

論文96-33A-7-25

# 이종(異種)구조에서 위치의 함수로 표시된 효과질량을 포함하는 Schrödinger 방정식을 위치에 무관한 효과질량을 포함하는 방정식으로 변환하는 방법 및 그 응용

(Method of Converting Schrödinger Equation for Heterostructures with a Position-dependent Effective Mass to the Equation with a Position-independent Effective Mass and Its Applications)

李 竝 浩 \*, 李 旭 \*\*

(Byoungho Lee and Wook Lee)

## 요 약

이종구조에서 위치의 함수로 표시된 효과질량을 포함한 Schrödinger 방정식을 간단한 좌표변환을 통해 위치에 무관한 효과질량을 포함한 방정식으로 바꾸는 방법을 제안한다. 이 방법은 Schrödinger 방정식에서 위치에 따라 변하는 효과질량이 divergence 연산자와 gradient 연산자 사이에 삽입된 것이 어떤 영향을 주는지를 개념적으로 파악하게 해준다. 또한, 이 방법을 이용해서 위치에 따라 효과질량이 다른 여러 가지 이종구조에 대해 투과계수 등의 특성식을 쉽게 구할 수 있음을 보인다.

## Abstract

A simple coordinate transformation method is suggested that converts Schrödinger's equation involving a position-dependent effective mass in a heterostructure to an equation involving a position-independent effective mass. This method enables the conceptual study of the effect of the position-dependent effective mass inserted between the divergence operator and the gradient operator in Schrödinger's equation. It is also shown that the characteristics such as a transmission coefficient in various heterostructures involving a position-dependent effective masses can be obtained with ease by the suggested method.

## I. 서 론

이종접합구조(heterostructure)에서 전자나 홀(hole)의 효과질량(effective mass)이 위치의 함수로 나타남은 잘 알려져 있다. 이와 같이 위치의 함수인 질량을

Schrödinger 방정식에 어떻게 포함시켜야 하는가에 대해 초기에는 논란이 있었으나,<sup>1,2,1</sup> Roos-Einevoll의 모델이 받아들여졌고<sup>3,1</sup> 이것이 현재 사용되고 있다. 이 모델에서는 다음과 같은 시간에 무관한 Schrödinger 방정식을 사용한다.

$$-\frac{\hbar^2}{2} \nabla \cdot \left\{ \frac{1}{m(\mathbf{r})} \nabla \psi(\mathbf{r}) \right\} + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (1)$$

이러한 Schrödinger 방정식에서  $\psi(\mathbf{r})$ 과  $\frac{1}{m(\mathbf{r})} \nabla \psi(\mathbf{r})$ 이 연속인 함수여야 한다. 주어진 문제

\* 正會員, \*\* 準會員, 서울大學校 電氣工學部

(School of Electrical Engineering, Seoul National University)

接受日字: 1996年2月9日, 수정완료일: 1996年5月18日

에 대하여 식 (1)을 푸는 일은 흔히 행하여지고 있으나, divergence 연산자와 gradient 연산자 사이에 질량의 역수가 삽입된 것이 어떤 영향을 미치는지를 개념적으로 파악하고자 한 시도는 저자들이 아는 한 없었다. 본 논문에서는 간단한 방법을 사용해 이를 시도하고자 한다. 또한, 이 방법이 포텐셜(potential) 장벽 또는 다중양자우물(multiple quantum-well) 등의 특성 해석 및 시뮬레이션에 효과적으로 이용될 수 있음을 보이고자 한다. 식 (1)을 사용하여 터널링 구조 등을 시뮬레이션 하는 예가 많으나,<sup>[4]</sup> 계산의 편의상 효과 질량이 위치에 무관하게 일정하다는 가정 하에 시뮬레이터를 만드는 경우도 많다. 상용화된 소프트웨어 Interquanta<sup>[5]</sup>와 public domain에 공개된 Walker와 Gathright의 프로그램<sup>[6]</sup>이 그 예이다. 이러한 소프트웨어에서는 사용자(user)가 효과질량을 위치에 따라 다르게 입력시킬 수가 없다. 그러나, 본 논문이 제시하는 방법에 의하면 이러한 소프트웨어로도 위치에 따라 효과질량이 달라지는 이종접합구조에 대한 시뮬레이션을 수행할 수 있다.

## II. 제안된 방법

이하에서는 편의상 Schrödinger 방정식을 1차원 공간으로 국한시켜 다루고자 한다. 이 경우 식 (1)은 다음과 같이 표시된다.

