

In_xGa_{1-x}N /GaN 양자우물 구조에 관한 수치 해석

김경찬, 김태근
광운대학교

Numerical Analysis for the In_xGa_{1-x}N/GaN Quantum Well Structures

Kyoung-Chan Kim, Tae-Geun Kim
Kwangwoon Univ.

Abstract

본 논문에서는 수치 해석 방법을 이용하여 In_xGa_{1-x}N/GaN (x=0.06~0.1) 양자우물 구조의 에너지 준위를 계산하였다. InGaN 벌크 샘플(bulk sample)의 PL(photoluminescence) 데이터로부터 bowing factor를 결정한 후 InGaN의 유효 에너지 밴드갭을 계산하였고, InGaN/GaN 양자우물 구조의 전도대와 가전자대의 오프셋(offset)을 0.67/0.33으로 정하였다. 다음으로, 양자화 효과에 의한 에너지 변위와 압전장(piezoelectric field)을 제외한 양축 압축 변형(biaxial compressive strain)에 의한 에너지 변위를 고려하여 기준준위 전자와 heavy hole(1e-1hh)간의 천이 에너지를 계산하였다. 계산된 천이 에너지는 PL로 측정된 천이 에너지에 비해 약 9~15 meV 크게 관찰되었는데, 이것은 InGaN/GaN 양자우물 계면에 발생하는 압전장 때문인 것으로 생각된다.

Key Words : InGaN/GaN, 양자우물, 압전장, PL, bowing factor

1. 서론

최근 질화갈륨(GaN) 물질을 이용한 청색, 녹색 발광다이오드(light emitting diodes, LEDs)에 대한 상업화의 성공으로 인듐갈륨질소/갈륨질소(InGaN/GaN) 양자우물(quantum well) 구조에 대한 관심이 고조되고 있으며, 이들 구조에 대한 보다 정확한 이해가 요구되고 있다[1]. 그러나, InGaN/GaN 양자우물 구조는 에너지 밴드 오프셋(energy band offset), 인듐 불균일성(indium non-uniformity), 격자 불일치(lattice-mismatch)로 인한 변형(strain)과 압전장(piezoelectric fields)등과 같은 많은 불확실한 재료 성분(material parameters)을 갖기 때문에 아직까지 이들 구조의 양자 에너지 준위 및 천이 에너지에 대한 시뮬레이션이 활발하게 수행되지 못하고 있다. 특히, 압전장은 인듐 조성에 따른 변형 정도가 매우 크고,

방출 에너지의 Stark shift를 야기시켜 전위 모양(potential profile)을 깨뜨리고, 광학적 특성을 변형시키기 때문에 InGaN/GaN 양자우물 구조의 정확한 계산을 위하여 가장 먼저 고려되어야 할 인자이다[2]. 일반적으로 내부전장은 자발 분극(spontaneous polarization)과 압전 분극(piezoelectric polarization)에 의하여 발생하는 것으로 알려져 있으며, 특히 InGaN/GaN 재료에서는 압전 분극에 의하여 주도적으로 발생하는 것으로 보고된 바 있다[3]. InGaN/GaN 양자우물의 내부 압전장에 대한 발표 논문들을 살펴보면, Chichibu 연구팀에서는 In_{0.25}Ga_{0.75}N 양자우물에 대한 압전장이 1.4 MV/cm 정도[4], C. Y. Lai 연구팀에서는 In_{0.23}Ga_{0.77}N 양자우물에 대한 압전장이 1.7~1.9 MV/cm 정도라고 보고한 바 있다[5].

본 논문에서는 파장 360~400 nm 영역의 UV-LED(ultraviolet-light emitting diode) 개발을

위하여, 인듐 조성에 따른 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ ($x=0.06\sim 0.1$) 양자우물 구조의 에너지를 수치 해석 방법으로 계산하였다.

먼저, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 벌크 샘플(bulk sample)로부터 측정된 PL 에너지와 식 (2)에서 계산된 에너지를 비교하여 결정된 bowing factor를 고려하여 유효 에너지 밴드갭을 계산하였고, InGaN/GaN 양자우물 구조의 전도대와 가전자대의 오프셋(offset)을 0.67/0.33으로 정하여 2차원 슈뢰딩거 파동 방정식을 수치적으로 풀어 $1e-1\text{hh}$ 의 양자화된 에너지 준위를 계산하였다. 다음으로, 양축 압축 변형(biaxial compressive strain)에 의한 양자우물 구조의 가전자대 에너지 변위를 계산한 후 전체 천이 에너지를 고려하여 계산된 천이 에너지와 PL로 측정된 천이 에너지를 비교하였는데, 계산된 천이 에너지가 9~15 meV 크게 관찰되었다. 이것은 InGaN/GaN 양자우물 계면에 발생한 압전장 때문인 것으로 생각된다.

