

<연구논문>

반도체 초격자의 Subband 에너지와 Envelope 함수

김영주 · 손기수

경북대학교 자연과학대학 물리학과
(1991년 12월 26일 접수)

The Subband Energy and The Envelope Wave Function of The Semiconductor Superlattice

Yung-Joo Kim and Ki-Soo Sohn

Department of Physics, Kyungpook National University, Taegu 702-701, Korea
(Received Decemner 26, 1991)

요 약— 초격자와 다양자우물이 가질 수 있는 모든 구조에 대한 subband와 입자의 envelope 파동함수를 계산할 수 있는 방법을 제시하고 단순조성 초격자와 δ -doping 초격자에 적용한 결과를 다른 방법의 계산결과와 비교하여 그 타당성을 검토하였다. 나아가서 기존의 방법에서 요구되었던 일정한 유효질량의 가정없이 graded gap 초격자에 적용하여 입자의 유효질량의 연속변화에 따른 subband 에너지와 파동함수를 계산하였다.

Abstract— The electronic subband structure and the envelope wave function for three types of superlattices are calculated with a new method. Comparison of the results of this method with those of other methods has proved the validity of this method. In particullas, the results of saw-toothed superlattices show that the change of the effective mass with position must be considered. Therefore this method can be easily applied to arbitrarily shaped superlattices and multiple quantum well structures.

1. 서 론

최근 들어 제작기법의 발달로 다양한 구조를 갖는 초격자(superlattice)와 다양자우물(multiple quantum well)의 제작이 가능하게 되었고 이에 따른 전기적 구조를 이용한 전자, 광학적인 소자로의 응용 가능성도 한층 증대되고 있다[1-3]. 이들 초격자의 응용은 각 구조가 가지게 될 subband 에너지와 이에 따른 전자의 존재 형태를 이론적으로 정확히 규명해야 할 필요성에 따라서 몇 개의 이론적인 계산방법이[4, 5] 제시되고 있다. 이들 가운데 입자의 유효질량 이

론을 이용하여 1차원 양자우물의 모형으로부터 에너지와 envelope 파동함수를 얻는 방법이 간단하고 또 가장 보편화되어 있다. 이 방법에서는 유효질량이 다른 두 물질의 경계면에서 주어지는 envelope 파동함수의 경계조건(Bastard 경계조건)을[4] 이용하여 에너지를 얻는 방법이다. 그러나 이 방법은 조성(compositional) 초격자와 같이 두 물질의 경계가 분명하여 유효질량도 단순히 계단 형태로 변하는 경우에 있어서는 적용이 간단하지만 그렇지 않은 경우, 즉 다양한 구조의 초격자에 있어서는 경계조건을 이용하기가 어려우므로 많은 제약이 따른다. 따라서 본 논문에서는 모든 구조에 적용될 수 있는 간단한 방법을 제시하고 단순조성 초격자와 유효질량의 변화가 나타나지 않는 δ -doping 초격자에[6] 적용하여 기존의

*본 연구는 1991년도 교육부 대학부설 기초과학연구소 학술연구조성비 및 경북대학교 학술연구조성비에 의하여 수행되었음.

방법에 의한 결과와 비교함으로써 방법의 타당성을 확인한 후 유효질량이 연속적으로 변하는 구조를 틈니모양의 포텐셜을 갖는 초격자(graded gap superlattice)에[7] 적용하여 subband envelope 파동함수를 계산하였다.

2. 본 론

초격자의 구조적인 특성에 의해서 초격자의 성장 방향으로 주기적인 band gap의 변화가 나타나게 되는데 유효질량을 갖는 입자에 일차원 주기적인 포텐셜 효과를 낳는다. 따라서 성장방향을 z축이라고 한다면 x-y 평면에서 입자의 운동은 단순히 평면파(plane wave)로 해석되나 z축 방향으로의 입자의 운동은

$$H\psi(z) = E\psi(z), = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \frac{1}{m^*(z)} \frac{\partial}{\partial z} \right\} \psi(z) + V(z) \psi(z) \quad (1)$$

