

## 사파이어 기판방향에 따른 GaN 박막의 표면탄성과 특성에 대한 이론적 계산

임근환<sup>†</sup> · 김영진 · 최국현\* · 김범석\* · 김형준\* · 김수길\*\* · 신영화\*\*

경기대학교 재료공학과

\*서울대학교 재료공학부

\*\*경원대학교 전자공학과

(2003년 4월 19일 접수; 2003년 5월 7일 승인)

### Theoretical Calculation of SAW Propagation of GaN/Sapphire Structure according to SAW Propagation Direction

Gune Hwan Lim,<sup>†</sup> Young Jin Kim, Kook Hyun Choi,\* Bum Seok Kim,\* Hyeong Joon Kim,\*  
Soo Gil Kim,\*\* and Young Hwa Shin\*\*

Department of Material Engineering, Kyunggi University, Suwon 442-760, Korea

\*School of Material Science and Engineering, Seoul National University, Seoul 151-742, Korea

\*\*Department of Electronic Engineering, Kyungwon University, Kyunggi-Do 461-701, Korea

(Received April 19, 2003; Accepted May 7, 2003)

#### 초 록

GaN/사파이어 박막구조는 높은 SAW 속도로 인해 고주파 소자로 이용될 가능성이 있다. 일반적으로, GaN 박막은 사파이어의 c, a, 그리고 r-면에 성장한다. 본 연구에서는 사파이어의 기판과 GaN 박막사이의 결정학적 관계에 따라 GaN/사파이어 구조의 파동 방정식을 계산하였다. 각각의 면에서, GaN의 kH와 사파이어의 기판방향에 따라 전단속도가 변화하였다. 그 결과 r-면의 경우 전기기계결합계수가 우수했다. 즉, 재료의 탄성상수와 전기기계결합계수는 기판의 cut 방향과 방향성에 좌우된다. 또한, GaN/r-면 사파이어는 전기기계결합계수가 우수하므로 고주파수 대역 SAW 소자 응용에 보다 더 좋을 것이다.

#### ABSTRACT

The GaN/sapphire layered structure is a potential candidate for high frequency devices due to high acoustic velocity of sapphire. Generally, the GaN thin films are epitaxially grown on c, a, and r-plane sapphire substrates. In this study, wave equations of GaN/sapphire structure were calculated according to crystallographic relationship between GaN layer and sapphire substrate. On each plane, the shear velocity was changed by the kH of GaN layer and propagation direction on sapphire substrate. We found electromechanical coupling constant of r-plane was better than the others. As a result, elastic stiffness and electromechanical coupling constant of materials are affected by a cut and an orientation of substrate. GaN/r-plane sapphire structure is more advantageous for high frequency SAW devices.

**Key words :** GaN, Sapphire, Shear velocity, SAW, Piezoelectrics, Electromechanical coupling constant ( $k^2$ )

#### 1. 서 론

넓은 밴드갭을 갖는 III-V족 반도체인 GaN은 고전압/고온에 견디는 전자부품 및 청색발광소자에 널리 응용되고 있고 빠른 음파속도와 높은 전기기계결합계수, 우수한 온도특성을 갖고 있어 고주파수 SAW 필터에 적용이 가능하다. 또한 GaN은 광학적, 전자적, 음파특성을 결합시킨 형태의 하이브리드 소자들에게도 응용이 가능하다.<sup>1)</sup> SAW

소자를 설계, 제작하는 데는 기판의 특성과 전극설치방법 그리고 필터의 특성을 왜곡시키는 2차 효과 등에 관한 특성에 관한 정확한 자료들을 확보해야 한다.<sup>2)</sup> 따라서, GaN/사파이어 다층박막구조를 고주파 표면탄성과 소자에 응용을 하기 위해서는 다층구조에서의 표면탄성과 전파현상에 대한 정확한 이해와 해석이 필수적이다.

본 연구에서는 표면탄성과 전파에 관한 이론적인 고찰을 통해 다층 박막구조에서 표면탄성과의 전파특성을 분석할 수 있는 컴퓨터 모사 프로그램을 표면탄성과의 파동방정식을 가지고 작성하였으며, 이를 통해 표면탄성과의 모드 및 속도, 그리고 전기기계 결합계수를 추출하였다. 전파 특성은 각 층에 사용된 재료의 결정학적 구조와

<sup>†</sup>Corresponding author : Gune Hwan Lim

E-mail : ghlim0627@hanmir.com

Tel : +81-31-249-9760 Fax : +81-31-249-9775

물질상수 값 그리고 층의 두께 및 전기적, 기계적 조건에 의해 결정되는 경계조건을 이용하여 파동방정식의 해를 구함으로써 얻을 수 있다. 이때, 사파이어기판 위에 증착된 GaN 박막 구조에서는 서로 다른 물질상수를 가지는 매질내에서 표면파가 형성되어 전달되기 때문에 박막이 전체 표면파의 생성과 전파에 차지하는 비율이 중요하게 되어 속도 dispersion이라는 개념을 도입해야 한다. 이는  $kH(=2\pi H/\lambda)$ 의 함수로 표현된다. 여기서  $k$ 는 파수,  $H$ 는 GaN 두께를 나타낸다. GaN의 전파속도가 느리기 때문에 GaN의 두께가 두꺼워 질수록 속도가 느려지고 충분히 두껍게 되면 GaN의 속도를 나타내게 된다. 이 속도 dispersion 관계를 이용하여 박막의 물질상수를 유추해낼 수 있다.

본 논문에서는 Transfer matrix method에 의한 GaN/사파이어 구조에서의 표면탄성과 전파특성을 다층구조의 표면탄성과 전파특성을 이론적으로 계산하였다. 계산은 본 연구에서 개발한 시뮬레이션 프로그램을 사용하였고 프로그램은 Transfer matrix 방법을 기초로 하여 Matlab 5.3으로 작성하였다.

