

A_{1-x}B_x 혼합물반도체에서 원자들의 혼합형태에 따른 비극성 Optical 포논산란에 대한 연구

Study of The Non-polar Optical Phonon Scattering According to The Mixture of Atoms in a A_{1-x}B_x Alloy Semiconductor

박일수*, 전상국**
(Il Soo Park*, Sang Kook Chun**)

Abstract

The non-polar optical phonon scattering in the valence band depends on the masses, ratios, and types of mixture of constituent atoms. Therefore, the random distribution of atoms in alloy semiconductors should be considered in the analysis of scattering mechanisms. For this purpose, the force equations of n atoms in a unit cell are expressed in a $n \times n$ matrix form to obtain the angular frequencies due to the acoustic and non-polar optical phonons. And, n is then assumed to be infinity. When this work is compared with other results published elsewhere, it is concluded that the independence of atomic displacement or amplitude of oscillation as well as the infinite number of atoms in a unit cell must be taken into account for the random distribution of atoms in alloy semiconductors.

Key Words : valence band, non-polar, phonon scattering, alloy semiconductor, random distribution

1. 서 론

Non-polar optical phonon(NOP)에 의한 산란은 단위격자에 있는 원자들의 상대적인 변이에 의해 발생하므로 단위 격자 안에 있는 원자들의 질량과 혼합비율 및 혼합형태에 의존한다. 따라서, 혼합비율과 혼합형태가 일정한 화합물반도체에서 NOP 산란은 원자질량에만 의존한다. Wiley와 DiDomenico[1,2]의 실험에 따르면, p-형 III-V 화합물에서 NOP 산란이 주된 산란일 때 정공 이동도는 Si과 Ge에서 정공 이동도와 유사함을 밝혔다. 이러한 실험결과를 토대로 Wiley는 화합물반도체에서 NOP 산란을 이해하는데 필요한 optical deformation potential(ODP) 상수에

원자들의 질량을 조합한 함수를 첨가하였다. Wiley[1]가 제안한 식은 화합물반도체에서 NOP 산란을 이해하는데 이용되어 왔지만 아직도 증명된 적은 없다.

Takeda[3] 등은 Wiley[1]가 제안한 ODP 상수에 혼합비율의 함수를 첨가하여 혼합물반도체의 ODP 상수를 제안하였지만, 혼합비율이 한 쪽으로 치우칠 때 ODP 상수가 발산하는 치명적인 오류를 지니고 있다. 반면, Chun과 Wang[4]이 첨가한 혼합비율의 함수에는 Takeda[3] 등의 식에서 보이는 오류는 없기에 지금까지 쓰여 오고있다. 앞서 제안된 식들은 지금까지 증명된 적은 없다. 더구나, 화합물반도체의 원자배열을 고려한 Wiley의 식에 원자들의 혼합비율을 첨가한 것이므로 혼합물반도체에서 불규칙적인 원자 배열을 전혀 고려하고 있지 못한다. 한편, Na와 Chun[5]은 스프링 모델을 이용하여 ODP 상수의 원자질량과 혼합비율에 대한 의존도를 이론적으로 처음 제안하였으며, 혼합형태를 고려하기 위하여 원

* : 인하대학교 전자전기컴퓨터공학부 통합과정

** : 인하대학교 전자전기컴퓨터공학부 부교수

(인천광역시 남구 용현동 253,

Fax : 032-875-5882

E-mail : ilsoo@orgio.net)

2001년 5월 14일 접수, 2001년 6월 25일 1차심사완료

자들의 위치를 불규칙적으로 바꾸는 시도를 하였다. 하지만, Na와 Chun[5]는 단위격자 내의 같은 원자는 같은 진동크기를 갖는다고 가정함으로써 혼합물반도체에서 원자들의 혼합형태를 완벽히 고려하지는 못했다.

NOP 산란은 혼합물반도체의 전기적 성질을 이해하는데 매우 중요한 현상이다. 그럼에도 불구하고, 혼합물반도체에서 NOP 산란을 해석하기 위한 ODP 상수에 대한 연구는 아직 이루어지지 못하였다. 특히, 혼합물반도체의 특징인 여러 가지 원자들의 불규칙적인 배열을 고려하지 못하고 있다. 따라서, 이 논문의 목적은 혼합물반도체에서 NOP 산란 식에 필요한 ODP 상수의 원자질량과 혼합비율의 의존도뿐만 아니라 혼합형태에 따른 변화를 밝혀내는 것이며, 지금까지 제안된 식들을 증명하여 각 연구결과와 장단점을 비교하고자 한다.

