

Ga_xIn_{1-x}Sb_yAs_{1-y}의 전자적 구조: UTB 방법에 의한 밴드정렬상태

심규리*

경기대학교 이과대학 전자물리학과, 수원 440-760

(2011년 9월 17일 받음, 2011년 11월 21일 확정)

사원화합물 반도체 Ga_xIn_{1-x}Sb_yAs_{1-y}을 구성하는 네 가지 이원화합물 반도체 GaAs, GaSb, InAs, InSb의 최고 가전자띠 준위와 최저 전도띠 준위를 밀접결합방법에 근거한 해석적 근사법으로 계산하였다. 이들을 이중 접합시켰을 때 경계면에서의 밴드정렬상태를 구한 결과, GaAs/InAs와 GaAs/InSb, GaSb/InSb는 제 I형, GaAs/GaSb는 제 II형, GaSb/InAs, InSb/InAs는 제 III형의 밴드 정렬 형태를 갖는다는 것을 알 수 있었다. 또한 범용적 밀접결합을 이용하여 사원화합물 반도체 Ga_xIn_{1-x}Sb_yAs_{1-y}의 성분비 x와 y에 따른 최고 가전자 띠와 최저 전도 띠 준위변화를 구하였다. Ga_xIn_{1-x}Sb_yAs_{1-y}을 GaSb와 InAs 격자 정합시켜 경계면에서의 밴드정렬상태를 구해 본 결과 성분비에 따라 제 II형과 제 III형 사이의 밴드정렬형태의 전이가 일어남을 알 수 있었다. Ga_xIn_{1-x}Sb_yAs_{1-y}를 GaSb에 격자 정합시켰을 때 x ≥ 0.15에서 제 III형 밴드정렬이었던 것이 x ≥ 0.81에서는 제 II형의 밴드정렬 상태로 전이되며, 이와 반대로 Ga_xIn_{1-x}Sb_yAs_{1-y}를 InAs에 격자정합시켰을 때 x ≥ 0.15에서 제 II형 밴드정렬이 x ≥ 0.81에서 제 III형 밴드정렬로 전이됨을 알 수 있었다.

주제어 : GaInAsSb, 밴드정렬, 최고 가전자띠 준위, 최저 전도띠 준위, 범용적 밀접결합

I. 서 론

III-V 이원화합물을 혼합시켜 만든 다원화합물 반도체는 혼합성분이나 성분비에 따라 밴드갭, 격자상수, 경계면에서의 밴드정렬 상태 등 전자적 특성을 인위적으로 조절할 수 있는 유용한 물질로 알려져 왔다. 삼원화합물 반도체는 한 가지의 성분비에 의해 전자적 특성이 조절되지만, 사원 및 오원화합물 반도체는 두가지 이상의 성분비를 각각 독립적으로 조절할 수 있어, 좀 더 안정적이고 다양한 스펙트럼 영역의 반도체를 만들 수 있다. 그러나 혼합농도에 따른 무질서 효과와 혼화성 갭(miscibility gap) 등의 문제로 결정 성장이 어려웠었는데, 최근 에피택시 비평형 결정성장기술의 발달로 LPE (liquid phase epitaxy)나 MOVPE (metal organic vapour phase epitaxy) 방법 등에 의해 순도 높은 III-V 다원화합물 반도체를 성장시킬 수 있게 되어 이에 대한 연구가 활발히 이루어지고 있다 [1,2].

두 종류의 III-V 화합물 반도체 A와 B를 붙여 만든 이중접합 반도체(heterojunction semiconductor) A/B는 경계면에서 두 반도체의 최고 가전자띠(valance band maximum, VBM)

와 최저 전도띠(conduction band minimum, CBM) 준위 간의 상대적 위치에 따라 밴드정렬(band alignment) 상태가 결정된다. 이와 같이 반도체 이중접합 경계면에서의 밴드정렬의 상태는 전자나 광자를 가두는(confinement) 능력을 갖게 되어 초 고속능 소자, 고출력 레이저의 활성층 등, 전자적 및 광학적 고안함에 광범위하게 응용되고 있다.

