

전위 장벽에 대한 전자의 터널링 시간의 시뮬레이션

論 文

45~1~21

Simulation of Electron Tunneling Time Through a Potential Barrier

李 旭* · 李 紹 浩**
(Wook Lee · Byoung-Ho Lee)

Abstract – Simulated electron tunneling time through a potential barrier is compared with theoretical phase time. For a GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs potential barrier with 300 meV height and 3 nm or 5 nm width, simulations are performed with various average electron energies and momentum deviations. The simulation results become closer to the theoretical phase time as the average electron energy decreases and as the momentum deviation decreases. It is also shown that a transmitted(tunneled) electron wave packet could appear before the center of an incident wave packet arrives at the potential barrier, which is due to the peak spectrum shift in the momentum space after tunneling.

Key Words : Tunneling Time, Phase Time, Potential Barrier, Electron Tunneling

1. 서 론

에너지 장벽보다 낮은 에너지를 가진 입자가 그 장벽을 터널링(tunneling)하는 현상은 잘 알려져 있으나, 입자가 이러한 에너지 장벽을 터널링하는데 걸리는 시간은 40여년 동안 계속 논의되어 온 주제이다. 위상 시간(phase time)이라는 개념적으로 간단한 시간이 터널링 시간으로 일찌기 Bohm과 Wigner에 의해 제안되었으며[1,2], 이 밖에도 dwell time, Larmor clock time 등이 제안되었다[3-5]. 뿐만 아니라, 최근에는 transmission line technique을 사용한 방법도 연구되었다[6,7]. 후자의 방법은 독특한 특성을 가지는데, 그것은 터널링 시간이 항상 ‘고전적 시간(classical time)’보다 길다는 것이다. 여기에서, 고전적 시간이란 에너지 장벽이 없을 때 같은 거리를 그 입자가 통과하는데 걸리는 시간이다.

그러나, 최근 Chiao 그룹의 실험에 의해, 광자(photon)의 wave packet peak의 터널링 시간이 ‘고전적 시간’인 빛의 속도 보다 빠를 수 있다는 것이(superluminal) 보여졌다[8]. (Front end의 속도는 빛의 속도보다 빠르지 않기 때문에 이 현상이 Einstein의 인과율에는 위배되지 않는다.) 또한, Chiao는 위상 시간이 터널링 시간으로 가장 적합한 모델임을 밝혔다. 따라서, 위상 시간이 물리학자들에 의해 다시 주목을 받게 되었다. 실용적인 관점에서 보다 의미가 있는 것은 전자(electron)의 터널링에 대한 연구이다. 전자의 터널링에 대한 위상 시간을 계산하는 것은 광자의 경우보다 수월하다. 실제로, 광자의 경우 파동방정식을 전자와 같이 질량을 가진 입자의 Schrödinger 방정식과 비교하여 그 위상 시간을 유추한다[9]. 현재의 터널링 소자에서의 동작 속도는 터널링 시간이 아니라 RC 시정수에 의

해 제한받는다. 그러나, 동작 속도의 물리적인 기본 한계로서 터널링 시간에 대해 연구할 필요가 있다. 전자의 터널링은 광자의 터널링과 몇 가지 점에서 다르다. 대표적인 점이 전자의 wave packet은 터널링 후 평균 속도가 빨라진다는 것으로 이는 일찌기 Hartman에 의해 지적된 바 있다[10].

본 논문에서는 하나의 에너지 장벽을 터널링하는 전자에 대하여 이러한 점을 고찰하였고, 저자들이 아는 한 최초로 시뮬레이션에 의한 터널링 시간을 이론적 위상 시간과 비교하였으며, Gaussian wave packet의 dispersion에 따른 터널링 시간의 변화도 고찰하였다. 시뮬레이션 tool로는 INTERQUANTA[11]를 사용하였다. 전자의 위상 시간에 대한 타당성은 궁극적으로 실험에 의하여 검증되어야 할 것이다. 현재의 소자에서의 한계로 인해 이것이 어려우므로, 본 논문에서 취하는 time-dependent Schrödinger 방정식을 사용한 시뮬레이션과의 비교는 위상 시간을 검증하는 1차적 수단이 될 것이다. II장에서는 위상 시간의 이론적 유도를 소개하고 III장에서는 시뮬레이션 결과에 대해 논의한다.