2. 이론

Si나 Ge와 같은 IV족 반도체의 단위격자 안에는 두 개의 동일 원자가 존재한다. 두 원자의 상대적 변이는 정공과 상호작용을 통해 에너지와 운동량의 변화를 초래하며 정공의 흐름을 방해한다. 이와 같은 과정은 원자의 변이 형태에 따라 acoustic phonon(AP)과 non-polar optical phonon(NOP)에 의한 산란으로 나뉘어 진다. 이때, 정공과 NOP와의 상호작용에 의한 해밀토니안과 ODP 상수는 아래와 같이 쓸 수 있다[6].

$$H_{ep} = \left(\frac{\bar{M}}{M_{tot}} \right)^{1/2} \vec{D}_o \cdot \vec{u} \quad (1a)$$

$$D_o = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{d_o}{a_o} \quad (1b)$$

\bar{M} 와 M_{tot} 는 단위격자 안에 있는 두 원자의 reduced mass와 총 mass이며, D_o 는 ODP 상수이며 [6], \vec{u} 는 단위격자 안의 두 원자의 상대적 변이(optical displacement)이다. d_o 는 가전자대에서의 변형포텐셜이며 [7] a_o 는 격자상수이다. 단위격자 안에 두 원자가 있을 경우, $\sqrt{\bar{M}/M_{tot}}$ 은 1/2이 되므로 D_o 는 원자의 상대적 변이가 아닌 원자변이(atomic

displacement)에 따라 변하는 에너지이다. 즉, $\sqrt{\bar{M}/M_{tot}}$ 는 원자변이에 따라 변하는 D_o 를 사용하면서 NOP의 원인인 상대적 변이를 사용하기 위하여 첨가된 것이다.

식 (1)에서 정의한 해밀토니안이나 ODP 상수는 단위격자 안에 있는 두 개의 원자가 같은 종류인 Si나 Ge에서 유효하다. 서로 다른 두 종류의 원자가 반복하는 화합물반도체나 여러 종류의 원자가 불규칙적으로 섞여있는 혼합물반도체의 경우, 원자의 상대적 변이와 원자변이의 관계는 원자 무게뿐만 아니라 혼합비율과 혼합형태의 함수가 된다. 따라서, 기존의 ODP 상수와 원자의 상대적 변이를 사용하여 전이율(transition rate)이나 완화시간(relaxation time)을 계산하기 위해선 원자들의 혼합비율과 혼합형태를 대변할 수 있는 함수를 식 (1)에 첨가하여야 한다. 이와 같이 변형한 식은 아래와 같다.

$$H_{ep} = \left(\frac{\bar{M}}{M_{tot}} \right)^{1/2} \vec{D} \cdot \vec{u} \quad (2a)$$

$$D = Q_{NOP} \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{d_o}{a_o} \quad (2b)$$

Q_{NOP} 는 원자들의 혼합비율과 혼합형태를 대변할 수 있는 함수로서, NOP와 AP의 각 주파수의 비(ω_{NOP}/ω_{AP})에 비례하는 함수이다[5]. 원자들의 혼합비율과 혼합형태와 관련이 없는 Si나 Ge과 같은 IV족 반도체의 경우, Q_{NOP} 는 1이 되어야 한다. 또한, 식 (2)를 혼합물반도체에 이용하기 위해서는 선형내삽법(linear interpolation)으로 구한 a_o 와 d_o 를 이용하여야 한다.

원자 진동에 의한 산란과정은 등방성의 탄성운동으로 근사화시킬 수 있다는 사실은 잘 알려져 있다 [8]. 이 경우, ω_{AP} 와 ω_{NOP} 는 원자간의 상호작용을 등방성의 탄성운동으로 가정한 선형스프링 모델을 이용하여 얻을 수 있다. Longitudinal 모드의 각 주파수는 transverse 모드의 그것과 다를 수 있다. 하지만, 전이율이나 완화시간을 계산할 때 사용하는 D_o 와 D 는 longitudinal 또는 transverse 모드에 상관없이 똑같다고 본다[6]. 다이아몬드구조에서는 가전자대의 Γ 지점에서 두 모드의 차이가 전혀 없으므로 Γ 지점 근처에서도 단일주파수 가정법(single-frequency approximation)이 유효하며,

zinc-blende 구조에서도 Γ 지점 근처에서 단일주파수 가정법은 유효한 것으로 알려져 있다[6]. 따라서, 선형스프링 모델을 적용할 때, 단일주파수 가정법을 적용함으로써 원자의 1차원 배열만 고려해도 된다.

