

비등방성 반도체 양자우물에서의 자유전자 흡수에 의한 광자의 흡수계수의 모델링

김경열 · 이병호
서울대학교 전기공학부

이찬호
숭실대학교 정보통신전자공학과

(1998년 11월 11일 받음, 1998년 12월 29일 수정본 받음)

비등방성 반도체 양자우물에서의 자유전자 흡수에 의한 광자의 흡수계수를 모델링하였다. Intravalley scattering과 intervalley scattering에 의한 자유전자 흡수가 모두 고려되었고 양자우물내의 각각의 부밴드가 광자의 흡수에 기여하는 정도도 따로 계산되었다. 또한 이 모델의 타당성을 검증하기 위해, Si에 δ -도핑을 이용하여 형성한 양자우물에 대하여 시뮬레이션 실험을 수행하고 문헌의 실험결과와 비교하여 그 적절성을 보였다.

I. 서 론

양자우물에서 형성되는 전자의 에너지 부준위간 천이(intersubband transition)에 의한 광자의 흡수를 이용한 적외선(특히 원적외선(far-infrared)) 감지기(detector)나 변조기(modulator)가 최근 활발히 연구되고 있다.^[1,4] 양자우물 광감지기는 양자우물구조를 바꾸어 탐지영역을 조절할 수 있다는 특징을 갖고 있어 WDM 등의 광통신에서 이용할 수 있다. 양자우물을 이용한 광감지기는 GaAs/AlGaAs의 이종접합을 이용한 구조에서 먼저 구현되었다.^[1] 하지만 GaAs/AlGaAs 시스템은 선택 규칙(selection rule)^[5]에 의해 양자우물에 대해 수직으로 입사하는 빛(빛의 편광방향이 양자우물의 성장방향에 수직인 경우)을 흡수할 수 없다. 이는 에너지 밴드의 대칭적인 구조에 기인한 것으로 물질 자체의 근본적인 한계이다. 그러나 일반적으로 입력 신호는 수직으로 입사할 때 가장 효율이 좋으므로 위의 물질을 이용하려면 격자구조(grating)를 이용해 입사광을 산란시키거나 도파구조(waveguide)를 만드는 방법이 사용되었으나 모두 효율이 떨어지고 제작이 어려워지는 문제점을 가지고 있었다. 따라서 실제로 이용되는 광탐지기를 제작하려면 수직으로 입사하는 빛에 대해서도 흡수가 가능한 구조가 필요하게 되었고, 이후 Si MBE (molecular beam epitaxy) 기술의 발전으로 비등방성 물질인 Si/SiGe 이종접합이 가능해지면서 δ -도핑을 이용한 Si/Si_{1-x}Ge_x와 Ge/Si_{1-x}Ge_x 양자우물 구조에서 전자와 홀(hole)의 광흡수가 관찰되었으며,^[2,3,6,7] 수직 입사하는 빛의 흡수도 가능하게 되었다.

자유전자에 의한 광자의 흡수는 다음의 두가지 이유로 주목을 받게 되었다. 첫째, 자유전자의 흡수는 부밴드간 천이에 의한 광자의 흡수와 동시에 일어나는데 도핑이 클 경우 실험상의 흡수 스펙트럼을 크게 왜곡시킨다. 특히 자유전자 흡수

는 빛의 파장에 비례해서 증가하기 때문에 장파장 특히 원적외선 영역의 감지기의 특성에 큰 영향을 미치게 된다. 더욱이 양자우물의 부준위간 에너지 차이는 아주 작으며 ((원)적외선 범위) 자유전자 흡수는 빛의 파장의 1.5~2승에 비례하기 때문에 이 왜곡은 무시할 수 없다. 이런 자유전자 흡수는 종종 전자의 부밴드간 천이에 의한 흡수 스펙트럼보다 커서 실험곡선만으로는 양자우물 감지기의 천이 에너지를 결정할 수 없다는 문제점을 가져온다.^[2,3] 따라서 우리가 원하는 파장을 흡수하기 위한 광감지기를 설계하기 위해서는 이런 자유전자 흡수 스펙트럼을 분석하고 이를 실제의 실험 스펙트럼에서 제거하는 과정이 필요하게 된다. 둘째, Si과 같은 비등방성 물질뿐만 아니라 GaAs/AlGaAs 시스템과 같은 등방성 물질을 이용하여 빛의 수직 입사를 감지하려는 시도로 자유전자에 의한 광자의 흡수 메커니즘을 이용하는 연구가 최근에 수행되고 있다.^[8] 이런 이유로 최근에 자유전자 흡수 메커니즘에 대한 이론적 연구도 많이 수행되고 있다. Fan *et al.*의 벌크 물질에서의 최초의 모델링^[9] 이후 최근에야 비로소 Tsai *et al.*이 벌크에서의 intervalley scattering에 의한 자유전자 흡수를 계산하였으며,^[10] 이후 Wu와 Lin에 의해 최초로 무한(infinite) 포텐셜을 가정한 GaAs 양자우물에서의 intravalley scattering에 의한 자유전자 흡수가 제한적으로나마 모델링 되었다.^[11] 하지만 앞에서 언급했듯이 최근 각광을 받고 있는 Si/SiGe 이종접합구조에 적용될 수 있는 비등방성 물질로 기른 양자우물에서의 이론적 모델링은 제시되지 않고 있다.

본 논문에서는 비등방성 반도체 양자우물에서의 자유전자 흡수에 의한 광자의 흡수계수를 모델링하였다.^[12-14] Intravalley scattering과 intervalley scattering에 의한 자유전자 흡수가 모두 고려되고 양자우물내의 각각의 부밴드가 광자의 흡수에 기여하는 정도도 따로 계산되었다. 또한 이 모델의 타당성을

검증하기 위해, Si에 δ -도핑을 이용하여 형성한 양자우물에 대하여 시뮬레이션하고 문헌의 실험결과와 비교하였다.

