

Crystallographic orientation-dependent properties of β -Ga₂O₃ single crystals investigated by raman scattering

Dae-Uk Kim, Yun-Jin Kim, So-Min Shin, Eun-Jeong An, Eun-Seo Lee, Mi-Seon Park, Kwang-Hee Jung, Yun-Ji Shin*, Seong-Min Jeong*, Jung-Gon Kim† and Won-Jae Lee†

Department of Advanced Materials Engineering, Dong-Eui University, Busan 47340, Korea

*Korea Institute of Ceramic Engineering and Technology, Jinju 52851, Korea

(Received September 1, 2025)

(Revised September 8, 2025)

(Accepted September 10, 2025)

Abstract β -Ga₂O₃, with an ultrawide bandgap of ~4.9 eV, a high critical electric field, and excellent stability, has emerged as a promising candidate material for next-generation power and optoelectronic devices. Wafer technology has rapidly advanced through large-diameter bulk growth using the EFG (Edge-defined Film-Fed Growth) and VB (Vertical Bridgman) methods; however, exploiting the strong anisotropy inherent to its monoclinic crystal structure remains a critical challenge. The electrical and optical properties vary significantly with crystallographic orientation, both out-of-plane and in-plane of β -Ga₂O₃. In particular, the (100) surface has been widely employed for device fabrication but has attracted attention due to its low surface energy and tendency to form twin boundaries. In this study, unintentionally doped (UID) β -Ga₂O₃ single crystals grown by the EFG method were processed into a (100) oriented sample, and its orientation was identified using high-resolution X-ray diffraction (HR-XRD) and Raman spectroscopy. Raman analysis revealed that phonon mode intensities varied markedly among the orientations depending on lattice symmetry. Angle-resolved Raman measurements on the (100) surface further showed that A_g and B_g modes exhibited 2-fold, 4-fold, or complete symmetry, indicating a strong dependence on the interaction between the incident light polarization and the crystallographic orientation of β -Ga₂O₃. These results demonstrate that Raman spectroscopy is an effective, non-destructive technique for probing crystallographic orientation and anisotropy in β -Ga₂O₃ single crystals, providing fundamental insights for device design, optimization of wafer fabrication process, and the evaluation of stress and defects in β -Ga₂O₃-based technologies.

Key words β -Ga₂O₃, Edge-defined Film-Fed Growth, UID, X-ray diffraction, Raman scattering spectroscopy

라만 산란법을 이용한 β -Ga₂O₃ 단결정의 면방위별 결정학적 특성 연구

김대욱, 김윤진, 신소민, 안은정, 이은서, 박미선, 정광희, 신윤지*, 정성민*, 김정곤†, 이원재†

동의대학교 신소재공학과, 부산, 47340

*한국세라믹기술원, 진주, 52851

(2025년 9월 1일 접수)

(2025년 9월 8일 심사완료)

(2025년 9월 10일 게재확정)

요약 β -Ga₂O₃는 약 4.9 eV의 초와이드 밴드갭, 높은 항복 전계, 우수한 안정성을 지닌 차세대 전력·광전자 소자 후보 소재이다. EFG(Edge-defined Film-Fed Growth) 및 VB(Vertical Bridgman) 법을 통한 대구경 기관 성장기술은 빠르게 발전하고 있으나, 단사정계 구조로 인한 강한 이방성의 활용은 여전히 중요한 과제로 남아있다. β -Ga₂O₃는 결정 축방향(out-of-plane) 및 결정 면방향(in-plane) 배향에 따라 전기적·광학적 특성이 크게 달라지며, 특히 (100) 면은 소자 제작에서 널리 활용되어 온 동시에 낮은 표면에너지와 쌍정 결함 문제로 주목받아 왔다. 본 연구에서는 EFG 법으로 성장한 UID(Unintentional doping) β -Ga₂O₃ 단결정에서 (100) 시편을 제작하여 HR-XRD(High-Resolution X-ray Diffractometer)와 라만 산란법으로 면방위를 확인하였다. 특히 (100) 면에 대해 각도 분해 라만 측정을 수행한 결과, A_g 모드와 B_g 모드들이 2-fold, 4-fold 및 완전 대칭성을 보이는 것이 확인되었고, 입사되는 광의 전기장 방향과 β -Ga₂O₃ 면방위와의 상호작용에 민감하게 반응함을 확인하였다. 본 연구는 라만 산란법이 β -Ga₂O₃ 단결정의 결정학적 배향과 이방성을 비파괴적으로 규명할 수 있는 효과적 도구를 보여주며, 향후 소자 설계와 가공 공정 최적화, 결정 내 응력 및 결함 분석에 활용될 수 있는 기초 자료를 제공한다.

