

준 2차원 시스템에서 전자 변위 포텐셜 상호 작용에 의한 Si의 양자 전이 특성

Quantum Transition properties of Si in Electron Deformation Potential Phonon Interacting Quasi Two Dimensional System

주석민*, 조현철**, 이수호***

Seok-Min Joo*, Hyun-Chul Cho**, Su-Ho Lee***★

Abstract

We investigated theoretically the quantum optical transition properties of quasi 2-Dimensional Landau splitting system, in Si. We apply the Quantum Transport theory (QTR) to the system in the confinement of electrons by square well confinement potential. We use the projected Liouville equation method with Equilibrium Average Projection Scheme (EAPS). In order to analyze the quantum transition, we compare the temperature and the magnetic field dependencies of the QTLW and the QTLS on two transition processes, namely, the phonon emission transition process and the phonon absorption transition process. Through the analysis of this work, we found the increasing properties of QTLW and QTLS of Si with the temperature and the magnetic fields. We also found the dominant scattering processes are the phonon emission transition process.

요약

우리는 준 2차원 Landau 분할 시스템의 양자 광학 전이 특성을 실리콘(Si)에서 이론적으로 고찰하였다. Square wall 구속 포텐셜에 의한 전자 구속 시스템에 양자 수송 이론(QTR)을 적용하였습니다. 평형 평균 투영 계획(Equilibrium Average Projection Scheme : EAPS)으로 계획된 Liouville 방정식 방법을 사용하였으며, 양자 전이를 분석하기 위해 포논 방출 전이 과정과 포논 흡수 전이 과정의 두 전이 과정에서 QTLW와 QTLS의 온도와 자기장 의존성을 비교하였습니다. 이 연구를 통해 Si의 QTLW와 QTLS의 온도와 자기장의 증가하는 특성을 발견하였으며, 또한 우세한 산란 과정이 포논 방출 전이 과정이라는 것을 발견했다.

Key words : Si, Quasi 2 Dimensional System, Quantum Transition, QTLW, QTLS

* Dept. of Electrical Engineering, Masan University
** Dept. of Avionics & Aviation Maintenance Kyungbuk college
*** Dept. of Electrical Engineering, Donga University
★ Corresponding author
E-mail : leesuho@dau.ac.kr, Tel : +82-51-200-7741
※ Acknowledgment

This research has been supported by the Donga university.
Manuscript received June. 7, 2019; revised Jun. 18, 2019; accepted June. 20, 2019.

This is an Open-Access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution Non-Commercial License(<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/3.0>) which permits unrestricted non-commercial use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

1. 서론

자기-광학 전이에 대한 연구는 저 차원 전자 시스템에서 전자의 수송 현상을 연구하는 데는 자기-광학 전기에 대한 연구가 많이 사용되어지고 있다. 양자 수송에 대한 많은 이론과 다양한 방법론이 있으며, 이중 평형 평균 투영 계획(EAPS)과 함께 투영된 Liouville 방정식 방법을 사용하였다. EAPS를 사용하는 장점은 양자 전달 이론을 확장함으로써 1 단계 과정에서 양자 반응 함수와 산란 인자 공식을 얻을 수 있다는 것이다. 이전 연구에서 반도체 물질에 EAPS 이론을 적용하여 EAPS

