

변수화 반도체 모델을 이용한 Cubic Zinc-blende CdSe의 유전함수 분석

정용우 · 공태호 · 이선영 · 김영동*

경희대학교 이과대학 물리학과 나노광물성 연구실, 서울 130-701

(2006년 12월 26일 받음)

본 연구에서는 광전자 소자에 폭넓게 사용되는 ZnCdSe 화합물 반도체의 end-point인 CdSe의 유전함수 spectrum을 Vacuum Ultra Violet spectroscopic ellipsometry(타원편광분석법) 측정하여 분석하였다. 측정 결과는 변수화 모델을 이용하여 분석하였으며 그 결과 6 eV 이상에 존재하는 전자전이점들을 확인할 수 있었고 CdSe의 Critical Point(CP) 구조를 수치화 함으로써 온도나 화합물 함량에 따른 광특성 의존성 연구 등에 활용될 수 있는 database를 확보하였다.

주제어 : CdSe, 타원편광분석기, 매개변수 반도체 모델, 유전함수

I. 서론

ZnSe를 기본물질로 하는 Laser Diode(LD)는 양자 우물 재료로 $Zn_xCd_{1-x}Se$ 을 일반적으로 사용한다 [1]. 양자우물 밴드갭 엔지니어링을 위해서는 $Zn_xCd_{1-x}Se$ 의 광특성을 아는 것이 무엇보다 선행되어야 하며 $Zn_xCd_{1-x}Se$ 화합물의 end-point으로서 CdSe의 정보는 필수적이다. 일반적인 형태의 hexagonal CdSe에 대한 타원편광분석법 연구는 폭넓게 진행되어져 왔으며 [2-5] 이후 LD 연구에서 cubic CdSe 광특성 정보가 요구됨에 따라 cubic CdSe ellipsometric 광특성 연구에 관련한 몇 개의 발표들이 있었다 [3-8]. Cubic CdSe의 경우, 일반적인 ellipsometry의 분광범위 때문에 1~6 eV 분광영역에 비해 6 eV 이상의 연구는 매우 제한적으로 진행되었다. 본 연구에서는 Vacuum Ultra Violet spectroscopic ellipsometry(VUV SE)를 이용하여 0.7~9 eV 분광영역에서의 cubic CdSe의 유전함수를 측정하였고 여기서 얻은 데이터를 변수화 모델로 분석하였다. 변수화 모델은 비대칭 peak들의 합으로 유전함수를 나타내는 방법으로서 energy, amplitude, broadening 등을 포함하는 각 변수들로 각 비대칭 peak들을 수치화하였기 때문에 E_0 영역에서 급격한 흡수가 일어나는 비대칭 유전율 함수를 갖는 반도체 박막물성 연구와 온도, 화합물 함량 의존 electronic structure 변화 연구에 유용하게 사용되고 있다. 우리는 Cubic CdSe의 분석에서 2차 미분법을 이용하여 구한 밴드갭 수치와 변수화 모델 분석에서 얻

은 밴드갭 값들을 문헌값들과 함께 비교함으로써 변수화 모델 분석의 적절성을 확인하였다.

II. 실험방법

자연적으로 생성된 bulk CdSe는 hexagonal wurzite structure를 가지고 있다 [9]. 반면 본 연구에서 사용한 CdSe 박막의 경우 GaAs(100) 기판 위에 Molecular Beam Epitaxy에 의해 성장된 CdSe heteroepitaxy로서 단일 cubic structure를 형성한다 [10-12]. 박막의 두께는 1 μm 이상으로 VUV SE light source 대부분의 분광영역(Cubic CdSe의 경우 E_0 영역 제외)에 대한 광학적 투과 깊이보다 크다. 가유전분광함수 $\langle \epsilon \rangle = \langle \epsilon_1 \rangle + i \langle \epsilon_2 \rangle$ 는 VUV ellipsometry에 의해 0.7~9 eV 상온 분광영역에서 입사각 70°로 측정되었다. VUV ellipsometry는 auto retarder, rotating analyzer, Xenon과 Deuterium lamp light source, photomultiplier tube, solidstate detector, 대기 중에서 통과하지 않는 UV 영역의 파장을 이용하기 위한 nitrogen-purged chamber 등으로 구성된다.

