

## 단일 온도대역 수평 Bridgman(1-T HB) 법에 의한 GaAs 단결정 성장시 As 원소의 초과 유입량 계산

오명환, 주승기\*

LG 전선 연구소

\* 서울대학교 재료공학부

### Calculation of the amount of excess As charge for the GaAs single crystal growing with the horizontal Bridgman method of single temperature zone(1-T HB)

Myung Hwan Oh and Seung Ki Joo\*

R & D Center, LG Cable and Machinery, Anyang 430-080

\*Division of Materials Science and Engineering, Seoul National Univ., Seoul 151-742

#### 초 록

증기압 제어를 위한 저온부를 없애고, 고온부의 단일 온도영역만으로 GaAs 단결정을 성장 시키는 단일 온도대역 수평 Bridgman(1-T HB : single temperature zone horizontal Bridgman) 방식에서는 증기압에 상응할만한 반응관 내부의 압력을 As 초과 유입량의 기화에 의하여 유지해야 하므로 그 양을 정밀하게 결정해 주어야 한다. 이것을 위하여, 우선적으로 Ga-As 계에서의 열화학적 특성을 규명하였고, 이에 근거하여 단일 온도대역 수평 Bridgman 법으로 결정성장할 때의 As 초과 유입량을 GaAs 장입량, 반응관 치수, 온도구배 등에 의한 일반해로 유도하였다. 따라서 단일 온도대역 수평 Bridgman 법에 의한 GaAs 단결정 성장의 이론적 근거를 마련하였다.

#### ABSTRACT

Calculation of the amount of excess arsenic charge has been carried out for the single crystal growth of GaAs with 1-T HB(single temperature zone horizontal Bridgman) method which has no low temperature arsenic zone. Based upon the investigation of the thermochemical properties of the Ga and As system, a general equation for the excess amount of arsenic element could be derived as a function of the charge weight of GaAs, dimension of the ampoule and temperature gradient of the furnace. From this result, a theoretical background of the 1-T HB method has been constructed for the single crystal growth of GaAs.

## 1. 서 론

GaAs 단결정 성장시 휘발성이 큰 As 성분의 기화를 방지하기 위하여 밀폐계를 써서 내부 압력을 제어한다. 이것은 GaAs melt가 형성되었을 때 melt로부터 생성되는 해리압(dissociation pressure)을 상쇄시켜 melt 조성비(stoichiometry)를 유지해야 단결정 성장이 가능하기 때문이다.

현재 범용적으로 사용되는 이중 온도대역 수평 Bridgman(2-T HB : double temperature zone horizontal Bridgman)이나 삼중 온도대역 수평 Bridgman(3-T HB : three temperature zone horizontal Bridgman) 방식에서는, 추가 장입된 As량이 저온부의 온도제어에 의하여 그 증기압이 제어되도록 함으로써<sup>1)</sup> 밀폐된 석영 반응관 내부의 분위기압이 유지되도록 한다<sup>2,4)</sup>. 그런데, 결정성장이 진행되는 과정이 밀폐계 내부이므로 그 분위기압의 정밀 측정이 불가능하기 때문에 저온부의 온도변화에 따른 결정결함 등의 특성변화 측정에 의해 실험적으로 가장 적합한 온도설정을 할 수밖에 없다<sup>1,4)</sup>. 그러나, As 원소의 낮은 기화계수(evaporation coefficient) 특성과<sup>5,6)</sup>, 1200°C 이상의 고온부와 공존하는 600°C 정도의 저온부를  $\pm 0.5^\circ\text{C}$  이내로 정밀하게 온도제어를 하기 위해서는 성장장치 상으로 많은 어려움이 따르기 때문에 실험적 연구보고도 사람마다 많은 편차를 보이는 현실이다<sup>1,4, 7-10)</sup>.

이러한 실험적 접근과 병행하여 반응관 내부의 평형압력을 얻기위한 As원소에 대한 열화학적 특성의 연구도 최근에 이르기까지 많이 보고되었다.<sup>11-16)</sup> 그러나 각 연구자마다 결과치의 편차가 심하여, 예를 들어 620°C를 기준하면 약 0.68 기압에서<sup>11)</sup> 1.32 기압까지<sup>15)</sup> 증기압 차이가 나는 실정이다. 이러한 요인은 크게 두 가지가 있다. 첫째, 순수 As 원소의 산화가 쉽게 일어나서 실제 측정시  $\text{As}_2\text{O}_3$ 나  $\text{As}_3\text{O}_5$  등과 같은 산화물 특성이 실험결과와 혼재될 수 있다는 것과<sup>11)</sup>, 둘째

As 원소가 600°C 이상의 온도에서 증기압이 1기압 이상으로 커지는 높은 휘발성 때문에<sup>11,12)</sup> 상온 부근에서 측정된 열화학 자료를 고온에까지 외삽하는 방법을 대개 쓰기 때문이다. 따라서 실제 GaAs 결정성장시 필요로 하는 600°C 이상의 온도영역에서 증기압의 편차는 심할 수 밖에 없다.