## 2. 다층박막의 표면 탄성과 분석을 위한 이론

### 2.1. 박막 구조 표면탄성과 전파 이론 및 계산

#### 2.1.1. 파동방정식

고체에서 응력과 변형도를 연관시키는 Hooke's 법칙과 Newton의 힘의 법칙으로부터 균질한 다층박막에서의 탄성파에 대한 방정식을 유도할 수 있는데, 다층 이방성 압전 박막재료에서  $x_1$  방향으로 전파하는 표면 탄성파에 의한 입자 변위  $U$ 와 전위  $\phi$ 는 운동방정식, 준정적인 Maxwell's 방정식, 전계밀도, 압전 응력방정식, 압전전위밀도 방정식, 선형 스트레인 변위에 대한 식들에 의해 아래와 같이 나타내어 진다.

$$c_{ijkl} \frac{\partial^2 U_k}{\partial x_j \partial x_i} + e_{kij} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_k \partial x_i} = \rho \frac{\partial^2 U_j}{\partial t^2} \quad (j=1, 2, 3) \quad (1)$$

$$e_{kij} \frac{\partial^2 U_k}{\partial x_j \partial x_i} - \epsilon_{ik} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_k \partial x_i} = 0 \quad (2)$$

식(1)을 만족하는 각 매질 내에서의 입자변위와 전기적 포텐셜은 아래 식(2)로 정의되는 partial wave들의 선형조합을 만족해야 하며 이때, 선형조합의 계수는 표면에서의 전기적, 기계적 경계조건을 만족시키는 값을 가져야 한다.

$$U_j = A_j \exp[ik(bx_3 + x_1 - vt)] \quad (3)$$

$$\phi_j = A_4 \exp[ik(bx_3 + x_1 - vt)] \quad (4)$$

따라서, 식(3), (4)를 식(1), (2)에 대입해서 풀게 되면, 8개 각각의 근에 대해서 4개 원소로 된 eigenvector( $A_1, A_2, A_3, A_4$ )가 존재하고, 8개 각각의 근  $b$ 와 eigenvector의 조

합은 모두 식(1), (2)를 만족하게 된다. 그런데, 기판에서는 깊이가 깊어질수록 표면파는 감소해야 하므로 기판에서는 4개, 그 위의 층들에서는 8개의 근을 갖게 된다.

#### 2.1.2. Transfer matrix method

1950년에 Thomason<sup>4)</sup>에 의해 최초로 도입된 Transfer matrix method는 최상부 층의 변위와 응력으로 하부 층의 변위와 응력을 표현해 주는 Transfer matrix를 이용해, 단순한 행렬의 곱으로 경계조건 행렬을 구하는 방법으로 표면탄성과의 전파특성을 나타내 주는 파동방정식(Governing Equation)의 해를 구하기 위해 수치 해석적 방법을 적용한다.

이때 각층의 계면 또는 표면에서의 경계조건을 구성하는 변수인 응력과 전기적 변위로 식(1)과 (2)를 정리하면 아래와 같이 표현된다.

(미분의 표현을 간단히 하기 위해서  $\frac{\partial y_{ij}}{\partial x_j} = y_{ij,j}$ 라 표기하기로 한다.)

$$T_{ij,j} = T_{i1,1} + T_{i2,2} + T_{i3,3} = -\omega^2 \rho U_i \quad (5-a)$$

$$D_{k,k} = D_{1,1} + D_{2,2} + D_{3,3} = 0 \quad (5-b)$$

$$T_{ij} = c_{ijk1} U_{k,1} + e_{kij} \phi_{,k} \\ = c_{ijk1} U_{k,1} + e_{1ij} \phi_{,1} + c_{ijk2} U_{k,2} + e_{2ij} \phi_{,2} + c_{ijk3} U_{k,3} + e_{3ij} \phi_{,3} \quad (5-c)$$

$$D_k = e_{kij} U_{i,j} - \epsilon_{ki} \phi_{,i} \\ = e_{ki1} U_{i,1} - \epsilon_{k1} \phi_{,1} + e_{ki2} U_{i,2} - \epsilon_{k2} \phi_{,2} + e_{ki3} U_{i,3} - \epsilon_{k3} \phi_{,3} \quad (5-d)$$

(단,  $k=1, 2, 3$ )

이때,  $x_2$  방향으로 변위나 전기장의 변화가 없으므로,<sup>5)</sup>  $dl dx_2 = 0$ 이라는 것을 고려하면

$$T_{i1,1} + T_{i3,3} = -\omega^2 \rho U_i \quad (6-a)$$

$$D_{1,1} + D_{3,3} = 0 \quad (6-b)$$

$$T_{ij} = c_{ijk1} U_{k,1} + e_{1ij} \phi_{,1} + c_{ijk3} U_{k,3} + e_{3ij} \phi_{,3} \quad (6-c)$$

$$D_k = e_{ki1} U_{i,1} - \epsilon_{ki} \phi_{,1} + e_{ki3} U_{i,3} - \epsilon_{ki} \phi_{,3} \quad (6-d)$$

(단,  $k=1, 2, 3$ )

따라서, 식(5)를 행렬 형태로 정리하면 아래와 같다.

$$\begin{bmatrix} T_{i3,3} \\ D_{3,3} \end{bmatrix} = -\omega^2 \rho I \begin{bmatrix} U_i \\ \phi \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} T_{i1,1} \\ D_{1,1} \end{bmatrix} \quad (7-a)$$

$$\begin{bmatrix} T_{i3} \\ D_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{i3k1} & e_{1i3} \\ e_{3k1} & -\epsilon_{31} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{k,1} \\ \phi_{,1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} c_{i3k3} & e_{3i3} \\ e_{3k3} & -\epsilon_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{k,3} \\ \phi_{,3} \end{bmatrix} = \Gamma^{31} \begin{bmatrix} U_{k,1} \\ \phi_{,1} \end{bmatrix} + \Gamma^{33} \begin{bmatrix} U_{k,3} \\ \phi_{,3} \end{bmatrix} \\ = -j\omega r \Gamma^{31} \begin{bmatrix} U_k \\ \phi \end{bmatrix} + \Gamma^{33} \begin{bmatrix} U_k \\ \phi \end{bmatrix} \quad (7-b)$$

식(7-b)를  $x_3$  방향에 대한 입자의 변위와 전위에 대하여 정리하면

$$\begin{bmatrix} U_{k,3} \\ \phi_{,3} \end{bmatrix} = X \begin{bmatrix} T_{i3} \\ D_3 \end{bmatrix} + j\omega r \Gamma^{31} \begin{bmatrix} U_k \\ \phi \end{bmatrix} \quad (X = [\Gamma^{31}]^{-1}) \quad (8-a)$$

