

## 계면경사가 있는 GaAs/(Al, Ga)As 초격자의 밴드구조

## (The Band Structure of GaAs/(Al, Ga)As Superlattice With Interface Grading)

金 長 來\*, 金 忠 源\*, 韓 百 亨\*

(Jhang Rae Kim, Choong Won Kim and Baik Hyung Han)

## 要 約

계면경사(interface grading)를 고려하여 다른 유효질량을 갖는 GaAs/(Al, Ga)As 반도체 초격자의 밴드구조를 계산하였다. 유효질량, 초격자의 주기, 우물의 폭과 장벽의 두께, 그리고 계면의 두께  $\delta$ 를 고려하여 dispersion relation을 유도하고, 위의 파라미터들이 초격자의 subband(또는 miniband) 구조와 유효 에너지갭에 미치는 영향을 살펴보았다. 특히 단일 유효질량을 가정했을 때 ( $m_a = m_b = m_c$ )의 결과와 유효질량을 다르게 고려했을 때 ( $m_a \neq m_b \neq m_c$ )의 결과를 비교하여 많은 차이가 있음을 보였다.

## Abstract

This paper calculates the band structure of the GaAs/(Al,Ga)As semiconductor superlattice with the interface grading, in consideration of different effective masses in each region. Including the effective masses, superlattice period, well and barrier widths, and the interface, the dispersion relation is derived, and the effects that the above parameters affect the subband(or miniband) structure of the superlattice and effective energy gap are investigated.

It is particularly found that this case ( $m_a \neq m_b \neq m_c$ ) is significantly different from the same effective mass case ( $m_a = m_b = m_c$ ).

## I. 서 론

1969년 Esaki와 Tsu가 처음으로 매우 얇은 층으로 구성되는 1-차원적인 주기구조를 제한한 이후로, CBE(chemical beam epitaxy), MBE(molecular beam epitaxy), 그리고 MOCVD(metal-organic chemical vapor deposition)와 같은 박막 성장기술의 발달로 양질의 이종접합구조(heterostructure) 및 초격자(superlattice)를 제작할 수 있었다.

초격자 종류에는 크게 나누어서 GaAs/AlGaAs 계와 같은 조성형 초격자(compositional superlattice)와 n-i-p-i계와 같은 불순물 주입형 초격자(doping superlattice)가 있다. 전자는 몇 개의 다른 층이 주기적으로 반복되는 구조를 가지며, 후자는 이온화된 불순물에 의해서 주기적인 밴드굽이(band bending)를 가진다. 특히, 조성형 초격자의 이종-계면(heterointerface)은 밴드 불연속(band discontinuity)에 기인한 전위의 형태에 따라서 4 가지 종류(즉 type 1, type 2-staggered, type 2-misaligned, type 3)<sup>[1]</sup>로 나누어진다.

1972년 Esaki<sup>[2]</sup> 등은 MBE로 성장시킨 GaAs/AlGaAs 반도체 초격자의 전송특성에서 부성 저항(ne-

\*正會員, 漢陽大學校 電子工學科  
(Dept. of Elec. Eng., Hanyang Univ.)  
接受日字: 1987年 10月 24日

gative resistance) 성질이 나타난다고 보고하였다. 이와 더불어 반도체 초격자의 또 다른 성질은 subband의 형성이다. 일반적으로 반도체 초격자에서 전자는 전위우물 (potential well) 내에 구속되기 때문에 2-차원적인 성질을 가진다. 또한 전위우물이 주기적이므로, 원래의 밴드구조가 섭동을 일으키게 되며, 이로 인하여 Kronig-Penney 모델과 유사하게 금지영역 (forbidden region)에 의해서 분리된 좁은 subband가 나타난다. 이러한 subband의 존재는 간접적으로 실험에 의해서 입증되었다.<sup>12)</sup>

이 분야에 대한 대부분의 연구에서는 계면의 전위가 급격한 밴드 불연속을 갖는다고 가정하여 계면효과 (interface effect)를 무시하였다. 물론, 박막 성장 기술의 진보로 인해 두 물질사이의 계면이 결정학적으로는 급격한 불연속을 나타낸다 하더라도, 수[Å] (angstrom) 정도의 두께를 갖는 계면에서는 적어도 이 계면에 인접한 많은 원자들의 결합분위기 (bonding environment)는 변화하기 때문에, 그 계면상태를 조금 더 물리적인 의미를 가지고 고찰하는 것이 바람직할 것이다.

본 논문에서는 계면경사가 있는 GaAs/(Al,Ga)As 반도체 초격자에 대하여 전이행렬 (transfer matrix) 방법을 사용하여 계면두께, 유효질량, 그리고 초격자 주기의 함수로써 dispersion relation을 유도하였다. 이로부터 GaAs/(Al, Ga)As 반도체 초격자에 대한 밴드구조를 계산하였고, 이 파라미터들이 subband구조, 즉 유효 에너지겉, 밴드폭, 그리고 기저상태 에너지에 미치는 영향을 살펴보았다.