본 연구에서는, 저온부가 없는 단일 온도대역 수평 Bridgman(1-T HB) 법에 의해 단결정을 성장시키고자 할 때, 종래의 이중 또는 삼중 온도대역 수평 Bridgman(2-T, 3-T HB) 방식의 As 증기압 제어방식과는 달리 밀폐계 내부의 필요 분위기압을 As 초과 유입량의 기화를 통하여 제어하고자 하므로 그 장입량을 정밀하게 결정해 주어야 한다. 그렇지 않으면, 결정성장 중 반응관이 부풀거나 수축하여 결정성장 자체가 불가능하다. 왜냐하면, 기존결정성장 방식의 경우는 저온부가 공존하기 때문에 저온부의 온도가 곧 증기압을 결정하였으나, 1-T HB 방식에서는 저온부가 없이 고온부만 존재하므로 As 원소의 초과 장입량에 따라 반응관의 내부압력이 결정되기 때문이다.

이러한 측면 외에 결정 성장시 가변적인 공정 변수인 온도구배나 반응관 치수, 장입량 등에 따른 일관된 일반해를 유도해야 실제 1-T HB 공정에서 활용할 수 있기 때문에, 이를 위하여 GaAs 용액 형성에 따른 열역학적 특성에 대한 정성적 이해 외에 반응관 내부의 평형 분위기압과 같은 정량적 값들에 대한 계산이 필요하다. 왜냐하면 실험적으로 결정할 수 없기 때문이다. 따라서 우선되어야 할 것은, Ga 원소와 As 원소가 GaAs 용액을 형성함에 따른 열역학적 특성의 규명에 의하여 As 증기상의 해리압을 정확히 얻는 것이며, 이에 근거해야만 1-T HB 법의 성장 조건에 맞는 As 초과 유입량의 일반해를 구할 수 있다.

## 2. 해리압 계산

GaAs 용액이 형성된 후 이 용액과 평형을 이

단일 온도대역 수평 Bridgman(1-T HB) 법에 의한  
GaAs 단결정 성장시 As 원소의 초과 유입량 계산

루는  $As_2(g)$ ,  $As_4(g)$  증기상의 평형 분압을 구하기 위하여 Vieland<sup>17)</sup>와 Thurmond<sup>18)</sup>, Arthur<sup>19)</sup>가 적용한 (1) 식을 적용하였다.

$$a_{As} = X_{As} \cdot \gamma_{As} = \left( \frac{P_{As_4}}{P^o_{As_4}} \right) = \left( \frac{P_{As_2}}{P^o_{As_2}} \right) \quad (1)$$

- $a_{As}$  : GaAs melt에서의 As 원소의 활동도
- $\gamma_{As}$  : GaAs melt에서의 As 원소의 활동도 계수
- $X_{As}$  : GaAs melt내의 As 조성
- $P_{As_4}$  : GaAs melt와 평형을 이루는  $As_4$  (g)의 해리압
- $P_{As_2}$  : GaAs melt와 평형을 이루는  $As_2$  (g)의 해리압
- $P^o_{As_4}$  : As(l)과 평형을 이루는  $As_4(g)$ 의 순수 증기압
- $P^o_{As_2}$  : As(l)과 평형을 이루는  $As_2(g)$ 의 순수 증기압

GaAs 용액의 비이상적(non-ideal) 특성을 감안하여, 규칙용액(regular solution) 모델에 의하여 (1) 식의 As 값을 (2) 식과 같이 정의할 수 있다.

$$\Delta G_{As}^{i,E} = RT\gamma_{As} \quad (2)$$

- $\Delta G_{As}^{i,E}$  : As 성분의 과잉 분몰자유에너지 (partial molar excess free energy)
- R : 기체상수(gas constant)

GaAs 용액형성에 따른 과잉 자유에너지를 구하기 위하여 Brebrick이 제시한 조성의 3차 함수모델<sup>20)</sup>(cubic function of composition)을 그 용액형성에 따른 혼합열(mixing enthalpy) 및 과잉 엔트로피(excess entropy) 값인  $\Delta H^i_m$ ,  $\Delta S^{i,E}_m$  에 적용하면 다음과 같다.

