

論文92-29A-1-3

AlGaAs/GaAs 단일양자우물 구조에서 Airy 함수를 이용한 공명터널링 현상에 관한 고찰

(Analysis of the Resonant Tunneling in an AlGaAs/GaAs Single
Quantum Well Structure by an Airy Function Approach)

金 成 振*, 李 旻 潤**, 李 憲 用*** 成 英 權*

(Seong Jeen Kim, Kyung Yun Lee, Heon Yong Lee, and Yung Kwon Sung)

要 約

단일 양자우물 구조에서 외부 인가전압에 따른 공명 터널링 현상에 관한 해석을 슈레딩거 방정식의 정확한 해를 기초로 하여 이론적으로 접근해 보았다. Airy 함수를 이용하여 정확한 해를 구하고, Bastard가 제안한 계면에서의 경계조건을 사용하여 전자 입사 에너지의 함수로서 투과율과, 그리고 터널링 전류밀도를 구했다. 그 결과를 기존의 다른 방법으로부터 얻어진 결과 및 다른 경계조건에서 구한 결과들과 비교하였다. 터널전류에 대한 J-V 특성곡선에서는, 온도 및 페르미준위의 변화에 따른 피크 전류가 나타나는 인가전압의 의존성을 고찰하였다. 추가적으로, 공명조건하에서 양자우물 내의 파동함수를 구하여, Esaki et al.에 의해 시도된 단순한 계단형 포텐셜 모델에서 얻어진 결과와 비교하였다.

Abstract

The analysis of the resonant tunneling based on the exact solution of Schrodinger equations is performed in a single quantum well structure under applied bias. The transmittivity and the net tunneling current density are calculated with Airy function and the boundary conditions which is suggested by Bastard. The results are compared with those from other methods and boundary conditions. From the calculated J-V characteristics for the tunneling current, the dependence of the voltage location showing the first peak current on the various temperatures and Fermi level is investigated. In addition, the wave function within the structure is obtained and compared with that from the flat-potential model.

*正會員, 高麗大學校 電氣工學科

(Dept. of Electrical Eng., Korea Univ.)

**正會員, 三星電子 半導體部門 富川研究所

(Buchun R & D center, Samsung Electronics)

***正會員, 明知大學校 電氣工學科

(Dept. of Electrical Eng., Myongji Univ.)

接受日字: 1991年 10月 26日

(※ 이 논문은 과학재단에서 金成振*에게 수여한 1991년도 박사과정 학위논문 연구비에서 일부 지원받았음.)

I. 서 론

MBE와 MOCVD와 같은 세밀한 막성장 기술의 발전으로 초격자 및 다중 양자우물구조를 갖는 소자의 실현이 가능해졌다. 초격자 구조는 최초 Esaki와 Tsu¹⁾에 의해 제안되었으며, 현재 광소자, 소역 필터, 및 고속트랜지스터 등에 다양하게 응용되어 왔다. 이 논문에서는 제작이 용이하고 두 물질사이의 거의 같은 격자상수를 갖는 이점으로 초격자구조 소자에 널리 이용되는 GaAs/AlGaAs 단일양자우물 구조를 선

정하여, 공명 터널링에 관련한 전자의 투과율과, 투과율이 최대가 될 때의 소자내의 파동함수, 그리고 터널 전류밀도를 구해보고자 한다. 외부에서 바이어스를 가함으로써 캐리어는 얇은 장벽을 통해 터널링할 수 있으며, 터널링 전류의 피크는 공간적으로 양자화된 양자우물내에서의 준 구속 에너지 준위와 장벽 외부에서 입사되는 전자 에너지 준위가 어떤 특정한 준위에 이를 때 발생하게 된다. 지금까지 저 여러 실험 분석^{2)을} 통해 공명 터널링의 존재를 확인하여 왔으며, PL(photoluminescence) 및 PLE(photoluminescence excitation) 측정^{3)4)을} 통해 초격자 구조속에서 미니밴드의 형성을 입증해 왔다.

