

Ge_{1-x}Sn_x 위에 성장시킨 Ge_{1-y}Sn_y 또는 Ge 층에서 성장방향과 응력변형 조건에 따른 다이렉트 에너지 간격 특성 연구

논문
12-10-2

Characteristics of direct energy gap of Ge_{1-x}Sn_x/Ge_{1-y}Sn_y or Ge/Ge_{1-y}Sn_y, in the growth direction and strain condition

박일수*, 전상국**

(Il Soo Park* and Sang Kook Chun**)

Abstract

The band structures for Ge_{1-x}Sn_x/Ge_{1-y}Sn_y, grown in the (001), (110), and (111) directions are calculated by taking into account the strain effects. The result shows that Ge_{1-x}Sn_x/Ge(001) has the widest direct band gap(0.73 eV > E_g > 0 eV, 0.05 < x < 0.27). Above all, Ge/Ge_{1-y}Sn_y(001) is expected to be the most promising for the development of ultra high speed optoelectronic device because of the small effective masses for electrons and holes.

Key Words(중요용어) : strain(응력변형), growth direction(성장방향), GeSn, direct energy gap(다이렉트 에너지 간격), 광전자 소자(optoelectronic device)

1. 서 론

현재까지 반도체소자의 개발은 Si를 중심으로 이루어져왔다. Si은 산화막을 쉽게 만들 수 있고 가격이 싸다는 장점을 갖고 있지만 III-V 화합물 반도체에 비해 이동도 특성이 매우 나빠 높은 주파수 대역에서 동작할 수 있는 고속 소자에 응용하기가 어렵다. 또한, IV족 반도체는 기본적으로 다이렉트 에너지 간격을 가지는 재료는 없기 때문에 광전자 소자 제작에도 제약이 따른다.

IV족 반도체를 광전자 소자로 사용하기 위해서는 양자우물 구조에서 버금띠사이 전이(intersubband transition)를 이용하거나, Si-Ge 초살상(superlattice)과 같이 인위적으로 입방대칭(cubic symmetry)을 깨면서 가장 낮은 위치의 전도띠가 Γ 지점에 접치게 하는 방법이 있다¹⁾. 또한, Ge-Sn 혼합

물처럼 다이아몬드 구조를 가지는 준안정 혼합물(metastable alloy)을 성장시켜 가장 낮은 전도띠에 Γ 지점이 위치하도록 할 수 있다.

GeSn 혼합물이 다이렉트 에너지 간격을 갖는다는 사실은 실험적 및 이론적 연구로 밝혀졌다²⁾. 최근에는, GeSn 혼합물을 소자에 이용하기 위하여 Ge_{1-x}Sn_x 기판 위에 Ge_{1-y}Sn_y 층을 성장시키는 연구가 한창이다³⁾. Ge_{1-y}Sn_y 기판 위에 성장시킨 Ge_{1-x}Sn_x 층은 응력변형을 겪게 되어 에너지 띠 구조가 변화되면서 다이렉트 특성도 변하게 된다. 격자상수의 상이함에 따른 응력변형은 Γ, X, 그리고 L 지점의 전도띠 에너지를 변화시키므로 다이렉트 띠 구조의 여부는 성장방향과 α-Sn의 함량에 의해 결정된다. 따라서, GeSn 혼합물은 III-V 또는 I-VI 반도체에서나 가능했던 띠사이 전이(interband transition)를 이용한 광전자 소자에 이용할 수 있다.

Ge_{1-y}Sn_y 기판 위에 성장시킨 Ge_{1-x}Sn_x 층은 다이렉트 에너지 간격을 가질 뿐만 아니라 매우 뛰어난 이동도 특성을 가질 수 있다. Γ 지점의 전도띠에서 전자의 이동도는 X, 또는 L 지점에서 전자의 이동도보다 매우 크다. 또한, Si에 비해 α-Sn에서 정공의 이동도는 3배정도 크다는 사실⁴⁾과 응력변형에 의한 정공의 띠사이 산란(interband scattering) 및 띠

* : 인하대 공대 전자재료공학과 통합과정
(인천광역시 남구 용현동 253, Fax : 032-875-5882 E-mail : rambo007@hanmail.net)

** : 인하대 대학 전자재료공학과
1999년 2월 28일 접수, 1999년 9월 21일 심사완료

내 산란(intraband scattering)이 크게 줄어드는 것을 감안하면 GeSn 혼합물에서 정공의 이동도는 매우 클 것으로 기대된다. 일반적으로, Si에서 전자와 정공의 속도가 느려 고속소자의 개발에 방해가 되고 있는 것을 감안하면 GeSn 혼합물의 이용은 초고속소자 개발의 가능성을 보여준다. 더구나, 응력변형을 겪는 GeSn 혼합물에서 다이렉트 에너지 간격을 갖는 특성과 이동도의 향상이라는 장점을 결합하면 단일 칩에 고성능의 광전자 소자를 실현시킬 수 있다.