또한, 식(7-a)를  $x_3$  방향에 대한 응력과 변위밀도에 대하여 정리하면

$$\begin{bmatrix} T_{i1} \\ D_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{i1k1} & e_{1i1} \\ e_{1k1} & -\epsilon_{11} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{k,1} \\ \phi_{,1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} c_{i1k3} & e_{3i1} \\ e_{1k3} & -\epsilon_{13} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{k,3} \\ \phi_{,3} \end{bmatrix} = \Gamma^{11} \begin{bmatrix} U_{k,1} \\ \phi_{,1} \end{bmatrix} + \Gamma^{13} \begin{bmatrix} U_{k,3} \\ \phi_{,3} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} T_{i1,1} \\ D_{1,1} \end{bmatrix} = (-j\omega r)^2 \Gamma^{11} \begin{bmatrix} U_k \\ \phi \end{bmatrix} - j\omega r \Gamma^{13} \begin{bmatrix} U_{k,3} \\ \phi_{,3} \end{bmatrix}$$

$$= (\omega r)^2 \Gamma^{11} \begin{bmatrix} U_k \\ \phi \end{bmatrix} - j\omega r \Gamma^{13} \left( X \begin{bmatrix} T_{i3} \\ D_3 \end{bmatrix} + j\omega r \Gamma^{31} \begin{bmatrix} U_k \\ \phi \end{bmatrix} \right)$$

이므로

$$\begin{bmatrix} T_{i3,3} \\ D_{3,3} \end{bmatrix} = -\omega^2 \rho I \begin{bmatrix} U_i \\ \phi \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} T_{i1,1} \\ D_{1,1} \end{bmatrix}$$

$$= -\omega^2 \rho I \begin{bmatrix} U_i \\ \phi \end{bmatrix} - \left\{ (\omega r)^2 \Gamma^{11} \begin{bmatrix} U_k \\ \phi \end{bmatrix} - j\omega r \Gamma^{13} \left( X \begin{bmatrix} T_{i3} \\ D_3 \end{bmatrix} + j\omega r \Gamma^{31} \begin{bmatrix} U_k \\ \phi \end{bmatrix} \right) \right\}$$

$$= j\omega r \Gamma^{13} X \begin{bmatrix} T_{i3} \\ D_3 \end{bmatrix} + \frac{1}{j\omega} (-\omega^2 \rho I + \omega^2 r^2 \Gamma^{11} - \omega^2 r^2 \Gamma^{13} \Gamma^{31}) \begin{bmatrix} j\omega U_k \\ j\omega \phi \end{bmatrix} \quad (8-b)$$

따라서, 각각의 계면 또는 표면에서의 경계조건을 구성하는 변수들로 파동방정식을 두께에 따라  $\tau$ 라는 행렬로 표현한다면 아래와 같다.

$$\tau = [T_{13}, T_{31}, D_3, j\omega U_1, j\omega U_3, j\omega \phi]^T \quad (9)$$

또한, 식(9)에 의해 식(8)은 식(10)과 같이 정리된다.

$$\frac{d\tau}{dx_3} = j\omega A \tau = j\omega \begin{bmatrix} rT^{13}X & (\rho I - r^2\Gamma^{11} + r^2\Gamma^{13}\Gamma^{31}) \\ \frac{1}{j\omega}X & rXT^{31} \end{bmatrix} \tau \quad (10)$$

이를 상 상수( $ik$ , rad/m)로 표현하면,  $\omega$ (angular frequency, rad/s) =  $kv$ 이므로 식(10)은 식(11)로 정리된다.

$$\frac{d\tau}{dx_3} = ikA \tau = ik \begin{bmatrix} -T^{13}X & u_p^2 \rho I_4 - T^{11} + T^{13}XT^{31} \\ X & -XT^{31} \end{bmatrix} \tau \quad (11)$$

이때,  $\rho$ 는 밀도,  $v_p$ 는 상속도,  $I_4$ 는 (4,4)원소만 0인 단위 행렬이다.

식(11)의 해는 다음과 같은 행렬의 지수함수로서  $x_3$ 에서의 상태벡터를  $x_3+h$ 의 상태벡터에 매핑하는 역할을 한다.

$$\tau(x_3+h) = \exp(ikAh) \cdot \tau(x_3) = \phi(h) \cdot \tau(x_3) \quad (12)$$

이때, 행렬  $\phi(h)$ 는 Transfer matrix라 하며 유용한 대수적 성질이 많이 알려져 있다. 다층구조에서 각 층은 같은 형태의 상 미분 방정식을 만족하므로, 각각의 Transfer

matrix를 가지게 된다. 이렇게 계면을 건너서 연속된 변수들로 벡터를 구성한다면, 최상위 표면에서의 상태벡터  $\tau_u$ 와  $\tau_i$ 의 관계는 Transfer matrix의 곱으로 다음과 같이 표현될 수 있다.

$$\Phi = \phi_v(h_n)\phi_m(h_m)\cdots\phi_2(h_2)\phi_1(h_1)$$

$$\tau_u = \Phi \tau_i \quad (13)$$

그런데, 경계조건에 의해  $x_3 < 0$ 인 부분의 기판에서는 음의 무한대일 때 모든 변수가 0이 되어야 한다. 기판의 A의 eigenvector로 이루어진  $8 \times 8$  행렬을 P라 하면, 모든  $\tau$ 는 정상모드 PY의 선형조합으로 표현될 수 있다. 여기서 Y는 정상상태벡터라고 한다. 이들 모드중 4개만이 깊이에 따라 감쇠하므로 반무한 기판에서 상태벡터는 다음과 같이 표현된다.

$$\tau(0) = P_p Y_p(0) \quad (14)$$

여기서  $P_p$ 는 P의  $4 \times 4$  부행렬로 감쇠하는 모드를 나타내며,  $Y_p$ 는 이와 관련된 정상상태벡터 Y의  $4 \times 1$ 의 부벡터이다.