이론의 수치 계산 결과와 기존 실험 데이터를 비교하여 얻은 결과를 발표하였다. 이것은 EAPS 이론이 새로운 시스템을 분석하는데 유용하다는 것을 보여 주고 있다.[1-9] 그러나 이전의 연구에서는 매우 약한 커플 링(Extremely Weak Coupling : EWC) 근사법을 사용하여 비 제한적 시스템을 제안하였다. 실험에서 측정 된 전이의 광 흡수 스펙트럼은 전기 전도도 텐서와 직접 관련이 있으며 스펙트럼의 선폭은 선형 함수와 관련이 있다. 따라서 이론적인 공식을 기반으로 주어진 제한 시스템에 대한 선 모양 함수의 명시적인 표현을 얻는 것이 중요하다. 최근에 우리는 적당히 약한 커플 링(Moderately Weak Coupling : MWC) 근사법을 사용하여 저 차원 전자 시스템에서 EAPS를 확장하고 적용하는 보다 정확한 절차를 제안하였다. MWC 체계에서 분배 요소는 양자 전이 과정에 대한 적절한 설명을 제공할 수 있으며 EWC 기법의 이전 연구에서 양자 전이 과정의 중간 상태가 나타나지 않는다.[10-13]

본 연구에서는 전자 변이 포텐셜 포논 상호 작용 시스템에서 산란 효과를 보여주는 흡수 전력과 양자 전이 선 너비(Quantum Transition Line Shapes : QTLW)과 광학 양자 전이 선 모양(Quantum Transition Line Widths : QTLS)을 해석하였다. 다양한 외부 필드 파장에 대한 흡수 전력을 계산하거나 검토해야하므로 QTLW의 온도 및 자기장 의존도 분석은 이론이나 실험이 매우 어렵다. EAPS의 QTR 이론은 QTLW가 다양한 외부 필드 파장에서 EAPS를 통해 직접적으로 얻어지므로 QTLW를 얻기 위해 흡수력의 계산이 필요하지 않아 본 논문에서는 수치 계산을 통해 QTLW와 QTLS의 온도와 자기장 의존성을 분석하였으며, 양자 전이를 분석하기 위해 두 전이 과정, 즉 포논 방출 전이 과정과 포논 흡수 전이 과정에서 QTLW와 QTLS의 온도와 자기장 의존성을 비교하였다.

II. 시스템

전자 시스템에 정 자기장 $\vec{B} = B_z \hat{Z}$ 이 미칠 때, 단일 전자 에너지 상태는 란다우 준위에서 양자화 된다. z 방향에서 z=0과 z=Lz 사이에서 무한 square wall 포텐셜(SQWP)에 한정된 전자 시스템을 적용하였으며, 참고 문헌[10]에서 제안한 상수들과 고유

상태를 적용하였다. square wall 포텐셜 시스템의 진동 전계 $E(t) = E_0 \exp(i\omega t)$ 가 z축을 따라 가해졌다고 가정한다. 이 힘은 시스템에 흡수력 $P(\omega) = (E_0^2/2) \text{Re}\sigma(\omega)$ 을 나타나게 되며, 여기서 “Re”는 실수 성분을 나타내고 $\sigma(\omega)$ 는 광 전도도 텐서를 나타내고 있다. 여기서 흡수력은 광 QTLS로 알 수 있으며, 산란 인자 함수는 광 QTLW로 표현된다. 전자-포논 상호 작용 시스템에서 Hamiltonian은 다음식 (1)과 같이 나타낼 수 있다.

$$H_s = H_e + H_p + V = \sum_{\beta} \langle \beta | h_0 | \beta \rangle a_{\beta}^{\dagger} a_{\beta} + \sum_q \hbar \omega_q b_q^{\dagger} b_q + \sum_q \sum_{\alpha, \mu} C_{\alpha, \mu}(q) a_q^{\dagger} a_{\mu} (b_q + b_{-q}^{\dagger}) \quad (1)$$

여기서 H_e 는 전자 Hamiltonian, h_0 는 단일 전자 Hamiltonian, H_p 는 포논 Hamiltonian, V 는 전자 포논(또는 불순물) 상호 작용 Hamiltonian이다. $b_1(b_2^{\dagger})$ 는 보존 입자의 소멸 연산자(생성 연산자)이고, \vec{q} 는 포논(또는 불순물) wave 벡터이다. 전자-포논(또는 불순물) 상호 작용 시스템의 상호 작용 해밀턴은 $V \equiv \sum_q \sum_{\alpha, \mu} C_{\alpha, \mu}(q) a_{\alpha}^{\dagger} a_{\mu} (b_q + b_{-q}^{\dagger})$ 일 때, 전자-포논 상호 작용 $C_{\alpha, \mu}(q)$ 의 결합 행렬 요소는 $C_{\alpha, \mu} \equiv V_q \langle \alpha | \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}) | \mu \rangle$ 이고, \vec{r} 는 전자의 위치 벡터이고 V_q 는 물질의 결합 계수이다.

