

완화된 또는 응력변형을 겪는 Ge과 Ge_{0.8}Sn_{0.2}에서 전자와 정공의 상태밀도 유효질량과 전도도 유효질량

The density-of-states effective mass and conductivity effective mass of electrons and holes in relaxed or strained Ge and Ge_{0.8}Sn_{0.2}

박일수*, 전상국**
(il-soo Park* and Sang Kook Chun**)

Abstract

Density-of-states effective mass(m_d^*) and conductivity effective mass(m_c^*) for Ge and Ge_{0.8}Sn_{0.2} are obtained by using 8×8 $k \cdot p$ and strain Hamiltonians. It is shown that m_d^* and m_c^* for electrons in Ge/Ge_{0.8}Sn_{0.2}(001) and Ge_{0.8}Sn_{0.2}/Ge(001) are much smaller than those for electrons in relaxed Ge mainly due to the increase of interaction, caused by the strain, between the conduction band and valence bands at the Γ point. The lift of degeneracy in Ge/Ge_{0.8}Sn_{0.2}(001) and Ge_{0.8}Sn_{0.2}/Ge(001) makes m_d^* and m_c^* for holes smaller than those in relaxed Ge, and results in the decrease of the interband scattering as well as intraband scattering. The decrease of the interband scattering is more obvious in Ge/Ge_{0.8}Sn_{0.2}(001) because of its large splitting energy between the heavy hole and light hole band. Therefore, Ge/Ge_{0.8}Sn_{0.2}(001) is expected to be good candidate for the development of ultra high-speed CMOS device.

Key Words(중요용어) : density-of-states effective mass(상태밀도 유효질량), conductivity effective mass(전도도 유효질량), strain(응력변형), GeSn,

1. 서론

MBE(molecular beam epitaxy)나 CVD(chemical vapor deposition)와 같은 방법으로 성장시킨 Ge/GeSn 또는 GeSn/Ge 구조는 성장과정 중에 생기는 응력변형에 의하여 에너지 구조가 크게 변화된다. Ge/Ge_{1-y}Sn_y 또는 Ge_{1-x}Sn_x/Ge 구조는 성장방

향과 α -Sn의 특정 x, y 함량에서 극소 전도띠가 Γ 지점에 존재하여 직접천이 가능성이 뿐만 아니라 에너지 구조의 변화로 인해 전자와 정공의 이동도도 향상될 수 있다¹⁾. 따라서, Ge/Ge_{1-y}Sn_y 또는 Ge_{1-x}Sn_x/Ge 구조는 광소자 및 초 고속소자의 재료로 이용될 수 있는 가능성을 보여준다.

Ge/Ge_{1-y}Sn_y 구조는 α -Sn의 특정 y 함량과 (001) 성장방향에서만 직접천이 에너지 간격을 가진다. 반면, Ge_{1-x}Sn_x/Ge 구조에서는 α -Sn의 특정 x 함량에 대해 (001), (110), 그리고 (111)의 세 성장방향에서 모두 직접천이 에너지 간격을 가진다²⁾. 세 방향 중, (001) 성장방향으로 길러진 Ge_{1-x}Sn_x/Ge 구조에서 결함에 의한 산란과 표면 산란이 가장 적

* : 인하대학교 전자전기컴퓨터 공학부 통합과정

** : 인하대학교 전자전기컴퓨터 공학부 부교수
(인천광역시 남구 용현동 253,

Fax : 032-875-5882 E-mail : ilsoo@orgio.net)

2000년 5월 15일 접수, 2000년 7월 29일 심사완료

다. 이와 같은 사실들을 감안하면, Ge/Ge_{1-y}Sn_y(001)과 Ge_{1-x}Sn_x/Ge(001) 구조가 직접천이 에너지 간격을 가지면서 좋은 전기적 특성을 보일 것이라 여겨진다.

한편, Ge_{1-y}Sn_y 위에 Ge_{1-x}Sn_x을 성장시킬 때 경계면에서 응력변형의 크기는 에피 층의 두께에 의존하지 않는다는 가정과 가상 결정 어림법(virtual crystal approximation)으로 계산된 Ge/Ge_{1-y}Sn_y(001) 구조는 0.11 < y < 0.27 (0.53 eV > E_g > 0 eV) 구간에서 직접천이 에너지 간격을 가진다²⁾. 마찬가지로 방법으로 계산된 완화된 Ge_{1-x}Sn_x의 직접 천이 에너지 간격을 가지는 범위는 0.2 < x < 0.6 이지만 실제로 Γ 지점 전도띠의 극소점이 L 지점의 그것보다 빨리 감소하여 2.8 eV³⁾의 큰 bowing 효과를 가진다. 그 결과, Ge_{1-x}Sn_x/Ge(001) 구조는 0.05 < x < 0.27 (0.73 eV > E_g > 0 eV) 구간에서 직접천이 에너지 간격 특성이 나타난다²⁾.

