페르미 준위가 바뀌게 되고 이로 인한 부밴드 에너지 준위의 상대적인 상승으로 전자의 농도가 감소함을 알 수 있다. 반면에 게이트 단자 밑부분의 전자 농도는 1차원

해석시의 값과 비교할 때 잘 일치함을 알 수 있다.

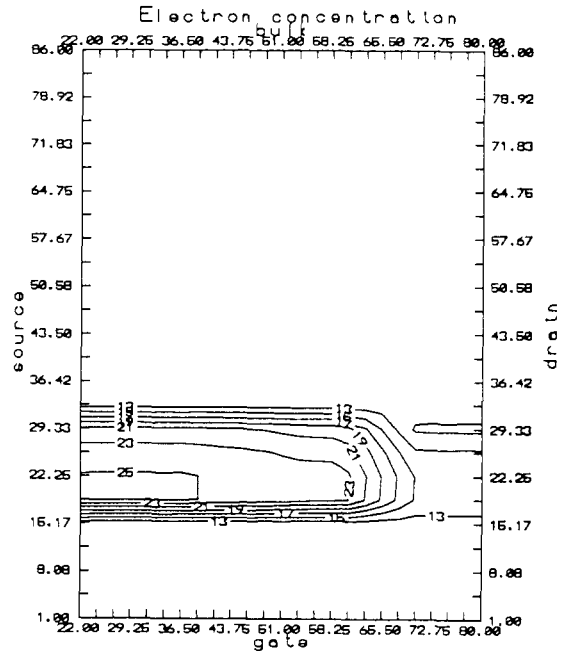


그림 10. 2차원 전자 농도 모양
Fig. 10. Profile of 2-dimensional electron concentration.

또, 본 연구에서 슈레딩거 방정식이 풀지 않은 구간에서는 선형 보간법에 의해서 전자의 농도를 구했기 때문에 전자의 모양이 1차원적 가감분포를 나타냈는데 이는 주어진 값을 이용하여 2차원적인 기울기를 가질 수 있는 spline function이나 기본 방정식과 유사한 함수를 사용한 근사법이 필요하다고 본다.

그러나, 시뮬레이션상의 문제점들에 의해 슈레딩거 방정식을 2차원적으로 직접 풀지 않고 Boltzmann transport equation 이나 energy balance equation을 이용한 소자 시뮬레이션에서 보고한 2차원 전위 분포 모양을 보면 상당히 잘 일치함을 알 수 있는데 본 방법에 의한 슈레딩거 및 포아송 방정식의 2차원적풀이 방법이 가능 하리라고 본다. 또한 본연구의 목적이 소자시뮬레이션시 몬테카를로 방법에 의한 소자 특성 분석에 있어서 전하할당을 보다 효율적으로 입력하기 위한 입력변수로 사용할 수 있고, 또한 접합 구조가 다른 고속 통신용 화합물 반도체의 해석시에도 간단히 물질파라미터의 교체만으로 본 알고리즘을 이용가능하리라고 본다.

V. 결론

본 연구에서는 이중 이중 접합 구조의 MODFET 소자에 대한 2차원적인 전위 분포 모양을 구하였고, 기존에 알려진 방법과는 다른 새로운 수치 해석법에 의해 간단히 파동함수 및 2차원 전자 농도를 구하는 방법을 제시하였다. 또한 슬래딩거 방정식의 완전한 2차원적 풀이보다는 양자 우물의 급격한 변화가 예상되는 부분에서 1 차원적인 풀이를 통하여 전자 농도를 구하고 나머지 구간에 대해서는 보간법을 이용하여 포아송 방정식의 2차원적 풀이에 필요한 데이터를 구하였다. 본 계산을 하는데 CPU속도 33MHz의 IBM-PC 486을 사용하여 약 35분이 소요되었다. 따라서 최근 고속 반도체 소자로 각광을 받는 화합물 소자의 동작 특성을 이해하고 기타 다른 3원화합물 구조에 몇가지 파라미터만 대체시킴으로써 간단히 본 모델을 적용시킬 수 있으리라 고려되며 지금까지 통계 확률적으로 소자의 전류-전압 특성을 연구하는데 가장 정확하다고 알려진 몬테 카를로 방법의 입력 변수로도 이용가능 하리라 생각된다.

