

°김성진°, 박근영°, 유환성°, 이승환°, 최복길°, 성영권°

° : 고려대학교 전기공학과, °° : 공주대학교 전기공학과

Numerical Analysis of I-V Curves of RTDs with AlGaAs/GaAs Structure by Self-consistent Method

S. J. Kim°, G. Y. Park°, H. S. Yoo°, S. H. Yi°, B. G. Choi°, and Y. K. Sung°

* : electrical eng. of Korea Univ. ** : electrical eng. of Gongjoo University

ABSTRACT

We investigated theoretically the current-voltage characteristics of resonant tunneling diodes with a single quantum well structure, using a self-consistent method. This method is a numerical analysis which is able to include the effects of the undoped spacer layer and the band bending by charge accumulation and depletion on the contact layers, so that it is better suited to explain experimental results. The structure used is an $Al_{0.2}Ga_{0.8}As/GaAs/Al_{0.2}Ga_{0.8}As$ single quantum well. In this work, we estimate the theoretical current-voltage characteristics, and then, the dependence of the current-voltage curves on the thickness of undoped spacer layers.

I. 서론

공명 터널링 다이오드는 양자역학 효과에 의한 우수한 부성저항(NDR) 특성때문에 많은 관심을 끌어들였다. 양자우물구조에서 발생하는 부성저항은 초고주파의 검지나 발진^[1]에 응용되어 왔으며, 또한 다양한 초고속 디지털 논리소자^[2-3]에 이용하려는 노력이 진행되어 왔다. 이러한 소자 개발의 노력과 함께 공명 터널링 다이오드에서 케리어의 전도 현상에 대한 이론적 연구^[4-7]가 활발히 진행되어왔으나, 초기에 이론적 해석은 공간 전하층의 효과나 양자우물내에 공간전하층의 형성과 밴드 구부러짐을 고려하지 않고 계산되어 왔기 때문에 이론과 실험적 결과 사이에는 커다란 차이가 있어 왔고 이론계를 극복하기 위해 self-consistent법^[8-10]이 소개되었다. 처음에 적용한 예는 이중접합의 계면에서 전하의 축적을 고려한 에너지밴드의 구부러짐 현상에 의한 구속 에너지 준위와 구속 전자밀도의 계산^[11]에 활용되었으며, 양자우물 구조에서 적용한 예^[12]도 발표되어왔다. 이 논문에서는 기존의 Schrödinger 방정식과 Poisson 방정식을 self-consistent법으로 해결한 방식과 달리 좀더 빠른 계산을 할 수 있는 방안으로 전도대 포텐셜 프로파일을 self-consistent

법으로 구한 후에 터널링 전류밀도를 구하는 두 단계 독립 계산과정을 통해 해를 구하였다. 즉 경계조건과 함께 포아손 방정식을 사용하여 공명터널링 다이오드의 전도대 프로파일과 전자밀도 분포를 계산한 다음에, airy 함수를 이용하여 무과울과 터널링 전류밀도를 계산하는 과정을 취했다.

II. 이론적 해석

공명 터널링 다이오드의 전류-전압 특성을 이론적으로 해석하기 위해 self-consistent법을 이용하였다. 여기에서 우리는 먼저 전도대 프로파일과 전자밀도를 구하기 위해 포아손 방정식과 경계조건을 self-consistent법으로 해결한 후에, airy 함수를 이용하여 시뮬레이션에서 Schrödinger 방정식의 해로부터 무과울과 전류밀도를 계산하는 과정을 취했다.

오믹 콘택 전극에서 포텐셜분포와 전자밀도를 시뮬레이션 하기위해 우리는 그림1에서 나타낸 것과 같이 좌측 콘택층의 좌표점을 $0, \dots, NL-1, NL$ 로 정하고, 우측 콘택층에서 좌표는 $NR, NR+1, \dots, N$ 으로 정하였다. 좌·우측 콘택층과 관련하여 페르미 준위는 각각 E_{VL} 과 E_{VK} 으로 정하였으며, 외부 인가 전압을 V_A 라 하면, $E_{VK} - E_{VL} = qV_A$ 의 관계를 갖게 된다. 오믹 콘택층에서 페르미 준위는 Thomas-Fermi 열평형 상태모델을 이용하여 일정하다고 가정하였으며, 단일 양자우물 구조에서의 전자밀도는 Schrödinger 방정식의 해로부터 구해진 파동함수와 함께 z-공간상으로 구속된 전자의 2차원 상태 밀도와 Fermi-Dirac 분포함수로서 나타내었다. 그리고 두 영역 사이의 계면에서 전도대 준위의 불연속은 우물내의 축적 전하량과 내부전계와 관련한 경계조건을 이용하여 연결하였으며, 전체 구조에서 전도대 프로파일과 전자 밀도를 self-consistent 법과 Newton-Raphson 반복법으로 계산하였다.