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dx} \left\{ \frac{1}{m(x)} \frac{d}{dx} \psi(x) \right\} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (2)$$

새로운 변수  $y$ 를 다음과 같이 정의하면( $m_0$ 는 상수),

$$y \equiv \int_x^x \frac{m(x')}{m_0} dx' \quad (3)$$

$y$ 에 대한 미분은 다음과 같이 표시된다.

$$\frac{d}{dy} = \frac{dx}{dy} \frac{d}{dx} = \frac{m_0}{m(x)} \frac{d}{dx} \quad (4)$$

식 (2)의 양변에  $\frac{m_0}{m(x)}$ 를 곱하고 식 (4)를 이용하면 다음의 방정식을 얻는다.

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2 \Psi(y)}{dy^2} + \frac{m_0}{M(y)} U(y) \Psi(y) = \frac{m_0}{M(y)} E \Psi(y) \quad (5)$$

여기에서

$$\Psi(y) \equiv \psi(x), \quad M(y) \equiv m(x), \quad U(y) \equiv V(x) \quad (6)$$

이다. 식 (5)를 다음과 같이 고칠 수 있다.

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2 \Psi(y)}{dy^2} + V_{eff}(y, E) \Psi(y) = E \Psi(y) \quad (7)$$

여기에서, 유효 포텐셜  $V_{eff}$ 는 위치와 에너지의 함수로서 다음과 같이 표시된다.

$$V_{eff}(y, E) \equiv \frac{m_0}{M(y)} \{U(y) - E\} + E \quad (8)$$

식 (7)은 식 (2)와 동일한 방정식이나, 질량이  $m_0$ 로 위치에 무관하게 일정한 Schrödinger 방정식의 형태이다. 단, 유효 포텐셜이 식 (8)과 같이 에너지에 따라 달라진다. 식 (2)에서의  $\psi(x)$ 의 연속조건은 식 (7)에서  $\Psi(y)$ 의 연속조건이 된다. 이는 식 (3)에서 효과질량이 delta 함수가 아닌 한,  $y$ 는  $x$ 에 따라 연속적으로 변하기 때문이다. 또한, 식 (2)에서의  $\frac{1}{m(x)} \frac{d\psi(x)}{dx}$ 의 연속조건은 식 (4)에서 볼 수 있듯이  $\frac{d\Psi(y)}{dy}$ 의 연속조건이 된다. 따라서, 식 (2)의 Schrödinger 방정식은 식 (3)으로 주어지는 좌표변환을 하면 식 (7)과 같은 동일한 효과질량의 Schrödinger 방정식 형태로 표시됨을 볼 수 있다. 위치에 따라 달라지는 효과질량의 영향은 에너지에 따라 달라지는 포텐셜  $V_{eff}$ 에 포함되어 있다. 이와 같이 에너지에 의존하는 포텐셜은 보통의 양자역학에서는 나타나지 않는 것이나, 식 (7)은 식 (2)로부터 형식적으로 유도된 방정식이다. 이와 같이 형식적인 경우에 포텐셜과 에너지가 관계되는 것은 다른 예(광자의 wave packet 터널링을 전자의 wave packet 터널링과 비교하여 계산하는 문제)에서도 볼 수 있다.<sup>[7,8]</sup>

## III. 포텐셜 계단에서의 반사

그림 1 (a)와 같은 포텐셜 계단을 고려하자.  $x < 0$ 의 영역과  $x > 0$ 의 영역에서의 효과질량을 각각  $m_1$ ,  $m_2$ 라 하고, 계단 높이를  $V_0$ 라 하자. 식 (2)로 주어지는 Schrödinger 방정식에 대해 식 (3)에서  $m_0$ 을  $m_1$ 으로 취한 좌표변환을 하면, 식 (2)는 식 (7)로 고쳐지며, 이는 그림 1 (b)와 같이 계단 높이  $V_{0,eff}$ 가

$$V_{0,eff} = \frac{m_1}{m_2} (V_0 - E) + E \quad (9)$$

로 주어지고 효과질량이 전 영역에서  $m_1$ 으로 일정한 문제로 취급할 수 있다.