원자의 1차원적인 배열은 반도체의 종류에 따라 달라진다. 가장 일반적인 원자들의 배열을 고려하기 위하여 반복되는 단위격자 내의 원자의 수를 n 개로 보았다. 이 때, 단위격자 안의 p 번째 원자의 진동함수는 아래와 같이 쓸 수 있다.

$$u_p = A_p e^{j(\omega t - qpb)} \quad (3)$$

A_p 는 p 번째 원자의 진동크기이고, q 는 파동함수이며, b 는 원자간 거리이다. 가장 가까운 원자간의 상호작용만 고려한 p 번째 원자에서 힘의 방정식은 아래와 같다.

$$M_p \frac{d^2 u_p}{dt^2} = \beta (u_{p-1} - u_p) + \beta (u_{p+1} - u_p) \quad (4)$$

식 (3)을 식 (4)에 대입한 후, n 개 원자에 대한 힘의 방정식을 행렬로 쓴다면 아래와 같다.

$$\begin{bmatrix} y_1 & \beta e^{-jqb} & 0 & 0 & \dots & 0 & \beta e^{jqb} \\ \beta e^{jqb} & y_2 & \beta e^{-jqb} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \beta e^{jqb} & y_3 & \beta e^{-jqb} & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \beta e^{jqb} & y_{n-1} & \beta e^{-jqb} \\ \beta e^{-jqb} & 0 & \dots & \dots & 0 & \beta e^{jqb} & y_n \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ \vdots \\ A_{n-1} \\ A_n \end{bmatrix} = 0 \quad (5)$$

y_p 는 $M_p \omega^2 - 2\beta$ 이다. 식 (5)의 행렬 함수가 해를 갖기 위해서는 $n \times n$ 행렬의 행렬식이 '0'이어야 한다. 이 때, $n \times n$ 행렬식을 내림차순별로 정리한 식은 아래와 같다.

$$C_n (\omega^2)^n + C_{n-1} (\omega^2)^{n-1} + C_{n-2} (\omega^2)^{n-2} + \dots + C_1 (\omega^2)^1 + C_0 = 0 \quad (6)$$

식 (6)의 해 중, 1개는 AP에 의한 것이고 $n-1$ 개는 NOP에 의한 것이다.

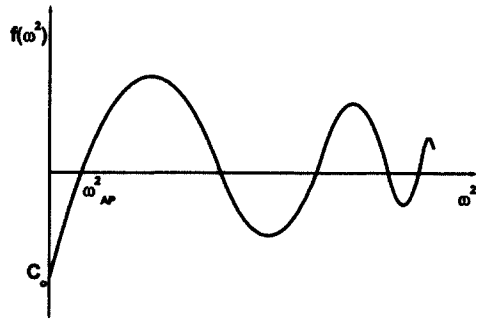


그림 1. AP와 NOP에 의한 각 주파수의 제곱.
Fig. 1. Square of the angular frequencies due to AP and NOPs.

대부분의 AP 및 NOP 산란은 파장이 긴 지역 ($qb \ll 1$ 에서 발생하며, 파장이 긴 지역에서 AP에 의한 해인 ω_{AP}^2 는 NOP에 의한 해들과 비교하여 매우 작다. 그림 1에 따르면, ω_{AP}^2 은 매우 작으므로 $\omega^2 = 0$ 에서 함수의 기울기가 $-C_0/\omega_{AP}^2$ 에 가까운 값이 된다. 이 값은 식 (6)의 왼쪽 항을 일차 미분한 후 ω^2 을 0으로 놓은 값인 C_1 과 같다. 따라서, 가장 작은 해인 ω_{AP}^2 는 아래와 같이 근사화시킬 수 있다.

$$\omega_{AP}^2 \cong -\frac{C_0}{C_1} \quad (7)$$

한편, 서로 다른 NOP에 의한 $n-1$ 개의 해는 기하학적 평균값인 ω_{NOP}^2 로 대변할 수 있다. n 개 해의 모든 곱은 $(-1)^n C_o C_n^{-1}$ 이므로 ω_{NOP}^2 는 아래와 같이 근사화시킬 수 있다.