연속 근사법을 이용하여, 우 편광 되어 입사되는 외부 장에서 흡수식 공식(또는 QTLS 공식)은 다음과 같이 최종적으로 구할 수 있다.[14-18]

$$P(\omega) \propto \left(\frac{e^2 \omega_c^2}{\pi^2 \hbar \omega} \right) \left\{ \frac{\gamma_{ms}(\omega_c) \sum_{N_{\alpha}} \int_{-\infty}^{\infty} dk_{z\alpha} (N_{\alpha} + 1) (f_{\alpha} - f_{\alpha+1})}{(\omega - \omega_c)^2 + (\gamma_{ms}(\omega_c))^2} \right\} \quad (2)$$

여기서 산란 인자 함수(또는 QTLW)는 식 (3)과 같이 주어진다.

$$\gamma_{total}(\omega) \equiv \sum_{\mp} \sum_{N_{\alpha}=0} \sum_{N_{\beta}=0} \gamma_{\alpha, \beta}^{\mp} \quad (3)$$

$$= \left(\frac{\Omega}{4\pi \hbar^2 v_s} \right) \left(\frac{\pi}{L_z} (2 + \delta(n_{\alpha}, n_{\beta})) \right) \left\{ \frac{\sum_{\mp} \sum_{N_{\alpha}=0} \sum_{N_{\beta}=0} \int_{-\infty}^{\infty} dk_{z\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} dq_z Y_{\alpha, \beta}^{\mp}}{\sum_{N_{\alpha}=0} \int_{-\infty}^{\infty} dk_{z\alpha} (N_{\alpha} + 1) (f_{\alpha+1} - f_{\alpha})} \right\}$$

참고문헌 [16]에서 산란 인자의 피적분 함수 $Y_{\alpha, \beta}^{\mp}$ 를 도출하여 제안하였다. 본 논문에서도 참고문헌[16]에서 제안한 식 (18)~식 (23)의 결과 방정

식을 사용하였다.

III. 수치해석 결과 및 토의

Si의 흡수력(QTLS)와 선폭(QTLW)을 수치해석으로 이론적으로 계산하였다. 이때 사용된 Si의 재료정수는 표 1에 나타내었다.

Table 1. Material constant of Si.

표 1. Si의 물질 상수

Symbol	Contents	Value
m^*	Effective mass of electron	$0.33m_0$
\bar{m}	Effective mass of hole	$0.58m_0$
ρ	Mass density	$2340kg/m^3$
k	Characteristic constant	$4.37 \times 10^{-4} eV/K$
ζ	Characteristic constant	636
\bar{K}	Electromechanical constant	$2.98 \times 10^{-2} m/s$
\bar{v}_s	Speed of sound	$9030 m/s$
$\bar{\epsilon}_s$	Energy gap	$1.424 eV$
E_1	Deformation potential constant	$7 eV$
L_z	Length of well of z direction	$20 \times 10^{-9} m$

양자 전이 과정을 해석하기 위해 전체 QTLW는 $\gamma_{total} \equiv \gamma_{em} + \gamma_{ab}$ 로 표시하였으며, 여기서