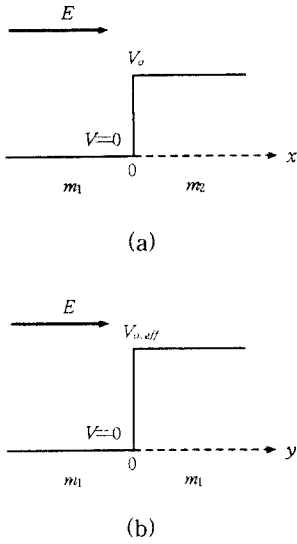


그림 1. (a) 포텐셜 계단 ( $m_1, m_2$ 는 각 영역에서의 전자의 효과질량을 나타냄.)  
 (b) 좌표변환 후의 포텐셜 계단  
 Fig. 1. (a) Potential step ( $m_1, m_2$  are electron effective masses in the corresponding regions.) (b) Potential step after the coordinate transformation.

그림 2는 입사하는 전자의 에너지  $E$ 의 변화에 따른  $E/V_{o,eff}$ 의 그래프를 여러 경우의  $m_2/m_1$  값에 대하여 그린 것이다. 1보다 큰  $m_2/m_1$  값에 대해,  $E < V_0$ 면  $E/V_{o,eff}$ 의 값은  $E/V_0$  (그래프에서 직선으로 나타남)보다 큼을 볼 수 있다. 반대로  $E > V_0$ 면  $E/V_{o,eff}$ 의 값은  $E/V_0$ 보다 작아짐을 볼 수 있다. 이는 에너지가 커짐에 따라 유효 포텐셜  $V_{o,eff}$ 도 커져서  $E/V_{o,eff}$ 의 증가율이 둔화되기 때문이다. 극한적인 경우로서 에너지가 무한대가 될 때  $E/V_{o,eff}$ 는 일정한 값으로 수렴하게 된다. 이는 그림 1 (b)에서 입사하는 전자의 에너지가 무한대로 커지면, 유효 포텐셜  $V_{o,eff}$ 도 일정한 비율로 따라서 커짐을 의미한다. 그러므로, 이와 같은 이중접합구조에서 에너지가 증가하여도 반사계수는 0으로 떨어지지 않음을 짐작할 수 있다.(반사계수는 입사하는 평면파 파동함수의 절대값 제곱에 대한 반사되는 평면파 파동함수의 절대값 제곱의 비율로 정의된다.) 포텐셜 계단의 양쪽에서 전자의 효과질량이 같다면, 입사하는 에너지가  $V_0$ 에 비해 매우 클 경우 계단의 영향은 무시되고 반사계수는 0으로 수렴한다. 그러나, 양쪽의 효과질량이 다르면 이상에서 살펴본 바와 같이 반사계수는

0이 아닌 값으로 수렴한다. 이는 그림 1 (a)에서 양쪽 영역에서 운동에너지가 거의 같아도 효과질량이 다르기 때문에 운동량  $p_{1,2} = \sqrt{2m_{1,2}E}$  이 다르고, 따라서, de Broglie의 파장  $\lambda_{1,2} = h/p_{1,2}$  ( $h$ 는 Plank 상수)가 다르기 때문이다.

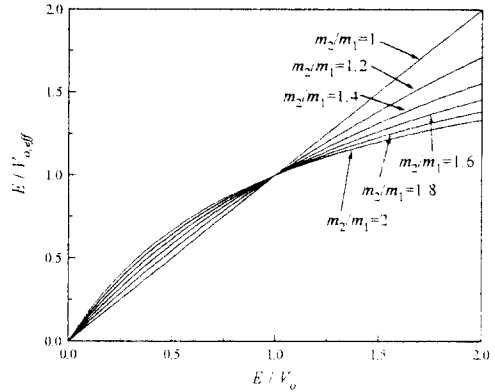


그림 2. 입사하는 전자의 에너지  $E$ 의 변화에 따른  $E/V_{o,eff}$ 의 변화 (가로축은  $V_0$ 에 대해 규격화되었음.)  
 Fig. 2.  $E/V_{o,eff}$  as a function of the incident energy  $E$ .  
 (The horizontal axis is normalized to  $V_0$ .)

식 (7), (9)의 방법은 정성적인 예측 뿐 아니라 정량적 계산을 가능하게 한다. 그림 1 (a)에서 전위장벽의 높이는  $V_0$ 이고, 양쪽의 질량이  $m_1$ 으로 동일하다면  $E > V_0$ 일 경우 반사계수  $R$ 은 다음과 같이 주어진다.<sup>(9)</sup>

$$R = \left| \frac{\sqrt{E} - \sqrt{E - V_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0}} \right|^2 \quad (E > V_0) \quad (10)$$

이것을 그림 1 (b)의 경우에 적용시키기 위해서는 식 (10)에서  $V_0$ 대신 식 (9)로 주어지는  $V_{o,eff}$ 를 대입하면 된다. 그 결과는 다음과 같다.