$$\omega_{NOP}^2 \cong - \left[\frac{C_1}{C_n} \right]^{\frac{1}{n-1}} \quad (8)$$

식 (7)과 (8)에서 얻은 ω_{AP}^2 와 ω_{NOP}^2 를 이용하면, Q_{NOP} 의 형태를 알 수 있다.

$$Q_{NOP} \sim \frac{\omega_{NOP}}{\omega_{AP}} \sim \left(\frac{C_1^n}{C_o^{n-1} C_n} \right)^{1/2(n-1)} \quad (9)$$

앞서 밝혔듯이, IV족 반도체의 경우처럼 $n=2$ 이며 두 원자의 무게가 같을 때, 식 (9)의 Q_{NOP} 는 1이 되어야 한다.

식 (5)의 행렬크기는 단위격자 내의 원자 수에 의해 결정된다. 이 때, 단위격자에 있는 원자들의 진동크기는 전부 다르다고 가정한 것이다. 하지만, 원자들의 진동크기가 원자의 종류에 따라 결정된다면 행렬크기는 반도체를 구성하고 있는 원자 종류의 수에 의해 결정된다. 따라서, 여러 가지 조건을 감안하여 얻은 결과를 지금까지 발표된 논문의 결과와 비교 분석할 필요가 있다.

1) 원자의 진동크기가 독립적일 때

IV족 반도체나 화합물반도체의 단위격자 안에는 두 개의 원자들이 반복되므로 식 (5)는 2×2 행렬로 줄어든다. 한편, 혼합물반도체에서는 서로 다른 종류의 원자들이 불규칙적으로 배열되어있다. 이 경우, 각 원자들의 주변 환경은 제각기 다르므로 각 원자들은 독립적이라 보아야 하며 반복하는 단위격자 안의 원자 수를 한정지을 수 없다. 이 경우, 단위격자 안의 원자들은 제각기 다른 진폭을 갖는다고 보아야 한다. 선형스프링 모델을 사용할 때, 혼합물반도체에서 원자들의 불규칙적인 배열을 고려하기 위해선 반복되는 단위격자가 n 개의 원자로 구성되어 있다고 보아야 하며, n 개 원자의 힘의 방정식을 표현한 $n \times n$ 행렬로부터 각 주파수를 구한 후 n 을 무한대

로 발산시켜야 한다.

A 와 B 원자로 구성되어있는 혼합물반도체 ($A_{1-x}B_x$)의 경우, AP와 NOP의 각 주파수를 계산하기 위하여 식 (5)의 $n \times n$ 행렬로부터 얻은 상수들은 아래와 같다.

$$C_o = 2(-1)^n \beta^n (1 - \cos nqb) \quad (10a)$$

$$C_1 = n^2 (-1)^{n-1} \beta^{n-1} \{ (1-x)M_A + xM_B \} \quad (10b)$$

$$C_n = (M_A^{1-x} M_B^x)^n \quad (10c)$$

M_A 와 M_B 는 A 와 B 원자의 무게이다. 식 (10)의 상수들을 식 (9)에 넣으면 Q_{NOP} 의 형태를 얻을 수 있다. $n=2$ 이고 $M_A=M_B$ 인 IV족 반도체일 경우, Q_{NOP} 가 1이 되도록 표준화시키면 아래와 같다.

$$Q_{NOP} = \sqrt{\frac{(1-x)M_A + xM_B}{M_A^{1-x} M_B^x}} \quad (11)$$

2) 원자의 진동크기가 독립적이나 단위격자 안의 원자 수를 2로 표준화(normalization)할 때

앞서 밝혔듯이, Wiley[1]는 단위격자 안에 2개의 다른 원자들이 있는 화합물반도체에 적용될 수 있는 Q_{NOP} 를 제안하였다. Chun과 Wang[4]은 Wiley의 식을 바탕으로 혼합물반도체에 적용할 수 있는 Q_{NOP} 를 제안하였으므로 그들의 식은 단위격자 안에 2개의 원자가 있다는 것을 가정한 셈이다. 따라서, Chun과 Wang이 제안한 Q_{NOP} 를 얻기 위해선 혼합물반도체에서 원자들의 불규칙적인 배열을 감안하여 n 개의 원자가 배열되어 있다고 보아야 하며, $n \times n$ 행렬로부터 각 주파수를 구한 후 n 을 무한대가 아닌 2로 수렴하도록 해야 한다. 즉, A 와 B 원자로 구성되어있는 혼합물반도체($A_{1-x}B_x$)의 경우, $2(1-x)$ 개의 A 원자와 $2x$ 개의 B 원자가 단위격자 안에서 불규칙적으로 배열되어 있다고 보아야 한다.