Open circuit 경계조건을 적용하면

$$[0 \ 0 \ 0 \ 0 \ ikU_i \ ik\Phi]_u = \Phi \tau(0) \quad (15-a)$$

여기서, 처음의 4개의 식만 고려하면

$$[0 \ 0 \ 0 \ 0] = \Phi_u P_p Y_p(0) \quad (15-b)$$

여기서, 아랫첨자  $u$ 는 윗쪽절반을 의미하며, 식(11)은 다음과 같이 행렬식이 0이 될 때만 의미있는 근이 나오게 된다.

$$\det[\Phi_u P_p] = 0 \quad (15-c)$$

이를 행렬로 표현하면

$$f_{sc}^b(v_p) = \det \begin{bmatrix} P_p(1:3,:) \\ P_p(8,:) \end{bmatrix} = 0 \quad (15-d)$$

결국, 속도  $v_p$ 를 찾는 수치해석 과정은  $\exp(ikAh)$  Transfer matrix를 통해 식(15-c)을 구한 후 행렬식이 0이 되는 점을 찾는 작업을 수행한다. 하지만 실제 계산시  $\exp(ikAh)$  Transfer matrix는 역행렬 계산부분에서 숫자가 지나치게 작아지면서 underflow 에러를 유발하거나 계산 루틴에서 지나치게 작은 숫자로 인해 부정확한 결과가 나올 수 있는 경고 메시지를 출력하여 지수 함수의 테일러 확장을 이용하여 변수를 행렬로 대입하여 표현하였다. 이 방법은 각 항의 계산이 간단하고 무리가 없어 정확한 결과를 기대할 수 있는 반면에 계산량이 증가하면서 계산 시간이 현저히 증가하였다.

최상위 표면에서의 경계조건이 open circuit이 아니고 short circuit일때 경계조건은  $T_{31} = T_{32} = T_{33} = 0$ ,  $\Phi = 0$ 이다.

이 경우에도 식(15)과 유사한 모양으로 정리된다.

$$[0 \ 0 \ 0 \ D_3 \ ikU_i \ 0]_u = \Phi\tau(0) \quad (16-a)$$

이를 행렬로 표현하면

$$f_{oc}^{bc}(v_p) = \det \begin{bmatrix} P_p(1:3,:) \\ P_p(4,:) + j\frac{\epsilon_0}{v_p}P_p(8,:) \end{bmatrix} = 0 \quad (16-b)$$

이 된다.

2.1.3. 계산에 사용된 GaN와 사파이어의 물질계수  
연구자들에 의해 발표된 GaN(육방정계,  $mm2$ )와 사파이어(삼사정계,  $\bar{3}m$ ) 탄성계수는 아래와 같다.<sup>6)</sup>

$$c(\text{GaN}) = \begin{bmatrix} 367 & 135 & 103 & 0 & 0 & 0 \\ 135 & 367 & 103 & 0 & 0 & 0 \\ 103 & 103 & 405 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 95 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 95 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 116 \end{bmatrix}$$

$$c(\text{sapphire}) = \begin{bmatrix} 494 & 158 & 114 & -23 & 0 & 0 \\ 158 & 494 & 114 & 23 & 0 & 0 \\ 114 & 114 & 496 & 0 & 0 & 0 \\ -23 & 23 & 0 & 145 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 145 & -46 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -46 & 168 \end{bmatrix}$$

GaN(육방정계,  $mm2$ )의 압전계수는 아래와 같이 간단히 되고 연구자들에 의해 보고 되고 있으며, 사파이어(삼사정계,  $\bar{3}m$ )의 경우는 대칭중심을 갖는 결정이므로 모든 압전계수가 0이 되어 압전효과를 기대할 수 없다.<sup>7)</sup>

$$e(\text{GaN}) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & -0.304 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -0.304 & 0 & 0 \\ -0.41 & -0.41 & 0.85 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

유전율 계수는 아래와 같다.

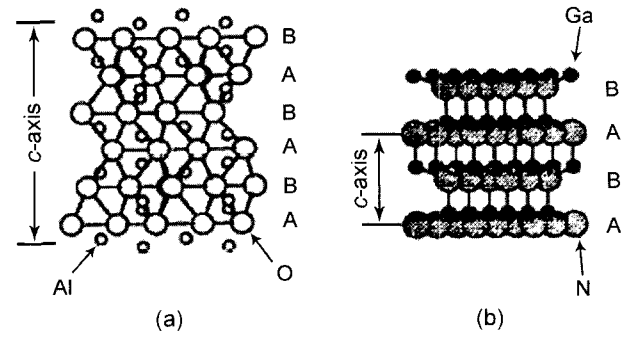
$$\epsilon(\text{GaN}) = \begin{bmatrix} 10.4 & 0 & 0 \\ 0 & 10.4 & 0 \\ 0 & 0 & 9.5 \end{bmatrix}$$

$$\epsilon(\text{sapphire}) = \begin{bmatrix} 9.34 & 0 & 0 \\ 0 & 9.34 & 0 \\ 0 & 0 & 11.54 \end{bmatrix}$$

GaN와 사파이어의 밀도는 각각 6.087와 4.0이다. 위의 계수들은 모두 MKS 단위계를 따르며, 밀도는  $\rho \times 103 \text{ kg/m}^3$ , 탄성계수는  $c \times 109 \text{ N/m}$ 이고 압전계수, 유전율계수는 무차원이다.

#### 2.1.4. GaN/사파이어의 구조

사파이어는 산소이온( $O^{2-}$ )과 알루미늄 이온( $Al^{3+}$ )으로 구



**Fig. 1.** Structures of sapphire and gallium nitride. (a) hcp structure of the  $O^{2-}$  ions in  $Al_2O_3$  with the  $Al^{3+}$  ions occupying 2/3 of the octahedral sites and (b) hcp structure of the N atoms in GaN with the Ga atoms occupying 1/2 of the tetrahedral sites.

