Journal of the Korean Institute of Electrical and Electronic Material Engineers. Vol.11, No.6, pp.423-427,1998

$Ga_{1-x}In_xAs$ 합금 반도체에서의 전자 이동도

논 문
11-6-1

The Electron Mobility in $Ga_{1-x}In_xAs$ Alloys

임행삼*, 심재훈*, 김능연**, 정재용**
(Haeng-Sam Im, Jae-Hoon Shim, Neung-Yeun Kim, Jae-Yong Jeong)

Abstract

In this paper the electron mobility in $Ga_{1-x}In_xAs$ alloy semiconductors is simulated by using the ensemble Monte Carlo method. The simulations for $Ga_{1-x}In_xAs$ with In mole fraction, doping concentration and temperature as parameters are performed. The electron mobility in $Ga_{1-x}In_xAs$ is improved as the In mole fraction increases. And we simulated the low-field mobility for alloys which perfectly orderd alloys without the alloy scattering mechanism are assumed, the results show that mobility in $Ga_{1-x}In_xAs$ is improved by 11%, 12% and 7% for 0.25, 0.53 and 0.75 In mole fractions, respectively. We reported the theoretical results of electron mobility in $Ga_{1-x}In_xAs$ alloys, so those will contribute to the research and development into materials for high-speed semiconductor devices.

Key Words(중요용어) : Ensemble Monte Carlo Method(앙상블 몬테카를로 방법), $Ga_{1-x}In_xAs$ Alloys ($Ga_{1-x}In_xAs$ 합금반도체), Electron Mobility(전자 이동도), Alloy Scattering Mechanism(합금산란 기구)

1. 서 론

MBE(Molecular Beam Epitaxy), MOCVD(Metal Organic Chemical Vapour Deposition)와 같은 반도체 제조 기술의 발전함에 따라 $Ga_{1-x}In_xAs$를 기반으로 한 이종구조에 필요한 얇은 다중층(multple thin layers)의 제조가 가능하게 되면서 물질 특성과 이를 이용한 소자에 대한 활발한 연구가 이루어졌다. 그 결과, 공명 투과(resonant tunnelling) 구조, 양자 우물(quantum well) 구조, 양자 선로(quantum wire) 구조, 양자 점(quantum dot) 구조들을 포함하여, 광다이오드, 이종구조 레이져, HEMT(High Electron Mobility Transistor), HBT(Heterojunction Bipolar Transistor) 등이 개발되었다.

* : 홍익대학교 부설과학기술연구소
** : 대유공업전문대학 전자과
(경기도 성남시 수정구 복정동 423, Fax: 02-720-2070
E-mail : jyongj@haksan.daeyoo.ac.kr)
1997년 12월 1일 접수, 1998년 4월 24일 심사완료

전자의 이동도(electron mobility)는 반도체 재료의 전자 수송 특성에 대한 중요한 척도이다. 그러나 고전계하에서의 이동도는 측정하기가 매우 어렵기 때문에 $Ga_{1-x}In_xAs$ 합금 반도체에 대한 고온 전자 수송(hot electron transport)과 같은 관련 자료들이 거의 드문 실정이다. 실험에서의 어려움은 종종 테스트 소자 구조상의 단자 효과(contact effect)와 기생 효과(parasitic effect)에 기인한다. 그럼에도 불구하고 얼마 안되는 측정 자료가 발표되었다[1]. 한편, Monte Carlo 방법[2-5]을 이용한 속도-전계 특성 곡선에 대한 이론적인 연구 결과[6,7]는 비교적 많이 발표되었다. 측정치와 이론치와의 비교를 통해 나타나는 약간의 불일치는 측정 표본의 도우핑 농도와 반송자 보상(carrier compensation)의 불확실성 뿐 아니라 모의실험에서 이용하는 반도체 재료의 파라미터 값의 불확실성에 기인한다. 이러한 불확실성들에도 불구하고 측정치와 이론치간의 실질적인 경향(trend)은 상당히 우수하며, 측정치와 이론치와의 비교로부터 추정된 파라미터를 가지고 Monte Carlo 모의실험을 실시할 경우 매우 좋은 결과를 얻을 수 있다.

