

양자우물에서의 전자의 에너지 부준위간 천이에 의한 광자의 흡수계수와 천이 에너지의 모델링

(Modeling of Absorption Coefficient and Transition Energy for Intersubband Transitions in Quantum Wells)

金京濂 * , 李竝浩 * , 李燦豪 **

(Kyoung-Youm Kim, Byoung-ho Lee, and Chanhoo Lee)

요 약

전도대의 양자우물에서의 부준위간 천이에 의한 광자의 흡수계수와 천이 에너지를, 전도대의 valley 구조와 유효질량 텐서의 valley 의존성이 갖는 영향을 포함하여 모델링하였다. 특히 실질적인 감지기로 사용 가능한 흡수계수를 얻기 위해 사용하는 높은 도핑이 가져오는 여러 many-body 효과를 포함시켰다. 또한 이 모델의 타당성을 검증하기 위해, Si에 δ -도핑을 이용하여 형성한 양자우물에 대하여 광자의 흡수계수와 천이 에너지, 광자의 편광 방향이 흡수 스펙트럼에 미치는 영향 등을 시뮬레이션하고 문헌의 실험결과와 비교하여 그 적절성을 보였다.

Abstract

The theoretical modeling of transition energy and absorption coefficient for intersubband transitions in quantum wells is presented. We include, as well as Hartree and exchange-correlation potentials, both depolarization effect and exciton-like effect which play great roles in heavily doped cases where practically reasonable absorption coefficients are available. Also, the calculated results are compared with the existing experimental values for δ -doped Si quantum wells to check the validity of our theoretical calculation.

I. 서 론

양자 우물에서 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 연구

되고 있다^[1-3]. 기존의 반도체 적외선 감지기의 경우 HgCdTe 등의 물질을 이용한 밴드간 천이를 이용하였다. 하지만 밴드간 천이를 이용할 경우 가장 널리 쓰이는 HgCdTe같은 물질은 제조 공정(process)이 매우 어렵고 소자의 수율(yield)도 아주 나쁘다^[4]. 또한 Si같이 on-chip 신호 처리를 위한 monolithic integration을 쉽게 할 수 있는 물질은 간접(indirect) 밴드구조 때문에 효율성이 낮아서 사용할 수 없었다.

양자 우물에서 형성되는 에너지 부준위간 천이를 이용할 경우, 형성된 에너지 준위의 간격이 보통의 밴드간 에너지에 비해 상당히 작기 때문에 원적외선 흡수에 쉽게 응용이 가능하고, 그 에너지 준위의 간격도 설계 파라미터(예를 들면, 도핑의 농도나 양자우물의

* 正會員, 서울大學校 電氣工學部
(Seoul National University, School of Electrical Engineering)

** 正會員, 崇實大學校 情報通信電子工學部
(Soongsil University, School of Electronic Engineering)

接受日字:1997年9月6日, 수정완료일:1998年7月24日

크기, 장벽에 사용된 물질의 종류 등)에 의해 조절할 수 있다는 장점이 있다. 또한 Si같이 간접밴드구조를 갖는 물질도 직접(direct) 천이가 가능하기 때문에 광 소자로 사용할 수 있어서 집적화가 용이하다는 장점도 아울러 지니고 있다. 양자우물을 이용한 광감지기는 GaAs/AlGaAs의 이중접합을 이용한 구조에서 먼저 구현되었으나 Si과의 monolithic integration이 되지 않고 도핑의 한계로 인해 전자 농도가 낮아 충분한 흡수계수를 얻지 못하였다^[1]. 따라서 Si에서 양자우물을 이용한 광감지기 구조에 관한 많은 연구가 진행되어 Si 또는 SiGe/Si 구조에서 에너지 부준위간 천이가 구현되었다^[2,3,5,6].

실제로 사용 가능한 흡수계수를 얻으려면 (~10⁴cm⁻¹) 양자 우물에 높은(heavy) 도핑을 해 주어야 하는데(~10¹³cm⁻² 또는 ~10¹⁹cm⁻³) 이 경우 흡수되는 광자의 에너지는 단순히 양자 우물에서 형성된 천이 에너지로 결정되는 것이 아니라 광자와 전자의 상호작용 때문에 발생하는 부가적인 물리적 현상(depolarization 효과, exciton-like 효과) 때문에 크게 달라지게 된다. 최대 도핑 농도가 ~10¹⁸cm⁻³인 GaAs에 비해 ~10²⁰cm⁻³까지 도핑 가능한 Si, SiGe에서는 충분한 흡수계수를 얻을 수 있었다.

한편 GaAs/AlGaAs 구조에서는 분리층(spacer)에 도핑을 하여 전자가 양자우물에 모이는 구조를 갖고 있으나 Si의 경우 δ-도핑기법을 이용하여 양자 우물층에 직접 도핑을 하여 도핑 자체가 양자우물을 형성시킨다. 따라서 GaAs 시스템에 비해 그 모델링이 훨씬 복잡하여 좋은 결과를 얻기가 어려웠다. 이 논문에서는 앞에서 언급한 것처럼 기존의 밴드간 천이를 이용한 광감지기에서는 사용할 수 없었으나 부준위간 천이를 이용하면서 다시 관심을 갖게된 Si, Ge 같은 물질을 이용한 양자 우물에서의 부밴드간 천이에 의한 광자의 흡수계수와 천이 에너지를 모델링하였다^[7]. 전도대(conduction band)의 valley 구조의 이방성과 유효질량 텐서가 좀 더 일반적인 경우에도 적용 가능한 형태로 포함되었으며, 실질적인 감지기로 사용 가능한 흡수계수를 얻기 위해 사용하는 높은 도핑이 가져오는 many-body 효과를 포함시켜 모델링하였다. 또한 이 모델링의 타당성을 검증하기 위해 실제 실험^[2]과 비교 가능한 조건에서의 광자의 천이 에너지와 흡수계수, 광자의 편광 방향이 흡수 스펙트럼에 미치는 영향 등을 시뮬레이션하고 실험치와의 비교를 통해

그 적절성을 보였다. 흡수되는 광자의 에너지는 앞에서 언급한 높은 도핑 때문에 나타나는 여러 가지 many-body 효과에 의해 크게 달라지고, 실험치와의 비교를 통해 이런 복잡한 모델링만이 실험치를 잘 설명함을 보일 것이다.

