Journal of the Korean Institute of Electrical and Electronic Material Engineers. Vol. 12, No. 11, pp. 994-998, 1999.

혼합물에서 non-polar optical phonon에 의한 변형 포텐셜

논 문
12-11-2

Study of the deformation potential due to the non-polar optical phonon in the alloy materials

나두현*, 전상국*
(Du Hyun Na*, Sang Kook Chun*)

Abstract

The deformation potential due to the non-polar optical phonon, E_{NOP}, is formulated by using a linear spring model. In order to account for the alloy composition and mass ratio, the deformation potentials due to the acoustic and non-polar optical phonons are compared. The E_{NOP}, expressed as functions of the alloy composition and mass ratio, for alloy and compound semiconductors is expected to be useful in the short-wavelength region as well as in the long-wavelength region.

Key Words(중요용어) : 화합물 반도체(Compound Semiconductor), 혼합물 반도체(Alloy Semiconductor), 변형 포텐셜(Deformation Potential), 응력 변형(Strain)

1. 서 론

화합물과 혼합물 반도체는 에너지 갭 (E_g)과 밴드 구조에 변화를 주어 다양한 전기적 및 광학적 성질을 얻을 수 있는 장점을 가지고 있어 여러 소자에 응용할 수 있다. 이러한 화합물과 혼합물 반도체를 소자에 이용하기 위해서는 전기적 및 광학적 성질을 이해할 필요가 있다. 따라서, 반도체 내에서 여러 가지 산란현상에 대한 이해는 필수적이다. 대표적인 산란현상으로는 acoustic 및 optical 포논 산란, ionized 및 neutral impurity 산란, 그리고 alloy 산란 등이 있다. 화합물이나 혼합물 반도체에서 대부분의 산란현상은 이론적으로 잘 알려져 있지만, optical 포논 산란 중에 non-polar optical 산란에서 물질의 질량과 혼합비율의 함수형태는 완전히 검증되지 못하였다.

Non-polar optical 포논 산란은 단위 격자구조에 2개 이상의 원자가 있을 경우에 발생한다. 이 경우, 변형 퍼텐셜은 단위 격자 안의 원자들의 상대적인 변위에 비례하게 된다. Ⅳ족 물질인 Si와 Ge 같은 다이아몬드 구조를 가지는 경우 한 단위 격자 구조 안에 두 개의 원자를 가지므로 non-polar optical 포논 산란은 매우 중요시된다. 혼합물과 화합물에서의 non-polar optical 포논 산란에 대해 Wiley[1]는 Si와 Ge에 적용되어진 산란을 적용하되 혼합되어진 물질의 질량과 혼합비율의 함수가 부가된 식을 제시하였지만 명확한 근거는 제시하지 못하였다.

본 논문에서는 Wiley와 DiDomenico[2]의 실험결과를 토대로 혼합물과 화합물에 적용될 수 있는 non-polar optical 변형 포텐셜의 일반적인 형태를 근사해보고자 한다. 이를 위해 Bardeen과 Shockley[3]의 전자와 격자파동간의 상호작용에 대한 가정인 '산란과정은 등방성의 탄성운동으로 근사화할 수 있다' 라는 사실을 이용하여 선형 스프링 모델을 도입했으며, 원자의 진동에 의해 발생되어지는 에너지는 변형 포텐셜로서 대치할 수 있다는 증명사실을 이용하여 함수의 근사적인 형태를 이끌어 내었다. 본론에서는 선형 스프링 모델을 사용한 근거와 두 가지 스프링 모델을 소개했으며, 이를 이용한 acoustic 포논 변형 포텐셜 에너지 E_{AC}와 non-polar optical 포논 변형 포텐셜 에너지 E_{NOP}에 대한 식을 전개하여 서로 다른 두 물질의 질량과 혼합

* : 인하대학교 전자재료공학과
1999년 6월 30일 접수, 1999년 11월 1일 심사완료

비율의 함수를 이끌어 내었다.

