

# 온도 및 조성비 변화에 따른 질화물계 화합물 반도체 $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ 의 에너지 밴드갭과 광학상수 계산

정호용\* · 김대익\*\*

The Calculation of the Energy Band Gaps and Optical constants of Zincblende  
 $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$  on Temperature and Composition

Ho-Yong Chung\* · Dae-Ik Kim\*\*

## 요 약

본 연구에서는 무질서 효과가 고려된, 새로이 가정한 가상 결정 근사법을 갖는 empirical pseudopotential method를 사용하여 온도와 조성비 변화에 따른 3원계 질화물계 화합물 반도체  $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ 의 휨 매개변수 및 에너지 밴드갭을 계산하였다. 300K의 조성비 구간( $0 \leq x \leq 0.05$ )에서 에너지 밴드갭들이 급격히 감소하며, 해당하는 계산된 휨 매개변수가 15eV임을 알 수 있었다. 에너지 밴드갭 계산 결과로부터 굴절률  $n$ 과 고주파 유전상수  $\epsilon$  등의 광학상수를 계산하였고, 에너지 밴드갭 계산 결과는 실험치를 대체로 잘 설명하였다.

## ABSTRACT

The energy band gaps and the bowing parameters of zincblende  $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$  on the variation of temperature and composition are determined by using an empirical pseudo-potential method with another virtual crystal approximation, which includes the disorder effect. The bowing parameter is calculated as 15eV and the energy band gaps are decreasing rapidly in  $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$  ( $0 \leq x \leq 0.05$ , 300K). A refractive index  $n$  and a function of high-frequency dielectric constant  $\epsilon$  are calculated by the results of energy band gaps and the calculation results of energy band gaps are consistent with experimental values.

## 키워드

$\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ , energy band gap, refractive index, bowing parameter, disorder effect  
 $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ , 에너지 밴드갭, 굴절률, 휨 매개 변수, 무질서 효과

## 1. 서 론

과거부터 다이아몬드 및 섬아연광(zincblende)구조 type의 2원계 및 3원계 화합물 반도체에 대하여 EPM(empirical pseudopotential method)를 써서 에너

지 띠 구조를 계산하여 왔으며, 조성비 변화에 따라 에너지 띠 구조를 대칭점과 대칭선을 따라서 계산하였다[1,2]. 이러한 연구 경험을 토대로 3원계 화합물 반도체인  $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ 의 에너지 띠 구조를 계산 하고 여러 물리량들을 구하고자 한다.

\* 전남대학교 의공학과(chunghy@jnu.ac.kr)

\*\* 교신저자 : 전남대학교 전기전자통신컴퓨터공학부

• 접수일 : 2018. 09. 17

• 수정완료일 : 2018. 10. 31

• 게재확정일 : 2018. 12. 15

• Received : Sep. 17, 2018, Revised : Oct. 31, 2018, Accepted : Dec. 15, 2018

• Corresponding Author : Dae-Ik Kim

School of Electrical, Electronic Communication, and Computer Engineering,  
Chonnam National University.

Email : daeik@jnu.ac.kr

일반적으로 본 연구의 기초가 되는 3원계 화합물 반도체의 에너지띠 구조를 계산할 때에는 pseudo-potential을 성분비에 따라 평균치를 취하는 가상 결정 근사법(virtual crystal approximation, VCA)방법을 많이 사용하여 왔다. 그러나 이 방법은 non-local pseudopotential, 무질서효과(disorder effect) 등[2]을 고려하지 않음으로써 실험치를 크게 만족스럽게 설명하지 못하였다.

따라서 본 연구에서는 3원계 화합물 반도체의 영년 방정식에서 자유전자 질량 대신에, 비국소 매개변수(non-local parameter)인 유효질량(effective mass)을 사용하고 또한 무질서 효과를 고려하여 VCA 방법을 개선한 새로운 potential을 가정하여 EPM에 의한 계산결과가 실험치[3-6]를 잘 설명할 수 있도록 한다. 이를 토대로 3원계 화합물 반도체  $GaAs_{1-x}N_x$ 에 대하여 본 연구를 수행하고자 한다.

III-V-N족 질화물계 화합물 반도체(nitride semiconductor)는 조성비를 조절함으로써 원자외선(deep-ultraviolet) 영역으로부터 근적외선(near infrared) 영역에 이르는 광대역 에너지 밴드갭(energy band gap)을 가지며, LED(light emitting diode), LD(laser diode) 등의 광전소자 및 전자소자 등에 사용되고 있다[7-9].

질화물계 화합물 반도체는 우르짜이트(wurtzite) 구조와 첨아연광(zincblende) 구조로 되어 있다. 이것은 대부분의 우르짜이트 구조로 실험실에서 성장되어 왔으며, 실험적으로나 이론적으로 연구가 활발히 진행되어 왔다. 그러나 첨아연광 구조 반도체는 여전히 우르짜이트 구조 반도체에 비하여 광전소자에 있어서 큰 광이득(optical gain)과 작은 임계전류밀도(threshold current density) 등을 갖는 장점이 있음에도 불구하고 상대적으로 연구가 활발하지 못했다[10].

질화물계 화합물 반도체를 각종 소자에 사용하기 위해서는 3원계 화합물 반도체의 가전자대와 전도대간의 물리적 성질을 이해해야 하며, 에너지 밴드갭과 휨 매개변수(bowing parameter) 등을 설명해야 한다.