$$\Delta H^i_m = -5186 \times (1-x) \{1 + 1.83(x-5)\} \quad (3)$$

$$\Delta S^{i,E}_m = 1.6735 \times (1-x) \{1 - 4(x-0.5)\} \quad (4)$$

- $\Delta H^i_m$  : Ga과 As의 용액형성에 따른 혼합열
- $\Delta S^{i,E}_m$  : Ga과 As의 용액형성에 따른 이상 용액대비 과잉 엔트로피

분몰량(partial molar quantity)의 정의로부터, (3), (4) 식에서  $\Delta H^i_{Ga}$ ,  $\Delta S^{i,E}_m$  값을 구하여 아래 (5) 식에 대입하면 (2) 식의  $\gamma_{As}$  값을 구할 수 있다.

$$\begin{aligned} \Delta G_{As}^{i,E} &= \Delta H^i_{As} - T \Delta S^{i,E}_{As} = RT \ln \gamma_{As} \\ &= -\frac{(1-x)^2}{RT} \{5186(3.66x + 0.085) + \\ &\quad 1.6735T(3.026 - 8.104x)\} \quad (5) \end{aligned}$$

이 식에 의한  $\gamma_{As}$  값을 (1) 식에 대입하면,  $P^o_{As_4}$ 나  $P^o_{As_2}$  값을 알 때,  $P_{As_4}$ ,  $P_{As_2}$  값을 구할 수 있다. 한편 (1) 식의 T 값에는, 실제 결정성장이 일어나는 온도가 되게 하기 위하여 액상선 온도의 값을 대입해야 한다. 이에대한 실험치는 많은 보고가 있었으나<sup>13,15,18,19)</sup>, 본 연구에서는 Thurmond나 Arthur가 제시한 규칙용액 모델에 근거한 실험식보다는 Brebrick의 선형온도 근사법(linear temperature approximation method)<sup>21)</sup>이 더 정확한 것이라 보여 Ga-As 계에 적용하였다. 이 근사법에의 적용시 대입해야 하는 상수값인 용융열, 용융 엔트로피 및 용융점(m.p.) 값에는 Lichter · Sommelet의 실험치를 사용하였다<sup>22)</sup>. 그리고 평균 생성열과 용융점에서의 Ga과 As 성분의 분몰량은 앞서 적용한 (4) 식에 근거하여 구한뒤 대입하면 액상선(liquidus line)은 다음 (6) 식과 같이 구할 수 있다.

$$T = \frac{28406-5168\{(13.66x+0.085)(2x^2-2x+1)-1.83x^2\}}{16.224+1.6735\{(2x^2-2x+1)(3.026-8.104x)+4.052x^2\}-Rln4x(1-x)} \quad (6)$$

윗 식에 의한 Ca-As 계의 액상선은 Fig. 1과 같다.

(1) 식에서  $P_{As_4}$  및  $P_{As_2}$  값을 계산하려면  $P_{As_4}^0$  나  $P_{As_2}^0$  값을 대입해야한다. 이 순수 증기압 값은 현재까지 실험치가 800°C 이상의 온도에서 제시되지 않았으므로, 인용가능한 열화학적 자료로부터 계산하기 위하여 다음의 세가지 가정을 적용하였다. 첫째 As(s)의 용융점은 817°C로 하였으며, 둘째 As(l)의  $C_p^0$  값을 As(s)의  $C_p^0$  값을 외삽하여 구하였고, 셋째 주요 기체상은  $As_4$ 와  $As_2$  뿐이라 하였다.

고체 As(s)의 열화학적 자료는 Herrick · Feber의 것을 인용하고<sup>(11)</sup>,  $As_2$  및  $As_4$  기체상의 자료는 Rau의 값을 사용했을 때<sup>(12)</sup> As(s)와 평형을 이루는  $As_4$  및  $As_2$  증기상의 순수 증기압은 아래 (7) 식과 같이 구할 수 있다.

$$4As(s) \rightleftharpoons As_4(g)$$

$$\Delta G_T^0 = -RT \ln P_{As_4}^0$$

$$= 37971.7 - 61.87T + 2.5733 \times 10^{-3} T^2$$

$$+ \frac{49518}{T} + 2.467T \ln T \quad (7)$$

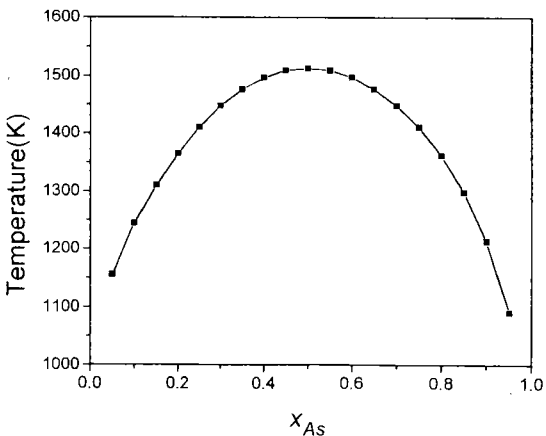
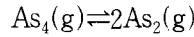