II. 양자우물에서의 광자와 전자의 상호작용

Si이나 Ge처럼 균일 에너지 표면(constant energy surface) 이 등방적(isotropic)이지 않을 경우 유효질량은 스칼라 값이 아니라 텐서가 된다. 전도대만을 고려한 유효질량 근사(effective-mass approximation; envelope-function approximation)에서, 이런 유효질량 텐서를 고려한 해밀토니안(Hamiltonian)은

$$H_0 = \frac{1}{2m_0} P^T W P + V_{eff}(z), \quad (1)$$

이다.^[15] 여기서 P 는 운동량벡터, $(1/m_0)W$ 는 역유효질량텐서(inverse effective mass tensor)이고, V_{eff} 는 Hartree 포텐셜과 exchange-correlation 포텐셜을 포함해서 self-consistent하게 계산되는 포텐셜이다. 식 (1)을 사용한 유효질량 방정식(effective mass equation)의 해는 다음과 같이 주어진다.

$$H_0 |n, k\rangle = E_{n,k} |n, k\rangle, \quad (2)$$

$$|n, k\rangle \equiv \xi_{n,k}(r_i, z) = \frac{1}{2\pi} \exp(ik \cdot r_i) \phi_n(z) \\ = \frac{1}{2\pi} \exp[i(k \cdot r_i - \gamma_k z)] \zeta_n(z), \quad (3)$$

$$E_{n,k} = W_n + \frac{\hbar^2}{2m_0} (\beta_{xx} k_x^2 + 2\beta_{xy} k_x k_y + \beta_{yy} k_y^2). \quad (4)$$

여기서 n 은 기저상태를 0으로 두었을 때의 state number를 나타내며

$$\gamma_k = \frac{k_x w_{xz} + k_y w_{yz}}{w_{zz}}, \quad (5)$$

$$\beta_{ij} = w_{ij} - \frac{w_{iz} w_{zj}}{w_{zz}}, \quad (6)$$

이다.^[15] (W 텐서의 (i,j) 원소를 w_{ij} , x - y 평면 위에 존재하는 transverse 방향의 벡터를 r_i , transverse 방향의 wavevector를 k 로 나타내었다.) 식 (3)과 (4)에서 $\zeta_n(z)$ 와 W_n 은 다음과 같은 일차원 슈뢰딩거 방정식을 만족시킨다.^[15]

$$H_z \zeta_n(z) \equiv \left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} w_{zz} \frac{d^2}{dz^2} + V_{eff}(z) \right] \zeta_n(z) = W_n \zeta_n(z). \quad (7)$$

따라서 식 (7)을 풀어 $\zeta_n(z)$ 과 W_n 을 구하면 양자우물에서의 전자의 상태를 결정할 수 있다.

이제 식 (1)로 주어지는 해밀토니안과 식 (3)으로 주어지는 전자의 상태를 지니고 있는 시스템에 광자가 입사한다고 하면 광자가 미치는 영향은 섭동(perturbation) 이론으로 다룰 수 있으므로^[15] 다음과 같은 섭동 해밀토니안을 도입한다.^[15]

$$H_1 = -\frac{e}{2m_0} (P^T W A + A^T W P). \quad (8)$$

여기서 e 는 전자의 전하량의 절대값이며, A 는 광자의 벡터 포텐셜로

$$A = \frac{A_0}{2} \left[\exp(ik_{op} \cdot (r_i + zz)) - i\omega t + c.c. \right] \hat{\epsilon}, \quad (9)$$

($c.c.$ 는 complex conjugate를 의미한다.)인데, 여기서 광자의 편광(polarization)을 나타내는 $\hat{\epsilon}$ 는 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\hat{\epsilon} = \epsilon_x \hat{x} + \epsilon_y \hat{y} + \epsilon_z \hat{z}. \quad (10)$$

식 (9)에서 첫 번째 항은 광자의 흡수, 두 번째 항은 광자의 방출에 기여한다. 페르미의 황금률(Fermi's golden rule)과 dipole 근사를 사용하면 다음과 같은 천이 행렬 요소(transition matrix element)가 얻어진다.

$$\langle \xi_m | H_1 | \xi_n \rangle \equiv \langle \xi_m | H'_{op} | \xi_n \rangle \exp(-i\alpha t) \\ + \langle \xi_m | H'_{op} | \xi_n \rangle \exp(i\alpha t) \quad (11)$$

$$\langle \xi_m | H'_{op} | \xi_n \rangle = -\frac{eA_0}{2m_0} \sum_{j,k \in \{x,y,z\}} \epsilon_j w_{jk} \langle \xi_m | p_k | \xi_n \rangle. \quad (12)$$

다음의 식을 이용하면

$$\langle \xi_m | p_{x(y)} | \xi_n \rangle = \hbar k_{n,x(y)} \delta_{n,m} \delta_{k,k}, \quad (13)$$

$$\langle \xi_m | p_z | \xi_n \rangle = \langle \xi_m | p_z | \xi_n \rangle \delta_{k,k} - \hbar \gamma_k \delta_{n,m} \delta_{k,k}, \quad (14)$$

우리는 다음과 같은 천이 행렬 요소를 얻게 된다.

$$\langle \xi_m | H'_{op} | \xi_n \rangle_{IST} = -\frac{eA_0}{2m_0} \sum_{j \in \{x,y,z\}} \epsilon_j w_{jz} \langle \xi_m | p_z | \xi_n \rangle \delta_{k,k}, \quad (15)$$

$$\langle \xi_m | H'_{op} | \xi_n \rangle_{FCA} \\ = -\frac{eA_0}{2m_0} \sum_{j \in \{x,y,z\}} \epsilon_j [w_{jx} \hbar k_{n,x} + w_{jy} \hbar k_{n,y} - w_{jz} \hbar \gamma_k] \delta_{n,m} \delta_{k,k} \quad (16)$$

식 (15)가 전자의 부밴드간 천이에 의한 광자의 흡수(혹은 방출)에 해당하는 천이 행렬 요소이고 식 (16)이 free carrier 흡수(혹은 방출)에 해당하는 천이 행렬 요소이다.