전도대 프로파일은 포아손 방정식으로부터

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} = \frac{q}{\epsilon(z)} [n(z) - N_{D+}(z)] \quad (1)$$

으로 주어지며, 포텐셜은 전하량에 의존한다. 여기에서 $V(z)$ 와 $\epsilon(z)$ 는 전자에 대한 정전 포텐셜과 유전율을 나타낸다.

그리고 전자밀도는 양자우물의 외곽지역에 대해 Fermi-Dirac 통계분포 법칙으로부터 계산한다. 따라서 캐소우드 지역에서 전하밀도는

$$n(z) = N_c F_{1/2}(\eta_n), \quad (z < z_{NL} : \text{cathode region}) \quad (2)$$

으로 주어지며, 여기에서 N_c 는 전도대의 유효 상태밀도, $F_{1/2}(\eta_n)$ 는 페르미 적분, η_n 는 $(E_V - E_c)/k_B T$ 를 의미하는 상수이다. 한편 z-공간상으로 구성된 단일양자 우물구조내에서 전자밀도는 근사적으로

$$n(z) = \sum_{i=1}^n \frac{1}{N} \frac{m^* k_B T}{(\epsilon_i)^2} \int k \ln \left[1 + \exp \left(\frac{E_V - E_i}{k_B T} \right) \right] |\psi(z)|^2 \quad (3)$$

으로 주어지며, 여기에서 N 은 파동함수의 정규화 계수 (normalization factor), k 는 k 공간 상의 미소성분, E_i 는 좌측 콘택층의 전도대 하단준위를 기준으로하여 양자화된 허용 에너지 준위를 나타내며, Vassell의 관계식^[21]인 (4)식을 이용하여 근사적으로 구할 수 있다.

$$k_{zL} = n_z - \sin^{-1} \{ \gamma E / [V_0 + (\gamma - 1)E] \}^{1/2} - \sin^{-1} \{ \gamma E / [V_0 + V_{WA} + (\gamma - 1)E] \}^{1/2} \quad (4)$$

여기에서 L 은 양자우물 폭, $k_{zL} = (2m^*)^{1/2} / \hbar$ 인 파수벡터, E 는 좌측 콘택층으로부터 주입된 전자의 에너지, V_0 는 장벽높이, V_{WA} 는 전체 인가 전압중에서 단일양자 우물구조에 인가된 전압, γ 는 우물과 장벽의 유효질량비를 나타낸다. 한편 에노드 영역에서 전자밀도는 캐소우드 영역에서 적용한 식인 (2)식을 이용하여 E_{VL} 대신에 E_{Vr} 을 대입하여 구할 수 있다.

$$n(z) = N_c F_{1/2}(\eta_n) \quad (z_{NL} < z < z_N : \text{anode region}) \quad (5)$$

(1)식으로부터 (5)식을 통해 얻어진 포텐셜 프로파일은 콘택층과 장벽사이의 계면에서 경계조건을 이용하여 연결한다. 계면에서 전계의 불연속은 우물 내의 축적된 전하량과 관련이 있으며, 포텐셜 불연속은 계면에서 전계에 의한 전압강화 성분과 내부 축적 전하량에 관련이 있다. 두 계면사이에 전계의 불연속은

$$F_R - F_L = \frac{V_{NR} - V_{NR+1} + V_{NL} - V_{NL-1}}{\int z} \quad (6)$$

$$= \frac{q}{\epsilon} \int_{z_L}^{z_R} [N_D(z) - n(z)] dz$$

으로 주어지며, 여기에서 z_L 과 z_R 은 각각 좌측과 우측 콘택층에서의 경계점. 그리고 F_L 과 F_R 은 그 위치에서 전계를 나타낸다. 한편 포텐셜의 불연속 조건은

$$V_{NR} - V_{NL} = - \frac{(z_R - z_L)}{\int z} (V_{NL-1} - V_{NL}) + D_V \quad (7)$$

으로 나타낼 수 있으며, (7)식에서 D_V 는

$$D_V = \frac{q}{\epsilon} \int_{z_L}^{z_R} dz' \int_{z_L}^{z'} dz [n(z'') - N_D(z'')] dz'' \quad (8)$$

으로 주어진다.