의 Schrodinger 방정식이 만족되어야 한다. H는 Ben-Daniel & Duke Hamiltonian[8]이고 $\psi(z)$ 는 입자의 envelope 파동함수, $V(z)$ 는 band gap의 변화로부터 주어지는 포텐셜, 그리고 $m^*(z)$ 는 입자의 유효질량으로 위치함수이다. 이 Hamiltonian으로부터 A, B 두 매질의 경계가 $z=b$ 에서 존재한다면 이 위치에서 Bastard 경계조건으로 잘 알려진

$$\frac{1}{m_A^*} \frac{\partial}{\partial z} \psi_A(z) \Big|_{z=b} = \frac{1}{m_B^*} \frac{\partial}{\partial z} \psi_B(z) \Big|_{z=b} \quad (2)$$

$$\psi_A(b) = \psi_B(b) \quad (3)$$

의 관계식이 만족되어야 한다. 유효질량을 갖는 입자의 포텐셜이 주기적이므로 Bloch 정리와 이들 경계조건으로부터 주어지는 에너지 분산관계식을 얻어 초격자의 subband 구조를 알게 되는데 경계조건만 다를 뿐 Kronig-Penney 모델에서의 에너지 계산방법과 같다. 그러나 초격자의 한 주기가 매우 많은 물질로 구성되는 경우에는 모든 경계면에서 연속조건을 도입해야 하므로 분산관계식을 얻는 것이 어렵게 된다. 따라서 과거 대부분의 결과는 이러한 경우에 유효질량을 일정하게 두고 계산된 것이므로 유효질

량의 변화를 고려한 좀더 정확한 결과가 요구된다고 하겠다. (1)식의 파동방정식을 만족하는 envelope 파동함수는 모든 위치에서 Bastard 경계조건을 만족하므로 envelope 함수를 직접 구한다면 이러한 문제는 해결될 수 있다. 기저상태의 에너지를 변분법을 이용하여 구하는 것이 한 방법은 될 수 있으나 subband의 구조를 알기에는 미흡하다. 본 방법에서는 subband 구조는 물론 각 상태의 파동함수를 얻기 위해서 격자수가 유한한 초격자에

$$\psi(z+L) = \psi(z) \quad (4)$$

의 Born-von Karman 경계조건을 도입하는 것으로부터 출발한다. L은 초격자의 길이로 격자수(N)과 격자상수(a)의 곱이다. 따라서 입자의 envelope 함수는 이 조건을 만족하는 함수들의 선형결합으로 나타낼 수 있다. 즉,

$$\psi(z) = \sum_{i=0}^M c_i \phi_i(z). \quad (5)$$

$\phi_i(z)$ 로는 경계조건을 만족하는 sine과 cosine 함수를 이용하게 되는데 이들 함수간의 직교성이 성립하고 각 함수의 규격화가 단순하기 때문에 매우 편리하다. M은 결합된 함수의 수로 에너지와 파동함수의 수렴 정도에 의해서 결정하게 된다. (1) 식의 양변에 $\phi_i(z)$ 를 곱하고 적분하면 함수간의 직교 관계에 의해서

$$\int_0^L \phi_i(z) H\psi(z) dz = E c_i \quad (6)$$

을 얻는다. 따라서 에너지와 파동함수는

$$DC = EC \quad (7)$$

로 주어지는 $M \times M$ 행렬의 고유치와 고유벡터의 문제로 귀결되며 행렬 D의 (i, j) 요소

$$d_{ij} = \int_0^L \phi_i(z) H\phi_j(z) dz \quad (8)$$

로 주어진다. 행렬요소 d_{ij} 의 계산은 초격자의 구조에 의해서 결정되는 Hamiltonian으로부터 삼각함수의 미적분이므로 쉽게 계산된다[9]. 또한 BenDaniel & Duke Hamiltonian의 hermitian 성질과 실함수에 의해서 행렬 D는 대칭 실행렬이며 대각화시켜 에너지와 고유벡터로부터 envelope 파동함수를 얻게 된다. 실제

초격자에 적용한 결과는 아래에 열거하였으며 다른 방법을 이용한 결과와의 비교를 위해서 전자만의 subband와 envelope 파동함수를 보였다. 모든 계산에서 초격자를 구성하는 격자의 수를 11개로 고정하고 결합된 함수의 수(M)도 331개로 하였는데 에너지는 함수의 수가 증가함에 따라 감소경향을 보이며 함수의 수를 300개에서 700개로 증가하였을 때의 변화는 대부분 0.05 meV 이하였다. 행렬의 대각화는 Jacobi 방법을 이용하였다.

