論文97-34D-3-11

Wigner 함수 모델을 이용한 양자전송의 시뮬레이션

(Simulation of Quantum Transport Using Wigner Function Model)

金 京 濂 *, 李 竝 浩 *

(Kyoung-Youm Kim and Byoungho Lee)

요 약

밀도 연산자로부터 유도된 양자역학적 Liouville 방정식과 Wigner 함수를 이용하여 기본적인 양자소자인 공진 터널링 다이오드(RTD)의 전류-전압특성을 수치 해석적으로 얻었다. 사용된 해밀토니안은 모두 single-particle approach에 의한 것이었고 전자간의 쿨롱 상호작용은 Hartree equation을 이용한 self-consistent 포텐셜에 의해 도입되었다. 인위적인 적분경계의 설정이 계산결과에 미치는 영향을 고려하여 Quantum correlation을 보다 정확히 계산하기 위한 discrete model을 사용하였는데, 그 결과를 기존의 모델을 사용하여 얻어진 결과와 비교하였다. Self-consistent 포텐셜을 고려할 때, 물리적으로 의미있는 포텐셜을 얻기 위해서는 비탄성(inelastic) process와 접촉 저항(contact resistivity)이 소자 해석에 포함되어야 하는데, 비탄성 process는 relaxation time operator를 Wigner formalism에 도입함으로써 근사시켰고, 접촉 저항은 drifted Fermi 분포를 경계조건으로 사용하는 방법을 통해 근사시켰다. 또 유효질량의 공간적 변화가 소자의 특성에 미치는 영향에 대해서도 flat-band 포텐셜의 경우에 한해서 살펴보았다.

Abstract

Steady-state I-V characteristics of a resonant tunneling diode(RTD) is calculated by numerical analysis using quantum Liouville equation based on Wigner function which is derived from density operator. Modifications to the conventional discrete model are made to calculate more accurate quantum correlations. It is pointed out that we must include inelastic processes and the resistivity of the contacting layers to get a much more credible potential which can be theoretically obtained from the simple screening theory. The effects of spatially-varying effective mass is also checked briefly.

I. 서론

반도체 제조 공정이 발달함에 따라 소자의 크기가 작아지면서 소자 특성에서 양자역학적 효과가 차지하는 비중이 점점 더 크게 되었다. 고전적인 범주의 반도체 소자를 분석할 때 사용되던 Boltzmann 전송 방정식은 이런 양자역학적 현상이 지배적인 미세 구조 소자에 대해서는 정확한 기술을 할 수 없다. 따라서 이런 양자소자들을 제대로 해석하기 위한 엄밀한 양자역학에 바탕을 둔 전송이론이 필요하다.

Boltzmann 전송 방정식에 대한 양자역학적 확장으로 이해되고 사용되고 있는 것이 Wigner 전송 방정식[1]이다. 하지만, 아직도 이 Wigner 함수가 실험치를 완벽히 재현하지는 못하고 있으며 근본적으로 Markovian 운동 방정식이 가정되어 있어서 phonon의 흡수나 방출 같은 non-Markovian process는 설명하지 못하는 한계를 갖고 있다. 이는 Wigner 함수가 위치에 대해서는 두 개의 인자를 가지고 있으나 시간에 대해 하나의 인자만을 갖고 있기 때문이다[2]. Non-Markovian process는 두 개의 위치와 두 개의 시간

* 正會員, 서울大學校 電氣工學部

(School of Electrical Engineering, Seoul National University)

接受日字:1996年12月28日, 수정완료일:1997年3月10日

인자를 가지는 Green 함수를 통해서만 정확히 기술할 수 있을 것으로 생각된다.

이 논문에서는, 이런 문제점을 가짐에도 불구하고 그 유용성이 입증된 Wigner 함수[3-4]를 이용하여 기본적인 양자소자인 공명 터널링 다이오드(resonant tunneling diode; RTD)의 전류-전압 곡선을 얻으려 한다. 또 self-consistent study를 통해 RTD의 self consistent 포텐셜은 소자내의 carrier 전송에 영향을 미치는 갖가지 요소의 복잡한 상호작용이 고려되었을 때 적절한 결과가 얻어짐을 보이려 한다.

국내에서 RTD의 시뮬레이션을 위해 steady-state Schrödinger 방정식을 풀어 연구한 논문은 있으나[5], 본 논문에서처럼 양자전송이론을 사용하여[6-7] 연구한 논문은 저자들이 아는 한 없었다.

II. 양자 전송 이론

1. 단일입자(single-particle) reduced Hamiltonian[8]

Z개의 전자에 대한 슈뢰딩거 방정식은

$$H\phi(\vec{r_1}, \vec{r_2}, \ldots, \vec{r_Z}) = E\phi(\vec{r_1}, \vec{r_2}, \ldots, \vec{r_Z}) \quad (1)$$

로 표시된다. 여기서 해밀토니안 H는

$$H = \Sigma_i\left(\frac{\vec{p}_i^2}{2m} + v(\vec{r_i})\right) + \frac{1}{2}\Sigma_{i,j\neq i}\frac{1}{4\pi\varepsilon}\frac{e^2}{|\vec{r_i} - \vec{r_j}|}$$

$$= \Sigma_i H_i + \frac{1}{2}\Sigma_{i,j\neq i}V_{ij} \quad (2)$$

이며, $\vec{r_i}$ $(i = 1, 2, \ldots, Z)$는 각 전자에 해당하는 좌표를 뜻하며 e는 전자의 전하량, ε은 유전율(permittivity)을 나타낸다.

위의 슈뢰딩거 방정식 (1)을 잘 근사하는 단일입자 방정식(single-particle equation)을 얻기 위해 다음과 같이 N개의 단일입자 파동함수의 곱으로 이루어진 trial wave function을 도입한다.

$$\phi(\vec{r_1}, \vec{r_2}, \ldots, \vec{r_Z}) = \phi_1(\vec{r_1})\phi_2(\vec{r_2})\ldots\phi_Z(\vec{r_Z}) \quad (3)$$

이제 이 각각의 $\phi_i(\vec{r_i})$가 만족시켜야 하는 식은

$$\delta\langle H\rangle = \delta\left(\int\phi^* H\phi d\tau\right)$$

$$= \Sigma_i\int\delta\phi_i^*\left[H_i + \Sigma_{j\neq i}\int\phi_j^* V_{ij}\phi_j d^3\vec{r_j}\right]\phi_i d^3\vec{r_i} = 0, \quad (4.0)$$

$$\int\delta\phi_i^*\phi_i d^3\vec{r_i} = 0 \quad (4.1)$$

이다. Lagrangian multipliers method를 이용하면(식(4.1)에 ε_i를 곱한다.) 다음과 같은 Hartree equation을 얻는다.

$$\left(H_i + \Sigma_{j\neq i}\int\phi_j^* V_{ij}\phi_j d^3\vec{r_j}\right)\phi_i = \varepsilon_i\phi_i \quad (5)$$

그러므로 단일입자 reduced Hamiltonian은

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^2 + v(\vec{r_i}) + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon}\Sigma_{j\neq i}\int d^3\vec{r_j}\frac{|\phi_j(\vec{r_j})|^2}{|\vec{r_i} - \vec{r_j}|}\right)\phi_i(\vec{r_i}) = \varepsilon_i\phi_i(\vec{r_i}) \quad (6)$$

가 된다. 여기서 V_{ij}는 전하밀도 $e|\phi_j(\vec{r_j})|^2$에 의존해 있고 전하밀도는 Z개의 (6)식을 모두 푼 다음에야 알 수 있으므로 self-consistent method를 사용하여야 함을 알 수 있다.

2. 양자역학적 Liouville 방정식과 Wigner 함수[3]

외부와 입자교환이 있는 RTD같은 시스템을 기술하는 데는 비가역적 현상을 필요로 하므로 통계 역학적 접근이 요구된다. 따라서 파동방정식을 사용하는 pure-state 양자역학적 방법보다는 밀도행렬(density matrix)을 이용하는 mixed-state 양자 통계 역학적 방법을 사용한다.