II. 흡수계수의 모델링

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

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

이다^[8]. 여기서 P 는 운동량벡터, W 는 역유효질량 텐서(inverse effective mass tensor)이다. W 는 주어진 양자우물의 성장 방향(여기서는 z -방향)에서 각각의 conduction valley마다 주어지며(valley에 따라 각 요소 값이 달라질 수도 있다.) 성장 방향과 전도대 valley의 방향 사이의 관계를 나타내는 Euler의 각을 이용한 좌표변환을 통해서 얻을 수 있다^[9]. H_0 의 고유상태(eigenstate)는 다음과 같이 표시될 수 있는데,

$$H_0|\nu\rangle = E_\nu|\nu\rangle, \quad (2)$$

여기서

$$|\nu\rangle \equiv \xi_{n,k}(\vec{r}, z) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \phi_n(z) = e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \gamma z)} \zeta_n(z), \quad (3)$$

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

이고

$$\gamma_k = \frac{k_x w_{zx} + k_y w_{yz}}{w_{zz}},$$

$$\beta_{ij} = w_{ij} - \frac{w_{iz} w_{zj}}{w_{zz}}, \quad (5)$$

이다^[8]. (W 텐서의 (i,j) 원소를 w_{ij}/m_0 , x - y 평면 위에 존재하는 transverse 방향의 벡터를 \vec{r} 로 나타내었다.) 식 (3)과 (4)에서 $\zeta_n(z)$ 과 W_n 은 다음과 같은 일차원 슈뢰딩거 방정식을 만족시킨다^[8]

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} w_{zz} \frac{d^2}{dz^2} + V_{eff}(z) - W_n \right] \zeta_n(z) = 0. \quad (6)$$

따라서 식 (6)을 풀어 $\zeta_n(z)$ 과 W_n 를 구하면 원하는 고유에너지(eigenstate) E_n 를 얻을 수 있다.

이제 식 (1)로 주어지는 해밀토니안과 식 (3)으로 주어지는 전자의 상태를 지니고 있는 시스템에 광자가 입사한다고 하자. 광자가 미치는 영향은 섭동(perturbation) 이론으로 다룰 수 있으므로^[4] 다음과 같은 섭동 해밀토니안을 도입한다^[8].

$$H_1 = -\frac{e}{2} (P^T W A + A^T W P). \quad (7)$$

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

$$\begin{aligned} A &= \frac{A_0}{2} \{ e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} + \vec{z})} e^{-i\omega t} + e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{r} + \vec{z})} e^{i\omega t} \} \hat{\epsilon} \\ &= \frac{1}{2} (A_x \hat{x} + A_y \hat{y} + A_z \hat{z}) e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} + \vec{z})} e^{-i\omega t} \\ &\quad + \frac{1}{2} (A_x^* \hat{x} + A_y^* \hat{y} + A_z^* \hat{z}) e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{r} + \vec{z})} e^{i\omega t}, \end{aligned} \quad (8)$$

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

$$\hat{\epsilon} = \epsilon_x \hat{x} + \epsilon_y \hat{y} + \epsilon_z \hat{z}. \quad (9)$$

위의 식들과 페르미의 황금률(Fermi's golden rule), dipole 근사를 사용하여 우리는 다음과 같은 흡수계수를 구하였다.(유도과정은 부록 1 참고)

$$\begin{aligned} \alpha &= \sum_{i,j} \frac{\tilde{m}_{dos}^* k_B T e^2}{c \epsilon_0 \pi \hbar^2 m_0^2 L n, \omega} \left| \frac{m_0 (W_i - W_j)}{\hbar} \int dz \phi_{i,v}^*(z) z \phi_{j,v}(z) \right|^2 \\ &\cdot \ln \left[\frac{1 + \exp\{(E_F - W_i)/k_B T\}}{1 + \exp\{(E_F - W_j)/k_B T\}} \right] \\ &\times \frac{\Gamma/2}{(\hbar \omega - \tilde{E}_{F,v})^2 + (\Gamma/2)^2} |S(\epsilon_x, \epsilon_y, \epsilon_z)|^2 \end{aligned} \quad (10)$$

여기서 입사하는 광자가 만드는 전기장의 편광 방향과 양자우물이 이루는 각이 기여하는 성분 $S(\epsilon_x, \epsilon_y, \epsilon_z)$ 는 다음과 같이 주어진다.

$$S(\epsilon_x, \epsilon_y, \epsilon_z) = \frac{1}{D} \cdot (w_{xx} w_{yy} - w_{xy}^2) \cdot (\epsilon_x w_{xz} + \epsilon_y w_{yz} + \epsilon_z w_{zz}). \quad (11)$$

여기서 ϵ_0 는 진공에서의 유전율(permittivity), c 는 진공에서의 빛의 속도, m_{dos}^* 는 density of states 유효질량, k_B 는 Boltzmann 상수, T 는 절대온도, n ,은

반도체 내에서의 굴절률, L 은 효과적인(effective) 양자우물의 폭, $\tilde{E}_{F,v}$ 는 3절에서 논의될 천이 에너지, D 는 역유효질량 텐서 행렬의 행렬식을 나타낸다. 위의 식 (10)에서 페르미의 황금률의 δ 함수(부록 1의 식 (A1) 참조)는 선폭(linewidth) Γ 를 가지는 Lorentzian 함수로 대체되었다.

