

다중척도모의에 의한 ZnO체적재료의 전자이동도특성연구

김경일, 홍성남, 유철준

위대한 령도자 김정일동지께서는 다음과 같이 교시하시였다.

《과학과 기술이 매우 빨리 발전하고있는 오늘의 현실은 기초과학을 발전시킬것을 더욱 절실하게 요구하고있습니다.》(《김정일선집》 증보판 제11권 138페이지)

우리는 제1원리적방법으로 ZnO의 금지띠너비와 유전률과 같은 물성값들을 결정하고 그것들을 MC모의의 입력자료로 리용하여 전기마당세기와 나르개농도에 따르는 ZnO의 전자이동도변화특성을 연구하였다.

1. 제1원리적방법에 의한 물성계산

이 논문에서는 밀도범함수리론(DFT)의 여러가지 계산방법들을 리용하여 ZnO체적재료의 물성값들을 결정하였다.

우선 우리는 제1원리노름보존의포텐셜평면파프로그램인 ABINIT7.2에서 BFGS구조최적화방법을 적용하여 ZnO결정의 최적살창파라미터들을 계산하였다.

ZnO결정은 보통 섬유아연광구조로서 공간군은 $P6_3mc$ 이며 단위포에는 2개의 ZnO분자가 있다. 구조최적화를 통하여 결정하여야 할 살창파라미터는 살창상수 a 와 c 그리고 원자위치파라미터 x 이다. 의포텐셜로는 TM형유연노름보존의포텐셜을 리용하였으며 PBE형일반화된 그라디언트근사(GGA)의 교환-상관범함수를 적용하였다. 이때 평면파절단에네르기는 40Ha이며 브릴류앙구역적분을 위한 k -점들은 $(6 \times 6 \times 4)$ 몽크호스트-팩크특수점들을 리용하였다.[2] 구조최적화로부터 결정된 살창파라미터들은 각각 $a=3.293$, $c=5.305$, $x=0.377$ 로서 실험값 $a=3.250$, $c=5.209$, $x=0.380$ 과 잘 일치한다. 최적화된 살창상수들을 통하여 결정된 밀도값은 5.424g/cm^3 이다.

다음 전자에네르기띠구조를 계산하였다. ZnO를 구성하는 Zn은 값전자로서 3d파도전자들을 포함하며 이 전자들이 O의 2p전자들과 강한 호상작용을 하므로 일반적으로 제1원리전자구조계산에 의하여 정확한 금지띠너비를 얻는것이 아주 어렵다.

우리는 최근에 개발된 강상관전자구조계산방법인 GGA+DMFT(동력학적평균마당리론과 밀도범함수리론을 결합 [3])방법과 GW방법들을 적용하여 에네르기띠구조와 포논분산곡선을 비교적 실험과 일치하게 계산하였다.(그림 1, 2)

계산된 금지띠너비 E_g 와 유효질량 m^* 을 통하여 Γ 점근방에서 에네르기띠의 비포물선성파라미터를 다음과 같이 계산할수 있다.

$$\alpha_i = \frac{1}{E_g} \left(1 - \frac{2m^*}{m_e} \right) \left[1 - \frac{E_g \Delta_i}{3(E_g + \Delta_i)(E_g + 2\Delta_i/3)} \right]$$

여기서 Δ_i 는 Γ 점에서 전도띠의 바닥과 i 번째 골짜기바닥사이의 에네르기차이다.

에네르기띠구조와 포논분산곡선으로부터 ZnO의 물성값들을 계산하였으며 그 결과는 표와 같다.

