

The development of the photoreflectance program for the analysis of semiconductor optical properties

Sang-Hoon Shin*, Geun-Hyeong Kim*

*Professor, Dept. of Aero Mechanical Engineering, Kyungwoon University, Gumi, Korea

*Professor, Dept. of Aero Mechanical Engineering, Kyungwoon University, Gumi, Korea

[Abstract]

In this paper, a computer simulation program was developed to interpret the results measured by photoreflectance spectroscopy. The developed program is implemented so that the user can easily change the factors required for optical modulation characteristic interpretation, and the result of the value can be checked simultaneously with the actual measurement result. The results obtained by photoreflectance spectroscopy are obtained by mixing a third derivative function form (TDFF) modulated around a bandgap with a Franz-Keldysh oscillation (FKO) signal due to an electric field at a surface and an interface higher than the bandgap. Through the computer simulation program, the optical characteristics that appear in the GaSb Epi layer formed as a single layer were analyzed, and very useful results were obtained by specializing in optical modulation analysis. In addition, a Fast Fourier Transform (FFT) analysis tool was added to facilitate frequency characteristics analysis of FKO.

▶ **Key words:** Photoreflectance, Simulation, TDFF, FKO, FFT

[요 약]

광반사 변조 분광법에서 측정된 결과를 해석하기 위하여 전산모사 프로그램을 개발하였다. 개발된 프로그램은 광반사 변조 분광 특성해석에 필요한 인자들을 사용자가 손쉽게 바꿀 수 있으며, 그 값에 따른 결과를 실제 측정 결과와 동시에 확인할 수 있도록 구현하였다. 광반사 변조 분광법에서 얻어지는 결과는 밴드갭 주변에서 변조되어 나타나는 TDFF(Third Derivative Function Form)와 밴드갭보다 높은 에너지에서 나타나는 표면 및 계면에서의 전기장에 기인한 FKO(Franz-Keldysh Oscillation)신호가 혼합하여 나타난다. 전산모사 프로그램을 통하여, 실제로 단일층으로 형성된 GaSb Epi 층에서 나타나는 광변조 특성에 대하여 해석하였으며, 광변조 분석에 특화되어 매우 유용한 결과를 얻을 수 있었다. 또한, FFT(Fast Fourier Transform) 해석 Tool을 추가하여 FKO의 주파수 특성분석을 보다 용이하게 하였다.

▶ **주제어:** 광반사 변조 분광법, 전산모사, TDFF, FKO, FFT

-
- First Author: Sang-Hoon Shin, Corresponding Author: Geun-Hyeong Kim
 - *Sang-Hoon Shin (shshin@ikw.ac.kr), Dept. of Aero Mechanical Engineering, Kyungwoon University
 - *Geun-Hyeong Kim (ghkim@ikw.ac.kr), Dept. of Aero Mechanical Engineering, Kyungwoon University
 - Received: 2022. 07. 07, Revised: 2022. 08. 16, Accepted: 2022. 08. 17.

I. Introduction

반도체 소자의 응용은 점점 그 범위가 넓어지고 있으며, 이는 다양한 응용방법이 새롭게 개발되거나 새로운 물질이 적용됨으로써 가능해 지고 있다.

반도체의 응용성 확대는 Silicon과 같은 범용의 반도체 물질 뿐만아니라, GaAs계열의 III-V화합물, GaN계열의 III-N 계열등의 물질의 응용등으로 확대되어 가고 있다. 이러한 물질의 확장은 다이오드, 트랜지스터와 같은 전자소자 이외에 LED(Light Emitting Diode), LD(Laser Diode) 및 PD(Photo Detector)와 같은 다양한 광소자등으로 발전하고 있다.

반도체의 응용은 반도체가 가지고 있는 고유의 전기광학적 특성을 이용한 것으로, 화합물반도체의 경우, 화합물 내의 조성의 변화와 이종의 화합물 계면의 미세한 특성의 변화를 줌으로써 원하는 특성을 얻어지게 할 수 있다. 따라서, 이러한 반도체 물성의 변화에 따른 특성의 변화를 확인하고, 응용성에 적합한 특성을 확인하는 것은 무엇보다 중요하다.

반도체의 전기/광학적 측정 방법은 반도체 응용의 범위가 넓어짐에 따라 많은 발전을 이루고 있으며, 광학적으로 이를 확인하는 방법은 비파괴적이고, $\mu\text{m} \sim \text{nm}$ 의 범위내에서 변화하는 반도체의 특성을 매우 효과적으로 분석하고, 해석할 수 있는 기반을 제시하고 있다.

특히, 본 논문에서 다루고자 하는 광반사 변조 분광법(photoreflectance)은 반도체 벌크뿐만 아니라 표면 근처의 나노구조(표면, 계면, 이질구조 등)를 포함하여 표면 근처의 실제 구조의 해석 및 성장/가공의 특성을 연구하고 특성화하는 강력한 실험 기법임이 입증되었다[1-3].

반사 변조 분광 측정에서 변조를 활용하는 방법은 샘플 또는 실험 장치의 일부 매개변수를 주기적으로 변화시키고 광학적 특성에서 그에 상응하는 정규화된 변화를 측정함으로써 쉽게 수행될 수 있다. 입사 빔의 파장, 샘플 온도, 가해진 응력 또는 외부에서 가해진 자기장과 전기장을 포함한 다양한 파라미터들을 변조 방법에 이용할 수 있다.

