

수치해석법에 의한 n-AlGaAs/GaAs 이종접합에서의 전자밀도와 전자상태 계산

(Calculation of Electron Density and Electronic States in n-AlGaAs/GaAs Heterointerface)

高 在 弘*, 金 忠 源*, 朴 成 鎬*, 韓 白 亨*

(Jae Hong Kho, Choong Won Kim, Seong Ho Park and Baik Hyung Han)

要 約

n-AlGaAs/GaAs 계면에서의 2차원 전자가스(2DEG)의 밀도와 전자상태를 각각 고전역학적인 방법과 양자역학적인 방법으로 계산하였다. Spacer 두께와 AlGaAs 층의 도핑농도가 2DEG 밀도에 주는 영향과 온도와 GaAs 층의 불순물 농도가 전자상태에 미치는 영향을 조사하였다.

Abstract

The electron density and electronic states in n-AlGaAs/GaAs heterointerface are calculated by using classical- and quantum- mechanics, respectively. We examine the effects of spacer layer thickness and doping concentration in AlGaAs layer on 2DEG density. Also, the dependences of electronic states of 2DEG upon temperature and acceptor concentration in GaAs layer are investigated.

I. 서 론

고속소자로 주목을 끌고 있는 MODFET(modulation-doped field effect transistor)는 donor와 전자를 Bohr 반경이상으로 분리할 수 있다는 것에 기초한 것으로 이 개념을 변조도핑이라 한다. 예를 들면, 강하게 도핑시킨 AlGaAs와 도핑시키지 않은 GaAs를 접합시키면 계면에 불연속이 생기고 계면가까운 GaAs쪽에 좁은 전위우물이 형성된다. 이 곳에 AlGaAs 층에서 확산되어 온 전자들이 갇히게 된다. 이렇게 되면 donor와 전자가 분리되어 이온화 불순물산란을

받지않으므로 전자는 높은 이동도를 갖는다. 도핑시킨 AlGaAs와 GaAs 사이에 도핑시키지 않은 AlGaAs 층(spacer)을 만들어 주면 전자와 donor의 파동함수가 겹치지 않게 되므로 더욱 높은 이동도를 얻을 수 있다. 그러나 spacer가 두꺼우면 이동도는 높아지나 2DEG 밀도가 감소하기 때문에 두께를 적절히 선택하여야 한다.

위와 같은 변조도핑개념은 1960년에 Esaki와 Tsu^[1]에 의해 제시되었으며, 1978년에 Dingle 등^[2]이 소자에 적용하였다. 이후로 실험적, 이론적 연구가 많이 이루어졌다.^{[3],[4]} T. Ando^[5]는 변분법을 써서 기저 상태 에너지와 파동 함수를 계산하였고, Vinter^[6]는 AlGaAs와 GaAs 두 영역에서 Schrodinger 방정식을 풀어 게이트 전압에 대한 에너지준위의 변화를 조사

*正會員, 漢陽大學校 電子工學科
(Dept. of Elec. Eng., Hanyang Univ.)
接受日字: 1988年 1月 6日

하였다. 또한, Yoshida^[7]는 n-AlGaAs/GaAs에서의 2DEG 밀도를 고전역학적 방법과 양자역학적 방법으로 계산하여 소자의 모델링에 Femi-Dirac 통계를 적용할 수 있음을 밝혔으나 spacer의 두께와 AlGaAs의 도핑농도를 고려치 않았다. 본 논문에서는 고전역학적 방법으로 spacer 두께와 AlGaAs의 도핑농도가 2DEG 밀도에 미치는 영향을 조사한다. 그리고 self-consistent method로 2DEG의 전자상태를 계산하여 GaAs의 불순물농도와 온도가 에너지준위, Fermi 에너지와 전자점유율에 주는 효과를 살펴 보고자 한다.