†Corresponding author

E-mail: kimjg@deu.ac.kr, leewj@deu.ac.kr

1. 서 론

초와이드 밴드갭(ultrawide bandgap, UWBG) 반도체는 차세대 전력 소자 및 자외선 검출 응용에서 유망한 소재로 주목받고 있다. 그 중 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 는 약 4.9 eV의 넓은 밴드갭과 높은 항복 전계(~ 8 MV/cm) 그리고 우수한 열적·화학적 안정성이라는 특성을 가지고 있으며, 용융 기반 성장법을 통해 대구경 단결정 웨이퍼 제조가 가능하다는 점에서 기존의 와이드 밴드갭 반도체인 SiC나 GaN 대비 차별화된 경제적 장점을 가지고 있다[1-5]. 용액 기반 성장법 중 EFG(Edge-defined Film-Fed Growth)법을 통해 현재 2, 4인치급 기판은 상용화 되었고, 최근 VB(Vertical Bridgman)법을 통해 6인치 급 벌크 성장 연구가 보고되어 산업적 활용 가능성이 확대되고 있다 [6,7]. 이러한 기판 기술의 발전에도 불구하고 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 의 단사정계(monoclinic) 구조로 인한 강한 이방성(anisotropic)으로 인해 Ga_2O_3 기반 소자응용은 여전히 큰 과제로 남아있다. $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 는 결정 축방향(out-of-plane)과 결정 면 방향(in-plane)에 따른 전기적·광학적 물성이 크게 달라지며, 이는 소자 특성과 가공 안정성에 직접적인 영향을 미친다[8]. 특히, $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ (100) 면은 소자제작에 널리 활용되는 주요 면방위이지만, 낮은 표면에너지로 인해 핵생성이 어려워 쌍정(twin boundary) 결함이 쉽게 형성되는 문제가 지적되어 왔다. 이러한 결함은 에피택시 성장과 소자 동작에 부정적인 영향을 미치기 때문에 면방위에 따른 이방성 분석을 통한 근본적인 이해가 필요하다.

라만 산란법(Raman scattering spectroscopy)은 시편 전처리가 필요 없는 광(레이저)을 이용한 비파괴적인 측정법으로 결정 내 격자진동의 정보(포논모드)를 취득함으로써 결정의 구조적·광학적 특성을 정밀하게 파악할 수 있는 분석법이다. 특히, $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 와 같이 강한 비등방성의 단사정 결정 구조를 가지는 물질에서는 결정 면방위 확인은 물론 결정 면방위에 따르는 다양한 광학포논모드의 강도 변화를 통해 결정의 대칭성 및 결정학적 배향을 신속하게 관별할 수 있다. 더욱이, XRD 분석법에 비해 빠르고 용이하므로 연구 초기 단계에서 면방위 식별 및 결정품질 평가에 유용한 도구로 활용될 수 있다. 한편, Ga_2O_3 기반 소자 제작 시 원하는 목적에 부합하는 물성을 가지는 면방위의 기판을 사용하게 되는데, 최근 우리는 라만 측정 시 시편이 놓이는 각도에 따라, 즉 레이저 입사빔의 전기장 방향과 Ga_2O_3 결정 면방향이 이루는 각도에 따라 측정된 광학포논모드의 강도변화가 발생하여 연구자들이 결과 분석에 혼란을 겪고 있는 것을 인지하였다.