III. 결과 및 고찰

그림 1.은 VUV SE로 측정한 CdSe 박막의 유전함수의

* [전자우편] ydkim@khu.ac.kr

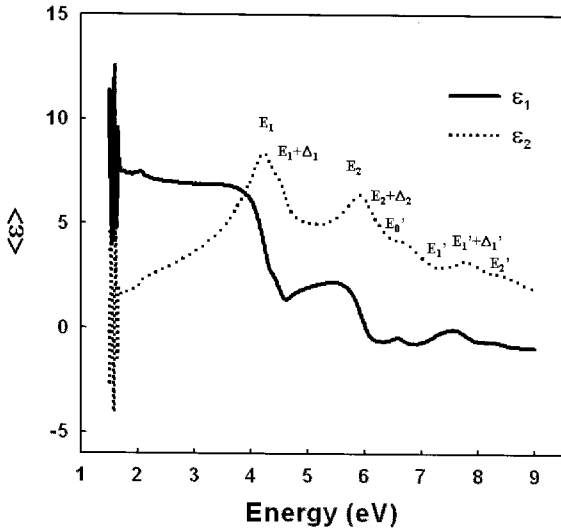


그림 1. VUV ellipsometry로 측정된 CdSe의 유전함수의 실수부와 허수부.

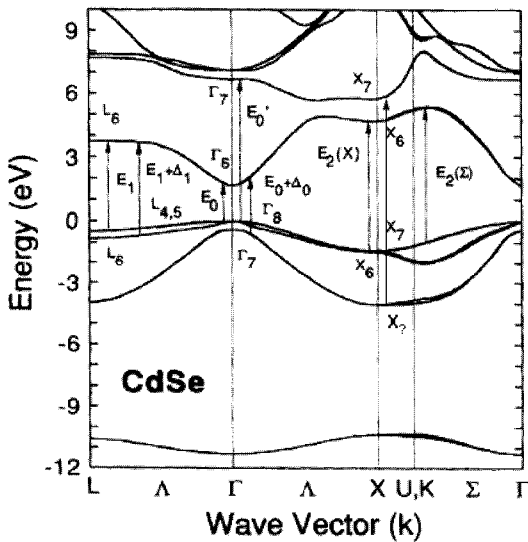


그림 2. Cubic CdSe의 밴드구조.[Ref. 7]

실수부와 허수부를 나타내고 있다. E_0 부분의 오실레이션 들은 GaAs 기판으로부터 반사된 빛에 의한 간섭효과로서 CdSe의 경우 E_0 밴드갭보다 작은 energy 영역에서 흡수가 일어나지 않는 투명한 물질이기 때문에 발생한다. 그림 1.에서는 간섭효과가 작용하는 $E_0, E_0+\Delta_0$ 부분을 제외하고 이전에 발표되었던 $E_1, E_1+\Delta_1, E_2, E_0', E_1', E_1'+\Delta_1', E_2+\Delta_2$ peak를 볼 수 있었으며 추가적으로 E_2' peak를 확인 할 수 있었다. 그림 2.는 cubic CdSe의 밴드 구조를 나타내고 있으며 각각의 띠간 전이를 확인할 수 있다.[7] 변수화 반도체 모델[13-15]은 모델링 영역 밖에서 발생하는 흡수에 기

인하여 index effect로 간주되는 energy-bounded Gaussian-broadened polynomial과 pole들의 합으로 유전함수를 표현할 수 있다. 먼저 복소유전함수를 photon energy E 의 함수로 정의하면 다음과 같다.

$$\begin{aligned} \epsilon(\omega) &= \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega) \\ &= 1 + i \sum_{j=1}^m \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} W_j(E) \Phi(\hbar\omega, E, \sigma_j) dE \\ &\quad + 1 \sum_{j=m+1}^{m+P+1} \frac{A_j}{(\hbar\omega)^2 - E_j^2} \end{aligned} \quad (1)$$