가장 보편적인 방법으로는 Laser를 이용한 비접촉 전기장 변조 스펙트럼을 분석하는 것으로 본 연구에 기본적으로 사용된 방법이다. 이것은 표준 전기변조 기법에 대한 대안으로써, 광 변조는 전기장 변조법으로는 측정하기 힘든 반절연 기판에 대해서도 측정이 가능하기 때문이다. 또한, 도핑된 기판을 가진 샘플을 사용할 수 있더라도 전기장 변조법은 샘플을 식각하거나 실질적인 변조를 위해 쇼트키 접촉체 또는 전해질을 사용해야 한다. 그러므로 기본

적으로 내부 내장 전기장의 광 유도 변화에 의한 전기장 변조를 기반으로 많은 연구가 되어 왔다[4,5].

그림 1은 본 연구에 사용된 광반사 변조 분광 측정에 대한 실험 장치도를 나타내고 있다. 광반사 변조 분광 측정은 그 측정의 특수성으로 인해 상용화 장비로 구현하기 힘들고, 아직은 범용적으로 활용이 되지 않음에 따라, 광학 측정이 가능한 전문적인 실험실에서 가능한 상황이다.

측정된 data의 해석은 주로 origin, matlab과 같은 상용화된 소프트웨어를 이용하여 해석해 왔다. 하지만, 기존의 결과 해석에서 광반사 변조 분광 스펙트럼을 설명/해석하는 수식에 필요한 인자(parameter)가 너무 많음으로 인해 상용프로그램을 사용할 경우, 인자들의 초기값 선택시 오류가 있을 경우, 실제 결과와 많은 오차를 발생시킴으로 인해 원하는 결과를 얻는데 상당한 시간적 소모와 많은 어려움을 발생하게 된다.

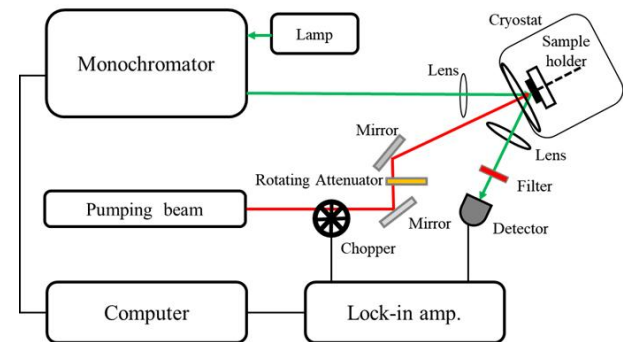


Fig. 1. Schematic diagram of photoreflectance experimental set-up

본 연구에서는 광반사 변조 분광 스펙트럼 측정 결과를 전산모사(simulation)와 fitting까지 가능하게 하여, 샘플의 특성을 파악할 수 있도록 개발하고자 하였다.

실험 결과 스펙트럼 분석을 함에 있어 그동안 많은 시간이 소요되었던 초기치의 값에 따른 결과의 편차를 줄이기 위하여, 결과를 미리 예측할 수 있도록 Simulation을 우선 수행하고, 유사한 결과를 가지는 parameter를 우선적으로 정한 다음, fitting함으로 인해 결과의 오류를 최소화 하고, 실제 측정 결과에 가장 근접한 fitting 결과를 얻을 수 있는 방법을 개발하였다. 본 프로그램 개발의 결과를 확인하기 위하여, n-type GaSb 기판위에 성장된 두께 1 μm 의 undoped GaSb 에피층에 대해 광반사 변조 분광 스펙트럼을 측정하였다.

II. Preliminaries

광 반사 변조 분광법은 반도체의 광학적 성질을 통해 여러 가지 물성을 얻을 수 있어서 광범위하게 쓰이는 측정 방법 중 하나이다. 물질의 특성을 직접적으로 측정하는 대신 외부로부터 특정 매개인자를 주기적으로 인가하여, 샘플에 작은 섭동(perturbation)을 일으키고, 이때 샘플에서 나타나는 광학적 상수의 변화량을 측정하는 것을 변조 분광법(modulation spectroscopy)이라 한다. 이렇게 얻어지는 신호는 큰 변화 없이 나타나는 광학적 물리량에 비해 급격하게 비선형적으로 변화하는 미분형의 신호로 나타나게 된다. 섭동을 주기 위해 주기적으로 인가할 수 있는 방법으로는 전기장, 빛, 온도, 압력 등을 이용할 수 있다. 이 중 빛에 의한 섭동으로 시료의 전기장을 변화시키고, 이에 따른 반사율의 변화를 측정하는 방식을 광반사 변조 분광학(photoreflectance: PR)이라 한다.

전기장 섭동에 의한 반사율의 변화는 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{R_{off} - R_{on}}{R_{off}} \quad (1)$$

여기서 R_{off} , R_{on} 은 각각 변조빔이 샘플에 입사될 때와 그렇지 않을 때의 반사율을 나타낸다. 샘플 표면에 발생한 전기장에 의한 반사율 변화는 샘플 표면 물질의 복소 유전함수 $\epsilon = \epsilon_1 + i\epsilon_2$ 를 이용해서 구할 수 있다. 한편 전기장 섭동에 의한 반사율의 변화는 다음과 같다[6].

$$\frac{\Delta R}{R} = Re[(\alpha - i\beta)(\Delta\epsilon_1 + i\Delta\epsilon_2)] \quad (2)$$

여기서 α, β 는 Seraphin 계수이다.