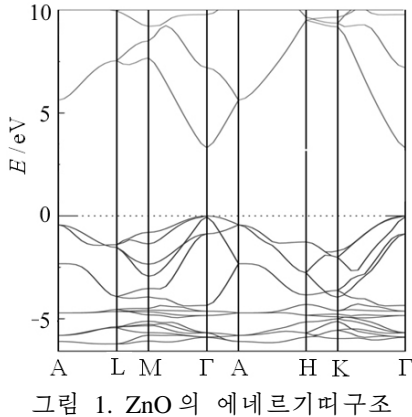


그림 1. ZnO의 에네르기띠구조

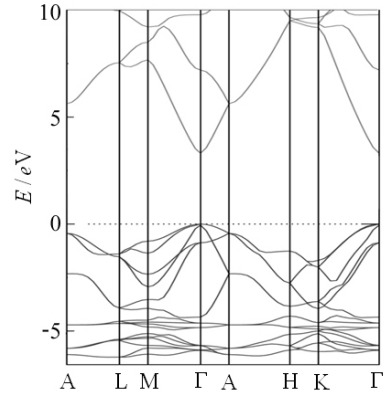


그림 2. ZnO의 포논분산곡선

실선-음향학적가지, 점선-광학적가지

표. ZnO의 물성상수값

계산된 에네르기띠구조로부터 Γ , U, K골짜기들에서 금지띠너비는 각각 3.4(실험값 3.44), 7.8, 8.2eV이라는것을 알 수 있다.

그리고 이 골짜기들에서 계산한 전도띠의 전도전자의 유효질량값들은 각각 0.17, 0.42, 0.70이며 비포물선성파라메터값은 0.66, 0.15, 0.0이었다.

지표	값
재료	ZnO
살창상수/nm	$a=b=0.329\ 3, c=0.530\ 5$
밀도/($g \cdot cm^{-3}$)	5.424
소리속도/($m \cdot s^{-1}$)	6 870
유전상수(저주파)	7.4
유전상수(고주파)	3.68
극성광학포논에네르기/meV	72.8
음향변형포텐셜/eV	3.8

2. MC모의에 의한 전자이동도계산

반도체재료에서 전자와 구멍들은 전기마당에 의하여 가속되지만 산란과정에 운동량을 잃는다. 일반적으로 산란은 살창진동(포논), 혼입물이온, 다른 나르개와의 충돌이나 결면 혹은 다른 재료와의 계면들에 의하여 일어나며 이 모든 미시적효과들이 수송방정식에 도입된 거시적인 운동량에 포함되기때문에 전자이동도는 전기마당, 살창온도, 혼입물첨가농도 등의 함수로 된다.

MC모의는 운동량공간에서 전기나르개의 운동을 추적하는 방법으로서 전자이동도결정에 효율적인 한가지 방법으로 된다. 전기나르개들은 에네르기띠구조로부터 결정되는 유효질량을 가지고 양자력학적효과를 반영한 산란확률에 따라 표류와 산란을 하는 반고전적인 입자로 취급되며 이때 자유비행시간, 산란물림새, 산란후의 상태 등이 우연수에 의하여 결정된다. MC모의에서는 설정된 마당과 첨가농도, 온도에서 평형상태에 있는 전자들의 집단을 발생시키며 이 전자들에 대한 초기조건을 설정하고 시간에 따라 그것을 변화시킨다. 이때 전자들은 마당에 의하여 가속되고 결정에서의 섭동들중의 하나에 의하여 다른 상태로 우

연적으로 산란된다. 이 과정은 전기나르개분포가 정상상태(물리적 특성의 평균이 결정될수 있는 점)에 도달할 때까지 진행된다.[1]

산란에는 골짜기내부와 골짜기사이 산란, 포논산란, 변형포텐살음향포논산란, 변형포텐살광학포논산란, 극성광학포논산란, 골짜기사이 포논산란, 혼입물산란, 이온화된 혼입물산란, 중성 혼입물산란이 있다.

우리의 MC모의에서는 재료의 특성을 반영하여 골짜기사이든 골짜기내부든 임의의 산란물림새들중의 일부를 선택한다.[4]

ZnO체적재료의 전하이동도특성을 밝히기 위해 TCAD의 MOCASIM을 리용하여 MC모의를 진행하였으며 모의에 리용하는 ZnO체적재료파라미터들은 제1원리적방법으로 계산한 물성파라미터값들을 그대로 리용하였다.

ZnO는 섬유아연광구조로 이루어져있으므로 우리는 골짜기사이 산란을 고려할 때 금지띠에너지가 제일 낮은 3개의 골짜기들을 선택하였다.

