

**$\beta$ -FeSi<sub>2</sub> 단결정의 전기적 광학적인 특성**

김남오\*, 김형곤\*, 이우선\*\*, 손경춘\*\*\*

\*조선이공대학 전기과, \*\*조선대학교 공과대학 전기공학과, \*\*\*조선대학교 인터넷창업보육센터

**Optical and electrical properties of  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> single crystals**

Nam-Oh Kim\*, Hyung-Gon Kim\*, Woo-Sun Lee\*\*, Kyung-Chun Son

\*Department of Electricity, Chosun college of Science & Technology, Kwangju 501-744

\*\*Department of Electrical Engineering Chosun University, kwangju 501-75

**Abstract** - Plate-type  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> single crystals were grown using FeSi<sub>2</sub>, Fe, and Si as starting materials by the chemical transport reaction method. The  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> single crystal was an orthorhombic structure. The direct optical energy gap was found to be 0.87eV at 300K. Hall effect shows a n-type conductivity in the  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> single crystal. The electrical resistivity values was 1.608 $\Omega$ cm and electron mobility was  $3 \times 10^{-1} \text{cm}^2/\text{V} \cdot \text{sec}$  at room temperature.

$\beta$ -FeSi<sub>2</sub> 단결정을 얻을 수 있었다. 또한, 단결정은 n-type 전도도를 보였다.

$\beta$ -FeSi<sub>2</sub> 단결정의 광흡수는 UV-VIS-IR spectrophotometer(Hitachi, U-3501)를 사용하여 구하였으며, 광학적 에너지 갭은 band edge 영역의 기초흡수단으로부터 환산하여 구하였다.  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> 단결정의 Hall 효과는 HL5500PC(Bio-Rad)를 사용하여 저항, 홀 이동도, 캐리어 농도의 온도의존성을 van der Pauws(VDP) 법으로 78 K에서 300 K까지 시편의 온도를 조절해 주면서 4단자법으로 측정하였다.

**1. 서 론**

반도체 구조 화합물에 속하는  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> 화합물은 seekbeck 계수가 크기 때문에 고온 열전소자로 사용하기 위한 연구가 다수 이루어졌으며,  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> 화합물은 전기저항이 IC소자의 전기저항소자로 적합하여 Si 기판 위에 reactive deposition epitaxy, MBE, 이온빔 및 Laser 증착 등의 방법을 사용하여  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> 박막을 성장시켜 물리학적 특성에 대한 연구가 활발히 이루어 졌다[1].  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> 화합물은 화학적으로 안정하고, 무독성, 자원이 풍부하기 때문에 생태학적으로 환경반도체로서 관심의 대상이 되고 있다[2]. 특히,  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> 결정은 사방정계(orthorhombic) 구조로 직접전이형 에너지 갭이 0.87 eV[3]로 광파이버의 최저 광손실 영역인 1.5  $\mu\text{m}$ 과 대응되어서 1.5  $\mu\text{m}$ 의 광을 발광하는 LD 디바이스 재료로서 적합하여 고효율의  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> LD 소자 제작에 대한 연구가 보고 되고 있다[4].  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> 화합물을 LD 소자 등의 광전자디바이스에 응용하기 위해서는  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> 단결정 성장과 광학적 특성 규명이 필수적임으로  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> 단결정 성장에 대한 연구가 화학수송법(chemical transport reaction)을 사용하여 연구되었다[5]. 그러나 고순도의 단결정 성장은 발표되지 못하고 있다. 본 연구에서는 양질의  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> 단결정을 성장시키기 위한 기초 연구의 하나로, 다양한 조건에서 CTR 방법으로  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> 단결정을 성장 시켰으며, 성장된  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> 단결정의 결정구조, 광흡수 그리고 전기적인 특성인 Hall 효과의 온도의존성을 규명하였다.