일반적으로 공명 터널링 현상을 설명하기 위해 적용된 이론으로는, 첫째 WKB(wentzel-kramers-brillouin) 근사법^{5)이} 있다. 그러나 장벽 에너지가 천천히 변화하는 구조에서 적용 가능하기 때문에, 초격자 구조와 같이 두께가 매우 얇은 구조에서 외부 전계에 의한 포텐셜 장벽이 급격히 변화하는 경우에는 적용할 수 없다. 일반적으로 사용되는 간단한 방법은 Esaki et al^{1)에} 의해 제안된 계단형 포텐셜 모델을 가정한 transfer matrix를 통해 투과율을 계산하는 방법이다. 그러나 이 방법은 저전계 하에서 적합하며, 외부 인가 전압에 관계없이 소자내에서는 균일한 정현파형의 평면파와 감쇄파 형태의 파동함수가 얻어지는 단점이 있다. 또한 전체구조에서 일정한 유효질량을 사용하여 각 계단마다 2×2 transfer matrix법에 의해 터널링 투과율을 계산하였기 때문에, 계면에서 적용한 경계조건식이 실제의 물리적 상태와 다르게 해석되었다. 그러나 이점은 Mukherji et al.^{6)에} 의해 각층마다 별개의 유효 질량을 사용한 경계조건식으로 보완되었으며, 그 후에 Bastard^{7)에} 의해 계면에서 일치미분 파동함수의 연속조건으로서 유효질량 차이를 고려한 식으로 수정하게 되었다. 즉,

$$\frac{1}{m_A^*} \frac{d\Psi_A}{dz} = \frac{1}{m_B^*} \frac{d\Psi_B}{dz} \quad (1)$$

정전계하에서 슈레딩거 방정식의 정확한 해는 Airy 함수^{8)의} 선형 결합으로 나타낼 수 있다. 이 방법은 여러 논문^{9)10)에서} 발표되어 왔다. 우리는 여기에서 GaAs/AlGaAs 물질 구조로 만들어진 단일양자우물 구조에서의 전자의 투과율을 계산하기 위해, 앞서 언급한 Bastard의 경계조건을 이용하여 구하였다. II 장에서는 Airy 함수와 적용된 경계조건으로 부터 구해진 2×2 transfer matrix^{11)에} 대해 설명할 것이며, III 장에서는 II 장에서 설명한 방법으로 구한 결과를 다른 방법에

서 얻은 결과들과 비교하였으며, 온도와 페르미준위의 변화에 따른 피크전류가 나타나는 외부 바이어스 전압의 의존성을 계산하여 공명 터널링현상을 우물 내부의 구속상태 에너지 준위와 페르미 준위 사이의 연관 관계로 고찰하였다.

II. 이론적 고찰

유효질량 근사법을 사용하여 양자우물 포텐셜을 통해 투과하는 전자에 대한 슈레딩거 파동 방정식은

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} + [E - V(z)]\Psi(z) = 0. \quad (2)$$

여기에서 $\Psi(z)$ 는 전자의 파동함수, $V(z)$ 는 포텐셜준위를 거리(z)의 함수로 표시한 것이다. 외부 인가전압에 의한 소자 내부전계는 상대적으로 낮은 전도성을 갖는 우물구조 내에서 전체적으로 균일하게 작용한다고 가정한다. 계산은 단일 양자우물 구조의 각 우물과 장벽에서 정확한 슈레딩거 방정식을 해결하여, 각 경계면에서 파동함수와 그 파동함수의 일치미분함수가 연속이어야 한다는 경계조건을 이용한다. 즉,

$$\Psi_A(z-) = \Psi_B(z+) \quad (3)$$

$$\frac{1}{m_A^*} \frac{d\Psi_A(z-)}{dz} = \frac{1}{m_B^*} \frac{d\Psi_B(z+)}{dz} \quad (4)$$

그림1은 투과율 계산을 위해 단일양자우물구조의 포텐셜을 일차원적으로 나타낸 것이다. 전자의 거동을 평면파와 감쇄파로 가정했을 때 지역 1에서 슈레딩거 방정식의 해는 입사파와 반사파의 선형결합으로 표시할 수 있다.

$$\Psi_1(z) = \exp(ik_1z) + R \exp(-ik_1z) \quad (5)$$

여기에서, 파동벡터 k_1 은

$$k_1 = \frac{\sqrt{2m_1^*E}}{\hbar} \quad (6)$$

m_1^* 는 GaAs층인 1지역에서의 전자의 유효질량을 말한다.