II. 2DEG 밀도 계산

n-AlGaAs/GaAs 이종접합에 전압을 인가하면 그림 1처럼 GaAs 층에 전위우물이 형성된다. 정전전위 $\phi(x) = -E_c(x)/q$ 와 전하밀도 $\rho(x)$ 의 관계는 다음 식으로 주어지는 Poisson 방정식으로부터 얻을 수 있다.

$$\frac{d}{dx} \left(\epsilon(x) \frac{d\phi(x)}{dx} \right) = -\rho(x) \quad (1)$$

여기에서 $\epsilon(x)$ 는 거리에 따른 유전율이다. $\rho(x)$ 는 이온화 불순물농도, 전자 및 정공밀도에 의해 다음처럼 결정된다.

$$\rho(x) = q \{ p(x) - n(x) + Nd^+(x) - Na^-(x) \} \quad (2)$$

여기에서, p, n은 각각 정공과 전자농도이고, Nd^+ 와 Na^- 는 각각 이온화된 donor와 acceptor 농도이다. 이 때 전자농도 $n(x)$ 은 Boltzmann 통계 또는 Fermi-Dirac 통계로부터 구할 수 있다. Boltzmann 통계를 따르면 $n(x)$ 은 (3)식으로 주어진다.

$$n(x) = N_c \exp \{ (E_F - E_c(x)) / kT \} \quad (3)$$

여기에서 N_c 는 전도대의 유효상태밀도이고 E_F 는 Fermi 에너지, k는 Boltzmann 상수, T는 절대온도이다.

한편, Fermi-Dirac 통계에 의한 전자농도 $n(x)$ 은

$$n(x) = N_c F_{1/2} \{ (E_F - E_c(x)) / kT \} \quad (4)$$

로, $F_{1/2}$ 은 다음 식으로 주어지는 1/2 order Fermi integral이다.^[8]

$$F_{1/2}(z) = \Gamma \left(\frac{1}{2} \right) \int_0^\infty \frac{y^{1/2} dy}{1 + \exp(y-z)} \quad (5)$$

이온화된 donor 밀도 N_d^+ 는

$$N_d^+ = N_d \left[1 - \frac{1}{1 + \frac{1}{2} \exp \{ (E_d - E_F) / kT \}} \right] \quad (6)$$

로 주어진다. E_d 는 donor level 이고 N_d 는 donor 농도이다. (4)나 (6)으로부터 $n(x)$ 를 구하면 2DEG 밀도, n_s 는 다음 식으로부터 구한다.

$$n_s = \int_0^\infty n(x) dx \quad (7)$$

III. Self-Consistent Method에 의한 전자상태 계산

2DEG 밀도를 입력으로하여 GaAs 영역에서만 Schrödinger 방정식과 Poisson 방정식을 self-consistent 하게 푼다. n_s 가 주어지면 계면에서의 전계를 구할 수 있기 때문에 AlGaAs 영역에서 Poisson 방정식을 풀지 않고도 2DEG의 전자상태를 계산할 수 있다. i 번째 subband에 있는 전자의 envelope function $F_i(x)$ 에 대한 Schrödinger 방정식은^[9]

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] F_i(x) = E_i F_i(x) \quad (8)$$

여기에서, m^* 은 전자의 유효질량, E_i 는 i 번째 subband의 밑바닥 에너지, $V(x)$ 는 effective potential energy이다. 그림 1에서 추측할 수 있듯이 AlGaAs로의 $F_i(x)$ 의 침투는 매우 작다. $V(x)$ 는 (9)식으로 주어진다.

$$V(x) = -e\phi(x) + V_h(x) + V_{ex}(x) \quad (9)$$

여기에서, $\phi(x)$ 는 정전 potential energy, $V_h(x)$ 는 진도대불연속과 관련된 effective potential energy이고, $V_{ex}(x)$ 는 local exchange potential energy이다. 본 논문에서는 Hedin과 Lundqvist^[10]가 제안한 간단한 해석적 모델을 사용하였다.