(001) 방향으로 성장시킨 Ge/Ge_{1-y}Sn_y과 Ge_{1-x}Sn_x/Ge 구조를 광소자 및 초 고속소자의 재료로 이용하기 위해서는 우선 그 전기적 특성을 연구할 필요가 있다. 따라서, 본 연구에서는 완화된 Ge_{0.8}Sn_{0.2}과 응력변형을 겪는 Ge/Ge_{0.8}Sn_{0.2}(001)과 Ge_{0.8}Sn_{0.2}/Ge(001) 구조의 에너지 구조를 $k \cdot p$ 방법을 이용하여 계산하였고, 전자와 정공의 상태밀도 유효질량(m_d^*) 및 전도도 유효질량(m_c^*)의 계산을 통해 재료의 전기적 특성을 연구하였다. 전도띠와 원자가띠가 매우 근접한 에너지 구조에서 섭동 이론에 의한 오차를 줄이기 위하여 8개의 띠를 이용한 8×8 $k \cdot p$ 및 응력변형 해밀토니안을 이용하였다⁴⁾.

2. 본론

α -Sn의 에너지 띠 구조를 볼 때, Γ 지점에서 전도띠의 역할을 하는 Γ_7^c 는 원자가띠(Γ_8^v)의 아래에 위치한다. 따라서, Ge과 α -Sn을 섞는다면 직접천이 에너지 간격을 갖는 물질들 만들 수 있을 뿐만 아니라 조성비를 조절하여 직접천이 에너지 간격을 변화시킬 수도 있다. 한편, MBE나 CVD와 같은 방법으로 성장시킨 Ge/GeSn 또는 GeSn/Ge은 Ge과 α -Sn 사이에 존재하는 약 15 %의 격자 불일치(lattice mismatch)때문에 평면방향으로 압축 또는

팽창 응력변형을 겪게된다. 그 결과, 응력변형을 겪는 Ge/Ge_{0.8}Sn_{0.2}(001)과 Ge_{0.8}Sn_{0.2}/Ge(001) 구조는 전도띠와 원자가띠가 매우 근접하게 될 수 있다. 따라서, 응력변형을 겪는 Ge/Ge_{0.8}Sn_{0.2}(001)과 Ge_{0.8}Sn_{0.2}/Ge(001) 구조의 에너지 구조를 알기 위해서는 섭동 이론에 의한 오차를 줄일 수 있는 8×8 $k \cdot p$ 및 응력변형 해밀토니안을 이용하여 계산해야 한다⁴⁾.

$|Jm_j\rangle$ 표현법으로 표시된 basis set을 이용하여 $k \cdot p$ 및 응력변형 해밀토니안을 만들었다. 응력변형 해밀토니안에 필요한 상수들과 형태는 참고문헌 [4]를 참조하였다. 계산에 필요한 상수인 Ge과 α -Sn의 브릴루앙 영역의 대칭점에서 에너지 값은 표 1에 있고 변형 포텐셜(deformation potential), 푸아송 비(Poisson ratio), 그리고 비등방성 인자(anisotropic factor)는 표 2에 있다. 또한, $k \cdot p$ 해밀토니안에 필요한 상수들은 원자가띠 사이의 상호작용과 원자가띠와 전도띠 사이의 상호작용을 대변하는 것들이며 표 3에 수록하였다^{12,13)}.

표 1. 브릴루앙 영역의 대칭점에서 Ge과 α -Sn의 에너지 값(eV)⁵⁾.

Table 1. The energy value of Ge and α -Sn at B.Z. symmetry point(eV)⁵⁾.

k -point	Ge	α -Sn
$\Gamma_7^v(\Delta)$	-0.29	-0.80
Γ_8^v	0.00	0.00
Γ_7^c	0.90	-0.42
L_6^c	0.76	0.14
X_5^c	1.16	0.90

$k \cdot p$ 및 응력변형 해밀토니안은 같은 basis set 으로부터 얻어진 것이므로 서로 합해질 수 있다. 8×8 해밀토니안을 직접 풀어 해를 구하려면 시간이 너무 많이 걸리는 단점이 있으므로 다음과 같은 과정을 거쳤다. 우선, unitary 변환을 통해 8×8 해밀토니안 행렬을 단순하게 만들었으며, 8×8 해밀

토니안 행렬의 해를 해석 표현식(analytic equation)으로 얻으려고 8×8 행렬에서 eigenenergy E 를 곱한 단위 행렬을 뺀 후 행렬식(determinant)을 0으로 놓았다. 각 띠들은 스핀에 의해 분리되지 않으므로 행렬식은 에너지에 대한 4차 방정식의 제곱형태가 된다. 마지막으로, 4차 방정식으로부터 에너지와 파수벡터와의 관계를 해석 표현식으로 얻었다⁴⁾.