계산결과로부터, 계면과 유효질량의 효과는 GaAs/(Al, Ga)As 초격자의 밴드구조에 수 meV 정도로 영향을 끼친다는 것을 알 수 있었다. 특히 초격자를 구성하는 각 물질의 유효질량을 고려함으로써, 단일 유효질량을 사용했을 때의 결과<sup>11)</sup>와 비교하였으며, 이로부터 많은 차이가 있음을 보였다.

II. 초격자의 에너지 밴드

GaAs/AlGaAs 초격자에서 GaAs의 전자 친화력 (electron affinity)이 AlGaAs의 것보다 더 크기 때문에 GaAs는 우물층, AlGaAs는 장벽층을 형성한다. 반도체 초격자에서 전위 우물의 폭과 초격자 주기와 같은 특성적인 양들이 전자의 자유행정거리 (mean free path)이하로 감소하면, 양자효과가 커지기 때문에 전체 전자계는 양자계가 된다. 한편 x축 방향으로 성장시킨 초격자에 대해서는 우물과 장벽은 x축에 대해 주기적인 구조를 이루며, 이 경우의 전위의 형태는 그림 1과 같이 나타낼 수 있다.

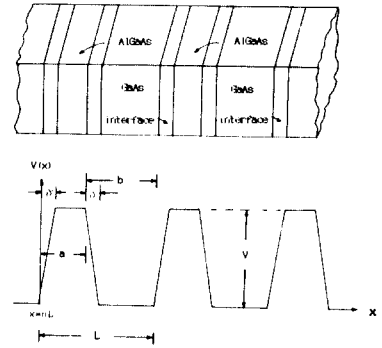


그림 1. 계면경사가 있는 GaAs/(Al, Ga)As 초격자의 전도대에 대한 band profile. 우물, 장벽 및 계면의 유효질량은 각각  $m_a$ ,  $m_b$ ,  $m_c$  이다.

Fig. 1. The band profile of the conduction band in GaAs/(Al, Ga)As superlattice with the interface grading. The effective masses in each layer of barrier, well, and the interface are  $m_a$ ,  $m_b$ , and  $m_c$ .

이 때 1-차원적인 전위에 대해 Schrödinger 방정식,

$$(-\hbar^2/2m^*) (d^2/dx^2) \phi(x) + V(x) \phi(x) = \epsilon \phi(x) \tag{1}$$

으로부터 초격자의 에너지를 구할 수 있다. 여기서,  $\phi(x)$ 는 단일 전자에 대한 파동함수이며,  $V(x)$ 는 전위,  $m^*$ 은 유효질량, 그리고  $\epsilon$ 는 밴드를 형성시키는 전자의 에너지이다. 전위  $V(x)$ 는 초격자에서 그림 1과 같은 주기구조를 가지며,

$$V(x) = \begin{cases} p(x - nL), & 0 \leq x - nL < \delta \\ V, & \delta \leq x - nL < a \\ p[a - (x - nL)] + V, & a \leq x - nL < a + \delta \\ 0, & a + \delta \leq x - nL < L \end{cases} \tag{2}$$

단,  $n=0, 1, 2, \dots$

로 주어진다. 여기에서,  $a$ 와  $b$ 는 계면두께  $\delta$ 를 포함하고 있는 각각 장벽의 두께, 우물의 폭이고  $p$ 는 증가 혹은 감소하는 기울기,  $V$ 는 밴드 불연속의 크기이며,  $\delta$ 는 계면의 두께로서 물질의 종류 및 경계면의 상태에 관계되는 파라미터이다. 그리고,  $L$ 과  $V$ 는 각각  $L=a+b$ ,  $V=p \cdot \delta$ 의 관계를 갖는다. (1)식으로부터,  $n$ 번째 주기에서의 파동함수는 각각의 영역에 대해서,

$$\phi_n(x) = A_n \cdot Ai[Z(x - nL)] + B_n \cdot Bi[Z(x - nL)], \quad 0 \leq x - nL < \delta, \tag{3}$$

$$\phi_2(x) = C_n \cdot \exp[k_b(x-nL)] + D_n \cdot \exp[-k_b(x-nL)],$$

$$\delta \leq x-nL < a, \quad (4)$$

$$\phi_3(x) = E_n \cdot \text{Ai}[Z'(x-nL)] + F_n \cdot \text{Bi}[Z'(x-nL)],$$

$$a < x-nL < a + \delta, \quad (5)$$

$$\phi_4(x) = G_n \cdot \exp[ik_a(x-nL)] + H_n \cdot \exp[-ik_a(x-nL)],$$

$$a + \delta < x-nL < L, \quad (6)$$

로 얻어진다. 여기서, (3) 및 (5)식은  $n$ 번째 주기의 계면에 해당하는 해이며, 해는 적당한 좌표변환<sup>(4)</sup>에 의해서 Airy 함수  $\text{Ai}(x)$ ,  $\text{Bi}(x)$ <sup>(5)</sup>가 된다. 여기서 사용된 변환계수 사이에는,

