

論文2002-39SD-2-3

# Pauli 배타 원리를 적용한 축퇴 양자 우물 소자 모델링

## (Modeling of Degenerate Quantum Well Devices Including Pauli Exclusion Principle)

李 殷 珠 \*

(Unjoo Lee)

## 요 약

Pauli 배타 원리를 적용한 축퇴 상태의 양자 우물 소자 모델링을 제안하였다. 양자 우물에서의 다중 에너지 부준위 각각에 대한 Boltzmann 방정식의 collision 항들을 Pauli 배타 원리를 적용하여 전개하고 이들을 Schrodinger 방정식과 Poisson 방정식과 결합하여 비선형적인 시스템의 모델을 설정하였다. 시스템의 해를 직접적으로 구하기 위하여 유한 차분법과 Newton-Raphson method를 적용하여 양자 우물의 다중 에너지 부준위 각각에 대한 캐리어 분포 함수를 구하였다. Si MOSFET의 inversion 영역에 본 모델을 적용하여 전자 밀도의 증가에 따라 양자 우물의 에너지 분포 함수가 Boltzmann 분포 함수의 형태로부터 Fermi-Dirac 분포 함수의 형태로 변화함을 제시하고, 소자 크기가 감소할수록 소자 모델링에 있어서의 Pauli 배타 원리의 중요성과 함께 본 모델의 정당함과 그 해석 방법의 효율성을 보여주었다.

## Abstract

A new model for degenerate semiconductor quantum well devices was developed. In this model, the multi-subband Boltzmann transport equation was formulated by applying the Pauli exclusion principle and coupled to the Schrodinger and Poisson equations. For the solution of the resulted nonlinear system, the finite difference method and the Newton-Raphson method was used and carrier energy distribution function was obtained for each subband. The model was applied to a Si MOSFET inversion layer. The results of the simulation showed the changes of the distribution function from Boltzmann like to Fermi-Dirac like depending on the electron density in the quantum well, which presents the appropriateness of this modeling, the effectiveness of the solution method, and the importance of the Pauli-exclusion principle according to the reduced size of semiconductor devices..

## I. 서 론

차세대 소자 기술로서의 나노 구조 소자의 전기, 자

기, 및 광학적인 특성에 대한 연구가 활발히 진행되어 오고 있다<sup>1-5)</sup>. 특히, quantum dot, quantum wire, superlattice, heterojunction structure 등의 구조를 이용하여 적외선 감지, quantum waveguide, quantum 논리 게이트 등의 응용을 위한 새로운 소자 개발을 위한 연구가 활발히 전개되고 있다<sup>6-8)</sup>. 따라서, 이들의 구조들이 공통으로 가지고 있는 양자 우물(quantum well)에서의 캐리어 전도 특성을 정확하게 예측하여 각 응용 분야에 적합한 소자의 설계를 용이하게 할 수 있는

\* 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

시뮬레이션 tool의 개발이 요구되고 있다.

소자의 특성을 나타내는 파라미터들의 값은 환경에 따라 변화하는 캐리어의 momentum 혹은 에너지 분포 함수를 이용하여 계산할 수 있다. 즉, 전자의 밀도, 평균 에너지, 평균 속도를 비롯하여 전자의 이동도, MOSFET 게이트 전류, 헤테로 접합 소자에서의 에너지 준위간의 천이 에너지 등 여러 가지 파라미터들을 캐리어의 분포 함수를 이용하여 계산할 수 있다<sup>[9]</sup>. 캐리어 분포 함수는 시간, 공간, 그리고 운동량에 대한 캐리어의 확률 밀도 함수로써 열역학 이론으로부터 유도되는 Boltzmann 전송 방정식(BTE : Boltzmann Transport Equation)으로부터 구할 수 있는 해(solution)이다<sup>[10]</sup>.

양자 우물은 나노 소자의 구조에 따라서 1차원적으로 혹은 2 차원적으로 양자화되는 에너지 부준위들(subbands)을 가지며, 이들 에너지 부준위에서의 캐리어 전도는 2차원적 혹은 1차원적이다. 에너지 부준위에서의 캐리어 전도가 2차원적인 경우를 2DEG(Two Dimensional Electron Gas) 시스템이라고 하는데<sup>[14]</sup>, 균일 에너지 표면이 등방적이지 않은 반도체의 경우에 있어서, 2DEG 시스템에서의 캐리어 전도는 일반 소자에 비해 소자의 결정 구조에 더욱 의존적이다. 이는, 양자 우물이 형성되는 결정 방향에 따라 에너지 부준위들의 에너지 상태 밀도가 달라지므로 소자에 주입되는 동일한 양의 에너지에 대하여 캐리어가 분포할 수 있는 에너지의 영역이 달라지기 때문이다. 그러므로, 양자 우물에서의 캐리어 전도 현상을 정확하게 규명하기 위해서는 에너지 부준위 각각에 대한 캐리어 분포 함수에 대한 정확한 예측을 필요로 한다. 더구나 양자 우물이 가지고 있는 특성 때문에 Boltzmann 방정식의 해를 구하는 데 있어서 각 에너지 부준위와 그 파동 함수 및 에너지 부준위의 상호 영향에 대한 정보가 부가적으로 필요하다. 또한, 소자의 크기가 점점 축소됨에 따라 양자 우물에 인가되는 전위의 크기가 증가하게 되어 양자 우물에 존재하는 캐리어의 전체 밀도가 에너지 상태 밀도보다 증가하게 되는 축퇴 현상을 배제할 수 없다. 특히 MOSFET에 있어서 소자의 크기 축소에 따른 축퇴 현상과 더불어 문턱전압 값의 추출은 substrate current, gate leakage current, 및 oxide charging 등의 hot electron effect와 DIBL(Drain induced barrier lowering) 현상의 정확한 해석을 필요로 하며 결국에는 반전 영역에서의 캐리어 분포 함수

의 정확한 계산을 필요로 한다. 기존의 반도체 소자 모델링은 전도 대역의 가장자리에 전자의 에너지 상태밀도가 효과적으로 집중되어 있다는 가정을 그대로 적용하고 있으므로 축퇴상태의 전자 전도 현상을 정확하게 나타낼 수 없다<sup>[11-14]</sup>.

Boltzmann 방정식은 N 개의 입자에 대하여, 특정 시간 t, real space r, momentum space p로 구성되는 6N 차원의 공간에서의 움직임을 고전 열역학적으로 Liouville 방정식을 이용하여 표현한다. Boltzmann 방정식의 해는 캐리어의 분포 함수로서, 그 양상은 일반적으로 Maxwell-Boltzmann distribution의 형태를 갖는다. 그러므로, 페르미온적인 성질을 갖는 전자의 전도 현상을 Boltzmann 방정식을 이용하여 규명하기 위해서는 Pauli 배타 원리를 적용하여야 함은 당연하다고 할 수 있다. 특히, 소자의 전자 밀도가 전자 상태 밀도보다 큰 degenerate(축퇴) 경우, Boltzmann 방정식에 Pauli 배타 원리의 적용은 필수적이라고 할 수 있다. Boltzmann 방정식에 Pauli 배타 원리를 고려하지 않은 경우, 소자에 존재하는 전자의 밀도가 높을수록 낮은 에너지 영역에 존재하는 전자의 수는 전자 상태 밀도보다 큰 값을 가지는 것으로 나타나 Fermi-Dirac 분포 함수의 형태를 만족하지 않는 결과를 나타낸다. 더구나, 2DEG 시스템을 갖는 양자 우물은 상대적으로 낮은 전자의 상태 밀도가 에너지에 대하여 계단 함수의 형태를 취하고 있으므로 축퇴 현상을 배제할 수 없다. 또한, 양자 우물에서는 전체 전자 밀도가 높을수록 양자 우물에 형성되는 전위의 기울기가 상대적으로 높으며 또한 전자의 분포가 양자 우물의 표면에 가까워 지는 현상이 있다. 이는 전체 전자 밀도가 높을수록 에너지 부준위 구조에서 낮은 레벨의 에너지 부준위에 상대적으로 높은 전자 밀도가 형성되기 때문이다. 따라서, 양자 우물의 경우에는 Pauli 배타 원리 적용의 중요성은 크다고 할 수 있다.