그런데, Si 같은 경우 동일한(equivalent) X-valley가 6개 있는데(이는 다시 성장 방향으로의 질량에 따라 X4-valley와 X2-valley로 나뉜다. 보통의 경우 X4-valley의 기저상태(ground state)가 더 낮아서 대부분의 전자는 X4-valley에 존재하게 되고 따라서 좀 더 엄밀한 의미의 동일한 valley는 4개가 된다.) 이런 각각의 동일한 valley에 대해 각각 valley의 흡수계수를 구해서 모두 더해야 한다. 각각의 valley는 유효 질량이 다르므로(보통 비대각선 요소의 부호가 다르다.) 최종적인 흡수계수는 다음과 같다.(여기서 v 는 각각의 valley를 의미하는 첨자이다.)

$$\begin{aligned} \alpha &= \sum_v g_v \sum_{i,j} \frac{m_{dos}^* k_B T e^2}{c \epsilon_0 \pi \hbar^2 m_0^2 L n, \omega} \left| \frac{m_0 (W_{i,v} - W_{j,v})}{\hbar} \int dz \phi_{i,v}^*(z) z \phi_{j,v}(z) \right|^2 \\ &\cdot \ln \left[\frac{1 + \exp\{(E_F - W_{i,v})/k_B T\}}{1 + \exp\{(E_F - W_{j,v})/k_B T\}} \right] \\ &\times \frac{\Gamma_v/2}{(\hbar \omega - \tilde{E}_{F,v})^2 + (\Gamma_v/2)^2} |S_v(\epsilon_x, \epsilon_y, \epsilon_z)|^2, \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} S_v(\epsilon_x, \epsilon_y, \epsilon_z) &= \frac{1}{D_v} \cdot (w_{xx,v} w_{yy,v} - w_{xy,v}^2) \\ &\cdot (\epsilon_x w_{xz,v} + \epsilon_y w_{yz,v} + \epsilon_z w_{zz,v}). \end{aligned} \quad (13)$$

여기서 g_v 는 v -valley의 fractional occupancy(전체 전자 수에 대한 v -valley에 있는 전자의 수의 비율)이다. 하지만 대부분의 경우(strain이 없는 경우) 전도대의 valley는 에너지적으로 등가이므로 위의 식 (12), (13)에서 $W_{n,v}$, $\xi_{n,v}$, Γ_v , $E_{F,v}$ 등의 하첨자 v 는 의미가 없고 오직 유효질량에 관련된 항에 들어가는 하첨자 v 만 의미를 갖게 된다.

III. 천이 에너지의 계산

위의 식 (12)에서 알 수 있는 것처럼 흡수계수는 전자의 농도에 따라 증가한다. 따라서 충분히 큰 흡수계수를 얻으려면($\sim 10^4 \text{cm}^{-1}$) 양자 우물에 높은 도핑을 해 주어야 하는데($\sim 10^{13} \text{cm}^{-2}$, $\sim 10^{19} \text{cm}^{-3}$) 이 경우 흡수되는 광자의 에너지는 Hartree 포텐셜과 exchange-

correlation 포텐셜을 포함해서 self-consistent하게 해를 구한 슈뢰딩거 방정식의 고유에너지(eigenenergy)만으로 결정되는 것이 아니라 depolarization 효과와 exciton-like 효과를 고려하여야 한다^[9,10]. 이는 광자에 의해서 여기(excite)된 전자 때문에 공간적인 전하의 분포가 달라지게 되고($\Delta n(z)$) 이 때문에 Hartree 포텐셜과 exchange-correlation 포텐셜이 변하게 되기 때문이다. Ando^[10]는 등방성 물질과, 초기에 모든 전자가 기저 상태에 있다는 것을 가정하고 두 개의 준위(level)만을 고려할 경우에 대해 위의 두 효과를 계산했다. 그의 계산에 따르면 흡수되는 광자의 에너지는

$$\widetilde{E}_{01} = E_{01}\sqrt{1 + \alpha_{11} - \beta_{11}}, \quad (14)$$

로 주어지며, 여기서 E_{01} 은 양자우물에서 형성된 천이 에너지를 뜻하며, 나머지 문자는 다음에 정의되어 있다. (N_s 는 단위 면적당 전자의 농도, N 은 전자의 농도, n, m 은 기저상태를 0으로 두었을 때의 state quantum number, $\hbar \omega_n$ 은 $E_n - E_0$ 를, v_{xc} 는 density-functional 근사에 의한 exchange-correlation 포텐셜^[11]을 의미한다.)

$$\alpha_{nm} = 2N_s \frac{e^2}{\epsilon} S_{nm} \frac{1}{\{(\hbar \omega_n)(\hbar \omega_m)\}^{1/2}}, \quad (15.0)$$

$$\beta_{nm} = -2N_s \frac{1}{\{(\hbar \omega_n)(\hbar \omega_m)\}^{1/2}} \int dz \phi_n \phi_m \phi_0^2 \frac{\partial v_{xc}}{\partial N}, \quad (15.1)$$

$$S_{nm} = -\int_0^\infty dz \phi_n(z) \phi_0(z) \int_0^z dz' \int_0^z dz'' \phi_m(z'') \phi_0(z'). \quad (15.2)$$

하지만 도핑 농도가 커지면 둘째 여기 상태(second-excited state)를 고려할 필요가 생기며 이 경우 식(14)를 사용할 수 없고 좀 더 복잡한 계산을 해야 한다. Ando의 계산과정에서 세 개의 준위(level)를 가정해서 우리는 다음과 같은 식을 얻었다.(부록 2 참조) 흡수되는 광자의 에너지는

$$\widetilde{E}_{01} = \frac{1}{2} \{A_{11} + A_{22} - \sqrt{(A_{11} - A_{22})^2 + 4A_{12}^2}\}, \quad (16)$$

이며, 여기서

$$A_{nm} = (\hbar \omega_n)^2 \delta_{nm} + \hbar \omega_n (\alpha_{nm} - \beta_{nm}) \hbar \omega_m, \quad (17)$$

이다.