통상적으로  $AlGa_{1-x}As_x$ ,  $In_{1-x}Ga_xAs$  등 III-V족 화합물 반도체는 휨 매개변수가  $\sim 1\text{eV}$  이하의 비교적 작은 값을 가진다. 그러나  $GaAs_{1-x}N_x$ 은 As나 N의 조성비가 작을 때 As원자와 N원자 사이의 큰 격자부정합(large mismatch) 등에 의하여 휨 매개변수가 아주

큰 값을 가진다[11,12]. 이러한 현상들에 대한 설명은 아직도 여러 이론적 모델[1,13-16] 또는 실험[3-6,11,12,15]으로 논의되고 있다.

본 연구는 이를 설명하기 위해 EPM를 사용하여 에너지 띠 구조를 계산 하였다. 계산에 있어서는 3원계 화합물 반도체의 영년방정식(secular equation)에서 자유전자 질량(free electron mass) 대신에 비국소 매개변수인 유효질량을 사용하였고 무질서 효과를 고려하여 VCA 대신에 조성비를 고려한 조절이 가능한 매개변수(adjustable parameter)를 사용하여 개선된 potential을 가정하여 계산하였다. 여기서 3원계 화합물 반도체의 에너지띠 구조를 설명하는데 있어서 potential이 조성비에 따라서 선형적으로 변화한다고 가정한 VCA는 단순하고 간단하지만, 그 결과는 실험결과를 충분히 설명할 수 없다는 단점이 있다. 따라서 무질서 효과를 고려하여 비선형성을 나타내주는 요소를 추가하여 개선된 퍼텐셜을 도입함으로써 실험결과를 설명하게 된다.

한편 이러한 질화물계 반도체에 대한 에너지 밴드갭에 대한 연구는 온도 및 조성비 등의 여러 변수들을 고려한 수정된 BAC(Band Anti-Crossing) 모델과 EPM 등을 사용하여  $GaAs_{1-x}N_x$ [13-16],  $InAs_{1-x}N_x$ [1,17,18] 및  $GaP_{1-x}N_x$ [19-21] 등에 대해 일부 연구자들에 의하여 수행되었으며, 실험 결과들을 잘 설명하고 있다.

II절에서는 EPM에 의한 질화물계 화합물 반도체  $GaAs_{1-x}N_x$ 의 휨 매개변수 및 에너지 밴드갭을 구하기 위한 계산 방법을 설명하였으며, III절에서는 온도와 조성비 변화에 따른 3원계 질화물계 화합물 반도체  $GaAs_{1-x}N_x$ 의 에너지띠 구조에 대하여  $0 \leq x \leq 0.05$  구간에서 논의하였다. 또한 조성비의 변화에 따른 에너지 밴드갭과 관련된 굴절률  $n$ (refractive index)과 고주파 유전상수(high-frequency dielectric constant)  $\epsilon$ 를 설명하였다.

## II. 계산방법

EPM에 있어서 one-electron Hamiltonian은 식 (1)과 같다.

$$H = P^2/2m^* + V_p(\mathbf{r}) \quad (1)$$

여기서  $m^*$ 은 다른 연구자들의 이론 결과 및 실험치 등에 맞추어 구한 유효질량이며,  $V_p(\mathbf{r})$ 은 weak pseudopotential로써 섬아연광 구조에서는 식 (2)와 같다.

$$\begin{aligned} V_p(\mathbf{r}) &= \sum V(\mathbf{G}) \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) \\ &= \sum [V^S(\mathbf{G}) \cos(\mathbf{G} \cdot \boldsymbol{\tau}) \\ &\quad + iV^A(\mathbf{G}) \sin(\mathbf{G} \cdot \boldsymbol{\tau})] \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) \end{aligned} \quad (2)$$

여기서  $V^S(\mathbf{G})$  및  $V^A(\mathbf{G})$ 은 대칭 형태 인자(form factor)와 반대칭 형태 인자를 각각 나타내며, 다이아몬드 구조에서는  $V^A(\mathbf{G})$ 가 0이 된다. 또한  $\boldsymbol{\tau} = a(1,1,1)/8$ 이고  $a$ 는 격자상수이다.

통상적으로 조성비  $x$ 가 달라지는 3원계 화합물 반도체 AB<sub>1-x</sub>C<sub>x</sub>의 띠구조를 계산할 때, pseudopotential의 푸리에 성분(Fourier component)  $V(\mathbf{G})$ 는 식 (3)과 같이 가정하였다[2].

$$\begin{aligned} V(\mathbf{G}) &= (1-x)V_{AB}(\mathbf{G}) + xV_{AC}(\mathbf{G}) \\ &\quad + P(1-x)x |V_{AB}(\mathbf{G}) - V_{AC}(\mathbf{G})| \\ &\quad + P(1-x)x |V_{AB}(\mathbf{G}) - V_{AC}(\mathbf{G})|^2 \end{aligned} \quad (3)$$

여기서 세 번째 이하 항은 무질서 효과를 나타내주고 있으며, 순수 화합물 반도체와 저농도 불순물 반도체 사이의 변화량의 합을 나타내고 있다.