표 2. Ge과 Ge_{0.8}Sn_{0.2}의 IMBP와 P.
Table 2. IMBP and P in Ge and Ge_{0.8}Sn_{0.2}.

	Ge	Ge _{0.8} Sn _{0.2}
$P(\text{eV/K})$	9.967	9.886
$A(\text{au})$	-13.113	-13.627
$B(\text{au})$	5.016	5.329
$N(\text{au})$	-16.749	-17.661

표 2. Ge과 α -Sn의 변형 포텐셜(eV), 푸아송 비(dimensionless), 그리고 비등방성 인자(dimensionless).

Table 2. Deformation potentials(eV), Poisson ratio(dimensionless) and anisotropic factor(dimensionless) of Ge and α -Sn.

	Ge	α -Sn
D_u	3.90 ^{b)}	3.60 ^{l)}
D'_u	4.07 ^{b)}	2.70 ^{l)}
D'_d	12.4 ^{l)}	3.3 ^{l)}
a_r	3.8 ^{l)}	13.7 ^{l)}
a_x	13.9	3.938
a_L	8.6 ^{l)}	1.173
$E_{d[001]}$	7.05	4.0
$E_{d[111]}$	15.91 ^{l)}	9.02
ν	0.273 ^{b)}	0.298 ^{b)}
a	0.6008 ^{b)}	0.5483 ^{b)}

이와 같은 과정을 통하여 Ge 또는 Ge_{0.8}Sn_{0.2}의 에너지구조와 일정에너지 표면(constant energy surface)을 얻을 수 있으며 m_d^* 및 m_c^* 를 계산할 수 있다. m_d^* 는 운반자가 머무를 수 있는 공간의 크기를 대변하는 변수로서, 띠내 산란과 띠사이 산란의 크기를 결정하며 이동도 예측에 사용되는 중요한 변수이다. 한편, m_c^* 는 운반자의 평면방향 속도를 결정하며 m_d^* 와 더불어 이동도 예측에 사용되는 중요한 변수다. 따라서, m_d^* 와 m_c^* 을 통해 물질의 이동도를 예측할 수 있다.

띠가 등방성(isotropic)이고 포물형(parabolic) 성질을 갖는다면 m_d^* 와 m_c^* 는 띠의 어느 곳에서도 일정하게 된다. 반면, 띠가 비등방성(anisotropic)과 비포물형(nonparabolic) 성질을 갖게 되면 m_d^* 와 m_c^* 는 띠의 위치와 방향에 따라 달라지므로 일정 에너지 표면에서의 유효질량을 구할 필요가 있다. 물질의 에너지 띠와 일정 에너지 표면이 등방성과 포물형 성질을 가졌다는 가정 하에 구한 상태밀도함수는 아래와 같다.

$$g(E)dE = \frac{8\sqrt{2} \pi m_d^{*3/2} \sqrt{E}}{h^3} dE \quad (1)$$

실제로 Ge과 Ge_{0.8}Sn_{0.2}의 에너지 띠 구조와 일정 에너지 표면은 비등방성과 비포물형 성질을 가지므로⁴⁾, 방향에 의존하는 새로운 상태밀도를 정의해야 한다. 극성각(polar angle) θ 와 방위각(azimuthal angle) ϕ 에 따른 새로운 상태밀도 함수는 아래와 같다.

$$g(E)dE = \frac{1}{4\pi^3} \int_{\theta, \phi} k^2 \sin \theta d\theta d\phi \frac{dk}{dE} dE \quad (2)$$

식 (1)과 (2)를 비교하면, 일정 에너지 표면에서 비등방성과 비포물형 성질을 고려한 m_d^* 를 계산할 수 있다. 계산한 m_d^* 로부터 에너지의 변화에 따른 비포물형 성질은 알 수 있지만 비등방성 성질에 대한 정보는 내포하고 있지 않다.

한편, 방향성을 가지는 유효질량의 표현식은 아래와 같다.

$$\frac{1}{m_i} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i^2} \quad (3)$$

여기서 i 는 파수벡터 \vec{k} 의 방향으로서 관심 있는 방향을 의미한다. 또한, 물질의 일정에너지 표면의 전공간에서 m_c^* 의 표현식은 아래와 같다.

$$\frac{1}{m_c^*} = \frac{\int_{\theta, \phi} \frac{k^2 \sin \theta d\theta d\phi}{m_i} \frac{dk}{dE} dE}{\int_{\theta, \phi} k^2 \sin \theta d\theta d\phi \frac{dk}{dE} dE} \quad (4)$$

식 (3)과 (4)로부터 일정 에너지 표면에서 비등방성과 비포물형 성질을 고려한 m_c^* 를 계산할 수 있다. 여기서 m_c^* 는 평면방향에 대한 가로 또는 세로 방향의 유효질량을 의미하며 에너지 변화에 따른 비포물형과 비등방성 성질을 모두 알 수 있다.

