

Fourier 변환을 이용한 ZnCdSe 전이점 연구

윤재진 · 공태호 · 김영동*

경희대학교 이과대학 물리학과 나노광물성 연구실, 서울 130-701

(2007년 11월 1일 받음)

타원편광분석법은 반도체 물질의 광 특성과 전이점 연구에 유용하게 쓰이는 기술이다. 측정된 유전율 함수로부터 전이점을 구하기 위해서 전통적으로 이차 미분 스펙트럼을 이용하여 분석하는데, 이 방법은 high frequency 의 잡음을 크게 증폭시키는 단점이 있다. 본 연구에서는 역 공간 푸리에 변환 (Fourier transform) 을 이용하여 low-, medium-, high-index 의 푸리에 계수로부터 baseline, 정보, high frequency 잡음을 분리하는 방법을 소개하고자 한다. 이 방법을 이용하여 광전자 소자에 폭넓게 사용되는 ZnCdSe 화합물 반도체의 E_1 , $E_1+\Delta_1$ 전이점에 대한 연구를 하여 전통적인 이차 미분법과 비교해 보았다.

주제어 : Fourier 변환, ZnCdSe, 타원편광분석기(ellipsometry), 유전함수

I. 서 론

타원편광분석법(ellipsometry)은 Kramers-Kronig 관계식 없이 반도체 박막 등의 광 특성인 유전율 함수와 두께 등을 정확하게 측정할 수 있는 유용한 기술이다.[1] 측정된 유전율 함수로부터 전이점 연구를 할 때 전통적으로 실 공간에서 이차 미분 스펙트럼으로부터 표준해석 밴드갭 표현 (standard analytic critical point expression) [2,3] 을 이용하여 구한다. 그러나 이 방법은 이차 미분시에 정보에 비해 잡음을 과도하게 증폭시키기 때문에 주의가 필요하다. 잡음을 줄이기 위해서 실 공간에서 스무드닝 작업을 하지만 이 방법 또한 잡음뿐만 아니라 정보도 왜곡시키므로 효과적인 방법이라고는 할 수 없다. 본 연구에서는 역 공간에서의 푸리에 변환 (Fourier transform) 을 통한 잡음 제거 및 전이점 연구를 하였다. 이 방법은 측정된 스펙트럼을 푸리에 변환을 통하여 low-, medium-, high-index 의 푸리에 계수로부터, baseline, 정보, 잡음을 구별하여 high-index 의 잡음을 제거한 뒤 역 푸리에 변환을 통하여 정보부분이 왜곡되지 않고, 고진동수의 잡음이 효과적으로 제거된 스펙트럼을 얻을 수 있으며, 또한 푸리에 계수로부터 전이점의 에너지 값 등의 정보도 결정할 수 있다. 이것은 타원편광분석법의 유전율함수 연구뿐만 아니라, 라만분광법, X-선 회절법등 모든 분야의 스펙트럼의 잡음 제거 및 분석에 응용될 수 있다. 푸리에 변환의 이용의 한 예로 광전자소자로 이용 가능한 ZnCdSe 의 유전율 함수의 잡음

제거와 E_1 , $E_1+\Delta_1$ 전이점의 연구를 하여 기존의 이차 미분법과 비교해 보았다.

II. 이 론

$M(1 \leq j \leq M)$ 개의 데이터를 갖고 $f_j=f_{j+M+1}$ 인 주기함수 f_j 가 있다고 가정한다. 그러면 이 주기함수 f_j 는 다음 식과 같이 역 공간 푸리에 계수 A_n , B_n 또는 진폭 C_n , 위상 ξ_n 으로 정의된다.[4,5]

$$f_j = \sum_{n=0}^{N_{\max}} (A_n \cos n\theta_j + B_n \sin n\theta_j) \tag{1a}$$

$$= \text{Re} \left[\sum_{n=0}^{N_{\max}} (A_n - iB_n) e^{in\theta_j} \right] \tag{1b}$$