실공간(real-space) 기저(basis)에서 statistically mixed quantum state를 기술하는 데에 사용되는 밀도함수는 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\rho(x, x') = \Sigma_{(i)} w_i\langle x|i\rangle\langle i|x'\rangle \quad (7)$$

여기서 $|i\rangle$는 complete set of states이고 w_i는 각 state가 갖고 있는 가중치로 해석될 수 있는 확률이다. 이 밀도행렬의 시간에 대한 미분은 다음과 같이 양자역학적 Liouville 방정식으로 주어진다.

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}[H, \rho] \equiv \frac{iL}{\hbar}\rho \quad (8)$$

여기서 H는 (6)에서 정의된 단일입자 reduced Hamiltonian이고 $L = H - H'$은 Liouville (super)operator이다. H에서 self-consistent term을 빼고 1차원으로 한정하여 (8)식을 정리하면

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial x'^2}\right]\rho + [v(x) - v(x')]\rho\right] \quad (9)$$

가 된다. 독립변수 x, x'을 $\chi=\frac{1}{2}(x+x'), \zeta=x-x'$로 바꾸어 ζ에 대해 Fourier 변환을 하면(여기서 χ는 고전적인 위치와 동일하게 된다.) 다음과 같은 Wigner 분포함수(Wigner distribution function)을 얻는다.

$$f(\chi, k)=\int_{-\infty}^{\infty} d\zeta e^{-ik\zeta}\rho(\chi+\frac{1}{2}\zeta, \chi-\frac{1}{2}\zeta) \qquad (10)$$

양자역학적 Liouville 방정식은 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\frac{\partial f}{\partial t}=-\frac{\hbar k}{m}\frac{\partial f}{\partial \chi}-\frac{1}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk'}{2\pi}\ V(\chi, k-k')f(\chi, k') \qquad (11)$$

여기서 포텐셜 연산자(operator)의 kernel은 다음과 같이 주어진다.

$$V(\chi, k)=2\int_0^{\infty} d\zeta \sin(k\zeta)[v(\chi+\frac{1}{2}\zeta)-v(\chi-\frac{1}{2}\zeta)] \qquad (12)$$

Wigner 함수는 carrier 농도 $n(\chi)$와 전류밀도 $j(\chi)$와 다음과 같은 관계를 갖는다.

$$n(\chi)=\rho(\chi, \chi)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk}{2\pi}f(\chi, k) \qquad (13)$$

$$j(\chi)=e\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk}{2\pi}\frac{\hbar k}{m}f(\chi, k) \qquad (14)$$

Frensley[3]에 의해서 Wigner 함수의, 소자와 reservoirs사이에서의 경계조건은 다음과 같이 주어진다.

$$f(0, k)=f_l(k), \quad k>0$$

$$f(L, k)=f_r(k), \quad k<0$$

$$f_{l,r}(k)=\frac{m_{l,r}k_B T}{\pi\hbar^2}\ln[1+\exp[-\frac{1}{k_B T}(\frac{\hbar^2 k^2}{2m_{l,r}}-E_{f_{l,r}})]] \qquad (15)$$

여기서 subscript l,r은 각각 왼쪽, 오른쪽 경계임을 나타내고 L은 디바이스의 길이, k_B는 Boltzmann 상수이다. $f_{l,r}(k)$는 quasi-Fermi 준위가 $E_{f_{l,r}}$이고 온도가 T인 Fermi-Dirac 분포함수를 transverse momenta에 대해 적분한 것이다. 이 경계조건은 reservoir로부터 디바이스로 들어오는 캐리어의 분포는 reservoir의 열 평형상태에 의해 결정되고 디바이스에서 reservoir로 빠져나가는 모든 캐리어는 reservoir가 흡수하는 것을 의미하며 이상적인 경계를 가정한 것이다.

Ⅲ. Discrete Model

식 (11)을 수치 해석적으로 풀기 위해 finite difference method를 사용한다. 위치좌표인 $\chi(0\le\chi\le L)$는 mesh spacing이 $\Delta_\chi\ (=L/(N_\chi-1))$로 균일하게 주어지도록 N_χ개의 mesh point로 나누고, 파동함수 혹은 연산자는 이 mesh point 위에서만 정의된다고 생각한다.(단, 식 (12)의 포텐셜 연산자를 계산하기 위해서는 mesh가 무한히 연장되어야 한다.) 포텐셜이 Δ_χ의 정수 배의 위치에서만 정의되므로 식 (12)의 포텐셜 연산자가 의미를 지니려면 상대좌표인 ζ는 mesh 간격이 $2\Delta_\chi$로 균일하게 주어지도록 나누어야 한다. ζ의 최대값은 위에서 정의된 어떤 양과도 무관한, 어떤 의미에서는 간섭이 허용된 여러 경로(path)들의 수를 결정하는 즉 quantum correlation을 고려할 때 필요한 최대 거리이다. 기존의 논문들[3-4]에서는 ζ의 최대값으로 특별한 이유 없이 소자의 길이 L을 그 값으로 택했다. 하지만 이 논문에서는 $2L$을 택했는 데 그 이유는 다음과 같다. Quantum correlation은 식 (12)에서 포텐셜의 인자인 ζ가 $-\infty$에서 ∞까지 변하면서 발생하게 된다. χ는 0에서 L까지 변하므로 $\chi+L$, $\chi-L$은 소자의 경계를 벗어나게 된다. 소자의 바깥에서는 소자의 경계와 똑같은 포텐셜을 가지므로 다음 식이 성립한다.

$$\begin{aligned} V(\chi, k) &= 2\int_0^{\infty} d\zeta \sin(k\zeta)[v(\chi+\frac{1}{2}\zeta)-v(\chi-\frac{1}{2}\zeta)] \\ &= 2\int_0^{2L} d\zeta \sin(k\zeta)[v(\chi+\frac{1}{2}\zeta)-v(\chi-\frac{1}{2}\zeta)] \\ &\quad +2\int_{2L}^{\infty} d\zeta \sin(k\zeta)[v(\chi+\frac{1}{2}\zeta)-v(\chi-\frac{1}{2}\zeta)] \\ &= 2\int_0^{2L} d\zeta \sin(k\zeta)[v(\chi+\frac{1}{2}\zeta)-v(\chi-\frac{1}{2}\zeta)] \\ &\quad +2\times V_b\times\int_{2L}^{\infty} d\zeta \sin(k\zeta) \\ &\cong 2\int_0^{2L} d\zeta \sin(k\zeta)[v(\chi+\frac{1}{2}\zeta)-v(\chi-\frac{1}{2}\zeta)] \qquad (12\text{-}1) \end{aligned}$$

여기서 V_b는 외부에서 걸어준 바이어스 전압이다. 따라서 $\zeta_{\max}$를 $2L$로 잡으면 충분하게 된다.(이 논문의 모든 시뮬레이션에서는 특별한 언급이 없는 한 $\zeta_{\max}$로 $2L$를 택했다.) ζ에 대해 Fourier 변환을 취했으므로 k-공간($-\pi/2\Delta_\chi\le k\le\pi/2\Delta_\chi$)에 대해서는 mesh 간

격이 $\Delta_k = \pi / N_k \Delta_\chi$로 균일하게 주어지도록 N_k개의 mesh point로 나눈다. (단, k=0 인 point가 포함되지 않도록 한다. k=0에서는 식 (11)의 gradient 항이 0이 되어 superoperator의 대각성분에 leading 0을 주기 때문에 가우스 소거법으로 행렬방정식을 풀 때 행교환(row-interchange)등의 복잡한 과정이 필요하기 때문이다.) 여기서는 $k_j = \pi/\Delta_\chi[(j-0.5)/N_k - 0.5], j=1,2,\ldots,N_k$를 사용하였다.