$$R = \left| \frac{\sqrt{E} - \sqrt{\frac{m_1}{m_2}(E - V_0)}}{\sqrt{E} + \sqrt{\frac{m_1}{m_2}(E - V_0)}} \right|^2 \quad (E > V_0) \quad (11)$$

이는 그림 1 (a)에서 포텐셜 계단 양쪽에서의 효과질량이  $m_1, m_2$ 로서 서로 다를 때 식 (2)를 적용하고  $\psi(x)$ 와  $\frac{1}{m(x)} \frac{d\psi(x)}{dx}$ 가 연속이라는 조건을 사용해 계산한 반사계수의 식과 동일하다(부록참조). 그림 3은 그림 1 (a)에서 포텐셜 계단 양쪽에서 전자의 효과질량이 같을

때와 다른 때의 반사계수의 비교를 보여준다. 효과질량이 다른 경우는 GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As 구조로 가정하여  $m_1=0.067m$ ,  $m_2=0.092m$  ( $m$ 은 진공에서의 전자 질량)로 택하였다.

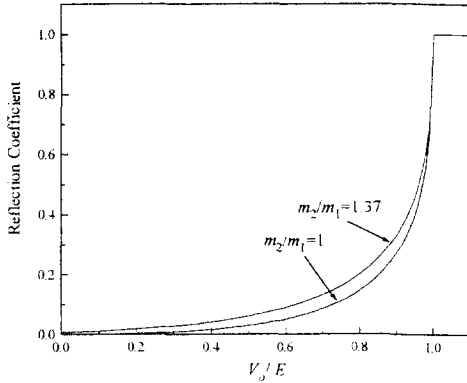


그림 3. 포텐셜 계단에서의 전자의 에너지  $E$ 의 변화에 따른 반사계수  $R$ 의 변화 (가로축은  $V_0/E$ 로서 에너지의 역수에 비례함.  $m_2/m_1=1.37$ 인 경우는  $m_1=0.067m$ ,  $m_2=0.092m$ 인 경우에 해당함.)

Fig. 3. Reflection coefficient  $R$  as a function of the incident energy  $E$  for the potential step (The horizontal axis is proportional to  $1/E$ . The case  $m_2/m_1=1.37$  corresponds to the case of  $m_1=0.067m$  and  $m_2=0.092m$ .)

#### IV. 단일 포텐셜 장벽에 대한 투과

그림 4 (a)와 같은 단일 포텐셜 장벽을 고려하자. 영역  $x < 0$ 과  $x > d$ 에서의 전자의 효과질량을  $m_1$ , 영역  $0 < x < d$ 에서의 전자의 효과질량을  $m_2$ 라 하고 장벽의 높이를  $V_0$ 라 하자. 식 (3)에서  $m_0$ 를  $m_1$ 으로 취한 좌표변환을 하면 식 (7)의 방정식에서 유효 포텐셜 높이  $V_{0,eff}$ 는 III장에서와 마찬가지로 식 (9)로 주어진다. 그림 4 (b)의 새로운 좌표계  $y$ 에서의 장벽 두께  $d_{eff}$ 는 식 (3)으로부터

$$d_{eff} = \frac{m_2}{m_1} d \quad (12)$$

가 됨을 볼 수 있다( $d$ 는  $x$  좌표계에서의 장벽두께). 따라서, 그림 4 (a)와 같이 장벽영역에서의 효과질량이 다른 경우에 대한 전자의 투과 또는 반사에 대한 문제가 그림 4 (b)와 같이 장벽두께가 식 (12)로 주어지고 유효 포텐셜 높이가 식 (9)와 같이 에너지의 함수로 주

어지며 전자의 질량이 위치에 무관하게  $m_1$ 으로 일정한 경우의 문제와 동일하게 된다.