Ando에 의해 계산된 식 (15.0), (15.1)은 등방성인 물질에 대해 계산된 것인데 우리는 좀 더 일반적인 이방

성(anisotropic)인 물질을 고려하였다. 이 경우 앞에서 언급했듯이 Si같은 물질의 경우 동일한(equivalent) X-valley가 4개(X4) 있으므로 이런 각각의 동일한 valley가 기여하는 성분을 각각 계산하여 모두 더해야 한다. 각각의 valley는 유효 질량이 다르므로(보통 비대각선 요소의 부호가 다르다.) 최종적인 파라미터 α_{nm} , β_{nm} 은 다음과 같다.

$$\alpha_{nm} = \sum_v g_v \alpha_{nm,v}, \quad \beta_{nm} = \sum_v g_v \beta_{nm,v}. \quad (18)$$

여기서 g_v 는 앞절에서 정의된 valley-occupancy이다. 여기서 하첨자 v 는 valley를 나타내는 첨자이다. 위의 식에서도 일반적으로는 $N_s, \hbar \omega_n, \zeta_n$ 등에 valley 의존성이 포함되어야 하지만 실제의 밴드구조에서 각 valley는 에너지상으로 등가이므로 의미가 없게 되고 오직 유효질량에 관련된 항에 들어가는 하첨자 v 만의 미를 갖게 된다.

IV. 시뮬레이션 결과 및 토의

위의 이론적 계산 결과의 타당성을 보이기 위해 참고문헌^[2]에 있는 실험을 모델로 삼아 시뮬레이션을 수행하였다. 위의 실험에서는 이종구조(heterostructure)에 의한 양자우물 대신 Si(001)에 δ -도핑을 이용하여 형성된 양자우물을 생각하였는데, 전체의 구조는 3000 Å의 도핑이 되지 않은 Si buffer layer에 50 Å(=L)의 n^+ Sb-도핑 Si 양자우물 층과 300 Å의 도핑되지 않은 Si이 교대로 올려지고(5 주기) 그 위에 마지막으로 3000 Å의 도핑이 되지 않은 Si cap layer가 올려진 형태이다. 시뮬레이션에서는 양자우물의 중심에서 첨두치(peak)가 되고 양쪽 장벽까지의 거리를 표준편차로 갖는 가우스 분포로 근사된 δ -도핑을 사용하였다. 도핑 농도는 실험에 있는 두 값을 사용했는데 시료 A는 도핑 농도가 $2.0 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$ 이고, 시료 B는 $6.5 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$ 이다. 계산에 이용된 상수들은 $n_r = 3.42$, $m_{\text{dos}}^* = 2.269 m_0$ ^[4] 이고 linewidth, $\Gamma = 105 \text{meV}$ 는 측정 결과에서^[2] 추출하였다.

그림 1에는 시료 A와 B의 X2 valley와 X4 valley 각각에 대해 self-consistent하게 계산한 포텐셜 에너지의 분포를 나타내었다. 수치해석에 사용된 node는 adaptive하게 잡았는데, 포텐셜 혹은 도핑의 농도가 1% 변하는 것을 그 기준으로 하였다. Si(001)의 경우

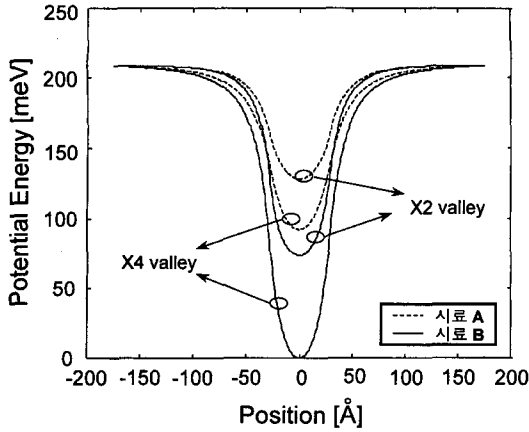


그림 1. Self-consistent하게 계산된 포텐셜 에너지 분포. 점선은 시료 A, 실선은 시료 B의 포텐셜 에너지를 나타낸다.
 Fig. 1. Self-consistently calculated potential energy profile for both sample A(dashed line) and sample B(solid line).

[001] 방향의 유효질량이 종방향(longitudinal) 유효 질량($m_l=0.98m_0$)인 valley(X2 valley)와 횡방향(transverse) 유효질량($m_t=0.19m_0$)인 valley(X4 valley)가 존재한다. Hartree 포텐셜과 exchange correlation 포텐셜을 고려하지 않을 경우 X4 valley의 질량이 작기 때문에 기저 상태의 에너지 준위는 X2 valley의 기저 에너지 준위보다 높게 된다. 하지만 도핑이 상당히 커서 위의 many-body 효과에 의한 band bending 효과가 중요해지는 경우에는 그렇지 않다. X4 valley의 양자 우물에서 형성되는 에너지 간격이 크기 때문에 (무한대 포텐셜 장벽을 가정할 때, 에너지 간격은 질량에 반비례한다.) 기저 상태에 존재하는 전자의 상대적 비율이 X2 valley의 경우에 비해 훨씬 클 것이고 따라서 거의 대부분의 전자가 양자 우물의 중심에 국한(localize)된다. 그 결과로 양자 우물의 중심부분의 포텐셜이 Hartree 포텐셜과 exchange-correlation 포텐셜 등에 의해 낮아지게 되어 양자 우물의 포텐셜 장벽을 더욱 깊게 하는 효과를 가져와 기저 상태의 에너지 준위가 X2 valley의 경우에 비해 훨씬 낮게 될 수 있다.(X2 valley의 경우 기저 상태와 첫 번째 여기된 상태의 에너지 차이가 그리 크지 않아 상당히 많은 수의 전자가 여기된 상태에 있게 되고 이는 상대적으로 전자가 양자 우물의 전체에 퍼지는 효과를 가져오기 때문에 포텐셜이 낮아지는 효과는 X4 valley에 비해 작게 된다.) 이 논문에서 사용한

도핑값의 경우가 이 경우에 해당한다. 따라서 이온화된 전자의 대부분은 X4 valley에 있게 된다.