$$= \text{Re} \left[\sum_{n=0}^{N_{\max}} C_n e^{-i\xi_n} e^{in\theta_j} \right], \tag{1c}$$

$$\theta_j = \frac{2\pi}{M}(j - j_o), \tag{1d}$$

$$N_{\max} = (M/2). \tag{1e}$$

이렇게 주기함수 f_j 를 차수 n 에 대해 전개하여 우리가 원하는 정보보다는 높은 차수를 가지는 잡음부분에 대한 푸리에 계수를 제거하여 다시 역변환을 함으로써 잡음이 없는 스펙트럼을 구할 수 있다.

* [전자우편] ydkim@khu.ac.kr

유전율 함수를 표현하는데 일반적으로 주로 이용하는 Lorentzian line shape 을 푸리에 계수로 표현하면 다음과 같다.[4,5]

$$\frac{C e^{i\beta}}{(E - E_g + i\Gamma)^\mu} \approx \sum_{n=0}^{N_{max}} C_n e^{-i\xi_n} e^{in(\theta - \theta_o)}, \quad (2a)$$

$$\theta = E / \Delta E, \quad (2b)$$

$$\theta_o = E_o / \Delta E, \quad (2c)$$

$$\Delta E = \frac{E_M - E_i}{M - 1} \frac{M}{2\pi}, \quad (2d)$$

$$C_n = \frac{C_n^{\mu + \kappa - 1} e^{-n\Gamma/\Delta E}}{\Delta E^{\mu + \kappa} \Gamma(\mu)}, \quad (2e)$$

$$\xi_n = -(\mu - \kappa) \frac{\pi}{2} - \beta + n(E_g - E_o) / \Delta E. \quad (2f)$$

이 변환된 계수로부터 Lorentzian line shape 의 모양과 밴드갭 값을 구할 수 있다. 또한 푸리에 변환은 주기함수에 대한 것이므로, 측정된 스펙트럼이 주기적으로 계속 반복 된다고 가정하여 주기함수로써 푸리에 변환을 하게 된다. 그런데, 측정된 유전율 함수와 같은 스펙트럼은 시작과 끝의 값이 일반적으로 연속적이지 않다. 이는 푸리에 변환을 통해 계수를 얻을 때 일종의 잡음처럼 작용한다. 이 문제점을 해결하기 위해서 저차원의 polynomial 함수들을 곱해서 불연속적인 문제를 해결한 뒤 푸리에 변환을 통해 얻은 계수에서 더해진 저차원의 polynomial 의 푸리에 계수를 제거하여 원하는 정보만을 포함하는 푸리에 계수를 얻는 방법을 이용한다.[5]

III. 결과 및 고찰

그림 1.은 Zn_{0.75}Cd_{0.35}Se 의 유전율 함수 이다.[6] E₁ 과 E₁+Δ₁ 밴드갭을 구하기 위해서 이차 미분을 이용하는데, 그림 2.처럼 이차 미분 스펙트럼에서 high frequency 의 잡음이 증폭되어 밴드갭을 결정하는데 부정확성을 줄 수 있어 주의가 필요하다. 본 연구에서는 이 잡음을 효과적으로 줄이기 위해서 푸리에 변환을 수행하였다. 그림 1.에 표시된 E₁ 과 E₁+Δ₁ 밴드갭 구간인 3.44-5.68 eV 부분만 식 2a 를 이용하여 푸리에 변환을 하여 차수 n 에 대한 진폭 C_n 과 위상 ξ_n 의 푸리에 계수를 얻을 수 있었고 그림 3.에 각각 실선과 점선으로 표현하였다. 이 변환을 통해서 차수