$$Z(x) = \alpha_1^{1/3} x - \epsilon_1 \alpha_1^{2/3},$$

$$Z'(x) = \alpha_2^{1/3} \cdot x - \epsilon_2 \alpha_2^{2/3}$$

$$= -Z(x) - (2m_c/\hbar^2) (V+p \cdot a),$$

$$\epsilon_1 = 2m_c \epsilon/\hbar^2,$$

$$\epsilon_2 = \epsilon_1 - (2m_c/\hbar^2) (V+p \cdot a) = (2m_c/\hbar^2)$$

$$(\epsilon - V - p \cdot a), \quad (7)$$

$$\alpha_1 = 2m_c p/\hbar^2, \quad \alpha_2 = -\alpha_1,$$

$$k_a^2 = 2m_a \epsilon/\hbar^2, \quad k_b^2 = (2m_b/\hbar^2) (V - \epsilon)$$

의 관계가 있다. 또한,  $A_n, B_n, \dots, G_n (n=0, 1, 2, \dots)$ 은  $n$ 번째 주기에서 정합조건(matching condition)에 의해서 결정되는 파동함수들의 계수이고, 예를 들어  $x=a+nL$ 에서의 경계조건,

$$\phi_2(x) = \phi_3(x), \quad (x=a+nL \text{ 에서})$$

$$(1/m_b) [d\phi_2(x)/dx] = (1/m_a) [d\phi_3(x)/dx],$$

$$(x=a+nL \text{ 에서}) \quad (8)$$

을 통해서 유일하게 결정된다. (7), (8)식에서  $m_a, m_b$ , 그리고  $m_c$ 는 각각 GaAs, AlGaAs, 그리고 계면에서의 유효질량이다. 이와 같은 정합조건을 통해 각 파동함수의 진폭은  $2 \times 2$  행렬에 의해서,

$$\begin{bmatrix} G_n \\ H_n \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} G_{n-1} \\ H_{n-1} \end{bmatrix} = M^n \begin{bmatrix} G_0 \\ H_0 \end{bmatrix} \quad (9)$$

$$M = Q_4^{-1} P_4 P_3^{-1} Q_3 Q_2^{-1} P_2 P_1^{-1} Q_1, \quad (10)$$

을 얻을 수 있으며 (10)식에서  $P, Q$  행렬은,

$$P_j = \begin{bmatrix} \text{Ai}(R_j) & \text{Bi}(R_j) \\ \text{Ai}'(R_j)/m_c & \text{Bi}'(R_j)/m_c \end{bmatrix}, \quad j=1, 2, 3, 4 \quad (11)$$

$$Q_j = \begin{bmatrix} \exp(iK_j \cdot x_j) & \exp(-iK_j \cdot x_j) \\ iK_j \cdot \exp(iK_j \cdot x_j)/m_b & -iK_j \cdot \exp(-iK_j \cdot x_j)/m_b \end{bmatrix}, \quad j=2, 3 \quad (12)$$

$$Q_1 = \begin{bmatrix} \exp(iK_j \cdot L) & \exp(-iK_j \cdot L) \\ iK_j \cdot \exp(iK_j \cdot L)/m_a & -iK_j \cdot \exp(-iK_j \cdot L)/m_a \end{bmatrix}, \quad (13a)$$

$$Q_4 = \begin{bmatrix} \exp(iK_j \cdot x_4) & \exp(-iK_j \cdot x_4) \\ iK_j \cdot \exp(iK_j \cdot x_4)/m_a & -iK_j \cdot \exp(-iK_j \cdot x_4)/m_a \end{bmatrix}, \quad (13b)$$

의 관계식을 갖는다. 여기에서  $j=1, 2$ 에 대해  $R_j = Z_j = Z(x_j)$ 이며,  $j=3, 4$ 에 대해서  $R_j = Z'_j = Z(x_j)'$ 이다. 또한  $j=2, 3$ 에 대해  $K_j = k_b$ 이고,  $j=1, 4$ 에 대해서는  $K_j = k_a$ 이다. (11), (12) 및 (13)식에서  $x_1 = 0, x_2 = \delta, x_3 = a$ , 그리고  $x_4 = a + \delta$ 이며,  $\text{Ai}'(R) | \text{Bi}'(R) |$ 은  $x = x_j$ 에서  $x$ 에 대한  $\text{Ai}(R_j) | \text{Bi}(R_j) |$ 의 미분이다.

(10)식을 계산하는 데 있어서, Airy 함수들의 Wronskian 이

$$W \{ \text{Ai}(x), \text{Bi}(x) \} = \text{Ai}(x) \text{Bi}'(x) - \text{Ai}'(x) \text{Bi}(x) = 1/\pi \quad (14)$$

인 성질을 이용하였다. (10)식의  $M$ 은  $2 \times 2$  행렬들의 곱으로 구성되며,  $n$ 번째 주기와  $n-1$ 번째 주기 사이의 파동함수와 관련된 변환행렬(transformation matrix)로서 (11-14) 식과 관련된 행렬  $M$ 의 행렬식  $|M|$ 은 1이 된다. 따라서 dispersion relation,

$$\cos(qL) = \text{Trace}(M/2) \quad (15)$$

을 얻을 수 있다. (10-14) 식으로부터 정확한 dispersion relation을 유도할 수 있으나, 표현식이 복잡하고 그의 물리적인 의미가 불분명하기 때문에 근사화를 취할 필요가 있다. 즉 계면의 두께  $\delta$ 가 작은 경우에는  $\delta$ 의 고차항들은 무시할 수 있다. (7)식으로부터  $Z'_4 = Z'_3 + \alpha_2^{1/3} \cdot \delta$ 의 관계가 있으므로, Airy 함수들과 그의 미분을 Taylor 급수로 전개하면, 아래의 식과 같이 얻을 수 있다.