그러면 식 (11 - 14)는 다음과 같이 discrete한 식으로 바뀐다.

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{1}{\hbar}\Sigma_{k'} V(\chi, k-k') f(\chi, k') - \frac{\hbar k}{m\Delta_\chi}[f(\chi+\Delta_\chi) - f(\chi),\ k<0 \text{ 혹은 } f(\chi) - f(\chi - \Delta_\chi),\ k>0]$$

$$\equiv L_1 f(\chi, k) \tag{16}$$

$$V(\chi, k) = \frac{2}{N_k}\Sigma_\zeta \sin(k\zeta)[v(\chi + \frac{1}{2}\zeta) - v(\chi - \frac{1}{2}\zeta)] \tag{17}$$

$$n(\chi) = \Sigma_k \frac{\Delta_k}{2\pi} f(\chi, k) \tag{18}$$

$$j(\chi + \frac{1}{2}\Delta_\chi) = e\frac{\Delta_k}{2\pi}[\Sigma_{k<0}\frac{\hbar k}{m} f(\chi+\Delta_\chi, k) + \Sigma_{k>0}\frac{\hbar k}{m} f(\chi, k)] \tag{19}$$

Ⅳ. 시뮬레이션 결과

1. 기본 모델

식 (16-19)를 이용하여 RTD의 steady-state 특성 ($\frac{\partial f}{\partial t} = 0$)을 수치 해석적으로 계산해보았다. 계산을 위한 parameter의 값은 $N_\chi = 80$, $N_k = 60$이다. 이 경우 mesh 간격은 $\Delta_\chi = 0.565nm$이고 이 값은 (Al,Ga)As 계의 원자층 간격과 거의 같은 크기의 두께를 지닌 layer를 가정하는 것이다. Discrete Liouville 방정식은 가우스 소거법으로 풀었는데 요구되는 메모리는 $N_\chi N_k^2$에 그리고 계산시간은 $N_\chi N_k^3$에 비례하게 된다. (Liouville 방정식으로부터 유도된 matrix 방정식은 sparse matrix를 포함하고 있기 때문에 요구되는 메모리와 계산시간이 N_χ에 선형적으로 비례하도록 만들 수 있다.)

RTD는 4.5nm 두께의 GaAs 양자우물이 각각 똑같이 2.8nm 두께의 $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ 장벽(barrier) 층으로 둘러싸인 모형을 사용하였다[13-14]. 17.5nm의 GaAs 전극이 양쪽에서 장벽과 연결되어 있다. 이 전극의 밖에서는 위에서 말한 이상적인 reservoir가 존재한다고 가정하였다. 전도대(conduction-band) 불연속(dis-continuity)은 0.27eV로 두었으며 전자의 유효질량(effective mass)은 모든 구간에서 $0.067m_0$으로 일정하다고 가정했다. Scattering은 무시했으며 모든 계산은 상온인 300K에서 이루어졌고 경계에서의 Fermi 준위는 reservoir에서의 전자농도가 $2\times10^{18}cm^{-3}$이 되도록 정하였다.(0.08195eV)

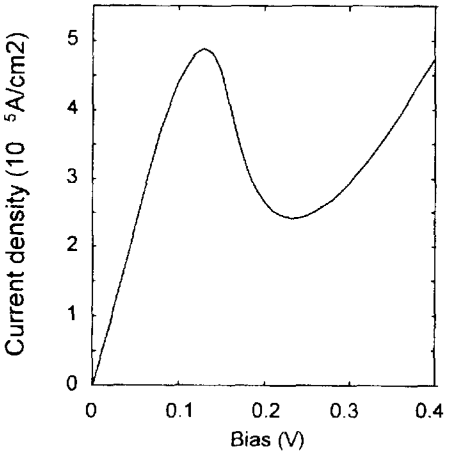

그림 1. RTD의 I-V 곡선. 부성저항구간이 나타남을 볼 수 있다.
Fig. 1. Current-voltage characteristics of a resonant tunneling diode. 'Negative resistance' region can be seen.

그림 1에 그 결과를 나타내었다. 여기에서는 self-consistent 포텐셜을 도입하지 않았기 때문에 바이어스 전압은 그림 2의 긴점선에서 볼 수 있는 것처럼 양자우물과 장벽에서 균일하게 강하가 일어난다. 실험치[13]와 비교했을 때 전류밀도가 10배 가량 큰데, 이는 실험에서 사용된 RTD의 실제 장벽의 두께가 여기서 사용한 값에 비해 크기 때문이다. 장벽이 두꺼우면 좁은 공진(narrow resonance)이 일어나는데 좁은 공진을 정확히 계산하려면 k-공간의 mesh point를 증가시켜야 하므로 이 경우 가우스 소거법을 사용하는데 필요한 메모리와 계산시간이 아주 많이 늘어나기 때문에 계산에서는 실제의 장벽보다 작은 값은 택하게 되었다. 그 결과(캐리어 농도는 장벽의 두께에 지수 함수적으로 반비례하므로) 계산된 전류밀도는 실험 값보다 상당히 크게 된다. Peak current가 발생하는 바이어스는 실제 실험 값보다 상당히 작은데 이는 Hartree 포텐셜과 contact layer의 Ohmic drop도 무시했기 때문이다.

Peak-to-valley ratio는 2.02:1 정도로 실험값인 2~6:1 [2,3]에 비해 작은 편이다.

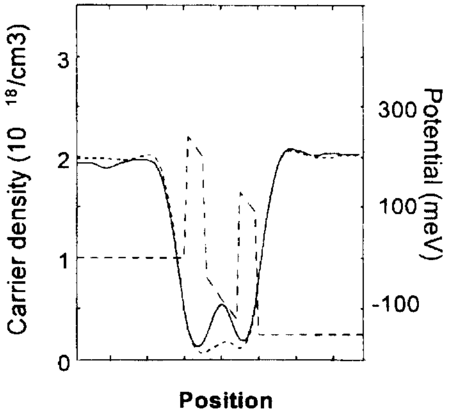

그림 2. 소자의 각 sampling point에서의 carrier 농도. 실선은 peak 바이어스인 경우(부성저항의 시작점)를, 점선은 valley 바이어스인 경우(부성저항의 끝점)를 나타낸다. 긴점선은 포텐셜 에너지를 나타낸다.

Fig. 2. Carrier density versus the position in the RTD. Solid-line and dotted-line are obtained for the cases where applied bias is peak-voltage and valley-voltage, respectively. Dashed line shows potential energy as a function of position

그림 2에서는 소자의 위치에 따라 캐리어의 농도가 어떻게 변하는지를 나타냈다. 장벽이 존재하는 영역에서 캐리어의 농도는 급격히 떨어지지만 고전 역학의 경우처럼 0이 되지는 않는다. 그리고 장벽을 지난 양자우물에도 고전 역학과는 달리 캐리어가 존재함을 보이고 있다. 즉 양자역학적 전송현상을 모델링하고 있는 것이다. 공진터널링(resonant tunneling)이 발생했을 때(실선)의 양자우물속의 캐리어의 농도가 그렇지 않은 경우(점선)보다 훨씬 많음을 볼 수 있다. 즉 Wigner 함수는 순수한 양자역학적 현상인 터널링을 잘 설명해 주고 있다.

그림 3에 앞에서 언급한 ζ_{max}를 L로 잡을 때와 $2L$로 잡을 때의 I-V 특성 곡선을 비교하여 나타내었다. 후자의 경우 전자에 비해 터널링이 일어나는 바이어스가 약간(20meV) 증가하였고 따라서 부성저항의 구간이 그만큼 줄어들었다. Peak-to-valley 비율이 1.77:1에서 2.02:1로 증가하였는 데, 주목할만 한 점은 두 곡선의 주된 차이는 터널링 전류가 지배적인 경우 즉 quantum correlation이 아주 중요한 바이어스 영역에서 나타난다는 것이다. Valley 바이어스 이후의 데이터에는 비교적 차이가 없고 양자역학적 효과가 중요한 바이어스에서 기존의 방법보다 이 논문에서 택한 결과가 실험치에 더 가깝다는 것은 이전의 모델($\zeta_{max}=L$)이 quantum correlation을 충분히 고려하지 못했음을 보여 주는 것이다.

