

# 단일 이종접합 구조에서의 2차원 전자가스(2DEG)의 수치적 연산을 위한 양자역학적 분석

論 文

49C-10-3

## Quantum Mechanical Analysis for the Numerical Calculation of Two-Dimensional Electron Gas(2DEG) in Single-Heterojunction Structures

黃光撤\* · 金眞郁\*\* · 元昌燮\* · 安亨根\*\*\* · 韓得永\*\*\*

(Kwang-Chuel Hwang · Jin-Wook Kim · Chang-Sub Won · Hyungkeun Ahn · Deuk-Young Han)

**Abstract** - This paper analyzed single AlGaAs/GaAs heterojunction energy band structures by solving Schrödinger's equation and Poisson's equation self-consistently. Four different concentrations, positively ionized donors, holes in the valence band, free electrons in the conduction band and 2DEG are taken into account for the whole system. 2DEG from both of the structures are obtained and compared with the data available in the literatures. Differential capacitances are also calculated from the concentration profiles obtained to prove the validity of the single AlGaAs/GaAs system. Finally, theoretical predictions for both of 2DEGs and the capacitances show good agreement with the experimental data referred in this study. It has only an error of less than 10 percent.

**Key words** : 2DEG(Two Dimensional Electron Gas), HEMT(High Electron Mobility Transistor)

### 1. 서 론

Esaki와 Tsu[1]가 제안한 변조 도핑된 초격자(modulation doped superlattice)의 개념이 Dingle[2] 등에 의해 구현된 이후 Fujitsu에서 최초로 HEMT(High Electron Mobility Transistor)를 제작하여 이의 동작 특성을 보고하였다[3]. 이후 이를 고속 컴퓨터, 마이크로웨이브 통신, 위성통신 등에 활용하고자 변조도핑(modulation doping)에 관한 연구가 활발히 진행되어, 단일 이종접합구조의 HEMT 소자의 제작과 모델링에 큰 진전이 있었다.

HEMT 소자의 특성을 결정하는 중요한 인자는 2차원 전자 가스(2DEG)의 농도와 포화속도이다[4]. 따라서 2차원 전자 가스 농도는 소자의 설계 및 소자특성 해석에 매우 중요하다.

그동안 많은 연구자들이 다양한 방법을 이용하여 이러한 문제에 접근해 왔었다. 그 한가지 예가 matrix를 이용한 계산으로 정확한 방법 중에 하나이지만 matrix를 이용하는 방법은 많은 data point를 이용해야 하므로 많은 시간을 필요로 하는 단점이 있다. 하지만 본 연구에서 사용된 수치 해석적인 방법은 간략하고 정확하며, Schrödinger 방정식을 푸는데 matrix를 사용하지 않으므로 최종결과를 매우 빨리 얻

을 수 있다.

본 연구에서는 파동방정식과 Poisson 방정식을 이용하여 게이트 인가 전압의 변화에 대한 단일 이종 접합구조(AlGaAs/GaAs)에서 나타나는 2차원 전자가스, 양이온화 도너, 가전자대 홀, 전도대 자유전자의 농도들을 수치 해석적인 방법으로 계산한다. 또한 이러한 농도분포에 의해 소자의 정전용량을 구하고 참고문헌과 그 결과를 비교, 검증한다.

### 2. 파동 방정식

이종접합 계면에 평행한 파동함수를 평면파 라고 가정하고, 계면에 수직인 방향(z)에 대한 시간에 독립적인 파동 방정식은 다음과 같다.

$$\frac{d^2}{dz^2} \psi(z) - \frac{2m^*}{\hbar} (V(z) - E_i) \psi(z) = 0 \quad (1)$$

위 식에서  $\psi$ 는 파동함수이며,  $m^*$ 는 전자의 유효질량,  $V(z)$ 는 전위에너지,  $E_i$ 는 부밴드 전자의 에너지,  $\hbar$ 는 reduced plank 상수이다.