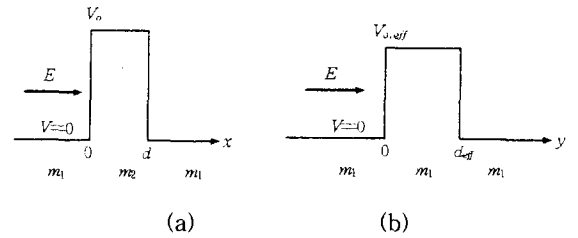


그림 4. (a) 포텐셜 장벽 ( $m_1$ ,  $m_2$ 는 각 영역에서의 전자의 효과질량을 나타냄.) (b) 좌표변환 후의 포텐셜 장벽

Fig. 4. (a) Potential barrier ( $m_1$ ,  $m_2$  are electron effective masses in the corresponding regions.) (b) Potential barrier after the coordinate transformation

이러한 문제에서의 전자의 투과계수는 다음과 같이 구할 수 있다. 그림 4 (a)에서 전자의 질량이 모든 영역에서  $m_1$ 으로 동일하다면 터널링 계수  $T$ 는 다음과 같이 주어진다.<sup>110)</sup>

$$T = \frac{4k^2 \gamma^2}{(2k \gamma \cosh \gamma d)^2 + \{(k^2 - \gamma^2) \sinh \gamma d\}^2} \quad (13)$$

여기에서

$$k = \sqrt{\frac{2m_1}{\hbar^2} E} \quad (14)$$

$$\gamma = \sqrt{\frac{2m_1}{\hbar^2} (V_0 - E)} \quad (15)$$

이다. 에너지  $E$ 가 포텐셜 장벽  $V_0$ 보다 큰 경우에도 식 (15)에서  $\gamma$ 를 허수로 취급하면 식 (13)은 유효하다. 식 (13), (15)에서 장벽두께  $d$ 를 식 (12)로 주어지는  $d_{eff}$ 로 치환하고 장벽높이  $V_0$ 를 식 (9)로 주어지는  $V_{0,eff}$ 로 치환하면 그림 4 (a)에서 효과질량이 위치에 따라 다른 경우, 즉, 그림 4 (b)의 경우에 대한 터널링 계수의 식을 얻는다. 이와 같은 치환을 하면 식 (15)는

$$\gamma' = \sqrt{\frac{2m_1}{\hbar^2} (V_{0,eff} - E)} = \sqrt{\frac{2m_1^2}{\hbar^2 m_2} (V_0 - E)} = \frac{m_1}{m_2} \gamma \quad (16)$$

로 바뀐다. 여기에서  $\gamma$ 는 장벽영역에서 정의되는 값으로서 식 (15)와 달리

$$\gamma = \sqrt{\frac{2m_2}{\hbar^2} (V_0 - E)} \quad (17)$$

로 정의한 것이다. 따라서, 식 (13)은 다음과 같이 변형된다.

$$T' = \frac{4 \frac{m_1^2}{m_2^2} k^2 \gamma^2}{\left( \frac{2m_1}{m_2} k \gamma \cosh \gamma d \right)^2 + \left\{ \left( k^2 - \frac{m_1^2}{m_2^2} \gamma^2 \right) \sinh \gamma d \right\}^2} \quad (18)$$

여기에서  $\gamma' d_{eff} = (m_1/m_2)\gamma(m_2/m_1)d = \gamma d$  임이 이용되었다. 식 (18)은 실제로 이중접합에서의 경계조건  $\frac{1}{m_1} \frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{1}{m_2} \frac{\partial \psi}{\partial x}$  를 이용해 계산한 터널링 계수<sup>[11]</sup>와 동일하다.

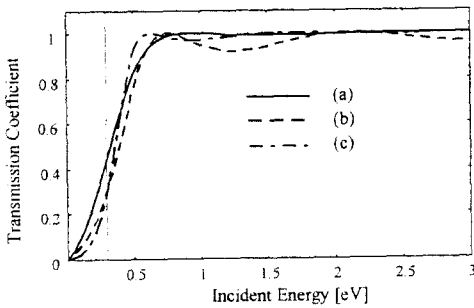


그림 5. 포텐셜 장벽에서의 전자의 입사에너지에 따른 투과계수 ( $V_0=300\text{meV}$ ) (a)  $m_1=m_2=0.067m$ ,  $d=3\text{nm}$ 인 경우 (b)  $m_1=0.067m$ ,  $m_2=0.092m$ ,  $d=3\text{nm}$ 인 경우 (c)  $m_1=m_2=0.067m$ , 장벽 두께가  $\frac{0.092}{0.067} \times 3\text{nm}$ 인 경우

Fig. 5. Transmission coefficient as a function of the incident energy for the potential barrier ( $V_0=300\text{meV}$ ). (a)  $m_1=m_2=0.067m$ ,  $d=3\text{nm}$  (b)  $m_1=0.067m$ ,  $m_2=0.092m$ ,  $d=3\text{nm}$  (c)  $m_1=m_2=0.067m$ , barrier thickness of  $\frac{0.092}{0.067} \times 3\text{nm}$