2. 본 론

2. 1. 변형 포텐셜(E_{AC}, E_{NOP})

Acoustic 포논 산란에 의한 변형 포텐셜 E_{AC}는 아래와 같이 표현된다[1].

$$E_{AC}=(\bar{u}/u_l)\Xi_{eff} \tag{1}$$

u_l은 세로음속이며 $\bar{u}$은 평균음속이다. Ξ_{eff}는 acoustic 포논에 의한 유효 변형 포텐셜[4]로 외부 영향에 의한 가전도대의 에너지 구조 변화를 감안한 값이다. 대부분 반도체의 가전도대는 유사하기 때문에 혼합물 반도체의 음속과 유효 변형 포텐셜은 혼합물을 구성하고 있는 물질의 값들을 선형 보간법으로 얻어낼 수 있다.

Non-polar optical 포논에 의한 변형 포텐셜 E_{NOP}은 다이아몬드 구조와 같이 단위격자 안에 원자가 두 개 이상 있을 경우 정의된다. 단위 격자 내부에 동일한 원자가 두 개 있을 경우, Szmulowicz[5]는 가전도대 밴드만을 고려하여 optical 전이율을 계산한 후 단위 격자 안의 원자들의 상대적인 변위에 비례하는 값인 E_{NOP}를 아래와 같이 추정하였다.

$$E_{NOP}\approx\frac{\sqrt{3}\,d_o}{a_o} \tag{2}$$

a_o는 원자간 거리이고 d_o는 단위 격자안의 동일한 원자들에 상대적인 변위를 대변하는 값이다. 따라서, 서로 다른 원자들의 상대적인 변위를 고려해야 하는 혼합물 또는 화합물 반도체인 경우에 식 (2)를 바로 사용할 수 없다. 서로 다른 원자들의 상대적인 변위는 원자의 종류(혹은 혼합비율)와 질량에 대한 함수가 되므로 혼합물 또는 화합물 반도체에서 E_{NOP}는 아래와 같이 변형되어진다.

$$E_{NOP}=Q\frac{\sqrt{3}\,d_o}{a_o} \tag{3}$$

식 (2)에서 Q는 원자의 종류(혹은 혼합비율)와 질량에 대한 함수이다. 함수 Q의 형태는 Szmulowicz [5]의 연구결과에서처럼 optical 전이율을 계산하여 얻어낼 수 없다. 다만, GaAs와 같이 두 원자가 똑같은 비율로 혼합되었을 경우, Wiley[1]는 Q의 형태를 제안하였지만 명확한 근거는 제시되지 않았다.

앞서 밝혔듯이, 화합물이나 혼합물의 경우에 E_{NOP}를 얻어내기 위해서는 Q의 형태를 밝혀내야 한다. 이를 위해서 본 논문에서는 acoustic 및 optical 포논의 상호관계를 이용하고자 한다. Acoustic 및 optical 포논에 의한 산란작용은 전자와 격자파동 간의 상호작용으로서 등방성의 탄성운동으로 해석할 수 있다고 밝혀져 있다[6]. 이 경우, Bardeen과 Shockley[3]는 long-wavelength limit에서 acoustic 운동과 non-polar optical 운동에 대한 변형 포텐셜의 비가 아래와 같이 표현될 수 있음을 밝혔다.

$$E_{NOP}/E_{AC}=\omega_{NOP}/\omega_{AC} \tag{4}$$

ω_{AC}와 ω_{NOP}는 acoustic 운동과 non-polar optical 운동에 대한 원자의 진동 주파수이다. 전자와 격자파동 간의 상호작용이 등방성의 탄성운동으로 해석할 수 있을 때 유효한 선형 스프링 모델을 사용한다면 ω_{AC}와 ω_{NOP}의 비를 얻어낼 수 있다[7].