Fig. 1 Calculated liquidus line in the Ga-As system



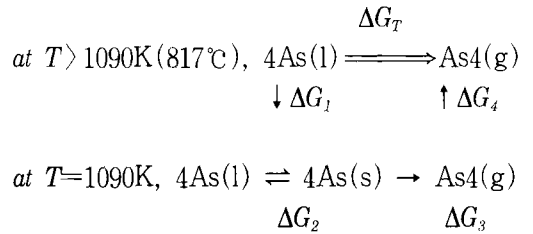
$$\Delta G_T^0 = -RT \ln \left( \frac{P_{As_2}^0{}^2}{P_{As_4}^0} \right)$$

$$= 54433.65 - 49.693T$$

$$- 2.05 \times 10^{-5} T^2 +$$

$$2.041T \ln T - \frac{1.3 \times 10^4}{T} \quad (8)$$

앞서 세운 가정에 의해, As(s)는 817°C에서 용융되므로 그 이상의 온도에서 As(l)와 평형을 이루는 증기압은 다음과 같은 Kirchhoff diagram으로 구할 수 있다.



$$\Delta G_T = (\Delta H_1 + \Delta H_2 + \Delta H_3 + \Delta H_4) -$$

$$T(\Delta S_1 + \Delta S_2 + \Delta S_3 + \Delta S_4)$$

$$= -RT \ln P_{As_4}^0$$

$$= -1891.855 - 25.298T + 2.577 \times 10^{-3} T^2$$

$$+ \frac{49518}{T} + 2.467T \ln T \quad (9)$$

$As_2(g)$  성분이 As(l)와 평형을 이룰때 갖는 분압은 (8), (9) 식을 연립하면 되므로, 그 결과는 Fig. 2에 도시되었다.

본 계산 결과에 의하면 순수 As(l)와 평형을 이루는  $As_4(g)$ 의 증기압  $P_{As_4}^0$  값은 GaAs의 용

단일 온도대역 수평 Bridgman(1-T HB) 법에 의한  
GaAs 단결정 성장시 As 원소의 초과 유입량 계산

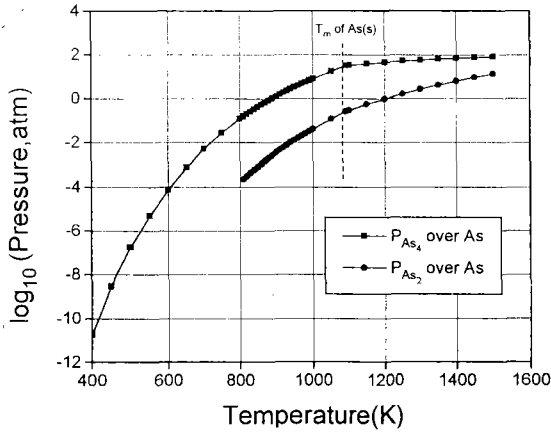


Fig. 2 Equilibrium partial pressure of  $As_2(g)$ ,  $As_4(g)$  over pure  $As(s)$  and  $As(l)$

**Table 1.** Calculated partial pressures of dissociation from GaAs melt along the liquidus line (T : liquidus temp.,  $\gamma_{As}$  : activity coefficient of As in GaAs melt,  $P_{As_2}$ ,  $P_{As_4}$  : partial pressure of each vapor species over GaAs melt)

xAs	T(K)	$\gamma_{As}$	$P_{As_2}$ (atm)	$P_{As_4}$ (atm)	$P_{As_2}+P_{As_4}$ (atm)
0.10	1243.48	0.1025	8.820 E-5	8.130 E-7	8.880 E-5
0.20	1364.75	0.1725	2.852 E-3	1.040 E-4	2.957 E-3
0.30	1447.33	0.2751	2.990 E-2	3.960 E-3	3.400 E-2
0.40	1493.95	0.4030	0.159	6.248 E-2	0.221
0.45	1508.95	0.4733	0.298	0.192	0.490
0.50	1513.005	0.5435	0.530	0.511	1.042
0.55	1509.00	0.6122	0.746	1.200	1.948
0.60	1497.03	0.6779	1.010	2.514	3.524
0.70	1448.50	0.7956	1.375	8.232	9.606
0.80	1361.84	0.8918	1.192	18.98	20.17
0.90	1214.28	0.9640	0.468	25.80	29.27