보통 EPM으로 에너지 밴드 구조를 계산할 경우에는 식(3)을 많이 사용하여 왔으며 실험결과들을 잘 설명하여왔다. 그러나 본 연구에서는 pseudopotential의 푸리에 성분  $V(\mathbf{G})$ 를 다음과 같이 가정하여 계산하였다[1].

$$V(\mathbf{G}) = (1-x)^p V_{AB}(\mathbf{G}) + x^p V_{AC}(\mathbf{G}) \quad (4)$$

식 (4)는 조성비 변화에 따른 Hamiltonian의 푸리에 성분  $V(\mathbf{G})$ 의 변화를 지수 함수적으로 변화한다고 가정하였다. 이것은 몇 개의 실험값을 이용하여 원하는 결과를 비교적 쉽게 얻을 수 있는 장점이 있다. 특히 여러 변수들이 고려된 수정된 BAC 모델에 의한 계산방법에 비하여 비교적 계산이 간단하다는 장점이

있다. 여기서 VCA방법을 개선한 pseudo-potential의 푸리에 성분  $V(\mathbf{G})$ 에 있어서  $P$ 값은 조절 매개변수로써 힘 매개변수를 조절해주며 여러 실험치[3-6]와 비교 조정하여 결정한다.

### III. 결과 및 논의

#### 3.1 온도와 조성비 변화에 따른 GaAs<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub>의 힘 매개변수와 에너지 밴드갭

영년방정식의 행렬요소는 표 1에 표시한 형태 인자를 적용하여 얻었으며 섭동이론을 사용함으로써 ~115개의 plane wave에 대한 행렬을 ~15×15 이하로 줄였다.

표 1. 형태 인자(in Ry), 유효질량 파라미터와 격자상수(in Å<sup>0</sup>)[16]

Table 1. Form factors(in Ry), effective-mass parameter and lattice constant(in Å<sup>0</sup>)[16]

	$V^S(3)$	$V^S(8)$	$V^S(11)$
GaAs	-0.264	0.019	0.057
GaN	-0.305	0.054	0.072
	$V^A(3)$	$V^A(4)$	$V^A(11)$
GaAs	0.063	0.048	0.006
GaN	0.280	0.199	0.029
	$V^A(12)$	$m/m^*$	$a(\text{Å}^0)$
GaAs	0.0	1.0669	5.651
GaN	0.017	1.0816	4.520

본 계산에서는 Hamiltonian의 자유전자 질량 대신에 표 1에서와 같이 유효질량을 사용하였으며, 이 값은 실험결과 등에 맞추어 구한 비국소 매개변수이다. GaAs 및 GaN의 격자상수  $a$ 는 EPM 계산에서 사용된 실험값을 사용하였으며 표 1에 나타났다. 또한 식 (4)에서 가정된 조절이 가능한 매개변수  $P$  값은 보통 상수 값으로 사용하고 있으나, 본 연구에서는  $0 \leq x \leq 0.05$ 의 조성비 구간에서 통상적으로 사용되는 상수값 대신에 조성비  $x$ 에 따라서 변화하는 값 5.3-32.5 $x$ 를 사용함으로써, 작은 조성비 변화에 따른 에너지 밴드갭의 큰 변화를 잘 설명하도록 하였다. 여기서 얻어진

P 값은 각각의 대칭점  $\Gamma$ 에서 조성비 변화에 따라 결정된 EPM 계산 결과를 실험치 등[3-6,11,12,15]과 비교 조정하여 결정하였다.

섬아연광 구조인 질화물계 3원계 화합물 반도체  $AB_{1-x}C_x$ 의 에너지 밴드갭  $E_g(AB_{1-x}C_x)$ 은 통상적으로 성분비  $x$ 에 따라서 식 (5)와 같이 표현된다[11].

$$E_g(AB_{1-x}C_x) = (1-x)E_g(AB) + xE_g(AC) - b(1-x)x \quad (5)$$

여기서  $E_g(AB)$ 와  $E_g(AC)$ 는 각각 2원계 화합물 반도체 AB와 AC의 에너지 밴드갭이며,  $b$ 는 비선형성을 나타내주는 휨 매개변수이다.

계산 결과는 조성비( $0 \leq x \leq 0.05$ ) 구간에서 조성비 변화에 따른 에너지갭의 변화는 절대온도 0K에서 조성비가 0.01, 0.02, 0.03, 0.04 및 0.05 로 증가함에 따라, 해당되는 에너지 밴드갭들 역시 1.349eV, 1.21eV, 1.099eV, 1.013eV 및 0.947eV까지 감소되고 있음을 알 수 있었다. 또한 조성비가 0일 때, GaAs의 에너지 밴드갭은 1.522eV를 갖게 된다. 특히 5%의 질소 조성비에서 0.575eV 만큼의 에너지 밴드갭이 크게 감소하였다. 이상의 계산 결과들을 2차식으로 표현하면 식 (6)과 같다.

$$E_g(GaAs_{1-x}N_x) = 1.522 - 13.215x + 15x^2, \quad 0 \leq x \leq 0.05 \quad (6)$$

식 (6)의 경험식은 실제 계산 결과와 비교하면 조성비가 0.02에서 최고 0.054eV의 차이가 있다. 여기서 이러한 조성비 증가 변화에 따른 에너지 밴드갭의 감소는 조성비의 구간 범위를  $0 \leq x \leq 0.04$ 로 줄였을 때는 휨 매개변수가 상대적으로 큰 값을 갖으며, 식 (7)과 같은 식으로 표현된다. 이는 조성비 구간이 좁아질수록 휨 매개변수가 커져 감을 뜻한다.

$$E_g(GaAs_{1-x}N_x) = 1.522 - 14.215x + 16x^2, \quad 0 \leq x \leq 0.04 \quad (7)$$

식 (7)의 경험식 또한 실제 계산 결과와 비교하면 조성비 0.02에서 최고 0.034 eV의 차이가 있으며, 조성비 구간이 좁아질수록 기울기가 커짐을 알 수 있다.