2. 위상시간

그림 1과 같이 높이 V_o , 두께 d 인 에너지 장벽에 다음과 같은 Gaussian wave packet $\psi_{inc}(x, t)$ 가 입사된다고 하자.

$$\psi_{inc}(x, t) = M_o \int_{-\infty}^{\infty} w(k) \exp i \left\{ k(x + x_o) - \frac{E(k)t}{\hbar} \right\} dk \quad (1)$$

여기에서, M_o 는 규격화 상수이고, $-x_o$ 는 시작 $t=0$ 에서의 wave packet의 위치를 나타내며, $w(k)$ 는 k_o 를 중심으로 한 k -공간에서의 Gaussian 분포함수로서 다음과 같이 표시된다.

$$w(k) = \exp \left\{ -\frac{(k - k_o)^2}{2\sigma_k^2} \right\} \quad (2)$$

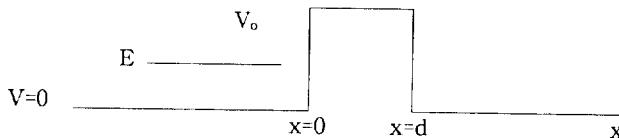
* 正會員 : 서울大 大學院 電氣工學科 碩士課程

** 正會員 : 서울大 工大 電氣工學科 專任講師 · 工博

接受日字 : 1995年 7月 24日

1次修正 : 1995年 8月 31日

2次修正 : 1995年 12月 1日

그림 1 단일 전위 장벽 (높이 V_o , 장벽 두께 d)Fig. 1 Single potential barrier (Height V_o , width d)

전위장벽을 투과한 후의 파동함수는 다음 식으로 표현된다. 이는 wave packet을 평면파들의 합으로 표현하고, 각 평면파 성분에 대해 해당되는 투과계수를 곱해 더한 것이다.

$$\begin{aligned}\psi_{trans}(x, t) &= M_o \int_{-\infty}^{\infty} t_B(k) w(k) \exp i \\ &\quad \left\{ k(x+x_o) - \frac{E(k)t}{\hbar} \right\} dk \\ &= M_o \int_{-\infty}^{\infty} |t_B(k)| w(k) \exp i \\ &\quad \left\{ k(x+x_o) + \phi(k) - \frac{E(k)t}{\hbar} \right\} dk\end{aligned}\quad (3)$$

여기에서 $t_B(k) = |t_B(k)| e^{i\phi(k)}$ 는 운동량 $\hbar k$ 의 평면파 입사에 대한 복소 투과 계수이다. 즉, 다음과 같은 시간에 무관한 Schrödinger 방정식의 해에 대해,

$$\psi(x) = \begin{cases} A \exp(ikx) + B \exp(-ikx) & x < 0 \\ C \exp(-\gamma x) + D \exp(\gamma x) & 0 < x < d \\ F \exp(ikx) & x > d \end{cases}, \quad (4)$$

단,

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}, \quad \gamma = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_o - E)} \quad (E < V_o), \quad (5)$$

복소 투과 계수 t_B 는 $t_B = F/A$ 로 정의된다.

