

## Band alignments in Al-doped GaInAsSb/GaSb heterojunctions

Kyurhee Shim<sup>†</sup>

Department of Electrophysics, Kyonggi University, Suwon 16227, Korea

(Received October 6, 2016)

(Revised October 17, 2016)

(Accepted October 28, 2016)

**Abstract** The valence band maximum (VBM) and conduction band minimum (CBM) of Al-doped GaInAsSb alloys substrated on GaSb are calculated by using an analytic approximation based on the tight binding method. The relative positions of the VBM and CBM between Al-GaInAsSb and GaSb determine band alignment type, valence band offset (VBO) and conduction band offset (CBO) for the heterojunctions. In this study, aluminium doping is assumed to be substituted in the cation site and limited up to 20 % because it can easily oxidize and degrade materials. It is found that the Al-doped alloys exhibit type-II band alignments over the entire composition range and make the band gaps increase, whereas the VBO and CBO decrease. The decreasing rate of VBO is higher than that of CBO, which implies the Al components play a decisive role in controlling electrons at the interface. The Al-doped GaInAsSb alloy has a direct band gap induced by E( $\Gamma$ ) with a considerable distance from the E(L) and E(X), however, E( $\Gamma$ ) approaches to E(L) and E(X) in the high Sb concentration (Sb > 0.7-0.8) which might affect the electron mobility and degrade the optical quality.

**Key words** GaInAsSb/GaSb, Al-doping alloys, VBM, CBM, Type-II band, Band offsets

## Al이 도핑된 GaInAsSb/GaSb의 경계면에서의 밴드정렬

심규리<sup>†</sup>

경기대학교 이과대학 전자물리학과, 수원, 16227

(2016년 10월 6일 접수)

(2016년 10월 17일 심사완료)

(2016년 10월 28일 게재확정)

**요약** GaSb 기판위에 Al이 도핑된 GaInAsSb(Al-GaInAsSb)에 대한 최고 가전대 준위(VBM)와 최저 전도대 준위(CBM) 변화를 범용적 밀접결합방법에 근거한 해석적 근사법을 이용하여 계산하였다. GaSb와 Al-GaInAsSb의 상대적 VBM과 CBM 준위에 따라 경계면에서의 밴드정렬 타입과 가전자대 오프셋(VBO)과 전도대 오프셋(CBO)이 결정된다. 본 논문에서는 Al 도핑이 GaInAsSb의 양이온 자리에 치환된다는 가정하에 이론이 전개 되었으며, Al은 부식등으로 결정의 질을 떨어트릴 수 있는 요인이 되므로 20%까지 제한하였다. Al 도핑 결과, 전 구간에서 제 II 형의 밴드정렬형태를 갖게 되며, 밴드갭이 증가되는 반면 VBO와 CBO는 감소됨을 알 수 있었다. CBO에 대한 감소비율 VBO보다 더 크므로, Al 도핑은 경계면에서의 전자 콘트롤에 더 효율적으로 작용함을 알 수 있었다. Al-GaInAsSb은 전 구간에서 E( $\Gamma$ )가 E(L)이나 E(X)보다 낮은 직접 갭을 나타 내고 있지만, Sb 성분이 많아지면(70~80% 이상) E(L)과 E(X)이 E( $\Gamma$ )에 가까워져서 전자 이동도에 영향을 주어 광학적 효율이 다소 떨어질 수 있음을 알 수 있었다.

### 1. 서론

중적외선(MIR) 파장대(midinfrared spectral range) 2~5  $\mu\text{m}$ (0.62~0.25 eV)의 반도체 레이저 다이오드는 적외선 탐지기나 공기 오염 센서등 군사용이나 의료용, 무선 광통신등 다양하게 유용될 수 있어 때문에 최근 학문적 관

심과 개발이 급증하고 있다[1-3]. 특히 LPE(liquid phase epitaxy)나 MOVPE(metal organic vapour phase epitaxy)와 같은 에피택시 비평형 결정성장기술의 발달로 순도 높은 III-V 다원화합물 반도체를 성장시킬 수 있게 되면서[4], 두가지이상의 혼합물질 성분비에 따라 밴드갭, 격자상수, 경계면에서의 밴드정렬 상태 등 전자적 상태를 인위적으로 조절할 수 있게 되면서, 다원화합물 반도체의 개발과 활용성등이 활발히 연구되고 있다.