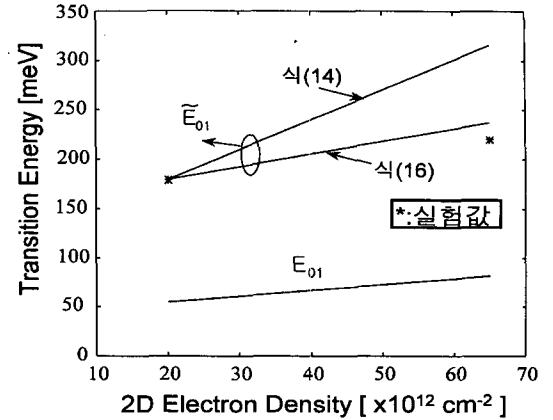


그림 2. 시료 A와 B의 각각에 대해 계산된 이론적 천이 에너지와 실험으로 측정된 천이 에너지. E_{01} 는 depolarization 효과와 exciton-like 효과를 고려하지 않은 경우이고, \tilde{E}_{01} 는 이를 모두 포함한 경우의 계산 결과를 나타낸다.
 Fig. 2. Measured and calculated transition energies of sample A and B. E_{01} is calculated ignoring the depolarization effect and exciton-like effect, and \tilde{E}_{01} denotes the calculated results including above two effects.

그림 2에는 시료 A와 B의 각각의 경우에 대해 이 논문에서 계산된 천이 에너지와 실험으로 측정된 천이 에너지를 같이 나타내었다. 시료 B의 경우, 즉 도핑이 커져서 두 번째 여기 상태가 존재할 경우 식 (14)로 주어지는 계산값은, 그림 2에서 알 수 있겠지만, 실험값에 비추어 보았을 때, 실제 천이 에너지와 큰 차이를 보인다. 반면 식 (16)이 주는 계산값은 실험값에 잘 맞음을 알 수 있다. 따라서 도핑이 커질수록 천이 에너지는 식 (14)처럼 간단히 구할 수 있는 것이 아니라 식 (16)을 이용해야 함을 알 수 있다. 시료 A, B 모두에서 식 (16)을 이용하여 계산된 이론값은 실험값을 비교적 잘 설명하고 있음을 알 수 있다. 따라서 흡수되는 광자의 에너지는 앞에서 언급한 높은 도핑 때문에 나타나는 여러 가지 many-body 효과와 부준위간의 여러 상호작용에 의해 크게 달라지고, 실험치와의 비교를 통해 이런 복잡한 모델링만이 실험치를 잘 설명함을 알 수 있다.

표 1. Many-body 효과가 천이 에너지에 미치는 영향. 실험값은 모든 many-body 효과를 포함했을 때만 정확히 계산됨을 알 수 있다.

Table 1. The many-body effects on the transition energy. The exact transition energy can be calculated when many-body effects are fully considered.

	시료 A			시료 B		
	E_0 [meV]	E_1 [meV]	E_{01} [meV]	E_0 [meV]	E_1 [meV]	E_{01} [meV]
① Hartree-포텐셜	137.3	188.2	50.9	93.7	169.0	75.3
② ①+Exchange-correlation 포텐셜	121.9	176.3	54.4	41.1	122.8	81.7
③ ②+Depolarization 효과	121.9	176.3	184.3	41.1	122.8	244.9
④ ③+Exciton-like 효과	121.9	176.3	180.0	41.1	122.8	237.8

표 1에는 시료 A와 B의 각각의 경우에 대해 many-body 효과가 천이 에너지에 미치는 영향을 나타내었다. 여기서 시료 B의 X4 valley 포텐셜의 가장 낮은 부분을 영점 기준으로 잡았다. 표에서 알 수 있듯이, exchange-correlation 포텐셜은 양자우물에서 형성되는 에너지 준위에 전체적으로 시료 A에서는 10-15 meV 정도, 시료 B에서는 45-50 meV 정도의 변화를 가져오지만 모든 에너지 준위를 비슷한 정도로 낮추기 때문에 천이 에너지에는 별 차이를 주지 못한다. 그러나 depolarization 효과는 양자우물에 형성된 천이 에너지를 약 3-4배정도 크게 한다. 하지만 depolarization 효과만으로 계산된 천이 에너지는 실험값보다 다소 큰 데, 이는 exciton-like 효과를 고려했을 때 비로소 실험값과 비슷해짐을 알 수 있다. 즉 정확한 천이 에너지를 모델링하려면 이런 복잡한 many-body 효과를 모두 고려해야 함을 알 수 있다.

그림 3에는 참고문헌 [2] 에서 실험한 waveguide 구조를 나타내었다. 그림 3의 setup에서 광자의 편광을 나타내는 $\hat{\epsilon}$ 는 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\begin{aligned} \hat{\epsilon} &= \epsilon_x \hat{x} + \epsilon_y \hat{y} + \epsilon_z \hat{z} \\ &= \cos 45^\circ \cos \eta \hat{x} + \sin \eta \hat{y} + \sin 45^\circ \cos \eta \hat{z}. \end{aligned} \quad (20)$$

그림 4는 시료 B에서 여러 편광 방향에 대해 계산한 흡수계수와 실험값을 나타낸 것이다. Si(001)의 경우 비대각선 유효질량 값이 0이므로 $S(\epsilon_x, \epsilon_y, \epsilon_z)$ 는

$\cos \theta$ (θ 는 $\hat{\epsilon}$ 와 양자우물의 성장 방향이 이루는 각, $\cos \theta = \sin 45^\circ \cos \eta$)가 되고 그림 4에서 알 수 있듯이

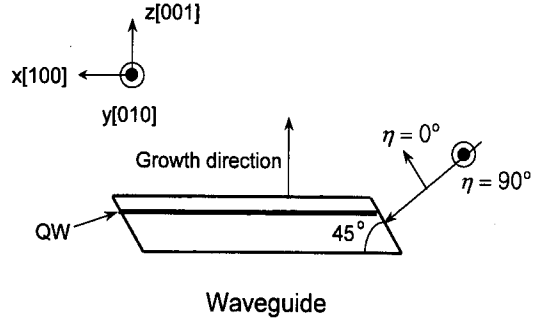


그림 3. 참고문헌 [2] 에서 실험에 사용한 waveguide의 구조. 시뮬레이션은 실험 결과와 비교해 보기 위해 이 구조를 가정하고 이루어졌다.

Fig. 3. Waveguide structure used in Ref. 2. Simulations are done assuming this configuration.