2. 2. 선형스프링 모델

GaAs는 Ga과 As 원자가 반복되는 형태를 갖고 있지만 혼합물은 혼합비에 따라 원자가 불규칙하게 섞여 있다. 우선, 혼합물의 혼합비를 고려하기 위해서 그림 1 (a)의 모형을 생각하였다. 그림 1 (a)는 질량 M_A를 갖는 원자 s 개와 질량 M_B를 갖는 원자 t 개로 구성된 격자구조가 반복되는 모형으로 혼합물의 혼합비를 반영할 수는 있지만 실제 물질에서와 같이 다양하게 섞여 있는 원자 분포를 고려하지는 못한다. 격자구조 안에 원자들의 배치를 불규칙하게 하기 위하여 두 원자를 서로 맞바꾼 모형이 그림 1 (b)이다. 이와 같은 과정을 반복할수록 실제의 경우에 접근하며, 이상적인 혼합물이라면 두 원자는 골고루 분포할 것이다.

그림 1 (a)의 경우, A와 B 원자의 변위를 각각 u_A와 u_B라 하고, 원자간의 스프링 상수를 β라고 할 때, 원자의 운동방정식은 아래와 같은 행렬형태로 표현된다.

$$\begin{aligned}&\{M_A\omega^2+\frac{2(s-1)}{s}\beta\cos qa_o-2\beta\}u_A+\frac{2\beta}{s}\cos qa_o u_B=0\\&\frac{2\beta}{t}\cos qa_o u_A+\{M_B\omega^2+\frac{2(t-1)}{t}\beta\cos qa_o-2\beta\}u_B=0\end{aligned} \tag{5}$$

한편, 두 원자의 위치를 n번 바꾸면 식 (5)는 아래와 같이 변형된다.

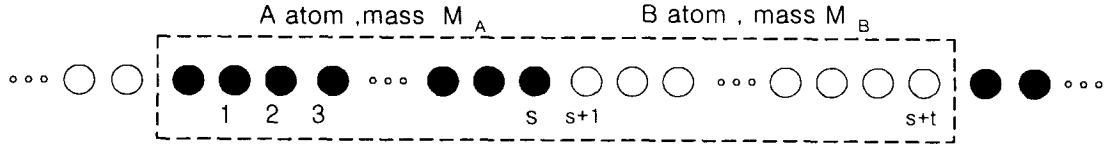

그림 1. (a) 질량 M_A을 가지는 원자 s개와 질량 M_B을 가지는 원자 t개가 연속된경우.
Fig. 1. (a) The model consisted of the two different atoms continusely, the number of s with mass M_A and the number of t with mass M_B.

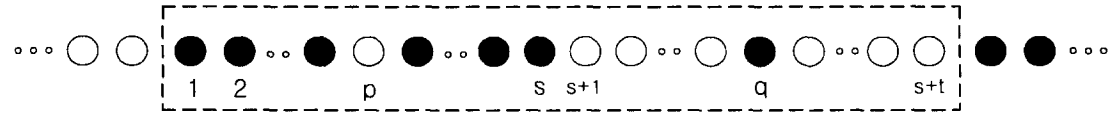

그림 1. (b) 원자의 위치가 서로 바뀐 스프링모델.
Fig. 1. (b) The model of the changing atomic position each other.

$$\left\{M_A\omega^2 - 2\beta + \frac{s-(1+2n)}{s}\,2\beta\cos qa_o\right\}u_A + \frac{1+2n}{s}\,2\beta\cos qa_o\,u_B = 0$$
$$\frac{1+2n}{t}\,2\beta\cos qa_o\,u_A + \left\{M_B\omega^2 - 2\beta + \frac{t-(1+2n)}{t}\,2\beta\cos qa_o\right\}u_B = 0 \qquad (6)$$

식 (6)에서, $u_A = u_B = 0$인 해 이외에 다른 해를 가지기 위해서는 2×2 행렬식이 '0'의 값을 가져야 하며 아래와 같은 식을 만족한다.

$$a\omega^4 - b\omega^2 + c = 0$$
$$a = M_A M_B$$
$$b = 2\beta/st[\,st\,(M_A+M_B)(1-\cos qa_o) + (2n+1)(M_As+M_Bt)\cos qa_o]$$
$$c = 4\beta^2/st[st(1-\cos qa_o)^2 + (2n+1)(s+t)\,(\cos qa_o - \cos^2 qa_o)] \qquad (7)$$