Fischetti[8,9]는 $Ga_{1-x}In_xAs$를 포함하는 다이어몬드(diamond) 구조와 진크브랜드(zinc-blende) 구조에 대한 Monte Carlo 모의실험을 포괄적으로 다룬 연구 결과를 발표하였다.

본 연구에서는 앙상블 몬테카를로 방법을 이용하여 $Ga_{1-x}In_xAs$ 합금 반도체에서의 전자 이동도에 대하여 연구하였다. In 몰비율이 다른 GaAs, $Ga_{0.75}In_{0.25}As$, $Ga_{0.47}In_{0.53}As$, $Ga_{0.25}In_{0.75}As$, InAs 등에 대하여 도우핑 농도와 온도를 파라미터(parameter)로 하여 모의실험하였다. 본 연구에서는 합금 반도체의 전자 이동도에 대한 이론적인 결과를 제공하고 있다. 이 결과들은 차세대 초고속 반도체 소자의 재료 연구에 대한 기초 자료로 활용될 수 있으리라 생각된다.

2. 모의실험 모형

준고전적인 수송(semiclassical transport) 이론에서 초기 운동량 $\langle \hbar \mathbf{k} \rangle$인 전자가 한 단자(contact)에서 출발하여 반도체 내부를 경유하여 다른 단자로 나가는 입자로 볼 수 있다. 외부 인가 전압과 내부 공간 전하에 의한 거시적인 전위 $E_C(z)$의 효과는 Newton 운동식으로 표현할 수 있으며, 미시적인 전위 $U_S(\mathbf{r},t)$는 운동량의 순시적인 임의의 변동을 나타내는 것으로 양자역학적인 산란 과정으로 표현할 수 있다. 다음식은 준고전적인 관점에서의 전자 운동식을 표현한 것이다.

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E_k \qquad (1)$$

$$\frac{d}{dt}(\hbar \mathbf{k}) = -\nabla E_C + \sum_i \hbar \boldsymbol{\beta} \delta(t - t_i) \qquad (2)$$

여기서, E_k는 전자의 운동 에너지, $\hbar$는 Planck 상수, $\mathbf{k}$는 파수 벡터, $\boldsymbol{\beta}$와 t_i는 확률변수(random variable)이다. $\sum_i \hbar \boldsymbol{\beta} \delta(t-t_i)$에 대한 확률적인 힘을 결정하기 위한 확률변수 $\boldsymbol{\beta}$와 t_i에 대한 분포 함수가 주어진다.

에너지 밴드는 Γ, L, X인 세 계곡을 고려하고 각 계곡에서의 비포물형 밴드(nonparabolic band) 형태로 다음과 같다.

$$E_k(1+\alpha E_k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2 m_d^*} \qquad (3)$$

여기서, α는 비포물형 파라미터, k는 $\mathbf{k}$의 크기, m_d^*는 상태 밀도 유효 질량(density-of-state effective mass)이다. 이러한 에너지 밴드 구조에서의 전자의 속도 $\mathbf{v}(\mathbf{k})$는 다음과 같다.

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m_d^*(1+2\alpha E_k)} \qquad (4)$$

몬테카를로 입자의 운동은 충돌간의 자유 비행과 충돌에 의한 급격한 운동 상태의 변화로 구분된다. 전자의 자유 비행 시간(free flight time)과 충돌 후의 운동량의 변화는 확률적으로 묘사하여 난수(random number) 발생을 통해 값이 결정된다[2-5].