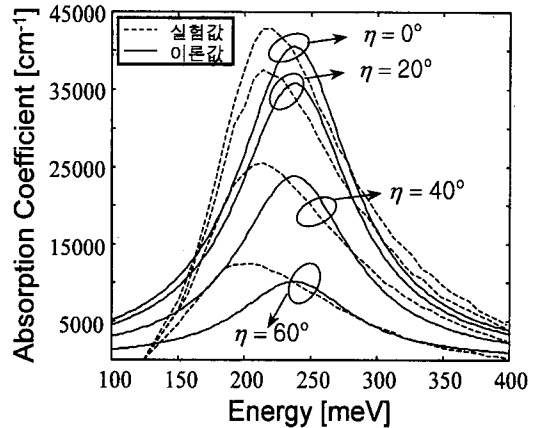


그림 4. 시료 B에서 여러 편광 방향에 대해 계산된 흡수계수(실선)와 실험적으로 얻은 흡수계수(점선)

Fig. 4. Calculated(solid lines) and measured(dashed lines) absorption coefficients of model B for various polarization angles.

흡수계수의 첨두치 값은 $\cos^2 \theta$ ($\sim \cos^2 \eta$)를 따라가고 있음을 보여 준다. 실험값과 이론값에 다소 오차가 있는데, 이는 참고문헌 [2] 에서 실험에 사용한 sample의 도핑 프로파일과 실제값과의 차이, 그리고 자유전 자흡수에 의한 영향 등과, 본질적으로 이 논문에서 취한 방법이 섭동이론이라는 것을 고려하면 작은 값이라고 생각된다. 그리고 에너지가 낮은 영역에서 스펙트

럼의 곡선 모양이 실험값과 큰 차이를 보이는데 이것은 실험값의 스펙트럼을 구하는 과정에서 자유전자 흡수에 의한 영향을 제거해야하기 때문이다. 즉 에너지가 작은 경우 그 영향을 정확히 제거하기 어려워 오차가 커지기 때문에 나타나는 현상이다.

V. 결론

양자 우물에서 형성되는 전자의 에너지 부준위간 천이에 의한 광자의 흡수를 이용한 적외선(특히 원적외선) 감지기는 Si같이 간접밴드구조를 갖는 물질도 직접 천이가 가능하기 때문에 사용할 수 있다. 이 경우 밴드의 valley 구조와 유효질량 텐서가 소자의 해석에 포함되어야 한다. 이 논문에서는 이 두 물리적 현상을 모두 포함해서, 일반적인 비등방성 물질로 기본 양자우물의 부밴드간 천이에 의한 광자의 흡수계수와 천이 에너지를 모델링하였다. 특히 실질적인 감지기로 사용 가능한 흡수계수를 얻기 위해 사용하는 높은 도핑이 미치는 현상을 살펴보았다. 높은 도핑의 경우 흡수되는 광자의 에너지는 양자 우물에서 형성된 천이 에너지만으로 결정되는 것이 아니라 광자와 전자의 상호작용 때문에 발생하는 다른 물리적 현상(depolarization 효과, exciton-like 효과) 때문에 크게 달라지게 됨을 보였다. 또한 이 모델링의 타당성을 검증하기 위해 실제로 Si에 δ -도핑을 이용하여 형성된 양자 우물에서 광자의 흡수계수와 천이 에너지, 광자의 편광 방향이 흡수 스펙트럼에 미치는 영향 등을 시뮬레이션하고 실험과 비교하여 그 적절성을 보였다.

부록 1

여기서는 식 (10), (11)을 유도한다. 먼저 조화 섭동(harmonic perturbation) 포텐셜에 의해 i -상태에서 f -상태로 광자를 흡수하여 천이할 확률은 다음과 같은 페르미의 황금률로 주어진다^[4].

$$W_{fi}^{abs} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_f | H'_{op}^{abs} | \psi_i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar \omega). \quad (A1)$$

여기서 H'_{op}^{abs} 는 식 (8)의 첫째항만을 식 (7)에 넣고 얻은 식에서 시간에 의존하는(time-dependent) 항을 빼고 얻은 식으로 다음과 같다.

$$\begin{aligned} H'_{op}^{abs} &= -\frac{e}{2m_0} \sum_{j,k \in (x,y,z)} A_j e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} + \vec{z})} w_{jk} p_k \\ &= -\frac{eA_0}{2m_0} \sum_{j,k \in (x,y,z)} \epsilon_j e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} + \vec{z})} w_{jk} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial k} \right). \end{aligned} \quad (A2)$$

여기서 우리는 Coulomb gauge($\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$)를 사용하였다. 전자의 완전한 상태(ψ)는 식 (3)에 Bloch 함수를 곱한 것이 되는데, 따라서 위의 식 (A1)의 천이 행렬 요소 $\langle \psi_f | H'_{op}^{abs} | \psi_i \rangle$ 는 다음과 같이 쓸 수 있다^[12].

$$\begin{aligned} \langle \psi_f | H'_{op}^{abs} | \psi_i \rangle &= \langle u_\nu | H'_{op}^{abs} | u_\nu \xi_i \rangle \\ &\approx \langle u_\nu | H'_{op}^{abs} | u_\nu \rangle \langle \xi_f | \xi_i \rangle + \langle \xi_f | H'_{op}^{abs} | \xi_i \rangle \langle u_\nu | u_\nu \rangle. \end{aligned} \quad (A3)$$

여기서 u_ν 는 ν -band Bloch 함수를 나타낸다. 밴드간 천이일 경우 Bloch 함수의 직교성 때문에 두 번째 항이 0이 되고, 같은 밴드내의 부밴드간 천이일 경우 포락선(envelope) 함수의 직교성 때문에 첫 번째 항이 0이 된다.(포락선 함수는 같은 밴드에 속하는 것끼리만 직교한 관계에 있고, 서로 다른 밴드에 속하는 포락선 함수끼리는 반드시 직교 관계에 있지는 않다.) 따라서, 같은 밴드내의 부밴드간 천이에 대해

$$\begin{aligned} \langle \psi_f | H'_{op}^{abs} | \psi_i \rangle &= \langle \xi_f | H'_{op}^{abs} | \xi_i \rangle \\ &= C_1 \times \langle \xi_f | e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} + \vec{z})} p_x | \xi_i \rangle + C_2 \times \langle \xi_f | e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} + \vec{z})} p_y | \xi_i \rangle \\ &\quad + C_3 \times \langle \xi_f | e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} + \vec{z})} p_z | \xi_i \rangle, \end{aligned} \quad (A4)$$