식 (7)의 계수들을 이용하여 acoustic 운동과 non-polar optical 운동에 대한 원자의 진동 주파수의 비를 구하면 아래와 같다.

$$\frac{E_{NOP}}{E_{AC}} = \frac{\omega_{NOP}}{\omega_{AC}} = \sqrt{\frac{b+\sqrt{b^2-4ac}}{b-\sqrt{b^2-4ac}}} \qquad (8)$$

식 (8)에서 원자의 질량과 혼합비율의 함수인 Q를 얻어내기는 쉽지않다. 하지만, acoustic 운동과 non-polar optical 운동에 대한 변형 포텐셜의 비가 acoustic 운동과 non-polar optical 운동에 대한 원자의 진동 주파수의 비로 표현될 수 있는 것은 long-wavelength limit($qa \langle\langle 1$)이기 때문에 식(7)의 계수 a, b, c는 아래와 같이 근사화 시킬 수 있다.

$$a = M_AM_B$$
$$b \approx 2\beta/st\,(2n+1)(M_As+M_Bt)$$
$$c \approx 2\beta^2/st\,(s+t)(qa_o)^2 \qquad (9)$$

또한, long-wavelength limit에서는 $b^2 \rangle\rangle$ 4ac 이므로, 식 (8)은 아래와 같이 간략화 시킬 수 있다.

$$\frac{E_{NOP}}{E_{AC}} \approx \sqrt{\frac{b^2}{ac}} = \frac{sM_A + tM_B}{\sqrt{M_AM_B\,ts}}\sqrt{\frac{2n+1}{s+t}}\,\frac{\sqrt{2}}{|qa_o|} \qquad (10)$$

격자구조 안의 원자 개수가 N_o일 때, s와 t를 혼합비율 x로 표현하면 $s = (1-x)N_o$이고 $t = xN_o$이다. 따라서, 식 (10)을 혼합비율을 이용하여 아래와 같이 바꿀 수 있다.

$$\frac{E_{NOP}}{E_{AC}} = \frac{(1-x)\,M_A + xM_B}{\sqrt{(1-x)\,M_A\;xM_B}}\sqrt{\frac{2n+1}{N_o}}\,\frac{\sqrt{2}}{qa_o} \qquad (11)$$

식 (11)은 원자의 질량과 혼합비율의 함수인 Q의 형태를 포함하고 있지만 유효 변형 포텐셜에 대한 정보는 상실되어 있다. 선형스프링 모델에서 유효 변형 포텐셜에 대한 정보는 스프링 상수 β에 포함되어 있지만 long-wavelength limit의 조건하에서 얻어진 식 (11)에서는 스프링 상수 β가 상쇄된다.
식 (11)을 이용하여 Q의 형태를 알아내기 위해서는 Wiley[1]와 Szmulowicz[5]에 의해 정의된 변형 포텐셜과 비교할 필요가 있다. 식(2)와 (3)을 이용하여 acoustic 운동과 non-polar optical 운동에 대한 변형 포텐셜의 비는 아래와 같다.

$$\frac{E_{NOP}}{E_{AC}} = Q\,\frac{\sqrt{3}\,u_l}{a_o\,u}\,\frac{d_o}{\Xi_{eff}} \tag{12}$$

식 (12)에서 Q를 제외한 나머지 값들은 원자의 질량과는 상관없는 값이다. 식 (11)과 (12)를 비교해 볼 때, 원자의 질량과 혼합비율의 함수인 Q는 아래와 같이 쓸 수 있으며

$$Q = \frac{(1-x)M_A + xM_B}{\sqrt{(1-x)\,M_A\,xM_B}} \tag{13}$$

혼합물에서 optical 포논에 의한 변형 포텐셜은 아래와 같다.

$$E_{NOP} = \frac{(1-x)M_A + xM_B}{\sqrt{(1-x)\,M_A\,xM_B}}\,\frac{\sqrt{3}\,d_o}{a_o} \tag{14}$$