용점(1513K)에서 83기압,  $As_2(g)$ 의 증기압  $P_{As_2}^0$ 는 6.7 기압인 것으로 계산되었다. (8),(9) 식에 의해  $P_{As_4}^0$ ,  $P_{As_2}^0$  값을 알고 (6) 식에 의해 T를 구했으므로 (1) 식에 대입하면 곧  $P_{As_2}$  및  $P_{As_4}$ 를 얻을 수 있다. 따라서 Ga-As의 전 조성에 걸쳐 액상선 온도 및 평형분압을 구하였고 그 결과가 Table 1. 에 나타나 있다. 또한 Ga-

As 계에서의 온도-증기압-조성 관계도를 Fig. 3과 같이 종합하여 나타낼 수 있다.

실제 GaAs 결정 성장시 melt는 액상선 온도 보다 높은 상태로 가열되기 때문에 melt 온도에 따른 해리압 변화를 얻기 위하여, (5) 식에 (6) 식의 액상선 온도 대신 임의의 melt 온도 값을 대입하여 그에 따른 (8),(9) 식의  $P_{As_4}^0$ ,  $P_{As_2}^0$  값을 계산하여 해리압을 구한 결과가 Fig. 4이다. 이 결과에서 melt의 해리압은 As 조성의 증가에 따라 지수적으로 증가하지만, melt의 온도에는 선형으로 증가함을 알 수 있고, GaAs melt가 1260℃일때 총 해리압의 크기는 1.112기압인 것으로 계산되어 GaAs의 용융점인 1240℃에서의 1.042 기압보다 0.07 기압이 커서 과열(superheating)에 따른 해리압 차이는 7% 미만임을 알 수 있다. 따라서 GaAs의 결정 성장시 melt 조성비를 유지하는데 필요한 반응관 내부 압력을 1.042 기압이라 해도 무방하다고 판단된다.

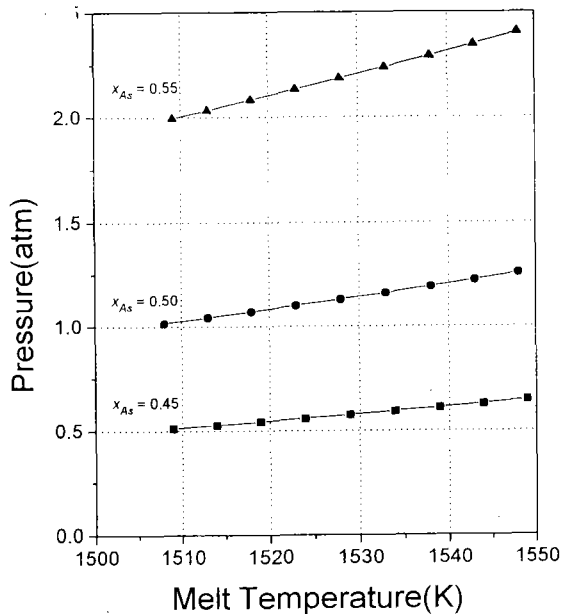


Fig. 4 Relationship between total dissociation pressure of As vapours and melt temperature for the different melt composition