한편, 산란율(scattering rate) 계산에 필요한 $Ga_{1-x}In_xAs$의 In 몰 비율 x에 따른 파라미터 값들은 다음 식으로 부터 계산하였다[1,10,11].

$$T_{GaInAs}(x) = (1-x)B_{GaAs} + xB_{InAs} \qquad (5)$$

식(5)는 알려진 2원(binary) 화합물의 파라미터 값 B_{GaAs}와 B_{InAs}으로부터 3원(ternery) 화합물의 파라미터 값 T_{GaInAs}을 구하는 선형 내삽(interpolation) 방법으로 InAs의 조성 비율 x에 따라 $Ga_{1-x}In_xAs$의 파라미터 값이 결정된다. 유효 질량에 대한 내삽법은 Schrödinger 방정식에 의한 유효질량 변환식에 근거하여 다음과 같이 표현된다[10,11].

$$\frac{1}{m^*_{GaInAs}(x)} = \frac{1-x}{m^*_{GaAs}} + \frac{x}{m^*_{InAs}} \qquad (6)$$

본 연구에서는 합금(alloy)산란, 이온화된 불순물(ionized impurity) 산란, 음향 포논(acoustic phonon) 산란, 극성 광학 포논(polar optical phonon) 산란, 계곡간 포논(intervalley phonon) 산란 등을 고려하였다[2-4].

3. 결과 및 검토

본 연구에서 이루어진 앙상블 몬테카를로 모의실험 조건은 초기에 Γ계곡에서 볼츠만 분포를 갖는 1000 개의 전자들을 20ps 동안 초기 비행시켜 정

상상태에 충분히 도달한 후 다시 40ps 동안 모의실험하였다. 모의실험 결과들은 정상상태에서 비행한 결과를 평균하여 계산하였다. 모의실험에 이용한 산란 기구들의 파라미터 값들은 GaAs에 대한 표 1과 InAs에 대한 표 2에 나타내었으며, $Ga_{1-x}In_xAs$에 대한 값들은 식(5), 식(6)으로 부터 계산하였다. 합금산란에 필요한 파라미터인 합금산란전위(alloy scattering potential) 값은 In 몰비율 x에 무관한 0.529eV로 계산하였다[10,11].

그림 1과 2는 0.1kV/cm의 낮은 전계하에서 각각 도우핑 농도와 온도를 파라미터로 하여 In 몰비율에 따른 $Ga_{1-x}In_xAs$의 저전계 이동도를 계산하였다. In 몰비율이 증가함에 따라 이동도가 증가함을 알 수 있다. 이는 GaAs에서 InAs로 갈수록 $\Gamma-L$ 계곡간 에너지가 0.29eV에서 0.72eV로 증가하여 같은 전계하에서의 L 계곡 점유율이 감소하기 때문이다[12]. 온도 300K, 도우핑 농도 $1\times10^{16}\,cm^{-3}$인 경우, In 몰비율이 증가함에 따라 이동도가 최저 $1.14\times10^4\,cm^2/Vs$ (GaAs)에서 최대 $2.75\times10^4\,cm^2/Vs$ (InAs)의 값으로 계산되었다. 그림 1에서 도우핑 농도가 $1\times10^{14}\,cm^{-3}$에서 $1\times10^{18}\,cm^{-3}$으로 증가함에 따라 GaAs의 경우 $2.39\times10^4\,cm^2/Vs$에서 $2.30\times10^3\,cm^2/Vs$로, InAs의 경우 $6.47\times10^4\,cm^2/Vs$에서 $6.39\times10^3\,cm^2/Vs$로 각각 약 10배 정도 이동도의 감소를 보였다. 또한, 그림 2에서 온도가 77K에서 400K로 증가함에 따라 GaAs의 경우 $2.68\times10^4\,cm^2/Vs$에서 $1.01\times10^4\,cm^2/Vs$로, InAs의 경우 $5.67\times10^4\,cm^2/Vs$에서 $2.42\times10^4\,cm^2/Vs$로 각각 이동도가 감소하였다.

그림 3에서는 공정 기술상에서 합금 반도체 성장시 야기되는 원자들의 무질서한 분포로 인한 합금 산란을 무시할 수 있는 이상적인 합금 반도체를 가정하여 온도 300K, 도우핑 농도 $1\times10^{16}\,cm^{-3}$일 때의 이동도 상한치를 계산하여 합금 산란을 고려한 경우와 비교하였다. 이러한 계산 결과로 부터 $Ga_{0.75}In_{0.25}As$, $Ga_{0.47}In_{0.53}As$, $Ga_{0.25}In_{0.75}As$ 합금 반도체의 이동도가 반도체 성장 기술의 개선에 따라 각각 11%, 12%, 7%까지 향상될 수 있음을 알 수 있다. 이러한 In 몰비율에 따른 성능 향상은 전자의 총산란율에서 합금 산란율이 기여하는 정도에 따라 결정되는 것이다.