현재 2~3  $\mu\text{m}$  파장대의 레이저로는 GaInAsSb나

<sup>†</sup>Corresponding author

E-mail: kshim@kyonggi.ac.kr

AlGaAsSb 등의 사원 화합물 반도체이용으로 이미 상용화가 되어 있으나, 3  $\mu\text{m}$  이상의 고성능 레이저에 대해서 아직 개발 단계에 있다. 이를 위해, GaInAsSb에서 In의 성분비를 높이거나 AlGaAsSb에서 Al 양을 증가시키는 방법들이 제시되고 있다. 그러나 GaInAsSb 활성층에 In을 증가시키게 되면 밴드갭을 줄이는 효과가 있으나, 결과적으로 가전자대 오프셋(valence band offset)을 작게 하는 역할을 해(홀 구속을 약하게 하는 효과) 광학적 성질의 질을 떨어뜨리게 한다. 한편, AlGaAsSb에 Al 성분을 증가시키게 되면 전도대 오프셋(conduction band offset)을 너무 높게 만들어 비등질의 전자분포가 유도되어 레이저의 질을 떨어뜨리게 한다[5, 6]. 최근 이런 점들을 개선하기 위해 고성능 레이저 출력의 새로운 물질로서 오원화합물 AlGaInAsSb를 제안 되었으나[7-9], 넓은 영역에 걸친 혼화성 갭(miscibility gap)에 의한 결정성장의 어려움과 비선형적 전자구조의 복잡성 때문에 이론적 연구나 실험적 연구가 제한되어 왔다. AlGaInAsSb의 물리적 연구가 절실히 요구된다.

본 연구에서는 Al 도핑된 GaInAsSb(Al-GaInAsSb)를 GaSb에 격자정합시켰을 때, 최고 가전자대(VBM: valence band maximum) 준위와 최저 전도대(CBM; conduction band minimum) 준위 변화를 범용적 밀접결합(universal tight binding: UTB) 방법[10]에 근거한 해석적 근사법[11]을 이용하여 성분비에 따른 밴드정렬변화에 대한 정량적 데이터를 처음으로 제시한다. 본 연구는 Al 도핑이 GaInAsSb의 양이온 자리에 치환된다는 가정하에 이론이 전개 되었으며, Al은 부식등으로 결정의 질을 떨어뜨릴 수 있으므로 20%까지 제한하였다. 이를 통해 Al-GaInAsSb/GaSb 이중정합 경계면에서 Al 성분비에 따른 밴드 오프셋의 변화 등으로 경계면에서의 전자와 홀의 구속 정도를 알아볼 수 있다.

## 2. 이 론

III-V 아연화합물반도체는 면심 입방 결정구조로서 한 개의 격자(혹은, 단위세포)에 양이온(cation)과 음이온(anion) 두 개의 원자로 이루어져 있다. 밀접결합에서 양자상태함수  $|c\rangle$ 와  $|a\rangle$ 는 Bloch 정리를 만족시키며, 결정의 최외각 원자궤도함수들의 선형결합(하이브리드상태)으로 나타내진다.

결정의 에너지고유함수를 구하기 위한 연산자 해밀토니안  $\hat{H}$ 을 양이온과 음이온의 부분행렬식(submatrix)으로 다음과 같이 나타내 지며[12],

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \hat{H}_{cc} & \hat{H}_{ca} \\ \hat{H}_{ac} & \hat{H}_{aa} \end{pmatrix} \quad (2)$$

여기서 대각선 행렬인자  $\hat{H}_{cc} = \langle c|H|c\rangle$ 와  $\hat{H}_{aa} = \langle a|H|a\rangle$ 는 양이온과 음이온의 자체내의 에너지(intrasite energy)를 나타내고 비대각선 행렬인자  $\hat{H}_{ca} = \langle c|H|a\rangle$ 와  $\hat{H}_{ac} = \langle a|H|c\rangle$ 는 양이온과 음이온의 상호간의 에너지(interatomic energy)를 나타낸다. 위의 해밀토니안을 대각선화(diagonalize) 시킴으로서 에너지 고유값을 얻게 되는데,

$$E = \frac{\hat{H}_{aa} + \hat{H}_{cc}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\hat{H}_{aa} - \hat{H}_{cc}}{2}\right)^2 + \hat{H}_{ac}\hat{H}_{ca}} \quad (3)$$

밀접결합방법에서  $-$ 는 p 원자궤도에 의한 결합(bonding) 상태로 VBM을 나타내며,  $+$ 는 s 원자궤도에 의한 반결합(anti-bonding) 상태로 CBM을 나타낸다.  $\Gamma$ 점에서의 VBM과 CBM은 양이온과 음이온 p-p와 s-s 상호작용 에너지로 해석적 근사식으로 다음과 같이 나타낸다[11, 12].

$$\text{VBM} = \frac{\epsilon_p^c + \epsilon_p^a}{2} - \sqrt{\left(\frac{\epsilon_p^c - \epsilon_p^a}{2}\right)^2 + V_{xx}^2} \quad (4)$$

$$\text{CBM} = \frac{\epsilon_s^c + \epsilon_s^a}{2} + \sqrt{\left(\frac{\epsilon_s^c - \epsilon_s^a}{2}\right)^2 + V_{ss}^2} \quad (5)$$

여기서,  $\epsilon_{s(p)}^{(a)}$ 는 양이온(혹은 음이온)의 s-궤도(혹은 p-궤도) 에너지이며,  $V_{xx}$ 와  $V_{ss}$ 는 물질의 첫 번째 가까운 TB 매개변수(TB parameters)로서  $V_{xx} = 2.16(\hbar^2/\text{md}^2)$ 와  $V_{ss} = -5.6(\hbar^2/\text{md}^2)$ 로 나타내진다[13].