한편 전기장에 의해 변화하는 복소 유전함수의 M_0 임계점에서의 변화는 실수부와 허수부를 모두 고려하면 다음과 같이 나타난다[7].

$$\Delta\epsilon(\hbar\omega, F) = \frac{B}{\hbar\omega} \frac{1}{\theta^2} \left[G\left(\eta + i\frac{\Gamma}{\hbar\theta}\right) + iF\left(\eta + i\frac{\Gamma}{\hbar\theta}\right) \right] \quad (3)$$

$G(\eta), F(\eta)$ 는 electro-optic 함수로 다음과 같이 정의된다[8,9].

$$G(\eta) = \pi [Ai'(\eta)Bi'(\eta) - \eta Ai(\eta)Bi(\eta)] + (\eta)^{1/2}u(\eta) \quad (4)$$

$$F(\eta) = \pi [Ai'^2(\eta) - \eta Ai^2(\eta)] + (-\eta)^{1/2}u(-\eta) \quad (5)$$

여기서, Ai, Bi는 Airy 함수이며, Ai'는 Ai를 미분한 함수이고, $\hbar\theta$ 는 계의 섭동 특성에너지, $\eta = (\hbar\omega_0 - \hbar\omega)/\hbar\theta$, Γ 는 Lorentzian 평탄 인자(broadening parameter)이다. 위 식을 통해 구한 반사율의 변화는 크게 표면 및 계면 전기장의 세기가 작을 때와 클 때로 나누어 각각 근사 함수(asymptotic form)를 구할 수 있고 다음과 같다.

1. 저 전기장 영역($\hbar\theta < \Gamma/3$)

그림 2은 저 전기장 영역에서 임계점 주위에서의 외부 전기장 인가에 의한 유전함수 허수부의 변화를 보여주고 있다. 전기장의 섭동에 의해 나타나는 허수부는 3차 미분형으로 나타남을 알 수 있다.

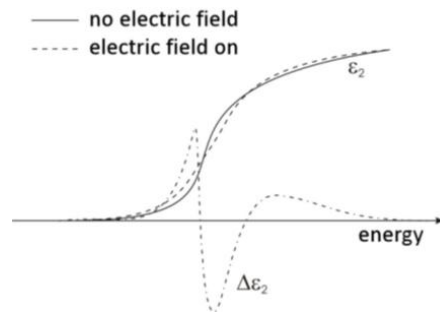


Fig. 2. Dielectric function imaginary part (ϵ_2) and its changes ($\Delta\epsilon_2$) due to the electric field. ref.[7]

외부 전기장의 세기가 약할 경우($\hbar\theta < \Gamma/3$), 반사율의 변화는 3차 미분형 함수(third derivative function form: TDF) 형태로 나타난다[2,10].

$$\frac{\Delta R}{R} = Re \left[\sum C e^{i\phi} (E - E_0 + i\Gamma)^{-n} \right] \quad (6)$$

여기서, C 는 진폭, ϕ 는 위상, E_0 는 밴드갭 에너지, Γ 는 평탄인자를 나타낸다. 그리고, 지수 n 은 임계점의 형태(critical point type)에 따라 다르며, 엑시톤, 3차원 및 2차원 밴드갭 천이에 대해 각각 $n=2, 2.5, 3$ 의 값을 가지게 된다.

2. 고 전기장 영역($\hbar\theta > \Gamma/3$)

전기장의 세기가 커질수록, 즉 $\hbar\theta > \Gamma/3$ 일 때, 밴드갭 에너지(E_0)보다 큰 영역에서는 진동형태의 신호가 나타나며, 이를 Franz-Keldysh oscillation(FKO)라고 한다.

그림 3은 고 전기장일 때, 유전함수 허수부의 변화를 나타내고 있으며, 밴드갭 위로 진동형태의 변화를 보여주고 있다. 이렇게 나타나는 신호는 다음과 같은 점근적(asymptotic) 형태로 나타난다[11,12].

$$\frac{\Delta R}{R} = \cos \left(\frac{4}{3} \left(\frac{E - E_0}{\hbar\theta} \right)^{3/2} + \frac{\pi(d-1)}{4} \right); E > E_0 \quad (7)$$

여기서, d 는 임계점 차원을 의미하며, 직접 천이에 대해서는 3의 값을 가진다. $\hbar\theta$ 는 섭동에 대한 특성에너지이며 $(\hbar\theta)^3 = e^2 F_i^2 \hbar^2 / 2\mu$ 이다. e 는 전하의 전하량, \hbar 는 플랑크 상수이며, μ 는 유효질량 그리고, F_i 는 내부 전기장이다.