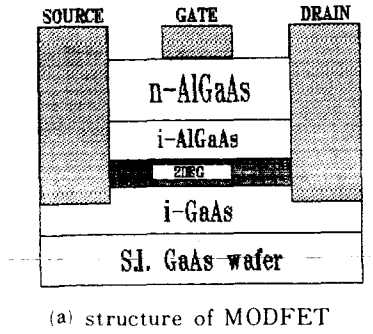
Schrödinger 방정식으로부터 envelope function $F_i(x)$ 가 구하여지면 전자의 농도는

$$n(x) = \sum_i N_i F_i^2(x) \quad (10)$$

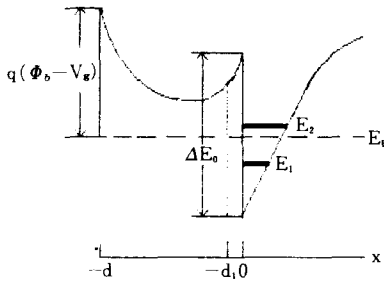
$$N_i = \frac{m^*kT}{\pi\hbar^2} \ln[1 + \exp \{ (E_F - E_i) / kT \}] \quad (11)$$

N_i 는 i 번째 subband에 점유된 단면 면적당 전자의 농도이다.

(8)식으로 주어지는 Schrödinger 방정식과 (1)식에 표현된 Poisson 방정식을 수렴해가 얻을 때까지 반복하여 푼다. Schrödinger 방정식은 Numerov integration scheme^[11]을 써서 풀었고, Poisson 방정식의 해는 통상적인 finite difference method로 구하였다. E_i 의 초기치는 triangular potential approximation으로 얻은 값을 사용하였으며, 초기 potential은 변분



(a) structure of MODFET



(b) energy band

그림 1. MODFET의 구조와 에너지밴드 다이어그램
Fig. 1. Structure and energy band diagram of MODFET.

법으로 구하였다. 반복에 따른 potential energy의 개선은 아래와 같이 하였다.

$$V^{m+1}(x) = (1-p)V^m(x) + pV^m(x) \quad (12)$$

여기에서, m은 반복횟수를 의미한다. p는 correction factor로써 $0 < p < 1$ 이다. $p \cong 1$ 이면 수렴은 빠르나 어떤 경우에는 발산한다. $p \cong 0$ 이면 안정도가 높으나 수렴속도가 매우 느리다.

IV. 계산결과 및 고찰

계산에서 사용한 물리상수를 표 1에 나타냈다. ternary AlGaAs의 Al몰분율은 0.3이고 전도대 불연속은 $0.85\Delta E_g$ 이라 가정했다. ΔE_g 는 AlGaAs와 GaAs의 band gap 차이다. $E_d = 32.4 \text{ meV}$ 로 놓았고, 전 영역에서 정공농도를 무시하였다. 또, 계면에 수직인 방향으로의 전류가 거의 흐르지 않으므로 $E_F = \text{constant}$ 라 가정하였다.

그림 2에 2DEG 밀도의 undoped AlGaAs (spacer) 두께 의존성을 나타냈다. AlGaAs 층의 도핑농도는 $3.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 이고, GaAs 층의 acceptor 농도는 $1.0 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ 이다. 두 통계로 구한 ns 값은 두께에 따

표 1. 계산에 사용한 물리상수¹⁷⁾

Table 1. The physical parameters used for calculation.

물리상수	GaAs	AlGaAs
Band gap(eV)	1.425	1.814
Electron effective mass	0.067mo	0.0917mo
Conduction band density of state(cm^{-3})	4.35×10^{17}	6.998×10^{17}
Valence band density of state(cm^{-3})	9.313×10^{18}	9.985×10^{18}
Relative dielectric constant	12.9	12.0

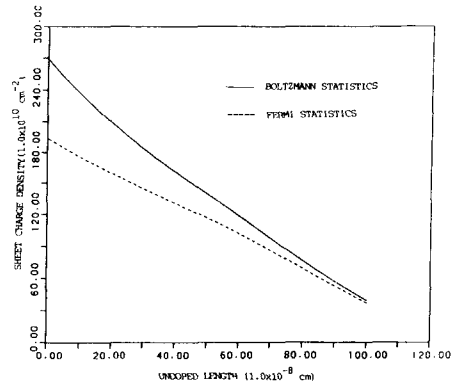


그림 2. Undoped length에 따른 2DEG 밀도의 변화
Fig. 2. The variation of 2DEG density with undoped length.