최근 파장대가 2-5 μm (0.62-0.25 eV)인 중적외선(mid-infrared, MIR) 영역의 반도체 레이저 다이오드 개발이 많은 관심을 얻고 있는데, 이는 적외선 탐지기나 공기 오염 센서 등 군사용이나 의료용, 무선 광통신 등 다양하게 이용될 수 있기 때문이다 [3]. 사원화합물 반도체 Ga_xIn_{1-x}Sb_yAs_{1-y}는 MIR 영역 고안함에 널리 쓰이는 물질로서 연구가치가 매우 높으나 [3-6], 넓은 영역에 걸친 혼화성 갭(miscibility gap)에 의한 결정성장의 어려움 때문에 이론적 연구나 실험적 연구가 제한되어 왔다.

본 연구에서는 사원화합물 반도체 Ga_xIn_{1-x}Sb_yAs_{1-y}을 구성하는 네가지 이원화합물 반도체 GaAs, GaSb, InAs와 InSb의 최고 가전자띠(valance band maximum, VBM) 준위와 최저 전도띠(conduction band minimum, CBM) 준위

* [전자우편] kshim@kyonggi.ac.kr

를 밀접결합(tight binding, TB) 방법을 이용한 해석적 근사법 [7]으로 계산하고, 이들을 이중 접합시켰을 때 경계면에서의 밴드정렬상태를 구한다. 여기서 경계 국소면에서 생길 수 있는 결합길이 이완이나 결합교환에 의한 포텐셜 변형은 성장 조건에 따라 다를 수 있기 때문에 무시한다 [7]. 또한 사원화합물 반도체 $Ga_xIn_{1-x}Sb_yAs_{1-y}$ 의 성분비 x 와 y 에 따른 VBM (혹은 CBM) 변화를 범용적 밀접결합(universal tight binding, UTB)을 [8] 이용하여 구하며, 이들과 GaSb와 InAs의 접합면에서의 밴드정렬을 구한다. 성분비에 따라 밴드정렬 타입이 어떻게 변환되는지 알아본다.

II. 이 론

면심 입방 결정구조를 갖는 III-V 아연화합물반도체는 한 개의 격자(혹은, 단위세포)에 양이온(cation)과 음이온(anion) 두 개의 원자로 이루어져 있다. 밀접결합(tight binding, TB) 방법에서 양이온과 음이온은 sp^3 하이브리드 상태로 결합을 이루며, 이들의 양자상태함수 $|c\rangle$ 와 $|a\rangle$ 는 한 개의 s 와 세 개의 p 원자궤도함수들의 선형결합으로 나타내 진다. TB에서 Bloch 정리를 만족시키는 결정의 양자 고유상태함수 $|\Psi(j, k)\rangle$ 는 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$|\Psi(j, k)\rangle = N^{-1/2} \sum e^{ik \cdot (R_i+r_j)} |a_j R_i\rangle = u_a|a\rangle + u_c|c\rangle \quad (1)$$

여기서, N 과 R_i 은 격자 수와 위치를 나타내며, a 는 원자궤도 함수(s, p_x, p_y, p_z), r_j 는 양이온 혹은 음이온의 위치를 나타낸다. 결정의 에너지고유함수를 구하기 위한 연산자 해밀토니안 \hat{H} 을 양이온과 음이온의 부분행렬식(submatrix)으로 다음과 같이 나타내지며,

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

여기서 대각선 행렬인자 $\hat{H}_{cc} = \langle c|\hat{H}|c\rangle$ 와 $\hat{H}_{aa} = \langle a|\hat{H}|a\rangle$ 는 양이온과 음이온의 자체 내의 에너지(intrasite energy)를 나타내고 비대각선 행렬인자 $\hat{H}_{ca} = \langle c|\hat{H}|a\rangle$ 와 $\hat{H}_{ac} = \langle a|\hat{H}|c\rangle$ 는 양이온과 음이온의 상호간의 에너지(intertomic energy)를 나타낸다. Eq. (2)에서 Hamiltonian의 에

너지고유치 E 는

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

가 된다. 여기서 “-”는 결합상태(bonding state)로 가전자띠에 해당하는 에너지 값이며, “+”는 반결합상태(anti-bonding state)로 전도띠에 해당하는 에너지 값이 된다.

TB 방법에서 III-V 아연화합물 구조의 에너지띠를 분석한 결과, 최고 가전자띠(VBM) 준위는 “p” 원자궤도 상호작용에 의해 그리고 최저 전도띠(CBM) 준위는 “s” 원자궤도의 상호작용에 의해 유도되는 값을 알려져 있다. 그러므로 Eq. (3)에서 VBM과 CBM은 다음과 같이 표현될 수 있다.