그림 5는 장벽높이  $V_0$ 가  $300\text{meV}$ 인 GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As/GaAs 구조에 대해 투과계수의 그래프를 보여준다. 그래프 (a)는 전자의 효과질량이 모든 영역에서  $m_1=0.067m$ 으로 일정하다고 가정할 때, 장벽두께  $d$ 가  $3\text{nm}$ 인 경우의 투과계수(식 (13))이다. 그래프 (b)는 전자의 효과질량이  $m_1=0.067m$ ,  $m_2=0.092m$ 으로 구별될 때 식 (18)을 이용해 계산한 투과계수이다. 전위장벽  $V_0$ 보다 낮은 전자의 에너지  $E$ 에 대해  $m_1 < m_2$ 인 경우 그림 2에서와 같이  $E/V_{0,eff}$ 가  $E/V_0$ 보다 커짐에도 불구하고 그림 5에서 터널링 계수가  $m_1=m_2$ 일 경우보다 작게 나타나는 것은 장벽두께 때문이다. 즉, 그림 4(b)에서  $d_{eff} = \frac{m_2}{m_1} d$ 로 효과적인 장벽두께가 늘어나기

때문이다. 그림 5에서 그래프 (c)는 장벽두께가  $d_{eff} = \frac{0.092}{0.067} d$ 이고 전자의 효과질량은 모든 영역에서  $m_1$ 이라고 가정했을 때의 투과계수를 보여준다. 그래프 (b)와 그래프 (c)를 비교하면, 그림 2로부터 예상되는 바와 같이  $E < V_0$ 일 경우에는 (b)가 (c)보다 크음을 볼 수 있다. 식 (9)에서  $E=V_0$ 이면  $V_{0,eff}=V_0$ 가 되므로 그래프 (b)와 (c)는  $E=V_0$ 일 때 (그림 5에서 수직실선과의 교점에 해당함.) 같은 값을 갖는다.

### V. 공진 터널링 구조에 대한 응용

이상에서 살펴본 결과는 포텐셜 장벽이 한 개 이상일 경우, 예를 들어 공진 터널링 구조에 대하여도 확장시킬 수 있다. 그림 6 (a)의 공진 터널링 구조에는 이상에서 설명된 방법을 이용하면 그림 6 (b)의 구조로 바뀐다.

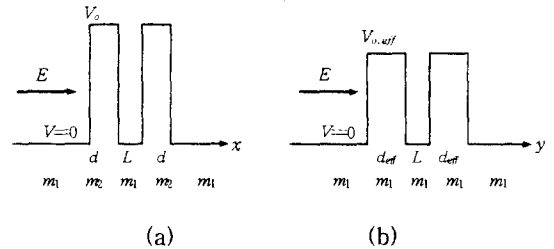


그림 6. (a) 공진 터널링 구조 ( $d$ 는 각 장벽의 두께,  $L$ 은 우물영역의 폭,  $m_1$ 과  $m_2$ 는 각 영역에서의 전자의 효과질량) (b) 좌표변환 후의 공진 터널링 구조 ( $d_{eff}$ 는 각 장벽의 두께,  $L$ 은 우물영역의 폭,  $m_1$ 은 모든 영역에서 동일한 전자의 효과질량)

Fig. 6. (a) Resonant tunneling structure ( $d$  is the barrier thickness,  $L$  is the well width,  $m_1$  and  $m_2$  are electron effective masses in the corresponding regions) (b) Resonant tunneling structure after the coordinate transformation ( $d_{eff}$  is the barrier thickness,  $L$  is the well width,  $m_1$  is the electron effective mass in all regions).

그림 6 (a)의 구조에서 효과질량이  $m_1$ 으로 모든 영역에서 일정하다면 투과계수  $T_{2B}$ 는

$$T_{2B} = \frac{1}{1 + \frac{4(1-T)}{T^2} \sin^2(kL - \theta)} \quad (19)$$

로 주어진다.<sup>[10]</sup> 여기에서  $L$ 은 우물영역의 폭이고,  $T$

와  $k$ 는 각각 식 (13), (14)로 주어지며,

$$\theta = \arctan \left\{ \frac{2k\gamma}{k^2 - \gamma^2} \coth \gamma d \right\} \quad (20)$$

이고,  $\gamma$ 는 식 (15)로 주어지고  $d$ 는 각각의 장벽의 두께이다. 이상의 식에서 IV장에서와 같은 치환을 하면 다음의 식을 얻으며, 이는 전자의 효과질량이  $m_1$ 과  $m_2$ 로 구별될 때의 투과계수가 된다.

