

$Al_xGa_{1-x}As - GaAs$ 양자우물에서 시도함수에 따른 결합에너지

Binding Energy in the n-type $Al_xGa_{1-x}As - GaAs$ Quantum well according to the Trial Function

이건영¹, 이무상¹, 전상국^{1,a}

(Kun Young Lee¹, Mu sang Lee¹, and Sang Kook Chun^{1,a})

Abstract

The binding energy in the n-type $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ quantum well is calculated. The shooting method, modified from the finite difference method, is used for the calculation of the subband energy level and its wave function. In order to account for the change of the potential energy due to the charged particles, impurities and electrons, the self consistent method is employed. The wave function used for the calculation of the binding energy is assumed to be composed of the envelope function and hydrogenic 1s function. Then, the binding energies calculated by taking into account for two different types of the hydrogenic 1s function are compared.

Key Words : Shooting method, Trial function, Binding energy

1. 서 론

Molecular beam epitaxy(MBE)나 metal organic chemical vapor deposition(MOCVD) 등의 박막 성장법을 이용한 이종접합구조를 가진 양자 소자의 개발은 저 전력 측면이나 고 집적화 측면에서 매우 획기적이라 할 수 있다. 양자 소자의 동작원리는 전자의 분포와 그 움직임을 통하여 이해할 수 있으며 이를 위해서는 불순물과 전자의 결합에너지를 알아야 한다. 최근엔 결합에너지를 임의로 조절하여 shallow impurity에서 내부천이를 이용한 소자를 만들려는 시도가 있다. 반도체의 shallow impurity에서 내부천이(internal transition)에 따른 에너지 변화는 매우 작으므로 원적외선의 방출기(emitter)와 검출기(detector) 등에 이용할 수 있으며[1,2], 불순물 에너지준위 간에 개체 수 반전(population inversion)을 통해 shallow impurity를

기반으로 한 terahertz 레이저의 가능성도 보여준다[3,4].

양자우물구조에서 불순물과 전자의 결합에너지에 대한 이론적 연구는 지금까지 많은 사람들에 의해서 진행되어 왔다. Bastard[5]가 양자우물 벽의 높이를 무한대로 설정한 후 결합에너지를 구한 후, 자기장, 전기장, 그리고 응력변형이 결합에너지에 미치는 영향이 연구되었다[6,7]. Conduction valley의 위치나 양자우물의 형태에 따른 결합에너지의 변화 또한 연구되었다[8,9]. 이들은 bulk 상태에서 정확한 결합에너지 값을 보여주는 계산방법인 hydrogenic-effective-mass theory를 도입하여 양자우물에서의 결합에너지를 계산하였다. 결합에너지 계산 시, 양자우물구조에서 사용되는 파동함수는 두 함수의 곱으로 표시한다. 하나는 쿨롱 퍼텐셜이 없는 경우에 양자우물에서의 파동함수이고, 또 다른 함수는 수소원자에서의 1s 함수이다. 불순물과 전자사이의 쿨롱 힘에 의해 첨가된 1s 함수를 사용할 때, 양자우물에서 전자의 움직임이 성장방향으로 제약된다는 이유로 성장방향을 고려하지 않기도 한다[8,9]. 이 방법은 간결한 함수형태의 사용으로 인해 계산시간이 적게 소요된다는 장점이

1. 인하대학교 전자전기공학부

(인천시 남구 용현동 253)

a. Corresponding Author : skc@inha.ac.kr

접수일자 : 2005. 5. 14

1차 심사 : 2005. 7. 16

심사완료 : 2005. 7. 25

있지만 성장방향을 무시함으로써 계산 값의 오류를 발생시킬 수 있다. 따라서 1s 함수의 형태에 따른 계산상의 오류에 대한 연구가 절실한 입장이다.