위상 시간[1]은 식 (3)에서의 피적분항에서 위상이 k 에 대해 극값을 갖는 부분이 적분에 가장 큰 기여를 한다는 가정에서 얻어진다[12]. 즉,

$$\frac{\partial}{\partial k} \left\{ k(x+x_o) + \phi(k) - \frac{E(k)t}{\hbar} \right\} = 0 \quad (6)$$

으로부터 다음의 식을 얻는다.

$$t = \frac{m}{\hbar k} \left\{ \frac{\partial \phi(k)}{\partial k} + x + x_o \right\} \quad (7)$$

식 (7)은 시각 $t=0$ 에 $x=-x_o$ 에서 출발한 wave packet에 대해 전위 장벽을 통과한 후 위치 x 에 도달하는 시각 t 를 나타낸다. 따라서, 터널링 시간 δt_{phase} 는 다음과 같이 계산되며[10], 이를 위상 시간이라 한다.

$$\begin{aligned}\delta t_{phase} &= t - \frac{x_o}{v} - \frac{x-d}{v} = \frac{m}{\hbar k} \left\{ \frac{\partial \phi(k)}{\partial k} + d \right\} \\ &= \frac{m}{\hbar k \gamma} \frac{\left(\frac{2m}{\hbar^2} V_o \right)^2 \sinh(2\gamma d) - 2dk^2 \gamma (k^2 - \gamma^2)}{4k^2 \gamma^2 \cosh^2(\gamma d) + (k^2 - \gamma^2)^2 \sinh^2(\gamma d)}.\end{aligned}\quad (8)$$

여기에서, v 는 전위 장벽 밖에서의 전자의 고전적 이동 속도로서 $v = \hbar k/m$ 이다.

3. 시뮬레이션 및 토론

터널링 후의 전자의 wave packet에 대한 운동량 공간에서의 분포는 터널링 전의 분포에 각각의 운동량 성분에 대한 투과계수를 곱함으로써 얻을 수 있다. 그림 2는 똑같은 평균 운동량을 가지지만 여러 가지 편차를 갖는 Gaussian wave packet들에 대해 전위 장벽을 투과한 후의 wave packet의 운동량 공간에서의 spectrum을 보여준다. 가장 안쪽의 curve에서부터 운동량 표준편차가 5%, 10%, 15%, 20%, 25%인 경우에 대한 그림이다. 그림 2에서 보듯이, 투과하고 난 후의 최대 spectrum에 해당하는 값은 입사하기 전의 경우에 비해 증가하고, 또 dispersion이 클수록 더욱 증가함을 알 수 있다. 이는 k (또는 운동량)값이 클수록 투과율이 증가하기 때문이다. 이것이 물리적으로 의미하는 것은 입사되는 wave packet에 대한 전자의 평균에너지와 비교할 때 투과한 후의 전자의 평균에너지에는 증가한다는 것이다. 그러나, 이는 에너지보존법칙에 위배되지 않는다. 반사되는 전자들의 평균에너지는 감소하기 때문이다. 즉, 각각의 전자는 투과 또는 반사되는데, 투과된 전자들의 평균운동에너지는 증가하고 반사된 전자들의 평균 운동에너지는 감소한다. 이는 각각의 전자의 에너지에 변화가 생기는 것이 아니라, 확률적으로 큰 에너지를 갖는 전자가 투과가 더 잘되고 낮은 에너지를 갖는 전자가 반사가 더 잘되기 때문이다. 그런데, 식 (8)로 표현된 위상시간은 입사되는 전자와 반사되는 전자에 대해 같은 속도를 가정하고 유도되었다. Wave packet이 시각 $t=0$ 에서 $x=-x_o$ 에서 출발하여 시각 t 에 $x=d+x_1$ 의 위치까지 진행하였다고 할 때, 포텐셜 장벽의 원편과 오른편에서 전자의 peak spectrum을 내는 k 값 및 이에 해당하는 이동속도(또는 대략적으로 평균이동속도)를 각각 k_0 , v_0 및 k_1 , v_1 라고 한다면, 식 (8)에서 k 를 k_1 으로 취하는 것이 타당하다. 이는 이와 같은 값을 취하여 계산한 식 (8)의 값이 운동량 확률분포를 갖는 전자들에서 가장 많이 터널링되는 전자에 대하여 터널링하는데 소요된 시간이기 때문이다. 따라서, 위상 시간은 아래와 동일하다.