3. 결과 및 고찰

3.1. 상태밀도 유효질량

그림 1은 Ge과 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$ 에서 Γ 지점에 위치하는 전자의 상태밀도 유효질량(m_{de}^*)을 에너지의 함수로 보여준다. 각 구조마다 전도띠의 극점을 영점 에너지로 선택했다. 한편, 완화된 Ge은 극소 전도띠가 L 지점에 위치하지만 비교를 위해 Γ 지점에 위치하는 m_{de}^* 를 첨가시켰다.

에너지가 증가함에 따라 m_{de}^* 도 증가하며, 증가하는 정도도 네 경우 모두 비슷하다. 이는 네 물질에서 전도띠의 비포물형 성질이 유사하다는 것을 의미한다. 각 물질에 따라 m_{de}^* 의 변화는 E_g , Δ (spin-orbit splitting energy), 그리고 전도띠와 원자가띠의 상호작용을 의미하는 P 의 크기에 의존한다. 특히, E_g 이 작을수록 전도띠와 원자가띠의 상호작용이 강해져 작은 m_{de}^* 를 갖게 된다. Bowing 효과를 고려하여 선형 내삽법으로 계산한 완화된 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$ 의 E_g 은 0.188 eV이다. 이 값은 그림 1의 네 경우 중에서 가장 작은 값이며 완화된 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$ 이 가장 작은 m_{de}^* 를 갖게 되는 원인이 된다. 한편, 팽창 응력변형을 겪는 $\text{Ge}/\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}(001)$ 구조는 완

화된 Ge의 E_g 보다 작은 값을 가지므로 작은 m_{de}^* 를 갖는다. 또한, 압축 응력변형을 겪는 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}/\text{Ge}(001)$ 구조는 완화된 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$ 보다 큰 E_g 를 가지므로 큰 m_{de}^* 를 갖는다. 완화된 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$, $\text{Ge}/\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}(001)$, 그리고 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}/\text{Ge}(001)$ 구조는 모두 극소 전도띠가 Γ 지점에 위치할 뿐만 아니라 GaAs의 유효질량(0.067 m_0)보다 작은 값을 가지므로 초고속소자의 재료로서 기대된다.

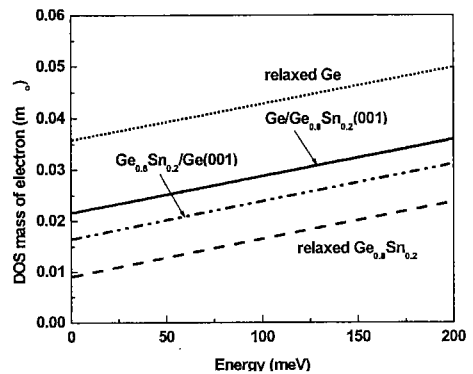


그림 1. Ge과 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$ 에서 전자의 상태밀도 유효질량.

Fig. 1. The density-of-states effective mass of electrons in Ge and $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$.

그림 2는 Ge과 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$ 에서 정공의 상태밀도 유효질량(m_{dh}^*)을 절대 에너지의 함수로 보여준다. 각 구조에서 원자가띠의 극점을 영점 에너지로 선택했다. 완화된 Ge과 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$ 의 경우, Γ 지점에서 HH과 LH 띠가 축퇴되어 있으므로 m_{dh}^* 는 HH과 LH 띠의 상태밀도 유효질량을 모두 포함하고 있다. 한편, 팽창 응력변형을 겪는 Ge에서는 단축 응력변형에 의한 띠 분리로 LH 띠가 HH 띠 위에 위치하며, 압축 응력변형을 겪는 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$ 에서는 HH 띠가 맨 위에 위치한다. 따라서, $\text{Ge}/\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}(001)$ 구조의 경

우, 낮은 에너지에서의 m_{dh}^* 값은 LH 띠에 의해서만 결정되며 에너지가 414 meV부터는 LH와 HH 띠가 모두 m_{dh}^* 의 결정에 기여한다. 또한, $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}/\text{Ge}(001)$ 구조의 경우, 낮은 에너지에서는 HH 띠에 의해서만 m_{dh}^* 가 결정되며 LH 띠의 기여가 포함된 에너지 값은 243 meV부터이다.

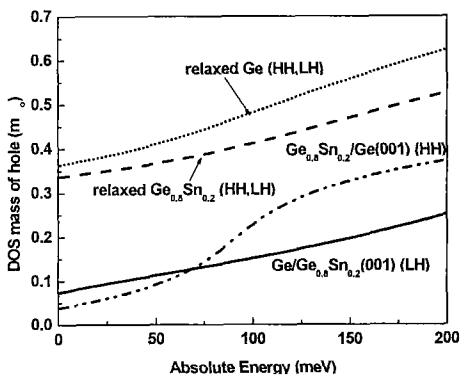


그림 2. Ge과 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$ 에서 정공의 상태밀도 유효 질량.