따라서, 응력변형을 겪는 GeSn 혼합물을 고속 소자 또는 광전자 소자로 사용하기 위해서는 다양한 응력변형 조건하에서 Ge_{1-x}Sn_x의 에너지 구조를 이해할 필요가 있다. 본 논문에서는, 이와 같은 연구를 수행하기 위해서 Ge_{1-y}Sn_y 기판 위에 Ge_{1-x}Sn_x 또는 Ge 층을 각기 다른 성장방향(001), (110), (111))으로 성장시켰을 경우, 압축 또는 팽창 응력변형이 띠 구조에 미치는 영향과 그에 따른 다이렉트 에너지 간격 특성 변화를 계산하였다.

2. 본 문

2.1. 응력변형을 고려하지 않은 경우

Ge은 L₆'에 극소를 가지는 인다이렉트(indirect) 띠 구조를 가진다. α-Sn의 경우, 극소에 위치하는 전도띠와 극대에 위치하는 원자가띠가 Γ₁'에서 축퇴되어 에너지 간격이 사라지고, L₆' 극소 전도띠는 Γ₆'보다 약간 위에 위치하며, Γ₁'와 Γ₇'에서 대칭성을 가지는 두 원자가띠는 Γ₇' 밑에 위치한다". 이때 Ge_{1-x}Sn_x 혼합물의 띠 구조는 Ge과 α-Sn의 각 띠 구조의 선형 내삽법(linear interpolation), 즉, Vegard's law로부터 얻어질 수 있다. Vegard's law와 더불어 비선형성을 고려한 에너지 구조 계산에 필요한 변수를 아래와 같은 방법으로 얻어낼 수 있다.

$$E_{AB}(x) = (1-x)E_A + xE_B - \theta x(1-x) \quad (1)$$

E_A와 E_B는 혼합물을 구성하고 있는 각 재료의 변수이고, x는 그 재료의 함량이며, θ는 비선형성을 고려하기 위한 bowing 매개변수이다. SiGe 혼합물의 경우, θ는 비교적 작은 값(0.206 eV)¹⁰이기 때문에 띠 구조의 비선형성을 무시할 수 있다. 그러나, GeSn 혼합물의 경우, θ는 2.8 eV¹⁰로서 bowing 효과로 인한 Γ 지점에서의 비선형성이

두드러진다. 그림 1은 bowing 효과를 고려한 GeSn 혼합물의 띠 구조를 보여준다. 필요한 변수들은 표 1에 있다.

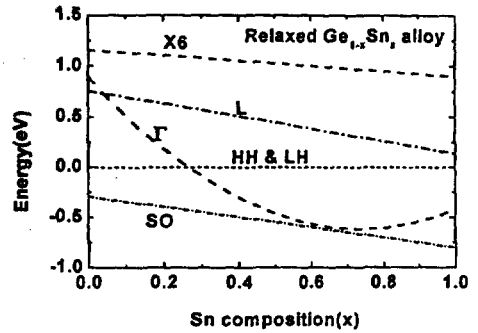


그림 1. Bowing 효과를 고려한 완화된 Ge_{1-x}Sn_x 혼합물의 띠 구조

Fig. 1. The band structure of the relaxed Ge_{1-x}Sn_x alloy with bowing effects.

표 1. B.Z.의 대칭점에서 Ge과 α-Sn의 에너지 값(eV)".

Table 1. The energy value of Ge and α-Sn at B.Z. symmetry point(eV)".

k-point	Ge	α-Sn
Γ ₇ '(Δ)	-0.29	-0.80
Γ ₆ '	0.00	0.00
Γ ₇ '	0.90	-0.42
L ₆ '	0.76	0.14
X ₅ '	1.16	0.90

2.2. 응력변형에 의한 원자가띠의 변화

Ge과 α-Sn의 격자상수는 약 15%의 격자 불일치(lattice mismatch)가 있다. 따라서, Ge_{1-y}Sn_y 기판 위에 성장시킨 Ge_{1-x}Sn_x 층은(x≠y) 평면방향으로 압축 또는 팽창 응력변형을 겪는다. 이때 응력변형은 단축(uniaxial) 응력변형과 물정지(hydrostatic) 응력변형으로 나뉘어진다. 원자가띠에서 물정지 응력변형은 원자가띠 내의 3개의 띠를 같은 양의 에너지만큼 이동시키지만 단축 응력변형은 3개의 띠를 상대적으로 다르게 이동시킨다. Kleiner와 Roth¹¹는 HH(heavy hole band)과 LH(light hole band)만을 이용하여 응력변형에 의한 에너지

구조의 변형을 설명하였다. 그 후, Hasegawa는 SO(spin-orbit band)를 포함하여 (J, m_j) 표현법으로 정한 6개의 기초 함수를 바탕으로 응력변형 해밀토니안(strain Hamiltonian)을 얻었으며 그 표현식은 아래와 같다¹⁰⁾.

$$H_s = D_d'(e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}) + \frac{1}{2} D_u[e_{xx}(J_x^2 - \frac{1}{2} J^2) + c.p.] + \frac{1}{2} D_u[e_{xy}(J_x J_y + J_y J_x) + c.p.] \quad (2)$$

D_s' 는 물결지 응력변형에 의한 변형 포텐셜(deformation potential)이고, D_u 와 D_d' 는 <001> 및 <111> 방향의 단축 응력변형을 대변하며, e_{ij} 는 변형 성분(strain component)이다.

