

논문 20-1-3

## 비 중심 Si $\delta$ -doping 층을 갖는 $GaAs - Al_xGa_{1-x}As$ 양자우물에서 전계에 따른 전자 분포

### Electron Distribution in the $GaAs - Al_xGa_{1-x}As$ Quantum Well with the Si $\delta$ -doped Layer in a Non-central Position under the External Electric Field

최준영<sup>1</sup>, 전상국<sup>1,a</sup>

(Jun Young Choi<sup>1</sup> and Sang Kook Chun<sup>1,a</sup>)

#### Abstract

The electric property in the  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  quantum well with the Si  $\delta$ -doped layer in a non-central position is studied through the effect of the electric field intensity on the electron distribution. The finite difference method is used for the calculation of the subband energy level and its wavefunction. In order to account for the change of the potential energy due to the charged particles, the self consistent method is employed. As the Si  $\delta$ -doped layer becomes closer to the heterojunction interface, the electrons less affected by Coulomb scattering are greatly increased under the external electric field. Therefore, the high speed device is suggested due to the fact that the high mobility electrons can be increased by positioning the  $\delta$ -doped layer in the quantum well and by applying the electric field intensity.

**Key Words** :  $\delta$ -doping, Finite difference method, Probability density, Mobility

#### 1. 서론

원자 층의 성장을 초정밀하게 조절할 수 있는 molecular beam epitaxy 법을 이용하여 반도체 내의 특정 공간에 불순물을 넣는  $\delta$ -doping 기술은 새로운 개념의 소자 제작에 응용할 수 있어 많은 관심을 끌고 있다.  $GaAs$ 에 Si  $\delta$ -doping 층을 넣으면 Si 막은 양전하 띠를 형성하여 2차원 구조의 양자우물이 만들어 진다. 양자우물에서는 여러 개의 subband가 형성되며 이 곳에 있는 전자들은 양자우물의 수직 방향으로 자유롭게 움직일 수 있다.

단일  $\delta$ -doping 층을 갖는 구조에서 이동도를 증대시키려는 방편으로 박막 성장법의 개선에 초점을

을 맞추는 연구가 있었다[1]. 두 개의  $\delta$ -doping 층을 갖는 구조에서는 단일  $\delta$ -doping 층의 경우보다 2~5배의 이동도 향상을 보였다[2]. 두  $\delta$ -doping 층 사이의 거리가 가까워지면 파동함수의 중첩이 발생하여 전자들은 두 층 사이에 존재하는 퍼텐셜 장벽지대에도 분포할 수 있게 된다. 이 때, 불순물로부터 어느 정도 떨어지게 된 전자들은 불순물 산란의 영향을 덜 받게 되어 이동도가 향상된다. Oztuk[3] 등은 전자 분포와 불순물 분포의 겹치는 정도에 따라 이동도가 주로 제한받는다 가정하여 Koenraad[4] 등의 실험결과를 정성적으로 설명하였다. 이 같은 사실에 착안하여 Oztuk[5] 등은 다중  $\delta$ -doping 층을 제안하기도 하였다.

지금까지 언급한 연구결과에서는 불순물 층으로부터 conducting 층을 분리시켜 이동도를 향상시키려 하였다. 최근, Osvald[6]는 500 Å 두께의  $GaAs$  내에서  $\delta$ -doping 층의 위치에 따른 퍼텐셜 및 전자 분포를 연구하였다.  $\delta$ -doping 층을 표면에

1. 인하대학교 전자공학과  
(인천시 남구 용현동 253)  
a. corresponding author : skc@inha.ac.kr  
접수일자 : 2006. 10. 30  
심사완료 : 2006. 12. 18

가깝게 하면 그 반대편 표면 쪽에 다른 양자우물이 발생하는 것을 알아내었다. 새로 발생한 양자우물내의 전자들은 불순물 층과 멀리 떨어져 있으므로 불순물 산란의 영향을 덜 받게 된다. 하지만 새로운 양자우물로 이동한 전자의 비율은 그리 높지 않아 높은 전도도는 기대할 수 없다. 높은 주파수 영역에서 동작하는 소자를 제작하기 위해서는 이동도뿐만 아니라 전도도도 향상시킬 필요가 있다.