Fig. 2. The density-of-states effective mass of holes in Ge and $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$.

전도띠의 경우와 마찬가지로 원자가띠의 비포물형 성질로 인하여 네 경우 모두 절대 에너지가 증가함에 따라 m_{dh}^* 는 증가하며 비등방성 성질은 나타나지 않는다. 각 물질에 따라 m_{dh}^* 의 변화는 inverse mass band parameter(IMBP)의 크기에 의존한다. 특히, 원자가띠 맺음변수(valence band parameter) A 의 크기가 작을수록 작은 m_{dh}^* 를 갖게된다. 선형 내삽법에 의해 본 연구에 사용된 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$ 의 A 는 -13.627 [a.u.]로 Ge의 -13.113 [a.u.]보다 작다. 이는 완화된 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$ 의 m_{dh}^* 가 완화된 Ge의 그것보다 작은 원인이 된다. 한편, 낮은 에너지 영역에서, 응력 변형을 겪는 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}/\text{Ge}(001)$ 나 $\text{Ge}/\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}(001)$ 의 m_{dh}^* 값은 완화된 경우보다 매우 작다. 이는 응력 변형에 따라 축퇴되어 있던 HH와 LH 띠가 분리되기 때문이다.

응력변형을 받는 두 구조를 비교해 볼 때, $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}/\text{Ge}(001)$ 구조에서 HH와 LH 띠의 분리된 정도가 작다. 이는 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}/\text{Ge}(001)$ 구조에서 HH와 LH 띠의 큰 상호작용을 유발시켜 낮은 절대 에너지 75 ~ 125 meV에서 m_{dh}^* 가 갑자기 크게 증가되는 원인이 된다. 그림에서는 보이지 않지만, $\text{Ge}/\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}(001)$ 에서도 유사한 변화가 보였다. $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}/\text{Ge}(001)$ 와 $\text{Ge}/\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}(001)$ 에서 나타나는 낮은 에너지 영역에서의 작은 m_{dh}^* 는 정공을 이용한 고속소자의 가능성을 제시한다.

3.2. 전도도 유효질량

그림 3은 Ge과 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$ 에서 Γ 지점에 위치하는 전자의 전도도 유효질량(m_{ce}^*)을 에너지 함수로 보여준다. 각 구조에서 전도띠의 극점을 영점 에너지로 선택했고 완화된 Ge의 m_{ce}^* 는 비교를 위해 첨가시켰다.

그림 1의 경우와 마찬가지로, 전도띠의 비포물형 성질로 인하여 네 경우 모두 에너지가 증가함에 따라 증가되는 m_{ce}^* 가 나타난다. 에너지 증가에 따른 m_{ce}^* 증가율이 m_{de}^* 의 그것과 다른 이유는 전도띠의 비등방성 성질 때문이다. 완화된 Ge과 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$ 은 입방 대칭(cubic symmetry) 구조를 가지기 때문에 전자의 가로 방향 질량(m_T^*)과 세로 방향 질량(m_L^*)이 같은 값을 가진다. 완화된 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$ 의 m_{ce}^* 가 완화된 Ge의 그것보다 작은 이유는 E_g 의 감소로 인해 전도띠와 원자가띠 사이의 상호작용이 커졌기 때문이다.

응력변형이 포함되면, 입방 대칭이 파괴되어 원자가띠에서 HH와 LH 띠가 분리될 뿐만 아니라 방향성을 가지게 된다. 따라서, 응력변형을 겪는 Ge 또는 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$ 은 전자의 m_T^* 와 m_L^* 이 달라진다. 앞서 설명하였듯이 $\text{Ge}/\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}(001)$ 구조는 완화된 Ge에 비해 작은 E_g 을 가지므로 전자의 m_T^* 와 m_L^* 은 완화된 Ge의 m_{ce}^* 보다 작아진다. 반면, $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}/\text{Ge}(001)$ 구조는 완화된 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$ 에 비해 큰 E_g 을 가지므로 전자의 m_T^* 와 m_L^* 은 완화된 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$ 의 m_{ce}^* 보다 커진다. 한편, $\text{Ge}/\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}(001)$ 구조에서 전도띠는 LH 띠와 세로 방향에서 더욱 심한 상호작용을 하게되어 m_L^* 이

m_T^* 보다 작아지게 된다. 반면, $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}/\text{Ge}(001)$ 구조에서의 전도띠는 HH 띠와 가로 방향에서 더욱 심한 상호작용을 하게되어 m_T^* 가 m_L^* 보다 작아지게 된다.