그림 4와 5는 온도 300K, 도우핑 농도

표 1. GaAs 파라미터[10,11]

Table 1. Parameters for GaAs[10,11]

Bulk Material Parameters	
Lattice Constant [10^{-8}cm]	5.653
Mass Density [g/cm^3]	5.318
Acoustic Deformation Potential [eV]	7.170
Sound Velocity [10^5cm/sec]	3.803
Longitudinal Optical Phonon Energy [eV]	0.0353
Low Frequency Dielectric Constant	13.18
High Frequency Dielectric Constant	10.89

Valley Dependent Parameters				
		Γ_Valley	L_Valley	X_Valley
Energy Gaps [eV]		1.420	1.710	1.910
Effective Mass Ratio		0.067	0.560	0.850
Number of Equivalent Valley		1	4	3
Intervalley Deformation Potential [10^9eV/cm]	Γ_Valley	...	1.0	1.0
	L_Valley	1.0	1.0	0.9
	X_Valley	1.0	0.9	0.9
Intervalley Phonon Energy [eV]	Γ_Valley	...	0.0300	0.0299
	L_Valley	0.0300	0.0290	0.0293
	X_Valley	0.0299	0.0293	0.0299

표 2. InAs 파라미터[10,11]

Table 2. Parameters for InAs[10,11]

Bulk Material Parameters	
Lattice Constant [10^{-8}cm]	6.058
Mass Density [g/cm^3]	5.668
Acoustic Deformation Potential [eV]	5.080
Sound Velocity [10^5cm/sec]	3.037
Longitudinal Optical Phonon Energy [eV]	0.0299
Low Frequency Dielectric Constant	14.60
High Frequency Dielectric Constant	12.25

Valley Dependent Parameters				
		Γ_Valley	L_Valley	X_Valley
Energy Gaps [eV]		0.350	1.070	1.370
Effective Mass Ratio		0.032	0.286	0.640
Number of Equivalent Valley		1	4	3
Intervalley Deformation Potential [10^9eV/cm]	Γ_Valley	...	1.0	1.0
	L_Valley	1.0	1.0	0.9
	X_Valley	1.0	0.9	0.9
Intervalley Phonon Energy [eV]	Γ_Valley	...	0.0300	0.0299
	L_Valley	0.0300	0.0290	0.0293
	X_Valley	0.0299	0.0293	0.0299

$1\times10^{16}\,cm^{-3}$일때의 전자 이동도와 표동 속도(drift velocity)를 전계의 함수로 각각 나타내었다. 전계가 증가할수록 이동도가 급격히 감소하는 것으로 확인되었다. 또한, 표동 속도-전계 특성으로 부터 In 몰

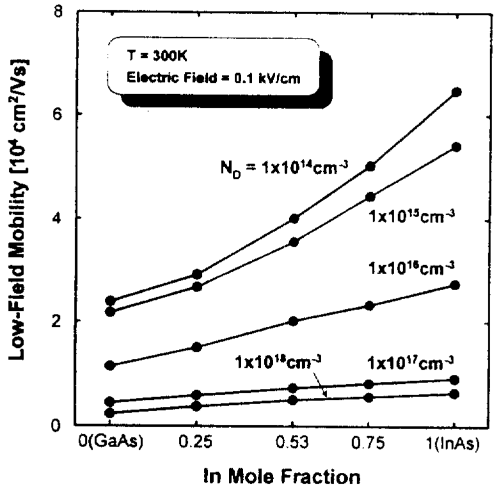

그림 1. $Ga_{1-x}In_xAs$에서의 도우핑 농도를 파라미터로 한 In 몰비율에 따른 전자 이동도

Fig. 1. Low-field electron mobility as a function of In mole fraction for $Ga_{1-x}In_xAs$ with doping concentration as a parameter.