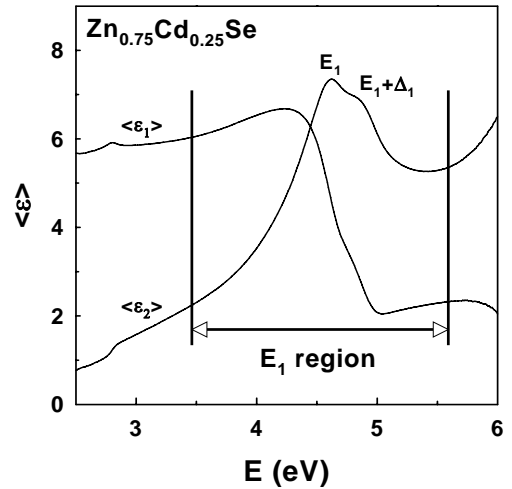


그림 1. Zn_{0.75}Cd_{0.35}Se 의 유전율 함수.

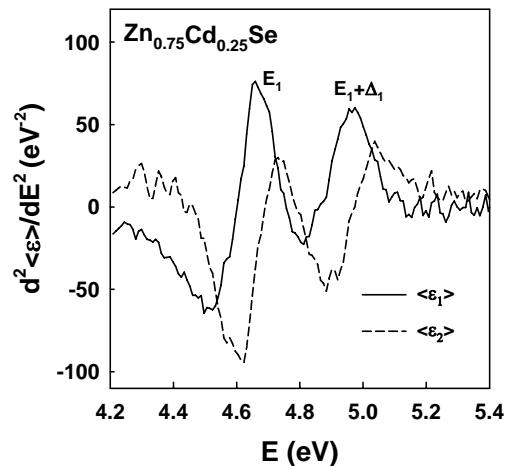


그림 2. Zn_{0.75}Cd_{0.35}Se 의 유전율 함수의 이차미분.

n 이 1-6 은 base line, 7-45 은 정보, 46 이상의 high frequency 잡음을 구별할 수 있었다. 여기서 차수 46 이상의 계수는 제거하고 다시 역 푸리에 변환을 통하여 잡음이 제거된 스펙트럼을 얻을 수 있었다. 이렇게 얻어진 유전율 함수를 이차 미분하여 본 결과 그림 4.에서 보여 지는 것과 같이 E₁ 과 E₁+Δ₁ 밴드갭을 정보의 왜곡 없이 잡음만 효과적으로 줄일 수 있음을 보였다.

또한 푸리에 변환법은 식 2 에서 얻어진 푸리에 계수 진폭 C_n 과 위상 ξ_n 으로부터 Lorentzian line shape 의 계수 C, Γ, E 를 회귀 분석법을 이용해 fitting 하여 값도 얻을 수 있다. 그림 5.와 그림 6.의 점은 각각 Zn_{0.88}Cd_{0.12}Se 의 E₁ 과 E₁+Δ₁ 밴드갭 구간에서의 푸리에 계수 C_n 과 위상 ξ_n

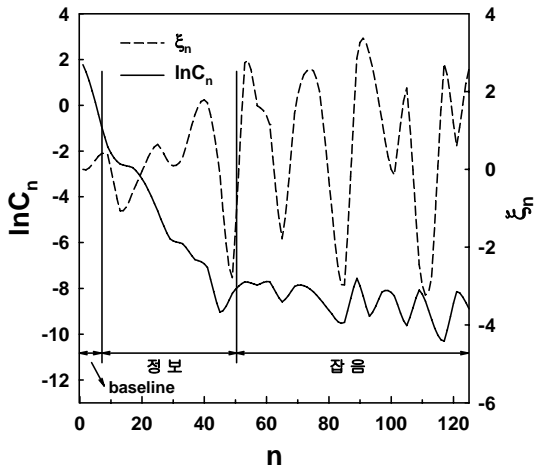


그림 3. $Zn_{0.75}Cd_{0.35}Se$ 의 유전율 함수의 역 공간 푸리에 변환.