물질의 에너지 밴드갭( $E_g$ )은 VBM과 CBM 준위의 차로 정의되며( $E_g = \text{CBM} - \text{VBM}$ ), 직접 갭 물질은 VBM과 CBM이 모두  $\Gamma$ 점에 존재하며, 간접 갭 물질은 VBM은  $\Gamma$ 점에 CBM은 L이나 X점에 존재한다.  $\Gamma$ 점에 대한 해석적 근사식 VBM과 CBM 중 하나를 택하고 다른 하나는 반경험적 혹은 실험적으로 구한 물질의 밴드갭( $E_g$ )을 이용하여  $E_g = \text{CBM} - \text{VBM}$ 의 조건을 만족시키는 나머지 값을 결정하게 된다.

두 종류의 서로 다른 반도체 A와 B를 붙여 만든 이중정합 반도체 경계면에서의 VBO와 CBO는 두 반도체의 VBM 간격과 CBM 간격으로 정의하며[12],

$$\begin{aligned} \text{VBO} &= |\text{VBM}(A) - \text{VBM}(B)| \\ \text{CBO} &= |\text{CBM}(A) - \text{CBM}(B)| \end{aligned} \quad (6)$$

VBO는 경계면에서의 홀을 CBO는 전자를 구속할 수 에너지를 제공한다. 경계면에서의 두 반도체의 VBM과 CBM의 상대적 위치에 따라 세가지 종류의 밴드정렬(band alignment) 형태로 나뉘게 된다. 제 I형(type-I, 혹은 straddling gap) 밴드정렬은 반도체 A의 VBM과 CBM의 위치가 반도체 B의 VBM과 CBM 안에 완전히 들어가 있거나 밖으로 빠져있는 상태를 정의한다. 제 II형(type-II, 혹은 staggered band) 밴드정렬은 반도체 A

Table 1

Calculated VBM and CBM for six binary semiconductors GaAs, GaSb, InAs, InSb, AlAs, and AlSb. The s and p atomic orbital energies and bond lengths of the cation and anion atom are taken from Ref.v13 and the band gap  $E_g$  are chosen as the experimental data at room temperature from Ref. 15

III-V	$\epsilon_s^c$ (eV)	$\epsilon_s^a$ (eV)	$\epsilon_s^a$ (eV)	$\epsilon_p^a$ (eV)	d (Å)	$E_g$ (Γ) (eV)	VBM (eV)	CBM (eV)
GaAs	-11.37	-4.90	-17.33	-7.91	2.448	1.433	-9.537	-8.104
GaSb	-11.37	-4.90	-14.80	-7.24	2.639	0.751	-8.707	-7.956
InAs	-10.12	-4.69	-17.33	-7.91	2.623	0.354	-9.183	-8.829
InSb	-10.12	-4.69	-14.80	-7.24	2.805	0.230	-8.414	-8.184
AlAs	-10.11	-4.86	-17.33	-7.91	2.442	3.027	-8.732	-5.705
AlSb	-10.11	-4.86	-14.80	-7.24	2.657	2.300	-8.272	-5.972

의 VBM와 CBM가 반도체 B의 VBM와 CBM에 맞물린 상태를 정의하며, 제 III형(type-III, 혹은 broken gap) 밴드정렬은 반도체 A의 VBM와 CBM가 반도체 B의 VBM와 CBM로부터 완전히 벗어난 상태를 정의한다. 전자적 고안품의 목적에 따라 최적의 밴드정렬의 형태와 밴드오프셋이 결정된다. Table 1과 Fig. 1에서 나타나는 바와 같이 GaAs/InAs, GaAs/InSb, AlAs/InSb, GaSb/InSb AlAs/AlSb는 type-I, GaAs/GaSb, AlAs/GaSb는 type-II, GaSb/InAs, InSb/InAs, InAs/AlSb는 type-III의 밴드 정렬 형태를 갖는다는 것을 알 수 있다. 이전 연구에서 범용적 밀접결합을 이용하여 사원화합물 반도체 GaInAsSb를 GaSb에 격자 정합 시켜(GaInAsSb/GaSb) 경계면에서의 밴드정렬상태를 구해 본 결과 성분비에 따라 제 II형과 제 III형 사이의 밴드정렬형태의 전이가 일어난 것을 알 수 있었다[12].