본 논문에서는 양자우물 구조에서 에너지 준위와 그 파동함수를 구하기 위하여 finite difference method(FDM)를 개량한 shooting method[10,11]를 이용하였으며, 불순물 및 전자의 분포에 따른 퍼텐셜 에너지의 변화를 고려하기 위하여 self consistent method를 사용하였다. 쿨롱 퍼텐셜에너지에 의해 첨가된 1s 함수의 형태에 따라 결합에너지를 계산하였으며, 양자우물 구조에 따라 결합에너지 값을 비교하였고, 불순물의 농도 및 분포에 따른 변화도 연구하였다.

2. 본 론

박막 층을 성장시켜 만든 양자우물에서 전자의 에너지 준위와 그 파동함수는 아래의 Schrodinger 방정식으로부터 구할 수 있다.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*(z)} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right] F_j(z) = E_j F_j(z) \quad (1)$$

$m^*(z)$ 는 각 박막 층에서의 유효질량이고, $V(z)$ 는 박막 층에 의한 퍼텐셜에너지의 변화와 이온화된 불순물과 전자의 분포에 따른 퍼텐셜에너지의 변화를 포함한다. 식 (1)에서 구한 전자의 에너지 레벨과 그 파동함수를 이용하여 불순물로부터 이온화된 자유전자의 분포를 구할 수 있다.

$$n(z) = \frac{m^*(z)k_B T}{\pi \hbar^2} \sum_j \ln \left(1 + e^{\frac{E_j - E_F}{k_B T}} \right) |F_j(z)|^2 \quad (2)$$

k_B 는 Boltzmann 상수이며, T 는 온도이고, E_F 는 페르미 에너지이다. E_j 는 양자우물에 있는 j 번째 에너지 준위이고 $F_j(z)$ 는 그 파동함수를 나타낸다. 전자의 분포를 Poisson 방정식에 적용하면 불순물과 전자의 분포에 따른 새로운 퍼텐셜을 구할 수 있다.

$$\frac{d}{dz} \left(\epsilon(z) \frac{d}{dz} \Phi(z) \right) = -e [N_D^-(z) - n(z)] \quad (3)$$

$\epsilon(z)$ 는 유전율이고 $\Phi(z)$ 는 수정된 퍼텐셜(corrected potential)이다. $\Phi(z)$ 에 전자의 전하량을 곱해서 퍼텐셜에너지 $V(z)$ 를 얻을 수 있다. (1)~(3)의 계

산은 전자의 분포, 페르미 에너지, 그리고 퍼텐셜 에너지가 수렴할 때까지 식 반복한다. 이 때, 식 (1)과 (3)은 FDM을 개량한 shooting method [10,11]를 이용하여 풀 수 있다.

불순물에 갇힌 전자는 자유전자에 비해 불순물과 전자사이의 쿨롱 힘에 기인한 퍼텐셜에너지를 추가로 겪게 된다. 쿨롱 힘에 의해 안정화된 에너지는 두 입자 사이의 거리에 반비례하므로 불순물에 갇힌 전자의 해밀토니안은 아래와 같다.

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m(z)} \nabla^2 + V(z) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon(z)\sqrt{\rho^2 + (z-z_0)^2}} \quad (4)$$

z_0 는 불순물의 위치를 나타낸다.

식 (4)의 해밀토니안을 만족하는 파동함수는 두 함수의 곱으로 근사화 할 수 있다. 하나는 식 (1)에서 얻은 파동함수 $F_j(z)$ 이고, 또 다른 함수는 식 (4)에서 두 번째 항을 고려하지 않은 상태에서 얻을 수 있는 hydrogenic 1s 함수로서 아래와 같다.

$$\phi_{2D}(\rho) = e^{-\frac{\rho}{\lambda}} \quad (5a)$$

$$\phi_{3D}(\rho, z) = e^{-\frac{\sqrt{\rho^2 + (z-z_0)^2}}{\lambda}} \quad (5b)$$

Bulk 반도체에서 불순물에 갇힌 전자가 가질 수 있는 함수 형태는 hydrogenic 1s 상태함수이며 λ 는 Bohr 반경을 의미한다. 양자우물구조에서도 불순물에 갇힌 전자는 hydrogenic 1s 상태함수의 형태를 가질 것이라 가정할 수 있다. 이 때, λ 는 더 이상 Bohr 반경이 아닌 가변변수이다. 식 (5)에서 가변 변수인 λ 의 선택으로 최소 결합에너지를 구할 수 있으므로 식 (5a)의 함수를 2D 시도함수(trial function)라 하고 식 (5b)를 3D 시도함수라 지칭한다. 식(4)와 (5)를 결합한 해밀토니안 식을 variation method로 풀면 아래와 같이 결합에너지를 구할 수 있다.