**2. 실험**

$\beta$ -FeSi<sub>2</sub> 단결정은  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>(99.9%)와 Fe(99.99%) 및 Si(99.9999%)를 석영관 ampoul 내에 넣고  $2 \times 10^{-6}$  torr의 진공에서 봉입하였으며, Iodine(99.999%)을 수송매체로 사용하여 화학수송법으로 성장 시켰다.  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> 단결정 성장시 결정성장부의 석영관 내부를 세척하였으며[6], 시료 증발부의 온도를 1050  $^{\circ}\text{C}$ 로 하였고 결정성장부의 온도는 850  $^{\circ}\text{C}$ 가 되게 하여 10일간 유지하여 단결정을 성장하였다. 이때 수송매체인 Iodine량은 5mg/cc를 사용하였다. 성장된 단결정의 크기는  $3.47 \times 8.68 \times 0.18 \text{mm}^3$  정도의 판형

**3. 실험결과 및 고찰**

성장된 단결정의 구조를 구하기 위하여 성장된  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> 단결정 분말에서 구한 X-ray 회절 무늬는 그림 1과 같다.  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> 단결정에서 구한 x-ray 회절 무늬는 사방정계(orthorhombic) 구조로 나타났다. 이들 회절면의 peaks를 해석하여 구한  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> 단결정의 격자상수  $a = 9.8545 \text{ \AA}$ ,  $b = 7.7935 \text{ \AA}$ ,  $c = 7.8071 \text{ \AA}$ 로 주어졌으며, 이들 격자상수의 값은 JCPDS card(20-532)에서 제시한  $a = 9.879 \text{ \AA}$ ,  $b = 7.799 \text{ \AA}$ ,  $c = 7.839 \text{ \AA}$ 의 값과 비교해 보면 잘 일치한 값이다.

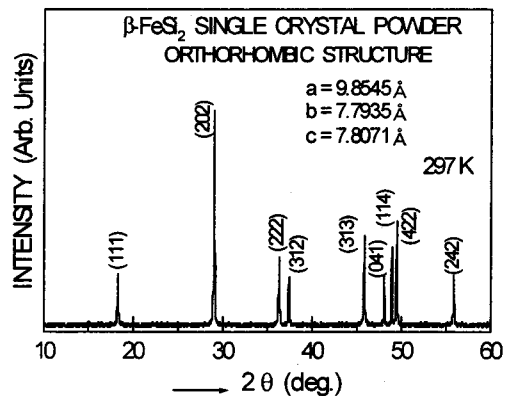


그림 1.  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> single crystal 분말의 X선 회절무늬.

Fig. 1. X-ray diffraction patterns of  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> single crystal powder.

성장된  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> 단결정에서 광학적 에너지 갭을 구하기 위하여 기초흡수단 영역에서 구한 광흡수 스펙트럼은 그림 2와 같이 주어진다.

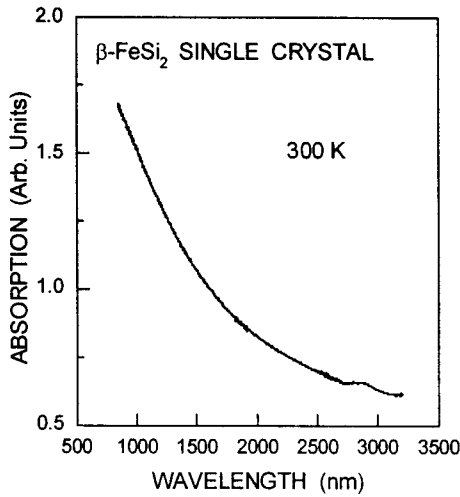


그림 2.  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> 단결정의 광흡수 특성.  
Fig. 2. Optical absorption spectrum of  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> single crystal(300K).

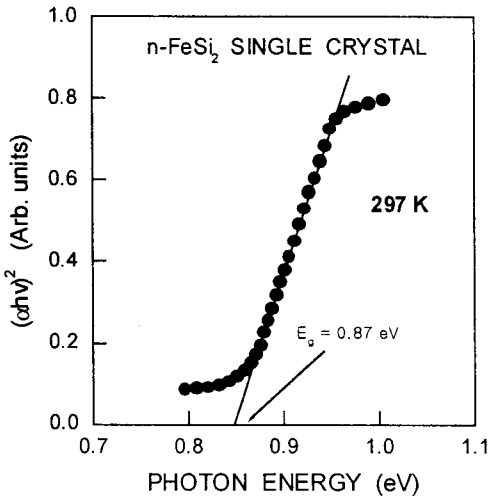


그림 3.  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> 단결정의 광 에너지와  $(\alpha \cdot h\nu)^2$  의 관계  
Fig. 3. Plots of  $(\alpha \cdot h\nu)^2$  vs. the incident photon energy  $h\nu$  in  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> single crystal at 300 K.