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

$$CBM = \frac{\hat{H}_{cc}^s + \hat{H}_{aa}^s}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\hat{H}_{cc}^s - \hat{H}_{aa}^s}{2}\right)^2 + \hat{H}_{ca}^s \hat{H}_{ac}^s} \quad (4)$$

여기서, 대각선행렬인자는 양이온과 음이온의 p (혹은 s) 원자궤도 에너지 $\epsilon_{p(s)}^c$ 와 $\epsilon_{p(s)}^a$ 에 비례하며 ($\hat{H}_{cc}^p = \langle \Psi_c^{(s)} | \hat{H} | \Psi_c^{(s)} \rangle \propto \epsilon_{p(s)}^c$ 와 $\hat{H}_{aa}^p = \langle \Psi_a^{(s)} | \hat{H} | \Psi_a^{(s)} \rangle \propto \epsilon_{p(s)}^a$) 비대각선 행렬인자 $\hat{H}_{ca}^p = \langle \Psi_c^{(s)} | \hat{H} | \Psi_a^{(s)} \rangle$ 와 $\hat{H}_{ac}^p = \langle \Psi_a^{(s)} | \hat{H} | \Psi_c^{(s)} \rangle$ 는 이웃한 양이온과 음이온 사이의 p-p 혹은 s-s 상호작용에 의한 에너지로서 V_{pp} 와 V_{ss} 로 나타낸다. 결국 Eq. (4)의 VBM과 CBM은 원자궤도 에너지들과 이웃원자들의 p-p 혹은 s-s 상호작용에너지로 해석적 근사식으로 다음과 같이 표현할 수 있다 [7].

$$VBM \propto \frac{(\epsilon_p^c + \epsilon_p^a)}{2} - \sqrt{\left(\frac{\epsilon_p^c - \epsilon_p^a}{2}\right)^2 + V_{pp}^2}$$

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

TB 방법에서 해밀토니안의 원자궤도 함수에 대한 적분은 TB 매개변수(TB parameters)로 두게 된다. 직접 갭을 갖는 물질은 Brillouine 영역의 중심점인 Γ 점에서 VBM와 CBM이 모두 존재하게 되어 Γ 점에서의 $V_{pp}(\Gamma) = 4 \langle p_x | \hat{H} | p_x \rangle = V_{xx}$, $V_{ss}(\Gamma) = 4 \langle s | \hat{H} | s \rangle = V_{ss}$ 로 물질의 첫 번째 가까운 TB 매개변수를 대입해서 구할 수 있다. 그러나 간접 갭 물질에 대해서는 Γ 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 된다 [9]. 본 논문에서 다루고 있는 이원화합물 반도체 GaSb, InSb, GaAs, InAs는 모두 직접 갭에 해당하므로 Eq. (5)에서 V_{pp} 를 단순히 TB 매개변수 V_{xx} 로 둘 수 있다.

절대에너지 스케일에서 물질의 에너지 갭은 최고 가전자 띠(VBM) 준위와 최저 전도띠(CBM) 준위의 차로 정의된다. 그러나 Eq. (5)의 VBM과 CBM은 모두 해석적 근사식이므로, Eq. (5)의 VBM과 CBM을 동시에 절대 에너지 스케일에 둘 수 없다. 본 논문에서는 VBM과 CBM 중 하나를 절대에너지 스케일에 위치하게 하고 다른 하나는 $E_g = E_{CBM} - E_{VBM}$ 의 조건을 만족시키는 상대적인 값으로 결정한다. TB 방법에서 가전자 띠가 전도 띠보다 좀 더 신뢰도가 있는 것으로 알려져 있으므로 [10], Eq. (5)의 VBM 값을 택하여 절대에너지 스케일에 위치하게 하고 이를 E_{VBM} 이라 한다. (ii) 물질의 에너지 갭을 이용하여 $E_{CBM} = E_g + E_{VBM}$ 의 조건을 만족시키게끔 상대적 CBM값 E_{CBM} 를 구한다. 즉,

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

$$E_{CBM} = E_g + E_{VBM} \tag{6}$$

을 통해 구한다.

III. 계산 결과 및 분석

GaAs, GaSb, InAs, InSb의 E_{VBM} 과 E_{CBM} 을 구하기 위해, 본 논문에서 사용한 양이온과 음이온의 s와 p 원자 궤도 에너지는 Harrison 값 [11]을 이용하였으며, 물질의 TB 매개변수 V_{xx} 와 에너지 갭은 sp^3s^* TB 방법 [9]에 의한 값

을 상온에 기준하여 보정한 값을 이용하였다(Table 1).