$$\delta t = t - \frac{x_o + x_1}{v_1}. \quad (9)$$

단,

$$v_1 = \frac{\hbar k_1}{m}. \quad (10)$$

그러나, 식 (8)에서의 k 값으로 사용해야 할 k_1 을 구하기 위해서는 그림 2에서와 같이 입사 wave packet의 운동량 공간분포에 운동량의 함수인 투과계수를 곱해주어 그 최대치를 찾는 작업을 수행해야 한다. 이 작업을 피하는 간단한 방법으로서 식 (8)의 k 값으로 k_0 (입사하기 전의 평균 k 값)을 근사적으로 취하는 방법을 생각할 수 있다. 이에 따른 오차를 뒤에 논의하고자 한다.

또 하나의 터널링 시간 Δt 를 다음과 같이 정의하면,

$$\Delta t \equiv t - \frac{x_o}{v_0} - \frac{x_1}{v_1}, \quad (11)$$

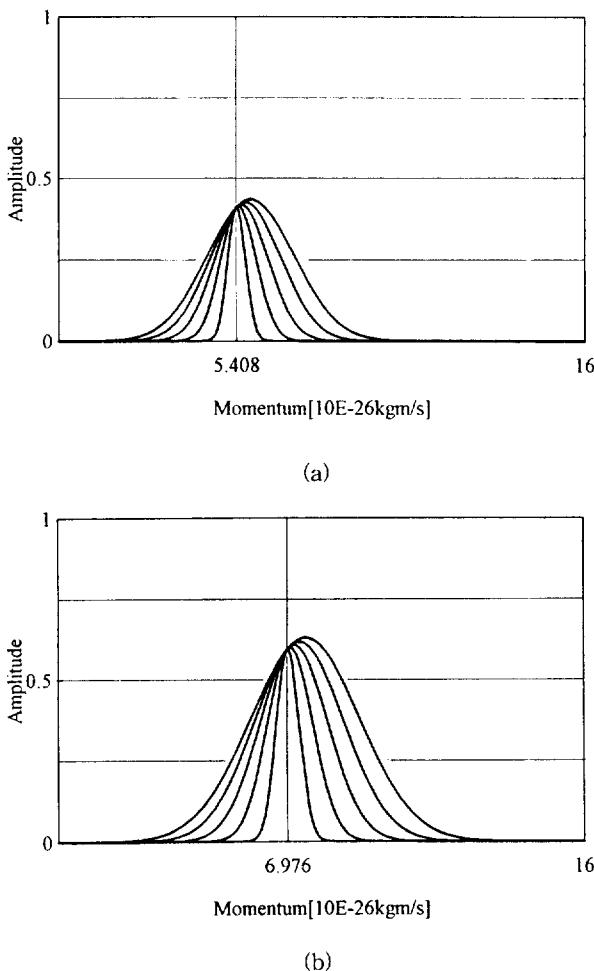


그림 2 하나의 전위 장벽(높이 : 300 meV, 두께 : 3 nm)을 통과할 때의 운동량 공간에서의 wave packet의 변화(안쪽 곡선에서부터 초기 wave packet의 운동량 공간에서의 표준편차가 각각 5%, 10%, 15%, 20%, 25%인 경우에 해당함. 비교의 편의를 위해 평균 입사 운동량에 대한 spectrum 성분을 같게 하였음.)

- (a) 터널링한 후의 Gaussian wave packet (평균 입사 에너지가 150 meV일 때)
- (b) 터널링한 후의 Gaussian wave packet (평균 입사 에너지가 250 meV일 때)

Fig. 2 Momentum space spectrums of wave packets after tunneling through a potential barrier of 300 meV height and 3 nm width (The curves correspond to the momentum standard deviations of 5%, 10%, 15%, 20%, and 25%, respectively from inside to outside. The spectrum amplitudes for the average input momentum are set to be equal for convenience.)