### 3. 계산 및 분석 결과

사원화합물 GaInAsSb에 Al을 도핑했을 경우(Al-

GaInAsSb) 여섯 개의 이원화합물 반도체 GaAs, GaSb, InAs, InSb, AlAs, AlSb로 이루어진 오원화합물을 이루게 되는데, GaSb, InSb, GaAs, InAs는 직접 갭에 해당하므로 Eq. (4)에서  $V_{pp}$ 를 단순히 TB 매개변수  $V_{xx}$ 로 둘 수 있으나, AlAs와 AlSb는 간접갭으로  $\Gamma$ 가 아닌 L과 X점에서의 전이를 고려해야 하므로  $V_{pp}$ 를 단순히  $V_{xx}$ 로 둘 수 없고  $V_{xx}$ 와  $V_{xy}$ 의 복합 항으로 나타내게 되므로 (4) 식보다는 (5) 식의  $V_{ss}$ 로 표현되는 CBM이 더 신뢰할 수 있는 값이 된다. 그러므로 GaSb, InSb, GaAs, InAs에 대해서는 (4) 식의 VBM을 AlAs와 AlSb에 대해서는 (5) 식의 CBM을 계산하고  $\Gamma$ 점에서의 밴드갭(실함값 혹은 이론값)을 이용하여 상대적 값이 결정하게 된다(Table 1).

$$E_g(\Gamma) = \text{CBM} - \text{VBM} \tag{7}$$

이들을 같은 에너지 스케일 내에서 나타내면, 이종접합경계면에서의 밴드 정렬 상태와 타입을 한눈에 볼 수 있는데, 세 가지 밴드정렬타입의 예를 Fig. 1에 나타내었다.

여섯 종류의 이원화합물들이 혼합된 오원화합물 Al-

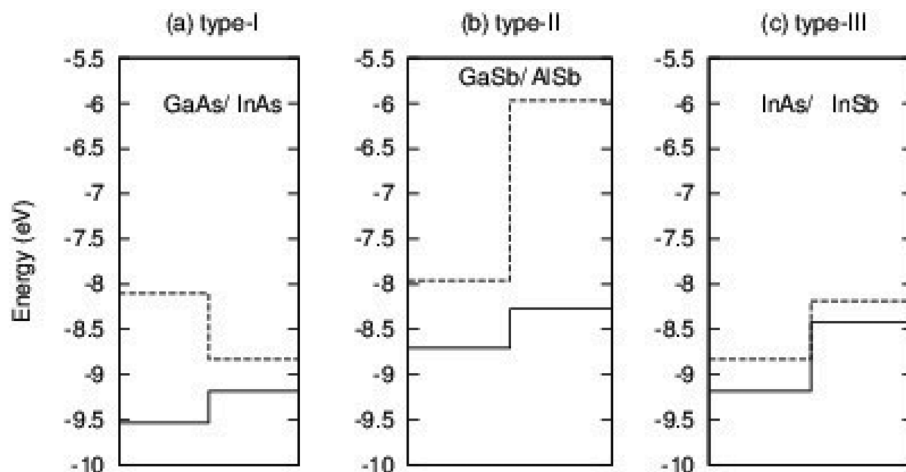


Fig. 1. Three different band alignment types of heterojunctions; (a) GaAs/InAs for the type I, (b) GaAs/AlSb for the type II, and (c) InAs/InSb for the type III.

GaInAsSb의 성분비에 따른 VBM을 UTB 방법[14]으로 구해보면,

$$\begin{aligned}
 \text{VBM}(\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{Sb}_z\text{As}_{1-z}) &= xz \text{ VBM}(\text{AlSb}) + x(1-z) \text{ VBM}(\text{AlAs}) \\
 &+ yz \text{ VBM}(\text{GaSb}) + y(1-z) \text{ VBM}(\text{GaAs}) \\
 &+ (1-x-y)(1-z) \text{ VBM}(\text{InAs}) \\
 &+ (1-x-y)z \text{ VBM}(\text{InSb}) \\
 &+ xyz \Delta \text{ VBM}(\text{AlSb} : \text{Ga}) \\
 &+ xz(1-x-y) \Delta \text{ VBM}(\text{AlSb} : \text{As}) \\
 &+ xy(1-z) \Delta \text{ VBM}(\text{AlAs} : \text{Ga}) \\
 &+ x(1-x-y)(1-z) \Delta \text{ VBM}(\text{AlAs} : \text{In}) \\
 &+ yz(1-z) \Delta \text{ VBM}(\text{GaSb} : \text{As}) \\
 &+ yz(1-x-y) \Delta \text{ VBM}(\text{GaSb} : \text{In}) \\
 &+ y(1-z)(1-x-y) \Delta \text{ VBM}(\text{GaAs} : \text{In}) \\
 &+ z(1-z)(1-x-y) \Delta \text{ VBM}(\text{InAs} : \text{Sb})
 \end{aligned}$$

이며, 여기서  $\Delta \text{ VBM}(\text{GaSb} : \text{As})$ 는 GaSb와 GaAs 사이에 일어나는 총 무질서 에너지로서 두 이원화합물의 치환에 의한 VBM 차로  $\text{VBM}(\text{GaSb} : \text{As}) \simeq |\text{VBM}(\text{GaSb}) - \text{VBM}(\text{GaAs})|$  둘 수 있으며, 다른 항들도 마찬가지로 나