단위격자 안에 n 개의 원자가 있는 경우, Q_{NOP} 를 얻기 위해 필요한 상수들은 식 (10)에서 이미 얻었다. $2(1-x)$ 개의 A 원자와 $2x$ 개의 B 원자가 단

위격자 안에서 불규칙적으로 배열되어 있는 경우에 대해서는 아래와 같다.

$$C_o = 2\beta^2 (1 - \cos 2qb) \quad (12a)$$

$$C_1 = -4\beta \{ (1-x)M_A + xM_B \} \quad (12b)$$

$$C_n = (M_A^{1-x} M_B^x)^2 \quad (12c)$$

위의 상수들을 이용하여 표준화된 Q_{NOP} 의 형태를 구하면 아래와 같다.

$$Q_{NOP} = \frac{(1-x)M_A + xM_B}{M_A^{1-x} M_B^x} \quad (13)$$

식 (13)의 결과는 Chun과 Wang이 제안한 식과 일치한다.

3) 같은 종류의 원자의 진동크기는 같다고 할 때

Na와 Chun[5]은 혼합물반도체에서 원자들의 불규칙적인 배열을 고려하기 위하여 단위격자 안의 원자수를 n 개로 가정한 후 서로 다른 원자들의 위치를 교환하였다. 그리고 각 주파수를 구한 후 n 을 무한대로 발산시켰다. 다만, 1)의 방법과 다른 점은 각 원자들이 갖는 환경이 제각기 다르더라도 단위격자 안에서 같은 종류의 원자들은 같은 진동크기를 갖는다고 가정하였다.

A 원자와 B 원자로 구성되어 있는 혼합물반도체 $A_{1-x}B_x$ 의 경우, 단위격자 안에는 A 원자가 $n(1-x)$ 개이고 B 원자가 nx 개이다. A 원자와 B 원자의 변이를 각각 u_A 와 u_B 라 할 때, n 개 원자의 운동방정식은 아래와 같은 2×2 행렬로 축소된다.

$$\begin{bmatrix} y_A + \frac{2(n(1-x)-1)}{n(1-x)} \beta \cos qb & \frac{2\beta}{n(1-x)} \cos qb \\ \frac{2\beta}{nx} \cos qb & y_B + \frac{2(nx-1)}{nx} \beta \cos qb \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} u_A \\ u_B \end{bmatrix} = 0 \quad (14)$$

y_A 는 $M_A \omega^2 - 2\beta$ 이고 y_B 는 $M_B \omega^2 - 2\beta$ 이다. 파장이 긴 지역($qb \ll 1$ 에서, 식 (14)의 2×2 행렬로부터 얻은 상수들은 다음과 같다.

$$C_o \approx 4\beta^2 \frac{1 - \cos qb}{n(1-x)x} \quad (15a)$$

$$C_1 \approx -2\beta \frac{(1-x)M_A + xM_B}{n(1-x)x} \quad (15b)$$

$$C_2 = M_A M_B \quad (15c)$$

위의 상수들을 식 (9)에 넣은 후 표준화된 Q_{NOP} 의 형태를 구하면 아래와 같다.

$$Q_{NOP} = \frac{(1-x)M_A + xM_B}{2\sqrt{(1-x)M_A^{1-x} xM_B^x}} \quad (16)$$

식 (16)은 Na와 Chun[5]이 제안한 식과 일치한다. 앞서 밝혔듯이, 같은 종류의 원자의 진동크기는 같다고 가정하여 원자들의 불규칙적인 배열로 인한 진동크기의 독립성을 묵과하였다.

4) Takeda[3]의 결과

Takeda[3] 등은 화합물반도체에 적용한 Wiley의 식을 바탕으로 혼합물반도체 $A_{1-x}B_x$ 에 적용할 수 있는 Q_{NOP} 를 제안하였으며, 그들의 제안 식은 아래와 같다.

$$Q_{NOP} = \frac{M_A + M_B}{(1-x)M_A^{1-x} xM_B^x} \quad (17)$$

식 (17)는 식 (5)의 행렬로부터 재생산할 수 없었다. 다만, Takeda 등이 제안한 식 (17)은 식 (16)과 유사한 것으로 보아 원자들의 불규칙적인 배열로 인한 진동크기의 독립성이 포함되지 않은 것으로 추정된다.