1425 nm에서 direct band gap에 대응하는 급격한 흡수에 증가가 일어났으며,  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> 단결정은 direct band gap을 갖고 있기 때문에[7] 에너지 갭( $E_g$ )을 구하기 위하여 입사광 에너지( $h\nu$ )와 광흡수계수  $\alpha$ 와의 관계식인[8]

$$(\alpha \cdot h\nu)^2 \sim (h\nu - E_g) \quad (1)$$

을 사용했다. 입사광 에너지  $h\nu$ 와 흡수계수  $\alpha$ 를 그림 1로부터 구하고  $(h\nu)$ 와  $(\alpha \cdot h\nu)^2$  사이의 관계를 구하면 그림 3과 같다. (1)식에서  $(\alpha \cdot h\nu)^2 = 0$  일 때  $h\nu = E_g$ 이기 때문에 그림 2의 외삽곡선으로부터  $(\alpha \cdot h\nu)^2 = 0$  일 때  $h\nu$ 값을 구하면 0.87 eV로 광학적 에너지 갭에 대응된다. 이 값은  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> 단결정에서 Bost 등이[9] 구한 0.87 eV와 같은 값이다.

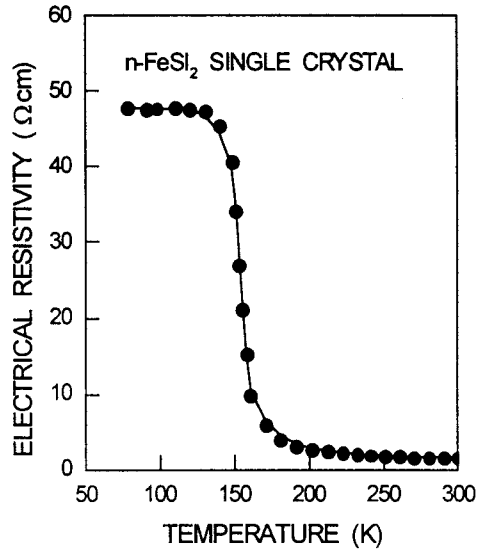


그림 4.  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> 단결정에서 전기저항의 온도의존성.  
Fig. 4. Temperature dependence of electrical resistivity of  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> single crystal.

$\beta$ -FeSi<sub>2</sub> 단결정의 전기저항 측정용 소자를 cold finger에 장치하여 소자의 온도를 78K에서부터 300K까지의 온도영역에서 측정한 전기저항의 온도의존성은 그림 4에서와 같이 300K에서 1.608  $\Omega$ cm 이었고, 측정 온도가 증가함에 따라 전기저항은 감소하였으며, 낮은 온도영역인 78K에서 47.78  $\Omega$ cm로 최대 값을 나타내었다. 한편, 150K 온도영역 이하와 160K 온도영역 이상에서는 온도에 거의 의존하지 않은 포화 현상을 보이고, 모든 측정 온도영역에서  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> 단결정은 부(negative) 특성을 보였다.

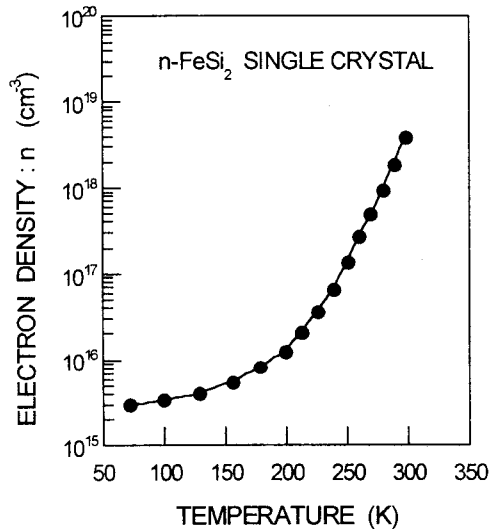


그림 5.  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> 단결정에서 캐리어 농도의 온도의존성.  
Fig. 5. Temperature dependence of carrier concentration of  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> single crystal.  
자유 캐리어 농도  $n=1/(qR_H)$ 는 Hall 계수로부터 얻

[참고 문헌]