따라서, 본 논문은 양자 우물의 모델링에 있어서, Pauli 배타 원리를 적용한 축퇴 상태의 양자 우물 소자에 대한 모델링을 제시하였다. Pauli 배타 원리를 적용하여 전개한 Boltzmann 방정식을 Schrodinger 방정식과 Poisson 방정식과 결합하여 형성되는 비선형 연립방정식 시스템을 수학적인 모델로 설정하였다. 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 방정식에 있어서는 다중 에너지 부준위 각각에 대하여 Pauli 배타 원리를 고려하여 acoustic phonon scattering, intervalley phonon scattering과 다중 에너지 부준위 사이의 intersubband phonon scattering의 항들을 전개하였다. 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>[15, 16]</sup>. Schrodinger 방정식과 Poisson 방정식으로부터 구한 양자 우물에 형성되는 에너지 부준위 구조에 대하여 Pauli 배타 원리가 포함되어 있는 비선형 다중 에너지 부준위 Boltzmann 방정식의 해를 구하고 그 결과를 다음 반복(iteration)에서 Schrodinger 방정식과 Poisson 방정식의 해로부터 새로운 에너지 부준위 구조를 구하기 위하여 사용하였다. 이와 같은 과정을 Boltzmann 방정식, Schrodinger 방정식, 그리고 Poisson 방정식의 해가 소정의 오차 범위 내에서 수렴할 때까지 계속하였다. 이들 수식들의 해는 유한 차분법과 Newton-Raphson method에 의해 수치적으로 구하였다. 본 방법은 Si-MOSFET 반전 영역(inversion layer)에 형성되는 양자 우물에 대하여 적용하여 전자 밀도의 증가에 따라 양자 우물의 에너지 분포 함수가 Boltzmann 분포 함수의 형태로부터 Fermi-Dirac 분포 함수의 형태로 변화함을 보였고, 소자 크기가 감소할수록 소자 모델링에 있어서 Pauli 배타 원리가 중요하다는 것을 보여줌으로써 본 모델의 정당함을 제시하였다. 또한 본 논문에 의한 해석 방법의 수렴 속도가 신속하고 수렴 상태가 안정적임을 보여 본 해석 방법의 효율성을 보여주었다.

## II. 수학적인 모델링

### 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.<sup>[15, 16]</sup>

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

여기서,  $z$ 는 양자우물이 형성되는 방향의 축을 나타내며,  $m_z$ 는 에너지 부준위의 양자화가 일어나는 방향에 대한 캐리어의 유효 질량,  $\psi$ 는 에너지 부준위의 파동함수,  $\epsilon$ 는 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 항으로 나타내었으며,  $i$  번째 에너지 부준위의 상대밀도,  $N^i$ 는 Boltzmann 방정식의 해로부터 계산되는 값으로서 아래와 같이 Fermi-Dirac 분포 함수를 사용하여 초기화하였다.

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

여기서,  $n_{vi}$ 는 균일 에너지 표면의 degeneracy,  $m_{di}$ 는 유효 에너지 상태 밀도,  $\epsilon^i$ 는  $i$  번째 에너지 부준위의 레벨이다.

### 2. Pauli 배타 원리를 적용한 다중 에너지 부준위 Boltzmann 방정식(MPEBTE)

다중 에너지 부준위 각각에 대하여 Pauli 배타 원리를 포함하는 Boltzmann 방정식을 함축적으로 표현하기 위하여 이를 Multi-Subband Pauli Excluded Boltzmann Transport equation(MPEBTE)으로 명명하였다. MPEBTE의 해는 양자 우물의 크기와 축퇴의 정도에 따라 변화하는 에너지 부준위 구조에 대한 캐리어 분포 함수이다. 정상 상태(steady state)에서 그리고 균일 전기장의 영향하에서 MPEBTE의 일반적인 형태를  $i$

번째 에너지 부준위에 대하여 momentum space에서 다음과 같이 나타내었다.

$$\begin{aligned} & \frac{-e}{\hbar} E \cdot \nabla_k F^i(k) \\ &= -\frac{A}{4\pi^2} \sum_j \int \{ P_j^i(k, k') F^i(k) [1 - F^i(k')] \\ & \quad - P_j^i(k', k) F^i(k') [1 - F^i(k)] \} dk' \end{aligned} \quad (4)$$

여기서,  $A$ 는 양자 우물 표면의 면적,  $E$ 는 전기장의 세기,  $F^i(k)$ 는  $i$  번째 에너지 부준위에서의 전자 momentum 분포 함수,  $P_j^i(k, k')$ 는 전자가  $k$  상태에서  $k'$  상태로 전이할 확률, 그리고 아래 첨자  $j$ 는 scattering의 여러 가지 종류를 나타내기 위한 색인이다. 식 (4)의 LHS는 MPEBTE의 drift, diffusion 항을 나타내고, RHS는 collision의 항으로서 acoustic phonon scattering, intervalley phonon scattering, 그리고 에너지 부준위 간의 intersubband phonon scattering 각각에 대하여 전자가  $k$  상태에서  $k'$ 로 전이하는 경우와  $k'$  상태에서  $k$  상태로 전이하는 경우를 포함하였다. 여기서,  $[1 - F^i(k)]$ 와  $[1 - F^i(k')]$ 은 Pauli 배타 원리를 포함하기 위한 factor로서  $i$  번째 에너지 부준위에서의  $k$ 과  $k'$  상태에 전자가 존재하지 않는 경우를 각각 나타낸다. 식 (4)의 형태로부터 알 수 있는 바와 같이 Pauli 배타 원리를 고려하는 MPEBTE는 비선형 시스템이다. 양자 우물에 존재하는 전체 캐리어의 밀도가 에너지 상태 밀도보다 훨씬 작은 경우, 즉  $[1 - F^i(k)]$ 는 거의 1에 가깝게 되어 Pauli 배타 원리를 무시할 수 있는 경우를 동시에 고려하기 위하여 본 논문에서는 Pauli 배타 원리 계수  $a$ 를 설정하였다. MPEBTE의 collision 항의 일반식은 Pauli 배타 원리 계수  $a$ 를 사용하고, Fermi-Golden rule과 deformation 이론으로부터 그리고 균일 에너지 표면이 비등방성(anisotropic)인 경우를 고려하여 Herring-Vogt 변환 방법을 적용시켜 균일 에너지 표면이 등방적으로 나타내어지는 starred space에서 다음과 같이 나타내었다.

$$\begin{aligned} \left[ \frac{\partial F^i(k^*)}{\partial t} \right]_{co} &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_q [ (|k^* \cdot N_{q^*} + \mathbb{1}|H|k^* + q^*, N_{q^*})|^2 \\ & \times \delta(\varepsilon_{k^*} - \varepsilon_{k^*+q^*} + \hbar \omega_{q^*}) F^i(k^* + q^*) (1 - aF^i(k^*)) \\ & + (|k^* \cdot N_{q^*} - \mathbb{1}|H|k^* - q^*, N_{q^*})|^2 \\ & \times \delta(\varepsilon_{k^*} - \varepsilon_{k^*-q^*} - \hbar \omega_{q^*}) F^i(k^* - q^*) (1 - aF^i(k^*)) \\ & + (|k^* - q^*, N_{q^*} + \mathbb{1}|H|k^*, N_{q^*})|^2 \\ & \times \delta(\varepsilon_{k^*-q^*} - \varepsilon_{k^*} + \hbar \omega_{q^*}) F^i(k^*) (1 - aF^i(k^* - q^*)) \\ & + (|k^* + q^*, N_{q^*} - \mathbb{1}|H|k^*, N_{q^*})|^2 \\ & \times \delta(\varepsilon_{k^*+q^*} - \varepsilon_{k^*} - \hbar \omega_{q^*}) F^i(k^*) (1 - aF^i(k^* + q^*)) ] \end{aligned} \quad (5)$$

(105)

여기서,  $|k^* \cdot N_{q^*} + \mathbb{1}|H|k^* + q^*, N_{q^*}|$ 은 collision 이전의 상태  $k^* + q^*$ 와 이후의 상태  $k^*$  사이의 perturbing potential의 matrix element이고, 첫 번째 항은 캐리어가  $k^* + q^*$  상태로부터 phonon scattering에 의해 phonon 에너지  $\hbar \omega_{q^*}$ 를 방출하고  $k^*$  상태로 들어오는 경우, 둘째 항은 캐리어가  $k^* - q^*$  상태로부터 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.  $a$ 는 Pauli 배타 계수로서 축퇴 상태의 양자 우물의 영역에 대해서는 1의 값을 설정하고 그렇지 않은 영역에 대해서는 0의 값을 설정하였다.