그림 1 과 같은 형태에서 AlGaAs 영역 I 과 GaAs 영역 II는 다음과 같은 파동 연속조건(continuity condition)을 만족시켜야 한다.

$$\frac{1}{m_1^*} \frac{d\psi}{dz} \Big|_I = \frac{1}{m_2^*} \frac{d\psi}{dz} \Big|_{II} \quad (2)$$

\* 非 會 員 : 建 國 大 電 氣 工 學 科 博 士 課 程

\*\* 非 會 員 : 建 國 大 電 氣 工 學 科 卒 業 (碩 士)

\*\*\* 正 會 員 : 建 國 大 電 氣 工 學 科 教 授 · 工 博

接 受 日 子 : 1999 年 12 月 31 日

最 終 完 了 : 2000 年 7 月 5 日

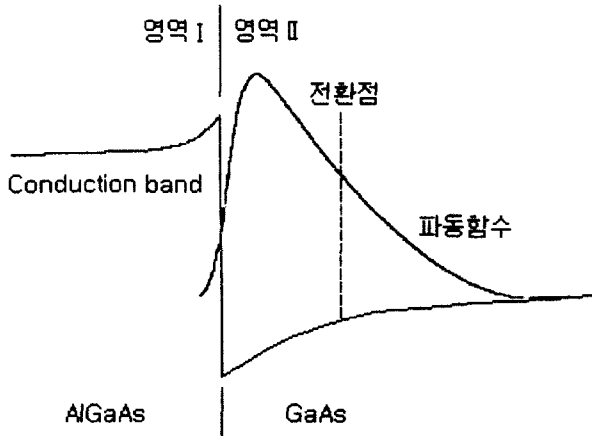


그림 1. 단일이종접합의 전위에너지와 파동함수

이것은 물질의 변화에 따라 파동함수는 급격히 변화하지 않음을 뜻한다.

$V(z)$ 를 따라 식(1)을 풀어 무한구간에서 거리에 따라 적분을 취하면 부밴드(subband) 별로 각각의 에너지  $E_i$ 를 구할 수 있다.

전위 에너지(potential energy)  $V$ 는 거시 에너지 준위  $V_E$ 와 주기적인 격자의 에너지 준위  $V_L$  그리고 산란 전위로 결정의 결합이나 불순물, 이온의 진동으로 발생하는 광량자, 혹은 전자와 전자간의 상호 작용에 의해 발생된  $V_X$ 의 합으로 간주되어질 수 있다. 여기서  $V_E$ 는 외부에서 인가된 전압이나 공간전하의 분포로서 이 부분이 에너지 밴드를 그릴 때 주로 사용되는 부분이다. 여기서 사용된  $V$ 는  $V_E(z)$ 를 의미하며  $V_L(z)$ 는  $m^*$ 로써 변환되어 계산된다.

### 3. Numerov 방법

Numerov 방법[5]은 상미분 방정식에서 사용되는 방법 중 하나로, 특히 1차 도함수가 없는 파동방정식을 해석하는데 있어 유용하다.

파동 방정식을 Numerov 방법으로 해석할 수 있도록 간략하게 나타내면 식(3)와 같다.

$$y^{(2)}(z) = A(z) y(z) \tag{3}$$

$$g(A_i) = 1 + \frac{h^2}{12} A_i \tag{4}$$

여기서  $y^{(2)}$ 는  $y$ 의 2차도함수를 의미하며, 함수  $A(z)$ 는 입자의 고유치와 전위 에너지를 포함하고 있는 함수이다.