III. 자유전자 흡수에 의한 광자의 흡수계수

자유전자(free electron)는 에너지 보존 법칙과 운동량 보존 법칙을 동시에 만족시킬 수 없기 때문에 광자를 스스로는 흡수할 수 없지만 포논(phonon)과의 상호작용을 통해 이런 보존 법칙을 만족시키면서 광자를 흡수할 수 있게 된다. 그림 1에 자유전자 흡수과정을 다이어그램으로 나타내었다. 따라서 광자의 흡수는 물질에서의 전자와 포논의 상호작용에 의존하게

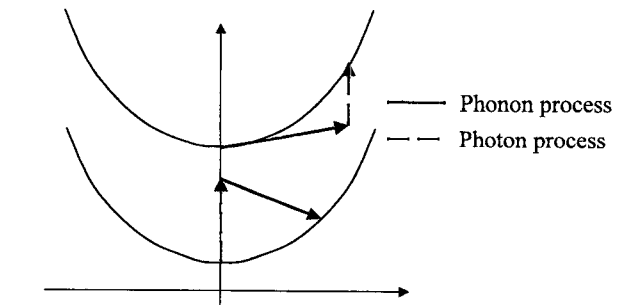


그림 1. 자유전자의 흡수과정.

된다. 벌크 구조의 경우 만족시켜야 할 운동량 보존법칙과 에너지 보존 법칙은 모두 3차원의 k 벡터와 관계된다. 하지만 양자우물의 경우 전자는 오직 두방향(양자우물의 성장방향(z -방향)에 수직인 두 방향(x, y -방향))으로만 '자유'롭기 때문에 만족시켜야 할 보존법칙들은 오직 2차원의(x, y -방향) k 벡터만 지배한다. 따라서 자유전자 흡수에 의해 광자를 흡수한 후에 전자는 흡수전과 같은 부밴드에 있을 수도 있고 좀더 들뜬 상태로 천이하거나 아니면 더 낮은 에너지 상태로 천이할 수 있다. 즉 intrasubband 자유전자 흡수 뿐만 아니라 intersubband 자유전자 흡수도 가능해 진다. 더욱이 Si이나 Ge같은 비등방성 물질들은 전도대의 동등한(equivalent) valley가 여러개인 multivalley 물질이기 때문에 intravalley 포논 뿐만 아니라 동등한 intervalley 포논에 의한 자유전자 흡수가 중요해 진다.^[10] 따라서 intervalley 포논에 의한 자유전자 흡수도 고려되어야 한다.

앞에서 언급했듯이 자유전자 흡수는 광자의 흡수에 뒤따르는 혹은 선행하는 포논의 흡수 혹은 방출에 의해서 이루어진다. 불순물에 의한 산란(impurity scattering)도 마찬가지로 자유전자 흡수를 가능하게 하지만 상온에서는 포논의 흡수 혹은 방출에 의해 이루어지는 free carrier 흡수가 지배적이다.^[9] 따라서 여기에서는 불순물 산란에 의한 자유전자 흡수는 무시한다. 또한 우리가 관심을 두는 구조가 Si/Si_{1-x}Ge_x 양자우물구조이므로 intravalley 음향 포논과 intervalley 포논만을 고려한다.

이런 과정은 양자역학적으로 second-order의 시간에 의존하는 섭동이론으로 다루어질 수 있으므로^[9-11] 흡수할 확률은 다음과 같이 주어진다.^[10]

$$P = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_n \frac{|H'_{fn}H'_{ni}|^2}{(E_n - E_i)^2} \delta(E_f - E_i). \quad (17)$$

여기서 아래첨자 i, n, f 는 각각 초기상태, 중간상태, 최종상태를 나타낸다. 두 개의 천이 행렬 요소 H'_{fn} 과 H'_{ni} 중 하나는 전자와 광자의 상호작용 해밀토니안에 의한 천이 행렬 요소이고 다른 하나는 전자와 포논의 상호작용 해밀토니안에 의한 천이 행렬 요소이다. 앞서서도 언급하였듯이 자유전자 흡수를 위해서는 광자의 흡수에 포논의 흡수 혹은 방출이 선행되거나 뒤따라야 한다. 광자의 흡수가 먼저 일어나는 경우 다음과 같은 식이 성립한다.

$$k_{ni} = k_u, \quad k_{fi} = k_u + q, \quad (18)$$

$$E_n - E_i = -\hbar \omega \quad (19)$$

아래첨자 i 는 k 벡터의 transverse 성분(양자우물 성장방향에 수직인 두 방향) 식 (18)의 모든 벡터는 모두 2차원 벡터이다. 을 나타낸다. q 는 포논의 2차원 k 벡터이며($q_{phonon} \equiv q + q_z \hat{z}$) \pm 는 각각 포논의 방출/흡수를 의미한다. 포논이 먼저 흡수 혹은 방출되는 경우 다음식이 성립한다.

$$k_{ni} = k_{fi}, \quad k_{ni} = k_u + q, \quad (20)$$

$$E_n - E_i = \frac{\hbar^2}{2m_0} \{ \beta_{xx}(k_{fx}^2 - k_{ix}^2) + 2\beta_{xy}(k_{fx}k_{fy} - k_{ix}k_{iy}) + \beta_{yy}(k_{fy}^2 - k_{iy}^2) \}$$

$$+ W_f - W_i \pm \hbar \omega_q = \hbar \omega \quad (21)$$

여기서 W_i, W_f 는 식 (4)와 (7)에 정의되어 있다. 따라서 광자흡수에는 모두 네가지의 과정이 존재함을 알 수 있다.