라 선형적으로 감소한다. spacer 두께가 얇은 부분에서는 Boltzmann 통계로 구한 값이 Fermi-Dirac 통계로 계산한 값보다 컸다. 사용한 통계에 따라 차이가 생기는 것은 donor level에 의한 불순물의 이온화를 고려하느냐 하지않느냐에 기인한다고 생각한다. spacer가 두꺼워지면 두 통계로 구한 값은 서로 일치한다. spacer가 얇으면 ns가 높아져 전류구동력은 좋아지거나 불순물산란이 커지므로 이동도는 감소한다. 그러므로 spacer 두께를 적절히 하여야 한다. Spacer가 없을 때, AlGaAs의 도핑농도가 ns에 미치는 영향을 그림 3에 보였다. 사용한 통계에 따라 값이 크게 달라짐을 볼 수 있다. Boltzmann 통계를 쓴 경우에는 ns는 도핑농도가 증가함에 따라 계속 증가하지만 Fermi-Dirac 통계를 사용하면 $3.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 의 도핑농도에서는 포화된다. 이것은 도핑농도가 증가하더라도 어느 값 이상이되면 불순물이

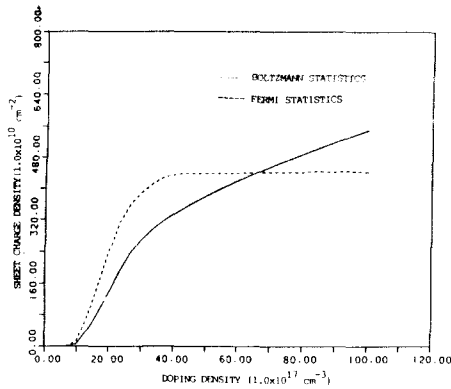


그림 3. AlGaAs 층의 도핑농도에 따른 2DEG 밀도의 변화

Fig. 3. The variation of 2DEG density with doping density in AlGaAs layer.

이온화되지 않기 때문이다. 그림 2 와 3 의 결과는 ungated structure 에 대한 것이다.

그림 4 는 gate 전압에 대한 ns 의 변화를 보여 준다. 이 경우에는 AlGaAs 층의 도핑농도는 $3.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 이고, GaAs 의 acceptor 농도는 $1.0 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ 이며, spacer 두께가 zero 일 때이다. -0.5V 이하의 gate 전압에서는 두 모델이 잘 일치하나, 그 이상에서는 매우 큰 차이가 있음을 볼 수 있다. 이러한 차이는 AlGaAs 층의 불순물이 완전히 이온화된다고 가정하느냐 아니냐에 기인한다. -0.3V 이상의 gate 전압에서, Fermi-Dirac 통계를 사용한 경우 ns 는 포화되나, Boltzmann 통계를 쓰면 크게 증가함을 알 수 있다.

Acceptor 농도가 $N_a = 1.0 \times 10^{14}$ 과 $1.0 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ 인 경우에 대하여 77K 와 300K 에서 전자상태를 계산

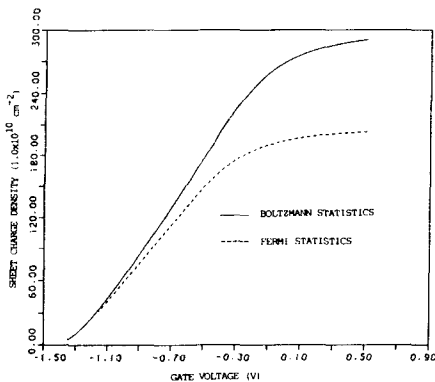


그림 4. Gate 전압에 대한 2DEG 밀도 변화
Fig. 4. 2DEG density versus gate voltage.

하였다. 그림 5 에 $N_a = 1.0 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, $T = 77\text{K}$ 에서 에너지 준위와 Fermi 에너지를 2DEG 밀도의 함수로 나타냈다. E_1 과 E_2 의 에너지차 E_{21} 은 ns 가 증가함에 따라 커지나 E_{32} 는 거의 변하지 않는다. Fermi 에너지는 $ns = 2.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 에서 교차한 후 계속 증가한다. 그림 6 은 그림 5 와 같은 온도에서 acceptor 농도를 $N_a = 1.0 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ 로 증가시켰을 때의 에너지 준위와 Fermi 에너지의 변화이다. 그림 5 와 비교하여 보면 에너지준위와 Fermi 에너지는 증가하고, 에너지준위 간의 차도 커졌음을 알 수 있다. 그러나 그림 5 에서는 E_{21} 과 E_{32} 이 ns 에 따라 증가하지만 그림 6 의 경우에는 변화가 거의 없다. 이것은 ns 가 potential 에 기여하는 바가 $N_a = 1.0 \times 10^{14}$ 에 비하여 $N_a = 1.0 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ 인 경우에는 적기 때문이다.