표 2. (001), (110), 그리고 (111) 방향으로 성장 시킬 때의 변형 성분¹¹⁾.

Table 2. Strain components for (001), (110), and (111) growth directions¹¹⁾.

e_{ij}	(001)	(110)	(111)
e_{xx}	$-f$	$-\frac{1-2\nu-\nu a}{1+a-2\nu} f$	$-\frac{2(1-2\nu)f}{(2+a)-\nu(4-a)}$
e_{yy}	$-f$	$-\frac{1-2\nu-\nu a}{1+a-2\nu} f$	$-\frac{2(1-2\nu)f}{(2+a)-\nu(4-a)}$
e_{zz}	$\frac{2\nu f}{1-\nu}$	$-f$	$-\frac{2(1-2\nu)f}{(2+a)-\nu(4-a)}$
e_{xy}	0	$\frac{a(1+\nu)}{1+a-2\nu} f$	$\frac{2a(1+\nu)f}{(2+a)-\nu(4-a)}$
e_{yz}	0	0	$\frac{2a(1+\nu)f}{(2+a)-\nu(4-a)}$
e_{zx}	0	0	$\frac{2a(1+\nu)f}{(2+a)-\nu(4-a)}$

e_{ij} 는 성장시킨 박막의 평면방향에서 변형률이 등방성이라는 사실을 이용하여 각 성장방향에 대해서 얻은 $\|e_{ij}\|$ 를 표 2에 요약했다¹¹⁾. 여기서 f 는 변형된 격자상수의 차이를 원래 격자상수로 나눈 값이며, ν 는 푸아송 비(Poisson ratio)이며, a 는 비 등방성 인자(anisotropic factor)를 나타낸다. 성장방향에 따른 원자가 띠끝머리(valence band edge)의 변화는 식(2)의 해밀토니안에서 고유값(eigenvalues)으로 계산되어질 수 있다¹²⁾. 이 계산에 사용되는 각 상수들은 표 3에 요약했으며¹³⁻¹⁶⁾ GeSn 혼합물에서의 상수들은 Ge과 α -Sn의 각 값들의 선형 내삽법으로 얻었다. 원자가띠의 HH, LH, 그리고 SO는 식 (1)과 (2)에 의해서 결정된다.

표 3. Ge과 α -Sn의 변형 포텐셜(eV), 푸아송 비(dimensionless), 그리고 비등방성 인자(dimensionless).

Table 3. Deformation potentials(eV), Poisson ratio(dimensionless) and anisotropic factor(dimensionless) of Ge and α -Sn.

	Ge	α -Sn
D_u	3.90 ¹³⁾	3.60 ¹⁴⁾
D_d'	4.07 ¹³⁾	2.70 ¹⁴⁾
ν	0.273 ¹⁵⁾	0.298 ¹⁶⁾
a	0.6008 ¹³⁾	0.5483 ¹⁶⁾
D_s'	12.4 ¹⁴⁾	3.3 ¹⁴⁾
a_r	3.8 ¹⁴⁾	13.7 ¹⁴⁾
a_x	13.9	3.938
a_L	8.6 ¹⁷⁾	1.173
$E_{v(001)}$	7.05	4.0
$E_{v(111)}$	15.9 ¹⁸⁾	9.02

2.3. 응력변형에 의한 전도띠의 변화

응력변형에 의한 원자가띠의 변형과 마찬가지로 전도띠의 변화도 물결지와 단축 응력변형에 의한 변형으로 해석할 수 있다. 물결지 응력변형의 영향을 고려한 GeSn 혼합물의 띠 간격 변화는 응력변형의 영향을 고려하지 않은 $Ge_{1-x}Sn_x$ 혼합물이 갖는 Γ, X , 그리고 L 지점의 에너지 값과 Ge과 α -Sn의 각 변형 포텐셜의 선형 내삽법으로 구한 변형 포텐셜의 값의 합으로 나타낼 수 있다.

$$\begin{aligned} \Gamma_i^s &= \Gamma_i^{s, no\ strain} + (a_r - D_d')(e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}) \\ X_3^s &= X_3^{s, no\ strain} + (a_x - D_d')(e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}) \\ L_6^s &= L_6^{s, no\ strain} + (a_L - D_d')(e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}) \end{aligned} \quad (3)$$

a_r 는 Γ 지점에서의 변형 포텐셜이고, a_x 와 a_L 은 X와 L 지점에서의 변형 포텐셜이며 표 3에 수록되어 있다. Γ 축과 Γ -V축 반도체에서 Γ, X , 그리고 L의 각 지점에 대한 압력계수가 거의 같은 값을 갖기 때문에¹⁷⁾ α -Sn의 X와 L 지점에 대한 변형 포텐셜은 Ge의 압력 계수를 인용해 체적 탄성률의 비로 계산했다.