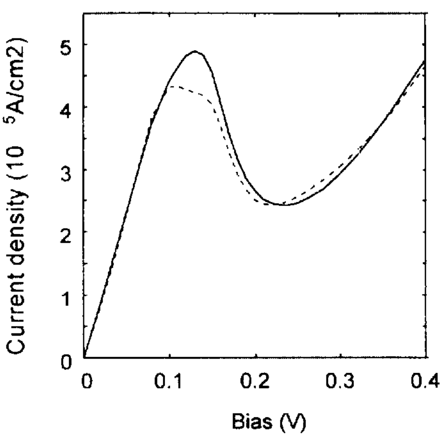

그림 3. ζ_{max}를 L로 잡았을 때(점선)와 2L로 잡았을 때(실선)의 RTD의 I-V 곡선

Fig. 3. I-V characteristics of RTD with two different ζ_{max} values. Dotted-line and solid-line are for the cases of ζ_{max} = L and 2L, respectively.

2. Collision을 포함시킨 모델

Wigner 함수가 Markovian 운동 방정식을 만족시킨다고 가정할 때 다음 식이 성립한다.

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \mathrm{L} f + \mathrm{C} f \qquad (20)$$

여기서 L은 전자의 ballistic motion을 기술하는 Liouville superoperator이고 C는 random scattering을 기술하는 collision superoperator이다. C의 경우에 있어서는 아직, 완전한 양자역학적 바탕 위에서 엄밀히 유도된 형태는 제시되지 않고 있다. 그러므로 여기에서는 C가 다음과 같은 고전적인 형태를 띠는 것으로 가정하기로 한다.

$$[Cf](\chi, k, t) = \int dk' [W_{k'k} f(\chi, k', t) - W_{kk'} f(\chi, k, t)] \qquad (21)$$

$W_{kk'}$는 k state에서 k'-state로 전이할 확률이다.

식 (21)의 형태를 지니면서 쉽게 얻을 수 있는 두가지 형태의 근사된 collision operator에는 첫째, relaxation time operator 식 (22)와[9] 둘째, 브라운

운동에 사용되는 Fokker-Plank 또는 Kramers 방정식으로부터 유도된 dissipation operator 식 (23)이 있다[11-12].

$$[C_{relax} f](k) = \frac{1}{\tau}[f_0(k)\int dk' f(k') - f(k)] \quad (22)$$

$$[C_{FP} f](k) = -\frac{1}{\tau}[\frac{\partial}{\partial k}(kf) + \frac{m}{\beta\hbar^2}\frac{\partial^2 f}{\partial k^2}] \quad (23)$$

여기서 τ는 relaxation time, f_0는 규격화된 평형 분포함수(normalized equilibrium distribution function)를 나타내며 β는 $\frac{1}{k_B T}$를 뜻한다. 이 두 연산자는 아주 높은 확률로 low momentum-transfer collision이 발생한다는 것을 가정한다.

또다른 좀더 현실적인 모형의 collision operator는 고전적인 볼쯔만 형태 식 (21)을 가지면서 전이확률인 $W_{k'k}$를 계산하기 위해 Fermi golden rule을 이용해서 얻어진 다음 결과이다[13-14].

$$W_{kk'} = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{V}{(2\pi)^3}\int d^2\vec{k}_\perp \int d^2\vec{k'}_\perp |\langle \vec{k}|H'|\vec{k'}\rangle|^2$$
$$\delta(E_{\vec{k}} - E_{\vec{k'}} \mp \hbar\omega)\frac{2\pi\beta\hbar^2}{m}\exp[\frac{\beta\hbar^2\vec{k'}^2_\perp}{2m}] \quad (24)$$

여기서 H'은 전자와 phonon의 상호작용을 기술하는 해밀토니안, $\vec{k}_\perp$는 transverse wave vector다.

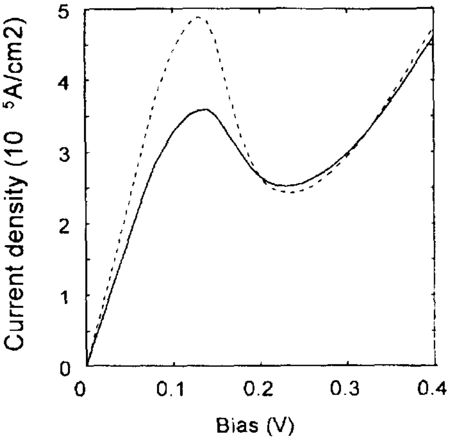

그림 4. 간단한 산란항이 RTD의 특성곡선에 미치는 영향. 실선은 산란항을 고려했을 때의, 그리고 점선은 산란을 무시했을 때의 특성곡선을 나타낸다.

Fig. 4. The effect of simple scattering(collision) term. Solid-line shows how the I-V curve changes when collision is considered in comparison with dotted-line which is obtained without collision term.

그림 4는 relaxation time collision operator(식 (22))를 식 (16)에 첨가하여 얻은 RTD의 steady-state 특성($\frac{\partial f}{\partial t}=0$)의 수치해석적 I-V 특성곡선을 collision을 고려하지 않고 얻는 I-V 특성곡선과 비교해서 나타낸 것이다. Relaxation time은 전자 이동도가 2600 $cm^2V^{-1}s^{-1}$ 인 경우에 해당하는 값인 100fs를 사용했다. Collision을 고려했을 때 peak point의 전류는 감소하고 valley point에서의 전류는 증가했다. 따라서 peak-to-valley 비율이 1.42:1 정도로 작게 나타났는데, 이는 collision을 고려하지 않은 특성 곡선의 peak-to-valley 비율값인 2.02:1의 0.7배 정도인 값이다. 이 값은 실험값에 비해 작은데 4절에서 Hartree의 self-consistent 방법을 사용하여 전자 상호간의 힘을 고려해주면 그 값이 커짐을 보일 것이다.

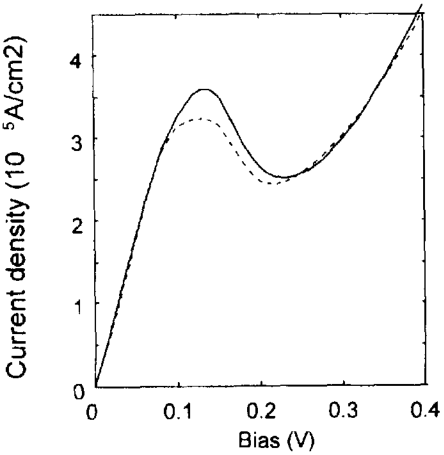

그림 5. ζ_{max} 를 L로 잡았을 때(점선)와 2L로 잡았을 때(실선)의 RTD의 I-V 곡선

Fig. 5. I-V characteristics of RTD with two different ζ_{max} values. Dotted-line and solid-line are for the cases of ζ_{max} = L and 2L, respectively.