따라서 본 연구에서는  $GaAs-Al_xGa_{1-x}As$  양자우물 내에서  $\delta$ -doping 층의 위치와 전계에 따른 전자의 분포 변화를 연구하여 전기적 성질을 향상시킬 수 있는 방법을 제안하고자 한다. 양자우물의 에너지 준위와 그 파동함수를 구하기 위하여 finite difference method(FDM) 방법을 이용하였으며, 불순물 및 전자 분포에 따른 퍼텐셜 에너지의 변화를 고려하기 위하여 self consistent method를 사용하였다.

## 2. 본 론

$GaAs-Al_xGa_{1-x}As$  양자우물에 넣는 불순물 반도체의 분포 형태에 따라 퍼텐셜 및 전하 분포 계산 방식을 달리해야 한다. 우물 속에 불순물이 균일한 경우, 이온화 된 전자들은 우물 안에 끌려 루 퍼지게 되어 우물 안의 어느 곳이든 전하의 중립성은 유지된다. 따라서 불순물과 전자의 분리로 인한 퍼텐셜의 변화는 없다. 한 편, 한정된 지역에 만 불순물을 넣는 방식인  $\delta$ -doping을 하면 이온화 된 전자들은 불순물로부터 떨어지게 된다. 이 때, 깨진 전하의 중립성을 보완하기 위하여 전자 분포와 퍼텐셜 에너지의 변화가 초래된다. 따라서 양자우물에  $\delta$ -doping을 할 경우, 서로 상호관계가 있는 전자 분포와 퍼텐셜 에너지는 동시에 결정되어야 한다. 이 같은 상황을 고려하기 위하여 유효질량 가정법(effective mass approximation)을 이용하여 Schrodinger 방정식과 Poisson 방정식을 self-consistent 법으로 풀고자 한다.

$GaAs-Al_xGa_{1-x}As$  양자우물 안에 Si  $\delta$ -doping을 할 때 전자의 에너지 준위와 그 파동함수는 아래의 Schrodinger 방정식으로부터 구할 수 있다.

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m^*(z)} \frac{d^2}{dz^2} + V_{iw} + V_n(z) + V_{sc}(z) + eFz \right] \psi_j(z) = E_j \psi_j(z) \quad (1)$$

$E_j$ 는 양자우물에 있는  $j$  번째 subband 에너지 준위이고  $\psi_j(z)$ 는 그 파동함수를 나타낸다.  $m^*(z)$

는 각 박막 층에서의 유효질량이다.  $V_{2D}(z)$ 는 이 종접합으로 인한 2차원 양자우물구조의 퍼텐셜이며,  $V_H(z)$ 는 Hartree 퍼텐셜이며,  $V_{xc}(z)$ 는 exchange-correlation 퍼텐셜이다.  $F$ 는 전계의 세기를 나타낸다.

식 (1)에서 구한 전자의 에너지 레벨과 그 파동함수를 이용하여 subband의 전자 농도인  $n(z)$ 를 아래와 같이 구할 수 있다.

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

$k_B$ 는 Boltzmann 상수이며,  $T$ 는 절대 온도이며,  $E_F$ 는 페르미 에너지이다. 이온화된 불순물과 전자의 분포에 따른 에너지의 변화인 Hartree 퍼텐셜  $V_H(z)$ 는 Poisson 방정식을 이용하여 아래와 같이 얻을 수 있다.

$$\frac{d}{dz} \left( \epsilon(z) \frac{d}{dz} V_H(z) \right) = e^2 [N_D^+(z) - n(z)] \quad (3)$$

$\epsilon(z)$ 는 유전율이고,  $N_D^+$ 는  $\delta$ -doping 층에 넣은 불순물 농도이다. Exchange-correlation 퍼텐셜  $V_{xc}(z)$ 은 Hedin과 Lundquist 매개변수법에 따라 아래와 같은 값을 사용하였다[6].

$$V_{xc}(z) = -\frac{Ry^*}{10.5\pi r} \left( \frac{9}{4\pi} \right)^{1/3} [1 + 0.7734r \ln(1 + r^{-1})] \quad (4)$$

$$r = \frac{1}{21 a^*} \left( \frac{4}{3} \pi n(z) \right)^{-1/3} \quad (5)$$

$a^*$ 는 effective Bohr radius이고  $Ry^*$ 는 effective Rydberg 상수이다. 불순물의 농도가 매우 높지 않다면  $V_{xc}(z)$ 는  $V_H(z)$ 에 비해 그 영향력이 무시할 정도로 작다.