$$T'_{2B} = \frac{1}{1 + \frac{4(1-T')}{(T')^2} \sin^2(kL - \theta')} \quad (21)$$

여기에서  $T'$ 는 식 (18)로 주어지고  $\theta'$ 는 다음과 같이 주어진다.

$$\theta' = \arctan \left\{ \frac{2 \frac{m_1}{m_2} k\gamma}{k^2 - \left(\frac{m_1}{m_2}\right)^2 \gamma^2} \coth \gamma d \right\} \quad (22)$$

여기에서, 즉, 식 (21), (18), (22)에서,  $\gamma$ 의 값으로서 식 (15)대신 식 (17)을 사용하여야 한다. 그림 7은 식 (19)로 계산한 터널링 계수와 식 (21)로 계산한 터널링 계수를 비교하여 보여준다. 여기에서  $m_1=0.067m$ ,  $m_2=0.092m$ ,  $V_0=300\text{meV}$ ,  $d=3\text{nm}$ ,  $L=6\text{nm}$ 를 사용하였다. 그림 7에서 효과질량이 일정하다고 가정했을 경우와 그렇지 않은 경우 투과계수의 특성이 차이를 나타냄을 볼 수 있다.

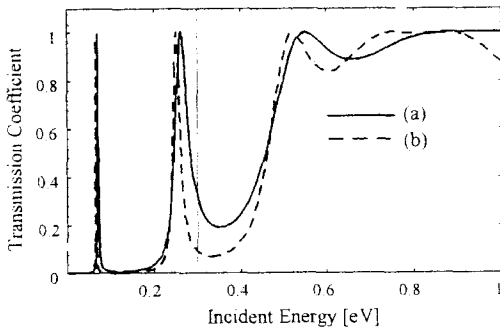


그림 7. 공진 터널링 구조에서의 전자의 입사에너지에 따른 투과계수 ( $V_0=300\text{meV}$ ,  $d=3\text{nm}$ ,  $L=6\text{nm}$ ) (a)  $m_1=m_2=0.067m$ 인 경우 (b)  $m_1=0.067m$ ,  $m_2=0.092m$ 인 경우

Fig. 7. Transmission coefficient as a function of the incident energy for the resonant tunneling structure ( $V_0=300\text{meV}$ ,  $d=3\text{nm}$ ,  $L=6\text{nm}$ ) (a)  $m_1=m_2=0.067m$  (b)  $m_1=0.067m$ ,  $m_2=0.092m$

## VI. 결론

본 논문에서는 효과질량이 위치의 함수로 주어지는 경우의 Schrödinger 방정식을 간단한 좌표변환을 통해 효과질량이 위치에 무관하게 일정한 문제로 바꿀 수 있음을 보였다. 이 경우, 포텐셜이 에너지의 함수로 변화하게 된다. 이러한 방법으로, Schrödinger 방정식에서 divergence 연산자와 gradient 연산자 사이에 위치의 함수인 효과질량이 삽입되는 것이 개념적으로 어떤 영향을 미치는가를 파악할 수 있다. 또한, 본 논문에서 제시한 방법은 효과질량이 위치에 무관하게 일정한 경우에 유도된 투과계수와 같은 특성식에서 적당한 치환을 통해 효과질량이 위치의 함수로 변화하는 경우의 특성식을 유도할 수 있게 한다. 단일장벽문제의 경우를 예로 들어 이를 증명하였다. 이러한 방법은 다중 양자우물구조나 superlattice에도 이용될 수 있다. Interquanta<sup>151</sup> 등의 공개된 소프트웨어에서는 효과질량을 위치의 함수로 입력시킬 수 없게 되어 있으나 본 논문에서 제안한 방법을 사용하면, 이를 이용하여서도 효과질량이 위치의 함수인 경우를 시뮬레이션할 수 있다. 뿐만 아니라 이는 광학에도 이용될 수 있다. 저자들은 최근 이종(異種)유전체구조에 임의의 각도로 입사하는 TM 편광된 광파의 문제가 적당한 치환을 통해 효과질량이 위치에 따라 다른 이종구조에서의 전자에 대한 1차원적 Schrödinger 방정식을 푸는 문제로 바뀔 수 있음을 보였다.<sup>112)</sup> 따라서, 본 논문에서 제안하는 방법에 의하면, 이를 다시 효과질량이 균일한 경우의 문제로 변형시킬 수 있으며, 이러한 과정을 통해 광파에 대한 투과계수 등의 식을 쉽게 유도할 수 있고, 다층유전체에 경사지게 입사하는 광파에 대한 해석을 효과질량이 균일한 경우의 Schrödinger 방정식을 푸는 프로그램을 이용하여 수행할 수 있게 해 준다.