타낸다. 그러므로  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{Sb}_z\text{As}_{1-z}$ 의 VBM은 성분비에 따라 변하므로, 성분비와 어떤 기판(substrate)에 성장 시키느냐에 따라 경계면에서의 밴드형태가 달라질 수 있다.  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{Sb}_z\text{As}_{1-z}$ 을 GaSb에 격자정합 시키는 성분비 조건은 이미 구한 바 있다[14].

$$\begin{aligned}
 0.016 = &-0.181x - 0.175y + 0.182z \\
 &+ 0.033xz + 0.009yz
 \end{aligned} \quad (9)$$

(9) 식의 Al-GaInAsSb/GaSb 격자 정합 조건에 따라, Al-GaInAsSb의 VBM을 (8) 식을 이용하여 계산하며 CBM은 에너지 밴드갭 값을 이용하여 구하게 된다. Al-GaInAsSb에 대한 에너지 밴드갭 값의 실험데이터가 거의 존재하지 않아 sp3s\* UTB 방법에 의해 이론적으로 이미 발표한 데이터[14]를 사용하였다. Al-GaInAsSb을 GaSb에 격자정합 시켰을 때, Al의 도핑 성분을 0~20% 까지 5%씩 늘려 구한 결과가 Table 2~Table 6에 나와 있다. 이에 대한 분석 결과는 다음과 같다.

(1) Table 2에서 보는 바와 같이 Al=0% 일 때 Sb(z)를 증가함에 따라  $E(\Gamma)$ 은 0.322 eV에서 0.751 eV로 증가하였으며, 반면  $E(L)$ 은 2.238 eV에서 1.21 eV로 감소,

Table 2

Variation of the principal band gaps ( $E(\Gamma)$ ,  $E(L)$ ,  $E(X)$ ), VBM, CBM, VBO, CBO, and band types for the 0% Al-doped alloy  $\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{Sb}_z\text{As}_{1-z}$  lattice matched to GaSb along the lattice matching conditions

$x=0$ $y, z$	$E_g(\Gamma)$ (eV)	$E_g(L)$ (eV)	$E_g(X)$ (eV)	VBM (eV)	CBM (eV)	VBO (eV)	CBO (eV)	Band type
0.013, 0.1	0.322	2.238	1.318	-9.111	-8.788	0.404	0.833	III
0.118, 0.2	0.336	2.118	1.264	-9.070	-8.734	0.363	0.778	III
0.224, 0.3	0.351	1.984	1.200	-9.027	-8.676	0.320	0.720	II
0.331, 0.4	0.373	1.845	1.135	-8.984	-8.611	0.277	0.655	II
0.440, 0.5	0.408	1.708	1.075	-8.941	-8.533	0.234	0.577	II
0.550, 0.6	0.451	1.585	1.025	-8.896	-8.445	0.189	0.489	II
0.660, 0.7	0.521	1.468	0.990	-8.850	-8.329	0.143	0.373	II
0.772, 0.8	0.598	1.369	0.968	-8.803	-8.205	0.096	0.249	II
0.886, 0.9	0.678	1.284	0.958	-8.756	-8.078	0.049	0.122	II
1.0, 1.0	0.751	1.21	0.955	-8.707	-7.956	0	0	-

Table 3

Variation of the principal band gaps ( $E(\Gamma)$ ,  $E(L)$ ,  $E(X)$ ), VBM, CBM, VBO, CBO, and band types for the 5% Al-doped alloy  $\text{Al}_{0.05}\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{Sb}_z\text{As}_{1-z}$  lattice matched to GaSb along the lattice matching conditions

$x=0.05$ $y, z$	$E_g(\Gamma)$ (eV)	$E_g(L)$ (eV)	$E_g(X)$ (eV)	VBM (eV)	CBM (eV)	VBO (eV)	CBO (eV)	Band type
0.067, 0.2	0.358	2.152	1.295	-9.033	-8.675	0.326	0.719	II
0.174, 0.3	0.375	2.022	1.235	-8.993	-8.618	0.286	0.662	II
0.282, 0.4	0.397	1.886	1.171	-8.952	-8.555	0.245	0.599	II
0.392, 0.5	0.430	1.750	1.111	-8.910	-8.480	0.203	0.524	II
0.502, 0.6	0.477	1.623	1.06	-8.868	-8.391	0.161	0.435	II
0.614, 0.7	0.537	1.508	1.022	-8.824	-8.287	0.117	0.331	II
0.726, 0.8	0.634	1.395	1.001	-8.779	-8.145	0.072	0.189	II
0.840, 0.9	0.684	1.321	0.982	-8.733	-8.049	0.026	0.093	II
0.955, 1.0	0.754	1.244	0.977	-8.687	-7.933	0.02	0.023	II

Table 4

Variation of the principal band gaps ( $E(\Gamma)$ ,  $E(L)$ ,  $E(X)$ ), VBM, CBM, VBO, CBO, and band types for the 10 % Al-doped alloy  $\text{Al}_{0.1}\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{Sb}_z\text{As}_{1-z}$  lattice matched to GaSb along the lattice matching conditions