식 (1)~(5)의 계산은 다음과 같은 과정을 통해 수행된다. 식 (1)으로부터  $\psi_j(z)$ 와  $E_j$ 를 구한다. 이 때, 필요한 입력 변수인  $V_H(z)$ 와  $V_{xc}(z)$ 는 식 (3)과 (4)에서 얻을 수 있지만 초기에는 추정치를 사용하여야 한다.  $V_H(z)$ 로는 V-형태의 시작 값을 이용하고  $V_{xc}(z)$ 는  $V_H(z)$ 에 비해 상대적으로 작은 값이므로 시작 단계에서 무시한다. 식 (1)으로부터 구한  $\psi_j(z)$ 와  $E_j$ 를 이용하여 식 (2)에서

$n(z)$  를 계산할 수 있다. 이 단계에선 모든 불순물이 이온화되었다고 가정하고  $n(z)$  와  $E_F$  값의 크기를 동시에 결정한다. 식 (3)에서 얻어진  $n(z)$  를 이용하여 계산할 수 있는  $V_H(z)$  와  $V_H(z)$  는 식 (1)의 Schrodinger 방정식을 풀 때 재사용된다. 위와 같은 순환과정은 계산 값이 충분히 수렴할 때 까지 반복된다.

### 3. 결과

$GaAs-Al_{0.3}Ga_{0.7}As$  양자우물에서 우물의 역할을 하는  $GaAs$  층의 두께는  $500 \text{ \AA}$  이고  $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$  의 에너지 장벽 높이는  $0.25 \text{ eV}$  로 하였다.  $GaAs$  와  $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$  의 유효질량은 각각  $0.067 m_0$  과  $0.092 m_0$  이고, 상대유전율은 각각  $12.35$  와  $11.59$  이다. 일반적인  $\delta$ -doping 층은 4~5개 정도의 원자 층으로 되어 있으므로  $GaAs$  우물에 넣은 Si  $\delta$ -doping 층의 두께는  $20 \text{ \AA}$  으로 하였다. 농도  $5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  의 불순물은 모두 이온화되었다고 가정하였으며 온도  $300 \text{ K}$  에서 전자의 분포를 고려하였다.

그림 1(a)는 양자우물 구조에서  $\delta$ -doping 층의 중심이 왼쪽 이종접합면에서  $64 \text{ \AA}$  떨어져있을 때, 퍼텐셜에너지의 변화와 파동함수의 절대 값에 제곱을 취한 확률밀도(probability density)를 보여 준다. 양자우물의 바닥을 에너지 기준점으로 정했으며 subband는 확률밀도가 높은 4개만을 도시하였다.  $\delta$ -doping 층이 양자우물의 왼쪽 이종접합면에 근접해 있기 때문에 이온화된 전자들은  $\delta$ -doping 층의 오른쪽으로 치우치게 된다. 양전하가 있는  $\delta$ -doping 층은 전자들이 분포해 움직임을 띠는 다른 지역에 비해 퍼텐셜 에너지가 낮아지게 되어 새로운 우물(A 지역)이 발생한다. 특이한 점은,  $\delta$ -doping 층이 왼쪽으로 치우칠 때, 우물의 중앙부가 상승하며 오른쪽으로 새로운 퍼텐셜 우물(B 지역)이 발생하는 것이다.