2.1. GaAs/Al_xGa_{1-x}As 초격자의 subband

이 초격자는 GaAs와 Al의 농도를 고정한 Al_xGa_{1-x}As를 교대로 일정한 주기를 갖도록 성장시킨 것으로 두 물질간의 band gap의 불일치에 의해서 전자나 정공에 대해 GaAs 영역이 격자내의 포텐셜 우물을 형성하고 Al_xGa_{1-x}As 영역이 포텐셜 장벽을 형성한다. Al의 농도가 증가함에 따라 Al_xGa_{1-x}As의 에너지 gap이 증가하여 포텐셜 장벽의 높이도 증가하게 되는데 전자에 대한 장벽의 높이

$$V_c(x) = 0.6(1.115x + 0.37x^2) \quad (9)$$

를 이용하였다[10]. 여기서 0.6은 band offset 값이다. 또한 Al의 농도에 따른 전자의 유효질량

$$m_c^*(x) = (0.067 + 0.083x)m_e \quad (10)$$

를 이용하였다[11]. Fig. 1(a)는 Al 농도 x가 0.2일 때 포텐셜 장벽의 두께를 40Å으로 고정하고 포텐셜 우물 폭의 변화에 따른 subband의 구조를 기존의 분산관계식으로부터 무한 초격자(N=∞)에 대하여 직접 계산한 결과이다. (b)는 본 연구에서의 방법을 이용하여 (a)와 같은 물리적 구조를 가지나 우물의 수를 11개로 줄인 유한 초격자에 대한 계산결과이다. 홀수 개의 격자로 구성되었으므로 홀수[짝수]번째 subband의 최저[최대] 에너지 즉, 역격자 공간의 각 Brillouin zone(BZ) 중심(k=2πn/a, n=0, 1, 2, ...)에서의 에너지를 제외한 나머지 준위들의 축퇴에 의해서 6개의 서로 다른 에너지가 각 band를 형성하게 된다. 그림에서 볼 수 있듯이 11개의 격자로 구성된 유한 초격자에 대한 subband의 모습은 무한 초격자의 그것과 큰 차이를 보이지 않는다. 실제로 초격자의 우물 폭이 150Å일 때 분산관계식으로부터 얻은 무한 초격자의 결과는 첫번[두번]째 subband의 최대와

최소 에너지가 각각 13.3[52.1] meV와 16.2[65.0] meV였고, 본 방법으로 계산한 유한 초격자의 결과는 13.3[52.3] meV와 16.2[65.0] meV로 두 방법의 결과가 거의 일치하였다. 또한 각 subband에서 BZ 중심에서의 에너지는 예견되었던 결과와 같이 격자수에 관계없이 무한 초격자의 에너지 값과 상당한 일치를 보였다. 이들에 대한 envelope 파동함수 모습 역시 격자의 수에 무관하였다. 이들 결과로부터 본 방법을 이용한 초격자의 subband 에너지 계산은 경계가 분명한 단순조성 초격자에 무리없이 적용될 수 있음이 증명되었다고 할 수 있다.

2.2 δ-doped 초격자의 subband와 envelope 파동함수

이 형태의 초격자는 단순조성 초격자와 달리 n-type과 p-type의 불순물을 번갈아 가며 일정한 간격을 두고 2차원적으로 주입함으로써 얻어진다. 초격자 포