본 연구에서는 EFG법으로 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ (001) 시드를 사용하여 [010] 방향으로 성장시킨 UID(Unintentional doping) 단결정을 준비하였다. DWS(Diamond Wire Saw)와

MP(Mechanical Polishing) 공정을 통해 $10\text{ mm} \times 10\text{ mm}$ 크기의 (100) 면방위 시편을 제작하였다. 제작된 시편은 고분해능 X선 회절(HR-XRD) 측정을 통해 면방위를 확인하였으며, 이를 토대로 라만 산란 분석을 수행하였다. (100) 면방위 시편으로부터 관측된 라만 스펙트럼의 광학포논모드 강도는 $A_g(6)$ 포논모드 강도를 기준으로 강도 정규화(intensity normalization)를 실시함으로써, 다른 광학포논모드들과의 강도비교가 가능하도록 정리하였다. $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ (100) 면은 결정 성장 용이성으로 인해 초기 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 단결정 연구와 전력소자 제작에서 사용된 면방위로 알려져 있다[9,10]. 라만 산란 측정에서는 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ (100) 면에 대해 후방산란배치를 적용하여 $10\text{ mm} \times 10\text{ mm}$ 사각시편의 좌측 라인(법선)을 기준으로 0° 부터 360° 까지 10° 간격으로 회전시키며 라만 스펙트럼을 취득하였으며, 관측된 각 광학포논모드의 각도 변화에 대한 강도를 플롯하는 폴라로그램(polarogram)을 작성하였다. 본 연구에서는 라만 산란법을 통한 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 의 분광학적 결정성 평가, 응력 상태 및 결합 분석 방법에 대한 가이드 라인 제공과 더불어 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 기반 면방위에 따른 최적 소자 설계 및 가공 공정 제어에 활용할 수 있는 기초 자료를 제공할 것으로 기대한다.

2. 실험 방법

$\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 단결정은 EFG법을 통해 성장되었으며, 원료로는 5 N(99.999%) 순도의 Ga_2O_3 파우더를 사용하였다. 성장 공정은 Ga_2O_3 의 녹는점 부근인 약 $1,800^\circ\text{C}$ 에서 수행되었으며, (001) 시드를 이용하여 [010] 방향으로 잉곳을 성장시켰다. Figure 1에 EFG 공정 개략도를 나타내었다. EFG 공정의 경우, 중앙에 이리듬 슬릿이 설치된 원통형의 이리듬 도가니 내부에 Ga_2O_3 원료파우더를 장입하며 이리듬 도가니 외부에는 세라믹 계열의 단열재를 배치시킨다. 단열재 외부에는 유도코일이 위치되어 유도가열 방식으로 이리듬 도가니를 가열하고 그 열에 의해 내부의 원료 파우더가 용융된다. 용융된 원료는 도가니 중앙의 슬릿을 따라 모세관 현상에 의해 상부로 이동되어 슬릿 상부 가장자리에 얇은 용융막이 형성된다. 이 슬릿 상부의 용융막에 특정 면방위를 가진 Ga_2O_3 시드를 접촉시킨 뒤, 당김 속도와 온도 구배를 제어하면서 결정 성장을 진행하게 된다.

$\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ (100) 면의 결정의 경우, 타 면방위에 비해 성장이 용이하여 초기 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 단결정 성장 연구와 전력 소자 제작에서 사용되었다. 한편, 최근 주로 활용되고 있는 (001) 면방위 결정 성장의 경우, 성장 공정 중 쌍정(twin boundary) 결함이 발생하기 쉽다. 쌍정의 면방위는 (-101) 면으로 내부의 격자 구성이 (001) 면의 격