이 방법은 테일러 급수를  $z$ 에서 미소 거리  $+h$ 와  $-h$ 에 대해 전개한 것을 홀수(1,3,...)차수 도함수 부분과 4차 도함수 부분을 제거, 정리하여 유도해 낼 수 있다.

$$y_{i+1} = \frac{\{(12 - 10g_i)y_i - g_{i-1} \cdot y_{i-1}\}}{g_{i+1}} + f(err) \tag{5}$$

식(5)를  $y_{i-1}$ 에 대하여 전개하면  $z$ 에 대해 역방향으로 적분을 수행하는 식이 유도되며, 여기서 함수  $f(err)$ 는 계산점에서의 오차로  $h^6$  함수이다.

$$A(z) = V(z) - E \tag{6}$$

식(3)의  $A(z)$ 를 파동방정식에서 이것에 해당하는 부분으로 일반화하여 표현하면 위의 식(6)과 같은 형태를 갖는다. 여기서  $V(z)$ 는 전위 에너지를,  $E$ 는 음의 값을 갖는 입자의 에너지, 즉 부밴드 에너지를 말한다.

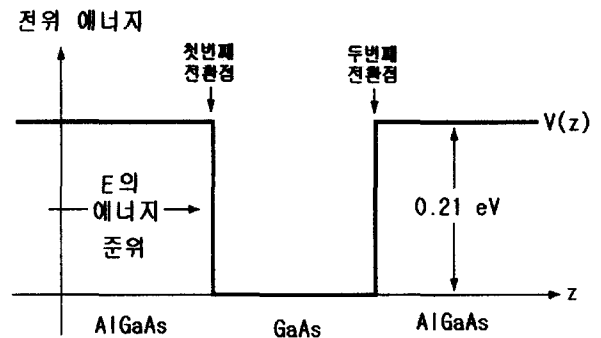


그림 2. Al<sub>0.27</sub>Ga<sub>0.73</sub>As/GaAs 양자우물

여기서 그림 2와 같이  $V(z)$  값을 가질 경우  $z$ 이 크거나 작을 때 즉, AlGaAs 영역에서 함수  $A$ 는 양의 값을 갖고, 중간 영역 즉, GaAs 에서는 음의 값을 갖는다. 이럴 경우 파동함수의 해는  $A$ 가 양의 값을 갖는 양쪽 끝으로 지수함수적으로 감소하고 음의 영역에서는 진동한다. 여기서  $A$ 가 0이 되는  $z$ 인 AlGaAs와 GaAs의 경계점을 전환점(turning point)이라고 한다.

$$y(2h) = y(h) \exp \left[ \int_n^{2n} A(z)^{1/2} dz \right] \tag{7}$$

AlGaAs 영역에서 파동함수는 식(7)과 같이 나타날 수 있으므로, 첫 번째 전환점에서  $-\infty$ 까지 지수적으로 감소하고, GaAs 영역에서는 진동하게 된다. 그러나 두 번째 전환점에서  $+\infty$ 까지는 이론적으로 지수적으로 감소해야 하나 오차가 증폭되어 그 값이 증가할 수 있으므로, 이것은 역으로 계산을 행하면서 두 번째 전환점에서 발생하는 오차의 증폭을 없앨 수 있다. 방법적으로 Numerov 적분에 있어  $-\infty$ 에서 두 번째 전환점까지 적분을 수행하고 그 지점 이후부터는 반대 방향, 즉  $+\infty$ 에서부터 적분을 수행하는 것이다. 그리고 에너지의 고유치가 맞는 값이라면, 이  $-\infty$ 부터 적분해온 함수와  $+\infty$ 에서부터 계산을 수행한 함수가 구간을 나눈 두 번째 전환점에서 만나게 된다.

파동방정식의 해석에서 사용하는 Numerov 방법은 에너지 준위 함수  $V$ 가 상수로 정의되지 않았고, 반복 계산을 진행해 나감에 따라 파동함수와 Poisson 방정식의 해에

의해 재 계산되어지고, 이것이 다시 초기 값으로 되돌림 되어 연산이 수행된다. 고유치 또한 이전 계산에 의해 다시 초기화되어 계산을 반복시켜 나간다.