**Table 1.** Crystallographic Data of GaN and  $Al_2O_3$

Parameters	$Al_2O_3$	GaN
Structure type	corundum	wurtzite
Crystal system	trigonal	hexagonal
Space group	$R\bar{3}c$ (No. 167)	$P6_3mc$ (No. 186)
Origin	$\bar{3}c$	3 m1
Lattice parameters <sup>a</sup>	$a=4.758 \text{ \AA}$ $c=12.991 \text{ \AA}$	$a=3.189 \text{ \AA}$ $c=5.185 \text{ \AA}$
$Z^b$	6	2
Coordination	$O^{2-}$ : position: 18c site symmetry: 2 $(x, y, z)=(0.306, 0, 1/4)$ $Al^{3+}$ : position: 12c site symmetry: 3. $(x, y, z)=(0, 0, 0.3520)$	$N^{3-}$ : position: 2b site symmetry: 3m. $(x, y, z)=(0, 0, 0.375)$ $Ga^{3+}$ : position: 2b site symmetry: 3m. $(x, y, z)=(0, 0, 0)$

<sup>a</sup>Reference 8

<sup>b</sup>Number of chemical formulae in a unit cell.

성되어 있다.  $O^{2-}$ 는 조밀육방(Hexagonal Close Packed: HCP) 구조이며, 반면에  $Al^{3+}$ 는 팔면체 자리의 2/3을 차지하고 있다(Fig. 1(a)).

Ahrens의 방식에 의하면 이온반경은 각각  $r(O^{2-})=1.40 \text{ \AA}$ ,  $r(Al^{3+})=0.51 \text{ \AA}$ 이고, c인 육방축 좌표계를 사용하여 이온의 위치와 배위수는 Table 1와 같이 보여진다.

Gallium nitride는 질소원자가 hcp 구조를 형성하고 갈륨원자는 사면체 자리의 1/2를 차지하고 있는 wurtzite 구조이다(Fig. 1(b)).

#### 2.2. 초기조건

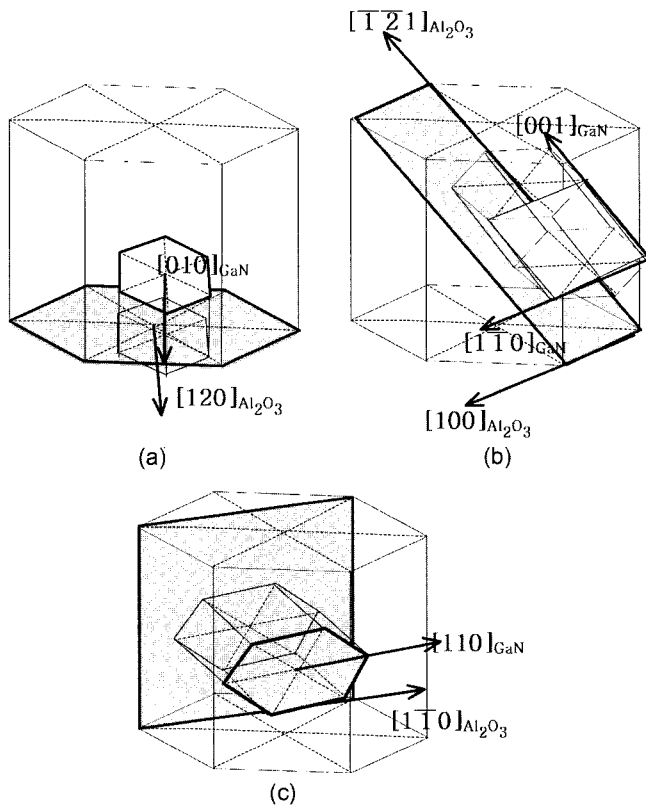
사파이어 기관위에 GaN 박막은 Table 2와 같은 결정방향과 면으로 성장한다. 계산은 사파이어 기관의 세 평면을 기준으로 하여 하였으며 그 결정면과 오일러 각도는 Table 3과 같으며 구조는 Fig. 2와 같다. 결정방향과 결정

**Table 2.** Epitaxial Relationships for the Growth of GaN Crystal

Growth direction relationship		In-plane direction relationship	
Epilayer	Substrate	Epilayer	Substrate
(001)GaN	(001)Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	[100] <sub>GaN</sub>    [110] <sub>Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub></sub>	
		[010] <sub>GaN</sub>    [120] <sub>Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub></sub>	
(110)GaN	(010)Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	[110] <sub>GaN</sub>    [100] <sub>Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub></sub>	
		[001] <sub>GaN</sub>    [120] <sub>Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub></sub>	
(001)GaN	(110)Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	[110] <sub>GaN</sub>    [110] <sub>Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub></sub>	

**Table 3.** Euler Angle of GaN/Sapphire Structure according to the Orientation of Sapphire

	Euler angle of GaN ( $\phi^\circ, \theta^\circ, \Psi^\circ$ )	Euler angle of sapphire ( $\phi^\circ, \theta^\circ, \Psi^\circ$ )
(001)GaN/ (001)sapphire c-plane	0, 180, 0~180	0, 180, 0~180
(110)GaN/ (010)sapphire r-plane	90, 90, 0~180	120, 57.61, 0~180
(001)GaN/ (110)sapphire a-plane	0, 180, 0~180	90, 90, 0~180



**Fig. 2.** Geometry for (a) (001)GaN/(001)sapphire, (b) (110)GaN/(010)sapphire, and (c) (001)GaN/(110)sapphire.

축계와의 각도에 따른 표면파 속도의 계산에 앞서 사파이어의 SAW 특성을 감안하여 속도는 3500 m/s~12000 m/s를

10 m/s단계로, kH는 0.01~10.01에 대해 0.2 단계로 범위를 한정하였다.