$$E_B = E_1 - \min \left[\frac{\langle F_1(z)\phi | H | F_1(z)\phi \rangle}{\langle F_1(z)\phi | F_1(z)\phi \rangle} \right] \quad (6)$$

식 (6)에서 E_1 와 F_1 은 식 (1)~(3)을 통해서 얻은 첫 번째 에너지 준위와 그 파동함수이다. E_B 는 식 (5)에서 가변 변수인 λ 의 선택을 통해 얻을 수 있는 가장 큰 값(bound state)을 나타낸다. 식 (5a)의 2D 시도함수와 식 (5b)의 시도함수를 이용한 결합에너지는 각각 아래와 같다.

$$E_{B-2D} = E_1 - \int F_1^*(z) e^{-\frac{\rho}{\lambda}} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{1}{\lambda \cdot \rho} \left(1 - \frac{\rho}{\lambda} \right) + V(z) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r\sqrt{\rho^2+z^2}} \right\} F_1 e^{-\frac{\rho}{\lambda}} d\rho d\phi dz \quad (7a)$$

$$E_{B-3D} = E_1 + \frac{\hbar^2}{2m^*} \int F_1^*(z) e^{-\frac{2\sqrt{\rho^2+z^2}}{\lambda}} \{ \nabla_z^2 F_1(z) \} d\rho d\phi dz + \frac{\hbar^2}{2m^*} \int F_1^*(z) e^{-\frac{2\sqrt{\rho^2+z^2}}{\lambda}} 2\{ \nabla_z F_1(z) \} \frac{z}{\sqrt{\rho^2+z^2}} \left(-\frac{1}{\lambda} \right) d\rho d\phi dz + \frac{\hbar^2}{2m^*} \int F_1^*(z) e^{-\frac{2\sqrt{\rho^2+z^2}}{\lambda}} F_1(z) \left\{ -\frac{2}{\lambda\sqrt{\rho^2+z^2}} + \left(\frac{1}{\lambda} \right)^2 \right\} d\rho d\phi dz - \int F_1^*(z) e^{-\frac{2\sqrt{\rho^2+z^2}}{\lambda}} F_1(z) \left\{ V(z) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r\sqrt{\rho^2+z^2}} \right\} d\rho d\phi dz \quad (7b)$$

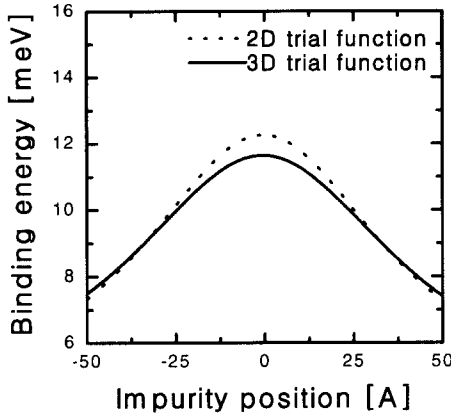
식 (7)에서 보듯이, 2D 시도함수를 이용하면 결합에너지의 수식적 결과가 간편하게 된다.