파동방정식을 식(4)로 나타낼 때  $A(z)$ 는 다음과 같다.

$$A(z) = -\frac{2m^*(E-V)}{\hbar} \quad (8)$$

찾고자 하는 에너지 고유치  $E$  는 구간  $\alpha$ 에서  $\beta$  사이에 0 의 값을 가지며 또한 양자수(Quantum number)  $Q_{no}$  에 해당하는 파수를 가져야 하므로,

$$\begin{aligned} \Psi &\propto \sin(k\pi z - \xi) & A(z) &\geq 0 \text{ 일 때} \\ \Psi &\propto e^{\pm Cx} & A(z) &\leq 0 \text{ 일 때} \end{aligned}$$

여기서  $\xi$  는 sin 함수의 지연을 말하고,  $k$ 는 파수를 의미 하며,  $C$ 는 임의의 상수이다. 이때 양자 우물의 폭이  $a$  인 무한 전위에너지 양자 우물 해석에서

$$k^2 = \left(\frac{Q_{no}\pi}{a}\right)^2 = \frac{2m^*(E_i - V)}{\hbar^2} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} E_i &= \frac{1}{2m^*} \left(\frac{\hbar Q_{no}\pi}{a}\right)^2 + V \\ &= \frac{\hbar^2 Q_{no}^2}{8a^2 m^*} \end{aligned} \quad (10)$$

이므로, 파동방정식을 다시  $A(z)$ 에 적용하여 식(5)에 나타난 Numerov 적분식으로 정리하여 다시 표현하면, 최종적으로 식(8)은 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\begin{aligned} A' &= -\frac{\pi\hbar m^*}{3}(E-V) \\ &= \frac{2}{3} m^* \pi^2 (E' - V) \end{aligned} \quad (11)$$

여기서  $E'$ 은 최대 에너지와 최소 에너지 사이의 평균값으로 식(10)에 의해 그 최대 최소가 예측·설정되고, 반복 계산을 통해 범위를 좁혀가며 부밴드 전자의 에너지인  $E_i$ 를 계산해내게 된다

#### 4. 전하의 분포

파동방정식 식(1)의 계산에 사용되는  $z$ 축 방향으로의 전위에너지  $V$ 는 다음과 같다.

$$V = -q\phi_e + E_b \quad (12)$$

$E_b$ 는 이종접합계면에서 에너지 장벽을 형성하는 함수이며,  $q$ 는 전하의 크기를 나타내고, 전위 에너지 함수  $\phi_e$ 는 Poisson 방정식의 해로부터 계산되어진다. 여기서  $V_X(z)$ 는

무시하였다.

$$\frac{d^2\phi_e}{dz^2} = \frac{Q_{ex}}{\epsilon}$$

$n_v, n_c$ 는 각각 홀과 전자 분포이고,  $n_d^+$ 는 양으로 이온화된 도우너의 농도이며,  $\epsilon$ 은 물질에 따른 유전율이다. 여기서  $Q_{ex}$ 는 여분의 전하를 나타내며 전하중성조건으로 무시하여 사용한다.

이때 2DEG의 농도는 2DEG 농도분포함수인  $n_s$ 를 거리에 따라 전구간에 걸쳐 적분으로 계산해 낼 수 있다.

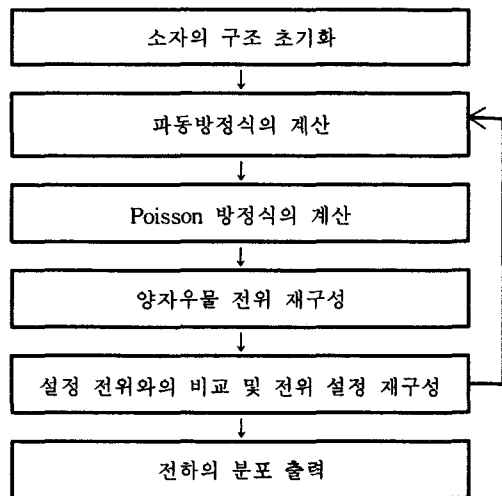
그러나 AlGaAs표면층에 전극을 형성한 AlGaAs/GaAs의 이종접합 구조의 경우, 금속 접합면과의 공핍층으로 인하여 전하 중성조건을 사용할 수 없으므로 위식에서 여분의 전하  $Q_{ex}$ 는 여분의 전하  $Q = -q(n_d^+ + n_v - n_s - n_c)$ 를 전 구간에 걸쳐 구함으로써 나타내어 페르미 준위  $E_F$ 를 구한다.