$$Q_i(R_4) = Q_i(Z'_4)$$

$$= Q_i(Z'_3 + \alpha_2^{1/3} \cdot \delta)$$

$$= Q_i(Z'_3) + \alpha_2^{1/3} \cdot \delta Q_i'(Z'_3) + (1/2) \alpha_2^{2/3} \cdot \delta^2 Z'_3 Q_i(Z'_3) + (1/6) \alpha_2 \cdot \delta^3 [Q_i(Z'_3) + Z'_3 Q_i'(Z'_3)] + \dots \quad (16a)$$

$$Q_i'(R_4) = Q_i'(Z'_4)$$

$$= Q_i'(Z'_3 + \alpha_2^{1/3} \cdot \delta)$$

$$= \alpha_2^{1/3} \cdot \{ Q_i'(Z'_3) + \alpha_2^{1/3} \cdot \delta \cdot Z'_3 \cdot Q_i(Z'_3) + (1/2) \alpha_2^{2/3} \cdot \delta^2 [Q_i(Z'_3) + Z'_3 \cdot Q_i'(Z'_3)] + (1/6) \alpha_2 \cdot \delta^3 \cdot Q_i'(Z'_3) + (1/6) \alpha_2 \delta^3 [Q_i'(Z'_3) + Z'_3 \cdot \delta^2 \cdot Q_i(Z'_3)] \} + \dots \quad (16b)$$

여기서  $Q_i$ 는  $A_i, B_i$ 를 나타내며,  $Q_i'$ 은  $Z'=Z'_j$  ( $j=3,4$ )에서의  $Z'$ 에 대한  $Q_i$ 의 미분을 의미한다. 또한,  $A_i(Z_2), A_i'(Z_2), B_i(Z_2),$  그리고  $B_i'(Z_2)$ 에 대해서도  $Z_1$ 의 향으로 (16)식과 비슷하게 쓸 수 있다. 한편 (16)식을 얻는 데 있어서 관계식<sup>15)</sup>  $Q_i'(x) = x \cdot Q_i(x)$ 을 이용하였다. 이제 (11-14) 및 (16)식을 이용하여  $K, \delta$ 의 2-차항까지 고려하면, (15)식으로부터 dispersion relation은 (17)식으로 얻을 수 있다.

$$\begin{aligned} \cos(qL) = & \cosh\beta \cos \tau (1 + \delta^2 k_{c12}^2) \\ & + \sinh\beta \sin \tau \{ (m_a/m_b) (k_b/k_a) (1 + \delta^2 k_{c13}^2) \\ & /3) / 2 - (m_b/m_a) (k_a/k_b) (1 + \delta^2 k_{c23}^2 / 3) / \\ & 2 + (m_a m_b / m_c^2) / (k_a k_b) \delta^2 k_{c12}^2 / 8 \\ & + (m_c^2 / m_a m_b) \delta^2 k_a k_b / 2 \} \\ & + \cosh\beta \sin \tau \{ (m_a/m_c) \delta k_{c12}^2 / k_a / 2 - (m_c / m_a) k_a \delta \} \\ & + \sinh\beta \cos \tau \{ (m_b/m_c) \delta k_{c12}^2 / k_b / 2 + (m_c / m_b) k_b \delta \} \end{aligned} \quad (17)$$

여기서, 사용된 변수사이에는 (18)식과 같은 관계식을 갖는다.

$$\begin{aligned} \beta = & k_b(a - \delta), \quad \tau = k_a(b - \delta), \\ k_a^2 = & 2m_a \epsilon / \hbar^2, \quad k_b^2 = 2m_b(V - \epsilon) / \hbar^2, \\ k_{c12}^2 = & 2m_c(V - 2\epsilon) / \hbar^2, \\ k_{c13}^2 = & 2m_c(V - 3\epsilon) / \hbar^2, \\ k_{c23}^2 = & 2m_c(2V - 3\epsilon) / \hbar^2 \end{aligned} \quad (18)$$

위의 (17)식은  $m_a = m_b = m_c$ 이고  $\delta = 0$ 일 때, Kronig-Penney 모델에 대한 dispersion relation으로 된다. 한편 (17)식은 계면경사를 고려한 GaAs/AlGaAs 초격자에서 계면두께에 관한 고차항을 무시하였기 때문에 작은 오차를 내포하고 있으나, 각기 다른 유효질량을 포함한 식이므로 계면의 두께에 따른 에너지 밴드구조의 변화는 물론이고, 동일한 유효질량을 이용하였을 때의 결과와 쉽게 비교할 수 있다.

(17)식은 비선형 다항식이므로, 이의 해는 반복계산법에 의해서 구해질 수 있다.