첫 번째와 두 번째 subband의 확률밀도는 A 지역에 치우쳐져 있다. 이는 subband 내의 전자들이 대부분 A 지역에 분포하고 있음을 의미한다. 세 번째 subband의 확률밀도는 B 지역에 치우쳐져 있지만 4번째 subband의 확률밀도는 다시 A 지역에 있다. A 지역에 있는 subband의 확률밀도 파형에서 peak 수가 순차적으로 증가하는 이유는 기존의 사각형 양자우물에서 나타나는 현상과 동일하

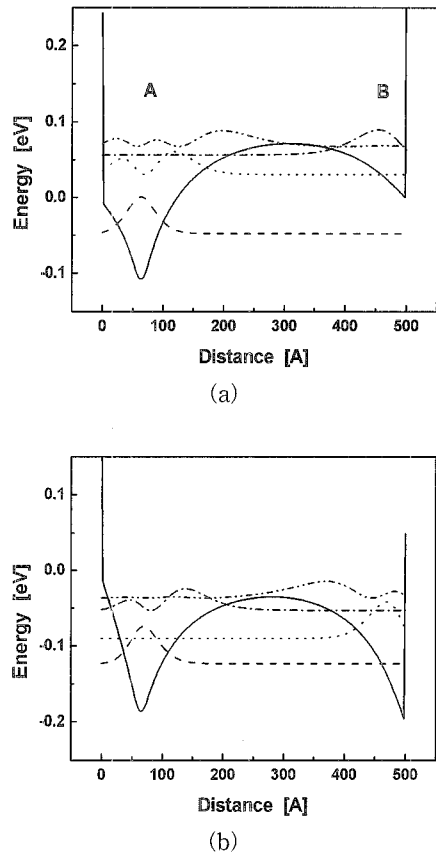


그림 1.  $GaAs-Al_{0.3}Ga_{0.7}As$  양자우물에서  $N_D = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  의 Si  $\delta$ -doping을 이종접합면으로부터  $64 \text{ \AA}$  위치에 넣었을 때 퍼텐셜 에너지 및 확률밀도. (a)  $F = 0$  (b)  $F = 40 \text{ kV cm}^{-1}$ .

Fig. 1. Potential energy and probability density for the Si  $\delta$ -doped layer with concentration  $N_D = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  in the  $GaAs-Al_{0.3}Ga_{0.7}As$  quantum well placed in  $64 \text{ \AA}$  from the heterostructure interface. (a)  $F = 0$  and (b)  $F = 40 \text{ kV cm}^{-1}$ .

다. B 지역에 있는 전자들은 불순물로부터 멀리 떨어져있기에 불순물산란의 영향을 덜 받게 되며 A 지역의 전자들에 비해서 이동도가 크다. 따라서 위의 구조를 고속소자에 적용하기 위해서는 B 지역의 전자 농도를 증가시키는 것이 유리하다.

그림 1(b)는 전계  $F = 40 \text{ kVcm}^{-1}$  일 때, 퍼텐셜 에너지와 subband의 확률밀도를 보여준다. 가한 전계는 우물 양단간에 0.2 V의 전압차를 초래하므로 더 많은 전자들을 B 지역으로 쏠리게 한다. 그림 1(a)의 경우와 달리 subband의 확률밀도가 A 지역과 B 지역에 교차하며 치우쳐져 있다. 특히 B 지역에 치우쳐져있는 두 번째 subband로 인해 B 지역에 전자가 증가했음을 알 수 있다. 하지만 A 지역과 B지역의 전자 농도가 역전될 정도는 아니다.

그림 2(a)는  $\delta$ -doping 층의 중심이 왼쪽 이종접합면에서 16 Å일 때, 퍼텐셜 에너지와 확률밀도를 보여준다.  $\delta$ -doping 층의 위치가 왼쪽 이종접합면에 가까워질수록  $\delta$ -doping 층의 왼쪽지역에 분포하는 전자 수는 감소한다. 그 결과, A 지역에서 기준 에너지로부터 에너지 감소로 인한 양자우물의 깊이는 그림 1(a)에서 그것보다 훨씬 얕다. 하지만  $\delta$ -doping 층 오른쪽지역에서는 불순물과 전자의 분리로 인한 퍼텐셜 에너지의 증가된 값이 그림 1(a)의 결과와 거의 같다. 양자우물의 중심부가 기준 에너지로부터 크게 상승하였기 때문에 B 지역의 양자우물은 상대적으로 깊어진다. 전계를 가하지 않았음에도 두 번째와 네 번째 subband의 확률밀도의 중심부가 B 지역에 위치한다. 즉,  $\delta$ -doping 층의 위치가 이종접합면에 가까워질수록 더 많은 전자가 B 지역의 우물 쪽으로 이동하게 되며 전계를 가하는 것과 동일한 효과를 발생시킨다는 것을 알 수 있다.