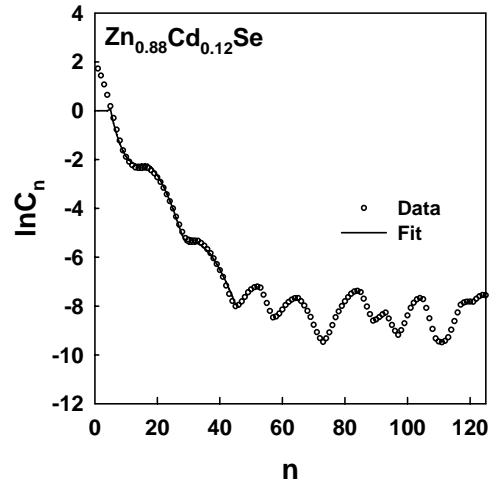


그림 5. $Zn_{0.88}Cd_{0.22}Se$ 의 유전율 함수의 역 공간 푸리에 변환 계수 $ln C_n$.

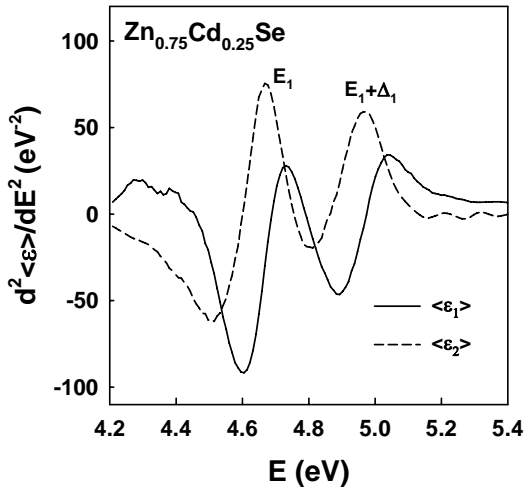


그림 4. 잡음이 제거된 $Zn_{0.75}Cd_{0.35}Se$ 의 유전율 함수의 이차미분.

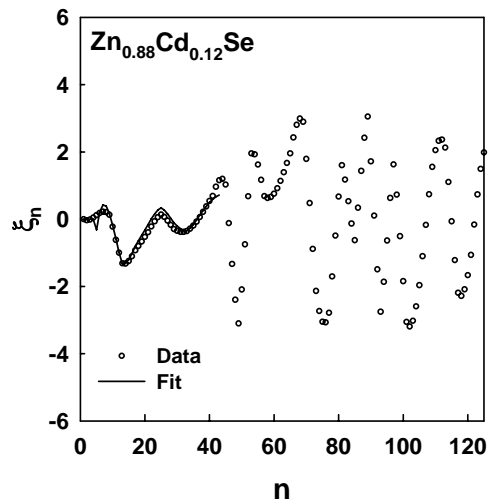


그림 6. $Zn_{0.88}Cd_{0.22}Se$ 의 유전율 함수의 역 공간 푸리에 변환 계수 ξ_n .

이고, 실선은 정보부분만을 선택하여 회기분석법으로 fitting 하여 얻어진 값이다. 그 결과로부터 $Zn_{0.88}Cd_{0.12}Se$ 의 E_1 과 $E_1+\Delta_1$ 밴드갭의 Lorentzian line shape 의 계수를 얻을 수 있었다. 이러한 푸리에 분석을 Zn 함량 $x=0.00, 0.21, 0.58, 0.75, 1.00$ 인 유전율 함수에 대해서도 수행하여 밴드갭 값을 구하였다. 이렇게 구해진 밴드갭 값의 정당성을 판단하기 위해 실 공간에서 이차 미분 스펙트럼의 표준해석 밴드갭 표현으로 구한 밴드갭 값과 비교해 보았다. 그 밴드갭 값의 결과 비교는 표 1에 있고 실 공간에서 분석한 값과 오차 범위 이내에서 일치함을 보았고, 역 공간 푸리에 분석법에 의해 밴드갭 값을 구할 수 있음을 보았다.