- (a) Transmitted Gaussian wave packet (Average incident energy : 150 meV)
- (b) Transmitted Gaussian wave packet (Average incident energy : 250 meV)

단,

$$v_o = \frac{\hbar k_o}{m} , \quad (12)$$

이는 입사하는 전자들에 대해 평균 운동에너지를 갖는 전자가 에너지 장벽에 도달하는 시각을 기준으로 하여, 가장 많이 터널링되는 전자가 에너지 장벽을 투파하여 나타나는 시간을 나타낸다. 식 (11)은 식 (9)를 이용하면 다음과 같이 표현된다.

$$\Delta t = \delta t - x_o \left(\frac{1}{v_o} - \frac{1}{v_1} \right) . \quad (13)$$

이 식에서 보듯이 Δt 는 wave packet의 초기위치 $-x_o$ 에 의존하는 값이 된다. 이는 시각 $t=0$ 에서 wave packet의 형태를 정해줄 때 x_o 값에 따라 각각의 k (또는 운동량)성분이 포텐셜 장벽에 도달하는 시간들의 차이가 달라지기 때문이다. 따라서, Δt 는 그 값이 음수인 경우도 있다. 즉, 입사하는 wave packet의 peak가 도달하기 전에 투파된 wave packet의 peak가 생성되어 진행될 수 있다.

그림 3은 소프트웨어 INTERQUANTA[11]를 사용한 시뮬레이션으로 얻은 데이터와 이론적 위상 시간을 비교한 그래프이다. GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs 이종접합의 경우를 시뮬레이션하기 위해 전위 장벽을 300 meV로 하였으며 전자의 질량은 GaAs에서의 유효질량인 0.067 m_e (m_e 는 진공에서의 전자의 질량)로 취하였다. 전위 장벽의 두께는 3 nm와 5 nm로 하였으며 입사하는 wave packet의 평균 에너지를 변화시키면서 터널링 시간을 고찰하였다. 시각 $t=0$ 에서 wave packet은 $x=-40$ nm의 위치에서 출발시켰다. Classical time은 전위 장벽이 없을 때 wave packet이 같은 거리를 통과하는데 걸리는 시간이다. 입사되는 에너지가 클수록 최대 스펙트럼에 해당하는 에너지가 장벽의 높이에 가까워져 전위장벽 위로 통과하는 k 성분이 커진다. 따라서, 입사하는 wave packet의 에너지가 커질수록 시뮬레이션에 의한 터널링 시간이 위상 시간에서 벗어나는 정도가 커짐을 볼 수 있다. 그림 3에서 'phase time 1'은 식 (8)에서 k 를 입사하는 wave packet의 peak spectrum에 해당하는 k_0 값으로 취했을 때의 계산결과이며 'phase time 2'라고 표시한 것은 k 를 투파된 wave packet의 peak spectrum에 해당하는 k_1 값으로 취했을 때의 계산결과이다. 본 논문에서 고려하는 장벽 두께 3 nm~5 nm의 GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs 구조에 대하여는 phase time 1과 phase time 2가 거의 일치하는 것을 볼 수 있다. 따라서, 식 (8)의 위상 시간의 식에서 k 값으로 k_0 을 취할 수 있다. 장벽 두께에 따라 위상 시간이 증가하지만, 점차 포화됨이 알려져 있다[10]. 본 논문에서 고려하는 GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs 구조에 대해 3 nm의 장벽 두께에 대해 이미 이러한 포화현상이 나타나는 것을 볼 수 있다. 즉, 그림 3에서 3 nm와 5 nm의 장벽 두께에 대해 100~200 meV의 입사 전자에너지에 대해 이론적인 위상 시간이 거의 일치함을 볼 수 있다. 이는 classical time과의 비교에서 확실히 드러난다. 3 nm 두께의 장벽에 대하여는 이론적인 위상 시간이 classical time보다 크지만, 5 nm 두께의 장벽에 대하여는 위상 시간이 classical time보다 짧다. 이는 위상 시간이 포화되어 장벽 두께에 덜 민감한 반면, classical time은 장벽 두께에 비례해 늘어나기 때문이다. 시뮬레이션에 의한 터널링 시간도 3 nm 두께의 경우와 5 nm 두께의 경우에 서로 큰 차이를 보이지 않음을 볼 수 있다. 이론적 위상 시간은 시뮬레이션에 의한 터널링 시간보다 크지만, 이론적 위상 시간이 대략적인 근사치로 타당함을 볼 수 있다.