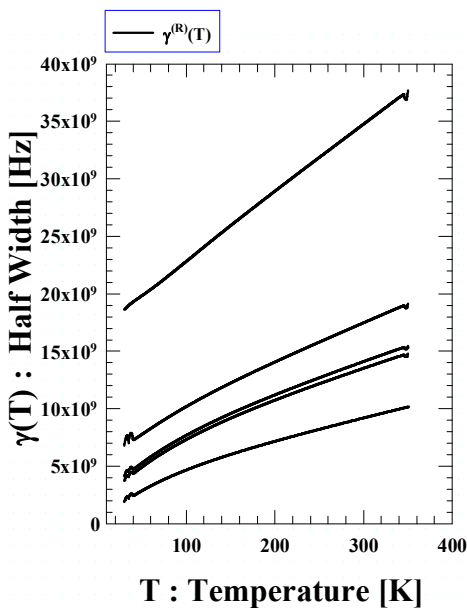


Fig. 1. Temperature dependence of QTLW $\gamma(T)$ of Si, with $\lambda=220, 394, 513, 550$ and $720 \mu m$ (from the top line to the bottom line).

그림 1. 파장 $\lambda=220, 394, 513, 550$ and $720 \mu m$ 에서 Si의 온도에 따른 QTLW의 값($\gamma(T)$)

$\gamma_{em} \equiv \gamma_{0,0}^+ + \gamma_{0,1}^+ + \gamma_{1,0}^+$ 와 $\gamma_{ab} \equiv \gamma_{0,0}^- + \gamma_{0,1}^- + \gamma_{1,0}^-$ 는 전체 포논 방출 및 흡수 전이 과정의 QTLW이다.

그림 1은 Si의 QTLW의 온도 의존성, $\gamma(T)$ 를 나타내고 있다. 그림 1에서 알 수 있는 것과 같이 외부 인가 파장 $\lambda=220, 394, 513, 550$ 및 $720 \mu m$ 전 파장에 대해 온도가 증가함에 따라 증가함을 알 수 있다. 또한 그림 2는 QTLW의 자기장 의존성을 온도 $T = 50, 70, 90, 120$ 및 $210 K$ 에서 나타낸 것으로 자기장의 증가에 따라 증가하는 것을 알 수 있다. 이는 Si의 경우 증가하는 자기장과 증가하는 온도에 따라 포논의 산란 효과가 커진다는 것을 의미한다.

그림 3에 외부 인가 field의 파장 $\lambda=394\mu m$ 에 대한 Si의 QTLW, $\gamma(T)_{total}$, $\gamma(T)_{em}$ 및 $\gamma(T)_{ab}$ 의 온도의 의존성을 나타내었다. QTLW, $\gamma(T)_{total}$, $\gamma(T)_{em}$ 및 $\gamma(T)_{ab}$ 는 온도가 증가함에 따라 증가함을 알 수 있다. 또한 $\gamma(T)_{em}$ 이 $\gamma(T)_{ab}$ 보다 크고 전체 $\gamma(T)_{total}$ 에 더 가깝기 때문에 포논 방출 전이 과정이 포논 흡수 전이 과정보다 우선한다는 것을 의미한다.

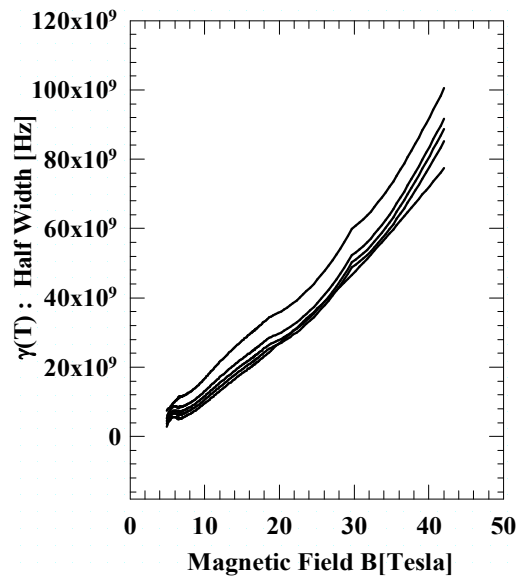


Fig. 2. Magnetic field dependence of QTLW $\gamma(B)$ of Si, with $\lambda=220, 394, 513, 550$ and $720 \mu m$ (from the top line)