#### 5. 시뮬레이션

식(1)에서 예측한 에너지로 Numerov방법을 통해 파동방정식의 해를 구하면서, 그 변화치가 일정한 오차 안에 들어올 때까지 반복 계산을 하였으며, 이 방법으로 임의의 전위 에너지  $V(z)$ , 즉 임의의 에너지 밴드 구조에서 파동함수를 연산해 낼 수 있다. 이러한 계산 과정의 단점으로는 선택되어진 영역의 에너지만이 계산되어 질 수 있다는 것이다. 그러나 300K에서  $E_0, E_1, E_2$ 까지의 전자 농도가 91.4%를 차지하므로,  $E_2$ 에너지 영역으로 한계를 설정하였다[6].

파동함수  $\Psi$ 와 전위 에너지인 전도대 에너지  $E_c$ 가 수렴할 때까지 수치 해석적인 반복 계산을 통하여  $E_0, E_1, E_2$  3개의 부밴드(subband) 에너지 준위와 파동함수 그리고 전도대역의 self-consistent한 해를 얻었다. 본 논문의 분석 방법을 예측하기 위해 단일 이종 접합구조(AlGaAs/GaAs)를 선택하였다. 표 1은 해석에 사용된 흐름도이다.

표 1. 흐름도



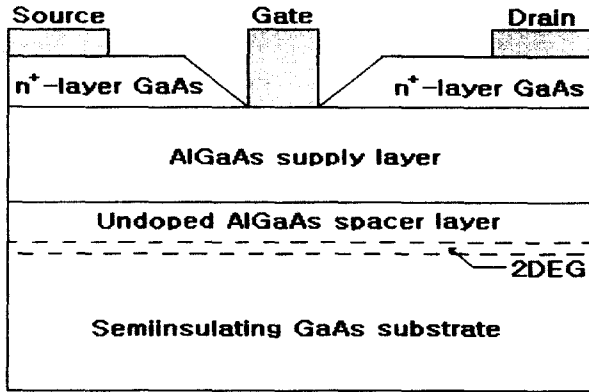


그림 3. 시뮬레이션에 사용된 AlGaAs/GaAs 구조

그림 4과 그림 6는 게이트 전압을 각각 0V, 0.4V을 인가 하였을 때의 전도대와 파동함수  $\psi_0, \psi_1, \psi_2$ 를, 그림 5와 그림 7은 인가 전압에 따른  $n_d^+, n_c, n_s$ 를 나타내고 있다.  $n_s$ 의 최대치는 이중접합 계면(AlGaAs/GaAs)으로부터 70~80 Å 대에 위치하고 있다. 또한 홀의 농도인  $n_v$ 는 다른 농도치인  $n_d^+, n_c, n_s$ 와 비교하여 100~1000배 이상 작게 계산되고 있어, 이를 함께 나타내었을 때 거의 나타나지 않았으므로 이것은 무시하여 도시하지 않았다.

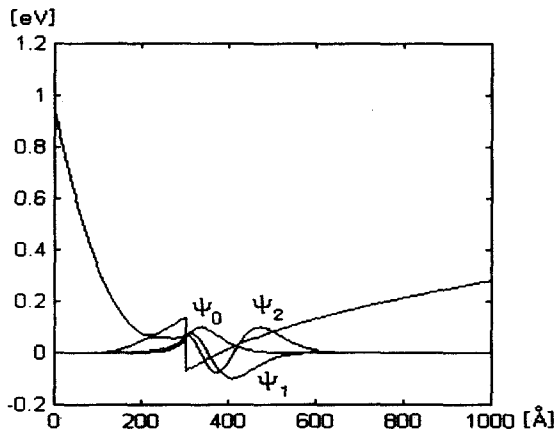


그림 4. Al<sub>0.27</sub>Ga<sub>0.73</sub>As/GaAs 단일 이중 접합 구조  
게이트 전압 0V 인가 시 전도대와  $\psi_0, \psi_1, \psi_2$