절대온도 0K에서 계산 결과는 조성비 구간에서 조성비가 증가함에 따라 해당되는 에너지 밴드갭들 역시 많이 감소하고 있음을 알 수 있다. 위의 결과에서 큰 값을 갖는 휨 매개변수는 2원계 화합물 반도체 GaAs 및 GaN들 간의 격자불일치에 기인한다.

본 연구에서의 계산방법은 간단한 pseudopotential을 가정하였음에도 불구하고 여러 변수들을 고려하여 계산한 BAC 모델에 의한 결과[14,15]와 다른 EPM 계산결과[13] 및 실험결과[3-6]들을 대체로 잘 설명해 주고 있다.

또한 Varshni 공식[22]을 사용한 온도 변화에 따른 에너지 갭의 변화는 식 (8)과 같다.

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{\beta + T} \quad (8)$$

여기서  $E_g(0)$ 은 0K에서 GaAs 및 GaN의 에너지 밴드갭이고,  $T$ 는 절대온도이다.  $\alpha$ 와  $\beta$ 는 Varshni의 상수이다. 여기서 GaAs와 GaN의  $\alpha$ 는 각각  $5.405 \times 10^{-4}$  eV/K와  $5.93 \times 10^{-4}$  eV/K이고,  $\beta$ 는 각각 204K와 600K이다[23]. 본 연구에서는 0K에서 GaAs 및 GaN의 에너지 갭은 1.522eV와 3.307eV 임을 확인하였다. 이때 Varshni공식을 사용하여 150K와 300K에서 조성비 변화에 따른 에너지 밴드갭을 2차식으로 표현하면 식 (9)와 식 (10)과 같다.

$$E_g(x) = 1.488 - 13.199x + 15x^2, \quad 0 \leq x \leq 0.05, \quad 150K \quad (9)$$

$$E_g(x) = 1.425 - 13.177x + 15x^2, \quad 0 \leq x \leq 0.05, \quad 300K \quad (10)$$

위의 경험식들은 실제 계산 결과와 비교하여 조성비가 0.02에서 최고 0.054eV의 차이가 있다.

한편 300K의  $0 \leq x \leq 0.05$  영역에서 식 (10)의 형태와 다른 2차식으로 표현[12]하면 식 (11)과 같이 설명된다.

$$E_g(GaAs_{1-x}N_x) = 1.425 - 18.14x + 135.263x^2, \quad 0 \leq x \leq 0.05 \quad (11)$$

최소자승법으로 계산한 식 (11) 또한 실제 계산결과인 그림 1과 비교하면 조성비가 0.01에서 최고 0.005eV의 근소한 차이가 존재한다. 여기서 조성비와 온도가 증가할수록 에너지 갭은 감소함을 알 수 있다.

그림 1은 절대온도 300K에서 조성비( $0 \leq x \leq 0.05$ ) 구간에서 조성비 변화에 따른 에너지 갭의 변화를 실험결과[3-6]들과 비교하여 실선으로 나타내었다.

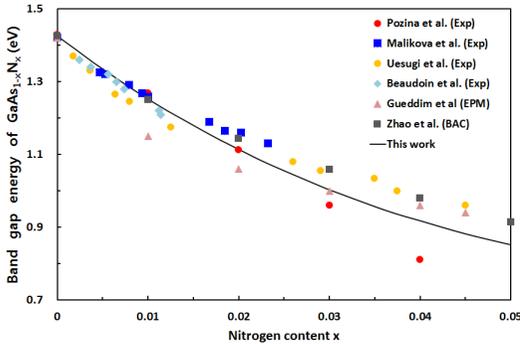


그림 1. 300K에서 질소 조성비 x에 따른  $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ 의 에너지 밴드갭 의존도

Fig. 1 Dependence of the band gap energy of  $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$  on N content x at 300K

여러 변수들을 고려하여 계산한 BAC 모델에 의한 결과[14]는 본 연구 결과와 비교하여 보았을 때 상대적으로 실험결과와 잘 일치하고 있으나, 본 계산방법에서는 간단한 pseudo-potential을 가정하였음에도 불구하고 실험결과들을 대체로 잘 설명해 주고 있다. 또한 다른 형태의 pseudo-potential의 푸리에 성분  $V(\mathbf{G})$ 를 사용한 다른 연구자의 EPM에 의한 결과[13]와 비교하여 보았을 때 근소한 차이를 보이고 있다 (그림에서 표시된 여러 실험 데이터들은 실제 값[14]과 미세한 차이가 있을 수 있음). 그림에서  $0 \leq x \leq 0.05$ 의 구간에서  $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ 의 반도체에 대한 힝 매개변수는 300K에서 15eV를 나타내었고, 조성비가 0일 때 GaAs의 에너지 밴드갭은 1.425eV를 가지며, 조성비가 증가함에 따라 해당되는 에너지 밴드갭들 역시 많이 감소되고 있음을 알 수 있다. 특히 5%의 질소 조성비에서 0.573eV 만큼의 에너지 밴드갭이 크게 감소하였다. 위의 결과들에서 힝 매개변수는 2원계 화합물 반도체들 간의 격자불일치(표 1)에 기인한다. 반도체들 간의 격자불일치가 클수록 힝 매개변수와 무질

서 효과가 커지는 경향이 있음을 확인할 수 있다. 여기서 실험 결과들은 여러 실험 방법들에 의하여 측정되었으며 실험 방법들로는 absorption data[3], electro-reflectance[4], x-ray diffraction(XRD)[5], photo-thermal deflection spectroscopy[6] 등이 사용되었다.