그림 2. 파장 $\lambda=220, 394, 513, 550$ and $720 \mu m$ 에서 Si의 자기장에 따른 QTLW의 값($\gamma(B)$)

그림 4에서는 $T=50K$ 에서 Si의 QTLW, $\gamma(B)_{total}$, $\gamma(B)_{em}$ 및 $\gamma(B)_{ab}$ 의 자기장 의존성을 비교 하였다. QTLWs, $\gamma(B)_{total}$, $\gamma(B)_{em}$ 및 $\gamma(B)_{ab}$ 는 자기장이 $28 Tesla < B < 50$ 테슬라 사이에서 $\gamma(B)_{ab}$ 의 경우 자기장이 증가함에 따라 감소하는 것을 알 수 있으나,

$\gamma(B)_{em}$ 의 증가폭이 크서 전체 $\gamma(B)_{total}$ 은 증가하는 것을 알 수 있습니다. 이러한 과정은 다양한 물질의 경우에 따라 다르게 나타날 수 있으며, Si의 경우 그림 3과 4의 결과에서. QTLW 값이 $\gamma(T)_{ab} < \gamma(T)_{em} < \gamma(T)_{total}$ 와 $\gamma(B)_{ab} < \gamma(B)_{em} < \gamma(B)_{total}$ 임을 나타낸다.

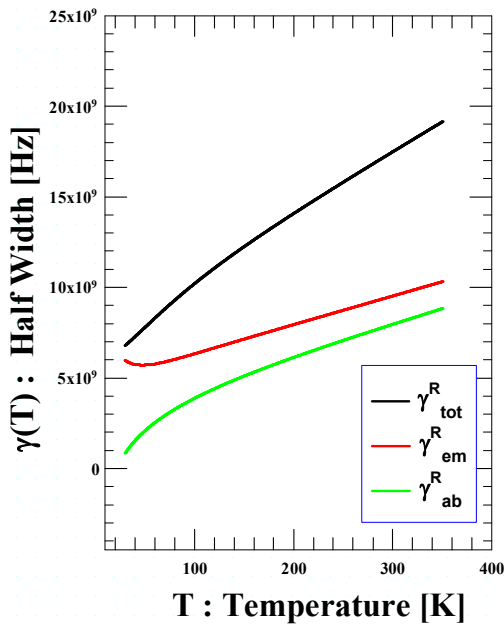


Fig. 3. Comparisons of the temperature dependence of QTLW of Si, $\gamma(T)_{total}$, $\gamma(T)_{em}$ and $\gamma(T)_{ab}$ with $\lambda=394\mu\text{m}$.
 그림 3. 파장 $\lambda=394\mu\text{m}$ 에 있어 Si의 QTLW의 값 $\gamma(T)_{total}$, $\gamma(T)_{em}$ 및 $\gamma(T)_{ab}$ 의 온도의존성

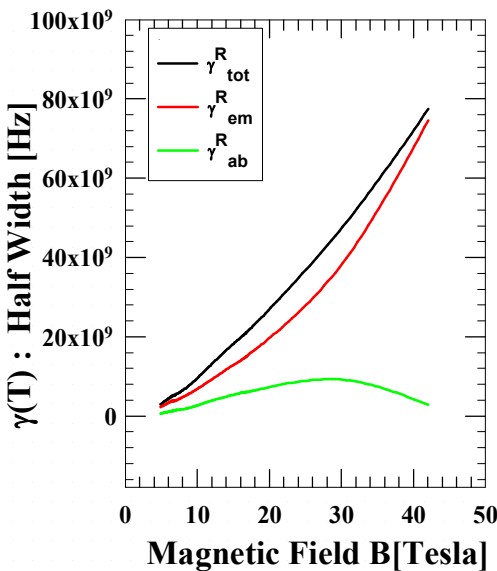


Fig. 4. Comparisons of the magnetic field dependence of QTLW of Si, $\gamma(B)_{total}$, $\gamma(B)_{em}$ and $\gamma(B)_{ab}$ at T=50K.
 그림 4. 온도 T=50K에서 Si의 QTLW의 값, $\gamma(B)_{ab}$ 및 $\gamma(B)_{total}$, $\gamma(B)_{em}$ 의 자기장 의존성