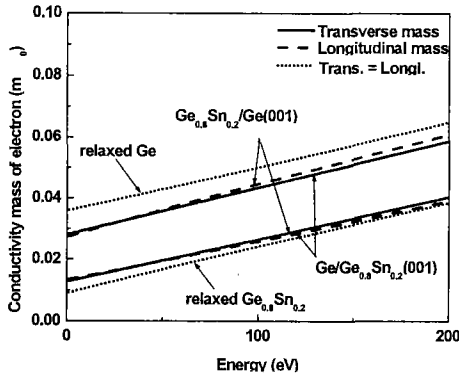


그림 3. Ge과 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$ 에서 전자의 전도도 유효질량.
 Fig. 3. The conductivity effective mass of electrons in Ge and $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$.

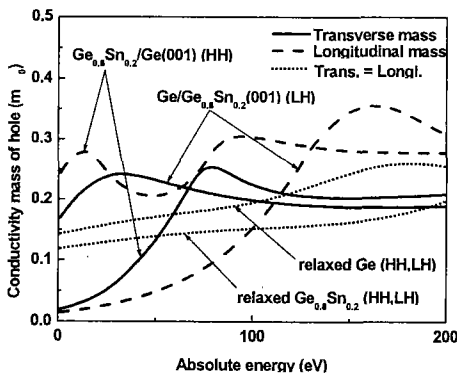


그림 4. Ge과 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$ 에서 정공의 전도도 유효질량.
 Fig. 4. The conductivity effective mass of holes in Ge and $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$.

그림 4는 Ge과 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$ 에서 Γ 지점에 위치하는 m_{ch}^* 를 절대 에너지 함수로 보여준다. 각 구조에서 원자가띠의 극점을 영점 에너지로 선택했다. 그림 2의 경우와 마찬가지로 완화된 Ge과 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$ 에서의 m_{ch}^* 는 HH과 LH 띠의 m_{ch}^* 를 모두 포함하고 있으며 $\text{Ge}/\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}(001)$ 구조에서는 LH 띠의 m_{ch}^* 를 보여주고 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}/\text{Ge}(001)$ 구조에서는 HH 띠의 그것을 보여준다.

완화된 Ge과 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$ 은 입방 대칭 구조를 가지기 때문에 m_T^* 와 m_L^* 이 같은 값을 가진다. 또한, 완화된 Ge의 원자가띠 뿔음변수 A 보다 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$ 의 그것이 작은 값을 가지기 때문에 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$ 의 m_{ch}^* 가 작아진다. 실제로 완화된 Ge과 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$ 의 HH과 LH 띠는 각각 심한 비포물형 성질을 보이지만, 그림 4에서는 두 값의 평균값을 보여주므로 그 특성은 뚜렷하지 않다. 반면, 응력변형을 겪는 Ge과 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$ 의 HH과 LH 띠는 입방 대칭의 파괴에 의한 비등방성 성질의 증가로 m_T^* 와 m_L^* 은 각각 서로 크게 달라지며 각 띠의 비포물형 성질이 뚜렷하다. 또한, $\text{Ge}/\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}(001)$ 구조의 LH 띠는 세로방향에서 전도띠와의 큰 상호작용으로 m_L^* 이 m_T^* 보다 작아지고 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}/\text{Ge}(001)$ 구조의 HH 띠는 가로방향에서 전도띠와의 큰 상호작용으로 m_T^* 가 m_L^* 보다 작아진다. $\text{Ge}/\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}(001)$ 구조의 에너지에 따른 띠 구조를 살펴보면 Γ 지점에서 크게 분리됐던 HH과 LH 띠가 세로 방향에서 전도띠와 LH 띠의 큰 상호작용으로 점점 가까워진다. 하지만, LH 띠는 HH 띠와의 상호작용에 의해 다시 크게 분리되는 현상이 나타난다. $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}/\text{Ge}(001)$ 구조에서는 HH 띠의 가로 방향에서 유사한 현상이 나타난다. 이는 원자가띠의 비포물형 성질을 더욱 심하게 만들어 $\text{Ge}/\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}(001)$ 구조의 LH 띠에서 m_L^* 은 ~ 110 meV 이상에서 m_T^* 보다 큰 값을 가지며 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}/\text{Ge}(001)$ 구조의 HH 띠에서 m_T^* 는 ~ 80 meV에서 m_L^* 과 거의 같은 값을 가지는 원인이 된다. 한편, $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}/\text{Ge}(001)$ 구조에서 HH 띠는 세로방향에서 전도띠보다 LH 띠와의 상호작용이 크다. 이는 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}/\text{Ge}(001)$ 구조에서 HH 띠의 m_L^* 이 ~ 15 meV와 ~ 95 meV의 두 곳에서 극값이 나타나는 원인이 된다. $\text{Ge}/\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}(001)$ 구조에서 LH 띠는 가로 방향에서 전도띠보다 HH 띠와 상호

표 4. 300 K에서 전자와 정공의 운반자 농도가 $10^{16}/\text{cm}^3$ 으로 가정했을 때, 완화된 Ge, 완화된 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$, $\text{Ge}/\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}(001)$, 그리고 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}/\text{Ge}(001)$ 에서 페르미 에너지 준위에 위치한 전자와 정공의 틀맞춤한 $1/m_c^* m_d^{*1.5}$.