### III. 계산에 이용한 파라미터

이종접합 계면에서 전도대와 가전자대에는 밴드 불연속이 나타나는데, 이것은 전위우물과 전위장벽을 형성하여 양자우물이나 초격자내에 갇힌 전자와 정공의 모든 물리적 성질을 지배하므로, 소자의 설계에 있어서 매우 중요한 파라미터<sup>16)</sup>이다. 그러나 가장 많이 연구된 GaAs/(Al, Ga)As 계에서 조차,  $\Delta E_c, \Delta E_v$ 와 같은 파라미터를 실험적으로 결정하는 것이 만족스럽지 못하다. 본 논문에서는 GaAs/(Al, Ga)As 초격자에 대하여 이 양들과  $\Delta E_g$ 와의 비<sup>18)</sup> ( $\Delta E_c$

$/\Delta E_g, \Delta E_v/\Delta E_g$ )를 0.85, 0.15로 각각 취하였다.

한편 GaAs/(Al, Ga)As 초격자의 에너지 밴드구조는 Al의 조성비(mole fraction)  $x$ 에 따라서 변화한다. Al의 농도가 40% 이하일 때, GaAs와 AlGaAs 반도체는  $\Gamma$ -점( $q=0$ 인 점)에서 직접 천이형 밴드갭(direct band gap)<sup>17)</sup>을 이루므로  $x=0.3$ (30%)으로 하였다. 따라서 에너지갭에 대한 경험적인 표현식,<sup>17~18)</sup>  $\Delta E_g = 1.155x + 0.37x^2$  [eV]을 사용하면,  $\Delta E_c = 0.3228$  [eV],  $\Delta E_v = 0.057$  [eV]를 얻을 수 있다.

$x=0.3$ 으로 하면, 전자에 대한 유효질량은 GaAs 영역에서  $m_a = 0.067m_e$ 으로 주어지고, AlGaAs 영역에서는  $x$ 의 함수로써  $m_b = m_e(0.067 + 0.083x)$ 로 주어진다.<sup>17~18)</sup> 가벼운 정공(light hole)에 대하여 GaAs, AlGaAs 영역에서 각각  $m_a = 0.08m_e, m_b = 0.102m_e$ 인 유효질량을 가지며, 무거운 정공(heavy hole)의 유효질량은 GaAs, AlGaAs 영역에서 각기  $m_a = 0.45m_e, m_b = 0.51m_e$ <sup>19~21)</sup>이다. 여기서  $m_e$ 는 자유공간에서 전자의 질량이다. 그리고 두께가  $\delta$ 인 계면에서의 유효질량은 각각의 캐리어의 유효질량에 대해서 그 평균값을 취하였다.

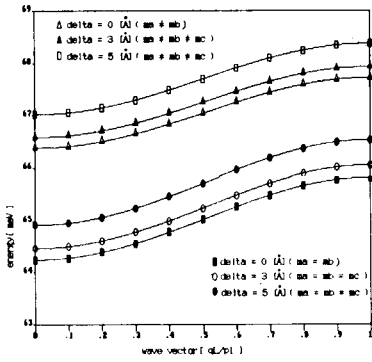
### IV. 계산결과 및 고찰

에너지 밴드구조 계산에서 주된 관심은 계면경사 및 유효질량 효과가 subband 구조, 유효 에너지갭, 기저상태 에너지, 그리고 밴드폭에 미치는 영향을 살펴보는 데 있다. 또 초격자의 주기가 이와 같은 초격자의 성질에 어떤 영향을 미치는 가를 알아보려고 한다.

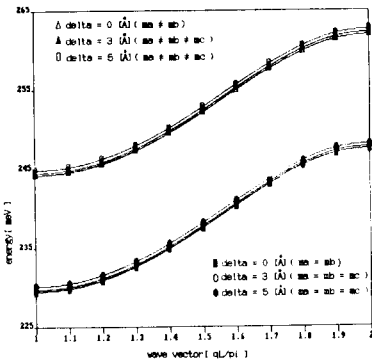
그림 2(a)는 주기를  $L = 120$  [Å]으로 하고,  $a = b = L/2$ 로 했을 때에 GaAs/(Al, Ga)As 초격자의 전도대에 대한 제 1 subband 에너지의 계면두께에 따른 변화를, 그리고 그림 2(b)는 제 2 subband 에너지 변화를 나타낸다. 특히 유효 질량이 동일한 경우와 다른 경우를 비교해 보면, 상당한 에너지 차이를 가진다는 것을 알 수 있다. 고정된  $q$ 값에 대해  $\delta$ 가 커짐에 따라서, 각각의 subband 에너지는 거의 비슷한 변화율로 증가하고 있다.

보통의 밴드구조 계산에서와는 달리 계면효과  $\delta$ 가 각각의 subband 구조에 미치는 영향은 수 meV 정도내에서 차이를 보이고 있다.