(6)식을 이용하여 각물질의 E_{VBM} 과 E_{CBM} 을 구한 결과가 Table 2와 Fig. 1에 나타나있다. 그림에서 보는 바와 같이 물질들의 상대적 VBM과 CBM 위치가 다르기 때문에, 어떤

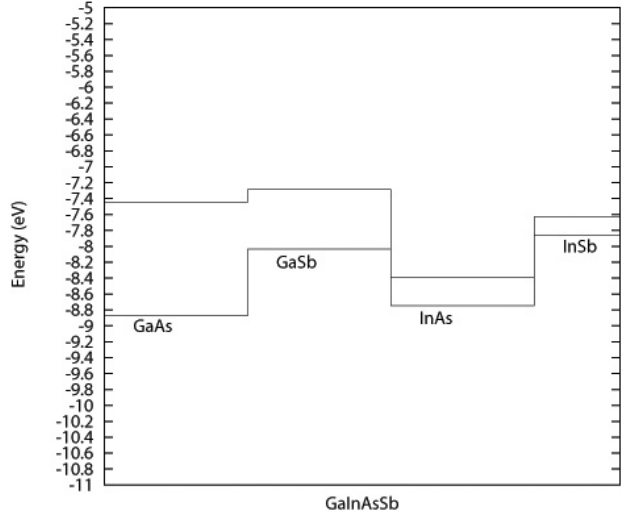


Figure 1. Band alignments of GaAs, GaSb, InAs and InSb. Below and above lines correspond to the VBM and CBM, respectively.

Table 1. The s and p atomic orbital energies of the cation and anion atom are taken from Ref. 11 and the TB parameters V_{xx} and band gap E_g are determined from the band calculation with sp^3s^* n,n. TB method based on Ref. 9.

III-V	ϵ_s^c (eV)	ϵ_p^c (eV)	ϵ_s^a (eV)	ϵ_p^a (eV)	V_{xx}	E_g (eV)
GaAs	-11.37	-4.90	-17.33	-7.91	-6.323	1.43
GaSb	-11.37	-4.90	-14.80	-7.24	-6.127	0.75
InAs	-10.12	-4.69	-17.33	-7.91	-5.516	0.35
InSb	-10.12	-4.69	-14.80	-7.24	-5.519	0.23

Table 2. Calculated VBM and CBM for semiconductors A and B and their band alignment types.

A / B	$E_{VBM}(A)$ (eV)	$E_{CBM}(A)$ (eV)	$E_{VBM}(B)$ (eV)	$E_{CBM}(B)$ (eV)	A/B 경계면에서의 밴드정렬형태
GaAs/GaSb	-8.872	-7.442	-8.035	-7.285	type - II
GaAs/InAs	-8.872	-7.442	-8.745	-8.395	type - I
GaAs/InSb	-8.872	-7.442	-7.860	-7.63	type - I
GaSb/InAs	-8.035	-7.285	-8.745	-8.395	type - III
GaSb/InSb	-8.035	-7.285	-7.860	-7.63	type - I
InAs/InSb	-8.745	-8.395	-7.860	-7.63	type - III

물질들을 접합했느냐에 따라 경계면에서의 밴드정렬상태가 달라진다.

두 종류의 서로 다른 반도체 A와 B를 붙여 만든 이종접합 반도체 경계면에서의 VBMe과 CBM의 상대적 위치에 따라 세가지 종류의 밴드정렬(band alignment) 형태를 갖게 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 A의 VBM과 CBM이 반도체 B의 VBM과 CBM에 맞물린 상태를 정의하며, 제 III형(type-III, 혹은 broken gap) 밴드정렬은 반도체 A의 VBM과 CBM이 반도체 B의 VBM과 CBM으로부터 완전히 벗어난 상태를 정의한다.

GaAs, GaSb, InAs와 InSb들 사이에 이종 접합했을 경우, Table 2에 나타낸 바와 같이 GaAs/InAs와 GaAs/InSb, GaSb/InSb는 type-I, GaAs/GaSb는 type-II [12], GaSb/InAs, InSb/InAs는 type-III의 밴드 정렬 형태를 갖는다 (Fig. 1, 2). 본 연구에서 구한 이론적 밴드 정렬 형태는 실험적 결과 [13]와 대체적으로(정성 및 정량적으로) 잘 맞았다.