그림 5는 그림 3의 경우에서 처럼 ζ_{max} 를 L로 잡을 때와 $2L$로 잡을 때의 I-V 특성 곡선을 비교하여 나타낸 것이다. 후자의 경우 Peak-to-valley 비율이 1.32:1에서 1.42:1로 증가하였는 데, 여기서도 두 곡선의 주된 차이는 quantum correlation이 아주 중요한 부분에서 나타나는 데, 여기서도 이전의 모델이 quantum correlation을 충분히 고려하지 못했음을 알 수 있다. 그림 3과 5에서 살펴볼 수 있듯이 이전의 모델에서는, collision을 고려할 때 그렇지 않은 경우에 비해

peak 바이어스가 20meV 정도 커지는 데 이는 다소 물리적으로 현실적이지 못한 결과이다.(변화량이 다소 큰 값이다.) 하지만 이 논문에서 제안한 방법으로 시뮬레이션을 하면 collisoin을 고려하는 경우나 고려하지 않는 경우나 거의 같은 바이어스에서 peak 전류를 얻을 수 있었다. 또 collision을 도입할 때 peak point에서의 전류는 줄어들었으나 valley point의 전류는 별 차이가 없던 기존의 모델과는 달리 peak point에의 전류는 줄어듬은 물론 valley point에서의 전류는 증가한다는 결과를 보여주어 좀 더 정확한 시뮬레이션임을 알 수 있다.

3. 유효질량의 공간적 변화를 고려해준 모델

다음에는 전자의 유효질량의 공간적 변화를 고려해 주었을 때의 효과를 간략히 살펴본다. 우선 유효질량의 공간적 변화를 고려한 정확한 Liouville 방정식과 Wigner 함수를 얻어야 한다. 이종 접합 구조(heterostructure)에서 전자나 홀의 유효질량이 위치의 함수로 나타남은 잘 알려져 있다. 이와 같이 위치의 함수인 질량을 해밀토니안에 어떻게 포함시켜야 하는가에 대해 초기에는 논란이 있었으나[15,16], Roos Einevoll의 모델이 받아들여졌고[17] 이것이 현재 사용되고 있다. 여기서도 이 모델을 사용한다.

$$H\psi = \frac{-\hbar^2}{2}\nabla\left(\frac{1}{m(\chi)}\nabla\psi\right) + v(\chi)\psi \tag{25}$$

식 (25)를 1차원적 해석으로 한정하여 사용하면 양자역학적 Liouville 방정식은

$$\begin{aligned}\frac{\partial\rho}{\partial t} &= \frac{i}{\hbar}(H-H')\rho \\ &= \frac{i}{\hbar}\left[\frac{-\hbar^2}{2}\left[\frac{d}{dx}\left(\frac{1}{m(x)}\frac{d}{dx}\right) - \frac{d}{dx'}\left(\frac{1}{m(x')}\frac{d}{dx'}\right)\right]\rho \right. \\ &\quad \left. + [v(x)-v(x')]\rho\right]\end{aligned} \tag{26}$$

로 주어진다. 독립변수 x, x'를 $\chi = \frac{1}{2}(x+x')$, $\zeta = x - x'$로 바꾸고 상대좌표 ζ에 대해 Fourier 변환하면 다음 식을 얻는다[4].

$$\begin{aligned}\frac{\partial f(\chi,k)}{\partial t} &= \hbar\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk'}{8\pi}M_1(\chi,k-k')\frac{\partial f(\chi,k')}{\partial\chi} \\ &\quad -\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk'}{4\pi}k'M_2(\chi,k-k')f(\chi,k') \\ &\quad +\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk'}{16\pi}M_3(\chi,k-k')\left[\frac{\partial^2 f(\chi,k')}{\partial^2\chi} - 4k'^2 f(\chi,k')\right] \\ &\quad -\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk'}{4\pi}k'M_4(\chi,k-k')\frac{\partial f(\chi,k')}{\partial\chi} \\ &\quad -\frac{1}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk'}{2\pi}V(\chi,k-k')f(\chi,k')\end{aligned} \tag{27}$$

여기서

$$M_1(\chi,k-k') = 2\int_0^{\infty}d\zeta\frac{\partial}{\partial\chi}\left(\frac{1}{m^-(\chi,\zeta)}\right)\sin[(k-k')\zeta] \tag{28}$$

$$M_2(\chi,k-k') = 2\int_0^{\infty}d\zeta\frac{\partial}{\partial\chi}\left(\frac{1}{m^+(\chi,\zeta)}\right)\cos[(k-k')\zeta] \tag{29}$$

$$M_3(\chi,k-k') = 2\int_0^{\infty}d\zeta\frac{\sin[(k-k')\zeta]}{m^-(\chi,\zeta)} \tag{30}$$

$$M_4(\chi,k-k') = 2\int_0^{\infty}d\zeta\frac{\cos[(k-k')\zeta]}{m^+(\chi,\zeta)} \tag{31}$$

$$V(\chi,k-k') = 2\int_0^{\infty}d\zeta\left[v\left(\chi+\frac{1}{2}\zeta\right) - v\left(\chi-\frac{1}{2}\zeta\right)\right]\sin[(k-k')\zeta] \tag{32}$$

이고

$$\begin{aligned}\frac{1}{m^-(\chi,\zeta)} &= \frac{1}{m(\chi+\frac{1}{2}\zeta)} - \frac{1}{m(\chi-\frac{1}{2}\zeta)} \\ \frac{1}{m^+(\chi,\zeta)} &= \frac{1}{m(\chi+\frac{1}{2}\zeta)} + \frac{1}{m(\chi-\frac{1}{2}\zeta)}\end{aligned} \tag{33}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial\zeta}\left(\frac{1}{m^-(\chi,\zeta)}\right) &= \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial\chi}\left(\frac{1}{m^+(\chi,\zeta)}\right) \\ \frac{\partial}{\partial\zeta}\left(\frac{1}{m^+(\chi,\zeta)}\right) &= \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial\chi}\left(\frac{1}{m^-(\chi,\zeta)}\right)\end{aligned} \tag{34}$$

를 사용하였다.

식 (27)에서 유효질량이 일정하다고 하면 $M_1(\chi,k-k')$, $M_2(\chi,k-k')$, $M_3(\chi,k-k')$는 0이 되고 $M_4(\chi,k-k')$는 $\frac{4\pi}{m}\delta(k-k')$가 되어 앞에서 유효질량의 공간적 variation을 가정하지 않고 유도한 Liouville equation인 식(11)과 같은 형태로 된다.

Carrier 농도 $n(\chi)$와 전류밀도 $j(\chi)$는 다음과 같다[4].

$$n(\chi) = \rho(\chi,\chi) = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk}{2\pi}f(\chi,k) \tag{35}$$

$$j(\chi) = e\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk}{2\pi}\frac{\hbar k}{m(\chi)}f(\chi,k) \tag{36}$$

경계조건은 이경우도 Frensley[3]를 따랐다.

식 (27-34)을 앞의 경우와 마찬가지로 finite element method를 이용하여 수치해석적으로 푼다. 먼저 1절에서 살펴본 것과 똑같은 mesh point로 discretize 하면 식(37-44)을 얻는다.

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \hbar\Sigma_{k'}\frac{M_1(\chi, k-k')}{\Delta_\chi}[f(\chi+\Delta_\chi, k')-f(\chi, k'),\ k'<0$$

$$\text{혹은}\ f(\chi, k')-f(\chi-\Delta_\chi, k'),\ k'>0]$$

$$-\hbar\Sigma_{k'}k'M_2(\chi, k-k')f(\chi, k')+\hbar\Sigma_{k'}\frac{M_3(\chi, k-k')}{\Delta_\chi^2}$$

$$[f(\chi+\Delta_\chi, k')-2(1+2\Delta_\chi^2 k'^2)f(\chi, k')$$

$$+f(\chi-\Delta_\chi, k')]-\hbar\Sigma_{k'}\frac{k'M_4(\chi, k-k')}{\Delta_\chi}$$