2지역에서 슈레딩거 방정식은

$$\Psi_2''(\rho) - \rho \Psi_2(\rho) = 0 \quad (7)$$

여기에서

$$\rho = -\left[\frac{2m_2^*eVa}{\hbar^2}\right]^{1/3} (z + \phi), \quad (8)$$

$$\phi = (E - V_0) L / Va. \quad (9)$$

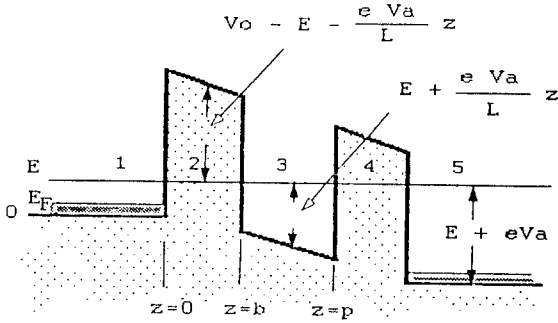


그림 1. 경사형 포텐셜 모델로 나타낸 단일양자우물 구조의 개략도

Fig. 1. Schematic representation of a single quantum well structure indicated by a tilted-potential model.

m_2^* 는 AlGaAs층에서 전자의 유효질량, V_a 는 외부 인가전압, V_0 는 장벽높이, E 는 전자의 에너지, e 는 전자의 전하량, \hbar 는 프랑크상수, L 은 단일양자우물 구조의 길이를 말하며, z 는 실공간에서 1지역과 2지역 사이의 계면을 기준으로 위치를 나타낸다. 식(7)의 해는 다음과 같이 Airy함수의 선형결합으로 표시된다.

$$\Psi_2(\rho) = C_2^+ Ai(\rho) + C_2^- Bi(\rho) \quad (10)$$

한편, 3지역에서의 슈레딩거 방정식은

$$\Psi_3''(\rho) - \rho \Psi_3(\rho) = 0 \quad (11)$$

여기에서

$$\rho = -\left(\frac{2m_1^*eVa}{L\hbar^2}\right)^{1/3}(z+\phi) \quad (12)$$

$$\phi = E(L/Va) \quad (13)$$

이며, 식(11)의 해는

$$\Psi_3(\rho) = C_3^+ Ai(\rho) + C_3^- Bi(\rho) \quad (14)$$

따라서 그림1에서 나타낸 각 지역에서의 파동함수는

$$\Psi_1 = |\exp(ik_1z) + R \exp(-ik_1z), \quad z < 0 \quad (15)$$

$$\Psi_2 = C_2^+ Ai[\rho(z)] + C_2^- Bi[\rho(z)], \quad 0 \leq z < b \quad (16)$$

$$\Psi_3 = C_3^+ Ai[\rho(z)] + C_3^- Bi[\rho(z)], \quad b \leq z < p \quad (17)$$

$$\Psi_4 = C_4^+ Ai[\rho(z)] + C_4^- Bi[\rho(z)], \quad p \leq z < p+b \quad (18)$$

$$\Psi_5 = T \exp(ik_5z), \quad z \geq p+b \quad (19)$$

여기에 계면에서 경계조건을 적용함으로써 2×2 transfer matrix 형태로 투과계수(T)를 구한다.