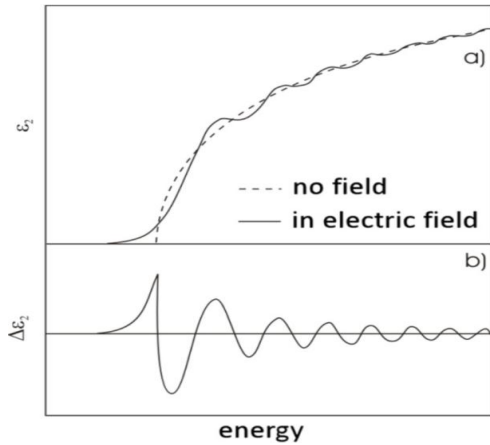


Fig. 3. Franz-Keldysh oscillations in the imaginary part of the dielectric function a) and in its change b) according to ref. [13]

고 전기장 영역에서 나타나는 진동형태의 FKO 신호를 나타내는 식(9)에서 오른쪽의 \cos 항은 주기적인 진동을 의미하므로 $\cos(2\pi fx + \phi)$ 형태의 특정 주파수를 가지는 주기함수로 표현할 수 있다. 이 주기함수를 이용하여 식(9)의 \cos 내의 항 $4/3(\hbar\theta)^{3/2}$ 을 주파수에 대한 수식으로 정리하면 다음과 같다.

$$\frac{4}{3}(\hbar\theta)^{-\frac{3}{2}} = 2\pi f \tag{8}$$

$$f = \left(\frac{2}{3\pi}\right)(\hbar\theta)^{-\frac{3}{2}} = \left(\frac{2}{3\pi}\right)\left(\frac{e^2 F_i^2 \hbar^2}{2\mu}\right)^{-\frac{1}{2}} \tag{9}$$

$$= \left(\frac{2}{3\pi}\right)\left(\frac{1}{e\hbar}\right)(2\mu)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{F_i}$$

주파수 f 는 FFT(Fast Fourier Transform)를 통해서 고유의 진동수를 확인 할 수 있으며, 따라서 FFT를 이용하여 f 를 구하게 되면, 물질의 내부 전기장을 얻을 수 있게 된다.

III. Development and results

앞서 살펴본 것과 같은 광변조 신호는 반도체 물질이 단일 구조일 경우에도 주 신호와 밴드갭 이상에서의 FKO 신호가 일반적으로 동시에 나타나며, 여기에 얇은 박막의 층이 성장되어 있을 경우, 두 개 이상의 층에서 나타나는 신호들이 서로 중첩되어 매우 복잡한 신호를 나타내게 된다. 두 개의 층 이상에서 나타나는 신호에 대해서 각각 신호를 구분하여 이를 해석하는 것은 기존의 수치해석 프로그램인 Origin, Matlab등 상용 프로그램에 이론 수식을 이용하여 해석하더라도 매우 복잡한 과정을 거쳐야 해석이 가

능하였다. 이러한 분석과정의 어려움을 해결하기 위하여 광변조 신호 해석을 위한 전산모사 프로그램을 C#을 사용하여 제작하였으며, 아래 그림5와 같은 window OS에서 구동이 가능한 simulation 프로그램을 완성하였다.

개발된 프로그램은 크게 네 부분으로 나누어져 있으며, 각각 Data 불러오기/저장하기(a), data를 가시화하고, Simulation/fitting을 목적에 따라할 수 있는 기능 선택창(b), data를 전체적으로 확인하고, 처리할 수 있는 main 창(c) 그리고, data 처리 및 분석을 위한 창(d)으로 나누어진다.

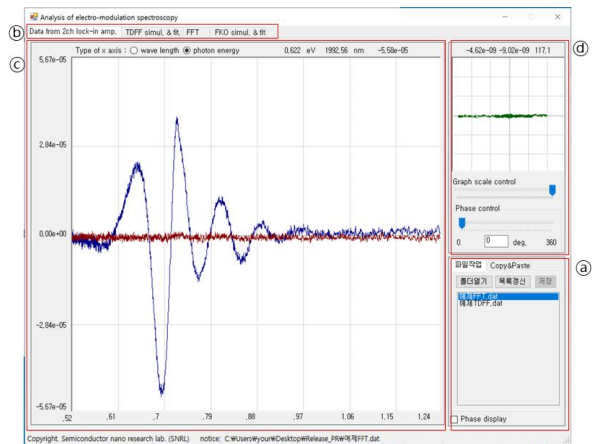


Fig. 4. The electro-modulation spectroscopy simulator for analysis of the multi-layered semiconductor materials.

그림 4에 ㉑를 통해 분석하고자 하는 data를 불러오는 것이 첫 번째 단계이며, 이렇게 data를 불러오면 ㉒)창에 data가 나타나게 된다. 불러온 data는 data 처리 및 simulation 기능을 수행하는 주요 화면 ㉓를 통해 필요한 단계를 진행할 수 있게 된다. ㉔를 통해 선택할 수 있는 주요화면은 측정 data를 확인하는 “Data from 2ch lock-in amp.”, 광변조 주 신호를 simulation 하는 “TDFD simul & fit.”, 각 광변조의 밴드단 이상에서의 주파수를 찾기위한 “FFT”화면 및 FKO신호에 대한 분석을 위한 “FKO simul & Fit”의 4개의 화면으로 구성하였다.

그림 4는 이 중 data를 불러와서 확인하는 창에 대해 나타내었고, Lock-in에서 측정된 90도 위상 차이를 가진 두 개의 광변조 신호를 파장 및 에너지에 대한 강도로 표현할 수 있도록 한 화면 ㉒)에서 90도 위상 차이를 X와 Y로 나타내어 각각의 크기를 표시하도록 하여 위상간 대응의 변화를 확인할 수 있는 X-Y Phase 그래프 ㉓)를 확인할 수 있도록 하였다. 이를 시각적으로 상세히 확인할 수 있도록 그래프의 크기를 확대 축소할 수 있는 scale bar와 phase를 다르게 하여 볼 수 있는 phase control bar를

위치시켰으며, 이를 통해 X-Y phase 그래프를 통해 신호의 위상분석을 할 수 있도록 하였다.