2. $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 양자우물의 수학적

해석

InGaN/GaN 양자우물 구조의 $1e-1\text{hh}$ 간의 천이 에너지를 계산하기 위하여, 그림 2와 같은 사각 양자우물 구조를 모델화하였고, 전체 천이 에너지에 영향을 주는 인자들을 식 (1)과 같이 고려하였다.

$$E_{1e-1hh} = E_g + \Delta E_{1c} + \Delta E_{1hh} + \Delta E_{hh} + \Delta E_{pz} \quad (1)$$

여기서 E_{1e-1hh} 는 $1e-1\text{hh}$ 간의 전체 천이 에너지이고, E_g 는 전도대와 가전자대간의 유효 에너지 밴드갭이며, E_{1c} 와 E_{1hh} 는 각각 $1e-1\text{hh}$ 의 양자화된 에너지 준위이다. 또한, E_{hh} 와 E_{pz} 는 양축 압축 변형과 압전장에 의해 발생한 에너지의 변화이다. 각각의 인자들은 다음과 같이 계산하였다.

2.1 유효 에너지 밴드갭, E_g

$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 양자우물의 E_g 를 계산하기 위해서는 먼저 bowing factor를 결정해야 한다. 이를 위하여 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ ($x=0.06\sim 0.35$) 벌크 샘플의

PL 에너지를 조사하였고, 그 결과를 아래의 식(2)에 의해 계산한 결과와 비교하였다.

$$E_{g\text{InGaN}}(x) = (1-x) \cdot E_{g\text{GaN}} + x \cdot E_{g\text{InN}} - B \cdot x \cdot (1-x) \quad (2)$$

여기서 B 는 bowing factor이고, 일반적으로 1~3의 범위의 값을 갖는 것으로 보고되고 있다[6]. 또한, x 는 인듐 조성(indium composition)이다.

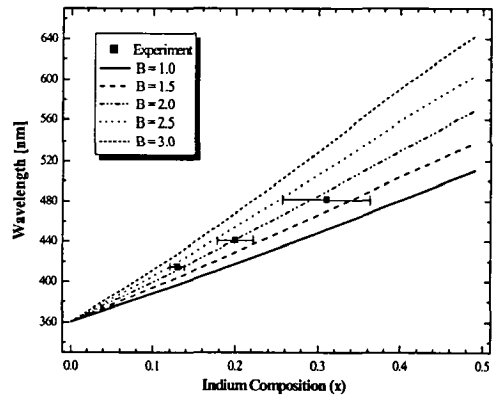


그림 1. Bowing factor에 따른 인듐 조성의 함수로써 계산된 파장과 PL로 측정된 파장의 비교.

그림 1은 식 (2)를 이용하여 B 값(1~3)에 따른 인듐 조성의 함수로써 계산된 파장(various lines)과 PL로 측정된 파장(closed squares)의 비교를 보여준다. 인듐 조성이 증가함에 따라 계산된 파장은 거의 선형적으로 증가함을 알 수 있으며, 증가율은 B 값에 비례하기 때문에 인듐 조성이 높을수록 B 값에 대한 파장의 의존성이 커짐을 알 수 있다. 또한, PL로 측정된 파장은 인듐 조성이 증가함에 따라 계산값과의 오차 정도가 증가함을 알 수 있는데, 이것은 인듐 조성이 증가함에 따라 인듐의 불균일성이 커져 PL 파장 또는 X-ray에 의하여 얻어진 인듐 조성이 실제값과 달라질 수 있기 때문이다. 본 논문에서는 인듐의 조성이 6~10%인 샘플을 사용하였기 때문에 그림 1로부터 2.5로 결정하였다. 이때 $\text{In}_{0.08}\text{Ga}_{0.92}\text{N}$ 인 경우를 예로 들면 유효 에너지 밴드갭은 식 (2)로부터 3.132 eV로 계산되고, 그 값을 그림 2에 명시하였다.