- (1). R. T. Tung, K. Maex, P. W. Pellegrimi and L. H. Allen: "Silicide Thin Films-Fabrication Properties and Applications", (MRS, Pittsburgh, 1996)
- (2). T. Suemasu and F. Hasegowa: Oyo Buturj, 69, 804 (2000)
- (3). H. Lange: MRS Symposium proceeding, Vol. 402, 307 (1996)
- (4). P. Muret and K. Lefki: "Comment on effect of sub-band-gap illumination on  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>/n-type Si diodes under reverse", Appl. Phys. Lett. 63(15), (1993)
- (6). C. Paorici, L. Zanotti and G. Zuccalli: J. Crystal Growth 43, 705 (1978)
- (7). Haruhiko Udono and Isao Kikuma: "Solution Growth of single-Phase  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> Bulk Crystal", Jpn. J. Appl. Phys. Vol. 39, L225-L226, (2000)
- (8). J. I. Pankove: "Optical processes in semiconductors", (Dover Pub., New York, 1975), 35.
- (9). Hirofumi Kakemoto, Yunosuke Makita, Shiro Sakuragi and Takeyo Tsukamoto: "Synthesis and properties of semiconducting iron disilicide  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>", Jpn. J. Appl. Phys. Vol. 38, 5192, (1999)
- (10). U. Birkholz and J. Schelm, Phys. Status Solidi 27, 431, (1968)

을 수 있으며, 여기서 q는 전자의 전하량이다. 78K에서 300 K까지의 온도영역에서  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> 단결정의 Hall 효과 (R<sub>H</sub>)로부터 구한 carrier는 전자(electron)고, 전자 농도의 온도의존성은 그림 5와 같이 300K 온도에서  $4.5 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$  정도이었으며, 78K에서는  $3 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$ 로 주위 온도가 상승함에 따라 전자의 농도는 증가하였다.

78K에서 300K 온도영역에서 electron 이동도  $\mu$ 의 온도의존성은 그림 6과 같이 이동도는 상온에서  $3 \times 10^1 \text{cm}^2/\text{V} \cdot \text{sec}$  이었고, 주위온도가 감소하면 electron 이동도  $\mu$ 는 증가하여 78K에서  $3.1 \times 10^1 \text{cm}^2/\text{V} \cdot \text{sec}$ 로 주어져 있으며, 이는 Birkholz등(10)이 구한  $4.8 \times 10^1 \text{cm}^2/\text{V} \cdot \text{sec}$  보다 낮게 나타나고 있는데 이와 같이 이동도가 낮은 이유는 전자-포논과 자유전자의 유효질량이 강하게 결합되어 있기 때문이며, 이동도  $\mu$ 는 포논에 의하여,

$$\mu_n = \frac{\sigma}{qn_H} \quad (2)$$

을 만족한다.  $\sigma$ 는 전기전도도,  $n_H$ 는 전자의 농도이다. 그림 5로부터 부(-) 온도계수를 만족하는  $\mu \propto T^{3/2}$  관계를 나타내었으며, 이는 이온화 불순물에 의하여 나타난다고 생각된다.

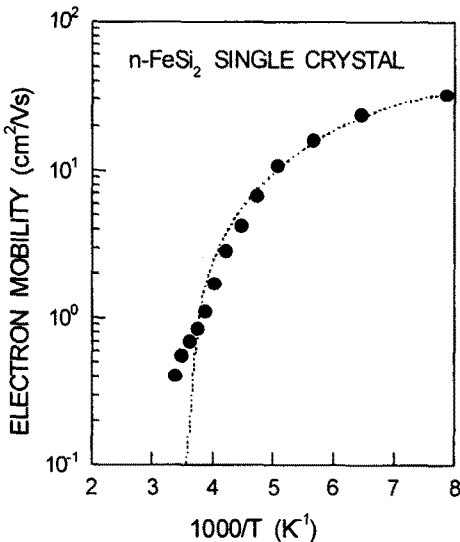


그림 6.  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> 단결정에서 전자 이동도의 온도의존성.

Fig. 6. Temperature dependence of electron mobility of  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> single crystal.

4. 결 론

화학수송방법으로 판형  $\beta$ -FeSi<sub>2</sub> 단결정을 성장시켰다. 성장된 단결정은 n-type으로 orthorhombic 구조를 갖고 있었다. 광흡수 측정으로부터 구한 에너지 갭은 300 K에서 0.87 eV 이었으며 에너지 밴드 구조는 직접전이형 밴드 구조였다. 전기저항은 300 K에서 1.608  $\Omega\text{cm}$  이었으며, 전자의 이동도  $\mu$ 는 상온에서  $3 \times 10^1 \text{cm}^2/\text{V} \cdot \text{sec}$ 로 나타났고, 캐리어의 농도는  $4.5 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$  정도로 주위온도가 증가함에 따라 전자의 농도는 증가하였다.