지금까지 설명한 전도대 프로파일을 구하는 과정을 그림2

의 flow chart를 통해 나타내었다.

한편 공명터널링 전류가 (9)식에 의해 계산된다.

$$J = \frac{qm^*k_B T}{2\epsilon^2 \hbar^3} \int dE_x T^* T(E_x) \ln \left[\frac{1 + \exp[-(E_x + E_V + qV_L)/k_B T]}{1 + \exp[-(E_x + E_V - qV_A)/k_B T]} \right] \quad (9)$$

여기에서 m^* 는 GaAs의 유효질량, V_L 은 좌측 콘택층에서 전압강하, 그리고 V_A 는 외부 인가 전압이다.

III. 결과 및 논의

앞서 언급한 이론을 장벽 두께가 25 Å이고 우물폭이 50 Å으로 이루어진 $Al_{0.5}Ga_{0.5}As/GaAs/Al_{0.5}Ga_{0.5}As$ 단일양자 우물구조에 적용한다. 여기에 도핑되지 않은 스페이서층을 장벽과 콘택층 사이에 형성시켜 전류-전압 특성에 미치는 효과를 평가하였다. GaAs 콘택층에서 도핑농도는 $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 으로 가정하였으며, 이것은 페르미 준위를 전도대 하단 준위 (E_c)로부터 약 0.054eV 정도 위에 위치하게 한다. 유효질량은 우물과 콘택층의 경우에 $0.067m_0$, 장벽의 경우는 $0.1087m_0$ 을 사용하였으며, GaAs와 $Al_{0.5}Ga_{0.5}As$ 사이에 전도대 불연속 에너지는 0.5 eV로 정하였다. 우리는 이들 파라미터를 이용하여 self-consistent법으로 전도대 프로파일과 전자농도를 계산하였다. 그림3은 두께 50 [Å]의 도핑되지 않은 스페이서층을 가진 단일양자우물구조에서 0.88 [V]의 전압을 인가하였을 때 전도대 프로파일과 전자밀도를 나타낸 것이다. 여기에서 실선과 점선은 전도대 프로파일과 전자의 밀도를 각각 나타내며, 콘택층에서 밴드 구부림 효과는 시뮬레이션레딩 방정식의 포텐셜 에너지항을 변화시켜 투과율에 영향을 미친다. 그림4는 인가전압이 0.2와 0.88 [V]일 때 밴드 구부림 효과를 고려한 투과율을 나타낸 것이다.

전류밀도는 (9)식을 이용하여 구할 수 있으며, 절대온도 77 K상에서 계산한 것이 그림5에 나타났다. 단지 하나의 전류 피크와 벨리를 가지며, 인가전압이 벨리전압을 넘게되면 단조 증가하는 경향을 보인다. 이와같은 결과는 장벽 외곽의 계면에서 전하의 축적과 공핍으로 인한 전압 강화성분이 실제적으로 공명 장벽에 인가된 유효 전압을 줄이는 역할을 하며, 더우기 캐소우드 영역에서 나타나는 전하 축적에 의한 전압강화 성분은 첫번째 장벽의 유효 장벽높이를 감소시켜 터널링 전류를 증가시킨다. 이 효과는 고전압 영역에서 더욱 증가하여 벨리전압 이상에서 터널링 전류가 단조 증가하게 한다. 이것은 Esaki에 의해 제안된 평탄형 밴드 프로파일 상에서 구한 결과와 다르며, 실험결과^[22]에 잘 부합되는 양상을 보여주고 있다.

IV. 결론

공명 터널링 전류-전압 특성을 self-consistent법을 이용하여 이론적으로 해석 하였다. 계산은 이중양자 우물구조에 대해 이루어졌으며, self-consistent법으로 이중장벽 외곽 계면에서 전하의 축적과 공핍에 의한 밴드 구부러짐 효과를 고려하여 터널링 전류를 구하고, 스페이서 층의 효과를 평가 하였다. 그결과 self-consistent법으로 구한 전류-전압 곡선 상에서는 단지 하나의 벨리와 피크와 함께, 외부 인가전압

이 벨리전압 이상일 때 전류가 단조 증가하는 실험적 결과와 유사한 양상을 얻을 수 있었으며, 계산된 피크대 벨리 전류비(PVR)는 다른 이론적 평가법에 비해 확실히 실험적 결과에 근접하였다.