식 (14)는 long-wavelength limit의 조건하에서 유효한 결과이며 short-wavelength 지역에서의 유효성은 확실하지 않다. 이것을 확인하기 위하여 식 (8)을 다음과 같이 변형했다.

$$\frac{E_{NOP}}{E_{AC}} = \frac{\sqrt{b+\sqrt{b^2-4ac}}}{\sqrt{b-\sqrt{b^2-4ac}}} = Q\sqrt{T(qa_o)} \tag{15}$$

$$\sqrt{T(qa_o)} = \frac{1}{Q}\,\frac{\sqrt{b+\sqrt{b^2-4ac}}}{\sqrt{b-\sqrt{b^2-4ac}}} \tag{16}$$

식 (16)의 $\sqrt{T(qa_o)}$가 long-wavelength limit의 조건을 사용하지 않은 변수 a, b, c를 적용하였을 때 원자의 질량과 혼합비율에 상관없이 일정한 값이라면 식 (14)는 long-wavelength 지역에서 뿐만아니라 short-wavelength 지역에서도 유효한 non-polar optic 변형 포텐셜로 적용할 수 있다.

3. 결과 및 고찰

그림 2는 총 원자수 N_o를 변화시키면서 함수 $\sqrt{T(qa_o)}$를 qa_o의 함수로 전산시늉 한 것이다. 전산시늉 결과, 함수 $\sqrt{T(qa_o)}$는 스프링 상수의 크기에 따라 거의 변화가 없기 때문에 스프링 상수 값으로서 몇 몇의 혼합물과 화합물의 격자상수와 탄성계수가 갖는 값을 평균하여 계산된 값을 이용하였다. 그림에서 보는 것과 같이, N_o가 작은 값을 가지면 $qa_o = 0$에서 무한대의 값을 가지지만 큰 값을 가질수록 $\sqrt{T(qa_o)}$가 전 구간에 대해 일정한 값을 가지는 것을 볼 수 있다. 실제 경우, N_o는 10^7보다 크므로 $\sqrt{T(qa_o)}$는 qa_o에 상관없이 일정한 값을 갖는다.

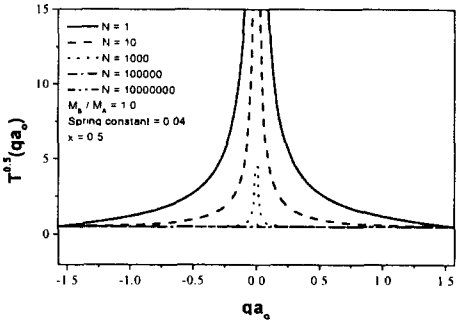

그림 2. 총원자수 N_o을 변화에 대한 $\sqrt{T(qa_o)}$ 그래프.

Fig. 2. The plot of $\sqrt{T(qa_o)}$ referring to the change of total number of atom, N_o.

그림 3은 질량비 M_B/M_A를 변화시키면서 함수 $\sqrt{T(qa_o)}$를 qa_o의 함수로 전산시늉 한 한 것이다. 질량비 M_B/M_A를 변화시킨 이유는 혼합물을 이루고 있는 원자의 질량이 다르기 때문이다. 그림에서 보듯이, $\sqrt{T(qa_o)}$는 질량비에 따라 크기는 다르지만 qa_o에 상관없이 일정한 값을 갖는다. 따라서, 혼합물을 이루고 있는 원자의 종류에 상관없이 Q는 $\sqrt{T(qa_o)}$는 질량비에 따라 크기는 다르지만 qa_o에 상관없이 일정한 값을 갖는다. 따라서, 혼합물을 이루고 있는 원자의 종류에 상관없이 Q는 long-wavelength 지역뿐만 아니라 short-wavelength 지역에서도 유효하다.

그림 4는 혼합비율 x를 변화시키면서 함수 $\sqrt{T(qa_o)}$를 qa_o의 함수로 전산시늉한 한 것이다.