Table 4. Normalized $1/m_c^* m_d^{*1.5}$ of hole and electron in relaxed Ge, relaxed $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$, $\text{Ge}/\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}(001)$, and $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}/\text{Ge}(001)$ at Fermi energy level when it is approximated that each electron and hole concentrations is $10^{16}/\text{cm}^3$ at 300 K.

material		relaxed Ge	relaxed $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$	$\text{Ge}/\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}(001)$	$\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}/\text{Ge}(001)$
$1/m_c^* m_d^{*1.5}$					
electron	$\frac{1}{m_T^* m_{de}^{*1.5}}$	1.00	2.03	1.64	1.62
	$\frac{1}{m_L^* m_{de}^{*1.5}}$			2.41	1.12
hole	$\frac{1}{m_T^* m_{dh}^{*1.5}}$	1.00	1.38	3.84	2.99
	$\frac{1}{m_L^* m_{dh}^{*1.5}}$			11.61	2.84

작용이 크지만 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}/\text{Ge}(001)$ 구조에 비해 HH와 LH 띠 사이의 띠 분리가 크다. 이는 $\text{Ge}/\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}(001)$ 구조에서 LH 띠의 m_T^* 의 두 극값이 ~ 33 meV와 ~ 385 meV로 넓게 나타나는 원인이 되며 그림에는 한 곳만 보여준다.

표 4에서는 계산한 m_c^* 와 m_d^* 를 이용하여 Ge의 전자와 정공의 $1/m_c^* m_d^{*1.5}$ 를 틀맞춤하여 각 물질에서 $1/m_c^* m_d^{*1.5}$ 의 크기를 비교하였다. 띠가 등방성이고 포물형 성질을 갖는다면 이동도는 $1/m_c^* m_d^{*1.5}$ 에 비례한다. 하지만, 띠는 비등방성과 비포물형 성질을 가지므로 $1/m_c^* m_d^{*1.5}$ 는 에너지의 함수가 된다. 이 경우, 물질의 전기적 특성은 페르미 에너지 준위 근처에 있는 운반자에 의해 결정된다. 따라서, 표 4는 페르미 에너지 준위에서의 $1/m_c^* m_d^{*1.5}$ 로서 각 물질의 이동도 특성을 보여준다. 단순비교를 하기 위하여 온도는 300 K이며 전자와 정공의 운반자 농도는 각각 $10^{16}/\text{cm}^3$ 이라고 가정하였다.

전자의 $1/m_c^* m_d^{*1.5}$ 을 비교하면, 완화된 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$ 와 $\text{Ge}/\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}(001)$ 구조에서 높은 증가율을 보인다. 그 주요 증가 원인은 E_g 의 감소 때문이다. 한편, 정공의 $1/m_c^* m_d^{*1.5}$ 을 비교하면, $\text{Ge}/\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}(001)$ 와 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}/\text{Ge}(001)$ 에서 크게 증

가한다. 이는 응력변형에 의해 HH와 LH 띠가 분리되면서 띠사이 산란이 크게 줄어들었기 때문이다. 특히, 세로 방향의 $\text{Ge}/\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}(001)$ 에서는 10배 이상의 증가량을 보인다. 즉, $\text{Ge}/\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}(001)$ 구조에서의 전자와 정공의 $1/m_c^* m_d^{*1.5}$ 는 완화된 Ge의 그것에 비해 모두 크게 증가한다는 사실을 알 수 있다. 따라서, GeSn을 이용한 CMOS 소자를 만든다면, 전자와 정공의 전기적 특성이 크게 향상되는 $\text{Ge}/\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}(001)$ 구조가 가장 적합할 것으로 사료된다. 또한, $\text{Ge}/\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}(001)$ 구조는 직접천이 에너지 간격을 가지므로 광전자 소자(optoelectronic device)에 응용할 수 있다.