그림 5는 온도 T=50, 70, 90, 120 및 210K에서 외부 인가 필드 파장 $\lambda=393\mu\text{m}$ 에 대한 Si의 QTLS의 흡수력 P(B)의 자기장 의존성을 나타내고 있다. 동일한 그래프에서 QTLS의 라인을 비교하기 위해, $P_{nr}(B)=aP(B)$ 의 값을 도시하였다. 그림 5에 나타낸 바와 같이, P(B)는 온도가 증가함에 따라 증가함을 알 수 있다. 또한 선폭도 온도가 증가함에 따라 증가함을 나타내고 있다. 그림 6에서 최대 흡수 전력의 자기장 의존성을 나타내고 있다. 그림 6의 밑에 있는 것은 T=50K에서 $\lambda=220, 394, 513, 550$ 및 $720\mu\text{m}$ 인 Si의 흡수력(QTLS) P($\Delta\omega$)의 상대 주파수 의존성을 보여준다. 흡수력 (QTLS)의 상대 주파수 의존성의 분석을 통하여 외부 인가 필드의 파장에 대한 흡수 전력의 자기장 의존성을 알 수 있으며 이를 이용한 물질의 실험 조건을 예측할 수 있다.

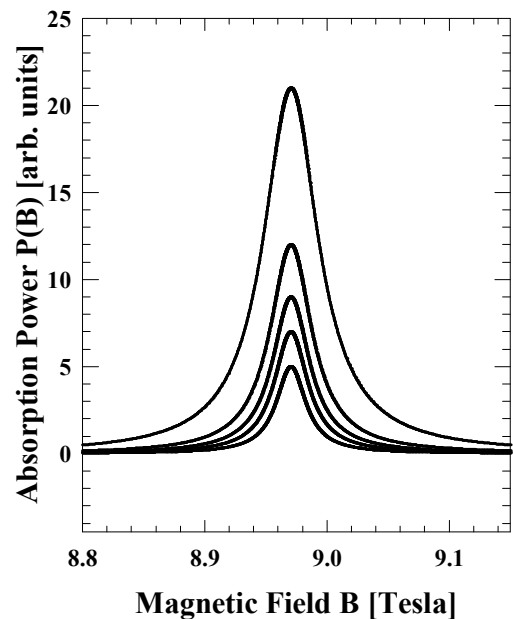


Fig. 5. The Magnetic Field dependence of normalized P(B) (QTLS) of Si with $\lambda=394\mu\text{m}$ the at T=50,70,90,120 and 210K. (from the bottom line to top)
 그림 5. 온도 T=50, 70, 90, 120 및 210K에서 파장 $\lambda=393\mu\text{m}$ 에 대한 Si의 QTLS의 흡수력 P(B)의 자기장 의존성

IV. 결론

양자 전이 과정을 쉽게 해석 할 수 있는 점이 EAPS 이론의 장점이다. 이 연구를 통해 Si의 QTLW와 QTLS가 온도와 자기장이 증가함에 따라 증가하는 특성을 발견하였으며, 또한 우세한 산란 과정이 포논 방출 전이 과정이라는 것을 알 수

있었다. 이 연구의 결과는 상호 작용하는 전자 변형 전위에서의 산란 메커니즘을 실험적으로 분석하는 데 도움이 될 것이다.