한편, 단축 응력변형은 전도띠와 원자가띠의 축퇴를 파괴시켜 Γ, X , 그리고 L의 각 지점에서 각 방향에 따라 에너지를 다르게 변화시키지만 평균값은 변하지 않는다. 단축 응력변형에 의한 각 지점의 에너지

지 변이는 아래와 같다.

$$\Delta E'_i = \epsilon_{ij} [(a_i a_j) - \frac{1}{3} I] : \|\epsilon\| \quad (4)$$

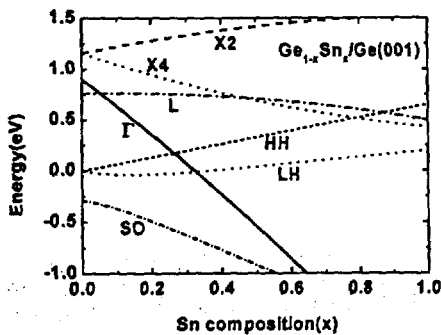
ϵ_{ij} 는 전단 응력변형(uniaxial shear)에 의한 변형 포텐셜, a_i 는 i 지점의 k 벡터와 평행한 단위 벡터, $(a_i a_j)$ 는 3×3 행렬의 다이어드 곱(dyad product), I 은 단위 텐서, 그리고 $\|\epsilon\|$ 은 응력변형 텐서를 나타낸다. 식 (4)에 필요한 변형 포텐셜은 표 3에 수록되어 있다. 표 3에서 보듯이, 변형 포텐셜 ϵ_{ij} 는 방향에 따라 $\epsilon_{u(001)}$ 와 $\epsilon_{u(111)}$ 로 나뉘어질 수 있다. IV족과 III-V족 반도체에서 Γ , X, 그리고 L의 각 지점에 대한 압력계수가 거의 같은 값을 가지며¹⁷⁾, 현재까지 알려진 변형 포텐셜 값은 Si의 $\epsilon_{u(001)}$ 과 Ge의 $\epsilon_{u(111)}$ 이다. 따라서, Ge과 α -Sn의 $\epsilon_{u(001)}$, $\epsilon_{u(111)}$ 은 Si의 $\epsilon_{u(001)}$ 과 Ge의 $\epsilon_{u(111)}$ 을 각각 인용하여 Si, Ge, 그리고 α -Sn의 체적 탄성률의 비로 계산했다.

3. 결과 및 고찰

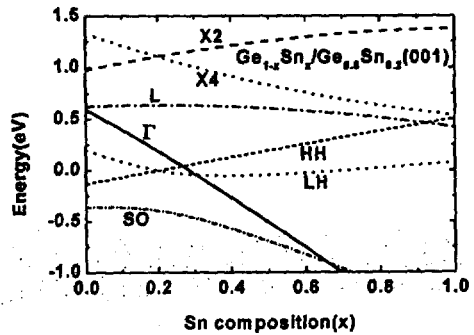
그림 2, 3, 4, 5는 Ge_{1-y}Sn_y 또는 Ge 층을 Ge_{1-y}Sn_y 기판 위에 성장시켰을 때 각 층에서 응력변형에 의한 띠 구조 변화와 다이렉트 에너지 간격 특성 변화를 보여준다. 응력변형을 겪는 Ge_{1-y}Sn_y 또는 Ge 층의 원자가띠는 응력변형을 겪지 않는 경우의 원자가띠의 극점(0 eV)으로부터 분리되는 정도에 따라 HH, LH, SO를 표시했다. 그리고, 전도띠의 각 극점은 응력변형을 겪지 않는 경우의 원자가 띠의 극점

(0 eV)에 더 간격을 더한 후 물결지 응력변형과 단축 응력변형을 고려한 값을 표시했다. 또한, 축퇴된 X 지점은 축퇴 형태에 따라 X2([001], [00 $\bar{1}$]), 그리고 X4([100], [100], [010], [010])로 표시했으며, 축퇴된 L 지점은 방향에 따라 L1([111]), L2([11 $\bar{1}$]), L3([11 $\bar{1}$]), 그리고 L4([11 $\bar{1}$])로 표시했다. 한편, 단축 응력변형에 의한 영향이 없는 경우의 Γ , X, 그리고 L 지점은 각각 Γ , X6, L로 표시했다.

그림 2(a)는 Ge(001) 기판 위에 길러진 Ge_{1-y}Sn_y 층의 띠 변화를 α -Sn 함량의 함수로서 보여준다. α -Sn 함량이 증가할수록 원자가띠에서 HH, LH과 SO는 분리가 증가됨을 볼 수 있다. 단축 응력변형에 의한 띠의 분리는 전체 에너지에 아무런 영향을 주지 않으므로 HH, LH, SO의 각 에너지의 합은 GeSn 혼합물의 선형내삽법에 의한 SO 에너지와 같다. 한편, Ge_{1-y}Sn_y 층은 모든 구간에서 압축 응력변형을 겪으므로 ($e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}$)는 0보다 작은 값을 갖는다. 이때, Γ 지점의 경우, Ge의 변형 포텐셜 ($a_r - D_r^2$)는 0보다 작고 α -Sn의 그것은 0보다 크므로 Γ 지점의 에너지는 위로 볼록한 형태의 에너지 변화가 나타난다. 따라서, bowing 효과로 인해 아래로 볼록한 형태를 가졌던 Γ 지점은 거의 일직선 형태의 에너지 감소가 나타난다. L 지점의 경우, Ge과 α -Sn의 변형 포텐셜 ($a_r - D_r^2$)는 0보다 작으므로 L 지점의 에너지는 응력변형을 겪지 않는 경우의 그것에 비해 증가하나 단축 응력변형에 의해 분리되지 않음을 볼 수 있다. X 지점의 경우, Ge과 α -Sn 모두 0보다 큰 변형 포텐셜 ($a_x - D_x^2$)를 가지므로 X 지점의 에너지는 응력변형을



(a)



(b)

그림 2. Ge_{1-y}Sn_y(001) 위에 기른 응력변형된 Ge_{1-y}Sn_y 혼합물에서 α -Sn 함량에 따른 띠 변화.