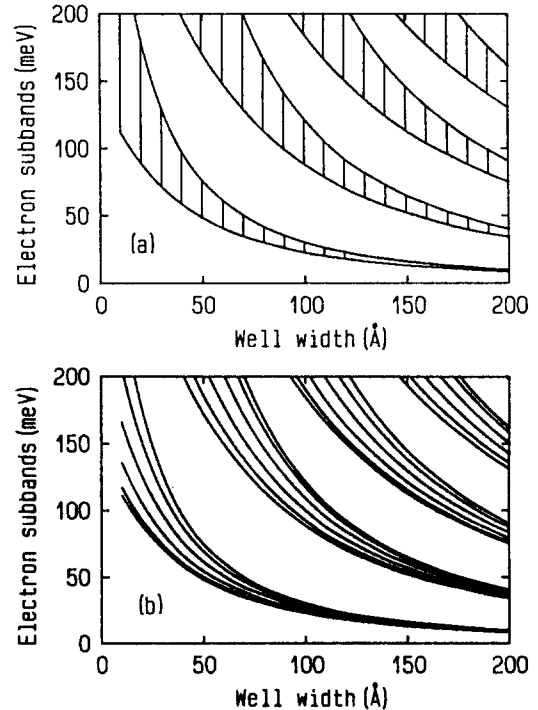


Fig. 1. Calculated subband energies and bandwidths for electrons as a function of the well width for GaAs/Al_xGa_{1-x}As square superlattice with barrier thickness = 40Å, x = 0.2, (a) N = ∞ (Kronig-Penney method), (b) N = 11, and M = 331 (our method).

텐셜은 불순물에 의한 전기장이 에너지 gap을 주기적으로 V자 모양으로 변화시켜 type-I의 단순 초격자와 달리 type-II 초격자 구조를 가지게 되며 최근 δ -doping 기술의 발달로 인하여 많은 연구가 진행중에 있다. 이 초격자에서는 조성 초격자의 에너지를 계산함에 있어 등장하는 band offset의 문제가 없으며 단순 doping에 의하여 전자나 정공의 유효질량의 변화가 없으므로 이론적인 해석이 한결 쉽다고 할 수 있다. 이 초격자의 주기 즉, 격자상수는 두 n-type 또는 p-type doping 간격이며 우물의 깊이는 δ -doping 농도와 격자상수에 따라 달라지게 된다[7]. 유효질량을 이용한 에너지 계산방법은 선형적으로 변하는 포텐셜로부터 대부분 Airy 함수를 이용한다. 본 연구에서의 방법을 이 구조의 초격자에 적용하여 subband와 envelope 파동함수를 얻고 그 결과를 Airy 함수와 경계조건을 이용한 결과(Ref. 7)와 비교하였다. 이용된 모든 parameter는 Ref. 7과 가급적 일치하도록 전자의 유효질량비를 0.067, 유전상수를 12.5, δ -doping 농도를 $12.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 로 하였으며, 대상으로 한 초격자의 구조가 Ref. 7에서는 무한 초격자에 적용한 결과이나 여기에서는 11개의 우물로 구성된 유한한 초격자에 적용한 것이 다른 점이다. Fig. 2는 격자상수의 변화에 따른 전도띠의 subband를 그린 것으로 조성 초격자와 같이 각 subband는 6개의 에너지 준위로 구성되며 이 결과는 Ref. 7의 Fig. 2와 비교한다. 두 결과의 다른 점은 조성 초격자에서와 같이 격자상수가 75\AA 이하에서 유한 초격자에서 무한 초격자 보다 Bz 경계에서의 subband 에너지 gap이 큰 것을 제외하면 Bz 중심에서의 에너지와 격자상수가 증가할 때 각 subband의 수렴에너지 등은 두 그림 상으로는 구별이 거의 불가능하다. Bz 경계에서의 에너지 gap의 변화가 Fig. 1의 조성 초격자와 달리 크게 나타나는 이유는 격자상수가 작아짐에 따라서 포텐셜 장벽의 두께와 높이가 조성 초격자의 경우에는 일정하게 유지되나 doped 초격자에서는 감소하게 되므로 인접 우물간의 상호작용이 커지게 되어 우물의 수가 적어지면 그만큼 파동함수의 dispersion이 적어지기 때문이다. 이 초격자에서도 격자수에 따른 Bz 중심의 에너지도 거의 변화가 없었다. Fig. 3은 격자상수가 160\AA 일 때의 처음 두 subband의 최대와 최소 에너지에 대한 envelope 파동함수를 초격자의 중심근처에서 나타낸 것이다. Fig. 3(a)[d]는

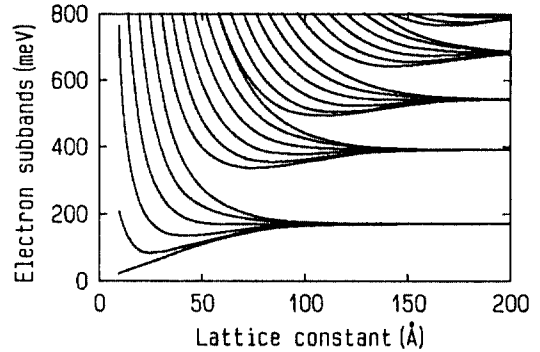


Fig. 2. Calculated subband energies and bandwidths for electrons as a function of the lattice constant (period) for finite δ -doping superlattice with doping concentration $= 12.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $N = 11$, and $M = 331$.