전자 momentum 분포 함수를 Legendre 다항식으로 전개하면

$$F^i(k^*) = f_0^i(\varepsilon) + k^* g^i(\varepsilon) \cos \theta \quad (6)$$

이고, 양자 우물의 dispersion relation은

$$\chi(\varepsilon) = \varepsilon^i + \frac{\hbar^2 k^{*2}}{2m_0} \quad (7)$$

이다. 여기서,  $f_0^i(\varepsilon)$ 은 캐리어 분포 함수의 대칭 성분,  $k^* g^i(\varepsilon) \cos \theta$ 은 비대칭 성분, 그리고  $\theta$ 는  $E^*$ 와  $k^*$ 이 이루는 각이다. MPEBTE을 식 (6), (7)에서와 같이 starred space에서 Legendre 다항식으로 전개하고 각 항들을 대칭 성분과 비대칭 성분으로 분류한 다음 Legendre 다항식의 직교성을 적용하여 다음과 같이 대칭 성분으로만 구성되도록 유도하였다.

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

$$\begin{aligned}
& -N_R f_0^i(\epsilon)(1 - a f_0^i(\epsilon + \hbar \omega_R)) \\
& \times u_0(\epsilon - \epsilon^i + \hbar \omega_R) \\
& + [N_R f_0^i(\epsilon - \hbar \omega_R)(1 - a f_0^i(\epsilon)) \\
& - (N_R + 1) f_0^i(\epsilon)(1 - a f_0^i(\epsilon - \hbar \omega_R))] \\
& \times u_0(\epsilon - \epsilon^i - \hbar \omega_R) \\
& + \sum_{R \geq j, j \neq i} I_{ij}^2 \frac{(m_d^j)^{1/2} Z_R^2}{\rho \hbar^3 \omega_R} \times \\
& \{ [(N_R + 1) f_0^i(\epsilon + \hbar \omega_R)(1 - a f_0^i(\epsilon)) \\
& - N_R f_0^i(\epsilon)(1 - a f_0^i(\epsilon + \hbar \omega_R))] \\
& \times u_0(\epsilon - \epsilon^j + \hbar \omega_R) \\
& + [N_R f_0^i(\epsilon - \hbar \omega_R)(1 - a f_0^i(\epsilon)) \\
& - (N_R + 1) f_0^i(\epsilon)(1 - a f_0^i(\epsilon - \hbar \omega_R))] \\
& \times u_0(\epsilon - \epsilon^j - \hbar \omega_R) \} = 0
\end{aligned} \tag{8}$$

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

$$\frac{1}{\tau^i(\epsilon)} = \frac{1}{\tau_{ac}^i(\epsilon)} + \frac{1}{\tau_{ib}^i(\epsilon)} + \frac{1}{\tau_{isub}^i(\epsilon)} \tag{9}$$

### III. Numerical Solution Method

상기한 바와 같이 본 연구에서는 양자 우물의 수식적인 모델링으로서 Pauli 배타 원리를 포함하는 다중 에너지 부준위 각각에 대한 MPEBTE, Schrodinger 방정식, 그리고 Poisson 방정식으로 구성되는 연립방정식을 설정하고 이들의 해를 Gummel의 Block iteration method를 적용하여 수치적으로 구하였다. 먼저 다중 에너지 부준위와 그 파동함수들의 초기치들을 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 MPEBTE의 해를 유한 차분법과 Newton-Raphson 반복법을 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 Boltzmann 방정식의 해들이 소정의 오차 범위 내에서 수렴

할 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

$$-\frac{\hbar^2}{2m_z} \frac{\phi_{j+1} - 2\phi_j + \phi_{j-1}}{\Delta z^2} - e\phi_j \psi_j = \epsilon \psi_j \tag{10}$$

$$\frac{\phi_{j+1} - 2\phi_j + \phi_{j-1}}{\Delta z^2} = -\frac{e}{\epsilon_s} (D_j - N_s \sum_i N^i |\psi_j^i|^2) \tag{11}$$

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

$$\text{B.C. : } \psi(0) = \psi_1 = 0, \quad \psi(\infty) = \psi_N = 0$$

$$\phi(0) = \phi_1 = 0, \quad \frac{d\phi_j}{dz} \Big|_{\infty} = \frac{d\phi_j}{dz} \Big|_N = 0 \tag{12}$$

일반적으로  $N$ 의 값은 100에서 1000 사이의 값을 가지도록 하였고  $\Delta z$ 는 0.1nm의 크기를 가지도록 설정하였다. 식(10)에 의해 주어진  $N$ 개의 Schrodinger 차분 방정식은  $N \times N$ 의 크기를 가지는 대칭 tri-diagonal matrix의 eigensystem으로서  $A\psi = \lambda\psi$ 의 형태로 나타낼 수 있으며, matrix  $A$ 는  $N \times N$ 의 linear operator,  $\lambda$ 는 eigenvalue, 그리고  $\psi$ 는 eigenfunction이다. Recursive relation을 이용하여 determinant의 근을 구하였고 Gerschgorin Cycle에 근거한 Gerschgorin's bound를 적용하여 eigenvalue를 구하였다<sup>[17]</sup>. Eigenvector를 구하기 위해서는 inverse vector 반복법에 근거한 표준 Lanczos 알고리즘을 이용하였다. 위의 알고리즘들에 의하여 구한 eigenvalue와 eigenvector를 식 (11)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 이와 같은 과정을 Schrodinger 방정식과 Poisson 방정식의 해가 소정의

오차 범위 이내로 수렴될 때까지 반복하였다.

2. Boltzmann 방정식

축퇴 상태의 양자 우물에 대한 식 (8)의 MPEBTE는 비선형 differential/difference 방정식이다. 방정식의 해를 구하기 위해 Schrodinger 방정식과 Poisson 방정식의 경우와 마찬가지로 에너지 영역을  $\Delta\varepsilon$  크기를 가지는 N 개의 미소 구간으로 나누어 유한 차분법을 적용하고 Newton-Raphson 반복법을 이용하였다. 유한 차분법을 적용하여 구한 j 번째 에너지 부준위의 l 번째 노드에 대한 Boltzmann 방정식은 다음과 같이 나타내었다.