參考文獻

[1] R. Dingle, H.L. Stormer, A.C. Gossard et. al., "Electron mobility in modulation doped semiconductor heterojunction superlattices," *Appl. Phys. Lett.* 33, 665 1978.

[2] L. Esaki and R. Tsu, IBM Res. Rep. RC-2418 1969.

[3] H.L. Stormer, R. Dingle, A.C. Gossard, et al., "Two-dimensional electron gas at a semiconductor-semiconductor interface," *Solid state Commun.*, vol. 29, 705-709 1979.

[4] D. Delagebeaudeuf and N. T. Linh, "Metal-(n)AlGaAs-GaAs two-dimensional electron gas FET", *IEEE ED-29*, 955-960, 1982.

[5] Hadis Morkoc and Paul M. Solomon, "The HEMT : a super fast transistor", *IEEE spectrum*, vol. 21, pp. 28-35, 1984.

[6] Jean-Louis Cazaux, Gzok-Ing Ng, D. Pavlidis, Hin-Fai Chan, "An Analytical Approach to the Capacitance-Voltage Characteristics of Double-Hetero-

junction HEMT's", *IEEE ED-35*, No. 8, pp. 1223-1231, 1988.

[7] K. Park and K. D. Kwack, "A Model for the Current-Voltage Characteristics of MODFET's", *IEEE ED-33*, pp. 673-676, 1986.

[8] U. Ravaiolo and Ferry, "MODFET ensemble Monte Carlo Method including the quasi-two-dimensional electron gas", *IEEE ED-33*, pp. 677-681, 1986.

[9] G. W. Wang, Y. K. Chen, W. J. Schaff and L. F. Eastman, "A 0.1μm Gate Al0.5In0.5As/Ga0.5In0.5As MODFET fabricated on GaAs substrates", *IEEE ED-35*, pp. 818-825, 1988.

[10] A. A. Ketterson et al., "Characterization of InGaAs/AlGaAs pseudomorphic modulation-doped field-effect transistor," *IEEE ED-33*, pp. 564-571, 1986.

[11] Carlo Jacoboni and Lino Reggiani, "The Monte-Carlo Method for the Solution of Charge Transport in Semiconductors with application to Covalent Materials," *Reviews of Modern Physics*, vol-55, No.3, 1983.

[12] M. I. Nathan, "Persistent conductivity in AlGaAs/GaAs modulation doped layers and field effect transistors," *Solid-state Electron.* vol. 29, no. 2, pp. 167-172, 1988.

[13] E. F. Schubert, A. Fischer, and K. Ploog, "Photoconductivity in selectively n- and p-doped AlGaAs/GaAs heterostructures," *Solid-State Electron.*, vol. 29, no. 2, pp. 173-180, 1986.

[14] A. J. Valois, G. Y. Robinson, K. Lee and M. S. Shur, "Temperature dependence of the I-V characteristics of modulation-doped FETs," *J. vac. Sci. Technol. B*, vol. 1, pp. 190-195, 1983.

[15] R. Fisher et al., "On the collapse of drain I/V characteristics in modulation-doped FET's at cryogenic temperature," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. ED-31, pp. 1028-1032, 1985.

