

## 2 차원 전자개스(2DEG)의 수치적 연산을 위한 양자역학적 분석

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

황광철, 김진욱, 류세환, 안형근, 한득영  
(Kwang-Chuel Hwang, Jin-Wook Kim, Se-Hwan Ryu, Hyungkeun Ahn, Deuk-Young Han)  
Dept. of Electrical Engineering, Konkuk University

#### Abstract

This paper analyzed arbitrary Energy band profile heterostructures 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 to 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. Finally, theoretical predictions for both of 2DEGs and the capacitances show good agreement with the experimental data referred in this study.

**Key Words(중요용어):** 2DEG(2차원 전자개스), heterostructure(이종접합), HEMT

#### 1. 서론

양자우물 소자의 우수한 동작 특성으로 지금까지 많은 연구가 이루어져 왔다. 특히 2차원 전자개스(2DEG: 2 Dimensional Electron Gas) 농도는 이 소자의 특성을 결정하는 주요한 요소라고 말할 수 있다.

본 연구에서는 파동방정식과 Poisson 방정식을 이용하여 단일 이종 접합구조 및 이중 이종 접합구조에서 나타나는 2차원 전자개스, 양이온화 도너, 가전자대 홀, 전도대 자유전자의 농도들을 수치해석적인 방법으로 계산한다. 또한 이러한 농도분포에 의해 소자의 정전용량을 구하고 참고문헌과 그 결과를 비교, 검증한다.

#### 2. 파동 방정식

계면에 수직인 방향(z)에 대한 시간에 독립인 파동 방정식은 다음과 같다.

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

$V(z)$ 를 따라 식(1)을 풀어  $z \rightarrow -\infty$  에서

$z \rightarrow \infty$  까지 적분을 취하면 부밴드 별로 각각의 에너지  $E_i$ 를 구할 수 있다.

전위 에너지  $V(z)$ 는 다음과 같은 요소로 나눌 수 있다.

$$V(z) = V_E(z) + V_L(z) + V_X(z) \quad (2)$$

$V_E(z)$ 은 거시 에너지 준위(macroscopic potential)이며,  $V_L(z)$  주기적인 격자의 에너지 준위(periodic lattice potential), 그리고  $V_S(z)$ 는 scattering potential 이다.<sup>1)</sup>

#### 3. 전하의 분포

$V_L$ 과  $V_S$ 는 그 크기가  $V_E$ 에 비하여 매우 작으

므로 생략하면, 파동방정식 식(1)의 계산에 사용되는 z축 방향으로의 전위에너지  $V(z)$ 는 다음과 같다.

$$V(z) = V_E = -q\phi_e(z) + V_b(z) \quad (3)$$

$V_b(z)$ 는 이종접합계면에서 에너지 장벽을 형성하는 함수이고, Poisson 방정식의 해로부터 전위 에너지 함수  $\phi_e(z)$ 는 계산되어진다.

$$\frac{d^2\phi_e}{dz^2} = -\frac{q}{\epsilon} \{ \sum n_d^+(z) + n_v(z) - n_s(z) - n_c(z) \} = 0 \quad (4)$$

$n_v$ ,  $n_c$ 는 각각 홀과 전자 분포이고,  $n_d^+$ 는 양으로 이온화된 도우너의 농도이며,  $\epsilon$ 은 물질에 따른 유전율이다.

2DEG는 식(5)로 계산해 낼 수 있다.

$$n_2 = \int_{-\infty}^{\infty} n_s(z) dz \quad (5)$$

AlGaAs표면층에 형성된 AlGaAs/InGaAs/GaAs 혹은 AlGaAs/GaAs의 이종접합 구조의 경우, 금속 집합면과의 공핍층으로 인하여 전하 중성조건을 사용할 수 없다. 그러므로 식(4)대신 다음과 같은 조건식을 사용하여 페르미 준위  $E_f$ 를 구할 수 있다.<sup>3)</sup>

$$\begin{aligned} \frac{d\phi_e(z)}{dz} &= -\frac{q}{\epsilon} \int \{ n_d^+(z) + n_v(z) - n_s(z) - n_c(z) \} dz \\ &= \frac{Q}{\epsilon} \end{aligned} \quad (6)$$