그림 3은  $\delta$ 가 3 [Å]일 때 주기에 따른 기저상태 에너지(ground state energy)의 변화를 각각의 유효질량에 대하여 나타내었다. 실제로 초격자의 밴드구조는 주기에 따라서 크게 달라지는데, 그림 3으로부터 주기가 증가 함에 따라 기저상태 에너지는 큰 폭으



(a)



(b)

그림 2. (a)  $L = 120 [\text{Å}]$ ,  $a = b = L/2$  일 때, 제1 subband 구조의  $\delta$ 에 따른 변화. (b)  $L = 120 [\text{Å}]$ ,  $a = b = L/2$  일 때,  $\delta$ 에 따른 제2 subband의 변화.

위쪽의 밴드는 유효질량이 다른 경우를 나타내고, 유효질량이 같은 경우의 밴드는 아래쪽에 나타나 있다.

Fig. 2. (a) First subband structure versus  $\delta$ , where  $L = 120 [\text{Å}]$ ,  $a = b = L/2$ . (b) Second subband structure versus  $\delta$ , where  $L = 120 [\text{Å}]$ ,  $a = b = L/2$ .

The three upper bands indicate the case that  $m_a \neq m_b \neq m_c$ , the three lower band show the one that  $m_a = m_b = m_c$ .

로 감소함을 알 수 있다. 이것은 단일 양자우물 문제에서 얻었던 결과와 일치한다.

주기가 큰 초격자에서는 전위우물의 폭이 효과적으로 증가하기 때문에, 기저상태 에너지는 전위우물 바닥에 가까워진다. 마찬가지로 이유로 주기가 작은 경우에는 우물의 폭이 작아지기 때문에, 기저상태 에너지는 우물의 꼭대기로 접근한다. 초격자의 파동벡터  $p$ 와  $\delta$ 를 일정하게 두었을 때, 주기에 따라서 기저상

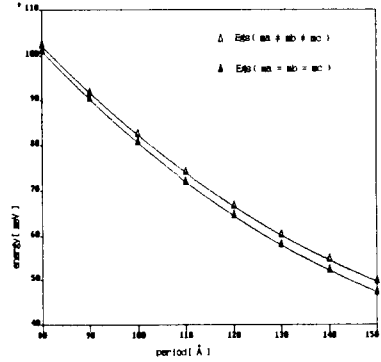


그림 3.  $a = b = L/2$ 이고  $\delta$ 가  $3 [\text{Å}]$ 로 고정되었을 때,  $m_a \neq m_b \neq m_c$ 인 경우와  $m_a = m_b = m_c$ 인 경우에 대한 기저상태 에너지의 주기에 따른 변화.

Fig. 3. Ground state energy versus period for  $m_a \neq m_b \neq m_c$  and  $m_a = m_b = m_c$ , where  $\delta = 3 [\text{Å}]$  and  $a = b = L/2$ .

태 에너지가 크게 변화하므로, 이러한 주기에 대한 영향은 초격자 소자에서의 응용을 제한한다.

그림 4는 주기가  $80 [\text{Å}]$ 일 때, 제1 subband 폭의 변화를 유효질량이 같은 경우와 다른 경우에 대해서  $\delta$ 의 함수로 나타내었다. 이로부터 계면두께  $\delta$ 가 증가함에 따라 밴드폭이 증가함을 알 수 있다. 한편 유효질량이 다른 경우에는 같은 경우보다 낮은 에너지에서 변화함을 볼 수 있다.

GaAs/(Al, Ga)As 반도체 초격자에서 주기는 계면 두께를 포함한 우물 폭  $b$ 와 장벽의 두께  $a$ 를 합한

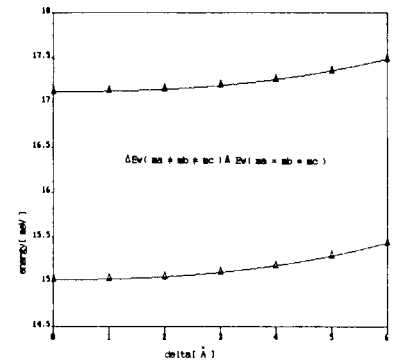


그림 4. 유효질량이 같을 때와 다를 때의  $\delta$ 에 대한 제1 subband 폭의 변화. 단  $L = 80 [\text{Å}]$ ,  $a = b = L/2$ 이다.

Fig. 4. First subband width versus  $\delta$  for  $m_a \neq m_b \neq m_c$  and  $m_a = m_b = m_c$ , where  $L = 80 [\text{Å}]$ ,  $a = b = L/2$ .

것이므로, Brillouin zone의 크기는  $2\pi/(a+b)$ 가 된다. 단일물질에서 단위세포의 크기는 격자정수가 되나, 초격자의 경우에는 예로서 GaAs가 10층, AlGaAs가 10층으로 이루어질 때에  $(a+b)$ 는  $(20 \times \text{격자정수})$ 가 되어 Brillouin zone의 크기는 20배로 감소한다. 따라서 주기  $(a+b)$ 가 크면 클수록 subband의 폭은 더욱 좁아진다.