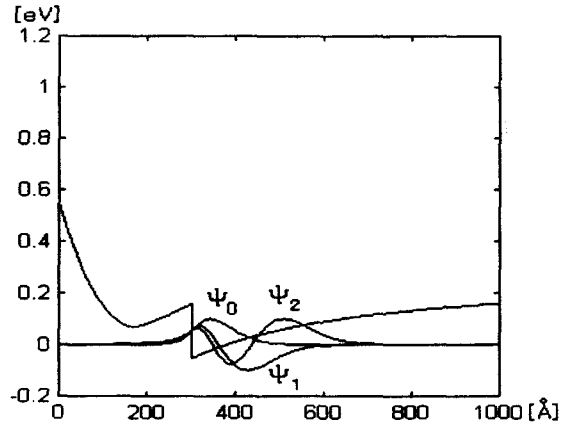


그림 6. Al<sub>0.27</sub>Ga<sub>0.73</sub>As/GaAs 단일 이중 접합 구조  
게이트 전압 0.4V 인가 시 전도대와  $\psi_0, \psi_1, \psi_2$

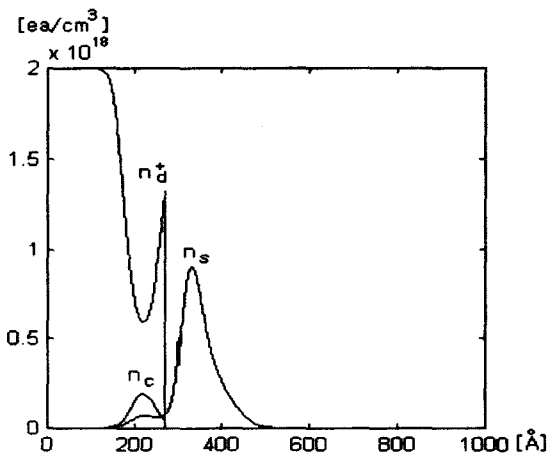


그림 5. Al<sub>0.27</sub>Ga<sub>0.73</sub>As/GaAs 단일 이중 접합 구조  
게이트 전압 0V 인가 시  $n_d^+, n_c, n_s$ 의 분포

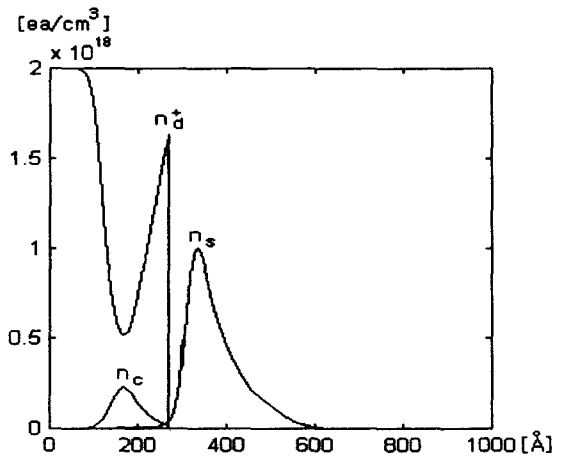


그림 7. Al<sub>0.27</sub>Ga<sub>0.73</sub>As/GaAs 단일 이중 접합 구조  
게이트 전압 0.4V 인가 시  $n_d^+, n_c, n_s$ 의 분포

그림 4과 그림 6에서 AlGaAs와 GaAs간의 전위 장벽이 무한이 아니므로 이곳으로 파동함수가 침투되고 있음을 볼 수 있다. 또한 그림 5와 그림 7에서 AlGaAs/GaAs 물성에 따라 상태밀도가 상이한 관계로  $n_s$ 가 그 경계점에서 불연

속 하게 나타나고 있다.