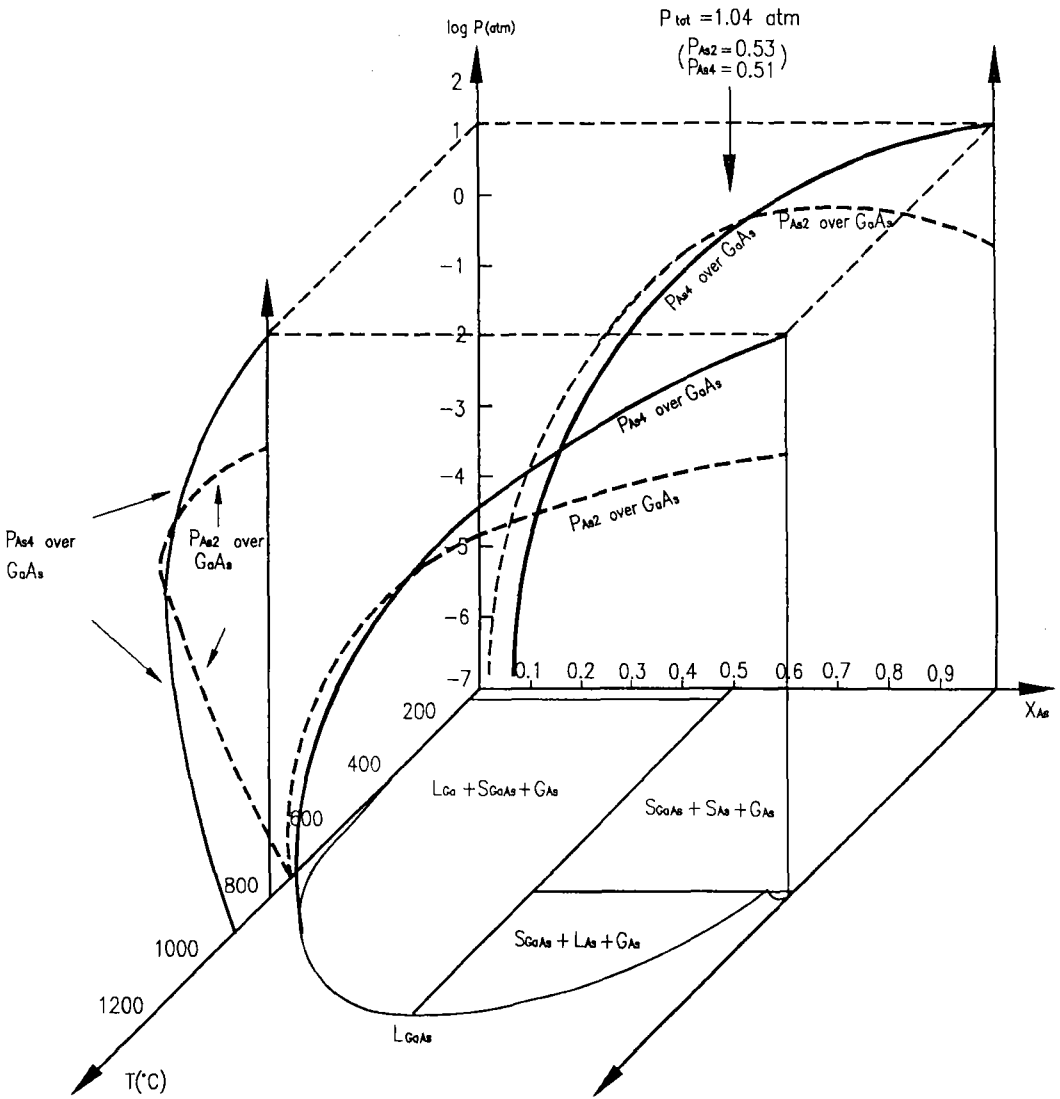


Fig. 3. T-P-X relationship in the Ga-As system

(T: liquidus line temperature, P: partial pressure of As vapor species, X: melt composition of As)

### 3. 1-T HB 공정에서의 As 초과 유입량

앞서 계산한 바에 의하면 GaAs melt 형성시 As 증기상들의 총 분압은 1.042 기압인 것으로 나타났다. 이를 근거하여 다음 과정에 의해 1-T HB 공정에 필요한 As 초과 유입량을 정밀 계산할 수 있다. 우선 Fig. 5의 l 구간과 같은 온도

구배를 갖는 석영 반응관 내의 분위기압을 1.042 기압으로 유지하기 위한 As 원소의 몰(mole) 수를 구분구적법으로 계산하면 다음과 같다.

Fig. 5의 l 구간을 n 등분하면 k번째 구간에서의 온도  $T_k$  는 다음과 같다.

단일 온도대역 수평 Bridgman(1-T HB) 법에 의한  
GaAs 단결정 성장시 As 원소의 초과 유입량 계산

$$T_K = \left(\frac{l}{n}\right) \cdot K \cdot \frac{\Delta T}{l} + T_e \quad (10)$$

$$[\Delta T = T_h - T_e]$$

반응관 내부의  $As_4(g)$  및  $As_2(g)$  기체상이 모두 이상기체라 가정하면<sup>12)</sup> 온도  $T_K$  를 갖는 영역에서의 증기상 몰 수는 아래의 (11) 식과 같다.

$$n_K = \frac{PV_K}{RT_K} \quad (11)$$

$$= \frac{P}{R} \cdot \left(\frac{l}{n}\right) \cdot A \cdot \frac{1}{\left\{T_e + \left(\frac{l}{n}\right)K\left(\frac{\Delta T}{l}\right)\right\}}$$

이 식에서 P 값을 대입하면 곧  $n_K$ 를 구할 수 있는데 계산의 정확성을 기하기 위하여 T에 따른  $P_{As_4}$  및  $P_{As_2}$ 의 분압변화를 (8) 식에 근거하여 (12) 식과 연립하여 각각 구하면 Table 2,

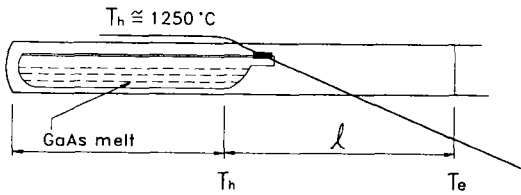


Fig. 5 Cross-section view of 1-T HB process ampoule and a typical temperature profile for the growth of GaAs single crystals

Fig. 6과 같다.