$$[f(\chi+\Delta_\chi, k')-f(\chi, k'),\ k'<0\ \text{혹은}$$

$$f(\chi, k')-f(\chi-\Delta_\chi, k'),\ k'>0]-\frac{1}{\hbar}\Sigma_{k'}$$

$$V(\chi, k-k')f(\chi, k') \equiv L_2 f(\chi, k) \tag{37}$$

$$M_1(\chi, k-k')=\frac{1}{2N_k\Delta_\chi}\Sigma_\zeta\sin[(k-k')\zeta]$$

$$[\frac{1}{m^-(\chi, \zeta)}-\frac{1}{m^-(\chi-\Delta_\chi, \zeta)},\ k'<0$$

$$\text{혹은}\ \frac{1}{m^-(\chi+\Delta_\chi, \zeta)}-\frac{1}{m^-(\chi, \zeta)},\ k'>0] \tag{38}$$

$$M_2(\chi, k-k')=\frac{1}{N_k\Delta_\chi}\Sigma_\zeta\cos[(k-k')\zeta]$$

$$[\frac{1}{m^+(\chi, \zeta)}-\frac{1}{m^-(\chi-\Delta_\chi, \zeta)},\ k'<0$$

$$\text{혹은}\ \frac{1}{m^+(\chi+\Delta_\chi, \zeta)}-\frac{1}{m^+(\chi, \zeta)},\ k'>0] \tag{39}$$

$$M_3(\chi, k-k')=\frac{1}{4N_k}\Sigma_\zeta\frac{\sin[(k-k')\zeta]}{m^-(\chi, \zeta)} \tag{40}$$

$$M_4(\chi, k-k')=\frac{1}{N_k}\Sigma_\zeta\frac{\cos[(k-k')\zeta]}{m^+(\chi, \zeta)} \tag{41}$$

$$V(\chi, k-k')=\frac{2}{N_k}\Sigma_\zeta\sin[(k-k')\zeta][v(\chi+\frac{1}{2}\zeta)-v(\chi-\frac{1}{2}\zeta)] \tag{42}$$

$$n(\chi)=\Sigma_k\frac{\Delta_k}{2\pi}f(\chi, k) \tag{43}$$

$$j(\chi+\frac{1}{2}\Delta_\chi)=e\frac{\Delta_k}{2\pi}[\Sigma_{k<0}\frac{\hbar k}{m(\chi)}f(\chi+\Delta_\chi, k)+\Sigma_{k>0}\frac{\hbar k}{m(\chi+\Delta_\chi)}f(\chi, k)] \tag{44}$$

식 (37-44)를 이용하여 RTD의 steady-state 특성 ($\frac{\partial f}{\partial t}=0$)을 수치해석적으로 계산해보았다. 계산을 위한 parameter의 값은 1절과 똑같이 $N_\chi=80$, $N_k=60$으로 두었다. 전자의 유효질량 값으로는 GaAs에서는 $0.067m_0$ $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$에서는 $0.092m_0$를 사용했다. Discrete Liouville 방정식도 1절의 경우에서 처럼 가우스 소거법으로 풀었다.

RTD는 앞의 경우와 똑같은 모델을 가정했다. 즉 4.5nm 두께의 GaAs 양자우물이 각각 똑같이 2.8nm 두께의 $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ 장벽층 사이에 들어있는 모형을 사용하였다. 모든 계산은 300K에서 이루어졌고 경계에서의 Fermi 준위는 reservoir에서의 전자농도가 $2\times10^{18}cm^{-3}$이 되도록 정하였다.(0.08195eV) 단, 이 경우에는 시뮬레이션 시간이 너무 오래 걸리기 때문에 quantum correlation parameter인 ζ_{max} 를 L로만 두고 시뮬레이션 하였으며, collision이나 self-consistent 포텐셜은 고려하지 않았다.

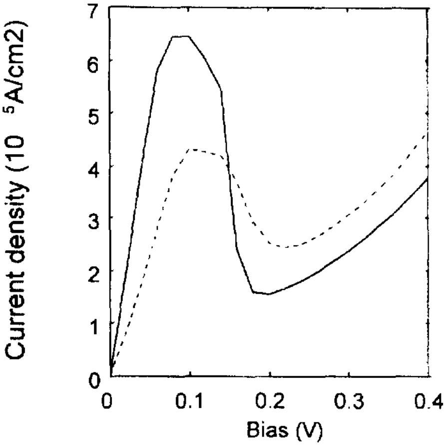

그림 6. 전자의 유효질량의 공간적 변화의 고려가 RTD의 특성곡선에 미치는 영향. 실선은 유효질량의 공간적 변화를 고려할 때, 점선은 일정한 유효질량을 가정할 때의 특성곡선을 나타낸다.(단, $\zeta_{max}=L$)

Fig. 6. The effect of considering the spatial variation of the electron effective mass in the RTD. Solid-line shows how the I-V curve changes when spatially-varying effective mass is considered in comparison with dotted-line which is obtained with constant effective mass.($\zeta_{max}=L$)

그림 6에 그 결과를 1절의 경우와 비교하여 나타내었다. 유효질량의 공간적 변화를 고려할 경우 peak-to-valley 비율이 실험값과 거의 비슷한 수준인 4:1 정도로 아주 크게 나타났다. 이 값은 전 구간에서의 유효질량을 $0.067m_0$로 일정하다고 가정한 경우의 ($\zeta_{max}=L$) peak-to-valley 비율인 1.77:1보다 2.2배 정도 증가한 것으로 공간적으로 변화하는 전자의 유효질량을 고려하는 것이 소자의 해석에서 상당히 중요한 역할을 한다는 것을 보여준다. Memory storage는 3배정도, running time은 8배가량 증가했다.

4. 전자간의 쿨롱 상호작용을 고려한 모델

앞의 세 모델에서 무시했던 전자상호작용항(V_{ij})을 고려했을 때의 RTD의 I-V 특성곡선을 살펴본다. 식 (6)에서 나타난 V_{ij}는 Poisson방정식을 양자역학적 Liouville 방정식과 동시에 풀어서 self-consistent한 결과를 만족시킬 때까지 반복법(iteration)을 계속함으로 다룰 수 있다. 함께 다루어야 하는 Poisson 방정식은

$$\frac{\partial}{\partial \chi}\left(\varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial \chi}\right) = -e(\Gamma - n) \tag{45}$$

이고 여기서 ε은 공간적으로 변화하는 유전율, Γ는 dodor의 doping 농도이다. Liouville 방정식 (11-12)에 들어가는 포텐셜과는 다음의 관계가 있다.

$$v(\chi) = -[\chi_e(\chi) - \chi_e(0)] - e[\phi(\chi) - \phi(0)] \tag{46}$$

여기서 χ_e는 물질의 전자 친화도이다. 위의 포텐셜에 대한 경계조건은 다음과 같다[18].

$$\phi(0) = \frac{k_B T}{e} \ln\left[\frac{n(0)}{w(0)n_i(0)}\right]$$

$$\phi(L) = V_b + \frac{k_B T}{e} \ln\left[\frac{n(L)}{w(L)n_i(L)}\right] \tag{47}$$

여기서 V_b는 바이어스 전압, $w(\chi)$는 위치에 따른 bandgap의 변화를 나타내기 위해 도입한 band grading 함수로 다음과 같이 주어진다.

$$w(\chi) = \sqrt{\frac{N_v(0)N_c(\chi)}{N_c(0)N_v(\chi)}} \exp\left[\frac{E_G(\chi) - E_G(0)}{2k_B T}\right] \exp\left[\frac{\chi_e(\chi) - \chi_e(0)}{k_B T}\right] \tag{48}$$

여기서 N_c, N_v는 각각 conduction band와 valence band의 effective density of state이고, E_G는 energy gap이다.