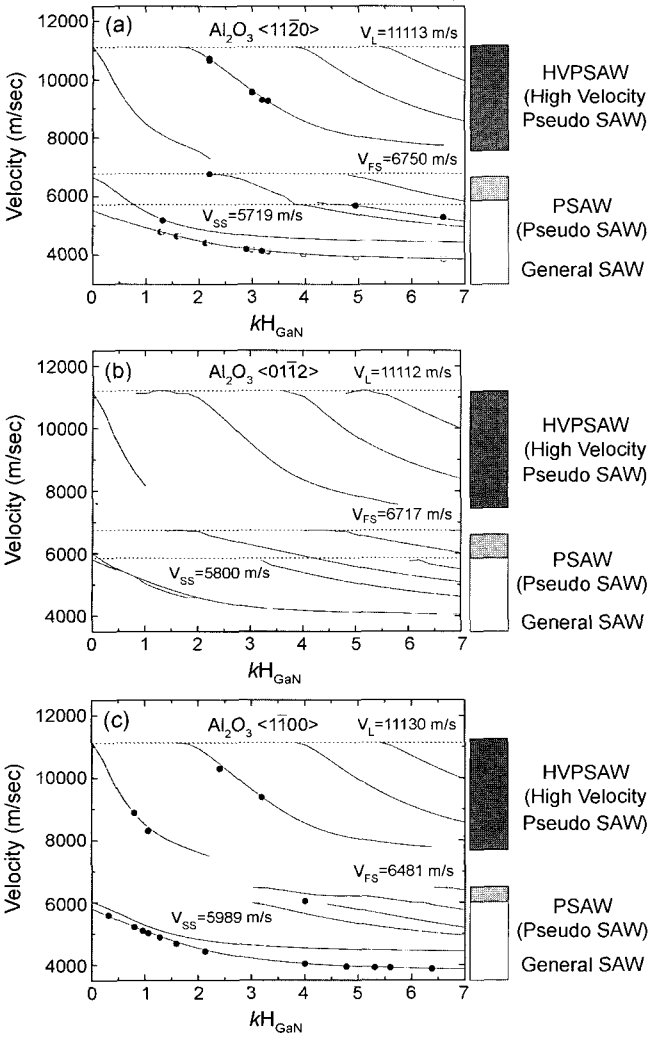
### 3. 실험방법

GaN 박막은 c-면, r-면, a-면 사파이어 기판위에 3개의 2인치 웨이퍼를 동시에 넣을 수 있는 MOCVD 장치를 이용하여 성장시켰다. 성장온도는 1,050°C이고, 반응기 압력은 100 torr로 유지시켰다. Ga의 원료물질로는 trimethyl-gallium (TMGa), 질소의 원료물질은 암모니아(NH<sub>3</sub>)이다. 암모니아와 TMGa는 수소를 수송가스로 이용하여 각각 6 slm and 60 sccm로 공급하였다. 사파이어 위에 금속유기 화학증착법으로 성장시킨 GaN 박막이 에피성장했는가를 확인하기 위해 고분해능 X-선 회절기를 이용해 분석하였다. Unapodized IDT(Inter-Digital Transducer) 전극을 사진 식각공정을 사용하여 GaN/사파이어의 표면에 형성시켰다. 사용한 전극재료는 Al-0.5%Cu이며 두께는 150 nm로 하였다. 전극 finger는 50쌍이며 파장( $\lambda$ )은 4~10  $\mu$ m 범위이다. 각 소자의 SAW 특성은 HP8753D 네트워크분석장치를 사용하여 측정하였다. wafer probe(Cascade Microtech)를 가지고, 측정주파수 200 MHz~4 GHz에서 측정하였다.

### 4. 결과 및 고찰

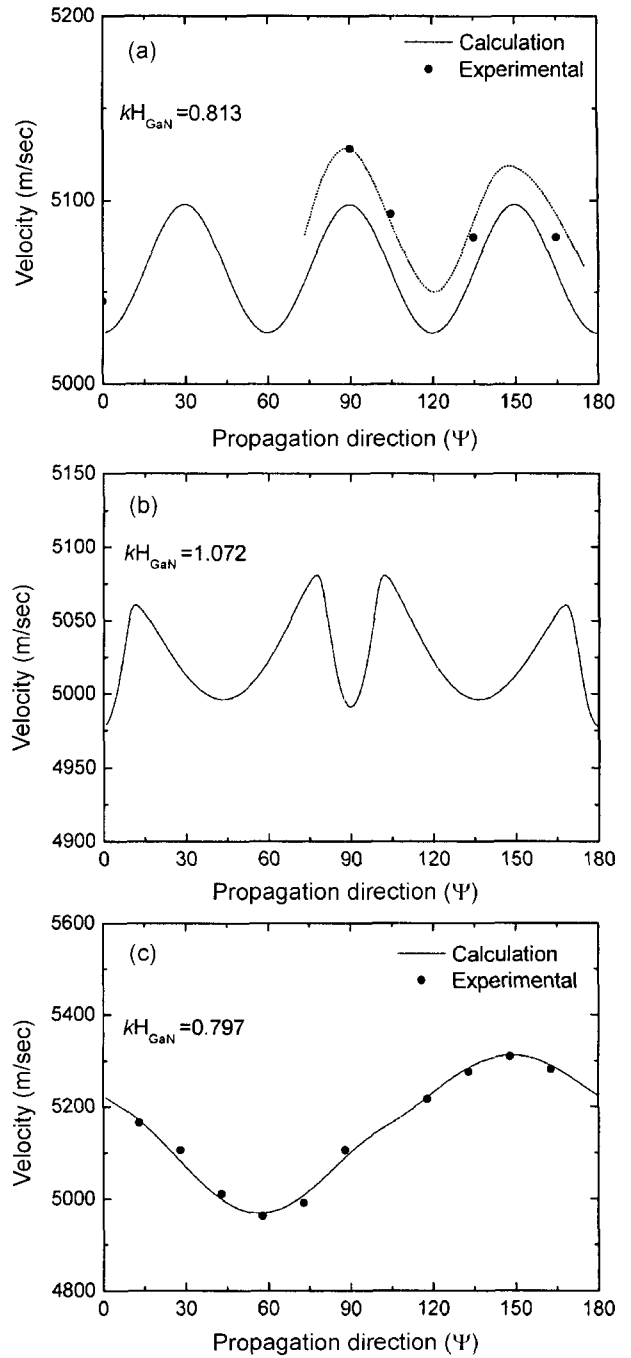
동일한 GaN의 두께로 각 평면에서 kH에 따른 전파속도 비교하기 위해 Fig. 3에서 kH에 따른 전파속도를 시뮬레이션을 하였다.