무질서 효과를 무시한 순수 VCA 방법에 의한 계산결과를 300K에서 1차 함수식으로 표현하면 식 (12)와 같다.

$$E_g(x, \text{VCA}) = 1.425 + 3.26x, \quad 0 \leq x \leq 0.05 \quad (12)$$

식 (12)는 실제 계산 결과와 비교하면 조성비가 0.02에서 최고 0.002eV의 차이가 있었으며, 무질서 효과를 무시한 순수 VCA 방법에 의한 계산결과는 거의 선형적으로 변화함을 알 수 있다. 식 (11)과 식 (12)로부터  $0 \leq x \leq 0.05$  구간의 300K에서 무질서 효과에 의한 에너지 갭의 변화량  $\Delta E_g(x)$ 을 개선된 VCA 방법에 의한 계산 결과와 순수 VCA 방법에 의한 결과로부터 구해보면, 조성비 x에 대한 결과는 식 (13)과 같다.

$$\begin{aligned} \Delta E_g(x) &= E_g(x) - E_g(x, \text{VCA}) \\ &= -21.4x + 135.263x^2, \quad 0 \leq x \leq 0.05 \end{aligned} \quad (13)$$

식 (13)은  $0 \leq x \leq 0.05$ 의 구간에서 조성비 0.01에서 실제로 계산된 값과 최고 0.007eV 만큼의 차이가 있었으며, 조성비가 증가하는 동안에 무질서 효과에 의한 에너지 갭의 변화량은 점점 증가하였으며, 조성비가 0.05에서 최대 0.736eV(식 (13)에서는 0.732eV로 계산됨)의 무질서 효과 값을 나타내고 있음을 확인하였다. 이와 같이 VCA 방법에 의한 계산결과는 실험치를 잘 설명하지 못하고 있음을 볼 수 있다. 따라서 본 연구에서는 조성비의 변화에 따른 무질서 효과를 나타내줄 수 있는 매개변수 P를 고려하여,  $V(\mathbf{G})$ 를 새로이 가정한 수정된 EPM 모델을 사용하여 계산하였고, 비국소 매개변수인 유효질량 및 격자상수를 Vegard 법칙에 의하여 조성비에 따라 선형적으로 변화한다고 가정하여 본 계산에 사용한 결과, 그림 1의 실험치를 대체로 잘 설명할 수 있었다. 따라서 지수함수형으로 표현된 새로이 가정한 간단한 pseudo-

potential의 푸리에 성분  $V(\mathbf{G})$ 는 실험결과를 대체로 만족하고 있음을 확인할 수 있었다.

또한 0K에서 300K까지의 범위에서 온도 변화에 따른  $0 \leq x \leq 0.05$  구간에서  $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ 의 에너지 밴드갭 변화량(band gap shift)  $\Delta E_g(T, x)$ 를 계산하기 위하여 식 (14)와 같이 정의한다[1].

$$\Delta E_g(T, x) = E_g(T, x) - E_g(300\text{K}, x) \quad (14)$$

식(6), 식(9), 식(10)으로부터 에너지 밴드갭 변화량은 같은 온도에서 조성비가 증가할수록 감소하며, 같은 조성비에서도 온도가 증가할수록 감소함을 알 수 있다.

### 3.2 조성비의 변화에 따른 굴절률과 고주파 유전상수

다음으로는  $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ 의 광학적 성질을 굴절률  $n$ 과 고주파 유전상수  $\epsilon$ 를 사용하여 설명하고자 한다. 질화물계 삼원계 화합물 반도체는 에너지 밴드갭 이외에도 이러한 광학적 상수들은 도파관 장치(waveguiding devices)와 헤테로 접합 레이저(heterostructure laser) 설계 등에 중요한 역할을 하며, 조성비  $x$ 의 함수로서 설명되어진다. 이와 같이 결정의 광학적 및 전기적 성질을 결정하는데 매우 중요하다[24].

에너지 갭과 광학적, 전기적 상수들 간의 상관관계에 대한 연구는 화합물 반도체 등의 여러 종류의 결정에 대하여 EPM 등에 의해 계산된 에너지갭의 결과로부터 기존의 여러 가지 모델식[25]에 적용하여 조성비 구간에 따른 굴절률  $n$  및 고주파 유전상수  $\epsilon$  등에 대한 연구를 최근에 많이 수행하고 있다[25-30].

이러한 계산을 위해 사용하는 여러 모델식으로는 다음과 같이 수정된 Moss 모델, Gupta-Ravindra 모델, Hervé-Vandamme 경험식 모델, Reddy-Anjaneyulu 모델, Ravindra 외 2인의 모델 및 Reddy-Ahamed 모델 등이 있으며, 이러한 여러 모델들은 직접에너지 갭  $E_g$ 과의 상관성을 설명해 주고 있다.