3. 결 과

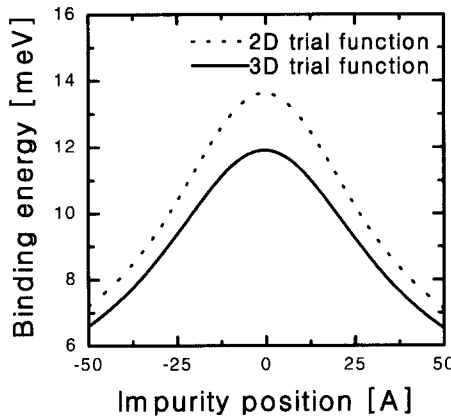
그림 1은 에너지 장벽과 우물의 폭이 모두 50 Å 인 $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ 양자우물구조에서 불순물 위치에 따른 결합에너지를 보여준다. 그림 1(a)에서 x 는 0.15이며 실선은 3D 시도함수를 이용하여 구한 값이다. 불순물의 위치와 전자의 위치가 근접할수록 안정적인 상태가 되므로 결합에너지는 증가하게 된다. 양자우물에서 최저에너지를 갖는 전자는 우물 중간에서 발견될 확률이 제일 크고 장벽 쪽으로 접근할수록 그 확률은 감소한다. 따라서 불순물의 위치가 우물 중앙일 때 결합에너지 값이 최대가 되며 우물 중앙에서 멀어질수록 감소한다. 한편, 점선으로 표시된 2D 시도함수를 이용하여 얻은 결합에너지 값은 3D 시도함수를 이용하여 얻은 값보다 크다. 2D 시도함수에서는 z 방향을 고려하지 않기에 전자분포가 우물 안쪽으로 더 쏠리게 되어 결합에너지 값이 과대평가되는 결과가 초래된다. 불순물이 우물 중앙에 위치할 때, 결합에너지 값은 3D 시도함수를 이용하였을 경우보다 5.3 % 크다. 불순물이 에너지 장벽에 있을 때엔 불순물과 이온화된 전자의 거리가 멀어지므로 시도함수의 형태에 크게 영향을 받지 않게 된다.

그림 1(b)에서는 x 는 0.45일 때 불순물 위치에 따른 결합에너지를 보여준다. Al 함량이 증가하면서 우물 벽의 높이도 증가하여 전자의 분포는 우물 안쪽으로 더욱 쏠리게 된다. 그 결과, 불순물의 위치가 중앙인 경우에 결합에너지 값은 더 커지는 반면 불순물의 위치가 장벽 쪽인 경우엔 더 작아진다. 2D 시도함수를 이용하면 결합에너지가 현저하게 증가하는 것을 볼 수 있다. 불순물이 우물 중간에 있을 경우에 결합에너지 값은 14.5 % 과대평가 된다. 그림 1(a)와 1(b)의 결과를 비교할 때, 에너지 장벽이 높을수록 2D 시도함수의 이용은 결합에너지 값의 오류를 증폭시킨다고 볼 수 있다.

그림 2는 에너지 장벽의 폭이 50 Å 인 $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ 양자우물 구조에서 우물의 폭(L)에 따른 결합에너지를 나타낸다. 불순물의 위치는 우물의 중앙이라고 가정하였다. 그림 2(a)에서는 에너지 장벽의 역할을 하는 $Al_xGa_{1-x}As$ 의 x 값이 0.15이다. 점선은 2D 시도함수를 이용하여 계산한 결합에너지이고 실선은 3D 시도함수를 이용하여 얻은 값이다. 두 결과의 개형을 보면, 결합에너지의 크기는 우물의 폭이 증가함에 따라 처음에는 증가하다가 이내 감소한다. 이러한 결과는 양자 우물 안에 존재하는 전자의 분포와 관련하여 두 가지 효과로 설명할 수 있다. $L > 25$ Å 지역의 경우, 우물의 폭이 늘어남에 따라 전자분포는 우물 안에 골고루 퍼지게 되므로 전자와 불순물 함수사이의 중첩이 감소하게 된다. 따라서 결합 에너지의 값은 감소한다. 우물의 폭을 무한대로 증가시키면



(a)

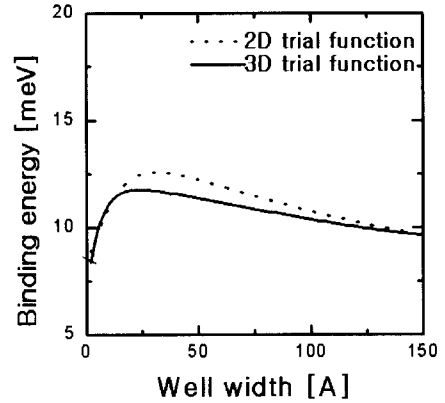


(b)