첫번째[두번째] subband의 BZ 중심에 위치한 에너지의 파동함수로 격자의 경계면에 대하여 우[기] 함수이며 격자상수를 주기로 완전한 주기성을 만족한다. 즉, subband의 기준이 되는 에너지준위에 해당하므로 이 에너지를 갖게 될 전자는 격자의 수에 관계없이 완전한 비국소 상태(delocalized state)로 존재하여 유한한 초격자 효과가 나타나지 않는다. 이 파동함수의 모습은 Ref. 7의 Fig. 4[7]과 일치한다. (b)[c]는 첫번째[두번째] subband의 BZ 경계에서의 에너지에 대한 파동함수로 기[우] 함수형태의 모습은 Ref. 7의 Fig. 5[6]와 흡사하나 (a)나 (d)와는 달리 완전한 주기성이 만족되지 않으며 초격자의 중심에서 파동함수의 진폭이 가장 크고 양쪽 가장자리로 갈수록 감소하였다. 격자상수가 160\AA 으로 충분히 커서 Fig. 2로부터 그 에너지는 무한 초격자의 에너지와 거의 같으나 그 파동함수는 유한 초격자의 효과를 나타내고 있는 것이다. 이 경향은 다른 에너지준위의 파동함수에서도 볼 수 있었으며 최대 진폭의 위치가 각 에너지준위에 따라 달리 나타났다. 조성 초격자의 파동함수는 다른 이론결과와 비교할 대상이 없는 관계로 제시하지 않았으나 doped 초격자와 같은 경향을 보였으며 Fig. 1에서 볼 수 있듯이 유무한의 차이가 상대적으로 적고 파동함수 역시 δ -doped 초격자에 비해서 유한 초격자의 효과도 적게 나타남을 확인할 수 있었다.