(a) $y=0$ (b) $y=0.2$

Fig. 2. Band alignments of strained Ge_{1-y}Sn_y alloys on Ge_{1-y}Sn_y(001) as the variation of α -Sn composition.

(a) $y=0$ (b) $y=0.2$

겨지 않는 경우의 그것에 비해 증가하고 단축 응력변형에 의해 X2 방향은 위로, X4 방향은 아래로 분리되지만 $Ge_{1-x}Sn_x$ 층의 다이렉트 특성에는 아무런 영향을 주지 않음을 볼 수 있다. 벌크 $Ge_{1-x}Sn_x$ 혼합물의 다이렉트 에너지 간격($0.70 \text{ eV} > E_g > 0 \text{ eV}$, $0.05 < x < 0.26$)과 비교해 볼 때, $Ge_{1-x}Sn_x/Ge(001)$ 구조의 다이렉트 에너지 간격은 크게 변화되지 않았다($0.73 \text{ eV} > E_g > 0 \text{ eV}$, $0.05 < x < 0.27$).

그림 2(b)는 $Ge_{0.8}Sn_{0.2}(001)$ 기판 위에 길러진 $Ge_{1-x}Sn_x$ 층의 띠 변화를 α -Sn 함량의 함수로서 보여준다. α -Sn 함량이 $0 < x < 0.2$ 구간에서는 $Ge_{1-x}Sn_x$ 층이 팽창 응력변형을 겪기 때문에 ($e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}$)는 0보다 큰 값을 가지면서 그림 2(a)의 경우와 반대 현상이 나타난다. 즉, Γ 와 X 지점의 에너지는 증가하고 L 지점의 에너지는 감소하며 X 지점에서 X2방향은 아래로 X4 방향은 위로 분리된다. 이 경우 $0.40 \text{ eV} > E_g > 0 \text{ eV}$ ($0 < x < 0.27$)의 다이렉트 에너지 간격 특성을 가지며 $Ge_{1-x}Sn_x/Ge(001)$ 구조의 경우에 비해 다이렉트 에너지 간격 특성은 나빠진다. 그러나, 팽창 응력변형을 겪는 구간($0 < x < 0.2$)에서 정공의 이동도는 LH에 의해 결정되며 HH과 LH의 분리도 따라서 산란과 띠내 산란이 감소되므로 이동도의 상당한 증가가 기대된다.

그림 3(a)와 (b)는, 기판의 α -Sn 함량이 각각 $y=0$ 과 $y=0.2$ 일 경우, $Ge_{1-y}Sn_y(110)$ 기판 위에 길러진 $Ge_{1-x}Sn_x$ 층의 띠 변화를 α -Sn 함량의 함수로서 보여준다. 그림 2의 경우와 마찬가지로 압축 응력변형을 겪는 구간에서는 Γ 와 X 지점의 에너지는 감소하

고 L 지점의 에너지는 증가한다. 그러나, L 지점에서 단축 응력변형에 의한 L1, L3 방향과 L2, L4 방향으로의 분리는 $Ge_{1-x}Sn_x$ 층의 다이렉트 에너지 간격을 줄이는 결과를 가지고 온다. 한편, 압축 응력변형을 겪는 $Ge_{1-x}Sn_x$ 층에서 성장방향이 (001)인 경우 ($e_{xx} - e_{zz}$)는 0보다 크고 성장방향이 (110)일 경우의 그것은 0보다 작다. 따라서 그림 2의 경우와는 반대로 압축 응력변형을 겪는 구간에서 X2 방향은 아래로 X4 방향은 위로 분리되며 이 경우에도 $Ge_{1-x}Sn_x$ 층의 다이렉트 에너지 간격 특성에는 아무런 영향이 없음을 알 수 있다. 이때 $Ge_{1-x}Sn_x/Ge(110)$ 구조에서는 $0.65 \text{ eV} > E_g > 0 \text{ eV}$ ($0.09 < x < 0.30$), $Ge_{1-x}Sn_x/Ge_{0.8}Sn_{0.2}(110)$ 구조에서는 $0.38 \text{ eV} > E_g > 0 \text{ eV}$ ($0.05 < x < 0.28$)의 다이렉트 에너지 간격 특성이 나타난다. 이 경우 다이렉트 에너지 간격 변화 범위와 HH과 LH의 분리가 (001)성장방향의 경우보다 작을 뿐만 아니라 (110) 성장방향에서는 표면 산란이 크다는 사실을 고려하면 (001) 성장방향의 경우보다 좋은 전기적 특성을 기대할 수 없을 것으로 사료된다.