3. 결과 및 고찰

그림 2는 이미 발표된 결과와 비교하기 위하여 두 가지 종류의 원자로 구성된 $Si_{1-x}Ge_x$ 혼합물반도체에서 Q_{NOP} 를 계산한 것이다. 점선은 Takeda[3] 등이 제안한 식 (17)을 바탕으로 얻은 결과이다. 두 원자

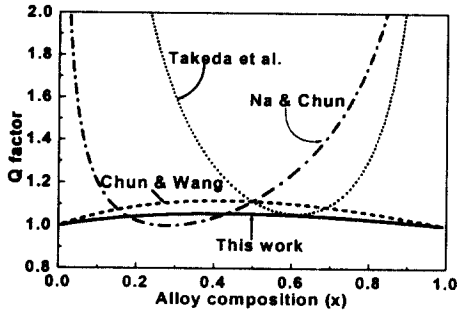


그림 2. $Si_{1-x}Ge_x$ 혼합물반도체에서 혼합비율 x 에 따른 다른 Q_{NOP}

Fig. 2. Q_{NOP} as a function of composition ratios in $Si_{1-x}Ge_x$ alloy semiconductor.

의 무게가 같고 혼합비율이 같다면 Q_{NOP} 는 1이 되어야 하지만 Takeda 등이 제안한 식 (17)의 결과는 8이 된다. 이와 같은 모순 점을 보완하기 위해선 식 (17)에 1/8을 곱해야 한다. 따라서, 그림 2에서의 점선은 식 (17)에 1/8을 곱한 값이다. $Si_{1-x}Ge_x$ 혼합물반도체에서 혼합비율이 Si 또는 Ge으로 치우칠 때, Q_{NOP} 는 1에 수렴하여야 타당하지만, Takeda의 결과는 오히려 발산하는 오류를 보여준다. 따라서, Takeda의 식은 혼합물반도체의 ODP 상수를 보완하기 위한 Q_{NOP} 로 적당하지 않다.

Dot-dashed line은 Na와 Chun[5]이 제안한 식과 동일한 결과를 보여주는 식(16)을 이용하여 계산한 값이다. 혼합비율이 Si 또는 Ge쪽으로 치우치면 Takeda[3] 등의 결과와 마찬가지로 Q_{NOP} 의 값은 발산한다. Na와 Chun[5]은 본 연구에서와 마찬가지로 정공과 격자파동간의 상호작용을 선형 스프링모델로서 해석하였다. 두 가지 종류의 원자로 구성된 혼합물반도체의 단위격자는 크기는 무한대로 보았지만, 단위격자 안에서 같은 종류의 원자들은 같은 진동크기를 갖는다고 가정하였기에 $n \times n$ 행렬은 2×2 행렬로 축소되었다. 결국, Na와 Chun은 원자들의 불규

칙적인 배열로 인한 진동크기의 독립성을 묵과하였다. 결과적으로, 혼합비율이 Si 또는 Ge쪽으로 치우칠 때 Q_{NOP} 가 발산하는 이유는 원자들의 불규칙적인 혼합형태를 고려하지 못했기 때문이다.

Dashed-line은 Chun과 Wang[4]이 제안한 식과 같은 결과를 보여주는 식 (13)을 이용하여 계산한 값이다. Chun과 Wang[4]이 제안한 식도 화합물반도체에서 사용된 Wiley[1]의 Q_{NOP} 를 변형한 것이다. 하지만, Takeda[3] 등이 제안한 식과는 달리, 혼합비율이 Si 또는 Ge으로 치우치더라도 Q_{NOP} 는 발산하지 않고 1로 수렴한다. 또한, 두 원자의 비율이 같고 무게가 같을 때에는 Q_{NOP} 는 1로 표준화된다. 이와 같이, Chun과 Wang[4]이 제안한 식은 모순 점을 갖고 있지 않기에 지금까지 혼합물반도체에 사용되어 왔다. 다만, 식 (13)은 혼합물반도체에서 불규칙적인 원자의 배열을 고려하였지만 단위격자 안의 원자 수를 2로 표준화하는 가정을 한 셈이다. 다음에서 밝혀지듯이, 이 같은 가정은 약간의 오차를 초래한다.