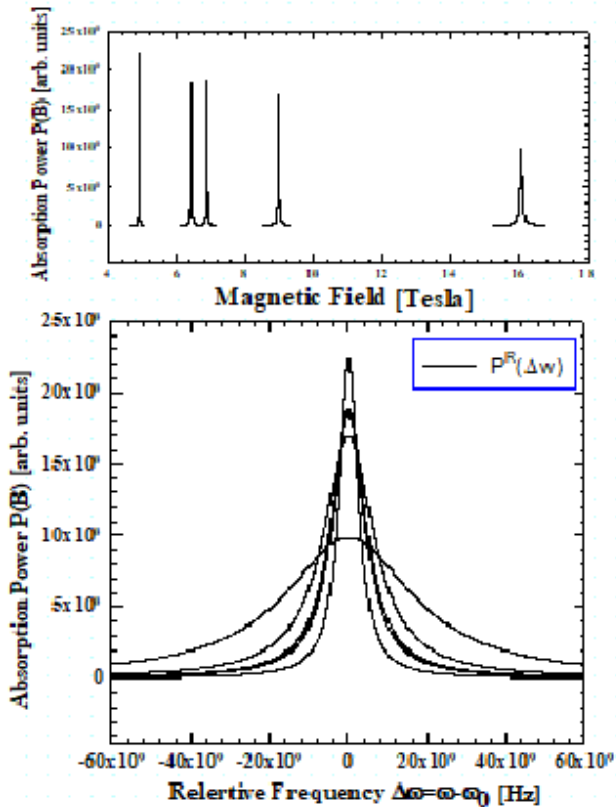


Fig. 6. The relative frequency dependence of (QTLS) $P(\Delta\omega)$ of Si and the magnetic field dependence of the absorption power, $P(B)$ (QTLS) with $\lambda=220, 394, 513, 550$ and $550 \mu\text{m}$ at $T=50\text{K}$.

그림 6. 최대 흡수 전력의 자기장 의존성과 온도 $T=50\text{K}$ 에서 $\lambda=220, 394, 513, 550$ 및 $720\mu\text{m}$ 인 Si의 흡수력(QTLS) $P(\Delta\omega)$ 의 상대 주파수 의존성

References

[1] C. S. Ting, S. C. Ying and J. J. Quinn, "Theory of cyclotron resonance of interacting electrons in a semiconducting surface inversion layer," *Physical Review B*, vol.16, no.12, pp. 5394–5404, 1977. DOI: 10.1103/PhysRevB.16.5394
[2] Wu Xiaoguang, F. M. Peeters and J. T. Devreese, "Theory of the cyclotron resonance spectrum of a polaron in two dimensions," *Physical Review B*, vol.34, no.12, pp.8800–8809, 1986. DOI: 10.1103/PhysRevB.34.8800

[3] P. Grigolini and G. P. Parravidini, "Phonon thermal baths: A treatment in terms of reduced models," *Physical Review B*, vol.25, no.8, pp.5180–5187, 1982. DOI: 10.1103/PhysRevB.25.5180
[4] J. R. Barker, "Quantum transport theory of high-field conduction in semiconductors," *Journal of Physics C: Solid State Physics*, vol.6, no.17, pp.2633–2684, 1973. DOI: 10.1088/0022-3719 /6/17/009
[5] R. Kubo, "Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes. I. General Theory and Simple Applications to Magnetic and Conduction Problems," *Journal of the Physical Society of Japan*, vol.12, no.6, pp.570–586, 1957. DOI: 10.1143/ JPSJ.12.570
[6] H. Mori, "Transport, Collective Motion, and Brownian Motion," *Progress of Theoretical Physics*, vol.33, no.3, pp.423–455, 1965. DOI: 10.1143/PTP.33.423
[7] K. Nagano, T. Karasudani and H. Okamoto, "Reduced Equations of Motion for Generalized Fluxes and Forces in the Continued-Fraction Expansion," *Progress of Theoretical Physics*, vol.63, no.6, pp.1904–1916, 1980. DOI: 10.1143/ PTP.63.1904
[8] R. Zwanzig, "Theoretical basis for the Rouse-Zimm model in polymer solution dynamics," *The Journal of Chemical Physics*, vol.60, no.7, pp.2717–2720, 1960. DOI: 10.1063/1.1681433
[9] V. M. Kenkre, "Integrodifferential Equation for Response Theory," *PHYSICAL REVIEW A*, vol.4, no.6, pp.2327–2330, 1971. DOI: 10.1103/Phys.,Rev.,A.4.2327
[10] S. G. Jo, N. L. Kang, Y. J. Cho, S. D. Choi. "Modeling of the Cyclotron Transition Theory for Quasi-2-Dimensional Electron-Systems by the Isolation-Projection Technique," *J. Korea Phys. Soc. 30*, pp.103–110, 1997.
[11] J. Y. Sug and S. D. Choi. "Quantum transport theory based on the equilibrium density projection technique," *PHYSICAL REVIEW E*, vol.55, no.1, pp.314–321. 1997. DOI: 10.1103/PhysRevE.55.314