1-T HB 결정성장 시 Fig. 5의  $T_e$  온도는  $1000^\circ C$  이상이므로 Fig. 6에서 알 수 있듯이  $P_{As_4}$ ,  $P_{As_2}$ 의 분압이 (12) 식과 같이 T의 일차함수로 표시할 수 있다.

$$P_{As_4} = -2.4 \times 10^{-3}T + 4.267 \text{ (기압)}$$

$$P_{As_2} = 2.4 \times 10^{-3}T - 3.23 \text{ (기압)} \quad (12)$$

(1300 K ≤ T ≤ 1550 K)

이 식을 (11) 식에 대입하여  $n^{As_4}_K$ 를 구한 뒤 적분해 주면 곧  $l$  구간에서 1.042 기압을 유지하는데 필요한  $As_4(g)$ 의 총 몰 수를 (13) 식과 같이 구할 수 있다.

$$n^{As_4}_{tot.} = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{K=1}^n n^{As_4}_K = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{l}{n}\right) \sum_{K=1}^n \frac{A}{R}$$

$$\frac{a\left(T_e + \frac{\Delta T}{l} \cdot \frac{l}{n}K\right) + b}{T_e + \left(\frac{\Delta T}{l}\right) \frac{l}{n}K}$$

$$= \int_0^l \frac{A}{R} \left( a + \frac{b}{T_e + \frac{\Delta T}{l}x} \right) dx \quad (13)$$

$$= \frac{V_l}{R} \left[ a + \frac{b}{\Delta T} \ln \left( \frac{T_h}{T_e} \right) \right]$$

Table 2. Equilibrium partial pressure of As vapours inside the ampoule

T(K)	1200	1250	1300	1350	1400	1450	1500	1523	1550	1600
$P_{As_4}$ (g)	1.033	1.024	1.007	0.973	0.914	0.825	0.706	0.644	0.57	0.435
$P_{As_2}$ (g)	0.006	0.015	0.033	0.067	0.126	0.215	0.334	0.395	0.47	0.605

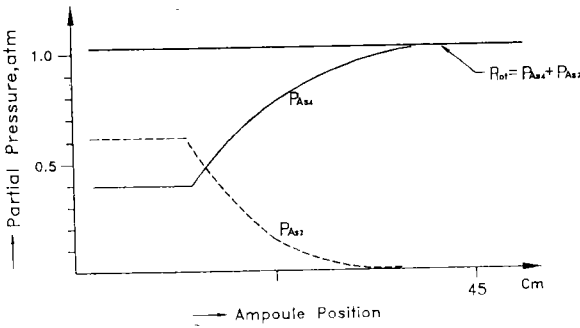


Fig. 6 Partial pressure of  $As_2$ ,  $As_4$  on temperature inside the ampoule for 1-T HB process of Fig. 5

$$n_{tot}^{As_2} = \frac{0.395(V_h - V_m)}{RT_h} + \frac{V_t}{R} \left[ a' + \frac{b'}{\Delta T} \ln \left( \frac{T_h}{T_e} \right) \right] \quad (16)$$

- $V_h$ :  $T_h$  구간의 반응관 부피
- $V_m$ : GaAs melt 부피
- R: 기체상수
- $\Delta T = T_h - T_e$
- $a = -2.4 \times 10^3$ ,  $b = 4.267$  [ $As_4(g)$  경우의 상수]
- $a' = 2.4 \times 10^3$ ,  $b' = -3.23$  [ $As_2(g)$  경우의 상수]

- $l$ : 온도구배가 있는 반응관 길이(Fig. 5 참조)
- A: 반응관의 단면적
- $V_t$ :  $l$  구간의 반응관 부피
- $a = -2.4 \times 10^3$ ,  $b = 4.267$  [(12) 식에 의한  $As_4(g)$  경우의 상수]

4. 결 론

증기압 제어부가 없는 단일 온도대역 수평 Bridgman(1-T HB) 방식에 의한 GaAs 단결정 성장을 위하여 GaAs melt와 평형을 이루는 해리압을 계산하였고, 이를 상쇄할 만한 As 초과 유입량을 온도구배 및 반응관 치수, 장입량 등을 고려한 일반해로 유도한 결과 다음과 같은 결론을 얻었다.