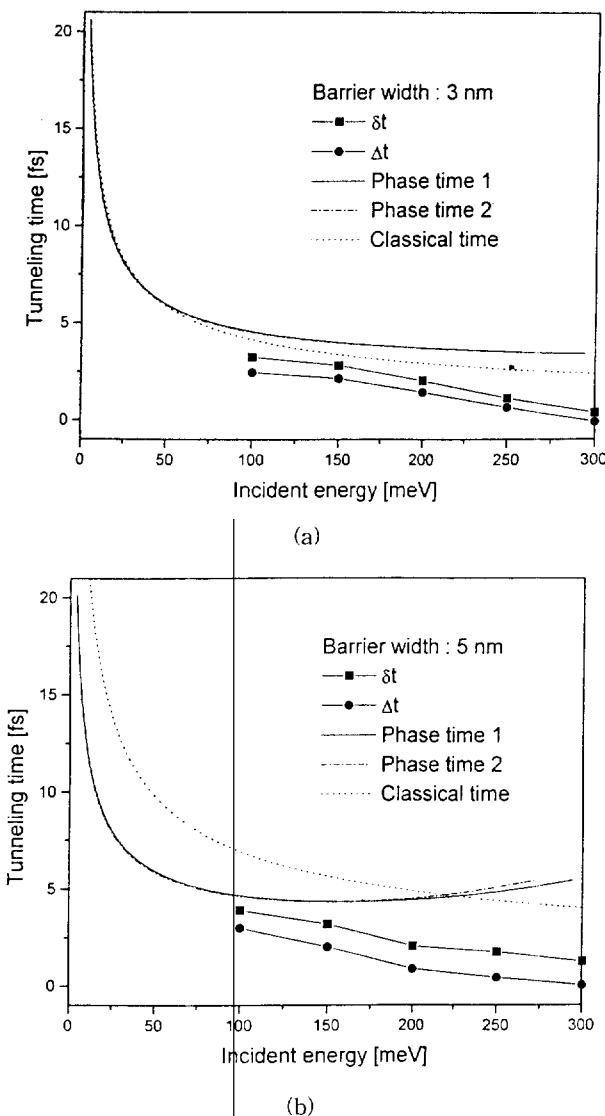


그림 3 시뮬레이션한 터널링 시간과 이론적 위상시간 (전위 장벽 : 300 meV)
(a) 장벽 두께가 3 nm인 경우
(b) 장벽 두께가 5 nm인 경우

Fig. 3 Comparison between simulated tunneling time and theoretical phase time (Potential barrier height : 300 meV)
(a) Potential barrier width : 3 nm
(b) Potential barrier width : 5 nm

그림 4는 시간에 따른 터널링 시뮬레이션의 예를 보여준다. Wave packet이 전위 장벽에 근접하여 갈 때 입사하는 파들과 반사하는 파들 간의 간섭현상을 볼 수 있다. 따라서, 장벽 근처에서의 파동합수의 형태로부터 터널링 시간을 유추하기는 힘들다. 본 논문에서는 wave packet이 장벽에 도달하기 전과 터널링한 후 충분한 시간이 경과한 상태에서의 wave packet의 위치를 기준으로 하여 식 (9)를 이용해 시뮬레이션 터널링 시간을 계산하였다.