$$\begin{aligned} & \frac{(eE)^2 \tau^i (\Delta\varepsilon)}{m_0} \left[ \frac{f_{l+1}^i - f_{l-1}^i}{2\Delta\varepsilon} + (\varepsilon - \varepsilon^i) \right. \\ & \left. \frac{f_{l+1}^i - 2f_l^i + f_{l-1}^i}{\Delta\varepsilon^2} \right] + \frac{4(m_d^i)^{1/2} m_0 Z_A^2}{\hbar^3 \rho} \\ & \left\{ (1 - af_l^i) f_l^i + [K_0 T + (\Delta\varepsilon - \varepsilon^i)(1 - 2af_l^i)] \right. \\ & \left. \frac{f_{l+1}^i - f_{l-1}^i}{2\Delta\varepsilon} \right. \\ & \left. + K_0 T (\Delta\varepsilon - \varepsilon^i) \frac{f_{l+1}^i - 2f_l^i + f_{l-1}^i}{\Delta\varepsilon^2} \right\} \\ & + \sum_{R \neq i, j=i} I_{ij}^2 \frac{(m_d^i)^{1/2} Z_R^2}{\rho \hbar^3 \omega_R} \frac{1}{e^{\hbar \omega_R / K_0 T} - 1} \times \\ & \left\{ [e^{\hbar \omega_R / K_0 T} f_{l+l_R}^i (1 - af_l^i) - f_l^i (1 - af_{l+l_R}^i)] \right. \\ & \times u_0(\Delta\varepsilon - \varepsilon^i + \hbar \omega_R) \\ & + [f_{l-l_R}^i (1 - af_l^i) - e^{\hbar \omega_R / K_0 T} f_l^i (1 - af_{l-l_R}^i)] \\ & \times u_0(\Delta\varepsilon - \varepsilon^i - \hbar \omega_R) \left. \right\} \\ & + \sum_{R \neq i, j=i} I_{ij}^2 \frac{(m_d^i)^{1/2} Z_R^2}{\rho \hbar^3 \omega_R} \frac{1}{e^{\hbar \omega_R / K_0 T} - 1} \times \\ & \left\{ [e^{\hbar \omega_R / K_0 T} f_{l+l_R}^i (1 - af_l^i) - f_l^i (1 - af_{l+l_R}^i)] \right. \\ & \times u_0(\Delta\varepsilon - \varepsilon^j + \hbar \omega_R) \\ & + [f_{l-l_R}^i (1 - af_l^i) - e^{\hbar \omega_R / K_0 T} f_l^i (1 - af_{l-l_R}^i)] \\ & \times u_0(\Delta\varepsilon - \varepsilon^j - \hbar \omega_R) \left. \right\} = 0 \end{aligned} \quad (13)$$

여기서,  $f_l^i = f_l^i(\varepsilon_l) = f_l^i(\Delta\varepsilon)$ 이고  $l_R$ 은  $\hbar \omega / \Delta\varepsilon$ 에 가장 가까운 정수이다. Newton-Raphson 반복법을 이용하기 위해 식 (13)의 방정식을 0으로 설정하는 대신에  $G_l^i(f^{i,n})$ 으로 설정하고 Newton-Raphson method를 적용하여 다음과 같이 식을 설정하였다.

$$\begin{aligned} G_l^i(f^{i,n+1}) &= G_l^i(f^{i,n} + \delta f^{i,n}) \\ &= G_l^i(f^{i,n}) + \left( \frac{\partial G_l^i(f^{i,n})}{\partial f^{i,n}} \right) \cdot \delta f^{i,n} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (14)$$

여기서,  $f^{i,n}$ 는  $(f_1^{i,n}, \dots, f_l^{i,n}, \dots, f_N^{i,n})$ 이고  $\delta f^{i,n}$ 은

difference 벡터로서  $(\delta f_1^{i,n}, \dots, \delta f_l^{i,n}, \dots, \delta f_N^{i,n})$ 이며, 첫 첨자  $n$ 은  $n$ 번째 반복을 의미하고,  $\left( \frac{\partial G_l^i}{\partial f^{i,n}} \right)$ 은 Jacobian matrix,  $\left( \frac{\partial G_l^i}{\partial f_1^{i,n}}, \dots, \frac{\partial G_l^i}{\partial f_l^{i,n}}, \dots, \frac{\partial G_l^i}{\partial f_N^{i,n}} \right)$ 이다. 열 벡터  $\left( \frac{\partial G_l^i}{\partial f^{i,n}} \right)$ 에서의 미분을 행하여 다음의 항들을 제외한 나머지의 원소들의 값은 모두 0이 되는 Jacobian matrix를 구하였다.

$$\frac{\partial G_l^i}{\partial f_{l-l_R}^i} = \overline{IV_R^i} \left( \frac{1}{e^{\hbar \omega_R / K_0 T} - 1} + af_l^i \right) \times u_0(\Delta\varepsilon - \varepsilon^i - \hbar \omega_R) \quad (15-1)$$

$$\frac{\partial G_l^i}{\partial f_{l-l_R}^i} = \overline{IV_R^j} \left( \frac{1}{e^{\hbar \omega_R / K_0 T} - 1} + af_l^i \right) \times u_0(\Delta\varepsilon - \varepsilon^j - \hbar \omega_R) \quad (15-2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial G_l^i}{\partial f_{l-l}^i} &= \overline{E^i} (l - l^i - \frac{1}{2}) + \overline{AC^i} \{ K_0 T \\ & \times \left[ \frac{l - l^i}{\Delta\varepsilon} - \frac{1}{2\Delta\varepsilon} \right] - \frac{1}{2} (l - l^i)(1 - 2af_l^i) \} \end{aligned} \quad (15-3)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial G_l^i}{\partial f_l^i} &= -2 \overline{E^i} (l - l^i) + \overline{AC^i} \{ (1 - 2af_l^i) \\ & - \frac{2K_0 T (l - l^i)}{\Delta\varepsilon} - a(l - l^i)(f_{l+1}^i - f_{l-1}^i) \} \end{aligned} \quad (15-4)$$

$$\begin{aligned} & + \sum_{R \neq i, j=i} \overline{IV_R^i} \left[ \left( -\frac{1}{e^{\hbar \omega_R / K_0 T} - 1} - af_{l+l_R}^i \right) \right. \\ & \times u_0(\Delta\varepsilon - \varepsilon^i + \hbar \omega_R) \\ & + \left( -\frac{e^{\hbar \omega_R / K_0 T}}{e^{\hbar \omega_R / K_0 T} - 1} + af_{l-l_R}^i \right) \\ & \times u_0(\Delta\varepsilon - \varepsilon^i - \hbar \omega_R) \left. \right] \\ & + \sum_{R \neq i, j=i} \overline{IV_R^j} \left[ \left( -\frac{1}{e^{\hbar \omega_R / K_0 T} - 1} - af_{l+l_R}^i \right) \right. \\ & \times u_0(\Delta\varepsilon - \varepsilon^j + \hbar \omega_R) \\ & + \left( -\frac{e^{\hbar \omega_R / K_0 T}}{e^{\hbar \omega_R / K_0 T} - 1} + af_{l-l_R}^i \right) \\ & \times u_0(\Delta\varepsilon - \varepsilon^j - \hbar \omega_R) \left. \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial G_l^i}{\partial f_{l+l}^i} &= \overline{E^i} (l - l^i - \frac{1}{2}) + \overline{AC^i} \{ K_0 T \\ & \times \left[ \frac{l - l^i}{\Delta\varepsilon} + \frac{1}{2\Delta\varepsilon} \right] \\ & + \frac{1}{2} (l - l^i)(1 - 2af_l^i) \} \end{aligned} \quad (15-5)$$

$$\frac{\partial G_l^i}{\partial f_{l+l_R}^i} = \overline{IV_R^j} \left( \frac{e^{\hbar \omega_R / K_0 T}}{e^{\hbar \omega_R / K_0 T} - 1} - af_l^i \right) \times u_0(\Delta\varepsilon - \varepsilon^j + \hbar \omega_R) \quad (15-6)$$

$$\frac{\partial G_l^i}{\partial f_{l+l_R}^i} = \overline{IV_R^i} \left( \frac{e^{\hbar \omega_R / K_0 T}}{e^{\hbar \omega_R / K_0 T} - 1} - af_l^i \right) \times u_0(\Delta\varepsilon - \varepsilon^i + \hbar \omega_R) \quad (15-7)$$

$$\begin{aligned} \overline{E^i} &= \frac{(eE)^2 \tau^i (\Delta \varepsilon)}{m_0 \Delta \varepsilon}, \\ \overline{AC^i} &= \frac{4(m_d^i)^{1/2} m_0 Z_A^2}{\hbar^3 \rho}, \\ \overline{IV_R^i} &= |I_{ij}|^2 \frac{(m_d^i)^{1/2} Z_R^2}{\rho \hbar^2 \omega_R}, \\ \overline{IV_R^j} &= |I_{ij}|^2 \frac{(m_d^j)^{1/2} Z_R^2}{\rho \hbar^2 \omega_R}, \end{aligned}$$