1. GaAs melt의 해리압은 용융점인 1240 °C에서 총 1.042 기압인데,  $P_{As_2}$ 는 0.53 기압,  $P_{As_4}$ 는 0.512 기압이었다. 나아가 As 조성 변화 및 melt 온도 차이에 따른 해리압을 전조성에 걸쳐 구하였다. 그 결과에 의하면, 해리압은 As 조성에 따라 지수적으로 증가하고, melt 온도에는 선형적으로 비례하지만 1260°C 이내에서는 7% 이내의 미미한 증가를 보였다.

2. 단일 온도대역 수평 Bridgman(1-T HB) 법에 의한 단결정 성장을 위하여, GaAs melt의 해리압과 평형을 유지할 As 초과 유입량을 장입량, 반응관 치수 및 온도분포의 일반해로 유도하였다. 따라서 본 방식에 의한 결정 성장시, 반응관의 내부 압력을 정산하여 장입된 As 초과 유입량에 의해 제어함으로써 GaAs 단결정 성장이 가능하다는 이론적 근거를 마련하였다.

따라가지로,

$$n_{tot}^{As_2} = \frac{V_t}{R} \left[ a' + \frac{b'}{\Delta T} \ln \left( \frac{T_h}{T_e} \right) \right] \quad (14)$$

$a' = 2.4 \times 10^3$ ,  $b' = -3.23$  [(12) 식에 의한  $As_2(g)$  경우의 상수]

따라서 Fig. 5에서 보듯이 온도구배가 있는  $l$  구간과 온도구배가 없는  $T_h$  영역을 따로 구분하여 소요기체 mole 수를 더해줌으로써 다음 식과 같이  $As_4(g)$  및  $As_2(g)$  기체의 총 몰(mole) 수에 대한 일반해를 유도할 수 있다.

$$n_{tot}^{As_4} = \frac{0.644(V_h - V_m)}{RT_h} + \frac{V_t}{R} \left[ a + \frac{b}{\Delta T} \ln \left( \frac{T_h}{T_e} \right) \right] \quad (15)$$



단일 온도대역 수평 Bridgman(1-T HB) 법에 의한  
GaAs 단결정 성장시 As 원소의 초과 유입량 계산

References

1. Kröger F. A., *The Chemistry of Imperfect Crystal*, Vol. 2, North-Holland Pub. Co., 1973
2. J. M. Parsey *et al.*, *J. Electrochem. Soc.*, 129(1982), 388
3. T. Suzuki *et al.*, *Sumitomo Electric Technical Review*, No. 18(1978), 105
4. 井上哲也 等, *日本結晶成長學會誌*, Vol. 18, No. 4(1991), 494
5. B. Paul, *J. Amer. Rocket Soc.*, 32(1962), 1321
6. G. M. Rosenblatt and Pang-Kai Lee, *J. Chem. Phys.*, 49(1968), 2995
7. K. Fujita *et al.*, *Sumitomo Electric Technical Review*, No. 26(1978), 185
8. S. Mizuniwa *et al.*, *Hitachi Cable Review*, No. 7(1988), 51
9. S. Mizuniwa *et al.*, *ibid.*, No. 8(1989), 61
10. T. P. Chen *et al.*, *J. Cryst. Growth*, 106(1990), 367
11. C. C. Herrick and R. C. Feber, *J. Phys. Chem.*, 72(1967), 102
12. H. Rau, *J. Chem. Thermodyn.*, 7(1975), 27
13. H. Wenzl *et al.*, *J. Cryst. Growth*, 109(1991), 191
14. R. G. Reddy *et al.*, Eds. : *Arsenic Metallurgy* (Metallurgical Soc., 1988)
15. M. Tmar *et al.*, *J. Cryst. Growth*, 69(1984), 421
16. N. A. Gokcen, *Bull. Alloy Phase Diagrams*, 10(1989), 11
17. L. J. Vieland, *Acta Met.*, 11(1963), 137
18. C. D. Thurmond, *J. Phys. Chem. Solids*, 26(1965), 785
19. J. R. Arthur, *ibid.*, 28(1967), 2257
20. R. F. Brebrick, *Met. Trans.*, 8a(1977), 403
21. R. F. Brebrick, *ibid.*, 7a(1976), 1609
22. B. D. Lichter and P. Sommelet, *Trans. Met. Soc. AIME*, 245(1969), 1021