자유전자 '방출' 과정(free carrier 'emission')도 존재하는 데 이는 광자의 방출에 포논의 흡수 혹은 방출이 선행되거나 뒤따르는 현상이다. 광자의 방출이 먼저 일어나는 경우 다음과 같은 식이 성립한다.

$$k_{ni} = k_u, \quad k_{fi} = k_u + q, \quad (22)$$

$$E_n - E_i = \hbar \omega \quad (23)$$

포논이 먼저 흡수 혹은 방출되는 경우 다음식이 성립한다.

$$k_{ni} = k_{fi}, \quad k_{ni} = k_u + q, \quad (24)$$

$$E_n - E_i = \frac{\hbar^2}{2m_0} \{ \beta_{xx}(k_{fx}^2 - k_{ix}^2) + 2\beta_{xy}(k_{fx}k_{fy} - k_{ix}k_{iy}) + \beta_{yy}(k_{fy}^2 - k_{iy}^2) \} + W_f - W_i \pm \hbar \omega_q = -\hbar \omega \quad (25)$$

따라서 광자방출에도 모두 네가지의 과정이 존재함을 알 수 있다. 식 (21)과 (25)의 마지막 등식은 전체시스템의 에너지 보존법칙에서 유도되었다.

이제 두 개의 천이 행렬 요소 H'_{fn} 과 H'_{ni} 를 자세히 살펴보자. 식 (16)에 비등방성 물질에서의 자유전자 흡수에 관계되는 전자-광자간 상호작용 해밀토니안에 의한 천이 행렬 요소가 나타나 있다. 식 (16)은 크게 세 항으로 이루어져 있는데 그 중 세 번째 항은 전적으로 물질의 유효질량 텐서의 off-diagonal 요소에 의한 기여이다. 등방성 물질이나 유효질량 텐서의 off-diagonal 요소가 0인 밴드구조를 갖는 물질에서는 p_x, p_y 연산자(식 (13)참조)만 자유전자 흡수에 기여할 수 있지만 Si/SiGe 같은 물질에서는 0이 아닌 유효질량 텐서의 off-diagonal 요소 때문에 p_x, p_y 연산자뿐만 아니라 p_z 연산자에 의해서도 자유전자 흡수가 일어날 수 있다(세번째 항). 이는 '자유'로운 방향(x, y 방향)의 운동량이 유효질량 텐서의 off-diagonal 요소에 의해 갇혀있는(confined) 방향(z 방향)으로 연결(link)되어 전자가 x, y 방향으로만 자유롭지 않고 z 방향으로도 effective하게 자유롭기 때문이다 (식 (3)의 $\exp(-i\gamma_k z)$ 부분).^[16,17]

전자와 포논의 상호작용 해밀토니안에 의한 천이 행렬 요소는 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$|H'_{mk',nk}|^2 = |M_q|^2 \left(N_q + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \langle \phi_m | \exp(\mp i q_z z) | \phi_n \rangle^2 \delta(k' - k \pm q). \quad (26)$$

여기서 q_z 는 confine된 방향(z -방향)의 포논 k 벡터이고($q_{phonon} \equiv q + q_z \hat{z}$), N_q 는 Bose-Einstein 분포함수로 주어지는 q 에서의 포논의 population을, \pm 는 각각 포논의 방출/흡수를 의미한다. M_q 는 다음과 같이 주어진다.^[10]

$$|M_q|^2 = \begin{cases} \frac{D_{ac}^2 \hbar q^2}{2\rho \hbar \omega_q V} & \text{acoustic phonon,} \\ \frac{Z_f D_{inter}^2 \hbar^2}{2\rho E_{inter} V} & \text{intervalley phonon.} \end{cases} \quad (27)$$

표 1. 시뮬레이션에 사용한 물질의 파라미터

기호	의미	값	참고문헌
ϵ_0	진공에서의 유전율	8.85×10^{-12} F/m	[5]
k_B	볼츠만 상수	1.38×10^{-23} J/K	[5]
e	전자의 전하량의 크기	1.6×10^{-19} C	[5]
c	진공에서의 빛의 속도	3×10^8 m/s	[5]
T	온도	300 K	
n_r	물질의 굴절율	3.42	[5]
m_0	자유전자의 질량	9.11×10^{-31} kg	[18]
m_t	횡질량	$0.19 m_0$	[18]
m_l	종질량	$0.916 m_0$	[18]
m_{dos}^*	상태밀도 유효질량	(m, m, m_l)	[18]
ρ	물질의 질량 밀도	2.329 g/cm ³	[18]
s_l	음속	9037 m/s	[18]
D_{ac}	음향포논의 deformation 포텐셜	12 eV	[18]
D_{inter}	intervalley 포논의 deformation 포텐셜	19.2×10^8 eV/cm	[18]
E_{inter}	intervalley 포논의 에너지	59.0 meV (f-type) 63.0 meV (g-type)	[18]
V_0	band offset	133 meV (Si/Si _{0.7} Ge _{0.3}) 216 meV (Si/Si _{0.5} Ge _{0.5})	[19]

여기서 Z_n 는 equivalent final valley의 수, V 는 소자의 부피이다. 나머지 기호들은 표 1에 나타나 있다.