$i$ 은  $\varepsilon^i/\Delta\varepsilon$ 에 가장 근사한 정수값이고 윗 첨자  $i$ 와  $j$ 는 에너지 부준위를 나타내는 첨자이다. MPEBTE의 해를 구하는 데 있어서 세 가지 경우의 경계조건들을 고려하였다. 첫째는, 분포함수의 정규화에 관한 것으로서 Newton-Raphson 반복법을 적용하기 위해 미분하여 아래와 같이 나타내었다.

$$\delta n = \frac{1}{2\pi^2} \sum_{\varepsilon} \delta f_i^{i,n} h^i(\varepsilon) \Delta \varepsilon \quad (16)$$

여기서,  $n$ 은 시스템 내에 존재하는 캐리어의 전체 밀도이고  $h^i(\varepsilon)$ 은  $i$  번째 에너지 부준위의 에너지 상태 밀도로서  $h^i(\varepsilon) = \frac{2\pi m_d^i}{\hbar^2} u_0(\varepsilon - \varepsilon^i)$ 이다. 둘째, 정상 상태에서 각 에너지 부준위에서의 캐리어 분포 함수가 평형을 이루므로 intersubband scattering rate는 0의 값을 갖게 되므로,  $i$  번째 에너지 부준위에 대해

$$\sum_{R \neq J, J \neq i} \int \left( \frac{\partial F^i(k)}{\partial t} \right)_{\text{sub}} dk = G_{bc}^i \quad (17-1)$$

$$\left( \frac{\partial G_{bc}^i}{\partial f^{i,n}} \right) \cdot \delta f^{i,n} = -G_{bc}^i(f^{i,n}) \quad (17-2)$$

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

$$\delta f_N^n = 0 \quad (17-3)$$

으로 나타내었다. 결과적으로  $M$  개의 에너지 부준위를 갖는 양자 우물은 상기한 경계조건과 함께  $M \times N$  개의 서로 결합된 비선형 차분 연립방정식을 가지게 되었다. 초기 반복 횟수,  $n=1$ 부터 시작하여  $f^{i,n}$ 에 대한 타당한 초기값을 설정하여  $G^i(f^{i,n})$ 을 계산하고, 식 (14)을 적용하여 구한 캐리어 분포 함수의 변화분,  $\delta f^{i,n}$  과  $f^{i,n+1} = f^{i,n} + \delta f^{i,n}$ 을 이용하여 다음 반복에서의 새로운 분포 함수의 값,  $f^{i,n}$ 을 설정하고 다시

식(14)로부터  $\delta f^{i,n}$ 을 구하는 과정을 캐리어 분포 함수  $f^{i,n}$ 가 소정의 오차 범위 내에서 식 (13)을 만족할 때까지 계속하였다.

### 3. Self-consistent 해석 방법

그림 1의 flow chart에는 Pauli 배타 원리를 포함하는 축퇴 양자 우물의 MPEBTE(식(8))를 Schrodinger 방정식(식(1)), Poisson 방정식(식(2))과 결합하여 Gummel의 block iteration method에 의해 다중 에너지 부준위 구조와 에너지 부준위 각각에 대한 캐리어 분포 함수를 구하는 전체적인 과정을 나타내었다. 캐리어 분포 함수의 초기값으로서 Fermi-Dirac 분포 함수를 가정하고 Schrodinger 방정식과 Poisson 방정식으로부터 다중 에너지 부준위의 구조를 구하고 구한 에너지 부준위 구조에 대하여 Newton-Raphson 반복법을 이용하여 MPEBTE으로부터 캐리어 분포 함수를 구하여 다음 반복에서 새로운 값으로써 사용하였다. 이와 같은 과정을 다중 에너지 부준위의 구조 및 캐리어 분포 함수가 소정의 오차 범위 내에서 수렴할 때까지 반복하였다.

## IV. 결 과

본 연구의 방법을 (100) Si n-MOSFET의 반전 영역에 형성되는 축퇴 상태의 양자 우물에 적용하였다. 그림 2에는 축퇴 상태의 양자 우물에 있어서, Pauli 배타 원리를 적용하여 구한 전자의 에너지 분포 함수(실선: MPEBTE)와 Pauli 배타 원리를 무시하고 구한 전자의 에너지 분포 함수(점선: MBTE(Multi-subband BTE))를 비교하여 나타내었다. 여기서, 전체 전자 밀도,  $N_s$ 의 값으로  $10^{12}, 10^{13} \text{cm}^{-2}$ 의 두 가지 경우에 대하여 고려하였으며 균일 전기장의 세기를  $1 \text{kV/cm}$ 로 설정하였다. 전체 전자 밀도가  $10^{13} \text{cm}^{-2}$ 인 경우에 있어서, Pauli 배타 원리가 적용된 경우의 분포 함수는 예상한 바와 같이 Fermi-Dirac 분포 함수의 형태를 가지며 그렇지 않은 경우의 분포 함수는 1보다 큰 값을 가지는 비실제적인 영역이 존재함을 보여주었으며, 전체 전자 밀도가  $10^{12} \text{cm}^{-2}$ 인 경우에 있어서는 Pauli 배타 원리의 적용에 의한 결과가 그렇지 않은 것과 차이가 미미함을 보여주었다. 즉, 전체 전자 밀도가  $10^{12} \text{cm}^{-2}$ 인 경우에는 축퇴 현상이 존재하지 않으므로 Pauli 배타 원리를 적용할 필요성이 없으나 전체 전자 밀도가  $10^{13} \text{cm}^{-2}$ 인

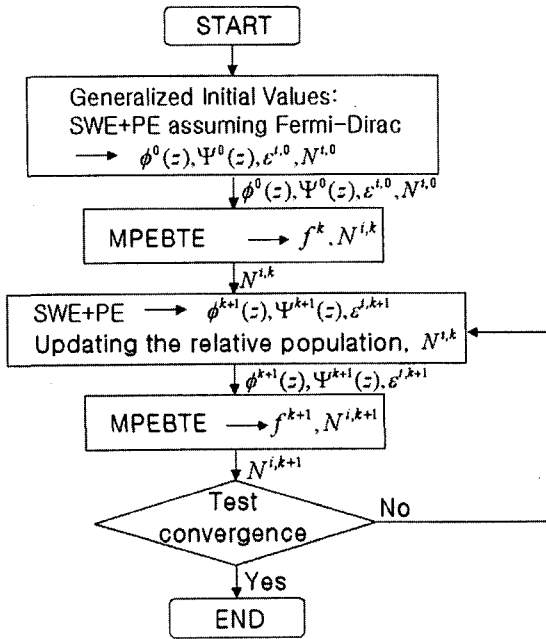


그림 1. Self-consistent 해석 방법의 흐름도  
 Fig. 1. Program flow chart for the self-consistent solution.

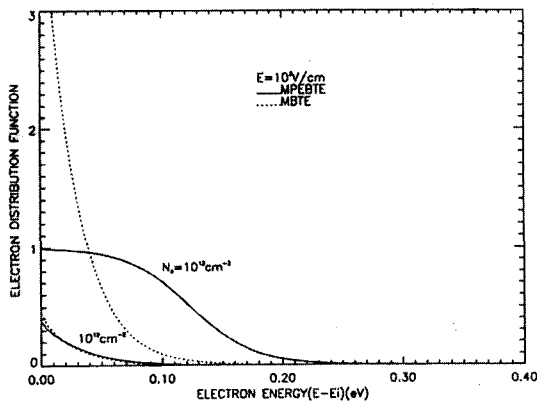


그림 2. 에너지 분포함수와 에너지(linear scale, E=1kV/cm)  
 Fig. 2. Distribution function versus energy on a linear scale for an electric field of 1kV/cm.