최근 들어, 반도체 소자의 고기능화를 위해 소자의 구조가 단일층에서 양자층, 양자점등으로 점점 복잡해 짐에 따라 광변조 신호의 해석이 복잡해지고, 이에 따라 구조해석을 보다 상세하게 하기 위하여 위상분석을 통한 해석이 점점 중요해지고 있으며, 이에 대한 연구결과들이 많아지고 있는 추세이다. 따라서, 본 프로그램을 이용하게 되면, 향후 복잡한 구조에 대한 해석을 보다 정밀하게 수행할 수 있을 것으로 사료된다.

1. TDFF(Third Derivative Function Form)

측정된 신호에 대한 해석은 우선 주된 광변조 신호의 해석에 있다. 본 프로그램은 least square법을 이용한 fitting까지 구현한 것이며, 실제 fitting에서 결과값의 발산의 오류를 최소화하기 위하여, 초기값의 설정을 쉽게 인지하도록 각 parameter의 입력과 동시에 simulation이 되도록 하였다.

초기 화면에서 data 불러오기가 실행이 되면, 그림 4와 같이 광반사 변조 분광법에 의해 측정된 결과가 그래프에 나타내어지게 된다. 여기서, data 분석을 위해 data를 초기의 X와 Y 두 개 위상을 가진 data에서 X 위상에서 최대의 결과가 나올 수 있도록, 우측의 위상 변화 bar를 변화시키게 되면, Y값이 0에 가까운 최소값을 가지면서 X방향으로 최대의 진폭을 가진 data를 얻을 수 있게 된다.

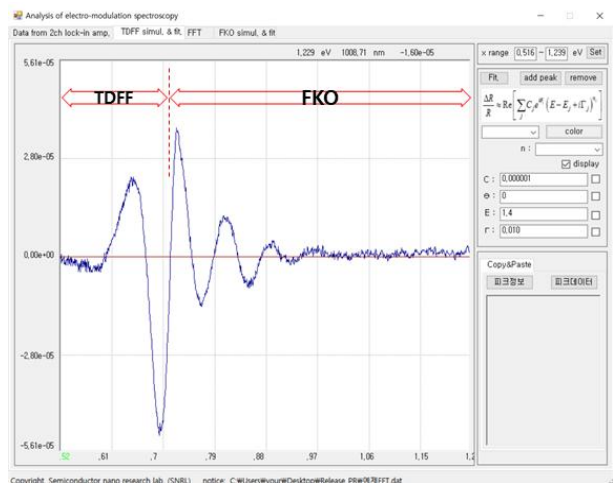
위상에 따른 분석을 필요로 할 경우에는 특정 위상값에서 X와 Y의 값을 각각 다르게 가지게 하여, 분석을 진행할 수 있지만, 여기서는 프로그램 개발과 결과 활용 전반에 대해 설명하기 위하여, 이부분은 생략하도록 한다. 그림 4에서는 측정시, 최적조건이 잘 맞춰진 경우로 위상 0도에서 X가 최대치의 진폭으로 data가 얻어진 경우를 나타내고 있다. 이 초기조건을 설정한 후, 우선 광반사 변조 신호의 주 신호인 TDFF신호에 대해 분석을 진행하게 되는데, 이때 그림 4의 ㉔에서 “TDFF simul. & Fit”을 클릭하게 되면 그림 5(a)와 같은 창으로 바뀌게 된다.

그림에서 볼 수 있는 것처럼 약 0.7eV 전, 후로 나타나는 광변조 신호가 다른 모습을 하고 있음을 알 수 있다. 0.7eV 이하의 경우는 앞서 그림 3에서 볼 수 있는 것과 같이 TDFF 신호가 나타남을 알 수 있고, 0.7 eV 이후에는 그림 4와 같이 FKO 신호가 나타남을 알 수 있다.

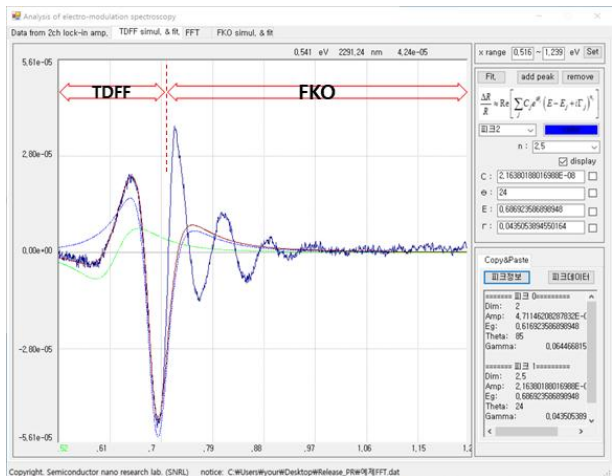
본 개발 프로그램은 TDFF와 FKO 신호에 대해 개별적으로 simulation을 진행하도록 개발되었다. 따라서 TDFF의 경우 0.7eV 이하에서 광변조 신호가 나오고 있음을 알

수 있다.