이제, 위의 구성물질들을 혼합시킨 사원화합물 반도체 $Ga_xIn_{1-x}Sb_yAs_{1-y}$ 에 대해 성분비에 따른 VBM과 CBM 변화는 범용적 밀접결합(universal tight binding, UTB) 방법 [8]을 이용하여 구한다. UTB에 의한 E_{VBM} 과 E_{CBM} 은 다음과 같이 쓸 수 있으며,

$$\begin{aligned}
 & E_{VBM(CBM)}(Ga_xIn_{1-x}Sb_yAs_{1-y}) \\
 &= xy E_{VBM(CBM)}(GaSb) \\
 &+ x(1-y) E_{VBM(CBM)}(GaAs) \\
 &+ (1-x)y E_{VBM(CBM)}(InSb)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &+ (1-x)(1-y) E_{VBM(CBM)}(InAs) \\
 &+ x(1-y)y \Delta E_{VBM(CBM)}(GaSbAs) \\
 &+ xy(1-y) \Delta E_{VBM(CBM)}(InSbAs) \\
 &+ x(1-x)y \Delta E_{VBM(CBM)}(GaInAs) \\
 &+ x(1-x)(1-y) \Delta E_{VBM(CBM)}(GaInSb)
 \end{aligned} \tag{7}$$

여기서 $\Delta E_{VBM(CBM)}(GaSbAs) = \Delta E_{VBM(CBM)}(GaSb:As) + \Delta E_{VBM(CBM)}(GaAs:Sb)$ 등은 GaSb:As와 GaAs:Sb의 총 무질서 $\Delta E_{VBM(CBM)}$ 로서 $\Delta E_{VBM(CBM)}(GaSb:As) \simeq E_{VBM(CBM)}(GaAs) - E_{VBM(CBM)}(GaSb)$ 와 $\Delta E_{VBM(CBM)}(GaAs:Sb) \simeq E_{VBM(CBM)}(GaSb) - E_{VBM(CBM)}(GaAs)$ 의 합은 GaSb:As와 GaAs:Sb계의 상쇄 효과에 의해 무시할 수 있다. 다른 무질서 항에 대해서도 마찬가지이다. 그러므로 $Ga_xIn_{1-x}Sb_yAs_{1-y}$ 의 E_{VBM} 과 E_{CBM} 은

$$\begin{aligned}
 & E_{VBM}(Ga_xIn_{1-x}Sb_yAs_{1-y}) \\
 &= -0.127x + 0.885y - 0.048xy - 8.745 \\
 & E_{CBM}(Ga_xIn_{1-x}Sb_yAs_{1-y}) \\
 &= 0.953x + 0.765y - 0.608xy - 8.395
 \end{aligned} \tag{8}$$

로서 성분비에 따라 변하므로, 성분비와 어떤 기판(substrate)에 성장 시키느냐에 따라 경계면에서의 밴드형태가 달라질 수 있다.

$Ga_xIn_{1-x}Sb_yAs_{1-y}$ 를 GaSb와 InAs 격자 정합시켰을 때 2-4 μm MIR 파장대 영역의 검출기나 광원에 응용할 수 있다는 사실은 잘 알려진 바와 같다 [3-6]. 그러나 이들의 경계면에서의 밴드 타입은 정확히 알려진 바 없다. 우선 사원화합물 반도체 $Ga_xIn_{1-x}Sb_yAs_{1-y}$ 의 GaSb와 InAs의 격자 정합 성분비 조건은 이미 구한 바와 같다 [14].

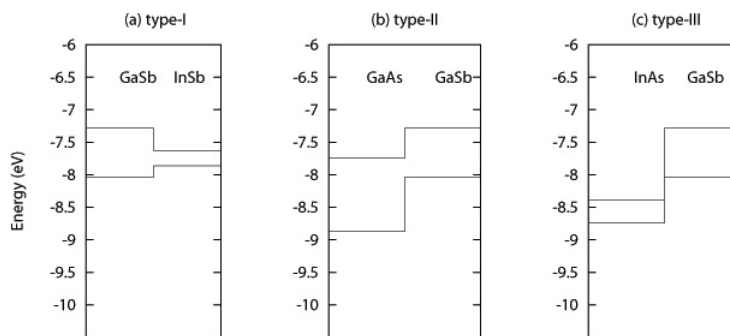


Figure 2. Three different band alignment types of heterojunctions. (a) GaSb/InSb for the type I, (b) GaAs/GaSb for the type II, and (c) InAs/GaSb for the type III.