여기서 broadening function Φ 는

$$\begin{aligned} \Phi(\hbar\omega, E, \sigma_j) &= \int_0^\infty e^{i(\hbar\omega - E + i2\sigma^2 s)s} ds \\ &\quad - \int_0^\infty e^{i(\hbar\omega + E + i2\sigma^2 s)s} ds \\ &= \sqrt{\frac{\pi}{8\sigma^2}} [e^{-y_1^2} + e^{-y_2^2} \operatorname{erf}(iy_1) - e^{-y_2^2} \\ &\quad - e^{-y_2^2} \operatorname{erf}(iy_2)]; \end{aligned} \quad (2a)$$

$$y_1 = \frac{\hbar\omega - E}{2\sqrt{2}\sigma} \quad (2b)$$

$$y_2 = \frac{\hbar\omega + E}{2\sqrt{2}\sigma} \quad (2c)$$

$$W_j(E) = \sum_{k=0}^N P_{j,k} E^k u(E - a_j) u(b_j - E); \quad (2d)$$

$u(x)$ 는 단위 계단 함수를 나타낸다. Eq. (2a)의 Gaussian broadening은 Eq. (1)의 유한적분 형태에 사용하기 적절하지 않다. 그러나 $(\hbar\omega + E)/(2\sqrt{2}\sigma)$ 의 함수로 배열된 1차원 lookup table은 Eq. (2c)에서 요구되는 다항식의 각 항에 대한 수학적 조건을 만족시킨다. 여기서 요구되는 다항식은 4차식으로 이루어진 4개의 ensemble 결합으로서($N=4$ Eq. (2d)) 그림 3에서 보인 것처럼 공유되는 흡수영역을 채우는 인접한 ensemble들의 중첩된 끝단을 가지고 critical point(CP) structure에 위치한다. Bounding energy E_L 과 E_U 는 인접한 CP structure를 표현하는 요소이며 이때 center energy E_C 는 CP energy를 나타낸다. 모델 변수 중 ConL과 ConU는 흡수 끝단이 영향을 미치는 인접한 CP 진동자의 center energy number를 나타낸다. 두 control point E_{LM} 과 E_{UM} 의 위치는 네 개의 다항식의 결합점으로서 Eqs. (2b)와 (2c) 관계식을 통하여 두 point의

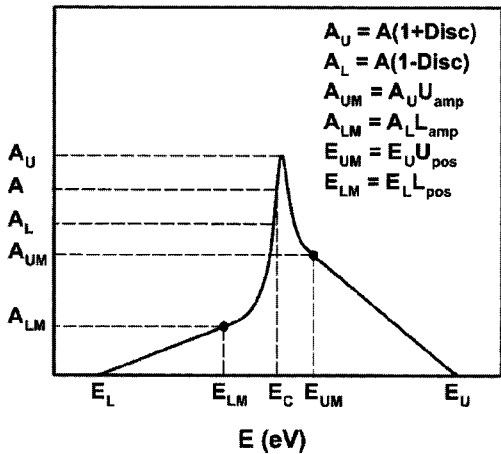


그림 3. 네 개의 다항식 ensemble을 가진 변수화 모델로 만든 단일 CP structure의 전형적인 모양.

energy에 따라 상대적으로 정의된다. E_C 에서 amplitude와 energy 각각의 불일치를 허용함으로써 ensemble 양쪽을 독립적으로 고려할 수 있다. 그래서 E_0 영역의 에너지 전이처럼 계단 형태를 갖는 급격한 흡수 특성도 직접 밴드갭 모델링을 통해 분석이 가능하다. broadening parameter는 각 CP energy의 개별적인 특징이며 CP들 사이의 broadening과 관련한 상호연관성은 거의 없다. 변수화 모델을 구성하는 각 진동자는 특정한 amplitude와 broadening 변수를 가지고 있는 delta 함수를 가지고 있으며 이 함수는 위치하는 energy에서 다항식을 기초하여 일반화된다.