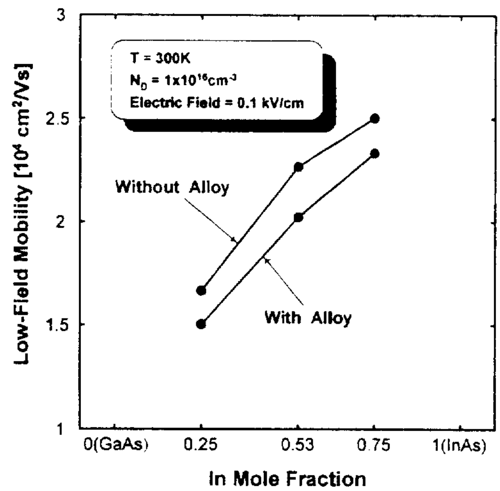

그림 3. 합금 산란이 없는 완벽 정렬된 합금반도체 $Ga_{1-x}In_xAs$에서의 전자 이동도

Fig. 3. Low-field electron mobility in $Ga_{1-x}In_xAs$ which a perfectly ordered alloy without alloy scattering is assumed.

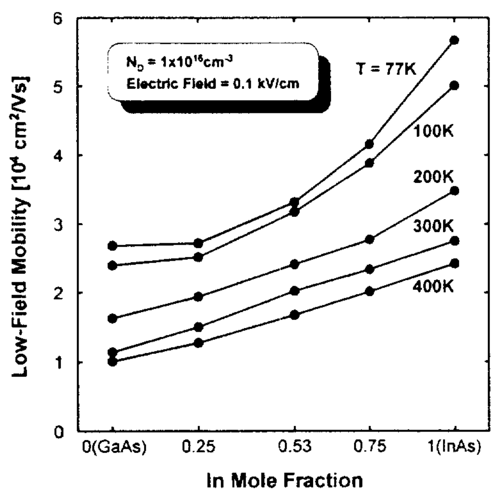

그림 2. $Ga_{1-x}In_xAs$에서의 온도를 파라미터로 한 In 몰비율에 따른 전자 이동도

Fig. 2. Low-field electron mobility as a function of In mole fraction for $Ga_{1-x}In_xAs$ with temperature as a parameter.

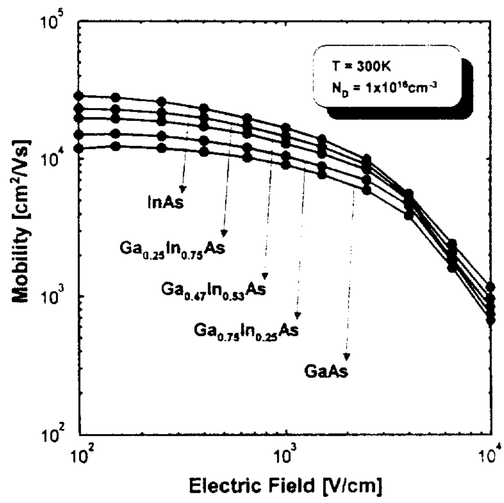

그림 4. $Ga_{1-x}In_xAs$에서의 전자 이동도-전계 특성

Fig. 4. Electron mobility-electric field characteristics for $Ga_{1-x}In_xAs$

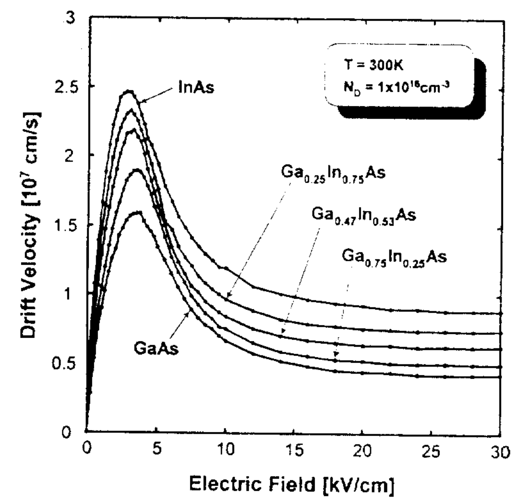

그림 5. $Ga_{1-x}In_xAs$에서의 전자 표동 속도-전계 특성

Fig. 5. Electron drift velocity-electric field characteristics for $Ga_{1-x}In_xAs$

비율이 증가함에 따라 최대 속도(peak velocity)와 포화속도(saturation velocity)가 증가함을 알 수 있다.