식 (16), (17), (26), (27)을 이용하여 자유전자 흡수에 의한 광자의 흡수 계수를 구하면 다음과 같다.

$$\alpha_{FCA}(\omega) = \frac{2\hbar\omega}{c\epsilon_0 n_r \omega^2 A_0^2} \frac{2}{V} \sum_{n,m,k,q} \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \phi_m | \exp(\mp iq_z z) | \phi_n \rangle|^2 \times [|S_{++}|^2 f_{n,k}(1-f_{m,k+q}) \delta(E_{n,k}-E_{m,k+q}+\hbar\omega_q+\hbar\omega) + |S_{-+}|^2 f_{n,k}(1-f_{m,k-q}) \delta(E_{n,k}-E_{m,k-q}-\hbar\omega_q+\hbar\omega) - |S_{+-}|^2 f_{n,k}(1-f_{m,k+q}) \delta(E_{n,k}-E_{m,k+q}+\hbar\omega_q-\hbar\omega) - |S_{--}|^2 f_{n,k}(1-f_{m,k-q}) \delta(E_{n,k}-E_{m,k-q}-\hbar\omega_q-\hbar\omega)] \equiv \sum_{n,m} [A_{++nm} + A_{-+n-} - A_{+-nm} - A_{--nm}]. \quad (28)$$

여기서 f_n 는 n 번째 부밴드에 있는 전자의 분포를 나타내는 페르미-디랙 분포함수이고, $|S_{++}|^2$, $|S_{-+}|^2$, $|S_{+-}|^2$, $|S_{--}|^2$ 는 다음과 같이 정의된다. (첫번째 하첨자의 \pm 는 포논의 흡수/방출의 경우임을, 두 번째 하첨자의 \pm 는 광자의 흡수/방출의 경우임을 의미한다.)

$$|S_{++}|^2 = |S_{-+}|^2 = \frac{2}{(\hbar\omega)^2} |\langle \xi_n | H_{op} | \xi_m \rangle_{FCA}|^2 |M_q|^2 N_q, \quad (29)$$

$$|S_{+-}|^2 = |S_{--}|^2 = \frac{2}{(\hbar\omega)^2} |\langle \xi_n | H_{op} | \xi_m \rangle_{FCA}|^2 |M_q|^2 (N_q + 1). \quad (30)$$

식 (28)은 하나의 valley에 대한 계산값이고 Si이나 Ge 같은 실제의 multivalley 물질에서는 각 valley에서 구한 흡수계수를 모두 구해 더해야 한다.

IV. 시뮬레이션 결과 및 토론

이론적 모델링의 타당성을 검증하기 위해 실제 비교할 수 있는 실험^[19]의 조건을 가지고 시뮬레이션을 수행하였다. 두 개의 시료(A, B)를 고려하였는데 두 시료 모두 Si/Si_xGe_{1-x}

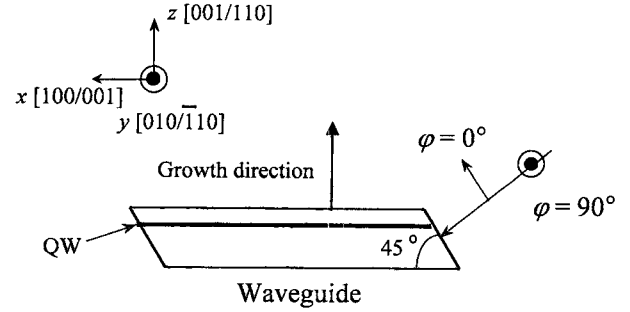


그림 2. 계산에 사용된 도파로(waveguide)의 구조와 실험 환경.

(5/30 nm) 양자우물 구조에 침투치가 1.3×10^{20} cm⁻³인 δ -도핑을 시행한 구조이다. (A: grown on Si(001), $x=0$, B: grown on Si(110), $x=0.5$). 그림 2에 실험에 사용된 도파로(waveguide)의 구조와 실험 환경을 나타내었다. 그림 2에서 $\phi=0^\circ$, 90° 인 경우가 각각 perpendicular 모드와 parallel 모드 천이에 해당한다. x, y, z 축은 Si(001)에서는 각각 [100], [010], [001] 방향을, Si(110)에서는 각각 [001], [110], [110] 방향을 나타내도록 좌표계를 설정하였다. Si(110)에서는 w_x 가 0이기 때문에 두 개의 parallel 모드 천이(x, y 방향)중 y 방향으로의 parallel 모드 천이만이 가능하다. 표 1에 시뮬레이션에 사용한 물질의 파라미터를 나타내었다. 시뮬레이션에서는 식 (7)을 수치해석적으로 self-consistent하게 풀었다. Hartree 포텐셜은 Poisson 방정식을, exchange-correlation 포텐셜은 Hedin-Lundqvist parameterization을 이용한 local density function 근사식^[20]을 이용하여 계산했다.^[4] 수치해석에 사용된 node는 adaptive하게 잡았는데, 포텐셜 혹은 도우핑의 농도가 1% 변하는 것을 그 기준으로 하였다.^[4] 도우핑은 양자우물의 중심이 1.3×10^{20} cm⁻³가 되고 도핑영역의 절반(20Å)을 표준편차로 갖는 가우스 분포로 근사된 δ -도우핑을 사용하였다.^[4]

먼저 Si(001)에서는 off-diagonal effective mass tensor element가 0이므로 선택규칙에 의해 시료 A에서는 수직입사

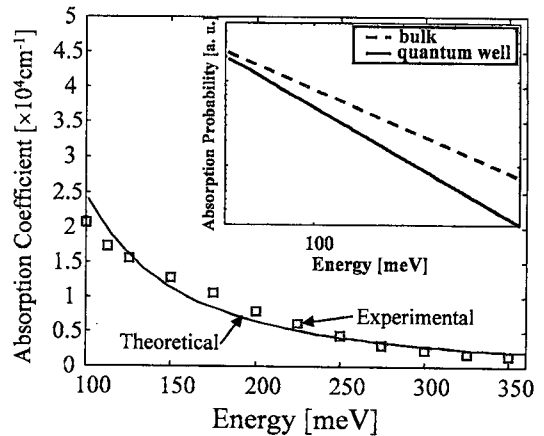


그림 3. 시료 A에 대해 실험으로 얻은 흡수 계수(□)와 이론적으로 구한 흡수 계수(실선). Inset에 자유전자 흡수 확률을 벌크 구조와 양자우물 구조에 대해 계산한 결과를 나타내었다.