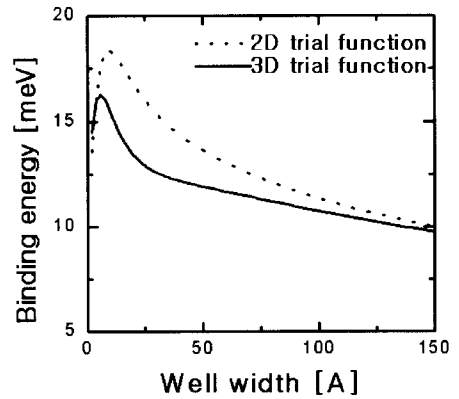
그림 1. 에너지 장벽과 우물 폭이 50 Å 인 $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ 양자우물에서 이온화된 불순물의 위치에 따른 전자와 이온화된 불순물 사이의 결합에너지. 양자우물의 중심을 중심위치로 하였음. (a) $x=0.15$ (b) $x=0.45$.

Fig. 1. Binding energy as a function of the impurity position in the $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ quantum well with the well width of 50 Å and the barrier width of 50 Å. (a) $x=0.15$ (b) $x=0.45$.

결합에너지 값은 bulk에서의 값($GaAs$ 은 약 5.3 [meV])에 수렴한다. 한편, $L < 25$ Å 지역의 경우, 우물의 폭이 줄어들수록 전자 에너지 장



(a)



(b)

그림 2. $Al_xGa_{1-x}As-GaAs-Al_xGa_{1-x}As$ 양자우물 구조에서 우물의 폭에 따른 전자와 이온화된 불순물의 결합에너지. (a) $x=0.15$, (b) $x=0.45$.

Fig. 2. Well thickness dependence of the on-center donor binding energy in the $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ quantum well with the barrier width of 50 Å for (a) $x=0.15$ and (b) $x=0.45$.

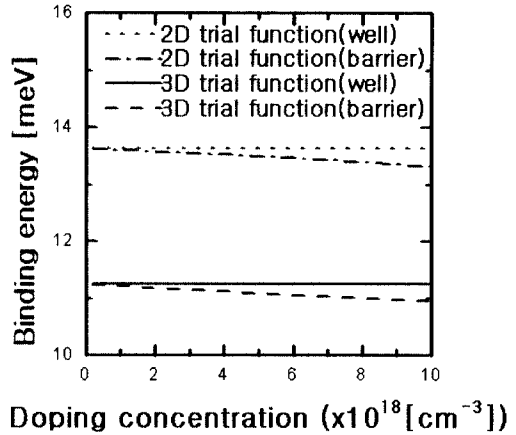
벽 안쪽으로 더욱 침투하게 된다. 이 경우, 전자와 불순물 함수사이의 중첩이 감소되므로 결합에너지의 감소를 초래한다. 2D 시도함수를 이용하면 결합에너지 값의 크기가 증가하는 것을 볼 수 있다. 3D 시도함수를 사용할 경우와 비교할 때, 2D 시도함수의 사용으로 인해 우물의 폭이 38 Å인 곳에

서 오류가 가장 크게 발생하며 8.0 % 정도 과대평가 된다.