$x = 0.1$ $y, z$	$E_g(\Gamma)$ (eV)	$E_g(L)$ (eV)	$E_g(X)$ (eV)	VBM (eV)	CBM (eV)	VBO (eV)	CBO (eV)	Band type
0.017, 0.2	0.391	2.181	1.328	-8.996	-8.605	0.289	0.649	II
0.125, 0.3	0.410	2.054	1.271	-8.958	-8.548	0.251	0.592	II
0.233, 0.4	0.433	1.920	1.209	-8.919	-8.486	0.212	0.530	II
0.343, 0.5	0.466	1.786	1.150	-8.880	-8.414	0.173	0.458	II
0.454, 0.6	0.512	1.658	1.098	-8.839	-8.327	0.132	0.371	II
0.567, 0.7	0.572	1.541	1.059	-8.798	-8.226	0.091	0.270	II
0.680, 0.8	0.642	1.439	1.032	-8.755	-8.113	0.048	0.157	II
0.795, 0.9	0.716	1.349	1.016	-8.711	-7.997	0.004	0.039	II
0.911, 1.0	0.783	1.269	1.008	-8.667	-7.884	0.04	0.072	II

Table 5

Variation of the principal band gaps ( $E(\Gamma)$ ,  $E(L)$ ,  $E(X)$ ), VBM, CBM, VBO, CBO, and band types for the 15 % Al-doped alloy  $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{Sb}_z\text{As}_{1-z}$  lattice matched to GaSb along the lattice matching conditions

$x = 0.15$ $y, z$	$E_g(\Gamma)$ (eV)	$E_g(L)$ (eV)	$E_g(X)$ (eV)	VBM (eV)	CBM (eV)	VBO (eV)	CBO (eV)	Band type
0.075, 0.3	0.451	2.089	1.311	-8.924	-8.473	0.217	0.517	II
0.185, 0.4	0.475	1.956	1.251	-8.887	-8.412	0.180	0.456	II
0.295, 0.5	0.507	1.823	1.192	-8.849	-8.342	0.142	0.386	II
0.407, 0.6	0.551	1.695	1.140	-8.811	-8.260	0.104	0.304	II
0.520, 0.7	0.608	1.578	1.098	-8.771	-8.163	0.064	0.207	II
0.634, 0.8	0.674	1.475	1.070	-8.731	-8.057	0.024	0.101	II
0.750, 0.9	0.745	1.383	1.051	-8.689	-7.944	0.018	0.012	II
0.866, 1.0	0.810	1.300	1.040	-8.646	-7.836	0.061	0.120	II

Table 6

Variation of the principal band gaps ( $E(\Gamma)$ ,  $E(L)$ ,  $E(X)$ ), VBM, CBM, VBO, CBO, and band types for the 20 % Al-doped alloy  $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{Sb}_z\text{As}_{1-z}$  lattice matched to GaSb along the lattice matching conditions

$x = 0.2$ $y, z$	$E_g(\Gamma)$ (eV)	$E_g(L)$ (eV)	$E_g(X)$ (eV)	VBM (eV)	CBM (eV)	VBO (eV)	CBO (eV)	Band type
0.025, 0.3	0.498	2.122	1.355	-8.889	-8.391	0.182	0.435	II
0.136, 0.4	0.524	1.992	1.296	-8.855	-8.331	0.148	0.375	II
0.247, 0.5	0.555	1.861	1.237	-8.819	-8.264	0.112	0.308	II
0.359, 0.6	0.596	1.734	1.184	-8.782	-8.186	0.075	0.230	II
0.473, 0.7	0.650	1.616	1.142	-8.745	-8.095	0.038	0.139	II
0.588, 0.8	0.714	1.510	1.111	-8.706	-7.992	0	0.036	II
0.704, 0.9	0.781	1.417	1.090	-8.667	-7.886	0.040	0.070	II
0.822, 1.0	0.844	1.331	1.075	-8.626	-7.782	0.081	0.174	II

$E(X)$ 는 1.318 eV에서 0.955 eV로 감소함을 알 수 있었다. 이제 Al을 10 % 도핑한 경우(Table 4)  $E(\Gamma)$ 는 0.391 eV에서 0.783 eV로 증가하였으며,  $E(L)$ 는 2.181 eV에서 1.269 eV로 감소,  $E(X)$ 는 1.328 eV에서 1.008 eV로 다소 감소하였다. 마찬가지로 Al을 20 % 증가하였을 경우(Table 6)  $E(\Gamma)$ 는 0.498 eV에서 0.844 eV로 증가하였으며,  $E(L)$ 는 2.122 eV에서 1.331 eV로 감소,  $E(X)$ 는 1.355 eV에서 1.075 eV로 다소 감소함을 알 수 있었다. Fig. 2에서 보는 바와 같이, Al의 도핑이  $E(\Gamma)$  에너지 갭을 높이는데 매우 중요한 역할을 하였으며,  $E(L)$ 과  $E(X)$