그림 2(b)는 전계  $F = 40 \text{ kVcm}^{-1}$  일 때, 퍼텐셜 에너지와 확률밀도를 보여준다. 그림 1(b)에서 설명했듯이, 전계를 가함으로써 전자들은 B 지역으로 더욱 치우치게 된다. 첫 번째와 세 번째 subband의 확률밀도가 B 지역에 치우쳐져 있는 것으로 보아 A 지역과 B지역의 전자 농도가 역전되었음을 알 수 있다. 이 경우, 불순물 산란의 영향을 적게 받는 B 지역의 전자 농도가 크게 증가함으로써 전도도가 크게 향상됨을 알 수 있다.

표 1은  $\delta$ -doping 층의 위치와 전계의 세기에 따라 subband의 전자 분포비율을 보여준다. Subband의 확률밀도가 B 지역에 치우쳐져 있는 경우엔 수치 뒤에 별표를 표기하였다. 전계를 가하지 않았을 경우,  $\delta$ -doping 층이 이종접합면으로부터 32 또는 16 Å 떨어져 있을 때 두 번째 subband의 확률밀도가 B 지역에 치우쳐져 있다.  $\delta$ -doping 층이 이종 접합면 쪽에 가까워질수록 B 지역의 전자 농도 비율이 증가함을 알 수 있지만 A 지역과 B 지역의 전자 농도 비율의 역전은 발

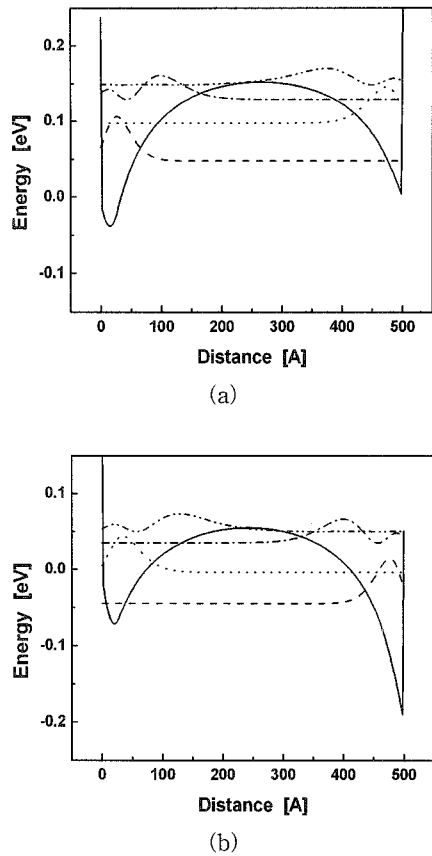


그림 2.  $GaAs-Al_{0.3}Ga_{0.7}As$  양자우물에서  $N_D = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 의 Si  $\delta$ -doping을 이종접합면으로부터 16 Å 위치에 넣었을 때 퍼텐셜 에너지 및 확률밀도. (a)  $F = 0$  (b)  $F = 40 \text{ kVcm}^{-1}$ .

Fig. 2. Potential energy and probability density for the Si  $\delta$ -doped layer with concentration  $N_D = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  in the  $GaAs-Al_{0.3}Ga_{0.7}As$  quantum well placed in 16 Å from the heterostructure interface. (a)  $F = 0$  and (b)  $F = 40 \text{ kVcm}^{-1}$ .

생하진 않았다. 전계  $F = 40 \text{ kVcm}^{-1}$ 를 가하면 B 지역에 전자 농도는 더욱 증가함을 볼 수 있다. 특히  $\delta$ -doping 층이 32 Å에서부터 첫 번째 subband의 확률밀도가 B 지역에 치우치게 되어 A 지역과 B 지역의 전자 농도 비율의 역전이 발생한다.