그림 4(a)와 (b)는, 기판의 α -Sn 함량이 $y=0$ 과 $y=0.2$ 일 경우, $Ge_{1-y}Sn_y(111)$ 기판 위에 길러진 $Ge_{1-x}Sn_x$ 층의 띠 변화를 α -Sn 함량의 함수로서 보여준다. 앞의 두 경우와 마찬가지로 압축 응력변형을 겪는 구간에서는 Γ 와 X 지점의 에너지는 감소하고 L 지점의 에너지는 증가한다. 그리고, 단축 응력변형에 의해 L 지점만 L1방향과 L2, L3, L4 방향으로 분리된다. 특히, L 지점에서 L1 방향으로의 에너지가 L2, L3, L4 방향보다 3배 큰 에너지를 가지기

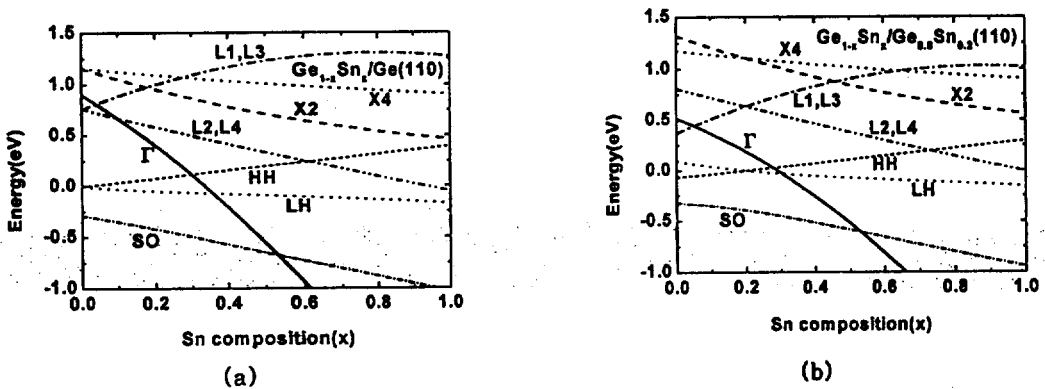
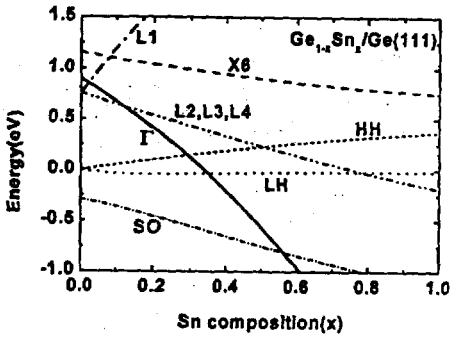


그림 3. $Ge_{1-y}Sn_y(110)$ 위에 기른 응력변형된 $Ge_{1-x}Sn_x$ 혼합물에서 α -Sn 함량에 따른 띠 변화.

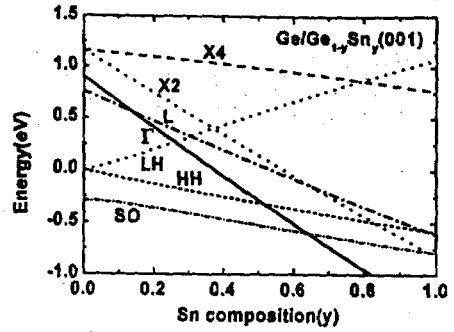
(a) $y=0$ (b) $y=0.2$

Fig. 3. Band alignments of strained $Ge_{1-x}Sn_x$ alloys on $Ge_{1-y}Sn_y(110)$ as the variation of α -Sn composition.

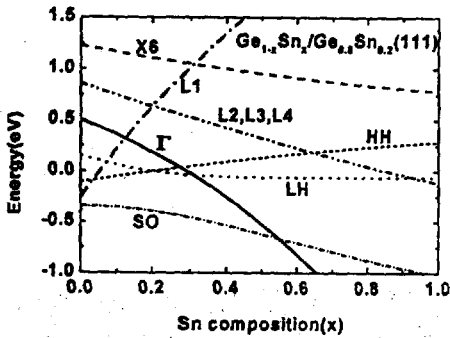
(a) $y=0$ (b) $y=0.2$



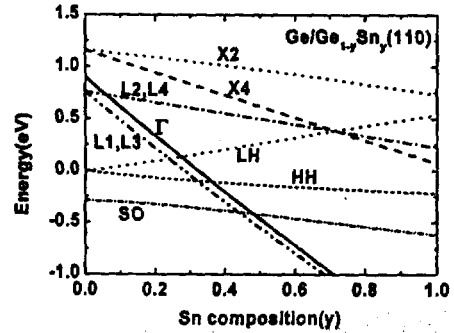
(a)



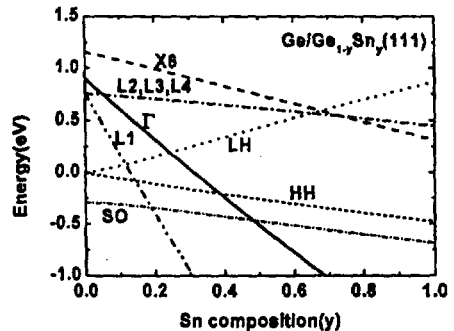
(a)