사파이어 c-면에서 GaN은 c축으로 성장하며 6 mm 점군을 가지므로 등방성탄성(isotropic elastic)과 압전성을 갖는다. 반면에 사파이어는 3 m이며, c-면 방향으로는 약한 정전기적 결합이므로 압전성은 없지만, 탄성특성은 6대칭을 가지고 있다. GaN과 사파이어의 a축 사이를 30° 회전을 시켜 격자일치를 할 수 있으며 이때, 사파이어의 <1120> 방향으로 시뮬레이션한 전파속도가 가장 큰 표면탄성파속도를 가졌으며 실험치와 일치하였다(Figs. 3(a), 4(a)). 이는 Fig. 5(a)에서 전기기계결합계수가 <1120>으로 최고 값을 가지는 것과 유사하다. 하지만, 16.09%의 매우 큰 격자 불일치가 생기기 때문에 전기기계결합 계수(k<sup>2</sup>) 값이 낮은 원인이 된다. 기판 위 다수의 박막 층이 형성되면 Rayleigh 파의 첫 번째 고차모드인 Sezawa파가 나타나는데, 이는 기본모드와 거의 유사한 특성을 보여주므로 Generalized-Rayleigh SAW(GSAW)라고 불린다. 하지만, 사파이어의 횡파 속도에 비해 GaN의 벌크 횡파의 속도가 더 크기 때문에 표면파는 사파이어의 벌크 횡파 속도에 접근하면서 그 구조는 사파이어의 벌크 횡파와 비슷해진다. 또한, GaN이 박막일 경우 그 두께가 비교적 얇아서 사파이어의 영향을 무시할 수 없는 경우에는 SAW는 사파이어를 더 깊



**Fig. 3.** The  $kH$  of GaN dependence of the measured SAW velocities and with calculated ones on (a) (001)GaN/(001)sapphire, (b) (110)GaN/(010)sapphire, and (c) (001)GaN/(110)sapphire. The solid lines are the values of calculation, and the circles are the values of experiment.

계 투과해 들어가게 되는데 결국, 임계속도(cut-off velocity)에서 표면파는 표면을 따라 전파하는 측면회파가 된다. 이 파는 사파이어의 깊이 방향으로 변위의 진폭이 감소하지 않는 partial wave이다. 즉, 파수가 복소수가 되어, 파의 진폭이  $\exp(-\alpha x)$ 에 비례하여 감소하는 표면파이다.  $\alpha$ 는 전파방향에 따라 매우 작아서 무시할 수도 있다. 이를 의사표면탄성파(PSAW, Pseudo SAW)라 하며 일반적으로 GSAW보다 약간 빠른 속도를 나타낸다. 또한, 전파방향과 거의 평행한 방향으로의 변위를 갖는 고속의사표면탄성파(HVPSAW, High Velocity PSAW)가 있다. 이때, 사파이어의 수직 전단속도(shear horizontal,  $V_{SS}$ )는 5719 m/sec, 수평 전단속도(shear vertical,  $V_{FS}$ )는 6750 m/sec, 그리고 벌크회파(longitudinal,  $V_L$ )는 11113 m/sec이다. 사파이어의 벌크파



**Fig. 4.** The propagation direction of GaN dependence of the measured SAW velocities and with calculated ones on (a) (001)GaN/(001)sapphire, (b) (110)GaN/(010)sapphire, and (c) (001)GaN/(110)sapphire. The solid lines are the values of calculation, and the circles are the values of experiment.

속도에 맞게  $V_{FS}$ 와  $V_{SS}$  사이에 존재하는 PSAW(pseudo SAW)가 관찰되며,  $V_{FS}$  보다 빠른 HVPSAW도 성공적으로 계산되었다. 사파이어의 벌크파 속도에서 GaN의  $kH$ 가 커질수록 전파속도가 느려진다. 이는 막 두께가 두꺼

위지면서 GaN 박막이 SAW 전파에 차지하는 비율이 커지기 때문이다.

사파이어 r-평면에서 GaN 박막은 a축 방향으로 성장하며 사파이어의  $\langle 01\bar{1}2 \rangle$  방향으로 시물레이션하였다(Fig. 3(b)). r-면은 사파이어의 c축이 기저면에 대해  $32^\circ$ 이면 된

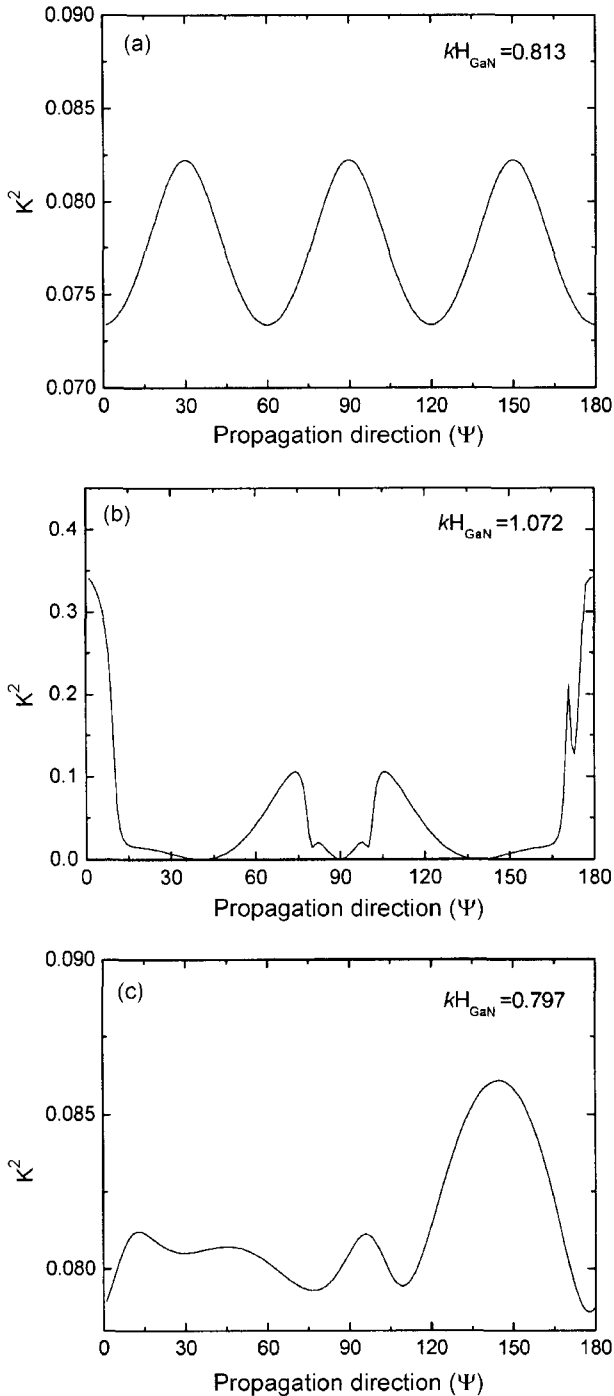


Fig. 5. The  $k^2$  of GaN dependence of the propagation direction on (a) (001)GaN/(001)sapphire, (b) (110)GaN/(010)sapphire, and (c) (001)GaN/(110)sapphire.