77K 에서 $N_a = 1.0 \times 10^{14}$ 과 $1.0 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ 일 때의 전자 점유율을 그림 7 에 보였다. $N_a = 1.0 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ 에 대해서는 ns 의 전범위에 걸쳐 90% 이상의 전자가 E_1 에 점유되고, 큰 ns 에서는 E_1 의 점유율이 조금 감소한다. $N_a = 1.0 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ 인 경우에는 ns 가 작은 부분에서는 ns 에 따라 E_1 과 E_2 의 전자점유율이 크게 변함을 알 수 있다. Si/SiO₂ 계면에서와 마찬가지로 ns 가 증가함에 따라 양자효과가 커짐을 알 수 있다. 위의 검토로부터 전자상태는 GaAs 의 acceptor 농도에 민감함을 볼 수 있었다.

전자상태의 온도 의존성을 알아 보기 위하여 그림 8 과 9 에 $N_a = 1.0 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ 에 대하여 $T = 300 \text{ K}$ 에서 계산한 에너지 준위와 전자점유율을 나타내었다. 그림 9 에는 77K 일 때의 전자점유율을 함께 그

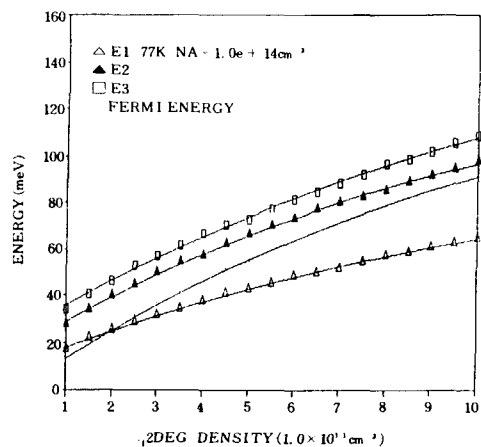


그림 5. 2DEG 밀도에 대한 에너지준위
Fig. 5. Energy levels vs. 2DEG density.

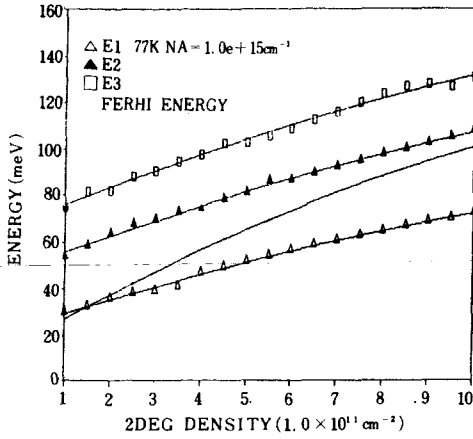


그림 6. 2DEG 밀도에 대한 에너지준위
Fig. 6. Energy levels vs. 2DEG density.

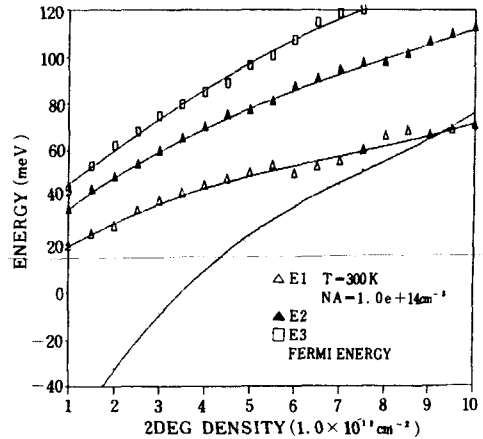


그림 8. $N_a = 1.0 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ 에 대한 에너지준위 ($T = 300 \text{ K}$)
Fig. 8. Energy levels for $N_a = 1.0 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ at 300 K.