4. 결론

8×8 $k \cdot p$ 및 응력변형 해밀토니안을 이용하여 계산된 완화된 $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$, $\text{Ge}/\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}(001)$, $\text{Ge}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}/\text{Ge}(001)$ 구조의 에너지 구조와 일정 에너지 표면으로부터 전자와 정공의 m_d^* 와 m_c^* 를 계산하였다. 계산된 전자와 정공의 m_d^* 와 m_c^* 값은 실험식에 유용하게 쓰일 뿐만 아니라 재료의 전기적 및 광학적 특성을 가름하는데 도움이 된다. 특히, 본 논문에서는 계산된 m_d^* 와 m_c^* 로부터 각 구조의

전기적 특성을 완화된 Ge에서 전자와 정공의 $1/m_c^* m_d^{*1.5}$ 크기를 통하여 비교 분석하였다.

완화된 $Ge_{0.8}Sn_{0.2}$ 의 경우, 작은 E_g 으로 인해 전자의 m_d^* 와 m_c^* 는 크게 줄어들지만 정공의 m_d^* 와 m_c^* 는 크게 줄어들지는 않는다. 또한, HH와 LH 띠가 붙어있으므로 각 띠내 산란 뿐만 아니라 띠사이 산란도 매우 크다. 따라서, 완화된 $Ge_{0.8}Sn_{0.2}$ 에서 정공의 이동도는 완화된 Ge에서 그것보다 그리 크지 않을 것이다.

반면, $Ge/Ge_{0.8}Sn_{0.2}(001)$ 과 $Ge_{0.8}Sn_{0.2}/Ge(001)$ 구조에서는 작은 E_g 으로 인해 전자의 m_d^* 와 m_c^* 가 작을 뿐만 아니라 HH와 LH 띠 사이의 띠분리에 의해 정공의 m_d^* 와 m_c^* 가 모두 작다. 따라서, $Ge/Ge_{0.8}Sn_{0.2}(001)$ 과 $Ge_{0.8}Sn_{0.2}/Ge(001)$ 구조에서는 전자 뿐만 아니라 정공의 이동도도 완화된 Ge의 이동도에 비해 크게 증가될 것이다. 특히, $Ge/Ge_{0.8}Sn_{0.2}(001)$ 구조는 $Ge_{0.8}Sn_{0.2}/Ge(001)$ 구조에 비해 전자와 정공의 가로 방향과 세로방향에서 모두 큰 이동도가 예상된다. 초고속 CMOS 소자 제작에 낮은 정공의 이동도가 가장 큰 제약이 되는 것을 감안하면, $Ge/Ge_{0.8}Sn_{0.2}(001)$ 구조는 초고속 CMOS 소자 제작에 가장 적합할 것으로 사료된다. 또한, $Ge/Ge_{0.8}Sn_{0.2}(001)$ 과 $Ge_{0.8}Sn_{0.2}/Ge(001)$ 구조는 직접접이 에너지 간격을 가지므로 광전자 소자에도 응용할 수 있다.

감사의 글

본 결과는 정보통신부 정보통신 우수시범학교(대학원) 지원사업에 의하여 1999년 인하대학교 교내 연구비 지원으로 수행하였습니다.

참고문헌

[1] S. K. Chun and K. L. Wang, "Effective mass and mobility of holes in strained $Si_{1-x}Ge_x$ layers on (001) $Si_{1-y}Ge_y$ substrate", IEEE T-ED, Vol. 39, No. 9, pp. 2153-2164, 1992.
 [2] 박일수, 전상국, " $Ge_{1-y}Sn_y$ 위에 성장시킨 $Ge_{1-x}Sn_x$ 또는 Ge 층에서 성장방향과 응력변형 조건에 따른 다이렉트 에너지 간격 특성 연구", 한국전기전자재료학회지, Vol. 12, No. 10, pp.

835-842, 1999.
 [3] 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.
 [4] 박일수, 전상국, "팽창 응력변형을 겪는 Ge에서 가전자대의 에너지구조 해석", 한국전기전자재료학회지, Vol. 12, No. 12, pp. 1102-1110, 1999.
 [5] 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.
 [6] Fred H. Pollak and M. Cardona, "Piezo-Electroreflectance in Ge, GaAs, and Si", Phys. Rev., Vol. 172, No. 3, pp. 816-837, 1968.
 [7] 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.
 [8] 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.
 [9] 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.
 [10] William Paul, "Band Structure of the Intermetallic Semiconductors from Pressure Experiments", J. Appl. Phys. Supp., Vol. 32, No. 10, pp. 2082-2094, 1961.
 [11] I. Balslev, "Indirect Absorption in Ge Under Combined 'Static and Oscillatory Stress'", Physics Letters, Vol. 24A, No. 2, pp. 113-114, 1967.
 [12] P. Lawaetz, "Valence-Band Parameters in Cubic Semiconductors", Phys. Rev. B, Vol. 4, No. 10, pp. 3460-3467, 1971.
 [13] J. A. Van Vechten, "Quantum Dielectric Theory of Electronegativity in Covalent Systems. I. Electronic Dielectric Constant", Phys. Rev. Vol. 182, No. 3, pp. 891-905, 1969.