그림 5(b)는 이러한 기준으로 본 개발 프로그램에서 주요 인자로 할당한 강도(C), 위상(θ), 밴드갭(E) 및 평탄인자(I) 값들을 적절히 조절하여 얻어진 Simulation의 결과를 나타낸다. 그림에서 알 수 있듯이, TDFF는 하나의 신호가 아닌 두 개의 신호에서 나타나는 것을 알수 있으며, 이에 대한 결과는 GaSb의 이론적인 값과 함께 표 1에 나타내었다.



(a) Initial data before Simulation



(b) After Simulated & Fitted for measured data

Fig. 5. TDFF(Third Derivative Function Form) simulation and fitting for measured data.

Table 1. Simulation results for TDFD Signals

Parameter	Simulation results		GaSb
	Peak 1	Peak 2	
Bandgap(eV)	0.6169	0.6869	0.726
Parameter	n	2	2.5
	C	4.71E-8	2.16E-8
	θ	85	24
	Γ	0.065	0.044

Simulation을 통해 TDFD 신호가 하나가 아니라 두 개의 신호를 가지고 있는 것을 알 수 있었다. GaSb 주 신호는 0.6869 eV의 신호로 보이며, 이보다 더 낮은 신호는 0.6169 eV로 두 신호간의 차이는 0.07eV의 차이를 나타내었다. 또한, TDFD 신호의 profile에 맞기 위해서는 0.6169 eV의 신호의 임계값 n이 bulk 신호인 2.5가 아니라 2의 값의 가져야 함을 알 수 있었다. 따라서, 작은 에너지를 가지는 신호는 exciton에 의한 신호인 것을 알 수 있고, 주 신호인 0.6869eV에서의 광변조 신호는 2.5의 값을 가지는 bulk에서의 밴드갭 신호임을 알 수 있었다.

GaSb의 이론적인 값 0.726 eV 대비 실제 측정값이 약 0.0391 eV 적게 나타났다. 이에 가장 영향을 크게 줄 수 있는 요소로는 모노크로메타에서 나타나는 오차로 볼 수 있다.

2. FKO(Franz-Keldysh oscillation)

광변조 전체 신호에 대한 해석을 위해서는 밴드갭 이상에서의 진동인 FKO까지 해석이 필요하며, 이를 위해 "FKO simul. & fit"창을 통해 할 수 있도록 제작하였다.

TDFD와 FKO 두 신호 모두를 한꺼번에 처리하는 것이 바람직하나, 현재의 version에서는 우선 각각의 simulation이 바람직하게 운용이 되는 것을 우선으로 하였으며, 전체 프로파일에 대한 대략적인 해석은 상용 프로그램인 오리진(Origin)을 이용하여 확인하는 것으로 하였다. 그림 6은 밴드갭 이상의 신호에서 나타나는 FKO 신호에 대한 simulation 결과를 나타내고 있다. 그림에서 알 수 있듯이 simulation한 그래프가 실제 data와 다소 차이가 남을 알 수 있는데, 이는 TDFD data와의 중첩 효과에 의한 것이며, 전체 측정 data와 simulation data는 아래 그림 7과 같다. 그림 7은 앞서 실행한 TDFD 결과와 FKO simulation 결과를 모두 실행한 결과이다. 전체 영역에 대한 data는 오리진을 이용하여 실제 측정값과 simulation의 결과를 비교하였으며, 비교적 잘 맞는다는 알 수 있다.

본 개발에서 좀 더 진행해야 할 사항이 TDFD와 FKO를 한번에 Simulation하고 fitting을 할 수 있도록 하는 것이며, 이는 TDFD와 FKO의 이론적인 비 일치성에서 공통으로 활용할 수 있는 변수에 대한 연구를 추가적으로 진행하여, 변수를 최소화 함으로써 가능할 것으로 사료된다.

FKO simulation을 통해 얻어진 결과는 표 2에 나타나 있다. TDFD와 마찬가지로 광변조에 나타나는 FKO의 신호를 두 개로 할 때 실제 data와 가장 유사한 결과를 얻을 수 있었으며, 두 개 신호에 대한 밴드갭과 임계값은 TDFD와 동일한 값을 사용하였다.

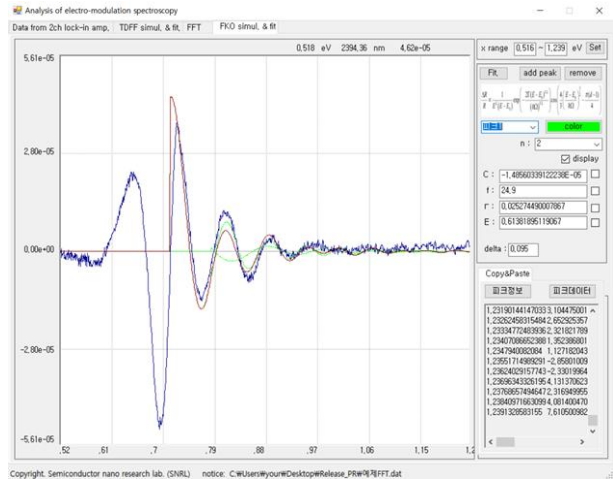


Fig. 6. FKO(Franz-Keldysh Oscillation) simulation for measured data.