Table 3. Composition dependent band alignments for the alloy GaInAsSb lattice matched to GaSb and InAs.

A	B	$E_{VBM}(I)$ (eV)	$E_{CBM}(I)$ (eV)	$E_{VBM}(II)$ (eV)	$E_{CBM}(II)$ (eV)	밴드형태(type)
GaSb	InSb _{0.087} As _{0.913}	-8.035	-7.285	-8.668	-8.328	III
GaSb	Ga _{0.15} In _{0.85} Sb _{0.224} As _{0.776}	-8.035	-7.285	-8.567	-8.101	III
GaSb	Ga _{0.81} In _{0.19} Sb _{0.827} As _{0.173}	-8.035	-7.285	-8.148	-7.398	II
GaSb	GaSb	-8.035	-7.285	-8.035	-7.285	-
InAs	InAs	-8.745	-8.395	-8.745	-8.396	-
InAs	Ga _{0.15} In _{0.85} Sb _{0.137} As _{0.863}	-8.745	-8.395	-8.643	-8.160	II
InAs	Ga _{0.81} In _{0.19} Sb _{0.740} As _{0.260}	-8.745	-8.395	-8.222	-7.421	III
InAs	GaSb _{0.913} As _{0.087}	-8.745	-8.395	-8.108	-7.299	III

$$1 - y = 0.913(1 - x) \rightarrow y = 0.913x + 0.087$$

lattice matched to GaSb

$$1 - y = -0.913x + 1 \rightarrow y = 0.913x$$

lattice matched to InAs

(9)

의 혼화성 값은 $0.15 \leq x \leq 0.81$ 에서 형성되는 것으로 알려져 있다 [15]. 즉 $0 \leq x \leq 0.15$ 와 $0.81 \leq x \leq 1$ 에서 결정 생장이 가능하므로 $x = 0, 0.15, 0.81, 1$ 의 격자 정합 조건 y 에 대한 VBM과 CBM을 Eq. (8)에 의해 구해 보고, 경계면에서의 밴드 정렬 형태를 Table 3에 나타내 보였다.

Table 3에서 보는 바와 같이 Ga_xIn_{1-x}Sb_yAs_{1-y}를 GaSb에 격자 정합 시켰을 때 $x \leq 0.15$ 에서 제 III형 밴드 정렬이었던 것이 $x \geq 0.81$ 에서는 제 II형의 밴드정렬 상태로 전이됨을 알 수 있었다. 한편 Ga_xIn_{1-x}Sb_yAs_{1-y}를 InAs에 격자정합 시켰을 때 경계면에서의 밴드정렬상태는 $x \leq 0.15$ 에서 제 II형이 $x \geq 0.81$ 에서 제 III형으로 밴드 정렬 상태 전이됨을 알 수 있었다.

IV. 결 론

GaAs, GaSb, InAs, InSb의 VBM과 CBM 준위를 TB의 해석적 근사법에 의해 계산해 보았다. 이들의 상대적 VBM과 CBM 준위에 따라 이종 접합면에서의 밴드정렬 상태 결정하는데, GaAs/InAs와 GaAs/InSb와 GaSb/InSb는 제 I형 밴드정렬, GaAs/GaSb는 제 II형 밴드정렬, GaSb/InAs와 InSb/InAs는 제 III형 밴드 정렬 상태를 갖게 됨을 알아내었다. 또한 UTB 방법에 의해 사원화합물 반도체 Ga_xIn_{1-x}Sb_yAs_{1-y}

의 성분비 x 와 y 에 따른 최고 가전자 띠와 최저 전도 띠 준위변화를 구하였다. Ga_xIn_{1-x}Sb_yAs_{1-y}을 GaSb와 InAs 격자 정합시켜 경계면에서의 밴드정렬상태를 구해 본 결과 성분비에 따라 제 II형과 제 III형 사이의 밴드정렬형태의 전이가 일어남을 알 수 있었다. Ga_xIn_{1-x}Sb_yAs_{1-y}를 GaSb에 격자 정합 시켰을 때 $x \leq 0.15$ 에서 제 III형 밴드정렬이었던 것이 $x \geq 0.81$ 에서는 제 II형의 밴드정렬 상태로 전이되며, 이와 반대로 Ga_xIn_{1-x}Sb_yAs_{1-y}를 InAs에 격자정합 시켰을 때 $x \leq 0.15$ 에서 제 II형 밴드정렬이 $x \geq 0.81$ 에서 제 III형 밴드정렬로 전이됨을 알 수 있었다.