다. 여기서, 면 (012)와 (102)이 산소이온( $O^{2-}$ )의 배열은 같으나 알루미늄이온( $Al^{3+}$ )의 배열이 대칭적으로 서로 다르다. Fig. 4(b)가  $90^\circ$ 에 따라 대칭인 것은 이와 같은 사파이어의 결정특성 때문이다. 게다가 (102)는 c-축을 중심으로  $60^\circ$  회전하면 (012)과 일치한다. 사파이어 (012)면에 GaN (110)면을 병진대칭 시키면 사파이어  $[\bar{1}21]$  방향축이 GaN의 c축보다 3배정도 긴 것을 알 수 있으며, 격자불일치가 1.11%로 매우 양호한 것을 알 수 있다. 사파이어 c-면에서와 같이 r-면에서도  $V_{FS}$ 와  $V_{SS}$  사이에 존재하는 PSAW (pseudo SAW)가 관찰되며,  $V_{FS}$  보다 빠른 HVPSAW도 성공적으로 계산되었으며 실험치와 일치하였다.

사파이어 a-면에서 GaN 박막은 a축 방향으로 성장하며 사파이어의  $\langle 1\bar{1}00 \rangle$  방향으로 시물레이션하였다(Fig. 3(c)). GSAW의 경우 다른 면에서보다 약간 빠른 경향을 보여 주었다. 다른면에서와 같이 PSAW와 HVPSAW가 계산되었으며 각각의 영역에서 탄성파가 존재하지 못하는 영역이 존재하였다. 이는 이 영역의 속도를 가지는 partial wave들의 조합들로는 경계조건을 만족시키지 못하기 때문이다.

Fig. 4는 전파방향에 따른 GSAW의 전파 속도값을 계산 및 측정하였다. c-면의 경우 유사한 경향을 나타내었으며, a-면은 이론치와 실험치가 일치함을 알 수 있다. c-면에서는  $\Psi$ 가  $30^\circ, 90^\circ, 120^\circ$  즉,  $\langle 1\bar{1}20 \rangle$  방향축에서 최고전파속도를 갖았으며 사파이어의 6 mm 결정구조의 특성을 반영한다.  $\langle 1\bar{1}20 \rangle$  방향에서 전파속도가 커지는 것은 이 방향축에 나타나는 Al-O-결합이 강한 탄성결합으로 탄성계수가 크기 때문이다. r-면은  $90^\circ$ 를 중심으로 대칭이며 이 평면이 대칭 결정구조 특성을 반영한 것이다. a-면은 정현파 모양으로  $140^\circ$ 에서 최고 전파속도를 갖는 어떤 주기적 특징을 발견하진 못했다.

Fig. 5는 전파방향에 따른 전기기계결합계수로 전파속도 그래프와 그 모양이 유사하다. 이는 압전체가 수직분극에 따라 재료의 탄성상수(elastic stiffness)가 변하게 되는데 분극률의 변화가 SAW의 속도를 제어하기 때문이다. 특이점은 r-면에서  $\Psi$ 가  $0^\circ$ 일때 상당히 큰  $k^2$  값을 가지다는 점이다. 이때의 GaN에서 SAW 전파 방향이 오일러 각도는 (90, 90, 0)에 해당하며, 이는 GaN의 극축이 SAW의 전파면과 수직을 이룰 때이다. 이는 r-면이 다른 면에 비해 격자도 잘 일치하며,<sup>8)</sup> c축 방향 결합은 약한 정전기적 인력이지만 -Al-O-결합은 강한 탄성결합으로 탄성계수가 크기 때문이다. 이 전파방향을 이용한다면 빠른 전파 속도를 가지면서도  $k^2$ 이 큰 SAW 소자를 제작할 수 있을 것으로 기대된다.

### 5. 결 론

GaN의 두께에 따라 각 면에서의 전파속도는 사파이어의 c-면이 다른 면에 비해 약간 빨랐으나 r-면에서 우수

한 전기기계결합 계수( $k^2$ )가 계산되었다. 이는 압전체의 수직분극이 사파이어의 결정방향에 따라 달라 재료의 탄성상수가 영향을 받기 때문이다. 또한, 고속 의사표면파인 경우 10000 m/sec 이상의 높은 속도 값을 가지고 있음을 확인할 수 있었다. 따라서, 재료의 탄성상수와 전기기계결합계수는 기관의 절단방향과 방향성에 좌우됨을 알 수 있었다.

### 감사의 글

본 연구는 정보통신부의 IT대학연구센터지원사업의 지원으로 수행되었으므로 이에 감사드립니다.

### REFERENCES

1. R. J. J. Rioboo, "Hypersonic Characterization of Sound Propagation Velocity in  $Al_xGa_{1-x}N$  Thin Films," *J. of Appl. Phys.*, **92** [11] 6868-74 (2002).
2. K. C. Whang, "Study on SAW Devices Technology," Yonsei University, 8, 1990.
3. B. A. Auld, "Surface Elastic Wave," *Ultrason. Sym. Proc. IEEE*, 1-15 (1970).
4. H. F. Tiersten, "Elastic Surface Waves Guided by Thin Films," *J. Appl. Phys.*, **40** [2] 770 (1969).
5. E. L. Alder, "Matrix Methods Applied to Acoustic Waves in Multilayers," *IEEE Ultrason. Ferroelect. Freq. Contr.*, **37** [6] 485-90 (1990)
6. J. F. Rosenbaum, Bulk Acoustic Wave Theory and Devices, pp. 451-58, Artech House Boston/London, 1945.
7. H. Goldstein, Classical Mechanics, 2nd Edition, Addison-Wesley Publishing Co., Reading, 1980.
8. P. Kung and C. J. Sun, "Crystallography of Epitaxial Growth of Wurtzite-type Thin Films on Sapphire Substrates," *J. Appl. Phys.*, **75** [9] 4515-19 (1994).