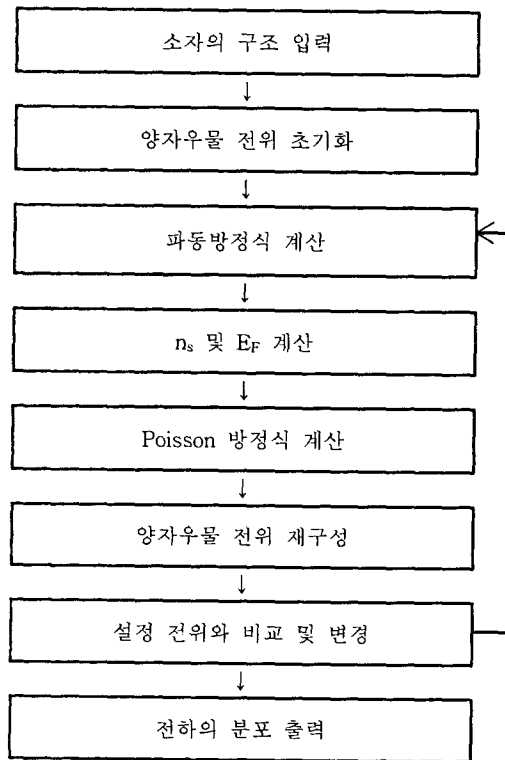
#### 4. 시뮬레이션

식(1)에서 예측한 에너지로 Numerov방법<sup>2)</sup>을 통해 파동방정식의 해를 구하면서, 그 변화치가 일정한 오차안에 들어올 때까지 반복 계산을 하였으며, 이 방법으로 임의의 전위 에너지  $V(z)$ , 즉 임의의 에너지 밴드 구조에서 파동함수를 연산해 낼 수 있다. 이것의 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 설정 하였다.<sup>4)</sup>

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 에너지 준위와 파동함수 그리고 전도대역의 self-consistent한 해를 얻었다. 본 논문의 분석 방법을 예측하기 위해 단일 이종 접합구조(AlGaAs/GaAs)를 선택하였다. 표(1)은 해석에 사용된 흐름도이다.

표 1. 흐름도



그림(1)은 게이트 전압을 0.4V을 인가하였을 때의 전도대와 파동함수  $\Psi_0, \Psi_1, \Psi_2$ 를, 그림(10)은 인가 전압에 따른  $n_d^+, n_s, n_c$ 를 나타내고 있다.

$n_s$ 의 최대치는 이종접합 계면(AlGaAs/GaAs)으로부터 70~80 Å 대에 위치하고 있다. 또한 홀의 농도인  $n_v$ 는 다른 농도치인  $n_d^+, n_s, n_c$ 와 비교하여 100~1000배 이상 작게 계산되고 있어, 이를 함께 나타내었을 때 거의 나타나지 않으므로 이것은 무시하여 도시하지 않았다.

그림(1)에서 AlGaAs와 GaAs간의 전위 장벽이 무한이 아니므로 이곳으로 파동함수가 침투되고 있음을 볼 수 있다. 또한 그림(2)에서 AlGaAs/GaAs 물성에 따라 상태 밀도가 상이한 관계로  $n_s$ 가 그 경계점에서 불연속 하게 나타나고 있다.

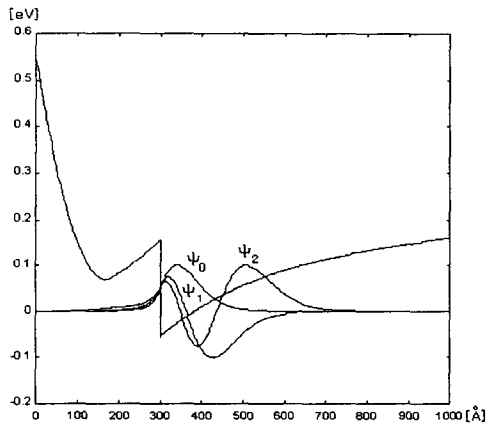


그림 1.  $Al_{0.27}Ga_{0.73}As/GaAs$  단일 이종 접합 구조 게이트 전압 0.4V 인가 시 전도대와  $\psi_0, \psi_1, \psi_2$   
fig. 1.  $Al_{0.27}Ga_{0.73}As/GaAs$  single heterostructure. Conduction band and  $\psi_0, \psi_1, \psi_2$  when gate voltage is 0.4V