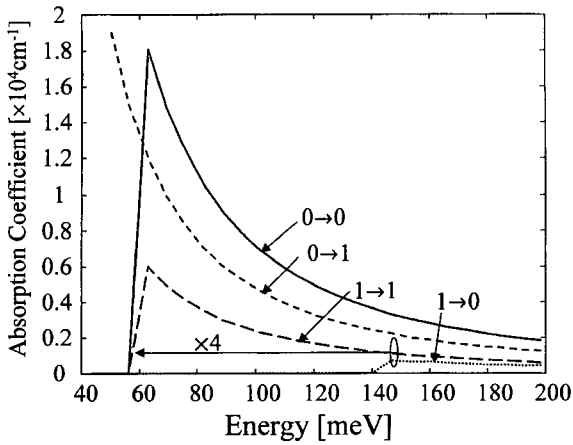


그림 4. 시료 B에 대해 f-type의 intervalley scattering에 의한 자유전자 흡수계수.

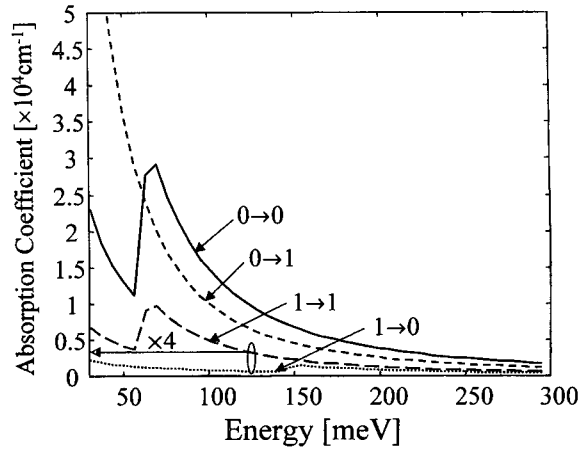


그림 6. 시료 B에 대하여 각각의 부밴드가 자유전자 흡수에 기여하는 정도를 나타내었다.

하는 광자(parallel 모드 천이)에 의한 전자의 부밴드간 천이가 불가능하다. 따라서 실험으로 얻게되는 시료 A의 흡수 스펙트럼은 자유전자에 의한 광자의 흡수 스펙트럼이라고 볼 수 있다. 이 경우의 실험으로 얻은 흡수 계수와 이론적으로 구한 흡수 계수를 그림 3에 나타내었다. 이론치와 실험치가 잘 일치함을 알 수 있으며 따라서 이 논문에서 제시하는 이론적 모델링의 적합성을 증명하고 있다. 그림 3의 inset에 식 (17)로 주어지는 자유전자 흡수 확률을 벌크 구조와 양자우물 구조에 대해 계산한 결과를 나타내었다. 벌크에서는 빛의 파장의 1.5승에 비례하는데 비해 양자우물 구조에서는 2승에 비례한다. 또한 전체적으로 벌크의 값이 큰데 이는 벌크에서는 전자가 3방향으로 모두 자유롭지만 양자우물 구조에서는 한 방향으로의 움직임이 제한되어 있기 때문이다.

이제 모델링 과정을 좀더 자세히 살펴보자. 그림 4에 시료 B에 대해 f-type의 intervalley scattering에 의한 자유전자 흡수계수의 계산 결과를 나타내었다. (n, m 은 자유전자 흡수 전후의 전자가 존재하는 부밴드를 나타낸다.) 먼저 intrasubband($m = n$) 흡수 과정에는 $f_{n,k}(1-f_{n,k+q}) < < f_{n,k}(1-f_{n, k+q})$ 이

므로 $A_{+,+,nm}, A_{+,-,nm}$ 항이 지배적이다. $A_{+,+,nm}$ 항의 경우 δ 함수의 인자의 조건에서($E_{n,k} \leq E_{n,k+q}$) $\hbar \omega < -\hbar \omega_q$ ($= -59$ meV)인 경우에 0이 된다. (즉 0이 되지 않는다.) 마찬가지로 $A_{+,-,nm}$ 항의 경우 $\hbar \omega > \hbar \omega_q$ 인 경우에 0이 된다. 따라서 $\hbar \omega < \hbar \omega_q$ ($= 59$ meV)인 광자에 대해서는 두 항이 서로 상쇄되어 전체적인 intrasubband 자유전자 흡수가 무시할 정도가 된다. Intersubband($m \neq n$) 흡수 과정에는 $A_{+,+,nm}, A_{+,-,nm}, A_{+,-,nm}, A_{-,-,nm}$ 항이 각각 $\hbar \omega > -\hbar \omega_q + E_{mn}, \hbar \omega < \hbar \omega_q + E_{mn}, \hbar \omega < \hbar \omega_q - E_{mn}, \hbar \omega > -\hbar \omega_q - E_{mn}$ 일 경우에만 0이 아니게 된다. (여기서 E_{mn} 은 $W_m - W_n$ 이다.) 따라서 $1 \rightarrow 0$ 의 경우 $f_{1k}(1-f_{0k+q}) < < f_{1k}(1-f_{0k+q})$ 이므로 $A_{+,+,10}, A_{+,-,10}$ 항이 지배적이다. 따라서 $\hbar \omega > -\hbar \omega_q + E_{01}$ (~ -140 meV)이고 $\hbar \omega < \hbar \omega_q - E_{01}$ (~ -140 meV)이면 두 항이 상쇄되어 전체적인 intersubband 자유전자 흡수가 무시할 정도가 된다. 계산 결과가 특정한 에너지 영역에서 급격한 변화를 보이는 것은 양자우물 구조의 상태밀도(density of states)가 불연속적이기 때문이다.