그림 4.는 변수화 모델을 이용한 CdSe $\langle \epsilon_2 \rangle$ spectrum 분석시 각 CP 성분들의 결합형태를 보여주고 있다. open circle는 ellipsometry 측정 결과이며 solid line은 변수화 모델로 피팅한 결과를 나타낸다. 그래프 하단부의 dashed

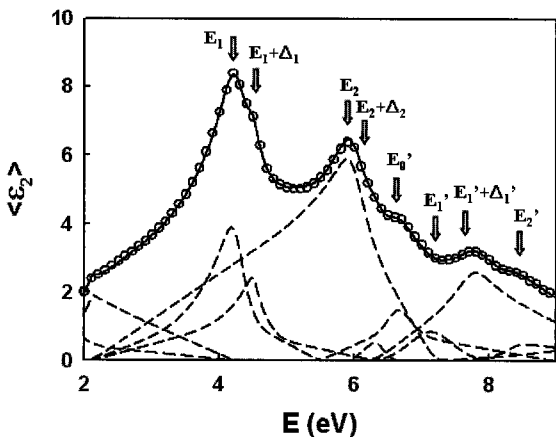


그림 4. 11개의 CP structure를 가지고 CdSe 유전함수를 피팅한 변수화 모델.

line들은 변수화 모델의 각 구성요소이다. 명확한 구분을 위해 측정 데이터 point 개수를 1/5 이하로 줄였다. Table I.에 변수화 모델의 최적화된 변수들을 명시하였다. CP structure를 구성하는 변수는 center energy(E_C), center amplitude(A), broadening(B), upper and lower mid-position (U_{pos} , L_{pos}), upper and lower mid-amplitude (U_{amp} , L_{amp})로 구성된다.

분석 영역 안에 다수의 CP 진동자들이 인접하여 존재하거나 인접한 진동자의 크기가 상대적으로 작은 경우 변수 모델로 유전함수 line shape(line과 shape 사이 띄우기) 분석시 CP 변수들의 상관관계가 발생하여 실제 시료물성과 다른 CP 진동자를 가지고 있음에도 불구하고 동일한 line shape(line과 shape 사이 띄우기) 피팅 결과가 나타날 수 있다. 본 연구에 사용된 cubic CdSe의 경우에도 4~9 eV 영역에 크기가 각기 다른 8개의 peak를 고려하여 분석을 진행하였기 때문에 CP 변수 상관성이 발생할 수 있다. 따라서 우리는 변수 모델에 의한 cubic CdSe $\langle \epsilon \rangle$ spectrum 분석의 적절성을 확인하고 변수 모델 분석에 필요한 기초정보 획득을 위해 그림 5에 나타낸 것처럼 3~9 eV 영역에서 2차 미분 spectrum을 standard analytic line shape로 피팅하여 밴드갭 값을 구하였다 [15-16]. Table II. 에서 변수모델과 2차 미분법을 이용하여 얻은 밴드갭 수치 및 이전에 발표된 문헌값들을 명시하였다. 두 모델에서 구한 밴드갭 energy 값들은 상당히 유사한 결과를 보이고 있으며 전이 위치에 따라 10~80 meV의 차이를 보이고 있는데 이는 자연 산화막을 포함한 시료표면에 발생하는

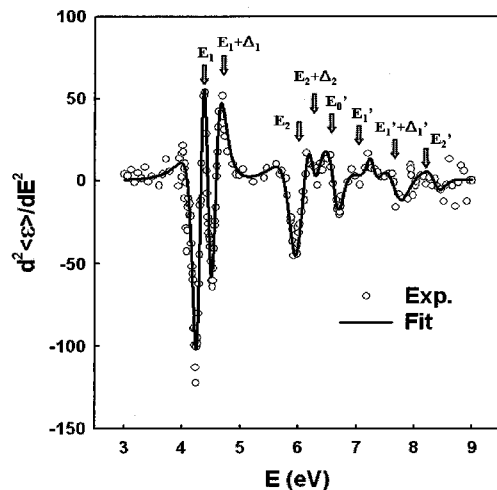


그림 5. 2차 미분을 통해 CdSe의 유전함수를 분석함으로써 전이 energy를 구할 수 있다.