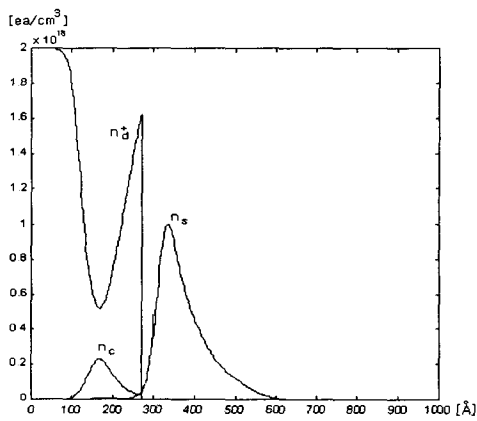


그림 2.  $Al_{0.27}Ga_{0.73}As/GaAs$  단일 이종 접합 구조 게이트 전압 0.4V 인가 시  $n_d, n_c, n_s$ 의 분포  
fig. 2.  $Al_{0.27}Ga_{0.73}As/GaAs$  single heterostructure. Distribution of  $n_d, n_c, n_s$  when gate voltage is 0.4V

그림(3)은 게이트 전압에 따른 2차원 전자 개스 농도를 참고문헌(5)에 나타난 실험치와 함께 나타

내고 있다. 참고문헌(5)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.

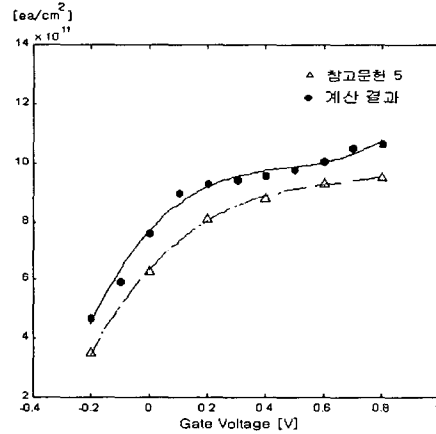


그림 3.  $Al_{0.27}Ga_{0.73}As/GaAs$  단일 이종 접합 구조 게이트 전압에 따른 2DEG의 변화  
fig. 3.  $Al_{0.27}Ga_{0.73}As/GaAs$  single heterostructure. Change of 2DEG as a function of gate voltage

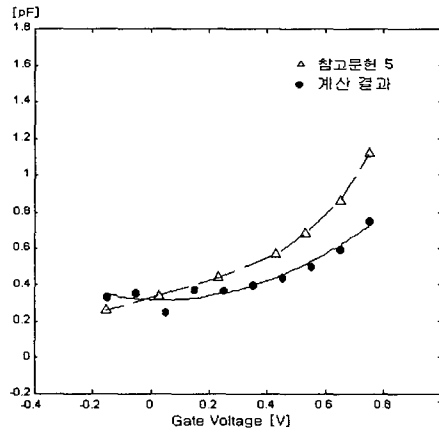


그림 4.  $Al_{0.27}Ga_{0.73}As/GaAs$  단일 이종 접합 구조 게이트 인가전압에 따른 게이트 capacitance의 변화  
fig. 4.  $Al_{0.27}Ga_{0.73}As/GaAs$  single heterostructure. Change of capacitance as a function of gate voltage

그림(4)는 게이트 전압에 따른 정전 용량의 변화로 실험치와 비교하여 높은 게이트 전압에서의 차이가 나고 있으며, 이는 본 시뮬레이션에서 AlGaAs 영역에서의 전자 농도인  $n_c$ 가 낮게 계산되기 때문으로 분석되었다.

## 5. 결론

본 연구는 임의의 이중 접합 구조를 선택하여 각각의 농도 및 파동함수를 계산해 내었으며, 이는 매개변수를 변경함으로써 lattice-match된 이중 접합 소자(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.

## 참고문헌

1. S. Datta , "Modular Series on Solide State Devices Vol. VIII" , Addison Wesley, 1989
2. P. C. Chow , "Computer Solution to the Schrödinger Equation" , J.Appl.phys. Vol40 730-734 , May 1972
3. G. Ji , T. Henderson , C. k. peng , D. Huang , H. Morkoç , "Analysis of Eney States in Modulation doped Multiquantum Well Heterostructures" , Solid-State Elec. Vol33, No2 pp247-258, 1990
4. R. Anholt "Electrical and Thermal Characterization of MESFETs, HEMTs, and HBTs" Artech House , 1995
5. H. Ahn , M. El-Nokali, "An Analytical Model for High Electron Mobility Transistors," IEEE Trans. Elect. Devices," Vol. 41, No. 6, pp.874-878, June 1994.