- [16] S. J. Lin et al., "Low-noise behavior of InGaAs quantum well structured modulation-doped FET's from 10-2 to 108 Hz," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. ED-33, pp. 576-582, May 1986.
- [17] K. Hess, H. Morkoc, H. Shichijo, and B.G. Streetman, "Negative Differential resistance through real space electron transfer," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 35, pp. 469-471, 1979.
- [18] K.F. Brennan and D.H. Park, "Theoretical comparison of electron real space transfer in classical and quantum two-dimensional heterostructure systems," *J. Appl. Phys.*, vol. 65, pp. 1155-1163, 1989.
- [19] K. Hess, "Real space transfer: Generalized Approach to transport in confined geometries," *Solid-State Electron.*, vol. 31, nos. 3-4, pp. 319-324, 1988.
- [20] I.C. Kizilyalli, K. Hess, T. Hightman, M. Emanuel, and J.I. Coleman, "Ensemble Monte Carlo simulation of real space transfer (NERFET/CHINT) devices," *Solid-State Electron.*, vol. 31, nos. 3-4, pp. 355-357, 1988.
- [21] Y. Cho, R. Sakamoto, and M. Inoue, "Real space hot electron distributions and transfer effects in heterostructures," *Solid-State Electron.*, vol. 31, nos. 3-4, pp. 325-328, 1988.
- [22] N. Sawaki et al., "Real space transfer of two dimensional electrons in double quantum well structures," *Solid-State Electron.*, vol. 31, nos. 3-4, pp. 351-354, 1988.
- [23] Duke H. Park and Kevin F. Brennan, "Monte Carlo Simulation of 0.35 μ m Gate length GaAs and InGaAs HEMT's", *IEEE ED-37*, 618, 1990.
- [24] A. Ketterson et al., "High transconductance InGaAs/AlGaAs pseudomorphic modulation-doped field effect transistors," *IEEE Electron Device Lett.* Vol. EDL 6, pp. 628-630, 1985.
- [25] G. Ji, T. Henderson, C. K. Peng, et al., "Analysis of Energy State in Modulation Doped Multiquantum Well Heterostructures", *SSE*, vol. 33, pp. 247-258, 1990.
- [26] M.B. Patil and U. Ravaioli, "Calculation of electron Device in Planar-Doped High Electron Mobility Transistors", *SSE*, vol. 33, No. 7, pp. 953-962, 1990.
- [27] I-H. Tan, G.L. Snider et al., "A Self-consistent Solution of Schrodinger-Poisson equations using a Nonuniform Mesh", *J. Appl. Phys.* 68(8) 4071, 1990.
- [28] F. Stern and S. D. Sarms, "Electron energy levels in GaAs-GaAlAs heterojunctions," *Phys. Rev.* B30, 840 1984.
- [29] M.B. Patil and U. Ravaioli, "Calculation of electron Device in Planar-Doped High Electron Mobility Transistors", *SSE*, vol. 33, No. 7, pp. 953-962, 1990.
- [30] W. T. Masselink, Ph. D. Thesis, Department of Physics, Univ. of Illinois at Urbana Champaign 1986.
- [31] K. Park and K. D. Kwack, "A Model for the Current-Voltage Characteristics of MODFET's", *IEEE ED-33*, pp. 673-676, 1986.
- [32] D. H. Park and K. F. Brennan, "Theory of electronic transport in two-dimensional GaInAs/AlGaAs pseudomorphic structures", *J. Appl. Phys.* vol. 65 pp. 1615-1620, 1989.
- [33] D. H. Park and K. F. Brennan, "Theoretical Analysis of an AlGaAs/InGaAs Pseudomorphic HEMT Using an Ensemble Monte Carlo Simulation", *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 36, No. 7 pp. 1254-1259, 1989.
- [34] S. Adachi, "Material parameters of $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ and Related binaries," *J. Appl. Phys.* 53(12), Dec. 1982.
- [35] O. Madelung, *LANDOLT-BORNSTEIN*, vol. 22, Springer-Verlag, 1987.
- [36] J.S. Blakemore, "Semiconducting and

other major properties of gallium arsenide". *J. Appl. Phys.*, 53(10), R123-, 1982.

[37] C. M. Snowden, Semiconductor device modeling, IEE, 1988.

[38] Clifford M. Krowne, "Semiconductor heterostructure nonlinear Poisson equation", *J. Appl. Phys.*, 65(4), 15, pp 1062-1614, 1989.

著 者 紹 介



宋榮珍(正會員)

1961年 8月 12日生. 1983年 2月 中央大學校 電子工學科 卒業.

1985年 2月 中央大學校 大學院 電子工學科 碩士. 1988年 3月 現在

中央大學校 大學院 電子工學科 박사 과정. 主 관심분야는 hot-carrier

transport, 화합물반도체 소자 및 공정물리, 모델링 및 시뮬레이션 등임.

黃好正(正會員) 第26卷 第7號 參照

현재 중앙대학교 전자공학과 교수.