그림 5에 계면두께  $\delta$ 가  $3[\text{\AA}]$ 일 때, 주기의 변화에 따른 제 1 subband 폭의 변화를 나타냈다. 이 결과로부터 주기가 증가함에 따라서 밴드의 폭이 감소하는데, 주기가 큰 경우에는 밴드폭이 거의 0이 됨을 볼 수 있다. 이는 동일한 크기의 Brillouin zone에 대해 주기가 커지면 subband가 많이 나타남을 의미한다. 특히 유효질량이 같은 경우보다 다른 경우에 더 작은 밴드 폭을 갖는다.

그림 6은 주기를  $100[\text{\AA}]$ 으로 주었을 때, 각각 가벼운 정공과 무거운 정공에 대하여  $\delta$ 가 증가함에 따른 유효 에너지갭의 변화를 보여준다. 유효질량이 같은 경우와 다른 경우에, 유효 에너지갭은 일정한 차이를 유지하며 증가하는 것을 볼 수 있다. 특히  $\delta$ 가 증가함에 따라 증가하는 폭이 점차 커지는 것을 알 수 있다. 한편 유효 에너지갭은 전도대의 가장 낮은 에너지 (lowest conduction subband)와 가전자대의 가장 높은 에너지 (uppermost valence subband) 사이의 차로 정의된다.

유효 에너지갭은 응용소자에서 전자-정공 쌍 (electron-hole pair) 들이 생성되는 데에 필요한 최소 에너지와 밀접한 관계를 지니므로, 매우 중요한 정보

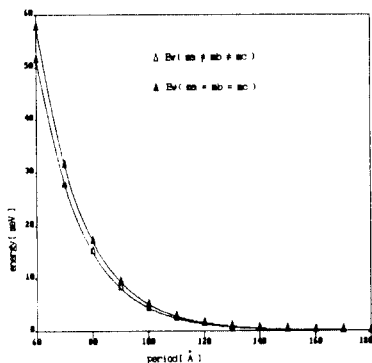


그림 5.  $\delta = 3[\text{\AA}]$ 일 때, 주기에 따른 제 1 subband 폭의 변화를  $m_a \neq m_b \neq m_c$  인 경우와  $m_a = m_b = m_c$  인 경우에 대하여 보았다. 단  $a = b = L/2$ .

Fig. 5. First subband width versus period for  $m_a \neq m_b \neq m_c$  and  $m_a = m_b = m_c$ , where  $a = b = L/2$ ,  $\delta = 3[\text{\AA}]$ .

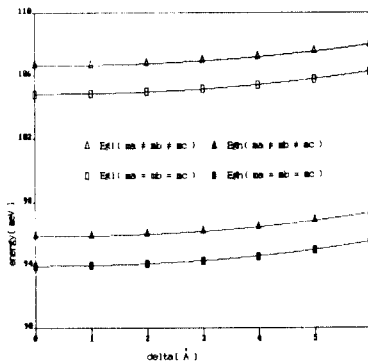


그림 6. 가벼운 정공과 무거운 정공에 대한 유효 에너지갭의 변화를  $m_a \neq m_b \neq m_c$  인 경우와  $m_a = m_b = m_c$  인 경우에 대하여 계면두께  $\delta$ 의 함수로 나타내었다. 단  $L = 100[\text{\AA}]$ ,  $a = b = L/2$ .

Fig. 6. Effective energy gap on heavy hole and light hole versus  $\delta$  for  $m_a \neq m_b \neq m_c$  and  $m_a = m_b = m_c$ , where  $L = 100[\text{\AA}]$ ,  $a = b = L/2$ .

를 내포하고 있다. 만일 Coulomb 및 phonon interaction이 무시되면, 전자-정공 쌍의 생성에 필요한 최소에너지는 유효 에너지갭이 된다.

계면두께  $\delta$ 가  $3[\text{\AA}]$ 일 때, 유효 에너지갭의 주기에 따른 변화를 그림 7에 나타내었다. 그림 7로부터 알 수 있듯이, 주기가 커지면 유효 에너지갭이 매우 급격하게 감소하고 있다. 또한 이것을 유효질량이 같은 경우와 다른 경우에 대한 유효 에너지갭의 변화도

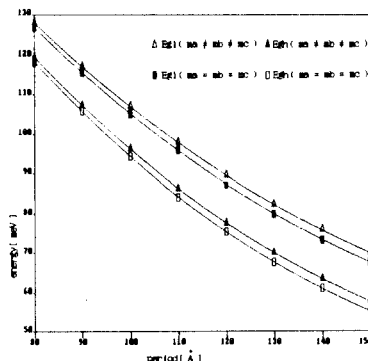


그림 7.  $\delta$ 가  $3[\text{\AA}]$ ,  $a = b = L/2$ 일 때, 유효 에너지갭의 주기에 따른 변화를  $m_a \neq m_b \neq m_c$  및  $m_a = m_b = m_c$  인 경우에 대하여 나타냈다.

Fig. 7. Effective energy gap versus period for  $m_a \neq m_b \neq m_c$  and  $m_a = m_b = m_c$ , where  $\delta = 3[\text{\AA}]$ , and  $a = b = L/2$ .

함께 나타났다. 이와 같이 모든 캐리어에 대해서 유효질량의 효과는 매우 크게 나타나고 있다.