Table 1. Cubic CdSe의 띠간 critical point 전이 energy에 대한 실험 및 이론계산값.

	E_1	$E_1+\Delta_1$	E_2	$E_2+\Delta_2$	E_0'	E_1'	$E_1'+\Delta_1$	E_2'
2nd derivation	4.29	4.52	5.98	6.24	6.64	7.26	7.69	8.35
Parametric model	4.2390	4.5113	5.9693	6.3264	6.5825	7.2086	7.7774	8.3836
Ref.	4.28 ^{a)} 4.197 ^{b)} 4.314 ^{c)} 4.5 ^{d)} 4.29 ^{e)}	4.48 ^{a)} 4.546 ^{b)} 4.568 ^{c)} 4.8 ^{d)} 4.49 ^{e)}	6.08 ^{a)} 6069 ^{b)} 6.7 ^{d)} 6.09 ^{e)}	 6.149 ^{b)} 7.4 ^{d)} 6.39 ^{e)}	 6.668 ^{b)} 7.8 ^{d)} 6.80 ^{e)}	 8.9 ^{d)} 7.4 ^{e)}	 9.2 ^{d)} 7.8 ^{e)}	

a) Ref.[4] b) Ref.[7] theory cal. c) Ref.[7] exp d) Ref.[7] theory cal. e) Ref.[5] exp

overlayer들의 영향으로 발생하는 노이즈 효과로 생각된다. Table II.에서 E_2' 로 명명한 전이 영역은 다수의 노이즈 효과를 가지고 있고 이론적으로도 명명되지 않았기 때문에 이 전이의 정확한 명명을 위해서 추가적인 CdSe 밴드 구조 계산을 진행 중에 있다.

IV. 결 론

VUV ellipsometry를 가지고 cubic CdSe 박막의 0.7~9 eV 영역 유전함수 spectrum을 측정하였다. 측정된 결과는 2차 미분법으로 계산하여 기본적인 CP energy 정보를 얻을 수 있었다. 그리고 이 정보를 기초로 하여 전자의 흡수가 발생하는 각 CP 구성요소들의 함으로 유전함수를 분석하는 변수 반도체 모델을 cubic CdSe에 적용하였다. 그 결과 2차 미분법과 유사한 변수 모델 분석 수치를 얻을 수 있었고 4~8.5 eV 사이에 다수의 CP가 존재함에도 불구하고

적절한 모델링이 이루어졌음을 확인하였다. 또한 6 eV 이상에서 존재하는 $E_2+\Delta_2$ 와 E_2' 으로 예상되는 전이를 2차 미분과 변수 모델을 통하여 확인하였다. 본 연구는 0.7~9 eV 영역에서 cubic CdSe 유전함수 분석과 더불어 전이가 발생하는 각 CP들을 변수화 함으로써 온도나 ZnCdSe 같은 화합물 반도체의 함량 의존에 따른 광학적 특성 변화 연구 등에 유용하게 사용될 수 있는 database를 제공해 준다.

참고문헌

- [1] M. A. Haase, J. Qiu, J. M. DePuydt, and H. Cheng, *Appl. Phys. Lett.* **59**, 1272 (1991).
- [2] T. K. Bergstresser and M. L. Cohen, *Phys. Rev.* **164**, 1069 (1967).
- [3] D. J. Stukel, R. N. Euwema, and T. C. Collins, *Phys. Rev.* **179**, 740 (1969).

Table 2. CdSe에 대한 변수화 모델의 전체 변수값.