식 (45)의 discrete한 형태는 간단하다. 하지만 반복적인(iterative)한 계산을 위해 다음의 matrix 방정식을 이용한다[4].

$$\begin{aligned} &\eta_1(\chi)\delta\phi(\chi - \Delta_\chi) + \left[\eta_2(\chi) - \frac{e^2}{k_B T} n(\chi)\right]\delta\phi(\chi) + \eta_3(\chi)\delta\phi(\chi + \Delta_\chi) \\ &= -\eta_1(\chi)\phi(\chi - \Delta_\chi) - \eta_2(\chi)\phi(\chi) - \eta_3(\chi)\phi(\chi + \Delta_\chi) \\ &\quad - e[\Gamma(\chi) - n(\chi)] \end{aligned} \tag{49}$$

여기서

$$\eta_1(\chi) = \varepsilon\left(\chi - \frac{1}{2}\Delta_\chi\right)/(\Delta_\chi)^2$$

$$\eta_3(\chi) = \varepsilon\left(\chi + \frac{1}{2}\Delta_\chi\right)/(\Delta_\chi)^2$$

$$\eta_2(\chi) = -\left[\varepsilon\left(\chi - \frac{1}{2}\Delta_\chi\right) + \varepsilon\left(\chi + \frac{1}{2}\Delta_\chi\right)\right]/(\Delta_\chi)^2 \tag{50}$$

이다. 모든 mesh point에서의 $\delta\phi$가 10meV보다 작게 될 때 반복(iteration)을 멈추었으며 계산시간과 memory storage의 편의상 전자유효질량의 공간적 변화는 고려하지 않았다. Doping 농도는 GaAs 전극에서 $2\times10^{18}cm^{-3}$, 장벽과 양자우물에는 doping이 없다고 가정하였다. 상대유전율은 GaAs에서 12.9, $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$에서는 12.03을 사용했다.

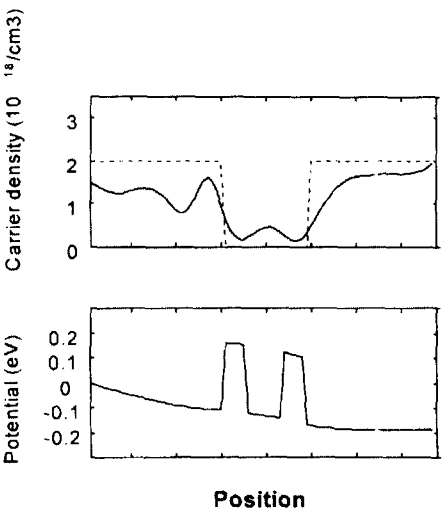

그림 7. Collision과 contact resistivity를 모두 고려하지 않았을 때의 위치에 따른 carrier 농도와 포텐셜.(점선은 이온화된 donor 분포를 표시)

Fig. 7. Carrier density versus the position in the RTD when both collision and contact resistivity are not considered. (Dotted-line indicates the distribution of ionized donors.)

그림 7에 비탄성(inelastic) process를 고려하지 않고 식 (11)과 식 (49)를 동시에 풀었을 때의 각 mesh point에서의 포텐셜과 carrier의 농도를 나타내었다. 점선은 이온화된 donor 분포를 나타낸다. 그런데 그림에서 알 수 있듯이 몇가지 문제점이 나타난다. 첫째, 장벽의 왼쪽에 accumulation layer가 형성되지 않고 오히려 depletion이 일어난다. 둘째, 그 결과로 barrier의 왼쪽에서 이차 미분계수가 양인 곡선모양의 포텐셜이 형성된다. 이런 모양의 포텐셜은 왼쪽 경계에서 상

당히 큰값의 전기장을 만드는데 이는 물리적으로 현실적이지 못하다. 왜냐하면 이런 경계는 인위적인 것으로, 그 위치는 self-consistent한 포텐셜의 형성에 큰 영향을 미치면 안되기 때문이이다. 따라서 경계의 위치가 self-consistent한 포텐셜의 형성에 거의 영향을 주지 않으려면 경계에서의 포텐셜의 변량이 아주 작은 값이어야 한다. 이런 해를 얻기위해 앞에서 살펴본 relaxation time 근사에 의한 비탄성 process 즉 collision을 도입한 결과를 그림 8에 나타내었다. 그림 8에서 알 수 있듯이 경계에서의 포텐셜의 변량은 상당히 줄어들었고 또 장벽의 왼쪽에 accumulation layer가 비록 충분하지는 않지만 형성되기 시작하고 있음을 알 수 있다.

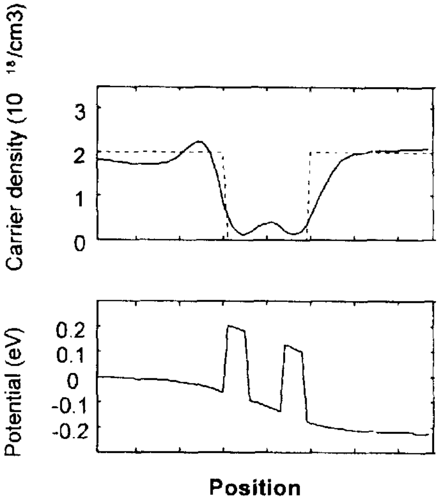

그림 8. Collision만 고려했을 때의 위치에 따른 carrier 농도와 포텐셜.(점선은 이온화된 donor 분포를 표시)

Fig. 8. Carrier density versus the position in the RTD when only collision is considered. (Dotted line indicates the distribution of ionized donors.)

하지만 장벽의 두께가 충분히 작아서 tunneling 비율이 산란 비율보다 훨씬 크면 이것으로 충분하지 않다. 여기서는 다시 접촉 저항(contact resistivity)을 생각하기로 한다. steady state에서 전류는 반드시 반도체 contact layer를 지나게 되는데 이 layer가 RTD로 들어가는 전자의 분포함수를 변화시킨다. 이런 저항의 가장 단순한 근사는 drifted Fermi 분포를 경계조건으로 사용하는 것인데 이는 식 (15)에서 $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ 대신 $\frac{(\hbar k - p_0)^2}{2m}$를 대입하면 된다[19]. 여기서 p_0는 $\mu_e m \nabla \phi$이다. 전자 이동도 μ_e로는 5000 $cm^2 V^{-1} s^{-1}$을 사용했다. 그 결과를 그림 9에 나타냈다. 경계에서의 전기장은 거의 0으로 경계의 위치가 self-consistent 포텐셜의 형성에 거의 영향을 미치지 않음을 알 수 있다. 또 장벽의 왼쪽의 accumulation layer도 완전히 형성되었음을 알 수 있다. RTD의 self-consistent 포텐셜은 소자내의 캐리어 전송에 영향을 미치는 갖가지 요소의 복잡한 상호작용이 고려되었을 때 적절한 결과가 얻어짐을 알 수 있다. 따라서 초보적인 양자역학적인 접근으로 얻어진 모형은 실제의 포텐셜을 정확히 기술할 수 없고 internal dissipation과 접촉 저항등을 모두 고려한 양자역학적 운동이론의 바탕위에서만 실제의 포텐셜을 비교적 정확히 예측할 수 있다.

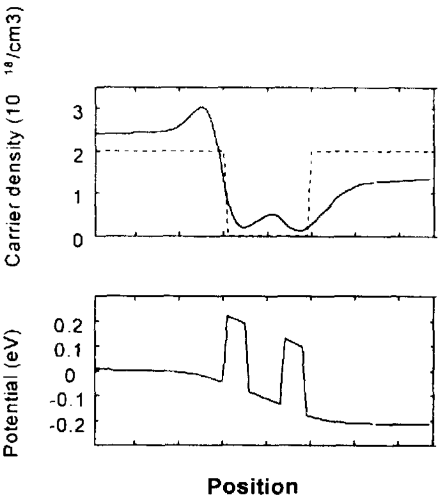

그림 9. Collision과 contact resistivity를 모두 고려했을 때의 위치에 따른 carrier 농도와 포텐셜.(점선은 이온화된 donor 분포를 표시)

Fig. 9. Carrier density versus the position in the RTD when both collision and contact resistivity are considered.(Dotted-line indicates the distribution of ionized donors.)