2.2 기저준위 전자와 heavy hole의 양자화된 에너지 준위, ΔE_{c1b} , ΔE_{v1hh}

양자 크기 효과(quantum size effects)에 의하여 이동한 전자와 heavy hole의 에너지 고유상태(eigenstate)를 이해하기 위하여 유효 질량 근사(effective mass approximation)로 2차원 슈뢰딩거 파동 방정식을 적용하였다. 이러한 계산을 위하여 InGaN/GaN 양자우물에 대하여 그림 2와 같이 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 사각 양자우물 에너지 밴드 구조를 모델화하였다. 여기서 전도대와 가전자대의 밴드 오프셋 비율(E_c/E_v)은 0.67/0.33으로 결정하였으며, 1e-1hh의 양자화된 에너지는 다음의 식 (3)에 의해 계산되었다.

$$\tan \left\{ L_z \sqrt{\frac{8\pi^2 m_0}{2^2 h^2} \sqrt{m_{c,v} V_{0c,v}(x) E_i}} \right\} = \sqrt{\frac{m_{c,v} V_{0c,v}(x) - E_i}{m_b E_i}} \quad (3)$$

여기서 L_z 는 우물 두께(well thickness)이고, m_0 는 자유 전자 질량이며, $V_{0c,v}$ 는 각각 전도대와 가전자대의 전위 장벽이다. m_b 는 장벽에서의 캐리어(carrier) 유효 질량이고, $m_{c,v}$ 는 우물에서 전도대와 가전자대의 캐리어 유효 질량이다. 또한, h 는 프랑크(Plank) 상수이고, E_i 는 양자화된 에너지 준위이다. 식 (3)에서 E_i 를 찾음으로써 양자화된 에너지 준위를 계산할 수 있었다. 예를 들면, $\text{In}_{0.08}\text{Ga}_{0.92}\text{N}/\text{GaN}$ 양자우물의 기저준위 전자와 heavy hole의 양자화된 에너지 준위는 각각 식 (3)으로부터 0.06 eV, 0.01 eV로 계산되었고, 그 값을 그림 2에 명시하였다.

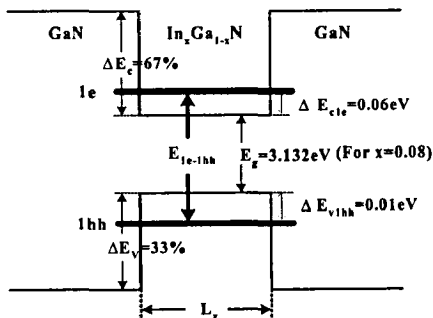


그림 2. 모델화된 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ 사각 양자우물 에너지 밴드 구조

2.3 압축 압력 변형에 의한 에너지 이동, ΔE_{hh}

앞에서 언급한 바와 같이, InGaN/GaN 양자우물 구조의 격자 불일치가 매우 크기 때문에 변형 효과(strain effect)는 정확하게 고려되어야 한다. InGaN/GaN 양자우물은 압축 압력 변형 구조를 갖는데, 그것은 가전자대의 light hole과 heavy hole의 유효 질량의 변화 때문에 전도대 바닥에 대한 가전자대 꼭대기의 에너지 변화를 발생시킨다. 이 에너지의 변화는 아래의 식 (4)에 의하여 계산될 수 있다.

$$\Delta E_{hh}(x) = -\Xi(x) \cdot \epsilon(x) \cdot \left\{ \frac{C_{11}(x) - C_{12}(x)}{C_{11}(x)} \right\} + b(x) \cdot \epsilon(x) \cdot \left\{ \frac{C_{11}(x) + C_{12}(x)}{C_{11}(x)} \right\} \quad (4)$$

여기서 $\Xi(x)$ 는 정수 변형 전위(hydrostatic deformation potential)이고, $\epsilon(x)$ 는 변형(strain)이며, $b(x)$ 는 전단 변형 전위(shear deformation potential)이다. 또한, $C_i(x)$ 는 탄성 계수이다. 각각의 값은 참고문헌[7]에 잘 나타나 있다. $\text{In}_{0.08}\text{Ga}_{0.92}\text{N}/\text{GaN}$ 양자우물을 예로들면 양축 압력 변형에 의한 에너지 변위는 식(4)로부터 0.027 eV로 계산되었고, 그 값을 그림 2에 명시하였다.

끝으로, InGaN/GaN 양자우물의 1e-1hh간의 전체 천이 에너지를 정확하게 계산하기 위해서는 압전장 효과가 반드시 고려되어야만 한다. 이를 위하여, 많은 연구팀들이 InGaN/GaN 양자우물 구조에 걸리는 압전장 효과에 대하여 활발한 연구를 진행하고 있으나 서론에서 언급한 바와 같이 불확실한 재료 성분 때문에 InGaN/GaN 양자우물 내부 압전장에 대한 정확한 계산은 이루어지지 않고 있다.