감사의 글

본 연구는 2010년도 경기대학교 연구년 지원에 의해 수행되었다.

참고문헌

- [1] M. M. Panish and H. Temkin, *Gas Source Molecular Beam Epitaxy*, Springer Series in Material Science (Springer, Berlin, 1993), Vol. 26.
- [2] M. Astles, H. Hill, A. J. Williams, P. J. Wright, and M. L. Young, *J. Electron. Mater.* **24**, 41 (1986).
- [3] D. V. Donetsky, R. U. Martinelli, and G. L. Belenky, *International Journal of High Speed Electronics and Systems* **12**, 1025 (2002).
- [4] T. Lehnhardt, M. Hummer, K. Robner, M. Muller,

- S. Hofling, and A. Forchel. *J. Appl. Phys.* **102**, 113710 (2007).
- [5] T. Lehnhardt, M. Hummer, K. Robner, M. Muller, S. Hofling, and A. Forched, *Appl. Phys. Lett.* **92**, 183508 (2008).
- [6] E. Tournie, J. L. Lazzari, F. Pitard, C. Alibert, A. Joullie, and B. Lambert, *J. Appl. Phys.* **68**, 5936 (1990).
- [7] K. Shim and H. Rabitz, *Appl. Phys. Lett.* **80**, 4543 (2002).
- [8] K. Shim and H. Rabitz, *Phys. Rev. B* **57**, 12874 (1998) and *J. Appl. Phys.* **85**, 7705 (1999).
- [9] P. Vogl, H. P. Hjalmarson, and J. D. Dow, *J. Phys. Chem. Solidi* **44**, 365 (1983).
- [10] D. J. Chadi, *Phys. Rev. B* **19**, 790 (1977).
- [11] W. A. Harrison, *Electronic Structure and the Properties of Solids* (Dover Publications, New York, 1989), pp.50-51
- [12] S. K. Noh, J. O. Kim, and S. J. Lee, *J. Korean Vacuum Soc.* **20**, 135 (2011).
- [13] I. Vurgaftman, J. R. Meyer, and L. R. Ram-Mohan, *J. Appl. Phys.* **89**, 5815 (2001).
- [14] K. Shim, H. Rabitz, and P. Dutta, *J. Appl. Phys.* **88**, 7157 (2000).
- [15] E. K. Muller and J. L. Richards, *J. Appl. Phys.* **35**, 1233 (1964).

Electronic Structure of $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}_y\text{As}_{1-y}$: Band Alignments Based on UTB Calculations

Kyurhee Shim*

Department of Physics, Kyonggi University, Suwon 440-760

(Received September 17, 2011, Accepted November 21, 2011)

The valence band maximum and the conduction band minimum of GaAs, GaSb, InAs, and InSb (constituent binaries of the quaternary alloy $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}_y\text{As}_{1-y}$) are calculated by using TB analytical approach method. The band alignment types of their heterojunctions are determined directly from their relative position of band edges (VBM and CBM). For example, the GaAs/InAs, GaAs/InSb, and GaSb/InSb are in a type-I, the GaAs/GaSb in a type-II, and the GaSb/InAs and InSb/InAs in a type-III, respectively. The composition dependent VBM and CBM for the $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}_y\text{As}_{1-y}$ alloy are obtained by using the universal tight binding method. For the alloyed heterojunctions, the band alignments can be controlled by changing the composition which induce a band type transition. For the alloy $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}_y\text{As}_{1-y}$ lattice matched to GaSb, the type-II band alignment in the region of $x \leq 0.15$ is changed to the type-III in the region of $x \geq 0.81$. On the other hand, the alloy $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{Sb}_y\text{As}_{1-y}$ lattice matched to InAs has the type-II band alignment in the region of $x \leq 0.15$ and the type-III band alignment in the region of $x \geq 0.81$, respectively.

Keywords : GaInAsSb, Band alignment, Valence band maximum, Conduction band minimum, Universal tight binding

* [E-mail] kshim@kyonggi.ac.kr