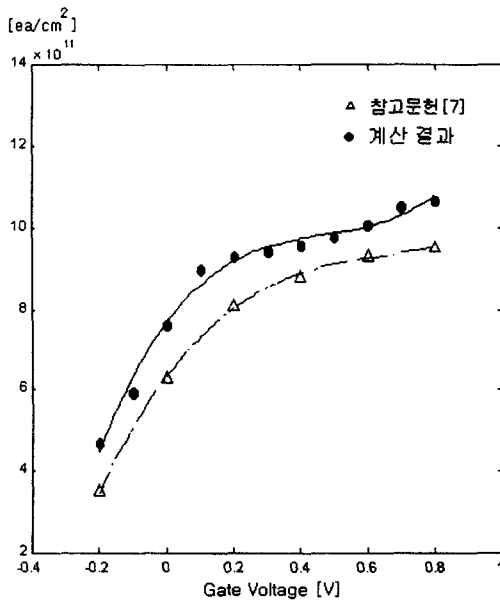


그림 8. Al<sub>0.27</sub>Ga<sub>0.73</sub>As/GaAs 단일 이종 접합 구조 게이트 전압에 따른 2DEG의 변화

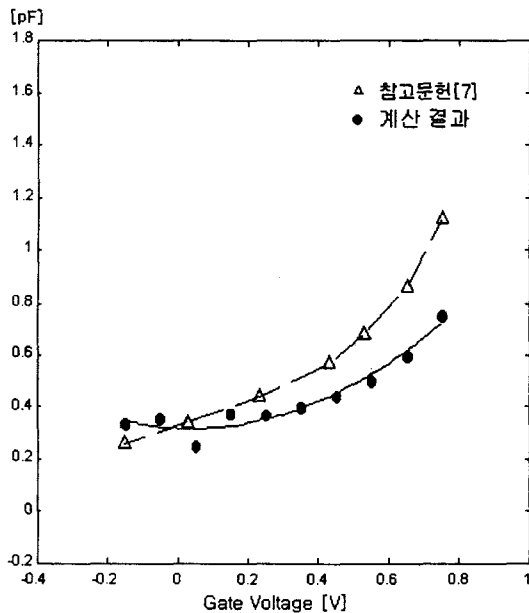


그림 9. Al<sub>0.27</sub>Ga<sub>0.73</sub>As/GaAs 단일 이종 접합 구조 게이트 인가전압에 따른 게이트 capacitance의 변화

그림 8은 게이트 전압에 따른 2차원 전자 개스 농도를 참고문헌[7]에 나타난 실험치와 함께 나타내고 있다. 참고문헌 [7]의 결과는 에너지 준위를  $E_0$ ,  $E_1$  상태까지만을 가정하여 85-90% 정도의 전자 농도만을 계산한 것이고, 본 논문에서는  $E_2$ 까지 계산하였으므로 농도가 높게 나타나고 있어 위의 가정을 고려하면 유사한 농도 변화로 예측할 수 있다.

그림 9는 게이트 전압에 따른 정전 용량의 변화를 나타낸 것으로, 게이트 전압이 높아질수록 계산결과와 측정치의 차이가 나고 있는데, 이는 본 시뮬레이션에서 AlGaAs 영역에서의 전자 농도인  $n_c$ 가 낮게 계산되고, 0 V 이하부분에서는  $n_d^+$ 가 높게 계산되었기 때문으로 분석되었다.

### 6. 결 론

본 연구는 단일 이종 접합 구조(AlGaAs/GaAs)를 선택하여 파동방정식을 해석하는데 유용한 Numerov 방법을 적용하여 3개의 부밴드(subband) 에너지 준위와 파동함수, 2차원 전자개스 농도와 전도대역의 self-consistent한 해를 얻었다. 이는 매개변수를 변경함으로써 lattice-match된 이종 접합소자(HEMT) 또는 적외선 센서(IR detector) 등의 설계 및 전기적·광학적 특성을 추측하는 데에 많은 기본 연구가 되리라 판단된다.