계면1에서 경계조건에 의한 transfer matrix는

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \frac{ik_1}{m_1^*} & -\frac{ik_1}{m_1^*} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ R \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Ai[\rho_2(z=0)] & Bi[\rho_2(z=0)] \\ \alpha Ai'[\rho_2(z=0)] & \alpha Bi'[\rho_2(z=0)] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_2^+ \\ C_2^- \end{bmatrix}$$

여기에서 α 는 변수치환에 따른 상수이다.

$$\alpha = -\frac{1}{m_2^*} \left(\frac{2m_2^*eVa}{L\hbar^2}\right)^{1/3} \quad (20)$$

계면2에서는

$$\begin{bmatrix} Ai[\rho_2(z=b)] & Bi[\rho_2(z=b)] \\ m_2^{*-2/3} Ai'[\rho_2(z=b)] & m_2^{*-2/3} Bi'[\rho_2(z=b)] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_2^+ \\ C_2^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Ai[\rho_3(z=b)] & Bi[\rho_3(z=b)] \\ m_1^{*-2/3} Ai'[\rho_3(z=b)] & m_1^{*-2/3} Bi'[\rho_3(z=b)] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_3^+ \\ C_3^- \end{bmatrix}$$

나머지 계면에서도 경계조건을 적용하면, 최종적인 2×2 transfer matrix를 얻게 된다.

$$\begin{bmatrix} R \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_1 & S_2 \\ S_3 & S_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T \\ 0 \end{bmatrix}$$

여기에서 S_1, S_2, S_3, S_4 는 전체 2×2 매트릭스의 각 성분을 나타내며, 투과계수 T는

$$T = 1 / S_1 \quad (21)$$

으로 구해진다.

III. 결과 및 비교

II장에서 설명한 방법으로 단일양자우물 구조에서의 투과율을 계산하였다. 그림2는 전자 에너지함수에 의한 투과율곡선을 인가전압이 0.16과 0.4V일 때 구한 결과이다. 사용된 구조는 비교를 위해, Brennan et al.¹²⁾이 사용했던 구조와 같다. 각 층에서의 유효질량값으로 $m_1=0.067m_0, m_2=0.1087m_0$ 를 사용하였으며, m_0 는 자유 전자질량이다. 장벽높이는 0.5eV, 우물 폭은 50Å, 장벽 두께는 20Å으로 하였으며, E_F 는 GaAs 콘택에서의 불순물 농도에 따른 페르미 준위로서 불순물 농도가 $n=10^{17}cm^{-3}$ 이라고 가정했을 때 $E_F=0.005eV$ 가 된다. 그림2에서는 경계조건으로 일차 미분함수의 연속성에 관한 유효질량차이를 고려하지 않고 구한 Brennan et al.¹²⁾의 결과와 수치해석 방법으로 구한 Vassell et al.¹³⁾의 결과들을 비교하였다. Brennan의 논문에서는 일정한 유효질량과

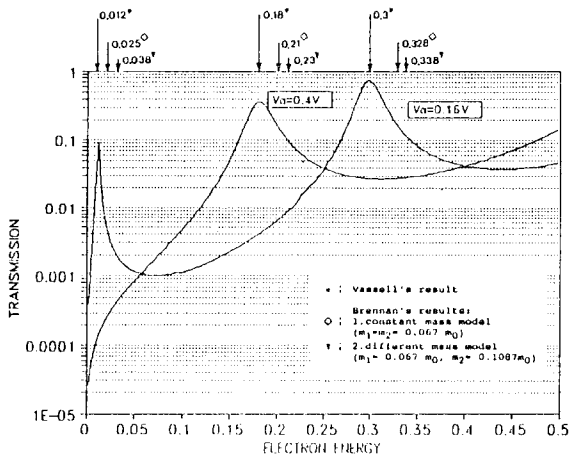
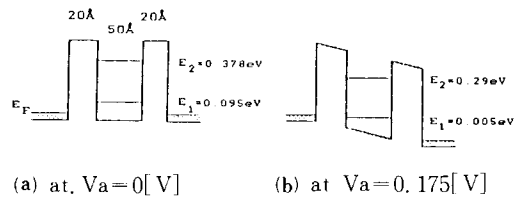
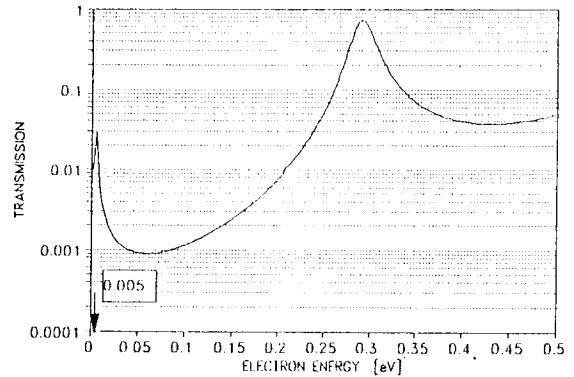


그림 2. 전자에너지 준위에 대한 투과율 곡선
 Fig. 2. Logarithm of the transmission coefficient as a function of incident electron energy.