경우에는 축퇴 현상이 존재하므로 Pauli 배타 원리를 적용할 필요성이 있음을 보여주었다. 그림 3에는 그림 2의 결과를 logarithmic scale로 나타내었다. 그림 3은 에너지의 값이 높은 영역에서는 분포 함수의 기울기가 Pauli 배타 원리가 적용된 경우나 그렇지 않은 경우나 같은 값(1/K<sub>0</sub>T at 300° K)을 가짐을 보여주었다. 이러한 결과는 일반적으로 축퇴 현상을 가지고 있는 경우

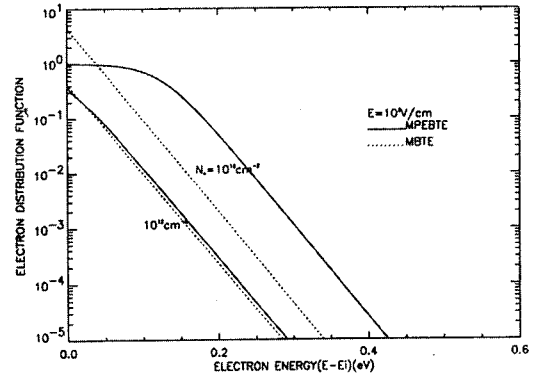


그림 3. 에너지 분포함수와 에너지(log scale, E=1kV/cm)  
 Fig. 3. Distribution function versus energy on a logarithmic scale for an electric field of 1kV/cm.

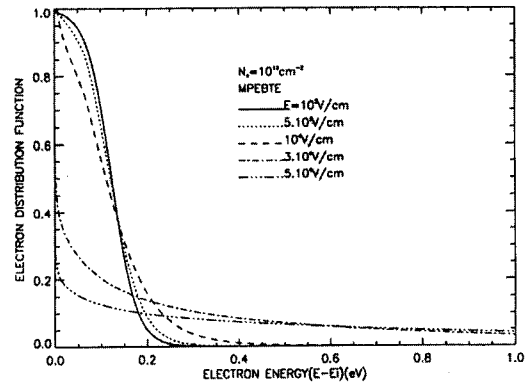


그림 4. 여러 전장의 세기에 대한 에너지 분포함수  
 Fig. 4. Distribution functions calculated for a constant electron concentration and various electric fields.

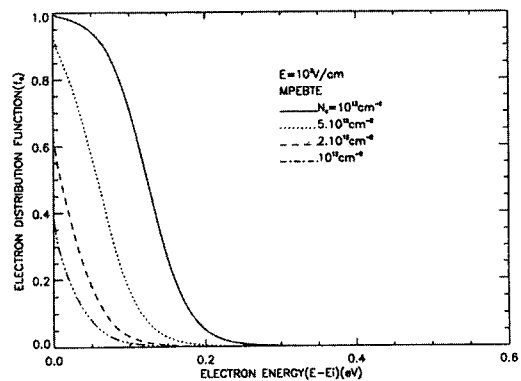


그림 5. 여러 전체 전자 밀도에 대한 에너지 분포함수  
 Fig. 5. Distribution functions calculated for a constant electric field and various electron concentration.



와 그렇지 않은 경우 모두에 있어서 에너지의 값이 높은 영역에서 Fermi-Dirac 분포 함수가 Boltzmann 분포 함수와 유사한 형태를 가지며 또한 Boltzmann factor인  $e^{-\epsilon/k_B T}$ 의 항으로 나타내어 질 수 있다는 보편타당한 사실을 그대로 나타내고 있다. 그림 4에는 전체 전자 밀도가  $N_s = 10^{13} \text{cm}^{-2}$ 인 축퇴 현상을 가지는 양자 우물에 대하여 전기장의 세기 변화에 따른 Pauli 배타 원리를 적용하여 구한 에너지 분포 함수의 변화를 나타내었다. 전장의 세기가 낮은 값을 가질수록 분포 함수는 열평형 상태의 Fermi-Dirac 분포 함수의 형태를 가지나, 전장의 세기가 높아짐에 따라 전자의 분포가 높은 에너지 영역으로 확산되는 flattening 현상을 보여주었다. 또한 2DEG 시스템에서의 낮은 scattering rate 때문에 양자 우물을 갖지 않는 소자의 경우보다 상대적으로 낮은 전장의 세기에 대하여 분포 함수가 flattening 되는 것을 보여주었다. 그림 5에는 전장의 세기가  $1 \text{kV/cm}$ 인 경우에 대하여 전체 전자 밀도의 변화에 따른 Pauli 배타 원리를 적용하여 구한 분포 함수들의 변화를 나타내었다. 전체 전자 밀도가 증가함에 따라 분포 함수의 형태가 Fermi-Dirac에 더욱 가까워지며 따라서 Pauli 배타 원리의 영향이 더욱 중요하게 작용함을 보여 주었다. 그림 6에는 여러 가지 전체 전자 밀도의 값에 대하여 Pauli 배타 원리를 적용한 경우의 전자의 평균에너지 값과 Pauli 배타 원리를 적용하지 않은 경우의 전자의 평균에너지 값의 차이를 전장의 세기의 함수로 나타내었다. 그리고 그림 7에는 여러 가지 전장의 세기에 대하여 Pauli 배타 원리를 적용한 경우의 전자의 평균에너지 값과 Pauli 배타 원리를 적용하지 않은 경우의 전자의 평균에너지 값의 차이를 전체 전자 밀도의 함수로 나타내었다. 전자의 평균 에너지 값은 다음의 식 (18)에 의해 구하였다.

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

그림 6과 7은 전자의 평균 에너지가 전체 전자 밀도와 전장의 세기에 따라서 변화하는 양자역학적인 특성을 잘 보여주고 있다. 그림 6에서 알 수 있는 바와 같이 어느 정도까지는 전기장의 세기가 증가할수록 Pauli 배타 원리를 적용한 경우의 평균에너지와 그렇지 않은 경우의 평균에너지와의 차이는 점점 증가하다가 다시 감소하는 경향을 보여주었다. 이와 같이 전기장의 세기가 증가할수록 Pauli 배타원리의 효과가 감소하는 것은

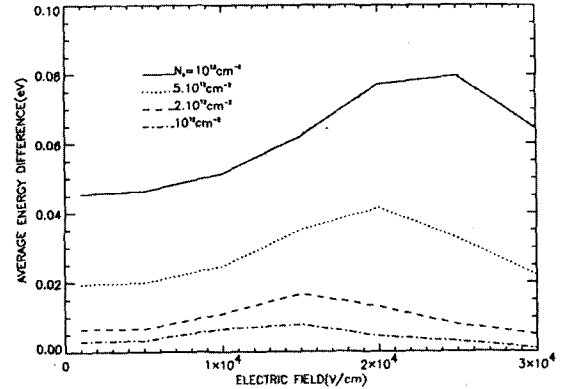


그림 6. 전장의 세기의 함수로 Pauli 배타 원리를 적용한 경우의 전자 평균 에너지와 그렇지 않은 경우와의 차이

Fig. 6. Average electron energy difference between the case including Pauli exclusion principle and the case neglecting the exclusion.

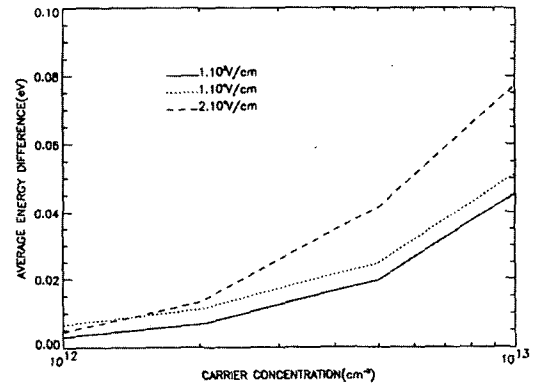


그림 7. 전체 전자 밀도의 함수로 Pauli 배타 원리를 적용한 경우의 평균 에너지와 그렇지 않은 경우와의 차이

Fig. 7. Average electron energy difference between the case including Pauli exclusion principle and the case neglecting the exclusion.