갭에는 유의무의 효과를 나타내는 것을 알 수 있었다. 광학적 효율이 좋은 물질이 되기 위해서는(즉, 효율이 좋은 LED(light emitting diode))  $\Gamma$  밴드 갭이 L 밴드 갭이나 X 밴드 갭으로부터 큰 차이를 두고 떨어져 있는 직접 갭 이어야 한다(즉,  $E(\Gamma) \ll E(L), E(X)$ ). 이런점을 고려해 볼 때, Al = 20 %까지는 전 구간에서  $E(\Gamma)$ 가  $E(L)$ 과  $E(X)$ 보다 낮은 직접 갭을 나타내고 있지만, Sb 성분(z)이 0.7~0.8 이상 되면  $E(L)$ 과  $E(X)$ 가  $E(\Gamma)$ 에 가까워져서 광학적 효율이 떨어진다. 또한 3  $\mu\text{m}$  이상(즉, 0.42 eV 이하의 밴드갭) 빛은 Al의 도핑이 10 % 이하이

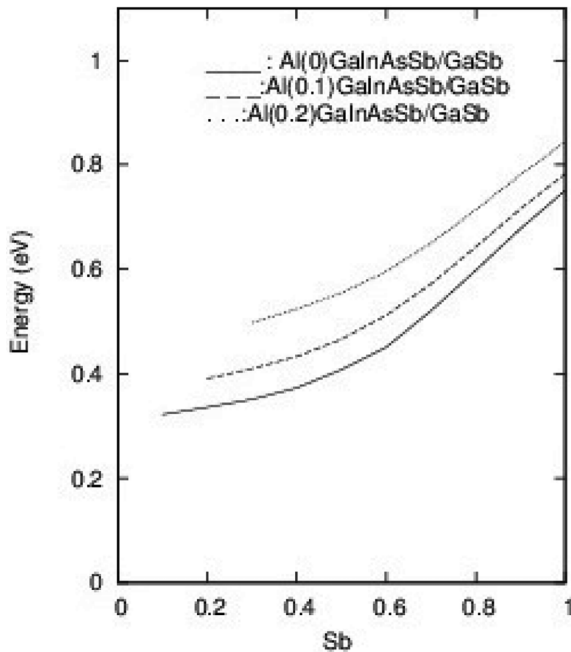


Fig. 2.  $E(T)$  energy gap variations as a function of  $Sb(z)$  concentration with  $y$  chosen to be lattice matched to GaSb for fixed  $x$  of  $Al_xGa_yIn_{1-x-y}Sb_zAs_{1-z}$  [ $x=0$  (solid line),  $x=0.1$  (dashed line),  $x=0.2$  (dotted line)].

며 Sb의 성분이 0.5 미만인 상태에서 가능하다는 것을 Table 2~6을 통해 알 수 있다.

(2) Al의 도핑이 밴드오프셋에 어떤 영향을 주는지 알아보기 위해,  $Sb=0.3$ 으로 고정하고  $Al=0\%$ 일 때 VBO와 CBO 값은 0.320 eV와 0.720 eV에서,  $Al=10\%$  증가시키게 되면 0.251 eV와 0.592 eV으로,  $Al=20\%$ 일 때 0.182 eV와 0.435 eV으로 Al 도핑시키게 되면 밴드 갭이 증가시키는 반면 VBO와 CBO는 감소시키게 된다. CBO에 대한 감소비율이 더 크므로, Al 도핑은 경계면에서의 전자 콘트롤에 더 효율적으로 작용함을 알 수 있다.

(3) Al-GaInAsSb를 GaSb 격자정합했을 때 경계면에서의 밴드정렬 상태를 살펴보자. GaSb의 VBM와 CBM은  $-8.707$  eV와  $-7.956$  eV에 대해 Al-GaInAsSb의 VBM과 CBM의 상대적 위치에 따라 밴드정렬타입이 결정된다. Table 2에서 보는 바와 같이 Al 도핑을 안했을 경우  $Sb < 0.2$ 까지는 제 III형의 밴드정렬 형태를 갖다가 그 이후 부터는 제 II형 밴드정렬 형태로 전이됨을 알 수 있다. 그러나 Al 도핑을 할 경우(Table 3~Table 6) 전 구간에서 밴드정렬의 전이 없이 안정적으로 제 II형의 밴드정렬형태를 갖게 됨을 알 수 있었다.