## V. 결 론

계면경사가 있는 GaAs/(Al, Ga)As 반도체 초격자에서 계면이 선형적으로 증가, 혹은 감소하는 전위를 가정하여 각 영역에서의 유효질량이 같은 경우와 다른 경우에 대해서 초격자의 밴드구조를 조사하였다.

계면두께  $\delta$ 와 유효질량이 에너지갭, 기저상태 에너지, 그리고 밴드 폭에 미치는 영향은 수 meV 정도였다. 주목할 것은 우물, 장벽, 그리고 계면에서의 유효질량을 다르게 했을 때의 결과와 동일하게 두었을 때의 결과(1)의 결과)가 많은 차이를 보인다는 점이다.

계산결과로부터 계면두께  $\delta$ 와 유효질량이 에너지갭, 기저상태 에너지, 그리고 밴드폭에 미치는 영향을, 주기가 일정한 경우( $\delta$ 의 함수로)와  $\delta$ 가 일정한 경우(주기의 함수로)에 대하여 아래에 나타내었다.

### 1. 주기가 일정할 때

계면두께  $\delta$ 가 증가하면, 에너지갭, 기저상태 에너지, 그리고 밴드폭은 모두 증가했다. 이 경우에  $\delta$ 가 고정되어 있을 때의 다른 유효질량 효과는 에너지갭과 기저상태 에너지를 증가시키며, 밴드폭을 감소시켰다.

### 2. 계면두께 $\delta$ 가 일정할 때

초격자의 주기  $L$ 이 증가하면, 에너지갭, 기저상태 에너지, 그리고 밴드폭은 모두 급격하게 감소하며,  $\delta$ 가 일정할 때 유효질량을 다르게 고려한 경우에 대하여 에너지갭과 기저상태 에너지는 유효질량을 같게 한 경우보다 증가하였다. 한편 밴드폭은 감소하였다.

이와 같은 결과로부터 계면두께  $\delta$ 와 유효질량이 밴드구조에 중요한 영향을 미치고 있다는 것을 알 수 있었다.

본 논문에서는 전도대와 가전자대의 밴드 불연속의 크기를 각각 0.3228 eV, 0.057 eV로 하였으며, 계면에서의 유효질량을 GaAs와 AlGaAs에 대한 유효질량의 평균값으로 취하였다.

밴드 불연속의 크기는 초격자내의 캐리어의 성질을 지배하기 때문에 이들의 정확한 값을 알아야 초격자 성질을 분명하게 명시할 수 있다. 이런 의미에서 이 밴드 불연속의 크기를 이론적으로나 실험적으로 정확하게 결정하는 일이 중요한 과제이다.

한편 계면이 큰 경우에는 계면에서의 유효질량을 일

정하게 취급하는 것은 많은 오차를 가져올 수 있기 때문에, 이에 대한 연구가 필요하며, 아울러 본 논문에서는 계면의 포텐셜이 선형적이라고 가정하였으나, 보다 실제적인 포텐셜 형태가 필요하다.

## 參 考 文 獻

- [1] G. Allan, G. Bestard, N. Boccaro, M. Lannoo and M. Voos, *Heterojunctions and Semiconductor Superlattices*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1986.
- [2] L. Esaki, L. L. Chang, W. W. Howard and V. L. Rideout, *Proceedings of 11th International Conference on the Physics of Semiconductors*, Warsaw, Poland, vol.1, p.431, 1972.
- [3] H. X. Jiang, J. Y. Lin, "Band structure of superlattice with graded interfaces," *J. Appl. Phys.* vol. 61, no.2, p.624, 1987.
- [4] E. J. Austin, M. Jaros, "Electronic structure of an isolated GaAs-GaAlAs quantum well in a strong electric field," *Phys. Rev.* vol. B31, no. 8, p. 5569, 1985.
- [5] A. Rabinovitch, J. Zak, "electrons in crystals in a finite-range electric field," *Phys. Rev.* vol. B4, p.2358, 1971.
- [6] H. Kroemer, "Heterostructure devices: A device physicist looks at interfaces," *Surface Science*, 132, p.543, 1983.
- [7] H. J. Lee, L. Y. Juravel, J. C. Wolley and A. J. Springthorpe, "Electron transport and band structure of (Al, Ga)As alloys," *Phys. Rev.* vol. B21, p.659, 1980.
- [8] W. T. Masselink, Y. C. Chang and H. Morkoc, "Binding energies of acceptors in GaAs/(Al, Ga) As quantum wells," *Phys. Rev.* vol. B28, p.7373, 1983.
- [9] C. Mailhot, Y. C. Chang and T. C. McGill, "Energy spectra of donors in GaAs/(Al, Ga) As quantum well structures in the effective mass approximation," *Phys. Rev.* vol. B26, p. 4449, 1982.
- [10] C. Priester, G. Allan and M. Lannoo, "Wannier excitons in GaAs/(Al, Ga) As quantum-well structures: Influence of the effective-mass mismatch," *Phys. Rev.* vol. B30, p.7302, 1984.
- [11] H. C. Casey, M. B. Panish, "Hetrostructure lasers," Academic, New York, Part A, Chap.4, 1978.