| Zn 함량 | 푸리에 분석 | | 실 공간 이차미분 분석 | |
|--------------------|--------|----------------|--------------|----------------|
| | E_1 | $E_1+\Delta_1$ | E_1 | $E_1+\Delta_1$ |
| $x=0.00$ (CdSe) | 4.316 | 4.601 | 4.313 | 4.567 |
| $x=0.21$ | 4.379 | 4.616 | 4.347 | 4.622 |
| $x=0.58$ | 4.522 | 4.820 | 4.492 | 4.778 |
| $x=0.75$ | 4.631 | 4.964 | 4.615 | 4.905 |
| $x=0.88$ | 4.747 | 5.049 | 4.726 | 5.002 |
| $x=1.00$ (ZnSe) | 4.843 | 5.137 | 4.835 | 5.099 |

표 1. 푸리에 변환과 실 공간 분석법에 의한 밴드갭 값의 비교

IV. 결 론

본 연구에서는 high frequency 잡음을 효과적으로 줄일 수 있는 역 공간 푸리에 변환법에 대해 소개하였다. 이 방법은 스펙트럼을 푸리에 변환을 하여 차수 n 에 대해 얻어진 푸리에 계수로부터 baseline, 정보, 잡음을 분리하여 잡음만을 효과적으로 제거 할 수 있는 기술이다. 이 방법을 통해 타원편광분석법으로 측정된 $Zn_{0.75}Cd_{0.35}Se$ 의 유전율 함수의 E_1 과 $E_1+\Delta_1$ 밴드갭 영역의 잡음을 효과적으로 제거할 수 있음을 보여주었다. 또한 얻어진 푸리에 계수로부터 밴드갭 값도 결정할 수 있는데, 그 예로 ZnCdSe 의 E_1 과 $E_1+\Delta_1$ 밴드갭을 구하여 전통적으로 사용하던 표준해석 밴드갭 표현법과 비교하여 오차범위 내에서 정확한 밴드갭 값을 구 할 수 있었다. 이러한 잡음 제거와 밴드갭 값을 결정하는 역 공간 푸리에 분석 방법은 타원편광분석법에서 측정된 유전율 함수뿐만 아니라 high frequency 잡음을 갖는 모든 스펙트럼 분석에 유용하게 사용되어질 것이다.

감사의 글

이 논문은 2005년 정부재원(교육인적자원부 학술연구조성사업비)으로 한국 학술진흥재단의 지원을 받아 연구되었음.(KRF-2005-015-C00144)

참고문헌

- [1] D. E. Aspnes and A. A. Studna, *Appl. Opt.* **14**, 220 (1975).
- [2] M. Cardona, *Modulation Spectroscopy*, Suppl. Vol. **11**, (Academic, New York, 1969).
- [3] D. E. Aspnes, *Handbook on Semiconductors*, Vol. **2**, (North-Holland, Amsterdam, 1980). p.109
- [4] D. E. Aspnes, *Solar Energy Materials and Solar Cells* **32**, 413 (1994).
- [5] S. D. Yoo and D. E. Aspnes, *J. Appl. Phys.* **89**, 8183 (2001).
- [6] Y. D. Kim, M. V. Klein, S. F. Ren, and Y. C. Chang, *Phys. Rev. B* **49**, 7262 (1994).

Study on critical point of ZnCdSe by using Fourier analysis

J. J. Yoon, T. H. Ghong, and Y. D. Kim*

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

(Received November 1 2007)

Spectroscopic ellipsometry is an excellent technique for determining dielectric function. To obtain critical point energy, standard analytic critical point expression is used conventionally for second derivatives of dielectric function which might increase high frequency noise than signal. However, reciprocal-space analysis offers several advantages for determining critical point parameters in optical and other spectra, for example the separation of baseline, information, and high frequency noise in low-, medium-, high-index Fourier coefficient, respectively. We used reciprocal Fourier analysis for removing noise and determining critical point of ZnCdSe alloy.

Keywords : Fourier transform, ZnCdSe, ellipsometry, dielectric function

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