이로서 양자우물 소자 특성 연구 및 디자인에 활용할 수 있고, 설계시 미리 검증해봄으로써 설계의 효율성을 확보할 수 있는 Schrödinger-Poisson equation solver를 개발하였다.

또한 단일 이종접합구조 분석에 사용된 수치적 연산 방법을 AlGaAs/InGaAs/GaAs와 같은 이종 이종접합구조의 2차원 전자 개스 농도와 전도대역, 부밴드 에너지 준위, 그리고 파동함수 등을 구하는 과정에도 쉽게 적용할 수 있다.

### 참 고 문 헌

- [1] L. Esaki, R. Tsu, "Superlattice and negative conductivity in semiconductors", IBM Research Center, Internal Report no. RC2418, March 1969.
- [2] R. Dingle, H.L. Störmer, A.C. Gossard, W. Wiegmann, "Electron mobilities in modulation-doped semiconductor heterojunction superlattices", Applied Physics Letter, vol. 33, pp.665-667, October 1978.
- [3] T. Mimura, S. Hiyamizu, T. Fujii, Nanbu, "A new field-effect transistor with selectively doped GaAs/n-AlGaAs heterojunction", Japanese Journal of Applied Physics. vol. 19, pp L225-L227, May 1980.
- [4] N.H. Sheng, C.P. Lee, R.T. Chen, D.L. Miller, "GaAs/AlGaAs double heterostructure high electron mobility transistors", IEEE International Electron Device Meeting Conference, pp352-355, 1984.
- [5] P. C. Chow, "Computer Solution to the schrödinger Equation", Journal of Applied physics. vol. 40, pp. 730-734, May 1972.
- [6] R. Anholt, Electrical and Thermal Characterization of MESFETs, HEMTs, and HBTs, Artech House, 1995.
- [7] H. Ahn, M. El-Nokali, "An Analytical Model for High Electron Mobility Transistors," IEEE Transactions on Electron Devices, vol. 41, no. 6, pp. 874-878, June 1994.

저 자 소 개



황 광 철 (黃 光 撤)

1971년 11월 21일생. 1997년 건국대 전기 공학과 졸업. 1999년 동 대학원 전기공학과 졸업(석사). 1999~현재 한국특수시계, 2000년~현재 동 대학원 전기공학과 박사 과정

Tel : 02-883-2274

E-mail : KChwang@korock.co.kr



안 형 근 (安 亨 根)

1983, 1985 연세대학교 전기공학과 졸업, 1993년 Dept. of EE, University of Pittsburgh(Ph.D.), 1986~1990 LG 반도체 연구소, 1995년~현재 건국대학교 전기공학과 부교수.

E-mail: hkahn@konkuk.ac.kr

http://pof.konkuk.ac.kr



김 진 옥 (金 眞 郁)

1975년 6월 21일생. 1998년 건국대 전기 공학과 졸업. 2000년 동 대학원 전기공학과 졸업(석사). 2000년~현재 아비브 정보 통신 연구원

Tel : 02-3452-6042



한 득 영 (韓 得 永)

1947년 7월 5일생, 1974-1977 현대중공업, 1979,1984년 연세대학교 대학원졸(석사,박사), 1979년 ~현재 건국대학교 전기공학과 교수, 1981~1982 Univ. of Texas (Austin) 1993~1993 Univ. of Illinois (Urbana/

Champaign) 방문교수

E-mail : dyhan@konkuk.ac.kr

http://pof.konkuk.ac.kr



원 창 섭 (元 昌 燮)

1968년 11월 20일생. 1995년 건국대 전기 공학과 졸업. 1998년 동 대학원 전기공학과 졸업(석사). 1998년~현재 동 대학원 전기공학과 박사과정, 1994~1997 (주)해인, 1998~1999 영진전문대학 겸임교수, 1999~

현재 동서울대학 초빙교수.

Tel : 02-447-8850

E-mail : won1@konkuk.ac.kr