(a) at $V_a=0[V]$ (b) at $V_a=0.175[V]$



(c) Transmission curve at $V_a=0.175V$

그림 3. 최대 투과율을 나타내는 위치의 외부 인가 전압 의존성

Fig. 3. Dependence of the location of the peak transmission on the applied voltage.

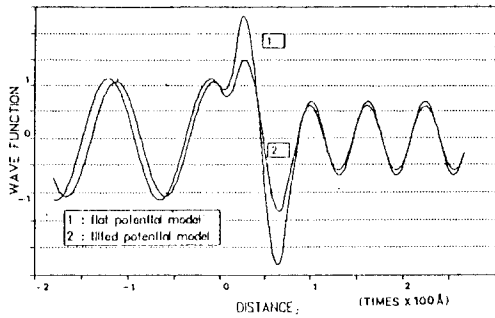
각층마다 다른 유효질량을 이용하였을 때 얻은 결과를 비교하면서, 실제의 물리적 상황에서 장벽과 우물 사이에 에너지 파동벡터의 산란관계식은 유효질량차이에 의해 다를 것이라는 가정하에서 결과를 구했지만, 비교한 Vassell의 결과와는 차이가 있었다. 그러나 우리가 구한 결과는 Vassell의 결과와 일치하였다. 이것은 경계조건의 차이에서 일어난 것임을 알 수 있다. 그림3은 전자의 입사 에너지에 대한 공명터널링의 투과율 곡선으로, 투과율이 최대가 되는 에너지준위는 우물내의 구속상태 에너지 준위와 대응함을 보여주고 있다. 0.175V의 인가전압하에서 나타난 투과율의 첫번째 피크는 전자의 에너지가 콘택 영역의 페르미 준위와 같은 0.005eV 부근에서 일어나게 되며, 이것은 그림6에 나타난 것처럼 첫번째 터널링 전류의 피크가 나타날 때의 외부인가전압과 연관성이 있음을 알 수 있다. 그림3(c)는 페르미 준위와 내부 구속상태 에너지 준위사이의 연관성을 보여주는 그림으로, 두 에너지준위들이 접근하게될 때 공명 터널링에 의한 전류가 피크가 됨을 보여준다.

그림4는 0.4V의 인가전압하에서 두번째 구속상태 준위인 $N=2$ 에 대해서 경사형 포텐셜 모델을 사용하여 정규화(normalization)하지 않은 상태로 구한 파동함수 곡선이다. 계단형 포텐셜 모델은 바이어스를 가해도 우물 내부에서 정상적인 정현파형을 나타내지만, 실제의 경우 외부에서 바이어스를 가하게 되면 변형된 정현파형을 나타나게 될 것이다. 소자내에서의 파동함수곡선만을 발췌한 것이 그림 4(b)이다.

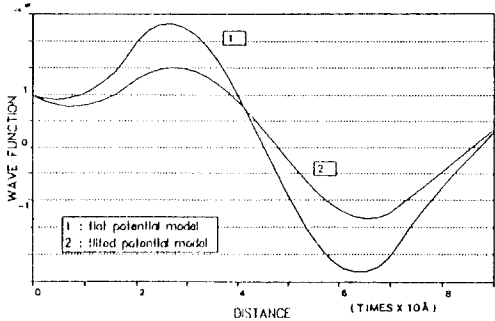
전자에 의한 순수한 터널링 전류성분은 앞서 구한 일차원 구조에서의 투과율과 전자의 군속도, $v(k) = \hbar^{-1} \nabla_k E$ 및 페르미 분포함수와의 적을 평균하여 구할 수 있다.¹¹⁾

$$J = \beta \theta \int_0^\infty T^* T \ln \left[\frac{1 + \exp[(E_F - E)/k_B \theta]}{1 + \exp[(E_F - E - eVa)/K_B \theta]} \right] dE \quad (22)$$