2.3. 틱니모양(graded gap) 초격자의 subband와 envelope 파동함수

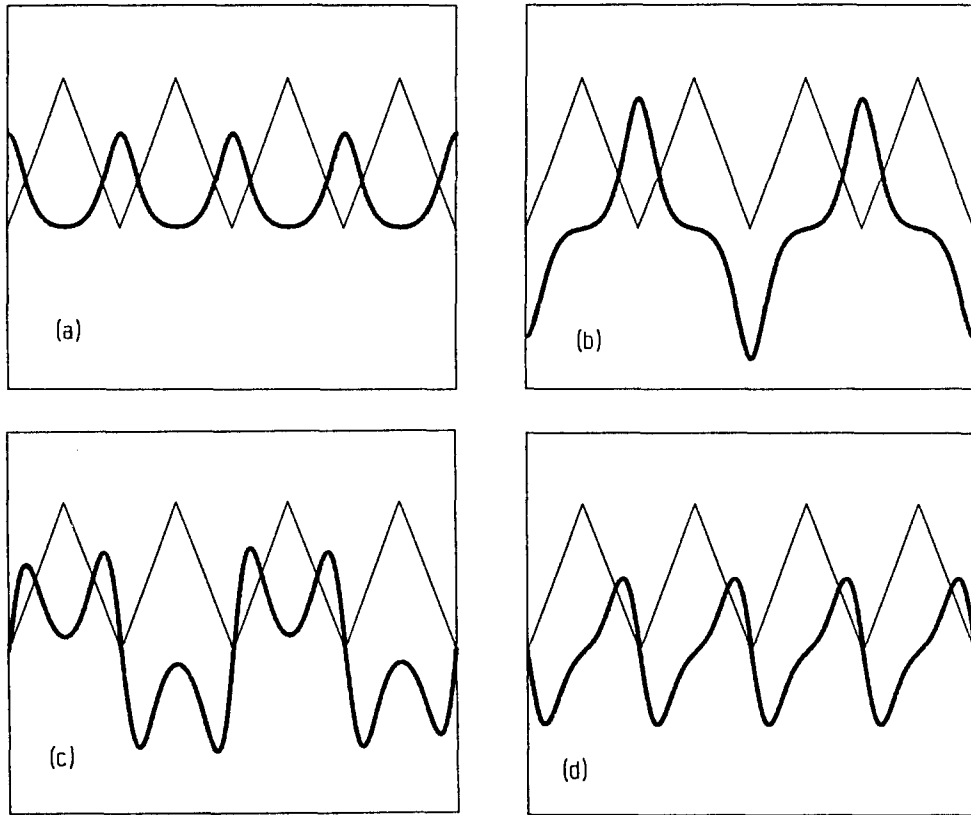


Fig. 3. Band-edge normalized envelope wave function for δ -doping superlattice with doping concentration = $12.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ and lattice constant = 160 \AA , $N=11$, and $M=331$. (a) The first band minimum energy state. (b) The first band maximum energy state. (c) The second band minimum energy state. (d) The second band maximum energy state.

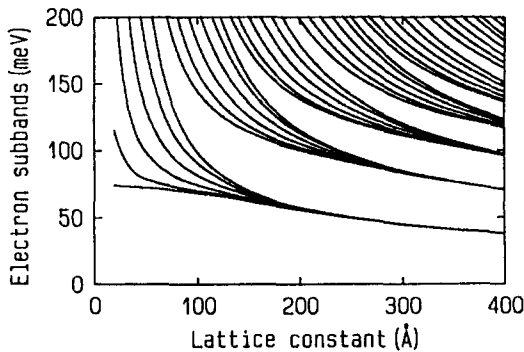


Fig. 4. Calculated subband energies and bandwidths for electrons as a function of the lattice constant (period) for GaAs/Al_xGa_{1-x}As sawtoothed superlattice with $x_{max}=0.2$, $N=11$, and $M=331$.

이 모양의 초격자는 GaAs/Al_xGa_{1-x}As 경우에 Al 농도 x를 위치에 따라 증가시켜 제작되며 앞의 두

초격자와 달리 반전대칭(inversion symmetry)이 성립되지 않는다. (9), (10) 식으로부터 x가 선형적으로 증가하는 경우 전자의 유효질량은 선형적으로 증가하지만 에너지 gap의 차이는 비선형적으로 증가하게 되어 초격자의 포텐셜도 비선형적인 요소가 나타났다. 앞에서의 두 초격자 구조에서의 결과로부터 타당성이 확인된 본 연구에서의 방법을 이 구조의 초격자에 적용하기 위하여 간단히 에너지 gap의 비선형적인 변화를 무시하고 단순히 초격자의 포텐셜이 $V_v(0)$ 에서 $V_v(X_{max})$ 까지 선형적으로 증가한다는 가정을 도입하였다. 비선형적인 효과를 고려한다면 우물의 폭이 증가하는 결과가 주어지게 되므로 에너지 값은 선형적일 때보다 약간 적어질 것으로 예상된다. Fig. 4는 $x_{max}=0.2$ 일 때 주기 즉, 격자상수의 변화에 따른 전도띠의 subband 변화를 그린 것으로 격자상수가 200

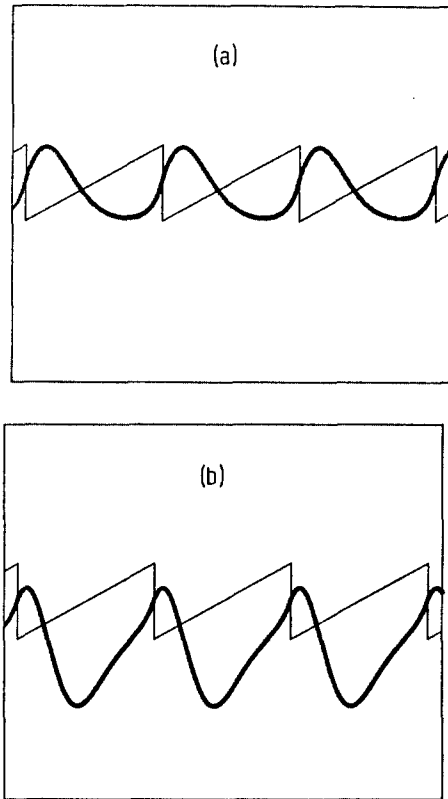


Fig. 5. Band-edge normalized envelope wave function for GaAs/AlGa_{1-x}As sawtoothed superlattice with $x_{max}=0.2$, lattice constant = 200Å, $N=11$, and $M=331$. (a) The first band minimum energy state. (b) The second band maximum energy state.