표 1.  $GaAs-Al_{0.3}Ga_{0.7}As$  양자우물에  $N_D = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 의 Si  $\delta$ -doping을 넣은 경우에 전계에 따른 확률밀도변화.

Table 1. Electric field dependence of the probability density for the Si  $\delta$ -doped layer with concentration  $N_D = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  in the  $GaAs-Al_{0.3}Ga_{0.7}As$  quantum well placed in various positions.

Position	64 Å	32 Å	16 Å
$F = 0$			
1st subband	0.5772	0.5511	0.4945
2nd subband	0.1826	0.1660*	0.2384*
3rd subband	0.0953*	0.1411	0.1165
4th subband	0.0681	0.0591*	0.0657*
$F = 40 \text{ kV cm}^{-1}$			
1st subband	0.4406	0.3910*	0.4743*
2nd subband	0.2734*	0.3415	0.2621
3rd subband	0.1212	0.0938*	0.1088*
4th subband	0.0765*	0.0876	0.0706

#### 4. 결론

$GaAs-Al_xGa_{1-x}As$  양자우물 구조에서  $\delta$ -doping 층의 위치와 전계의 세기에 따른 전자 분포의 변화를 통해 전기적 성질을 연구하였다.  $\delta$ -doping 층의 위치가 이중접합면에 가까워질수록 더 많은 전자가 B 지역의 우물 쪽으로 이동하게 된다. 하지만, A 지역과 B 지역의 전자 수의 역전은 발생하지 않았다. 전계  $F = 40 \text{ kV cm}^{-1}$ 를 가하면 B 지역에 전자 농도는 더욱 증가함을 볼 수 있다. 특히  $\delta$ -doping 층이 32 또는 16 Å에 있을 때, A 지역과 B 지역의 전자 농도 비율의 역전이 발생한다. 즉,  $\delta$ -doping 층의 위치가 이중접합면에 가까울수록 그리고 전계의 세기가 커질수록 전자 농도 비율의 역전 현상이 심해진다. B 지역에 있는 전자들은 불순물로부터 멀리 떨어져 있기에 불순물산란의 영향을 덜 받으므로 A 지역의 전자들

에 비해 이동도가 크다. 이와 같이  $\delta$ -doping 층의 위치와 전계의 세기를 조절하여 높은 이동도를 지닌 전자의 수를 증가시킬 수가 있어 고속소자 제작에 적용할 수가 있다.

#### 감사의 글

이 논문은 인하대학교의 지원에 의하여 연구되었음.

#### 참고 문헌

- [1] G. Gillman, B. Vinter, E. Barbier, and A. Tardella, "Experimental and theoretical mobility of electrons in  $\delta$ -doped GaAs", Appl. Phys. Lett., Vol. 52, p. 972, 1988.
- [2] X. Zheng, T. K. Carns, K. L. Wang, and B. Wu, "Electron mobility enhancement from coupled wells in delta-doped GaAs", Appl. Phys. Lett., Vol. 62, p. 504, 1993.
- [3] E. Ozturk, H. Sari, Y. Ergun, and I. Sokmen, "The effect of the donor distribution on the electronic structure of two coupled Si  $\delta$ -doped layers in GaAs", Physica B, Vol. 334, p. 1, 2003.
- [4] P. M. Koenradd, A. C. L. Heessels, A. P. Blom, J. A. A. J. Perenboom, and J. H. Wolter, "Subband population and electron subband mobility for two interacting Si- $\delta$ -doping layers in GaAs", Physica B, Vol. 184, p. 221, 1993.
- [5] E. Ozturk, H. Sari, Y. Ergun, and I. Sokmen, "The triple Si  $\delta$ -doped GaAs structure", Appl. Phys. A, Vol. 80, p. 167, 2005.
- [6] J. Osvald, "Self-consistent analysis of Si  $\delta$ -doped layer placed in a non-central position in GaAs structure", Physica E, Vol. 23, p. 147, 2004.