전기장의 세기가 증가하는 경우에는 전자의 분포 함수가 넓은 에너지 영역으로 flattening하게 되는 현상을 그대로 보여주는 것이다. 그림 7에서 알 수 있는 바와 같이 그림 6에서 보여 준 바와 같은 현상은 전체 전자 밀도가 높을수록 상대적으로 증가함을 보여주었다. 그림 8에는 전체 전자 밀도를  $10^{13} \text{cm}^{-2}$ 로 설정하고 양자 우물에 형성되는 다중 에너지 부준위 중에서 고려한 최하위 부준위의 수를 1개, 2개, 3개, 혹은 4개인 경우 각각에 대한 전자의 평균 에너지를 전장의 세기의 함수로 나타내었고 이들을 양자 우물을 가지고 있지

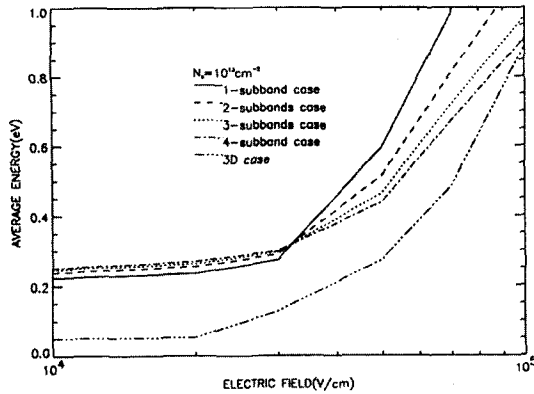


그림 8. 에너지 부준위의 수의 증가에 따른 전자 평균 에너지의 변화

Fig. 8. Average electron energy as a function of electric field for  $N_s=10^{13}cm^{-2}$  for varying the number of subbands.

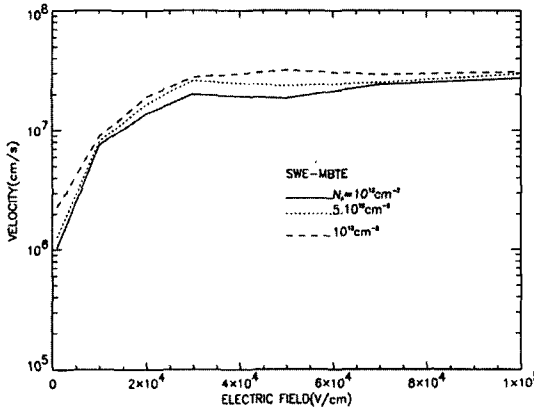


그림 9. 여러 가지 전체 전자 밀도에 대한 전장의 세기의 함수로서의 전자의 평균 drift 속도

Fig. 9. Average electron velocity as a function of electric field for various electron concentrations.

많은 일반적인 3D 경우와 비교하였다. 그림 8은 에너지 부준위의 레벨이 높을수록 부준위 사이의 간격은 점점 줄어들어 양자화 현상이 없어지는 경계에서 3D의 특성을 가지게 되는 양자 우물의 중요한 특성을 보여주고 있다. 즉, 낮은 전장의 세기에서는 전자의 에너지 분포가 낮은 레벨의 에너지 부준위에 국한되어 있으므로 전자의 평균 에너지 값은 3D의 경우보다 높은 값을 가지나 전장의 세기가 증가함에 따라 전자의 에너지 분포가 높은 레벨의 에너지 부준위로 확장되어 전자의 평균 에너지 값이 3D의 경우로 근접하는 현상을 보여주고 있다. 그림 6과 8에서 살펴 볼 수 있는 바와

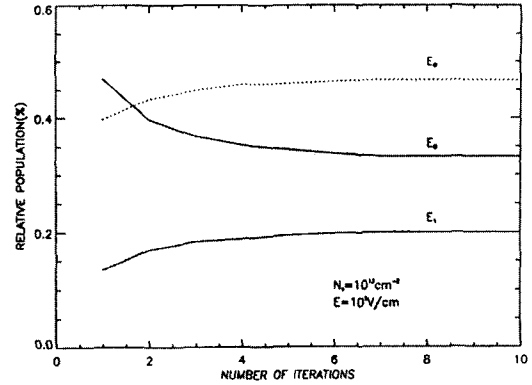


그림 10. 반복 시행 횟수에 따른 에너지 부준위들의 상대 밀도의 백분율( $N_s=10^{13}cm^{-2}$ ,  $E=10^5V/cm$ )

Fig. 10. Subband relative populations(%) vs. number of iteration at  $N_s=10^{13}cm^{-2}$ ,  $E=10^5V/cm$ .

같이 Pauli 배타 원리를 적용한 경우가 적용하지 않은 경우에 비해 평균 에너지 값의 예측에 도움이 됨을 알 수 있었다. 그림 9에는 여러 가지 전체 전자 밀도에 대하여 Pauli 배타 원리를 적용하여 구한 분포 함수로부터 아래 식 (19)을 이용하여 구한 평균 drift 속도를 전장의 세기의 함수로 나타내었다.

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

전자의 평균 drift 속도의 값은 3D의 경우보다 다소 높은 값을 가지며 전체 전자 밀도가 증가함에 따라 증가함을 보여주었다. 또한 그림 8과 9에서 명시되지 않았으나, Pauli 배타 원리를 적용하지 않은 경우의 평균 에너지 값과 비교하였을 때, Pauli 배타 원리를 적용한 경우의 평균에너지 값은 낮은 전기장의 영역에서 상대적으로 높은 값을 가짐을 보여주었다. 이는, 전기장의 세기가 낮은 영역에서 상대적으로 축퇴현상이 두드러지는 이유로 하여 이 영역에서의 Pauli 배타 원리의 중요성을 보여주는 것이라 하겠다. 그림 10에는 본 연구에서 개발한 축퇴 상태의 양자 우물의 모델링의 해석 방법의 수렴속도를 나타내기 위하여, 전장의 세기가  $100kV/cm$ 이고 전체 전자 밀도가  $10^{13}cm^{-2}$ 인 양자 우물에 대하여 반복 시행 횟수에 따른 다중 에너지 부준위들에 존재하는 전자의 상대 밀도(%)의 변화를 나타내었다. 그림으로부터 알 수 있는 바와 같이 본 방법은 빠른 수렴 속도를 가지고 있으며 그 수렴성 또한 안정적이다.