Å일 때 첫번째 subband의 에너지 값은 53.5[54.7] meV의 최소값과 55.1[57.1] meV의 최대값을 갖는다. 팔호 안의 값은 유효질량이 $m_e^*(0)$ 로 일정할 때의 계산결과이다. 일정한 유효질량을 가정하고 Airy 함수와 경계조건을 이용한 결과[11] 또는 본 방법에서 일정한 유효질량을 이용한 결과와 비교하여 모든 band가 약간 낮은쪽에 위치하게 되는데 변화되는 정도는 band index가 증가 할 수록 그 양이 점차 증가함을 보였다. 또한 일정한 질량에 비해 각 band 폭이 감소하였는데 장벽에서 전자의 질량 증가가 인접 우물간의 상호작용을 감소시켜 장벽의 높이가 증가 되는 효과로 나타나기 때문이라고 생각하며 x_{max} 값이 증가함에 따라 이들 변화가 점차 크게 나타나는 경향을 보였다. 우물의 폭과 장벽의 두께가 70Å로 같고,

Al 농도가 0.2의 장벽을 갖는 단순조성 초격자에 있어서 실제 결과와 모든 위치에서 전자 유효질량을 우물에서의 전자 유효질량으로 같게 두고 계산한 결과는 각각 첫번째 subband의 최소[최대] 값이 40.0 [43.6] meV, 41.9[47.2] meV였다. 두 초격자의 구조의 차이에 의해서 직접적인 비교가 불가능하지만 단순 초격자의 전자 유효질량에 대한 변화를 감안한다면 틱니형의 초격자에 대하여도 유효질량의 위치에 따른 변화를 고려할 필요가 있다.

Fig. 5는 처음 두 subband의 BZ 중심에서의 에너지에 대한 전자의 envelope 파동함수를 보이고 있다. 이들 역시 격자상수에 대한 주기성을 만족하므로 격자의 수에 영향을 받지않고 비국소 상태로 존재하지만 격자 경계면에서 파동함수의 대칭성은 δ -doped 초격자와 달리 만족되지 않는 특성을 갖고 있다.

3. 결 론

세 종류의 초격자에 대한 subband 에너지와 envelope 파동함수를 기존의 방법과 달리 구하였다. 특히 틱니형태의 구조를 갖는 초격자의 경우에 있어서 유효질량의 변화를 고려한 결과와 일정한 유효질량을 가정한 결과에서의 에너지와 band 폭 변화가 일반적인 조성 초격자와 비교할 때 무시될 수 없음을 확인하였다. 따라서 이 방법은 초격자는 물론 다양한 구조의 다양자우물에도 적용이 가능하므로 이들을 이용한 소자의 개발에 있어서 그 기여가 크게 기대된다.

참고문헌

1. L. Esaki, *J. Phys. (Paris) Colloq.*, **45**, C5-3 (1984).
2. M. Abe, T. Mimura, K. Nishiuchi, A. Shibatomi and M. Kovayashi, *IEEE J. Quantum Electron.*, **QE-22**, 1870 (1986).
3. N. Holonyak, Jr., R.M. Kolbas, R.D. Dupuis and P.D. Dapkus, *IEEE J. Quantum Electron.*, **QE-16**, 170 (1980).
4. G. Bastard, *Phys. Rev.*, **B24**, 5693 (1981).
5. G.A. Sai-Halasz, L. Esaki and W.A. Harrison, *Phys. Rev.*, **B18**, 2812 (1978).
6. J.M. Ferreyra and C.R. Proetto, *Phys. Rev.*, **B42**, 5657 (1990).

7. J.A. Brum, P. Voisin and G. Bastard, *Phys. Rev.*, **B33**, 1063 (1986).
8. D.J. BenDaniel and C.B. Duke, *Phys. Rev.*, **152**, 683 (1966).
9. to be published.
10. H.J. Lee, L.Y. Juravel, J.C. Wooley and A.J. Springthorpe, *Phys. Rev.*, **B21**, 659 (1980).
11. H.C. Casey and M.B. Panish, *Heterostructure Lasers* (Academic, New York, 1978) Part A. Chap. 4.