그림 5는 Gaussian wave packet의 운동량 공간에서의 편차에 따른 터널링 시간의 변화를 보여준다. Wave packet의 k -공

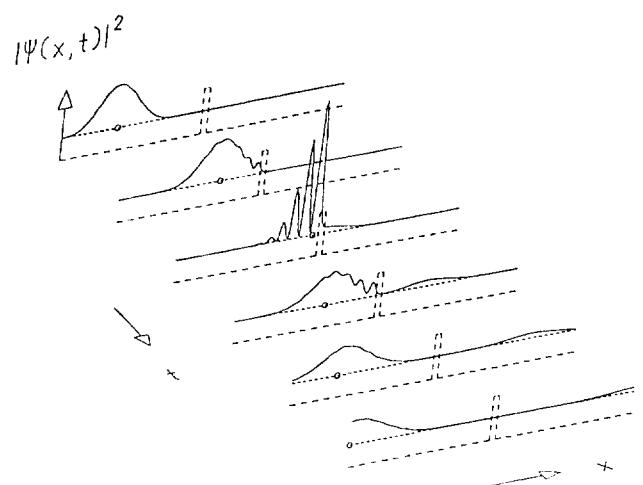


그림 4 Gaussian wave packet의 시간에 따른 전위 장벽 터널링 시뮬레이션의 예 (투과된 wave packet을 그림에 크게 나타나게 하기 위해 본 예에서는 장벽 두께를 0.4 nm로 작게 하였음.)

Fig. 4 Dynamic simulation example of the tunneling of a Gaussian wave packet through a potential barrier (To enhance the transmitted wave packet amplitude in this figure, the barrier width is taken to be as small as 0.4 nm.)

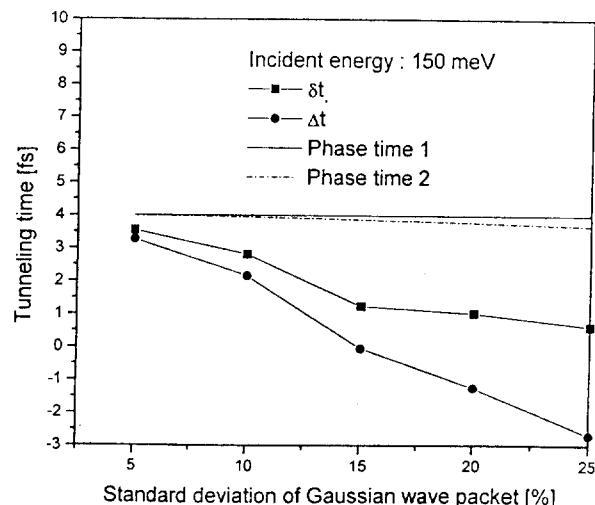


그림 5 Wave packet의 k -공간에서의 편차에 따른 터널링 시간의 영향 (전위 장벽 : 300 meV, 장벽 두께 : 3 nm, 평균 입사 에너지 : 150 meV)

Fig. 5 The effect of the wave packet spread in k -space on tunneling time (Potential barrier height : 300 meV, barrier width : 3 nm, average incident energy : 150 meV)

간에서의 분포가 괴질수록 터널링 시간이 짧아지고 위상 시간과 잘 일치하지 않음을 알 수 있다. 그림 5에서 'phase time 1'과 'phase time 2'의 의미는 그림 3에서의 경우와 같다. Δt 가 음수로 나타나는 경우는 초기의 wave packet의 peak가 전위장

벽에 도달하기 전에 투과 wave packet의 peak가 생성됨을 의미한다. 이는 이에 해당하는 운동량 성분이 초기 wave packet의 평균 운동량 성분보다 먼저 도착하여 투과하기 때문이다. 따라서, 이는 Einstein의 인과율에 모순되는 것이 아니다. 터널링 소자의 동작 속도를 궁극적으로 제한하는 터널링 속도는 Δt 가 아니라 δt 로 보아야 한다. 이는 터널링한 전자들의 운동량 중 가장 많이 발견되는 성분에 대한 터널링 시간이 δt 이기 때문이다. 아직 실용성은 없으나, 산란의 영향을 받지 않는 저온에서의 전자의 파동성을 이용한 양자소자들에 대한 연구가 이루어지고 있는 바, 이러한 경우 멀리서 출발한 전자의 wave packet에 대해 에너지 장벽을 터널링한 wave packet이 나타나는 시각이 원래의 wave packet의 중심이동속도로 계산한 장벽 도달시각보다 빠를 수 있음을 시뮬레이션에 의한 Δt 가 음수일 수도 있다는 사실이 보여주고 있다.