(i) 수정된 Moss 모델[30],

$$n = \left( \frac{108}{E_g} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (15)$$

(ii) Gupta - Ravindra 모델,

$$n = 4.084 - 0.62E_g \quad (16)$$

(iii) Hervé - Vandamme 경험식 모델,

$$n = \sqrt{1 + \left( \frac{13.6}{E_g + 3.4} \right)^2} \quad (17)$$

(iv) Reddy - Anjaneyulu 모델,

$$n = \frac{36.3}{E_g} \quad (18)$$

(v) Ravindra 외 2인의 모델,

$$n = 4.16 - 0.85E_g \quad (19)$$

(vi) Reddy - Ahamed 모델

$$n = \left( \frac{154}{E_g - 0.365} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (20)$$

이상의 여러 모델을 사용하여 300K에서 질소 조성비  $x$ 에 따른  $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ 의 굴절률  $n$ 을 나타내보면 그림 2와 같이 표현된다. 여기에서 GaAs의 굴절률은 2.949 ~ 3.472의 범위값을 가지며, 다른 여러 연구들의 결과 2.95 ~ 3.48와 잘 일치함을 확인할 수 있다[25]. 또한 GaN의 굴절률은 1.399 ~ 2.703의 범위 값을 얻을 수 있었으며, 다른 여러 연구들의 결과인 1.35 ~ 2.69의 범위값과도 잘 일치한다[25]. 여기에서 조성비  $x$ 가 증가할 때 에너지 밴드갭  $E_g$ 가 감소함에 따라 굴절률  $n$ 은 비선형적으로 증가함을 알 수 있다.

특히 이 중에서 널리 쓰이는 식 (16)의 Gupta - Ravindra 모델식을 사용하여 조성비 변화에 따른 굴

절률  $n$ 을 300K에서 최소자승법으로 사용하여 표현하면 식 (21)과 같다.

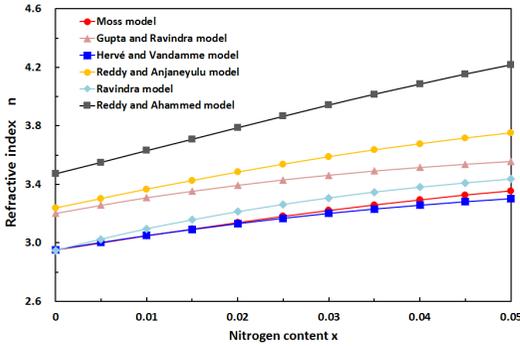


그림 2. 300K에서 질소 조성비  $x$ 에 따른 GaAs<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub>의 굴절률  $n$

Fig. 2 Refractive index  $n$  of GaAs<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub> versus nitrogen content  $x$  at 300K

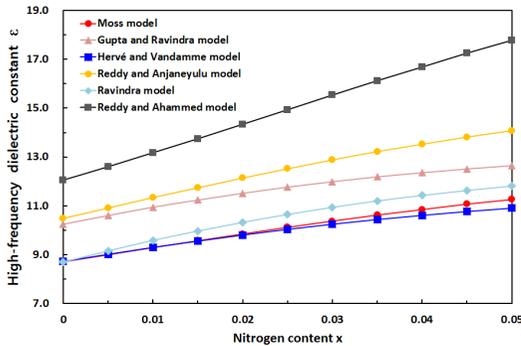


그림 3. 300K에서 질소 조성비  $x$ 에 따른 GaAs<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub>의 고주파 유전상수  $\epsilon$

Fig. 3 High-frequency dielectric constant  $\epsilon$  of GaAs<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub> versus nitrogen content  $x$  at 300K

$$n = 3.201 + 11.261x - 84.141x^2 : 0 \leq x \leq 0.05 \quad (21)$$

식 (21)의 경험식은 실제 계산 결과인 그림 2와 비교하여 조성비 0.01에서 최고 0.003의 차이가 존재한다.

또한, 굴절률  $n$ 의 값은 고주파 유전상수  $\epsilon$ 로서 식 (22)와 같다[25-30].

$$n = (\epsilon)^{0.5} \quad (22)$$

식 (22)를 사용하여 고주파 유전상수  $\epsilon$ 에 대한 계산한 결과를 그림 3에 나타내었다. 이 중에서 고주파 유전상수  $\epsilon$ 를 역시 Gupta - Ravindra 모델식을 사용하여 최소자승법으로 계산하면 식 (23)과 같다.

$$\epsilon = 10.246 + 73.99x - 523.682x^2 : 0 \leq x \leq 0.05 \quad (23)$$

위의 경험식 또한 실제 계산 결과인 그림 3과 비교하여 조성비 0.04에서 최고 0.013의 차이가 있다. 식 (21)과 식 (23)으로 부터 조성비가 증가함에 따라 에너지 밴드갭의 크기는 작아지는 데 반해서, 굴절률  $n$ 과 고주파 유전상수  $\epsilon$ 은 비선형적으로 증가함을 나타내주고 있다. 또한 굴절률에 있어서도 2원계 화합물 반도체간의 격자 불일치가 클수록 휨 매개변수가 많이 커짐을 알 수 있다. 그림 2 및 그림 3에서  $0 \leq x \leq 0.05$ 의 조성비 구간에서 조성비 변화에 따른 굴절률  $n$ 과 고주파 유전상수  $\epsilon$ 는 Reddy - Ahammed 모델에 의해 구해진 값이 제일 크게 나오고 Hervé - Vandamme 경험식 모델에 의해 구해진 값이 제일 작게 계산됨을 확인 할 수 있었다. 여기에서  $0 \leq x \leq 0.05$ 의 조성비 구간에서 계산된 굴절률 및 고주파 유전상수 등과 비교할 수 있는 실험결과에 대한 문헌은 찾을 수가 없었으나, 그 결과는 다른 연구자들에게 참고가 되었으면 한다.