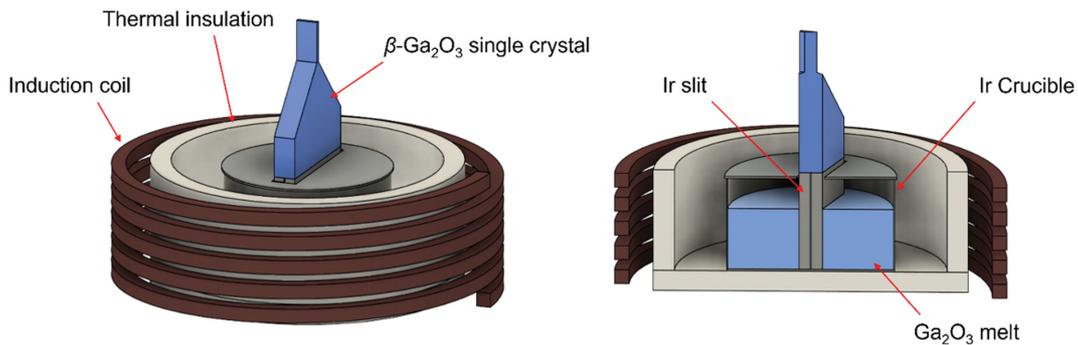
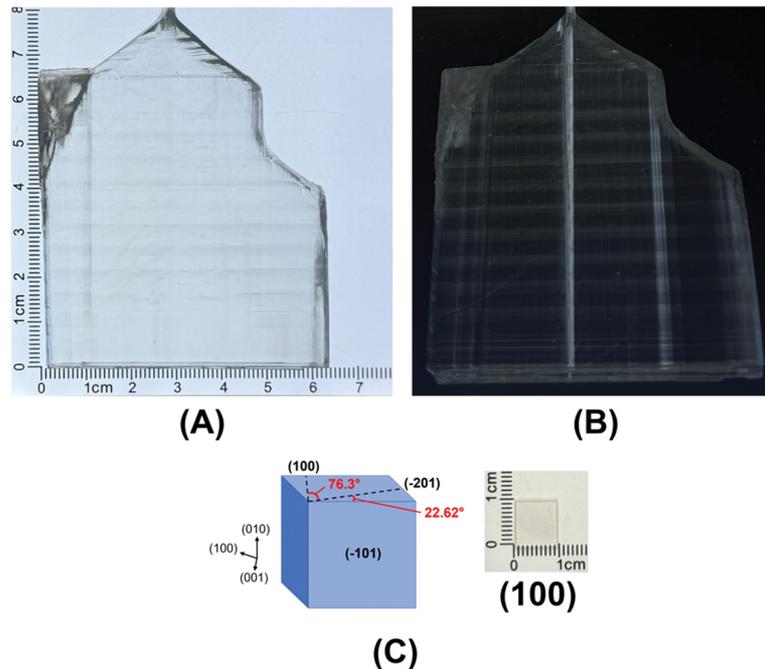


Fig. 1. Schematic of EFG method.

Fig. 2. (A) The UID β -Ga₂O₃ single-crystal ingot grown along the [010] direction using a (001) seed by the EFG method. (B) polarized image. (C) The extracted sample with (100) orientation.

자 구성과 거울면 대칭인 경우가 많다. 쌍정의 경우, 결정의 무결성을 상실하게 만들 뿐만 아니라 β -Ga₂O₃ 기반 반도체 소자의 성능을 크게 저하시키게 된다.

(100) 면의 낮은 쌍정 생성에너지(E_{TB} : Formation energy of twin boundary)가 쌍정 형성을 용이하게 하며, 결정 성장 도중 과냉각 정도에 따라 쌍정 형성에 필요한 에너지 임계값에 도달하면 쌍정핵이 생성되어 쌍정이 발생하는 것으로 알려져 있다[11].

Figure 2에 (001) 시드를 이용한 [010] 방향으로 성장시킨 β -Ga₂O₃ 단결정 잉곳 사진과 편광 이미지, 그리고 잉곳에서 추출된 (100) 면 시편 사진을 나타냈다. UID β -Ga₂O₃ 잉곳에서 추출한 (100) 시편의 크기는 약 10 mm × 10 mm × 0.6 mm로 추출하였다. 시편 준비 과정에서 (100) 시편은 (-101) 영역에서 결정학적 각도를 고려하여 Diamond Wire Saw로 절단해 제작하였다. (Fig. 2(c) 우

측 결정 면방위 참고) 결과적으로 (100) 면 방향의 시편을 확보할 수 있었으며, 확보된 시편은 Mechanical Polishing 공정을 통해 양면 경면 가공을 실시하여 준비하였다.