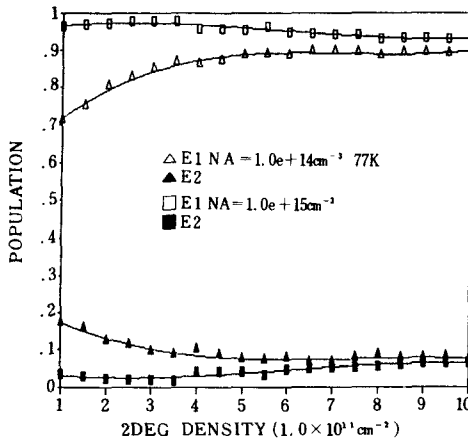


그림 7. 점유율의 2DEG 밀도 의존성
Fig. 7. Dependence of population on 2DEG density.

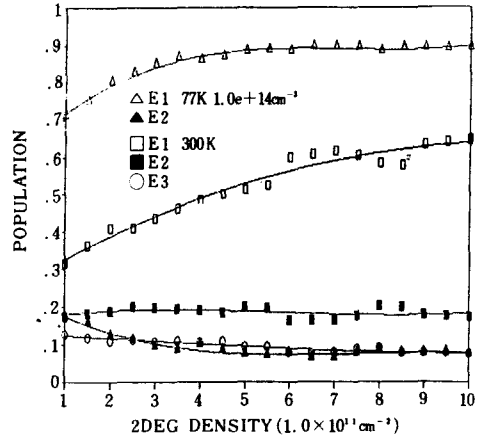


그림 9. $N_a = 1.0 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ 에 대한 점유율
Fig. 9. Populations for $N_a = 1.0 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$.

러 점유율의 온도존성을 뚜렷이 볼 수 있도록 하였다. 그림 8에서 보듯이 에너지 준위와 에너지준위 차가 ns에 따라 크게 달라진다. 이 현상은 77K에서는 볼 수 없었던 것으로 전자가 열에너지를 받아 높은 준위로 천이하여 여러 준위에 점유되기 때문이다. 또한 Fermi에너지도 ns에 따라 급격하게 변하기 때문에 전하제어 모델(charge control model)⁽¹³⁾을 세우는 데 이점을 고려하여야 한다. 그림 9으로부터 300K에서 E₁의 전자점유율은 ns가 증가함에 따라 증가하나, 77K에서는 ns = 5.0 × 10¹¹ cm⁻²까지 증가하고, 그 이상에서는 90%로 일정함을 알 수 있다.

그림 10은 $N_a = 1.0 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, $T = 77 \text{ K}$ 일 때 potential energy $V(x)$ 및 전자분포 $n(x)$ 를 계면에서

부터의 거리로 나타낸 것이다. 전자는 대부분 계면 가까이에서 분포하고 potential energy는 대부분의 전자가 분포하여 있는 200Å 내에서는 급격하게 변하나 그 이상에서는 완만하게 증가한다.

V. 결 론

n-AlGaAs/GaAs 이중접합에서의 2DEG 밀도를 고전역화적인 방법으로 계산하여 spacer두께와 AlGaAs의 도핑농도가 미치는 영향을 조사하였다. 또 2DEG의 전자상태가 GaAs의 acceptor 농도와 온도에 따

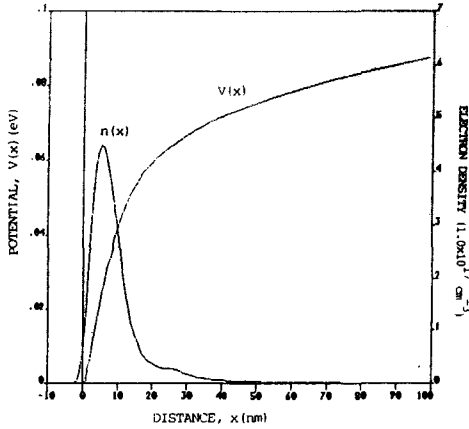


그림 10. 계면으로부터의 거리에 대한 전자의 분포와 전위분포

Fig. 10. Electron and potential distributions vs. distance from the interface.