- [12] J. Y. Sug and S. D. Choi. "Quantum transition processes in deformation potential interacting systems using the equilibrium density projection technique," *PHYSICAL REVIEW B*, vol.64, no.23, pp.235210, 2001. DOI: 10.1103/PhysRevB.64.235210
- [13] H. Kobori, T. Ohyama, and E. Otsuka, "Line-Width of Quantum Limit Cyclotron Resonance. I. Phonon Scatterings in Ge, Si, CdS and InSb," *Journal for the Physical Society of Japan*, vol.59, no.6, pp.2141-2163, 1989. DOI: 10.1143/JPSJ.59.2141
- [14] J. Y. Sug, S. H. Lee, J. J. Kim, "The magnetic field dependence of the deformation potential materials in the square well confinement potential," *Central European Journal of Physics*, vol.6, no.4, pp.812-824, 2008. DOI: 10.2478/s11534-008-0114-1
- [15] J. Y. Sug, S. H. Lee, J. Y. Choi, G. Sa-Gong, and J. J. Kim, "Magnetic Properties of Optical Quantum Transition Line Shapes and Line Widths of Electron - Piezoelectric Potential Phonon Interacting Materials under Circularly Oscillating Fields," *Japanese Journal of Applied Physics*, vol.47, no.9, pp.7757-7763, 2008. DOI: 10.1143/JJAP.47.7757
- [16] J. Y. Sug, S. H. Lee and J. Y. Choi, "The temperature dependence of quantum optical transition properties of GaN and GaAs in a infinite square well potential system," *Journal of the Korean Physical Society*, vol.54, no.4, pp. 1015-1019, 2009. DOI: 10.3938/jkps.57.1015
- [17] C. M. Wolfe and G. E. Stillman Processes, *Physical Properties of Semiconductors*, Prentice-Hall, 1989.
- [18] D. K. Ferry Process, "Semiconductors," Macmillan, New York, 1991.

BIOGRAPHY

Seok-Min Joo (Member)

1992 : BS degree in Electrical Engineering, Donga University.
 1994 : MS degree in Electrical Engineering, Donga University.
 1997 : PhD degree in Electrical Engineering, Donga University.
 2014~2018 : Professor, Masan University.

Hyun-Chul Cho (Member)

1987 : BS degree in Electrical Engineering, Donga University.
 1986 : MS degree in Electrical Engineering, Donga University.
 1996 : PhD degree in Electrical Engineering, Donga University.
 1994~2018 : Professor, Kyungbuk College.

Su-Ho Lee (Member)

1989 : BS degree in Electrical Engineering, Donga University.
 1991 : MS degree in Electrical Engineering, Donga University.
 1996 : PhD degree in Electrical Engineering, Donga University.
 2009~2018 : Professor, Donga University.