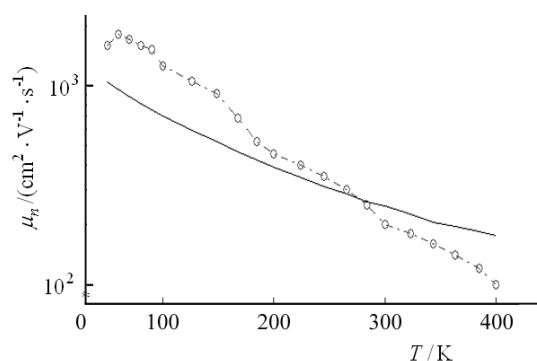


그림 3. 실험결과(점선)와 모의결과(실선)

우선 첨가농도가 10^{16} 개/cm³, 전기마당의 세기가 10kV/cm일 때 온도에 따르는 이동도변화를 계산한 결과는 방온도군방에서 선행연구결과[5]와 비교적 잘 일치하였다.(그림 3)

다음 $T=300$ K의 ZnO에 대하여 첨가농도를 $10^{14} \sim 10^{20}$ 개/cm³에서 변화시키면서 이동도변화를 계산하면 그림 4와 같다.

또한 전기마당의 세기를 10kV/cm부터 300kV/cm까지 변화시키면서 MC모의를 진행한 결과는 그림 5와 같다.

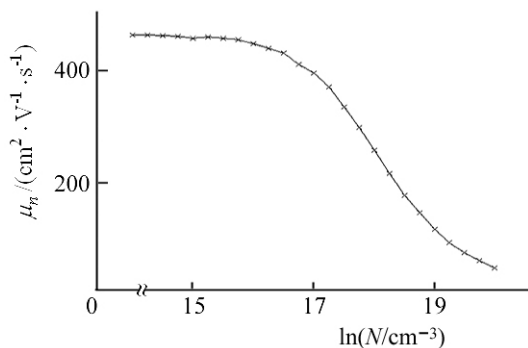


그림 4. 첨가농도에 따르는 이동도변화

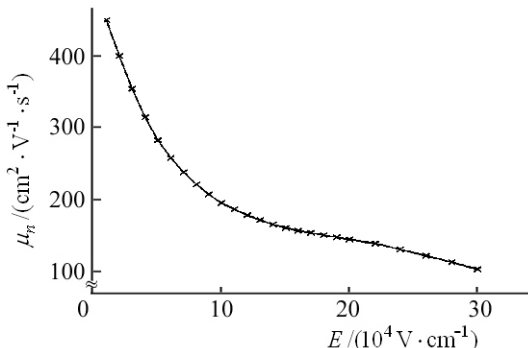


그림 5. E에 따르는 이동도변화

맺 는 말

1) 제1원리적방법으로 ZnO의 물성값들을 결정하고 그것들을 리용하여 ZnO체적재료에서 첨가농도와 전기마당의 세기에 따르는 전하이동도변화를 얻었다.

2) 첨가농도가 10^{16} 개/cm³, 전기마당의 세기가 10kV/cm일 때 모의결과값과 실험값은 방온도군방에서 비교적 잘 일치한다.

참 고 문 헌

- [1] 박호남 등; 반도체기술컴퓨터지원체계 4, 김일성종합대학출판사, 140~158, 주체100(2011).
- [2] X. Gonze et al.; Computer Phys. Comm., 180, 2582, 2009.
- [3] G. Kotliar et al.; Rev. Mod. Phys., 78, 865, 2006.
- [4] M. Farahmand et al.; IEEE Transactions on Electron Devices, 48, 3, 535, 2001.
- [5] A. Mokhles Gerami et al.; Adv. in Nat. Appl. Sci., 3, 3, 357, 2009.

주체103(2014)년 11월 3일 원고접수

On the Electron Mobility in Bulk ZnO using Multi-Scale Simulation

Kim Kyong Il, Hong Song Nam and Yu Chol Jun

We have determined the material parameters of ZnO using first-principle method and by using them we have studied electron mobility change characteristics according to the impurity concentration and electric field in bulk ZnO.

When the impurity concentration is $10^{16}/\text{cm}^3$ and the electric field is 10kV/cm, calculation data agree with experiment data at room temperature.

Key words: ZnO, multi-scale simulation, electron mobility