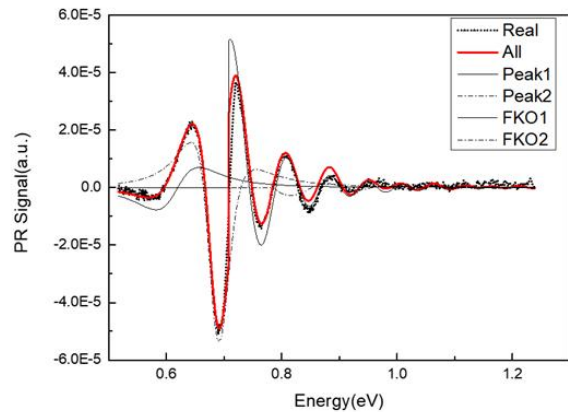


Fig. 7. Simulation for full range of the photoreflectance signal from GaSb epi-layer structure.

Table 2. Simulation results for FKO Signals

Parameter	Simulation results		GaSb
	Peak 1	Peak 2	
Bandgap(eV)	0.6169	0.6869	0.726
Parameter	n	2	2.5
	C	-1.47E-5	4.92E-7
	f	24.8	18.3
	Γ	0.614	0.011

3. FFT(Fast Fourier Transform)

일반적으로 FFT는 다중의 주파수를 가지는 파동에서 중첩된 각각의 주파수를 분리하는데 매우 유용하게 사용

되는 방법이다. 광변조에서 나타나는 FKO는 앞서 살펴본 것과 같이 단지 하나의 FKO 신호만이 아니라 여러개의 FKO신호가 중첩되어 나타날 수 있기 때문에 이를 효과적으로 분석하기 위해서는 FFT법을 이용하는 것이 유용하다. 아래 그림 8은 이에 대한 예를 적용한 것이다.

그림에서 우측의 숫자와 막대는 보다 정확한 FFT 해석을 위한 조건을 적용하기 위함이다. 우선 연구에 사용된 GaSb의 밴드갭의 값이 맨위에 설정값을 넣을 수 있도록 하였으며, FFT start는 밴드갭 보다 큰값을 사용하였다.

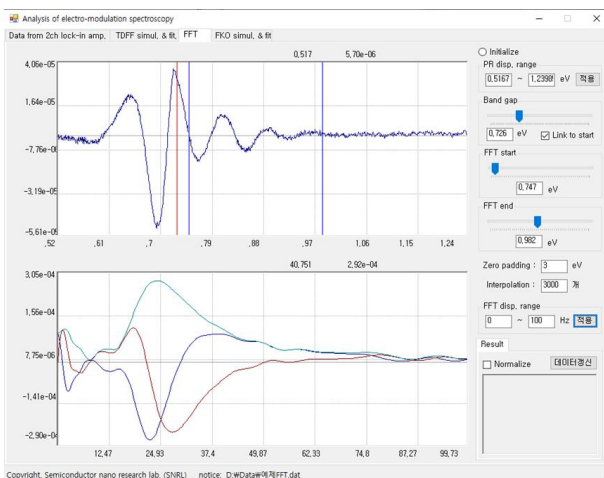


Fig. 8. FFT result for FKO Signal

이는 식(7)에서 알 수 있는 것과 같이 E의 값이 밴드갭에 근접할수록 무한대의 값의 가지게 되므로 Bandgap에서 떨어진 적절한 값을 설정하여야 한다. FFT end 값은 실제 얻어진 값이 수렴하여 더 이상의 진동이 보이지 않는 영역을 적절히 선택하여야 한다. FFT의 결과가 보다 명확하게 나타나게 하기 위해서는 zero padding을 사용하였고, 여기서는 3 eV까지 하였다. 이와 더불어 이산형 data가 보다 연속적인 값을 가지게 하기 위하여 interpolation 값을 최대한 많이 주어야 하는데, 여기서는 3000개로 충분히 많은 점들로 연결이 되게끔 하였다.

FFT display range는 그림 8의 아래쪽 창에 나타나는 FFT 결과를 명확히 보기 위하여 필요에 따라 크기를 조절할 수 있도록 하였다. 그림8의 아래쪽 창에 나타난 FFT 결과 그래프의 꼭지점에서의 값은 23.9Hz 였다. 위에 살펴본 것처럼 FKO에서 나타나는 주파수 f 는 식(9)와 같다.

이를 물리상수의 값을 대입하여 다시 표현하면 아래와 같이 표현할 수 있다.

$$f = 1.08717 \times 10^7 (\mu)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{F} \mu; m_0 \text{의 비율} \quad (10)$$

여기서,

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_h}, m_e : 0.041m_0, m_h : 0.4m_0, m_{lh} : 0.05m_0$$

이다.

이를 계산하면, GaSb 표면에서의 전기장은 7.7 kV/cm임을 알 수 있다. 다만, 앞서 FKO simulation에서 확인한 것과 같이 두 개의 FKO 신호가 있어야 실제 측정의 결과와 유사하게 나타남을 알 수 있었고, 이때 주파수는 표 2에서와 같이 각각 24.8 Hz와 18.3 Hz의 값을 나타내었는데, FFT에서는 하나의 주파수 값인 23.9 Hz를 나타내었다. 여기서 알 수 있는 것은 두 개의 서로다른 주파수 특성이 차이가 크지 않는 경우에는 FFT로 구분이 명확하지 않을 수 있다는 것이며, 이는 보다 선명한 신호를 얻지 않을 경우, 중첩된 결과를 보일 수 있음을 의미한다고 할 수 있다.