(b)



(b)



(c)

그림 4. Ge_{1-y}Sn_y(001) 위에 기른 응력변형된 Ge_{1-x}Sn_x 혼합물에서 α-Sn 함량에 따른 띠 변화.
(a) y=0 (b) y=0.2

Fig. 4. Band alignments of strained Ge_{1-x}Sn_x alloys on Ge_{1-y}Sn_y(001) as the variation of α-Sn composition.
(a) y=0 (b) y=0.2

때문에 팽창 응력변형을 겪는 구간에서 Ge_{1-x}Sn_x 층의 다이렉트 특성 구간이 앞의 두 경우 보다 현저하게 줄어들 수 있다. 이때 Ge_{1-x}Sn_x/Ge(111) 구조에서는 0.56 eV > E_g > 0 eV (0.12 < x < 0.30), Ge_{1-x}Sn_x/Ge_{0.8}Sn_{0.2}(111) 구조에서는 0.28 eV > E_g > 0 eV (0.12 < x < 0.28)의 다이렉트 에너지 간격 특성이 나타난다. 이 경우도 그림 3의 경우와 마찬가지로 이유로 (001) 성장방향의 경우보다 좋은 전기적 특성을 기대할 수 없을 것으로 사료된다.

그림 5. Ge_{1-y}Sn_y 위에 기른 응력변형된 Ge의 α-Sn 함량에 따른 띠 변화.
(a) (001) (b) (110) (c) (111)

Fig. 5. Band alignments of strained Ge on the Ge_{1-y}Sn_y. (a) (001) (b) (110) (c) (111)

앞의 결과를 볼 때, 다이렉트 띠 간격 특성뿐만 아니라 이동도 특성은 Ge_{1-y}Sn_y(001) 기판 위에 길러

진 $Ge_{1-x}Sn_x$ 층이 가장 우수함을 알 수 있다. 특히, 팽창 응력변형을 겪는 $Ge_{1-x}Sn_x$ 층에서의 이동도 향상은 고속소자의 응용 가능성이 기대된다. 이에 $Ge_{1-y}Sn_y$ 기판 위에 쉽게 에피층(epi-layer)을 성장시키면서 팽창 응력변형에서의 이동도 향상 특성을 충분히 이용할 수 있는 방법으로 $Ge_{1-y}Sn_y(001)$ 기판 위에 성장시킨 Ge 층을 제안할 수 있다.

그림 5는 $Ge_{1-y}Sn_y$ 기판 위에 길러진 Ge 층의 띠 변화물 (001), (110), (111) 성장방향에 따른 α -Sn 함량의 함수로서 보여준다. $Ge_{1-y}Sn_y(110)$ 와 $Ge_{1-y}Sn_y(111)$ 기판 위에 길러진 Ge 층은 다이렉트 에너지 간격 특성이 보여주지 않지만 (001) $Ge_{1-y}Sn_y$ 기판 위에 길러진 Ge 층은 $0.53 \text{ eV} > E_g > 0 \text{ eV}$ ($0.11 < y < 0.27$)의 다이렉트 에너지 간격 특성이 나타난다. 전기적 특성면에서 $Ge/Ge_{1-y}Sn_y(001)$ 은 다음과 같은 장점이 있다. 첫째, 혼합물 산란(alloy scattering)이 없다. 둘째, Γ 지점에서 전자의 무게는 GaAs보다 작은 $0.04m_0$ 를 갖는다. 셋째, HH과 LH가 크게 분리되어 띠사이 산란은 무시할 정도로 작아진다. 또한, 대부분의 정공이 무게가 작은 LH($\sim 0.04m_0$)에 위치하므로 정공의 이동도는 전자의 이동도와 비슷할 것으로 예상된다. 따라서 $Ge_{1-y}Sn_y(001)$ 기판 위에 성장시킨 Ge 층은 초고속 광소자 개발에 가장 유용할 것으로 기대된다.

4. 결 론

본 논문에서는, $Ge_{1-x}Sn_x$ 위에 $Ge_{1-x}Sn_x$ 또는 Ge 층을 각 성장방향((001), (110), (111))으로 성장시켰을 때, 압축 또는 팽창 응력변형이 각 띠 구조에 미치는 영향과 다이렉트 에너지 간격 변화를 살펴봄으로서 다음과 같은 결과를 얻었다.

$Ge_{1-x}Sn_x/Ge_{1-y}Sn_y$ 구조의 경우, (110)과 (111) 성장방향보다 (001) 성장방향에서 가장 좋은 다이렉트 띠 간격 특성이 보였다. $Ge_{1-x}Sn_x/Ge(001)$ 구조의 경우, $0.73 \text{ eV} > E_g > 0 \text{ eV}$ ($0.05 < x < 0.27$)의 가장 넓은 다이렉트 에너지 간격 특성이 보였다. $Ge_{1-x}Sn_x/Ge_{0.8}Sn_{0.2}(001)$ 구조의 경우 $0.40 \text{ eV} > E_g > 0 \text{ eV}$ ($0 < x < 0.27$)의 다이렉트 에너지 간격이 보여주지며, $0 < x < 0.2$ 구간에서 $Ge_{1-x}Sn_x/Ge(001)$ 구조의 경우보다 빠른 이동도가 기대된다.