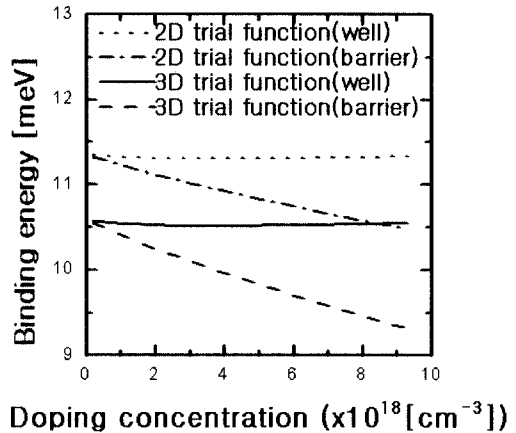
그림 2(b)에서는 양자우물의 장벽 역할을 하는 $Al_{0.45}Ga_{0.55}As$ 의 x 값이 0.45일 때 우물의 폭(L)에 따른 결합에너지 값을 보여준다. 우물 폭의 변화에 따른 결합에너지의 변화는 그림 2(a)의 경우와 유사하다. 다만, 결합에너지의 정점이 그림 2(a)와 달리 $L \sim 10 \text{ \AA}$ 에서 발생한다. 이는 x 값의 증가로 인한 에너지장벽 높이의 증가에 기인한다. 에너지장벽의 높이가 증가하면 전자는 에너지 장벽 안쪽으로 침투하기가 더욱 힘들어진다. 그 결과, 에너지 장벽 안쪽에서 전자 분포의 증가로 인한 결합에너지의 감소 현상은 우물 폭이 작은 곳에서야 두드러진다. 그림 2(a)와 2(b)를 볼 때, 우물의 폭이 매우 작은 지역을 제외한다면, 우물의 폭이 작아질수록 2D 시도함수의 이용은 결합에너지 값의 오류를 증폭시킨다.

그림 3(a)는 에너지 장벽과 우물의 폭이 모두 50 \AA 인 $Al_{0.45}Ga_{0.55}As/GaAs/Al_{0.45}Ga_{0.55}As$ 양자우물구조에서 불순물의 농도에 따른 결합에너지의 값을 보여준다. 점선과 실선은, 불순물을 우물에만 첨가하였을 때, 2D 및 3D 시도함수를 이용하여 각각 얻은 값이다. 불순물 농도가 낮은 곳에서 2D 시도함수를 사용하면 결합에너지 값은 21.2 % 정도 과대평가된다. 불순물의 농도가 증가하더라도 결합에너지 값은 거의 일정하다. 반면, 불순물을 퍼텐셜장벽에만 첨가하였을 경우, 불순물 농도가 증가함에 따라 결합에너지가 감소한다. 불순물로부터 떨어져 나온 전자들은 우물 안 쪽으로 떨어지게 되므로 불순물과 전자들이 분리되는 결과가 발생한다. 이 때, 에너지 밴드의 굴곡현상으로 인해 양자우물에서 에너지 준위가 상승하며, 에너지 장벽이 낮아지는 결과 발생하여 결합에너지의 감소를 초래한다. 불순물의 농도가 10^{19} cm^{-3} 일 때, 2D 시도함수의 이용에 따른 과대평가는 21.6 % 정도로 약간 증가한다.

그림 3(b)은 우물의 폭이 100 \AA 인 경우에 불순물의 농도에 따른 결합에너지의 값을 보여준다. 불순물 농도가 낮은 경우, 2D 시도함수를 사용하면 6.6 % 정도 과대평가된다. 우물의 폭이 넓을수록 2D 시도함수의 이용에 따른 오류가 줄어든다는 사실은 그림 2에서 이미 확인하였다. 불순물을 우물 안쪽에만 첨가하면 불순물 농도에 따른 결합에너지 값은 거의 변하지 않지만 불순물을 퍼텐셜장벽에만 첨가하면 불순물의 농도가 증가함에 따라 결합에너지가 감소한다. 불순물의 농도가 10^{19} cm^{-3}



(a)



(b)

그림 3. 에너지 장벽이 50 \AA 인 $Al_{0.45}Ga_{0.55}As/GaAs/Al_{0.45}Ga_{0.55}As$ 양자우물에서 불순물 농도에 따른 결합에너지. (a) 우물 폭이 50 \AA 인 경우. (b) 우물 폭이 100 \AA 인 경우.

Fig. 3. Binding energy as a function of doping concentration in the $Al_{0.45}Ga_{0.55}As/GaAs/Al_{0.45}Ga_{0.55}As$ with the barrier width of 50 \AA . The well width is chosen to be (a) 50 \AA and (b) 100 \AA , respectively.

일 때, 그림 3(a)의 경우와 달리, 2D 시도함수의 이용에 따른 과대평가는 12.5 % 정도로 심해진다.