IV. Conclusions

본 연구에서는 반도체 광특성을 분석하기 위한 광변조 분광법에서 얻어지는 결과를, 보다 빠르고 명확하게 해석하기 위하여 광변조 분광 이론에 근거하여 실제 data와 simulation 및 fitting이 가능한 프로그램을 개발하여 실제 결과 해석에 활용 가능성을 확인하였다. 간단한 TDFE의 경우에는 Simulation과 fitting까지 가능하도록 하였다. 현재의 개발된 프로그램이 광변조 신호에 대한 기본적인 해석에는 전혀 문제가 되지 않음을 알 수 있었다. 더 나아가 좀 더 복잡한 신호의 해석을 위해선 FKO와 TDFE 전체 신호를 해석하기 위해서는 이를 통합하는 과정이 필요하며, 이는 파라미터의 단순화 작업이 수반된다. 따라서 향후, 보다 복잡한 광반사 변조 분광 신호 해석에 이용될 수 있도록 FKO와 TDFE 신호를 통합해, 전체 신호를 보다 명확히 해석할 수 있는 프로그램을 개발할 계획이다.

REFERENCES

[1] Phillip H. R., Ehrenreich H., "Optical Properties of Semiconductors", Phys Rev 129 1550, Feb. 1963. DOI: 10.1103/PhysRev.129.1550
 [2] W. Malek, A. Kahouli, M. Bouzidi, N. Chaaben, Abdullah S., Alshammari, J. P. Salvestrini, A. Rebye, "Optical characterization by photoreflectance of GaN after its partial thermal decomposition", Optik, Vol 248, p. 168070, Dec. 2021, DOI: 10.1016/j.ijleo.2021.168070

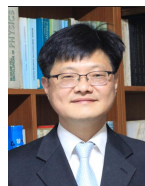
- [3] Sanam SaaidNahaei, Hyun-Jun Jo, Jong Su Kim, Sang Jun Leeb, Minsoo Kwak, "Investigation of the surface leakage current of the nBn InGaAsSb infrared photodetector by using photoreflectance spectroscopy", *Materials Letters*, Vol 313, No 15, p. 131755, April 2022. DOI: 10.1016/j.matlet.2022.131755
- [4] Ewelina Zdanowicz, Artur P. Herman, Robert Kudrawiec, "The influence of the photovoltaic effect on the surface electric field in GaN", *Applied Surface Science*, Vol. 577, No. 1, p. 1519051, March 2022. DOI: 10.1016/j.apsusc.2021.151905
- [5] Eiichi Kobayashi, Koya Satta, Ryoga Inoue, Ken Suzuki, Takayuki Makino "Contactless Determination of Electric Field in Metal-Insulator-Semiconductor Interfaces by Using Constant DC-Reflectivity Photoreflectance", *Solids 2021*, Vol 2, No 2, pp. 129-138, March 2021. DOI: 10.3390/solids2020008
- [6] B. O. Seraphin and N. Bottka, "Band-Structure Analysis from Electro-Reflectance Studies", *Phys. Rev.* 145, 628, May. 1966. DOI: 10.1103/PhysRev.145.628
- [7] M. Cardona, "Modulation spectroscopy", Academic Press, New York, 1969
- [8] D. E. Aspnes, "Handbook on semiconductors", ed. T. S. Moss. Vol. 2, North-Holland, New York, 1980.
- [9] R. A. Batchelor, A. C. Brown and A. Hamnett, "Theoretical and experimental results for p-type GaAs electrolyte electroreflectance", *Phys. Rev. B* 41, 1401, Jan. 1990. DOI: 10.1103/PhysRevB.41.1401
- [10] D. E. Aspnes, "Band nonparabolicities, broadening, and internal field distributions: The spectroscopy of Franz-Keldysh oscillations", *Phys. Rev. B* 10, 4228, Nov. 1974. DOI: 10.1103/PhysRevB.10.4228
- [11] F. H. Pollak and H. Shen, "Modulation spectroscopy of semiconductors: bulk/thin film, microstructures, surfaces/interfaces and devices", *Mater. Sci. Eng. R* 10, 275, Oct. 1993. DOI: 10.1016/0927-796X(93)90004-M
- [12] H. Shen, F. H. Pollak and J. M. Woodall, "Photoreflectance study of surface Fermi level in GaAs and GaAlAs", *J. Vac. Sci. Technol. B* 8, 413, June 1990. DOI: 10.1063/1.103916
- [13] F. H. Pollak, "Study of semiconductor surfaces and interfaces using electromodulation", *Surf. Interface Anal.* 31, 938, Oct. 2001. DOI: 10.1002/sia.1131

Authors



Sang-Hoon Shin received the B.S., M.S. and Ph.D. degrees in Naval Architecture and Ocean Engineering from Seoul National University, Korea, in 1990, 1993 and 2000. From 1999 to 2017, he had been a senior

researcher at Hyundai Heavy Industries. He is currently a Professor in the Department of Aero Mechanical Engineering, Kyungwoon University. He is interested in Design and Strength Evaluation of Structures, Optimization Technique and Optimal Shape Design.



Geun-Hyeong Kim received the B.S., M.S. and Ph.D. degrees in Solid-State Physics from Yeungnam University, Korea, in 1995, 1998 and 2013, respectively. He joined the faculty of the Department of Aero

Mechanical Engineering at Kyungwoon University, Gumi, Korea, in 2019. He is interested in Artificial Intelligent., Semiconductor Nano- Structures and Simulation.