실선은 식 (11)을 이용하여 얻은 값이다. 혼합비율이 Si 또는 Ge으로 치우치더라도 Q_{NOP} 는 발산하지 않고 1이 되며 두 원자의 비율이 같고 무게가 같을 때 Q_{NOP} 는 1이 된다. 실선으로 표시된 Q_{NOP} 는 원자의 비율이 변함에 따라 거의 직선에 가깝다. 혼합비율이 비슷할 때, 5% 정도 상승하는 이유는 혼합물을 구성하고 있는 Si와 Ge의 무게가 다르기 때문이다. 혼합물반도체를 구성하고 있는 원자의 무게차이가 클수록 직선 값에서 벗어난다. Chun과 Wang의 결과와 비교해 볼 때, 그들의 결과는 $x=0.5$ 에서 5% 정도 큰 값을 보인다. 하지만, 혼합물반도체를 구성하고 있는 원자들의 무게차이가 클수록 이 오차는 커진다.

4. 결론

혼합물반도체의 가전자대에서 NOP에 의한 산란을 이해하는데 필요한 ODP 상수를 구하였다. 산란의 원인이 되는 원자의 변이가 물질을 구성하고 있는 원자들에 따라 달라진다는 사실을 고려하기 위하여 원자질량과 혼합비율 및 혼합형태를 고려할 수 있는 함수인 Q_{NOP} 를 ODP 상수에 첨가하였다. 혼합물반도체에서 원자들의 불규칙적인 배열을 고려하기 위하여 반복되는 단위격자가 n 개의 원자로 구성되어

있다고 보았으며, n 개 원자의 운동방정식을 $n \times n$ 행렬로 변환한 후 각 주파수를 구하였으며, n 을 무한대로 발산시켰다. 이러한 방법으로 얻은 Q_{NOP} 는 혼합비율이 한 쪽으로 치우칠 때 발산하는 모순 점을 완전히 해결하였다. 혼합물 반도체를 구성하고 있는 원자의 무게차이가 크지 않다면 Q_{NOP} 는 혼합비율에 상관없이 거의 1에 가까우며, 혼합물반도체를 구성하고 있는 원자의 무게차이가 클수록 직선값에서 벗어난다. 또한 이 논문에서는 다른 논문에서 얻은 결과나 제안한 식을 처음으로 증명하였으며 그 결과들을 비교하였다. 결론적으로, 혼합물반도체에서 원자들의 불규칙적인 배열을 고려하기 위해선 단위격자 내의 원자 수를 무한대로 보아야 하며, 각 원자들의 주변환경이 모두 다르다고 보아야 하며, 그리고 원자들의 진동크기도 제각기 독립적이라고 보아야 한다.

감사의 글

이 논문은 1999년도 한국학술진흥재단의 연구비에 의하여 연구되었음. (KRF-99-041-E00201)

참고 문헌

- [1] J. D. Wiley, "Valence-band deformation potentials for the III-V compounds", Solid State Communications, Vol. 8, pp. 1865-1868, 1970.
- [2] J. D. Wiley and M. DiDomenico, "Lattice Mobility of Holes in III-V Compounds", Phys. Rev. B, Vol. 2, No. 2, pp. 427-433, 1970.
- [3] K. Takeda, A. Taguchi, and M. Sakata, "Valence-band parameters and hole mobility of Ge-Si alloys-theory", J. Phys. C: Solid State Phys., Vol. 16, pp. 2237-2249, 1983.
- [4] S. K. Chun and K. L. Wang, "Effective Mass and mobility of holes in strained $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ layers on (001) $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ substrate", IEEE Transactions on Electron Device, Vol. 39, No. 9, pp. 2153-2164, 1992.
- [5] 나두현, 전상국, "혼합물에서 non-polar optical phonon에 의한 변형포텐셜", 전기전자재료학회 논문지, 12권 1호, pp. 994-998, 1999.
- [6] B. K. Ridley, "Quantum processes in

semiconductors", Third Ed., Oxford university press, 1993.

- [7] G. L. Bir and G. E. Pikus, "Theory of the deformation potential for semiconductors with a complex band structure", Soviet Phys. Solid State Vol. 2, pp. 2039-2051, 1960.
- [8] J. Bardeen and W. Shockley, "Deformation potentials and mobilities in non-polar crystals", Phys. Rev., Vol. 80, No. 1, pp. 72-80, 1950.