그림 5, 6에 시료 B에 대하여 각각의 부밴드와 scattering mechanism이 자유전자 흡수에 기여하는 정도를 분리하여 나

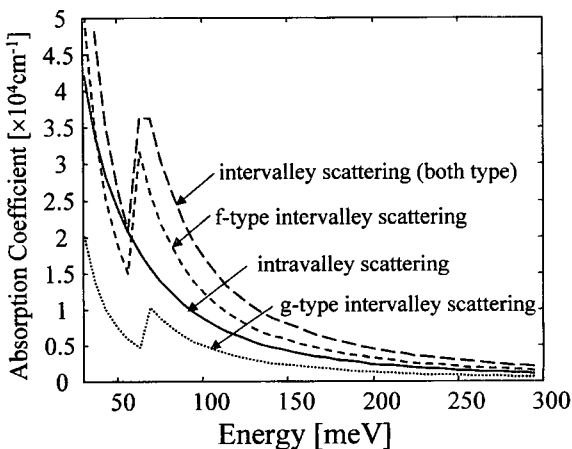


그림 5. 시료 B에 대하여 각각의 scattering mechanism이 자유전자 흡수에 기여하는 정도를 나타내었다.

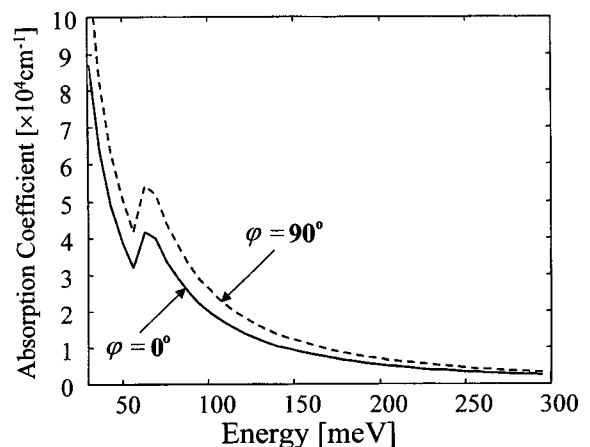


그림 7. 시료 B에 대해 parallel 모드와 perpendicular 모드의 경우에 해당하는 총 자유전자 흡수 계수를 나타내었다.

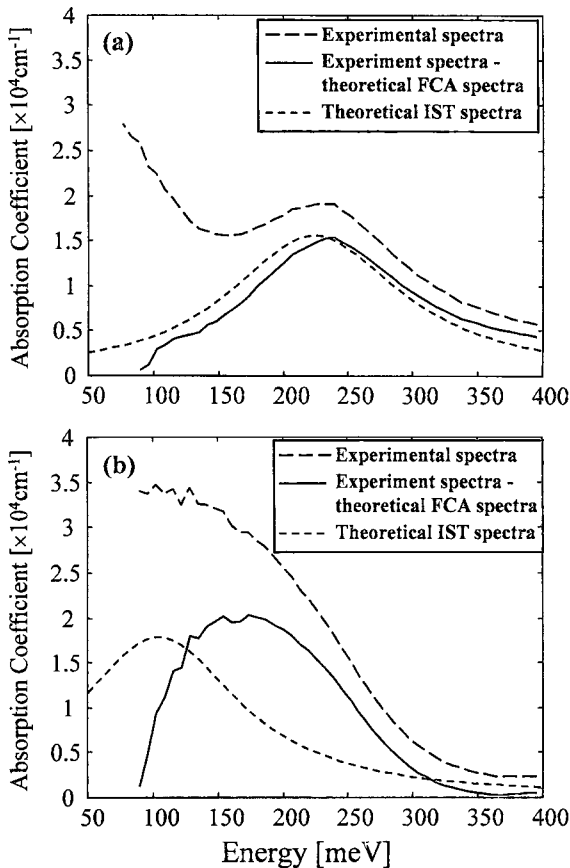


그림 8. 시료 B의 흡수 계수. 긴 점선은 실험에서 얻은 흡수계수^[19]이고 실험 곡선에서 계산한 자유전자 흡수계수를 뺀 값은 실선으로 나타내었다. 전자의 부밴드간 천이에 의한 흡수계수의 이론값^[12,13]을 점선으로 나타내었다. (a) Perpendicular 모드($\phi=0^\circ$)의 경우, (b) Parallel 모드($\phi=90^\circ$)의 경우.

타내었다. 그림 7에 시료 B에 대해 parallel 모드와 perpendicular 모드의 경우에 해당하는 총 자유전자 흡수 계수를 비교하여 나타내었다. Parallel 모드에서 흡수 계수가 더 큼을 알 수 있다.