여기에서 $\beta = em^* k_B / 2\pi^2 \hbar^3$, k_B 는 볼츠만 상수, 그리고 θ 는 절대온도를 나타낸다. 그림5는 여러가지 온도 변화에 따른 터널 전류밀도를 구한 결과이다. 부정 저항특성이 저전압에서 급격하게 일어나는 것을 알 수 있으며, 온도가 증가함에 따라 페르미-디랙 분포함수의 온도 의존성 때문에 전류밀도가 함께 증가하여, 300°K에서는 약 10⁴amp/cm²의 전류밀도를 보이고 있으며,²¹⁾⁴⁾ 피크 전류를 나타내는 인가전압은 낮은 쪽으로 이동하는 경향을 보이고 있다. 그림 6은 페르미준위의 의존성을 나타낸 그림으로, 피크전류를 나타내는 위치는 역시 낮은 전압 쪽으로 이동하지만



(a) 공명조건하에서 양자우물구조에서의 파동 함수 곡선



(b) 양자우물구조내만을 확대한 파동함수 곡선

그림 4. 인가전압이 0.4V일 때, 공명 상태에서 양자우물구조내의 파동함수 곡선

Fig. 4. Wave function curves in SQW structure under resonance at $V_a=0.4V$.

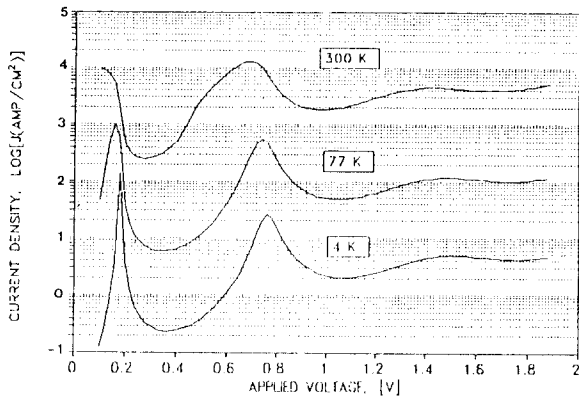


그림 5. 온도에 변화에 따른 인가전압과 터널 전류밀도사이의 특성곡선

Fig. 5. Current-voltage characteristics for the SQW at selected temperatures.

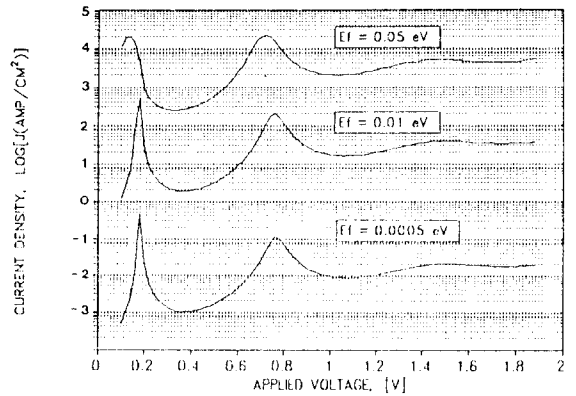


그림 6. 페르미 준위에 대한 $\theta=4^\circ K$ 에서 인가전압과 터널전류밀도사이의 특성곡선

Fig. 6. Current-voltage characteristics at $\theta=4^\circ K$ for selected Fermi energies.

일반적으로 널리 이용되는 낮은 페르미준위에 대해서는 거의 변화가 없음을 알 수 있다!"