4. 결 론

본 논문에서는 전자가 하나의 전위 장벽을 터널링할 때의 위상 시간을 여러 가지 경우에 대해 INTERQUANTA를 이용한 시뮬레이션 결과와 비교하였다. 이론적인 위상 시간은 wave packet spread의 영향을 포함할 수는 없으나, 대략 시뮬레이션 한 결과와 같은 order를 가짐을 확인하였다. Wave packet spread가 커지면 터널링 시간은 짧아지고 이는 이론적인 위상 시간에서 더 벗어남을 볼 수 있었다. 또한, wave packet의 중심에너지가 장벽 높이에 가까워질수록 투과된 wave packet이 나타나는데 걸리는 시간이 이론적인 위상 시간에서 더 벗어남을 볼 수 있었다.

참 고 문 현

[1] D. Bohm, *Quantum Theory*, Prentice-Hall, 1951, pp. 257-261.

- [2] E. P. Wigner, "Lower limit for the energy derivative of the scattering phase shift", *Physical Review*, vol. 98, pp. 145-147, 1955.
- [3] F. T. Smith, "Lifetime matrix in collision theory", *Physical Review B*, vol. 118, pp. 349-356, 1960.
- [4] M. Büttiker, and R. Landauer, "Traversal time for tunneling", *Physical Review Letters*, vol. 49, pp. 1739-1742, 1982.
- [5] M. Büttiker, "Larmor precession and the traversal time for tunneling", *Physical Review B*, vol. 27, pp. 6178-6188, 1983.
- [6] M. Cachy, K. T. Dalton, G. S. Fisher, and A. F. M. Anwar, "Tunneling time through resonant tunneling devices and quantum mechanical bistability", *Superlattices and Microstructures*, vol. 11, pp. 113-117, 1992.
- [7] P. Thanikasalam, R. Venkatasubramanian, and M. Cahay, "Analytical expressions for tunneling time through single and double barrier structures", *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 29, pp. 2451-2458, 1993.
- [8] A. M. Steinberg, P. G. Kwiat, and R. Y. Chiao, "Measurement of the single-photon tunneling time", *Physical Review Letters*, vol. 71, pp. 708-711, 1993.
- [9] A. M. Steinberg and R. Y. Chiao, "Tunneling delay times in one and two dimensions", *Physical Review A*, vol. 49, pp. 3283-3295, 1994.
- [10] T. E. Hartman, "Tunneling of a wave packet", *Journal of Applied Physics*, vol. 33, pp. 3427-3434, 1962.
- [11] S. Brandt, and H. D. Dahmen, *Quantum Mechanics on the Macintosh*, 2nd ed., Springer-Verlag, 1995.
- [12] R. L. Liboff, *Introductory Quantum Mechanics*, 2nd ed., Addison-Wesley, 1992, pp. 238-240.

제 자 소 개

이 육 (李 旭)

1971년 6월 10일생. 1995년 2월 서울대 공대 전기공학과 졸업. 1995년 3월~현재 서울대학교 대학원 전기공학과 석사과정



이 병호 (李 炳浩)

1964년 7월 6일생. 1987년 서울대 공대 전자공학과 졸업. 1989년 서울대학교 대학원 전자공학과 졸업(석사). 1993년 University of California at Berkeley, Department of Electrical Engineering and Computer Sciences 졸업(공박). 1993년 9월~1994년 6월 동 대학원 Post Doc. 1994년 9월~현재 서울대학교 전기공학과 전임강사. 주관심분야는 광굴절 효과, 양자소자의 모델링 및 광연결