#### IV. 결 론

본 연구에서는 무질서 효과가 고려된, 새로이 가정한 가상 결정 근사법과 Vegard 법칙을 만족하는 유효질량 및 격자상수를 사용하여 3원계 질화물계 화합물 반도체 GaAs<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub>의 휨 매개변수 및 에너지 밴드갭 계산을 EPM을 사용하여 계산하였다.

계산 결과는 이들 실험결과와 대체로 잘 일치하고 있다. 푸리에 성분  $V(\mathbf{G})$ 에서 조절이 가능한 퍼텐셜 파라미터  $P$ 값에서 상수값 대신에 조성비  $x$ 에 따라서 변화하는 값  $5.3-32.5x$ 를 사용함으로써  $0 \leq x \leq 0.05$ 의 구간에서 GaAs<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub>의 반도체에 대한 휨 매개변수는 300K에서 15eV를 나타내었고, 해당되는 에너지 밴드갭들 역시 감소되고 있음을 알 수 있었으며, 격자 불일치가 클수록 휨 매개변수의 값이 커지는 경향이 있

음을 확인하였다. 특히 5%의 질소 조성비에서 0.573eV 만큼의 에너지 밴드갭이 크게 감소하였다.

다음으로는 GaAs<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub>의 광학적 성질을 굴절률 n 및 고주파 유전상수 ε를 사용하여 설명하였다. 계산결과 굴절률 n은 에너지 밴드갭 E<sub>g</sub>가 감소함에 따라 증가함을 알 수 있었다. 여기서 GaAs 및 GaN의 굴절률은 각각 2.949~3.472의 범위와 1.399~2.703의 범위값을 얻을 수 있었다. 고주파 유전상수 ε 또한 조성비가 증가함에 따라 에너지 밴드갭의 크기는 작아지는 데 반해서, 고주파 유전상수 ε은 계속 증가함을 나타내주고 있다. 굴절률에 있어서도 2원계 화합물 반도체간의 격자 불일치가 클수록 휨 매개변수가 커짐을 알 수 있었다.

## References

- [1] H. Chung and D. Kim, "The Calculation of the Energy Band Gaps of Zincblende InAs<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub> on Temperature and Composition," *J. of the Korea Institute of Electronic Communication Sciences*, vol. 11, no. 12, 2016, pp. 1165-1174.
- [2] H. Chung and M. An, "Energy Band Structures of Graded Gap Superlattices and Quaternary Compound Semiconductors," *Sae Mulli*, vol. 32, no. 5, 1992, pp. 693-702.
- [3] G. Pozina, I. Ivanov, B. Monemar, J. Thordson, and T. G. Andersson, "Optical characterization of MBE-grown GaNAs," *Material Science & Engineer. B*, vol. 50, issues 1-3, 1997, pp. 153-156.
- [4] L. Malikova, F. Pollak, and R. Bhat, "Composition and Temperature Dependence of the Direct Band Gap of GaAs<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub> (0 ≤ x ≤ 0.0232) Using Contactless Electroreflectance," *J. of Electronic Materials*, vol. 27, no.5, 1998, pp. 484 - 487.
- [5] K. Uesugi, N. Morooka, and I. Suemune, "Reexamination of N composition dependence of coherently grown GaNAs band gap energy with high-resolution x-ray diffraction mapping measurements," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 74, no. 9, 1999, pp. 1254-1256.
- [6] M. Beaudoin, I. Chan, D. Beaton, M. Elouneq-Jamroz, T. Tiedje, M. Whitwick, E.Young, J. Young, and N. Zangenberg, "Bandedge absorption of GaAsN films measured by the photothermal deflection spectroscopy," *J. Crystal Growth*, vol. 311, no. 7, 2009, pp. 1662-1665.
- [7] Y. Kuo, B. Liou, M. Chen, S. Yen, and C. Lin, "Effect of band-offset ratio on analysis of violet-blue InGaN laser characteristics," *Opt. Commun.*, vol. 231, issue 1-6, 2004, pp. 395-402.
- [8] J. Kwon, H. Kim, K. Park, Y. Kim, and G. Hoang, "Thermal Characteristics of Designed Heat Sink for 13.5W COB LED Down Light," *J. of the Korea Institute of Electronic Communication Sciences*, vol. 9, no. 5, 2014, pp. 561-566.
- [9] B. Yoon, J. Song, J. Park, and H. Kwon, "Development of 1.2kW LED Light with Water-Air Circulation," *J. of the Korea Institute of Electronic Communication Sciences*, vol. 10, no. 5, 2015, pp. 615-622.
- [10] B. Liou and C. Liu, "Electronic and structural properties of zincblende Al<sub>x</sub>In<sub>1-x</sub>N," *Optics Commun.*, vol. 274, no. 2, 2007, pp. 361-365.
- [11] R. Senger and K. Bajaj, "Photoluminescence excitonic linewidth in GaAsN alloys," *J. of Appl. Phys.*, vol. 94, no. 12, 2003, pp. 7505-7508.
- [12] U. Tisch, E. Finkman, and J. Salzman, "The anomalous bandgap bowing in GaAsN," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 81, no. 3, 2002, pp. 463-465.
- [13] A. Gueddim, R. Zerdoum, and N. Bouarissa, "Dependence of electronic properties on nitrogen concentration in GaAs<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub> dilute alloys," *J. of Physics and Chemistry of Solids*, vol. 67, no. 8, 2006, pp. 1618-1622.
- [14] C. Zhao, N. Li, T. Wei, and C. Tang, "Temperature and Composition Dependence of GaN<sub>x</sub>As<sub>1-x</sub> (0 < x ≤ 0.05) before and after Annealing," *Chin. Phys. Lett.*, vol. 28, no. 12, 2011, pp. 127801-1-4.
- [15] R. Kudrawiec, G. Sek, J. Misiewicz, L. Li, and J. Harmand, "Experimental investigation of the C<sub>MN</sub> matrix element in the band anticrossing model for GaAsN and GaInAsN layers," *Solid State Commun.*, vol. 129, issue 6,