4. 결 론

본 연구에서는 앙상블 몬테카를로 방법을 이용하여 $Ga_{1-x}In_xAs$ 합금 반도체의 이동도에 대하여 연구하였다. In 몰비율 x = 0 (GaAs), x = 0.25, x = 0.53, x = 0.75, x = 1 (InAs)인 경우에 대하여 도우핑 농도와 온도를 파라미터로 하여 모의 실험하였다. 0.1kV/cm 의 낮은 전계하에서 온도 300K, 도우핑 농도 $1\times10^{16}cm^{-3}$ 인 경우, In 몰비율이 증가함에 따라 이동도가 최저 $1.14\times10^4 cm^2/Vs$ (GaAs)에서 최대 $2.75\times10^4 cm^2/Vs$ (InAs)의 값으로 계산되었다. 또한, 합금 산란이 없는 경우와 합금 산란이 있는 경우를 비교 계산 결과로 부터 $Ga_{0.75}In_{0.25}As$, $Ga_{0.47}In_{0.53}As$, $Ga_{0.25}In_{0.75}As$ 합금 반도체의 이동도가 반도체 성장 기술의 개선에 따라 각각 11%, 12%, 7% 까지 향상될 수 있음을 확인하였다. 본 연구에서의 합금 반도체의 전자 이동도에 대한 이론적인 계산 결과들은 차세대 초고속 반도체 소자의 재료 연구에 대한 기초 자료로 활용될 수 있으리라 생각된다.

참 고 문 헌

1. P. Bhattacharya, ed., *Properties of Lattice-Matched and Strained Indium Gallium Arsenide*, INSPEC, London, 1993.
2. C. Jacoboni and P. Lugli, *The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation*, Springer-Verlag, Wien, NY, 1989.
3. K. Tomizawa, *Numerical Simulation of Submicron Semiconductor Devices*, Artech House, Boston, 1993.
4. C. Moglestue, *Monte Carlo Simulation of Semiconductor Devices*, Chapman & Hall, London, 1993.
5. R. W. Hockney and J. W. Eastwood, *Computer Simulation Using Particles*, McGraw-Hill, New York, 1981.
6. T. J. Maloney and J. Frey, "Transient and steady-state electron transport properties of GaAs and InP", J. Appl. Phys., vol. 48, pp. 781-787, 1977.
7. M. V. Fischetti and S. E. Laux, "Monte Carlo analysis of electron transport in small semiconductor devices including band-structure and space-charge effects", Phys. Rev. B, vol. 38, no. 14, pp. 9721- 9745, 1988.
8. M. V. Fischetti, "Monte Carlo simulation of transport in technologically significant semiconductors of the diamond and zincblende structures-Part I : Homoguneous transport", IEEE Trans, Electron Devices, vol. 38, no. 3, pp. 634-649, 1991.
9. M. V. Fischetti and S. E. Laux, "Monte Carlo simulation of transport in techmologically significant semiconductors of the diamond and zinc-blende structures-Part II : Submicrometer MOSFET's", IEEE Trans. Electron Devices, vol, 38, no. 3, pp. 650-660, 1991.
10. S. Adachi, Physical Properties of III-V Semiconductor Compounds : InP, InAs, GaAs, GaP, InGaAs, and InGaAsP, Wiley-Interscience, New York, 1992.
11. S. Adachi, GaAs and Related Materials : Bulk Semiconducting and Superlattice Properties, World Scietific, Singapore, 1992.
12. 임행삼, 심재훈, 김영호, 정재용, 김재인, "몬테카를로 방법을 이용한 GaInAs 합금반도체에서의 과도 전자 수송 특성", 대한전자공학회 전자공학교육논문지, 제11권 1호, pp.79-85, 1997.