그림 3의 결과와 마찬가지로 $\sqrt{T(qa_o)}$는 혼합비율에 따라 크기는 다르지만 qa_o에 상관없이 일정한 값을 갖는다. 따라서, 혼합물을 이루고 있는 원자의 혼합비율에 상관없이 Q는 short-wavelength 지역에서도 유효하다고 볼 수 있다.

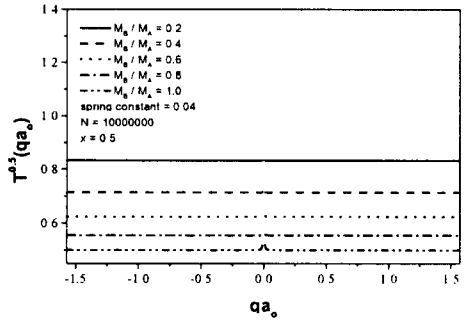

그림 3. $N_o = 10^7$인 경우 질량비의 변화에 대한 $\sqrt{T(qa_o)}$ 그래프.

Fig. 3. The plot of $\sqrt{T(qa_o)}$ referring to the change of mass ratio in the case of $N_o = 10^7$.

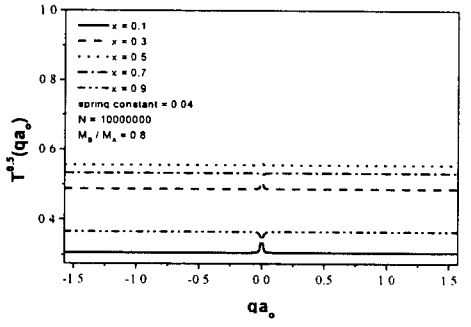

그림 4. $N_o = 10^7$인 경우 혼합비율의 변화에 대한 $\sqrt{T(qa_o)}$ 그래프.

Fig. 4. The plot of $\sqrt{T(qa_o)}$ referring to the change of alloy ratio in the case of $N_o = 10^7$.

4. 결 론

1. 혼합물이나 화합물에서 non-polar optical 포논에 의한 산란역학에 적용할 수 있도록 두 원자의 질량과 혼합비율의 함수인 Q를 얻어냈다.
2. 함수 $\sqrt{T(qa_o)}$는 주어진 N_o의 값이 충분히 크다면 질량비와 혼합비율의 값에 따라 변화되지 않으므로 Q는 long-wavelength 지역뿐만 아니라 short-wavelength 지역에서도 유효하다.
3. 결국, 함수 Q는 혼합물이나 화합물에서 non-polar optical 포논에 의한 산란역학에 적용 할 수 있다.

감사의 글

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

참 고 문 헌

[1] J. D. Wiley, "Valence-Band Deformation Potentials for the Ⅲ-Ⅴ Compounds", Solid State Communications, Vol. 8, pp. 1865-1868, 1970.

[2] J. D. Wiley and M. DiDomenico, "Lattice Mobility of Holes in Ⅲ-Ⅴ Compounds", Phys. Rev. B, Vol. 2, No. 2, pp. 427-433, 1970.

[3] J. Bardeen and W. Shockley, "Deformation Potentials and Mobilities in Non-Polar Crystals", Phys. Rev., Vol. 80, No. 1, pp. 72-80, 1950.

[4] P. Lawaetz, "Low-Field Mobility and Galvanomagnetic Properties of Holes in Ge with Phonon Scattering", Phys. Rev., Vol. 174, No. 3, pp. 867-868, 1968.

[5] F. Szmulowicz, "Calculation of Optical- and Acoustic-Phonon-Limited Conductivity and Hall Mobilities for p-type Si and Ge", Phys. Rev. B, Vol. 28, No. 10, pp. 5943-5963, 1983.

[6] F. Seitz, "On the Mobility of Electrons in Pure Non-Polar insulators", Phys. Rev. Vol. 73, No. 6, pp. 549-564, 1948.

[7] H. Ehrenreich and A. W. Overhauser, "Scattering of Hole by Phonons in Ge", Phys. Rev., Vol. 104, No. 2, pp. 331-342, 1956.