#### 4. 결 론

GaSb 기판위에 Al이 도핑된 GaInAsSb(Al-GaInAsSb)

에 대한 VBM과 CBM 변화를 범용적 밀접결합방법에 근거한 해석적 근사법을 이용하여 계산하였으며, 경계면에서의 밴드정렬상태 와 밴드 오프셋을 구하였다. 계산 결과, Al 도핑은(Table 3~Table 6) 전 구간에서 밴드정렬의 전이 없이 안정적으로 제 II형의 밴드정렬형태를 나타내며, 밴드 갭을 높이는 반면 VBO와 CBO를 낮추는 역할을 한다는 것을 알 수 있었다. 특히 CBO에 대한 감소비율이 더 크므로, Al 도핑은 경계면에서의 전자 콘트롤에 더 효과적으로 작용함을 알 수 있다. 이는 전도대 오프셋(CBO)이 너무 높아 비등질의 전자분포가 유도되는 물질에 대해 소량의 Al 도핑으로 성능을 개선 향상 시킬 수 있음을 시사한다. 또한  $3\mu m$  이상(즉 0.42 eV 이하의 밴드갭)의 고성능 레이저는 Al-GaInAsSb/GaSb에서  $Al < 0.1$ 이고  $Sb < 0.5$ 인 상태에서 얻을 수 있음을 알 수 있다. 물론 본 논문의 Al-GaInAsSb/GaSb에 대한 모든 데이터는 이론적 수치이며, 이에 대한 실험적 검증이 앞으로 필요하다. 이는 아직 알려지지 않은 중적외선(MIR) 파장대 반도체 레이저 다이오드 개발에 중요한 역할을 할 수 있으리라 기대된다.

#### 감사의 글

본 연구는 2014학년도 경기대학교 연구년 수혜로 수행되었다.

#### References

- [1] J.A. Gupta, P.J. Barrios, J. Lapointe, G.C. Aers and C. Storey, "Single-mode  $2.4\mu m$  InGaAsSb/AlGaAsSb distributed feedback lasers for gas sensing", *Appl. Phys. Lett.* 95 (2009) 041104.
- [2] A. Krier, V.M. Smirmow, P.J. Batty, M. Yin, K.T. Lai, S. Rybchenko, S.K. Haywood, V.I. Vasil'ev, G.V. Gagis and V.I. Kuchinskii, "Midinfrared photoluminescence and compositional modulation in pentanary GaInAsPSb alloys grown by liquid phase epitaxy", *Appl. Phys. Lett.* 91 (2007) 082102.
- [3] D.H. Jaw, J.R. Chang and Y.K. Su, "Observation of self-organized superlattice in AlGaInAsSb pentanary alloys", *Appl. Phys. Lett.* 82 (2003) 3883.
- [4] O. Marquardt, T. Hickel, J. Neugebauer, K.M. Gumbaryan and V.M. Aroutiounian, "Growth process, characterization, and modeling of electronic properties of coupled InAsSbP nanostructures", *J. Appl. Phys.* 110 (2011) 043708.
- [5] A. Jdidi, N. Sfina, S.A.-B. Nassrallah, M. Said and J.L. Lazzari, "A multi-color quantum well photodetector for mid- and long-wavelength infrared detection", *Semicond. Sci. Technol.* 26 (2011) 125019.
- [6] J.L. Lazzari, J.L. Leclereq, P. Grunberg, J. Joullie, B.

- Lambert, D. Barbusse and R. Four, "Liquid phase epitaxial growth of AlGaAsSb on GaSb", *J. Cryst. Growth* 123 (1992) 465.
- [ 7 ] L. Shterengas, G.L. Belenky, A. Gourevitch, J.G. Kim, and R.U. Martinelli, "Measurement of  $\alpha$ -factor in 2~2.5  $\mu\text{m}$  type-I In(Al)GaAsSb/GaSb high power diode lasers", *Appl. Phys. Lett.* 81 (2002) 4517.
- [ 8 ] J.G. Kim, L. Shterenga, R.U. Martinelli and G.L. Belendky, "High-power room-temperature continuous wave operation of 2.7 and 2.8  $\mu\text{m}$  In(Al)GaAsSb/GaSb diode lasers", *App. Phys. Lett.* 83 (2003) 1926.
- [ 9 ] M. Muller, T. Lehnhardt, K. Robner and A. Forchel, "Tunable lasers on GaSb using the concept of binary superimposed gratings", *Appl. Phys. Lett.* 93 (2008) 081117.
- [10] K. Shim and H. Rabitz, "Universal tight-binding calculation for the electronic structure of the quaternary alloy", *Phys. Rev. B* 57 (1998) 12874.
- [11] K. Shim and H. Rabitz, "Theoretical valence band offsets of semiconductor heterojunctions", *Appl. Phys. Lett.* 80 (2002) 4543.
- [12] K. Shim, "Composition dependence of band alignments in  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$  heterojunction lattice matched to GaSb and InAs", *J. Appl. Phys.* 114 (2013) 203703.
- [13] W.A. Harrison, "Electronic structure and the properties of solids" (Dover Publications, New York, 1989) p. 50.
- [14] K. Shim, "Composition behaviour of energy band gaps in the alloy  $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{Sb}_z\text{As}_{1-z}$ ", *Phil. Mag.* 94, (2014) 3088.
- [15] O. Madelung (ed.), "Semiconductors - Basic Data" (Springer-Verlag, Berlin, 1996) p. 75.