그림 8에 긴 점선으로 시료 B에 대해 실험적으로 구한 흡수계수를 나타내었다.^[19] Si(110)에서는 유효질량 텐서의 off-diagonal 요소가 0이 아니기 때문에 빛의 수직입사가 가능하게 된다. 그림 8(a)가 perpendicular 모드($\phi=0^\circ$)의 경우이고 그림 8(b)가 parallel 모드($\phi=90^\circ$)의 경우의 흡수곡선이다. 이들 곡선에는 자유전자 흡수에 의한 성분과 부밴드간 천이에 의한 흡수 성분이 섞여 있다. 그림에서 잘 볼 수 있는 것처럼 자유전자 흡수가 특히 에너지가 낮은 장파장 영역에서 흡수 스펙트럼을 크게 변화시켜 놓음을 알 수 있다. 그 결과, 이 실험값으로는 parallel 모드와 perpendicular 모드의 천이 에너지를 알아낼 수 없다. 따라서 이들 천이 에너지 값을 알아내려면 실험 곡선에서 식 (28)에서 구한 자유전자 흡수에 의한 광자의 흡수 성분을 빼내어야 한다. 실험 곡선에서 계산한 자유전자 흡수계수를 뺀 값을 그림 8에 실선으로 나타내었다. 일반적인 전자의 부밴드간 천이에 의한 광자의 흡수계수

스펙트럼처럼 Lorentzian lineshape 함수의 모양으로 결과가 얻어짐을 알 수 있다. 그림에서 알 수 있는 것처럼 이론값인 점선^[12,13]과 비교해 보았을 때 perpendicular 모드에서는 천이 에너지도 비슷하고 실제의 흡수계수 값도 크게 차이 나지 않음을 알 수 있다. 빛의 수직 입사에 해당하는 $\phi=90^\circ$ 에서의 흡수 계수는 천이 에너지 값만 다를 뿐 흡수계수의 크기는 거의 비슷함을 알 수 있다. Parallel 모드에 해당하는 빛의 천이 에너지의 정확한 계산을 위해서는 더 많은 연구가 진행되어야 한다.

V. 결 론

비등방성 반도체 양자우물에서의 자유전자 흡수에 의한 광자의 흡수계수를 모델링 하였다. 각각의 scattering 메커니즘과 양자우물내의 각각의 부밴드가 광자의 흡수에 기여하는 정도가 분리되어 계산되었다. 이 모델의 타당성을 검증하기 위해, Si에 δ -도핑을 이용하여 형성한 양자우물에 대하여 시뮬레이션하고 실제로 문헌의 실험값에서 계산치를 제거한 결과를 이론적으로 구한 전자의 부밴드간 천이에 의한 광자의 흡수 계수와 비교하여 그 적절성을 보였다.

참고문헌

- [1] L. C. West and S. J. Eglash, Appl. Phys. Lett. **46**, 1156 (1985).
- [2] C. Lee and K. L. Wang, J. Vac. Sci. Technol. **B 10**, 992 (1992).
- [3] C. Lee and K. L. Wang, Appl. Phys. Lett. **60**, 2264 (1992).
- [4] 김경염, 이병호, 이찬호, 전자공학회 논문지 **35-D(8)**, 44 (1998).
- [5] J. Singh, Semiconductor Optoelectronics (McGraw-Hill, Inc., New York, 1995) Chap. 7.
- [6] J. S. Park, R. P. G. Karunasiri, Y. J. Mii, and K. L. Wang, Appl. Phys. Lett. **58**, 1083 (1991).
- [7] J. S. Park, R. P. G. Karunasiri, and K. L. Wang, Appl. Phys. Lett. **61**, 681 (1992).
- [8] G. L. Luo, Q. Huang, and J. M. Zhou, Thin Solid Films **312**, 265 (1998).
- [9] H. Y. Fan, W. Spitzer, and R. J. Collins, Phys. Rev. **101**, 566 (1956).
- [10] C.-Y. Tsai, C.-Y. Tasi, C.-H. Chen, T.-L. Sung, T.-Y. Wu, and F.-P. Shih, IEEE J. Quantum Electron. **QE-34**, 552 (1998).
- [11] C.-C. Wu and C.-J. Lin, Phys. Low-Dim. Struct. **1-2**, 281 (1998).
- [12] K.-Y. Kim, B. Lee, and C. Lee, 제5회 광전자공학 학술대회 논문집, 283 (1998년 5월).
- [13] K.-Y. Kim, B. Lee, and C. Lee, Technical Digest on 1998 European Quantum Electronics Conference (EQEC), 143 (Scotland, UK, Sep. 1998).
- [14] K.-Y. Kim, B. Lee, and C. Lee, Proceedings of The 9th Seoul International Symposium on the Physics of Semiconductors and Applications (ISPSA-98), 78 (Seoul, Korea, Nov. 1998).

- [15] K. S. Yi and J. J. Quinn, Phys. Rev. **B 27**, 1184 (1983).
[16] K.-Y. Kim and B. Lee, Phys. Rev. **B 58**, 6728 (1998).
[17] K.-Y. Kim and B. Lee, Superlattices Microstruct. **24**, 389 (1998).
[18] S.-I. Takagi, J. L. Hoyt, J. J. Welser, and J. F. Gibbons, J. Appl. Phys. **80**, 1567 (1996).
[19] C. Lee, Intersubband Absorption in Conduction Bands of Silicon and Germanium Quantum Wells (Ph. D. Dissertation, UCLA, 1994).
[20] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, Solid State Physics (Holt, Rinehart and Winston, New York, 1976) Chap. 17.

Modeling of free carrier absorption coefficients in anisotropic semiconductor quantum well structures

Kyoung-Youm Kim and Byoungho Lee

School of Electrical Engineering, Seoul National University, Seoul 151-742, Korea

Chan-Ho Lee

School of Electronic Engineering, Soongsil University, Seoul 156-743, Korea

(Received November 11, 1998, Revised manuscript received December 29, 1998)

The theoretical modeling of free carrier absorption in quantum wells grown on anisotropic materials is presented for the first time. The intersubband and intrasubband free carrier absorption are distinguished and the contribution of each subband to them is calculated separately. The calculated results are compared with the experimental values of δ -doped Si quantum wells in literature.