인데, 여기서 C_1, C_2, C_3 는 상수이다. 광자의 운동량은 무시할 수 있을 정도로 작으므로 $e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} + \vec{z})} \approx 1$ 임을 적용하고 다음 식을 이용하면

$$\begin{aligned} \langle \xi_f(\vec{r}, z) | p_x | \xi_i(\vec{r}, z) \rangle &= \langle \xi_f(\vec{r}, z) | p_x | \xi_i(\vec{r}, z) \rangle \\ &= 0 \quad (\because \langle \phi_f(z) | \phi_i(z) \rangle = 0), \end{aligned} \quad (A5)$$

다음의 식 (A6)을 얻는다.

$$\langle \xi_f | H'_{op}^{abs} | \xi_i \rangle = -\frac{eA_0}{2m_0} \sum_{j \in (x,y,z)} \epsilon_j w_{jz} \langle \xi_f | p_z | \xi_i \rangle. \quad (A6)$$

이제 여기서 dipole 근사를 위해 다음 식을 이용하면(여기서 $[,]$ 는 commutator를 나타내고 이 식은 역유효질량 텐서의 비대각선 요소가 0일 경우에 대해 계산된^[13] $p_j = im_j / \hbar [H_0, j]$, $j \in (x, y, z)$ 의 좀 더 일반적인 형태라고 볼 수 있다.)

$$WP = \frac{i}{\hbar} \begin{pmatrix} [H_0, x] \\ [H_0, y] \\ [H_0, z] \end{pmatrix}, \quad (A7)$$

p_z 값을 다음과 같이 얻을 수 있다.

$$p_z = \frac{1}{D} \frac{im_0}{\hbar} \{ (w_{xy}w_{yz} - w_{xz}w_{yx})[H_0, x] + (w_{xz}w_{xy} - w_{yx}w_{xz})[H_0, y] + (w_{xy}w_{yz} - w_{yz}w_{xy})[H_0, z] \}. \quad (A8)$$

여기서 D 는 역 유효질량 텐서 행렬(W)의 행렬식을 나타낸다. 다음 식이 성립하므로

$$\langle \xi_f | [H_0, x] | \xi_i \rangle = (W_f - W_i) \langle \xi_f | x | \xi_i \rangle = 0 \quad (\because \langle \phi_f(z) | \phi_i(z) \rangle = 0), \quad (A9.0)$$

$$\langle \xi_f | [H_0, y] | \xi_i \rangle = (W_f - W_i) \langle \xi_f | y | \xi_i \rangle = 0 \quad (\because \langle \phi_f(z) | \phi_i(z) \rangle = 0), \quad (A9.1)$$

식 (A4)은 최종적으로 다음과 같이 유도된다.

$$\begin{aligned} & \langle \phi_f | H' \frac{d^2}{dp} | \phi_i \rangle \\ &= - \frac{eA_0}{2m_0} \left\{ \frac{m_0(W_i - W_f)}{i\hbar} \int dz \phi_f^*(z) z \phi_i(z) \right\} \\ & S(\epsilon_x, \epsilon_y, \epsilon_z) \delta_{\vec{k}_i, \vec{k}_f}. \end{aligned} \quad (A10)$$

여기서 $S(\epsilon_x, \epsilon_y, \epsilon_z)$ 는 식 (11)에 주어져 있으며 \vec{k}_i 와 \vec{k}_f 는 각각 천이전과 후의 양자운동과 평행한 방향으로의 파동함수의 wavevector를 의미한다. 위의 식 (A8)은 등방성 물질에서 유도한 참고문헌 [14]의 결과와 비교했을 때, $\cos \theta$ (θ 는 $\hat{\epsilon}$ 와 growth direction 이 이루는 각) 대신 $S(\epsilon_x, \epsilon_y, \epsilon_z)$ 가 들어가 있는 것을 제외하면 똑같은 결과임을 알 수 있다. 따라서 흡수계수도 참고문헌 [14]의 결과에서 $\cos \theta$ 대신 $S(\epsilon_x, \epsilon_y, \epsilon_z)$ 만을 첨가하면 된다. 따라서 식 (10)을 얻을 수 있다.

부록 2

여기서는 식 (16)을 유도한다. Ando의 식에서^[10] 입사하는 광자에 의해 생성되는 전도도(conductivity) $\tilde{\sigma}_{zz}$ 는 다음과 같이 주어진다.

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}_{zz}(\omega) &= N_s e^2 (-i\omega) \frac{w_{zz} \hbar^2}{m_0} \sum_n \sum_m u_n [A_{nm} - (\hbar \omega)^2 \delta_{n,m}] u_m, \\ & (n, m \in \{1, 2, 3, \dots\}). \end{aligned} \quad (B1)$$

여기서

$$u_n = (eF)^{-1} \left\{ \frac{2m_0}{w_{zz} \hbar^2} \hbar \omega_n \right\}^{\frac{1}{2}} \frac{1}{(\hbar \omega_n)^2 - (\hbar \omega)^2} \langle n | H | 0 \rangle. \quad (B2)$$

이고 (F 는 외부에서 작용한 전기장, H' 은 앞에서 정의된 섭동 해밀토니안이며, A_{nm} 은 본문 중의 식 (17)에 정의되어 있다.) 다음 식이 성립한다.

$$\sum_n [A_{nm} - (\hbar \omega)^2 \delta_{nm}] u_m = \left\{ \frac{2m_0}{w_{zz} \hbar^2} \hbar \omega_n \right\}^{\frac{1}{2}} \langle n | z | 0 \rangle. \quad (B3)$$