본 논문에서는 PL로 측정된 천이 에너지와 압전장을 제외하고 계산한 천이 에너지를 비교함으로써 InGaN/GaN 계면에 걸리는 압전장 효과를 간접적으로 관찰하고자 하였다. 그림 3은 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ ($x=0.06 \sim 0.1$) QW에 대한 우물 두께의 함수로써 계산한 파장(various lines)과 $\text{In}_{0.08}\text{Ga}_{0.92}\text{N}/\text{GaN}$ 양자우물에 대하여 PL로 측정된 파장(closed squares)의 비교를 보여준다. 우물 두께가 증가함에 따라 계산된 파장은 루트(root) 함수 형태로 증가함을 알 수 있고, x값이 0.08인 경우 38 Å에서 파장이 385 nm로 계산되었다. 또한,

PL로 측정된 파장은 38 Å의 우물 두께 부근에서 390~393 nm로 분포하는 것을 알 수 있고, 이러한 산포는 우물 두께와 인듐 조성의 실험적인 오차에 의하여 발생된 것으로 생각된다. 밴드 filling 효과를 무시하면, 계산된 천이 에너지가 9~15 meV 크게 관찰되는데, 이것은 InGaN/GaN 양자우물 계면에 발생하는 압전장 때문인 것으로 생각된다.

InGaN/GaN 양자우물 구조에 관한 수치 해석에 대한 연구는 이들 구조를 이용하는 광 디바이스(optical device)의 방출 파장 설계시 매우 유용한 정보를 줄 것이다.

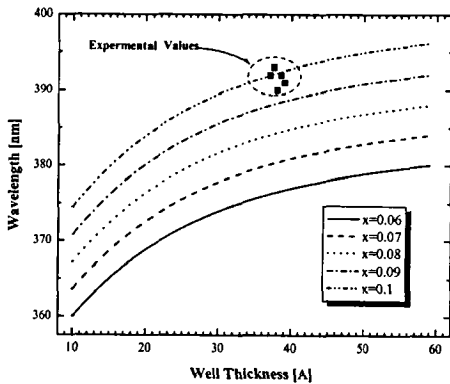


그림 3. 인듐 조성에 따른 우물 두께의 함수로써 계산된 파장과 PL로 측정된 파장의 비교.

3. 결론

본 논문에서는 InGaN/GaN 양자우물 구조의 에너지 준위를 수치 해석 방법으로 계산하였다. 계산값에 대하여 유효 에너지 밴드갭, 양자 크기 효과와 변형 효과를 고려하였고, PL 측정 실험으로 압전장 효과를 관찰하였다. 인듐 조성 8%에 대하여 PL과 계산된 파장을 비교함으로써 B값은 2.5로 결정되었고, 이때 $In_{0.08}Ga_{0.92}N$ 벌크의 유효 에너지 밴드갭은 3.132 eV로 계산되었다. 또한, 밴드 오프셋을 0.67/0.33으로 하였을 때, 기저준위의 전자와 heavy hole의 양자화된 에너지 준위는 각각 0.06 eV, 0.01 eV로 계산되었고, 이때 양축 압축 변형에 의한 에너지의 변화는 0.027 eV로 계산되었다. 이렇게 계산된 전체 천이 에너지는 PL 파장에 비해

약 9~15 meV 크게 관찰되었는데, 본 논문에서는 그 차이를 InGaN/GaN 양자우물 구조의 계면에서 발생하는 압전장에 의한 에너지 변위로 생각하였다.

참고 문헌

- [1] I. Akasaki and H. Amano, "For a rescent review see", Jpn. J. Appl. Phys. Vol. 36, p. 5393, 1997.
- [2] T. Takeuchi *et al.*, Appl. Phys. Lett. Vol. 73, p. 1691, 1998.
- [3] F. Bernardini and V. Fiorentini, Phys. Rev. Vol. B 57, p. R9427, 1998.
- [4] S. F. Chichibu, T. Azuhata, T. Sota, T. Mukai, and S. Nakamura, J. Appl. Phys. Vol. 88, p. 5153, 2000.
- [5] C. Y. Lai, T. M. Hsu, W.-H. Cahng, and K.-U. Tseng, J. Appl. Phys. Vol. 91, p. 531, 2002.
- [6] T. Takeuchi, H. Takeuchi, S. Sota, H. Sakai, H. Amano, and I. Akasaki, "Optical properties of strained AlGaIn and GaInN", Jpn. J. Appl. Phys. Vol. 36, p. L177, 1997.
- [7] M. Suzuki, T. Uenoyama, and A. Yanase, "First-principles calculations of effective-mass parameters of AlN and GaN.", Phys. Rev. B, Vol. 52, p. 8232, 1995.