No.	ConL	ConU	A	B	E	Disc.	L_{Pos}	L_{Amp}	U_{Pos}	U_{Amp}
#0	0	2	2.0275	50	1.6	0	0.9	0.2	0.6126	0.157
#1	0	2	1.9219	12.749	2.1249	0	0.0013	0.0011	0.274	0.258
#2	1	10	4.5734	95.770	4.2389	0	0.1411	0.0501	0.5076	0.1467
#3	1	5	2.5631	35.028	4.5113	0	0.4	0.2	0.5505	0.1666
#4	1	7	6.3501	112.31	5.9692	0	0.55	0.45	0.3	0.2
#5	4	6	0.8534	88.943	6.3263	0	0.7	0.5	0.7	0.5
#6	10	11	2.5445	158.50	6.5824	0	0.9766	0.3753	0.6626	0.2197
#7	6	8	1.6049	262.24	7.2086	0	0.5	0.4	0.6	0.3
#8	5	12	2.9128	154.49	7.7773	0	0.3480	0.2637	0.4750	0.3821
#9	8	12	0.5079	111.23	8.3836	0	0.5	0.3	0.2552	0.3159
#10					5.5					
#11					9					
#12	9	13	0.8115	1187.9	10.178	0	0.5	0.5	0.5	0.5
#13					13					

- [4] S. Ninomiya and S. Adachi, *J. Appl. Phys.* **78**, 4681 (1995).
- [5] C. Janowitz, O. Günther, G. Jungk, R. L. Johnson, P. V. Santos, M. Cardona, W. Faschinger, and H. Sitter, *Phys. Rev. B* **50**, 2181 (1994).
- [6] U. Lunz, J. Kuhn, F. Goschenhofer, U. Schüssler, S. Einfeldt, C. R. Becker, and G. Landwehr, *J. Appl. Phys.* **80**, 6861 (1996).
- [7] Y. D. Kim, M. V. Klein, S. F. Ren, and Y. C. Chang, *Phys. Rev. B* **49**, 7262 (1994).
- [8] J. R. Chelikowsky and M. L. Cohen, *Phys. Rev.* **14**, 556 (1976).
- [9] A. S. Nasibov, Y. V. Korostelin, P. V. Shapin, L. G. Suslina, D. L. Fedorov, and L. S. Matkov, *Solid State Commun.* **71**, 867 (1989).
- [10] H. Luo, N. Samarth, F. C. Zhang, A. Pareek, M. Dobrowolska, J. K. Furdyna, K. Mahalingam, N. Stsuka, W. C. Chou, A. Petrou, and S. B. Qadri, *Appl. Phys. Lett.* **58**, 1783 (1991).
- [11] N. Samarth, H. Luo, J. K. Furdyna, S. B. Qadri, Y. R. Lee, R. G. Alonso, E. K. Suh, A. K. Ramsas, and N. Otsuka, *Surf. Sci.* **228**, 226 (1990).
- [12] N. Samarth, H. Luo, J. K. Furdyna, R. G. Alonso, Y. R. Lee, E. K. Suh, A. K. Ramsas, S. B. Qadri, and N. Otsuka, *Appl. Phys. Lett.* **56**, 1163 (1990).
- [13] B. Johs, C. M. Herzinger, J. H. Dinan, A. Cornfeld, and J. D. Benson, *Thin Solid Films* **313**, 137 (1998).
- [14] *Guide to Using WVASE32* (J. A. Woollam Co. Inc., 2000), pp. Software for Spectroscopic Ellipsometry Data Acquisition and Analysis.
- [15] F. Seitz, D. Turnbull, H. Ehrenreich, *Modulation Spectroscopy* (Academic Press, New York, 1969).
- [16] M. Balkanski, *Handbook on Semiconductors* (North-Holland, Amsterdam, 1980), pp. 109.

Dielectric Function Analysis of Cubic CdSe Using Parametric Semiconductor Model

Y. W. Jung, T. H. Ghong, S. Y. Lee, and Y. D. Kim*

Nano-Optical Property Laboratory and Department of Physics , Kyung Hee University, Seoul 130-701

(Received December 26, 2006)

ZnCdSe alloy semiconductor was widely used for the optoelectronic device. And CdSe is the end-point in this material. In this work, we measured the dielectric function spectrum of cubic CdSe with Vacuum Ultra Violet spectroscopic ellipsometry and analysed this data with parametric model. As a result, we observed some of transition energy point over 6 eV and obtained the database for dielectric function spectrum, which could be used for temperature or alloy composition dependence study on optical property of CdSe.

Keywords : CdSe, ellipsometry, Parametric model, VUV SE, Dielectric function

* [E-mail] ydkim@khu.ac.kr