IV. 결 론

단일 양자우물구조 내에서 공명 터널링 현상을 관찰하기 위해, 슈레딩거 파동 방정식의 정확한 해를 Airy 함수의 선형 결합을 통해 구했다. GaAs/AlGaAs 단일양자우물 구조를 선정하여, 공명 터널링에 관련한 전자의 투과율과, 투과율이 최대가 될 때의 소자내의 파동함수, 그리고 터널 전류밀도를 이론적으로 구했다. 계면에서 경계조건으로 일차 미분된 파동함수의 연속성에 유효질량차이를 보완해서 얻은 결과가 기존의 수치 해석을 통해 얻은 것과 거의 일치하는 결과를 낳았으며, 계단형 포텐셜 모델에 비해 경사형 포텐셜 모델을 사용함으로써 정확하고 재현성이 있는 결과를 얻을 수 있었다. 끝으로 Ariy 함수의 특성상, 상대적으로 고전압하에 적용하는 것이 해를 얻기에 용이하였다.

參 考 文 獻

[1] R. Tsu and L. Esaki, "Tunneling in a finite superlattice," *Appl. Phys. Lett.*, 22, 562, 1973.
 [2] T.C.L. G. Sollner et al., "Observation of millimeter-wave oscillations from frequency limits," *Appl. Phys. Lett.* 50, 332, 1987.

- [3] D.A.B. Miller, "Electric field dependence of optical absorption in quantum well structures: physics and applications," SPIE vol. 792, 176, 1987.
- [4] Y.J. Chen et al., "Effect of electric field on excitons in a coupled double quantum well structure," *Phys. Rev. B* 36, 4562, 1987.
- [5] David Bohm, "Quantum Theory: Chapt. 11, 12," Prentice-Hall, 1951.
- [6] D. Mukherji and B.R. Nag, "Band structure of semiconductor superlattices," *Phys. Rev. B* 12, 4338, 1975.
- [7] G. Bastard, "Superlattice band structure in the envelope function approximation," *Phys. rev. B* 24, 5693, 1981.
- [8] M. Abramowitz and I.A. Stegun (Éds.), *Handbook of Mathematical Functions* (New York: Dover, 1965); originally published by the National Bureau of Standards, Washington, D.C., 1964.
- [9] M.J. Kelly, "Funneling in quantum-well structures," *Electron. Lett.* 20, 772, 1984.
- [10] E.J. Austin and M. Jaros, "Electronic structure of an isolated GaAs-GaAlAs quantum well in a strong electric field," *Phys. Rev. B* 31, 5569, 1985.
- [11] S.J. Kim, H.Y. Lee, and Y.K. Sung "Spectral Analysis of rectangularly corrugated waveguide filters using the effective-index method," *J. KITE.* 2,83, 1991.
- [12] K.F. Brennan and C.J. Summers, "Theory of resonant tunneling in a variably spaced multiquantum well structure: an Airy function approach," *J. Appl. Phys.* 61, 614, 1986.
- [13] M.O. Vassell, J. Lee, and H.F. Lockwood, "Multibarrier tunneling in $Ga_{1-x}Al_xAs/GaAs$ heterostructure," *J. Appl. Phys.* 54, 5206, 1983.
- [14] M. Tsuchiya and H. Sakaki, "Dependence of resonant tunneling current on Al mole fractions in $Al_x-Ga_{1-x}As-GaAs-Al_xGa_{1-x}As$ double barrier structures," *Appl. Phys. Lett.* 50, 1503, 1987.

 著 者 紹 介

金 成 振 (正會員) 電子工學會 英文 論文誌
 第 2 卷 第 1 號 參照
 현재 고려대학교 대학원 전기
 기공학과 박사과정

成 英 權 (正會員) 電子工學會 英文 論文誌
 第 2 卷 第 1 號 參照
 현재 고려대학교 전기공학과
 교수

◆

李 炅 潤 (正會員)
 1982年 고려대학교 전기공학과
 졸업. 1984年 고려대 대학원 전기
 기공학과 졸업 (공학석사). 현재
 삼성전자 반도체부문 부천연구소
 근무 및 고려대 전기공학과 박사
 과정 재학중. 주관심분야는 반도체

◆

李 憲 用 (正會員) 電子工學會 英文 論文誌
 第 2 卷 第 1 號 參照
 현재 명지대학교 전기공학과
 부교수



체소자 프로세스 등임.