최종적인 self-consistent 포텐셜 model 의 I-V 특성곡선을 그림 10에 나타내었다. 공진 터널링(resonant tunneling)은 0.15(V)에서 일어났는데 이는 self-consistent 포텐셜을 고려하지 않은 모델에 비해 20meV 가량 커진 값이다. 이는 물리적으로 현실적인데 그림 2와 그림 9의 포텐셜 profile을 비교해서 보면

알 수 있듯이 양자우물에서의 전기장(포텐셜의 변화량)이 감소하기 때문이다. 즉 flat-band model의 경우 가해주는 바이어스가 모두 양자우물에 영향을 주지만 self-consistent 포텐셜을 고려하면 가해주는 바이어스가 모두 양자우물에 영향을 줄 수 없기 때문이다. Self-consistent 포텐셜에 의해 전자가 느끼는 장벽이 낮아지기 때문에 소자에 흐르는 전류의 양은 상당히 커졌으며 peak-to-valley 비율은 1.69:1 정도로 실험값에 비해서는 작은 값이지만 self-consistent 포텐셜을 고려하지 않고 collision만 도입했을 경우의 peak-to-valley 비율인 1.42:1보다는 큰 값이다.

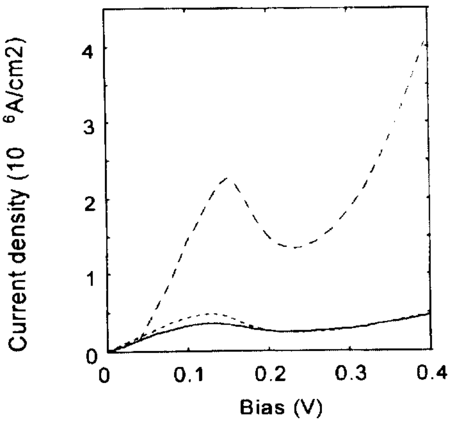

그림 10. Hartree 포텐셜 항이 RTD의 특성곡선에 미치는 영향. 긴점선은 collision 항과 self-consistent 포텐셜을 모두 고려한 model, 실선은 collision만을 고려한 model, 점선은 둘다 무시한 간단한 model의 특성곡선을 나타낸다.

Fig. 10. The effect of Hartree's potential term. Dashed-line shows how the I-V curve changes when Hartree's potential term is considered in comparison with solid-line which is obtained only with collision term. Dotted-line is obtained when both of these terms are not considered.

그림 11에는 그림 3이나 5에서 처럼 ζ_{max} 를 L로 잡을 때와 $2L$로 잡을 때의 I-V 특성 곡선을 비교하여 나타낸 것이다. 여기서도 두 곡선의 주된 차이는 터널링 전류가 중요한 바이어스 범위에서 나타났으며 후자의 경우가 훨씬 실험곡선의 모양과 비슷하다는 것을 알 수 있다(터널링이 일어나기 전까지의 곡선의 이차 미분계수가 0보다 크다는 점에서). 후자의 경우 Peak-to-valley 비율이 1.52:1 에서 1.62:1로 1.14배 가량 증가하였다.

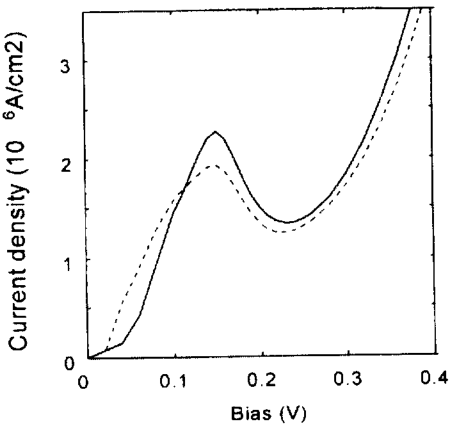

그림 11. ζ_{max} 를 L로 잡았을 때(점선)와 2L로 잡았을 때(실선)의 RTD의 I-V 곡선

Fig. 11. I-V characteristics of RTD with two different ζ_{max} values. Dotted-line and solid-line are for the cases of ζ_{max} = L and 2L, respectively.

V. 결 론

양자소자들을 제대로 해석하기 위해 양자역학에 바탕을 둔 전송이론의 초보적 단계로서의 Wigner 함수가 제안되어 왔고 여기서는 그 유용성 및 정당성을 검증하기 위해 RTD를 양자소자의 prototype으로 삼아 정상상태의 특성을 살펴보았다. I-V 특성곡선에 부성저항의 구간이 나타나고 또한 장벽과 양자우물 속에 전자가 존재할 확률이 있음을 보여주는 등, 양자역학적 현상을 설명하는데 성공하고 있다. 본 논문에서는 기본적인 Wigner 전송방정식 방법에 포텐셜이 self-consistent하게 바뀌는 영향, 전자의 유효질량이 위치에 따라 변하는 영향, collision과 접촉 저항이 미치는 영향을 포함시켜 해석하였으며 quantum correlation에 대한 보다 정확한 계산을 위한 방법을 다루었다.

참 고 문 헌

[1] E. Wigner, "On the quantum correction for thermodynamic equilibrium," *Phys. Rev.*, vol. 40, 749-759, June 1932.

[2] W. R. Frensley, "Quantum Transport," in

Heterostructures and Quantum Devices, Academic Press, New York, 1994, Chap. 9.

[3] W. R. Frensley, "Wigner-function model of a resonant-tunneling semiconductor device," *Phys. Rev. B.*, vol. 36, 1570-1580, July 1987.

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

[5] 김성진, "AlInAs/GaInAs계 공명터널링 다이오드의 부성저항 특성에 관한 수치 해석," 전자공학회논문지, 제 32권 A편, 제 7호, pp. 51-57, 1995.

[6] 김경염, 이병호, "Wigner function을 이용한 양자소자의 해석과 시뮬레이션," 제 13회 광학 및 양자전자 학술발표회 논문집, p. 88, 1996.

[7] 권택정, 이병호, "Wigner 분포함수 모델을 이용한 공명 터널링 다이오드의 해석," 전자공학회 추계학술대회 논문집, 제 19권 A편, pp. 625-628, 1996.

[8] A. Goswami, *Quantum Mechanics*, Wm. C. Brown Publishers, Dubuque, Chap. 20., 1992.

[9] W. R. Frensley, "Quantum transport modeling of resonant-tunneling devices," *Solid-State Electron.*, vol. 31, 739-742, 1988.

[11] Caldeira, A. O. and A. J. Leggett, "Path integral approach to quantum Brownian motion," *Physica*, vol. 121A, 587-616, 1983.

[12] Kubo, R., M. Toda, and N. Hashitsume, *Statistical Physics II. Nonequilibrium Statistical Mechanics*, Springer-Verlag, Berlin, p. 55.

[13] Levinson, I. B., "Translational invariance in uniform fields and the equation of motion for the density matrix in the Wigner represention," *Soviet Physics JETP*, vol. 30, 362-367, 1970.

[14] Lin, J. and L. C. Chiu, "Quantum theory of electron transport in the Wigner formalism," *J. Appl. Phys.*, vol. 57, 1373-1376, 1985.

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

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

[17] 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.

[18] M. Kurata and J. Yoshida, "Modeling and characterization for high-speed GaAlAs-GaAs n-p-n heterojunction bipolar transistors," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. ED-31, 467-473, April 1984.

[19] W. R. Frensley, "Effect of inelastic processes on the self-consistent potential in the resonant-tunneling diode," *Solid-State Electron.*, vol. 32, 1235-1239, 1988.

저 자 소 개

金 京 濂(正會員)
1975년 2월 28일생. 1997년 2월 서울대학교 전기공학부 졸업(공학사). 현재 서울대학교 전기공학부 석사과정. 주관심분야는 양자전송, 양자소자의 모델링, 초미세소자 등임.

李 竝 浩(正會員) 第 33券 A編 第 7號 參照
현재 서울대학교 전기공학부 조교수