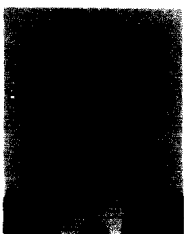
라 어떻게 변하는 지를 Poisson 방정식과 Schrodinger 방정식을 self-consistent 하게 풀어 조사하였다. 결과에서 보듯이 에너지준위, Fermi 에너지와 전자 점유율은 acceptor 농도와 온도에 민감하게 변하였다. Acceptor 농도가 높으면 2DEG 밀도가 전자상태에 미치는 영향이 적었다.

参 考 文 献

[1] L. Esaki and R. Tsu, "Superlattice and negative conductivity in semiconductors," IBM Res. Rep., RC-2418, 1969.
 [2] R. Dingle, H.L. Storme, A.C. Gossard, and W. Wiegmann, "Electron mobilities in modulation-doped semiconductor heterojunction superlattices," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 33, no. 7, pp. 665-667, 1978.

[3] T. Mimura, S. Hiyamizu, T. Fuji, and K. Nanbu, "A new field-effect transistor with selectively doped GaAs/n-AlGaAs heterojunctions," *Jpn. J. of Appl. Phys.*, vol. 19, no. 5, pp. L225-L227, 1980.
 [4] T.J. Drummond, H. Morkoc, K. Lee, and M. S. Shur, "Model for modulation doped field effect transistors," *IEEE Electron Device Lett.*, vol. EDL-3, no. 11, pp. 338-341, 1982.
 [5] T. Ando, "Self-consistent results for a GaAs/AlGaAs heterojunction. II. low temperature mobility," *J. of Phys. Soc. Jpn.*, vol. 51, no. 12, pp. 3900-3907, 1982.
 [6] B. Vinter, "Subbands and charge control in a two-dimensional electron gas field-effect transistor," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 44, no. 3, pp. 307-309, 1984.
 [7] J. Yoshida, "Classical versus quantum mechanical calculation of the electron distribution at the n-AlGaAs/GaAs heterointerface," *IEEE Trans. Electron Device*, vol. ED-33, no. 1, p. 154, 1986.
 [8] F.E. Battocletti, "Polynomial approximation of the integral of Femi integral," *Pro. IEEE*, p. 2162, 1985.
 [9] F. Stern, "Self-consistent results for n-type Si inversion layers," *Phy. Rev. B*, vol. 5, no. 12, pp. 4891-4899, 1972.
 [10] L. Hedin and B.I. Ludquist, *J. Phys. C*, vol. 4, p. 2064, 1971.
 [11] F. Herman and S. Skillman, *Atomic structure calculations*, Prentice-Hall, New Jersey, 1963.
 [12] 김충원, 한백형, "이온주입시킨 n형 실리콘 반전층에 대한 전자상태의 self-consistent 계산," 대한전자공학회 논문지, 제25권 제 2 호, pp. 70-77, 1987. *

著 者 紹 介



高在弘(正會員)
 1964年 5月 30日生. 1986年 2月
 한양대학교 전자공학과 졸업. 1988
 年 2月 한양대학교 전자공학과
 석사과정 졸업(M. S). 현재 삼성
 반도체통신 공정개발팀에서 연구.
 주관심분야는 Thin Film 제작 및

특성 등임.

金忠源(正會員) 第25卷 第3號 参照
 현재 한양대학교 전자공학과
 박사과정 재학중. 주관심분야는
 Hot-carrier transport 및 고
 속소자 Simulation 등임.

韓百亨(正會員)

1938年 8月 21日生. 1963年 2月
한양대학교 물리학과 졸업. 1965
年 2月 한양대학교 물리학과 이
학석사학위 취득. 1967年~1972年
미국 St. Louis Univ. 이학박사학
위 취득. 1972年~1974年 St.

Louis Univ. 연구원. 1974年~1977年 중앙대학교 물
리학과 조교수. 1977年~현재 한양대학교 물리학과
교수. 주관심분야는 에너지 밴드 구조 계산, HOT-
ELECTRON TRANSPORT 및 device simulation 등
임.

朴成鎬(正會員)

1962年 2月 5日生. 1984年 2月
아주대학교 전자공학과 졸업.
1986年 8月 한양대학교 전자공
학과 석사과정 졸업(M.S). 현재
한양대학교 전자공학과 박사과정
재학. 주관심분야는 Hot-carrier

transport 와 submicron device modeling 등임.