- 2004, pp. 353-357.
- [16] H. Chung, "Energy Band Gaps and Bowing Parameters of Zincblende  $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ ," *Sae Mulli*, vol. 64, no. 9, 2014, pp. 868-876.
- [17] J. Ibáñez, R. Oliva, M. De la Mare, M. Schmidbauer, S. Hernández, P. Pellegrino, D. Scurr, R. Cuscó, L. Artús, M. Shafi, R. Mari, M. Henini, Q. Zhuang, A. Godenir, and A. Krier, "Structural and optical properties of dilute InAsN grown by molecular beam epitaxy," *J. of Appl. Phys.*, vol. 108, issue 10, 2010, pp. 103504-1-8.
- [18] R. Kudrawiec, J. Misiewicz, Q. Zhuang, A. Godenir, and A. Krier, "Photoreflectance study of the energy gap and spin-orbit splitting in InNAs alloys," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 94, no. 15, 2009, pp. 151902-1-3.
- [19] C. Zhao, T. Wei, N. Li, S. Wang, and K. Lu, "The evolution of the band gap energy of the P-rich  $\text{GaN}_x\text{P}_{1-x}$  ( $0 \leq x \leq 0.05$ ) on composition and temperature," *Physica B: Physics of Condensed Matter.*, vol. 427, Oct. 2013, pp. 58-61.
- [20] C. Zhao, T. Wei, X. Sun, S. Wang, and K. Lu, "The factors contributing to the band gap bowing of the dilute nitride GaNP alloy," *Appl. Phys. A*, vol. 117, issue 3, 2014, pp. 1447-1450.
- [21] H. Chung and D. Kim, "The Calculation of the Energy Band Gaps of Zincblende  $\text{GaP}_{1-x}\text{N}_x$ ," *J. of the Korea Institute of Electronic Communication Sciences*, vol. 12, no. 5, 2017, pp. 783-790.
- [22] Y. Varshni, "Temperature dependence of the energy gap in semiconductors," *Physica*, vol. 34, Issue 1, 1967, pp. 149-154.
- [23] I. Vurgaftman, J. Meyer, and L. Ram-Mohan, "Band parameters for III - V compound semiconductors and their alloys," *J. of Appl. Phys.*, vol. 89, no. 11, 2001, pp. 5815-5875.
- [24] A. Gueddim, R. Zerdom, and N. Bouarissa, "Alloy composition and optoelectronic properties of dilute  $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x$  by pseudo-potential calculations," *Physica B*, vol. 389, no. 2, 2007, pp. 335-342.
- [25] N. Bouarissa, S. Siddiqui, M. Boucenna, and M. Khan, "Band structure and optical constants of  $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ ," *Optik*, vol. 131, Feb. 2017, pp. 317-322.
- [26] N. E. H. Fares and N. Bouarissa, "Band Structure, Charge Distribution and Optical Properties of  $\text{AlP}_x\text{Sb}_{1-x}$  Ternary Semiconductor Alloys," *Materials Research*, vol. 21, no. 4, 2018, pp. 1-8.
- [27] M. Boucenna and N. Bouarissa, "Refractive index and dielectric constants of  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ : Disorder effect," *Optik*, vol. 125, issue 22, 2014, pp. 6611-6615.
- [28] W. Kara Mohamed, F. Mezrag, M. Boucenna, and N. Bouarissa, "Electronic structure and related properties for quasi-binary  $(\text{GaP})_{1-x}(\text{ZnSe})_x$  crystals," *J. of Structural Chem.*, vol. 54, no. 6, 2013, pp. 1004-1011.
- [29] N. Ravindra, P. Ganapathy, and J. Choi, "Energy gap - refractive index relations in semiconductors-an overview," *Infrared Phys. & Technol.*, vol. 50, issue 1, 2007, pp. 21-29.
- [30] N. Ravindra and V. Srivastava, "Variation of refractive index with energy gap in semiconductors," *Infrared Phys.*, vol. 19, issue 5, 1979, pp. 603-604.

## 저자 소개

### 정호용(Ho-Yong Chung)



1979년 중앙대학교 물리학과 졸업(이학사)  
1981년 고려대학교대학원 물리학과 졸업(이학석사)  
1986년 중앙대학교대학원 물리학과 졸업(이학박사)

1987년~현재 전남대학교 공학대학 의공학과 교수  
※ 관심분야 : 반도체소자, 고체물리학

### 김대익(Dae-Ik Kim)



2002년~현재 전남대학교 전기전자통신컴퓨터공학부 교수

※ 관심분야 : VLSI 설계, 저전력 회로설계