참고문헌

[1] T.C.L.G. Sollner, E.R.Brown, W.D.Goodhue, and H.Q.Le, App. Phys.Lett., vol.50, p.332 (1987)
 [2] J.Söderström and T.G.Andersson, IEEE-ED Lett., vol.9, p.200, (1988)
 [3] A.C.Seabaugh, Y.C.Kao, and H.T.Yuan, IEEE-ED Lett., vol.13, p.479 (1992)
 [4] R.Tsu and L.Esaki, Appl.Phys.Lett., vol.22, p.562(1973)
 [5] M.J.Kelly, Electron Lett., vol.20, p.771(1984)
 [6] K.F.Brennan and C.J.Summers, J.Appl.Phys., vol.61, p.614(1986)
 [7] H.Sakaki, T.Matsusue, and M.Tsuchiya, IEEE-QE, vol.25, p.2498 (1989)
 [8] J.Yosida, IEEE-ED, vol.33, p.154(1986)
 [9] T.Ando, J.Phys.Soc.Jpn., vol.51, p.3893 (1982)
 [10] H.Ohnoishi, T.Inata, S.Muto, N.Yokoyama, and A.Shibatomi, Appl.Phys.Lett., vol.49, p.1248 (1986)
 [11] M.O.Vasselli, J.Lee, and H.F.Lockwood, J.Appl.Phys., vol.54, p.5206(1983)
 [12] J.Soderstrom and T.G.Andersson, Superlattices and microstructures, vol.5, p.109(1989)

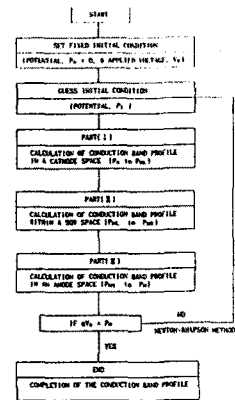


그림 2. 자기부호순환을 이용하여 DB구조의 전도대 프로파일링을 계산하는 과정을 나타낸 흐름도

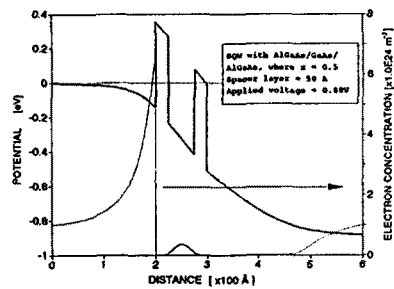


그림 3. 0.89V의 전압하에서 자기부호순환으로 계산된 전압하에 DB 구조의 전도대 밴드의 전이형태 프로파일

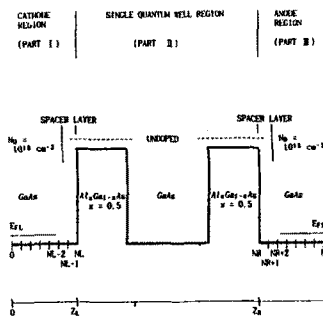


그림 4. 수직해석을 위해 나타낸 DB 공명 터널링 다이오드 구조의 전도대 밴드 계량도

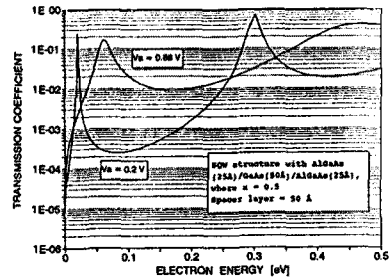


그림 4. 전압전압이 0.2와 0.88V에서 구한 주파수 곡선

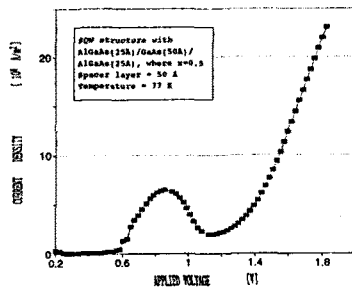


그림 5. 전압전압이 77 K에서 자기부호순환으로 계산된 전압하에 DB 구조의 전류-전압 특성곡선