$Ge/Ge_{1-y}Sn_y$ 구조의 경우 (001) 성장방향에서만 $0.53 \text{ eV} > E_g > 0 \text{ eV}$ ($0.11 < y < 0.27$)의 다이렉트 띠 간격이 보였다. 이 구조는 적은 α -Sn 함량의 변화에도 큰 다이렉트 띠 간격 변화를 가지기 때문에 광소자 개발에 유용한 가능성이 보여진다. 또한, 이 구조에서

의 Ge은 전자와 정공이 모두 적은 유효질량을 가지고 혼합물 산란이 없으며 띠사이 산란 적어져 탁월한 이동도의 향상이 예상된다. 따라서, $Ge/Ge_{1-y}Sn_y(001)$ 구조는 우수한 전기적 특성을 가지는 초고속 광전소자 개발에 유용할 것으로 기대된다.

감사의 글

본 연구는 '98년도 인하대학교의 학술연구조성비에 의해 수행되었습니다.

참 고 문 헌

1. T. P. Pearsall et al., "Structurally Induced Optical Transitions in Ge-Si Superlattices", Phys. Rev. Lett., vol. 58, no. 7, pp. 729-732, 1987.
2. Prof C.H.L. Goodman, "Direct-gap Group IV Semiconductors Based on Tin", IEE Proc., vol. 129 Pt. I, no. 5, pp. 189-192, 1982.
3. S. Oguz et al., "Synthesis of Metastable, Semiconducting Ge-Sn Alloys by Pulsed UV Laser Crystallization", Appl. Phys. Lett., vol. 43, no. 9, pp. 848-850, 1983.
4. Gang He and Harry A. Atwater, "Interband Transitions in Sn_xGe_{1-x} Alloys" Phys. Rev. Lett., vol. 79, no. 10, pp. 1937-1940, 1997.
5. O. Gurdal et al., "Low-temperature Growth and critical Epitaxial Thicknesses of Fully Strained Metastable $Ge_{1-x}Sn_x$ ($x \leq 0.26$) Alloys on $Ge(001)2 \times 1$ ", J. Appl. Phys., vol. 83, no. 1, pp. 162-170, 1998.
6. S. M. Sze, Physics of Semiconductor Devices 2nd Ed., J. Wiley & Sons, pp. 849, 1981.
7. James R. Chelikowsky and Marvin L. Cohen, "Nonlocal Pseudopotential Calculations for the Electronic Structure of Eleven Diamond and Zinc-blende Semiconductors", Phys. Rev. B, vol. 14, no. 2, pp. 556-582, 1976.
8. J. Weber and M. I. Alonso, "Near-band-gap Photoluminescence of Si-Ge Alloys", Phys. Rev. B, vol. 40, no. 8, pp. 5683-5693, 1989.
9. W. H. Kleiner and L. M. Roth, "Deformation Potential in Germanium from Optical Absorption Lines for Exciton Formation".

- Phys. Rev. Lett., vol. 2, no. 8, pp. 334-336, 1959.
10. H. Hasegawa, "Theory of Cyclotron Resonance in Strained Silicon Crystals", Phys. Rev., vol. 129, no. 3, pp. 1029-1040, 1963.
 11. 전 상국, "Si_{1-y}Ge_y 위에 성장시킨 Si_{1-x}Ge_x에서 성장방향과 응력변형 조건에 따른 정공의 이동도 연구" 전기전자재료학회지, vol. 11, no. 4, pp. 267-273, 1997.
 12. R. People, "Indirect Band Gap of Coherently Strained Ge_xSi_{1-x} Bulk Alloys on <001> Silicon Substrates", Phys. Rev. B, vol. 32, no. 2, pp. 1405-1408, 1985.
 13. Fred H. Pollak and M. Cardona, "Piezo-Electroreflectance in Ge, GaAs, and Si", Phys. Rev., vol. 172, no. 3, pp. 816-837, 1968.
 14. A. Blacha, H. Presting, and M. Cardona, "Deformation Potentials of $k=0$ States of Tetrahedral Semiconductors", Phys. Stat. Sol.(b), vol. 126, pp. 11-36, 1984.
 15. H. J. McSkimin and P. Andreatch, Jr., "Elastic Moduli of Germanium Versus Hydrostatic Pressure at 25.0°C and -195.8°C", J. Appl. Phys., vol. 34, no. 3, pp. 651-655, 1963.
 16. D. L. Price and J. M. Rowe, "Lattice Dynamics of Grey Tin and Indium Antimonide", Phys. Rev. B, vol. 3, no. 4, pp. 1268-1279, 1971.
 17. William Paul, "Band Structure of the Intermetallic Semiconductors from Pressure Experiments", J. Appl. Phys. Supp., vol. 32, no. 10, pp. 2082-2094, 1961.
 18. I. Balslev, "Indirect Absorption in Ge Under Combined Static and Oscillatory Stress", Physics Letters, vol. 24A, no. 2, pp. 113-114, 1967.