4. 결론

$Al_xGa_{1-x}As$ 로 둘러싸인 $GaAs$ 양자우물 구조에서 전자와 이온화된 불순물과의 결합에너지 variation method를 이용하여 구하였다. 불순물의 위치, 양자우물의 깊이와 너비, 그리고 불순물농도에 따른 결합에너지 값의 2D 및 3D 시도함수에 따른 변화를 비교하였다. 2D 시도함수를 사용하면 결합에너지 값을 쉽게 계산할 수 있는 장점이 있는 반면 계산상의 오차를 발생시킨다. 불순물의 위치와 전자의 위치가 가까울수록 오차는 커진다. 또한, 양자우물의 깊이가 깊어질수록 그리고 너비가 좁아질수록 계산상의 오류는 심해진다. 불순물을 양자우물에만 첨가할 경우, 불순물 농도에 따른 결합에너지 값은 거의 변화가 없으며 2D 시도함수의 사용으로 인한 오류의 크기도 거의 일정하다. 반면, 불순물을 퍼텐셜장벽에만 첨가할 경우, 불순물 농도가 높아질수록 결합에너지 값은 줄어든다. 2D 시도함수의 사용으로 인한 오류는 우물의 두께가 50 Å 인 경우엔 약간 증가하지만 우물의 두께가 100 Å 인 경우엔 크게 증가한다. 위의 결과를 볼 때, 양자우물소자에서 정확한 결합에너지를 계산하기 위해서는 3D 시도함수의 사용이 반드시 필요하다.

감사의 글

이 논문은 인하대학교의 지원에 의하여 연구되었음.

참고 문헌

[1] M. Rochat, J. Faist, M. Beck, U. Oesterle, and M. Ilegems, "Far-infrared ($\lambda = 88\mu m$) electroluminescence in a quantum cascade structure", Appl. Phys. Lett., Vol. 73, No. 25, p. 3724, 1998.
 [2] M. P. Halsall, P. Harrison, J. P. R. Wells, I. V. Bradley, and H. Pellemans, "Picosecond far-infrared studies of intra-acceptor dynamics in bulk GaAs and δ -doped AlAs/GaAs

quantum wells", Phys. Rev. B, Vol. 63, p. 155314, 2001.
 [3] P. Harrison and R. W. Kelsall, "Population inversion in optically pumped asymmetric quantum well terahertz lasers", J. Appl. Phys., Vol. 81, No. 11, p. 7135, 1997.
 [4] H.-W. Hubers, K. Auen, S. G. Pavlov, E. E. Orlova, R. Kh. Zhukavin, and V. N. Shastin, "Population inversion and far-infrared emission from optically pumped silicon", Appl. Phys. Lett., Vol. 74, No. 18, p. 2655, 1999.
 [5] G. Bastard, "Hydrogenic impurity states in a quantum well: A simple model", Phys. Rev. B, Vol. 24, No. 8, p. 4714, 1981.
 [6] S. Chaudhuri and K. K. Bajaj, "Effect of nonparabolicity on the energy levels of hydrogenic donors in $GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs$ quantum-well structures", Phys. Rev. B, Vol. 29, No. 4, p. 1803, 1984.
 [7] W. T. Masselink, Y.-Ch. Chang, and H. Morkoc, "Acceptor spectra of $Al_xGa_{1-x}As-GaAs$ quantum wells in external fields: Electric, magnetic, and uniaxial stress", Phys. Rev. B, Vol. 32, No. 8, p. 5190, 1985.
 [8] C. Wang, B. Huang, and M. Jiang, "The binding energy of a shallow donor in type-II quantum wells", Physics letters A, Vol. 229, p. 117, 1997.
 [9] E. Kasapoglu, H. Sari, and I. Sokmen, "Binding energies of shallow donor impurities in different shaped quantum wells under an applied electric field", Physica B, Vol. 339, p. 17, 2003.
 [10] P. Harrison, "Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics", Wiley, Chichester, p. 71, 2000.
 [11] S. F. P. Paul and H. Fouckhardt, "An improved shooting approach for solving the time-independent Schrödinger equation for III/V QW structures", Physics letters A, Vol. 286, p. 199, 2001.