식 (B3)에서 3-level을 가정하면

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} A_{11} - (\hbar \omega)^2 & A_{12} \\ A_{12} & A_{22} - (\hbar \omega)^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \left\{ \frac{2m_0}{w_{zz} \hbar^2} \hbar \omega_1 \right\}^{\frac{1}{2}} \langle 1 | z | 0 \rangle \\ \left\{ \frac{2m_0}{w_{zz} \hbar^2} \hbar \omega_2 \right\}^{\frac{1}{2}} \langle 2 | z | 0 \rangle \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (B4)$$

이므로

$$u_1 = \frac{1}{(A_{11} - (\hbar \omega)^2)(A_{22} - (\hbar \omega)^2) - A_{12}^2} \left\{ \frac{2m_0}{w_{zz} \hbar^2} \hbar \omega_1 \right\}^{\frac{1}{2}} \langle 1 | z | 0 \rangle (A_{22} - (\hbar \omega)^2), \quad (B5.0)$$

$$u_2 = \frac{1}{(A_{11} - (\hbar \omega)^2)(A_{22} - (\hbar \omega)^2) - A_{12}^2} \left\{ \frac{2m_0}{w_{zz} \hbar^2} \hbar \omega_1 \right\}^{\frac{1}{2}} \langle 1 | z | 0 \rangle (-A_{12}). \quad (B5.1)$$

이다. 위의 식을 유도하는 과정에서 $\langle 2 | z | 0 \rangle = 0$ 임을 이용하였다. 식 (B5.0)과 (B5.1)을 식 (B1)에 대입하고 식 (B3)을 이용하면 다음 식을 얻는다.

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}_{zz}(\omega) &= N_s e^2 (-i\omega) \frac{w_{zz} \hbar^2}{m_0} \sum_n \sum_m u_n [A_{nm} - (\hbar \omega)^2 \delta_{n,m}] u_m \\ &= N_s e^2 (-i\omega) \frac{w_{zz} \hbar^2}{m_0} \sum_n \left\{ \frac{2m_0}{w_{zz} \hbar^2} \hbar \omega_n \right\}^{\frac{1}{2}} \langle n | z | 0 \rangle u_n \\ &= N_s e^2 (-i\omega) \frac{w_{zz} \hbar^2}{m_0} \left\{ \frac{2m_0}{w_{zz} \hbar^2} \hbar \omega_1 \right\} \langle 1 | z | 0 \rangle^2 \\ & \frac{(A_{22} - (\hbar \omega)^2)}{(A_{11} - (\hbar \omega)^2)(A_{22} - (\hbar \omega)^2) - A_{12}^2}. \end{aligned} \quad (B6)$$

광자의 흡수는 전도도의 pole에서 일어나므로 식 (B6)에서 우리는 다음과 같은 전자의 천이 에너지를 얻을 수 있다.

$$(\hbar \tilde{\omega}_1)^2 = \frac{1}{2} \{ A_{11} + A_{22} - \sqrt{(A_{11} - A_{22})^2 + 4A_{12}^2} \}, \quad (B7.0)$$

$$(\hbar \tilde{\omega}_2)^2 = \frac{1}{2} \{ A_{11} + A_{22} + \sqrt{(A_{11} - A_{22})^2 + 4A_{12}^2} \}. \quad (B7.1)$$

식 (B7.0)이 본문에서 사용한 식 (16)이다.

참 고 문 헌

[1] L. C. West and S. J. Eglash, "First observation of an extremely large dipole infrared transition within the conduction band of GaAs quantum well," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 46, pp. 1156-1158, 1985.

[2] C. Lee and K. L. Wang, "Intersubband absorption in Sb δ -doped molecular beam epitaxy Si quantum well structures," *J. Vac. Sci. Technol. B*, vol. 10, pp. 992-994, 1992.

[3] C. Lee and K. L. Wang, "Intersubband absorption in Sb δ -doped Si/Si_{1-x}Ge_x quantum well structures grown on Si(110)," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 60, pp. 2264-2266, 1992.

[4] J. Singh, *Semiconductor Optoelectronics*, McGraw-Hill, Inc., New York, Chap. 7, 1995.

[5] J. S. Park, R. P. G. Karunasiri, Y. J. Mii, and K. L. Wang, "Hole intersubband absorption in delta-doped multiple Si layers," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 58, pp. 1083-1085, 1991.

[6] J. S. Park, R. P. G. Karunasiri, and K. L. Wang, "Intervalence-subband transition in SiGe/Si multiple quantum-wells normal incident detection," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 61, pp. 681-683, 1992.

[7] 김경엽, 이병호, 이찬호, "Si(110)에서 기른 Si/SiGe 양자우물의 부밴드간 천이에 의한 IR Photon 흡수계수의 모델링," 제 4회 광전자공학 학술회의 논문집, pp. 249-251, 1997

[8] K. S. Yi and J. J. Quinn, "Linear response of a surface-charge layer in an anisotropic semiconductor," *Phys. Rev.*, vol. 27, pp. 1184-1190, 1983.

[9] K. S. Yi and J. J. Quinn, "Optical absorption and collective modes of surface-charge layers on (110) and (111) silicon," *Phys. Rev.*, vol. 27, pp. 2396-2411, 1983.

[10] T. Ando, "Inter-subband optical absorption in space-charge layers on semiconductor surfaces," *Z. Phys. B*, vol. 26, pp. 263-272, 1977.

[11] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics*, Holt, Rinehart and Winston, New York, Chap. 17, 1976..

[12] D. D. Coon and R. P. G. Karunasiri, "New mode of IR detection using quantum wells," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 45, pp. 649-651, 1984.

[13] A. Goswami, *Quantum Mechanics*, Wm. C. Brown Publishers, Dubuque, Chap. 22., 1992.

[14] D. Ahn and S. L. Chuang, "Intersubband optical absorption in a quantum well with an applied electric field," *Phys. Rev. B.*, vol. 35, pp. 4149-4151, 1987.

저 자 소 개

金京濂(正會員) 第35卷 D編 第1號 參照
 현재 서울대학교 전기공학부 석사과정

李燦豪(正會員) 第32卷 A編 第12號 參照
 현재 숭실대학교 정보통신전자공학부 조교수

李竝浩(正會員) 第35卷 D編 第1號 參照
 현재 서울대학교 전기공학부 조교수