## 부 록

그림 1에서 시간에 무관한 Schrödinger 방정식의 해는 다음의 형태로 주어진다.

$$\psi(x) = \begin{cases} A \exp(ik_1x) + B \exp(-ik_1x), & x < 0 \\ C \exp(ik_2x), & x > 0 \end{cases} \quad (A1)$$

여기에서,

$$k_1 = \sqrt{\frac{2m_1E}{\hbar^2}}, \tag{A2}$$

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m_2(E - V_0)}{\hbar^2}} \tag{A3}$$

이다. 경계조건  $\psi(0^-) = \psi(0^+)$ ,  $\left. \frac{1}{m_1} \frac{d\psi}{dx} \right|_0^- = \left. \frac{1}{m_2} \frac{d\psi}{dx} \right|_0^+$  를 이용하면

$$\frac{B}{A} = \frac{\sqrt{E} - \sqrt{\frac{m_1}{m_2}(E - V_0)}}{\sqrt{E} + \sqrt{\frac{m_1}{m_2}(E - V_0)}} \tag{A4}$$

를 얻는다. 따라서, 반사계수  $R = |B/A|^2$ 은 식 (11)과 같이 된다.

참 고 문 헌

[1] O. von Roos, "Position-dependent effective masses in semiconductor theory", *Physical Review B*, vol. 27, pp. 7547-7552, 1983.

[2] S. Datta, *Quantum Phenomena*, Addison-Wesley, New York, p. 191, 1989.

[3] G. T. Einevoll, P. C. Hemmer, and J. Thomsen, "Operator ordering in effective-mass theory for heterostructures", *Physical Review B*, vol. 42, pp. 3485-3502, 1990.

[4] For example, H. Tsuchiya, M. Ogawa, and T. Miyoshi, "Simulation of quantum transport in quantum devices with spacially varying effective mass", *IEEE Trans. on Electron Devices*, vol. 38, pp. 1246-1252, 1991.

[5] S. Brandt and H. D. Dahm, *Quantum Mechanics on the Macintosh*, 2nd ed., Springer-Verlag, 1995.

[6] J. S. Walker and J. Gathright, "Exploring one-dimensional quantum mechanics with transfer matrices", *American Journal of Physics*, vol. 62, pp. 408-422, 1994.

[7] A. M. Steinberg and R. Y. Chiao, "Tunneling delay times in one and two dimensions", *Physical Review A*, vol. 49, pp. 3283-3295, 1994.

[8] R. Y. Chiao, P. G. Kwiat, and A. M. Steinberg, "Analogies between electron and photon tunneling", *Physica B*, vol. 175, pp. 257-262, 1991.

[9] R. L. Liboff, *Introductory Quantum Mechanics*, 2nd ed., Addison-Wesley, pp. 220-223, 1992.

[10] S. Datta, *Quantum Phenomena*, Addison-Wesley, New York, pp. 12-35, 1989.

[11] B. Lee, "Electron tunneling time through a heterostructure potential barrier", *Superlattices and Microstructures*, vol. 14, no. 4, pp. 295-298, 1993.

[12] 이 병호, 이 욱, "Frustrated total internal reflection 구조에서의 TM 편광된 광자의 터널링", *한국광학회지 (투고중)*

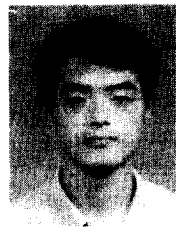
저 자 소 개



李 竝 浩(正會員)

1964년 7월 6일생. 1987년 서울대학교 전자공학과 졸업(공학사). 1989년 서울대학교 대학원 전자공학과 졸업(공학석사). 1993년 University of California at

Berkeley, Department of Electrical Engineering and Computer Sciences 졸업(Ph.D.) 1993년 9월 ~ 1994년 6월 동대학 Post Doc. 1994년 9월 ~ 현재 서울대학교 전기공학과 전임강사. 주관심분야는 광굴절 효과, 양자소자의 모델링 및 광연결 등임



李 旭(正會員)

1971년 6월 10일생. 1995년 2월 서울대학교 전자공학과 졸업(공학사). 1995년 3월 ~ 현재 서울대학교 대학원 전기공학과 석사과정