## V. 결 론

소자 크기가 감소할수록 양자 우물이 형성되는 방향으로 전기장의 세기가 커지게 되어 양자 우물에 존재하는 캐리어의 전체 밀도가 에너지 상태 밀도보다 증가하게 되는 축퇴 현상을 배제할 수 없다. 특히 MOSFET에 있어서 소자의 크기 축소에 따른 축퇴 현상과 더불어 문턱전압 값의 추출은 substrate current, gate leakage current, 및 oxide charging 등의 hot electron effect와 DIBL(Drain induced barrier lowering) 현상의 정확한 해석을 필요로 하며 결국에는 반전 영역에서의 캐리어 분포 함수의 정확한 계산을 필요로 한다. 본 방법은 축퇴 상태의 양자 우물의 특성을 고려하여 다중 에너지 부준위 각각에 대하여 Pauli 배타 원리를 포함하는 MPEBTE를 유도하고 이를 Schrodinger 방정식, Poisson 방정식과 함께 결합하여 self-consistent한 수학적 모델 설정하고, 축퇴 상태를 고려한 양자 우물의 다중 에너지 부준위, 파동 함수, 양자 우물의 전위, 그리고 캐리어 에너지 분포 함수들을 직접적으로 구하는 수치 해석적인 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 파동 함수들 그리고 양자 우물의 전위를 구하였다. 그리고, 그 결과들을 MPEBTE에 적용하여 Newton-Raphson 반복법을 이용하여 각 에너지 부준위에 대한 새로운 에너지 분포 함수를 구하고 이를 다음 반복 실행 시 Schrodinger 방정식과 Poisson 방정식의 해를 구하는데 사용하였다. 이와 같은 과정을 Gummel의 block iteration method를 적용하여 MPEBTE, Schrodinger 방정식, 그리고 Poisson 방정식의 해가 소정의 오차 범위 내로 수렴할 때까지 반복하였다. 본 방법을 Si MOSFET의 반전 영역에 형성되는 양자 우물에 적용하였다. 시뮬레이션의 결과는 전체 전자 밀도가 높을수록 그리고 전기장의 세기가 낮을수록 Pauli 배타 원리를 적용한 경우가 그렇지 않은 경우에서 제시할 수 없는 전자의 페르미온적인 성질을 정확하게 나타낼 수 있어 양자 우물 소자의 여러 가지 특성들을 정확하게 구할 수 있음을 보여줌으로써 본 모델의 정당함을 제시하였다

다. 또한, 본 논문에 의한 해석 방법의 수렴 속도가 신속하고 수렴 상태가 안정적임을 보여 본 해석 방법의 효율성을 보여주었다.

## 부 록

식 (1)의 유도<sup>[18]</sup> :

양자 우물이 형성되는 방향인  $z$ 축 방향에 대한 Schrodinger 방정식은 양자 우물 전위  $\phi(z)$ 의 항으로 다음과 같다.

$$[T - e\phi(z) - \epsilon]\Psi = 0 \quad (A1)$$

여기서, kinetic-energy operator인  $T = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \omega_{i,j} p_i p_j$  이며,  $p_j = -i\hbar(\partial/\partial x_j)$ , 그리고  $\omega_{i,j}$ 는 reciprocal effective-mass tensor이다. 양자 우물의 전위는  $z$ 의 함수이므로 파동함수  $\Psi$ 는 아래의 식과 같이 표현될 수 있다.

$$\Psi(x, y, z) = \xi(z) \exp(ik_1 x + ik_2 y) \quad (A2)$$

식(A2)을 식 (A1)에 대입하면, 아래와 같이  $\xi(z)$ 에 대한 식을 얻을 수 있다.

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2} \omega_{33} \hbar^2 (d^2 \xi(z)/dz^2) \\ & - \hbar^2 (\omega_{13} k_1 + \omega_{23} k_2) (d\xi(z)/dz) \\ & - [e\phi(z) + \epsilon] \xi(z) = 0 \end{aligned} \quad (A3)$$

여기서, 식(A1)에서의  $\epsilon$ 은  $\epsilon$ 와  $k_1, k_2$ 의 함수로서 아래와 같다.

$$\begin{aligned} \epsilon(k_1, k_2) = & \epsilon + \frac{1}{\hbar^2} \\ & (\omega_{11} k_1^2 + 2\omega_{12} k_1 k_2 + \omega_{22} k_2^2) \end{aligned} \quad (A4)$$

식 (A3)에서  $d\xi(z)/dz$  항을 제거하기 위하여 다음의 식과 같이  $\xi(z)$ 을 설정하여 식 (A3)에 대입하면

$$\xi(z) = \psi(z) \exp[-iz(\omega_{13} k_1 + \omega_{23} k_2)/\omega_{33}] \quad (A5)$$

아래와 같은 식이 성립한다.

$$\frac{d^2 \psi(z)}{dz^2} + \left( \frac{2m_z}{\hbar^2} \right) [\epsilon'' + e\phi(z)] \psi(z) = 0 \quad (A6)$$

여기서,  $m_z = \omega_{33}^{-1}$ 이며 식(A1)에서의  $\epsilon$ 은  $\epsilon''$ 와  $k_1, k_2$

의 함수로서 아래와 같다.

$$\begin{aligned} \epsilon(k_1, k_2) = & \epsilon'' + \frac{1}{2} \hbar^2 \left[ \left( \omega_{11} - \frac{\omega_{13}^2}{\omega_{33}} \right) k_1^2 \right. \\ & + 2 \left( \omega_{12} - \frac{\omega_{13}\omega_{23}}{\omega_{33}} \right) k_1 k_2 \\ & \left. + \left( \omega_{22} - \frac{\omega_{23}^2}{\omega_{33}} \right) k_2^2 \right] \end{aligned} \quad (A7)$$

결과적으로 Schrodinger 방정식은  $z$ 의 함수로 표현되며,  $\epsilon''$ 은 에너지 수준위 레벨로서  $\epsilon$ 으로서 치환하면 (A6)은 식(1)이 된다.

### 참 고 문 헌

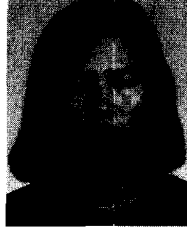
- [1] Thomas G. Pedersen, Kjeld Pedersen and Thomas B. Kristensen, "Optical second-harmonic generation as a probe of quantum well states in ultrathin Au and Ag films deposited on Si(111)", Thin Solid Films, vol. 364, 1-2 pp. 86-90, 2000.
- [2] YC Yeo, TC Chong, MF Li, WJ Fan, "Electronic band structures 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] L. R. Friedman, R. A. Soref, and J. B. Khurgin, "Linear and quadratic electrooptic effects in symmetric and asymmetric quantum well structures," IEEE, J. Quantum Electronics, Vol. 31, No. 2, pp 219-227, February 1995.
- [4] Hyuk J. Choi, E. Rotenberg, R. K. Kawakami, U. Bovensiepen, J. H. Wolfe, N. V. Smith, and Z. Q. Qiu, "Effect of interfacial roughness on the phase of quantum well states in Cu/Co(001) and Cu/Ni(001) systems", Phys. Rev. B 62, 6561 2000.
- [5] R. Tsu, "Silicon-based quantum wells", Nature, Vol. 364, 1 July 1993.
- [6] J.B. Wang and S. Midgley, "Quantum waveguide theory : a direct solution to the time-dependent Schrodinger equation", Phys. Rev. B 60, 13668, 1999.
- [7] I. Vurgaftman and J.R. Meyer, "High-temperature HgTe/CdTe multiple-quantum-well lasers", Optics Express, vol.2, no. 4, pp. 137-142, 1998.
- [8] A. Balandin, K. L. Wang, N. Kouklin and S. Bandyopadhyay, "Raman Spectroscopic Study of Inter-subband Transitions in Self Assembled CdS Quantum Dots", Appl. Phys. Lett., Vol. 76, p.137, 2000.
- [9] 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.
- [10] R. L. Liboff, Introduction to the Theory of Kinetic Equations. New York : John Wiley & Sons, 1969.
- [11] C. E. Korman and I. D. Mayergoz, "A Globally Convergent Algorithm for the Solution of the Steady-State Semiconductor Device", Journal of Applied Physics, vol. 68, no. 3, pp. 1324, 1990.
- [12] 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.
- [13] 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.
- [14] 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.
- [15] Blachman, N., "Mathematica : a Practical Approach", 2nd ed, Prentice Hall(Upper Saddle River, N.J), 1999.
- [16] E. M. Conwell, "High Field Transport in Semiconductors", Solid State Physics, Suppl. 9. Academic Press, New York, 1967.

- [17] B. N. Parlett, "The Symmetrical Eigenvalue Problem", Prentice Hall, 1980. Semiconductor Surface Inversion Layers in the Electric Quantum Limit", Physical Review, Vol. 163, p.816, 1967.
- [18] Frank Stern and W.E. Howard, "Properties of

---

 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 : 한림대학교 연구전임 재직중. <주관심분야> 나노 스케일 소자 모델링 및 시뮬레이션, 생체 신호 및 의용전자 소자 모델링