(100) 시편의 구조적 특성과 결정 품질을 분석하기 위해 High-Resolution X-ray Diffractometer(HR-XRD, Cu-K α radiation with $\lambda = 1.5406 \text{ \AA}$, X'Pert-PRO MRD, PANalytical, The Netherlands)를 사용하였다. θ -2 θ scan mode를 이용하여 10°~80° 구간에서 결정 상 분석을 진행하였다. 라만 산란법의 경우, Fig. 3(a)에 나타낸 것과 같이 여기광원으로 532 nm 레이저 빔을 β -Ga₂O₃ 시편의 (100) 면에 조사한 후 동일한 방향으로 산란되어 되 돌아오는 산란광을 수집하는 (100) 면 후방 산란 배치(backscattering configuration)로 라만 스펙트럼을 취득하였다. 산란광의 수집 효율을 높이기 위해 N.A.(Numerical Aperture) 0.75를 가지는 x50 배율 대물렌즈를 사용하였

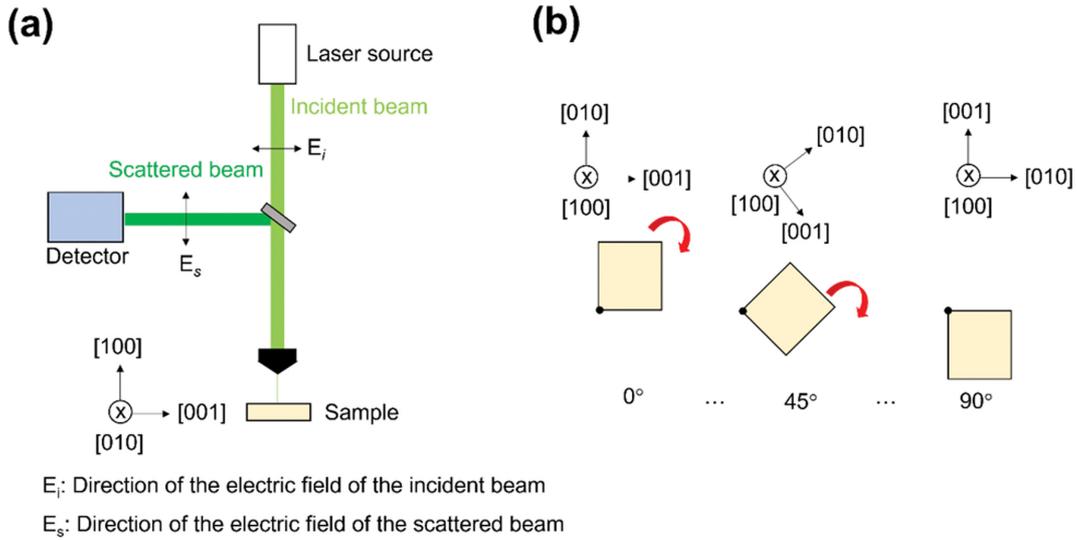


Fig. 3. (a) Raman scattering geometry for $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ samples. (b) Example of the angle-resolved Raman scattering configuration used in this study, showing sample orientations at 0° , 45° , and 90° .

으며, 약 0.5 cm^{-1} 의 파수 분해능 가지는 라만 산란 시스템(RamMics M532, Enspectr, Inc.)을 사용하였다[12]. Figure 3(b)에 본 연구에서 수행한 각도분해 라만 산란법에 사용된 시편의 배치(0° , 45° , 90°)와 그에 따른 면방위의 변화를 나타내었다. 여기서, 0° 를 기준으로 (100)면에 입사하는 레이저 광의 전기장(편광방향)의 방향과 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 시편 내 Ga와 O 원자의 상호작용에 의해 포논이 생성되며, 산란된 광은 특정 방향의 전기장을 가지고 다시 검출기로 입사되게 된다. 따라서, 입사 레이저광의 전기장 방향과 Ga 및 O 원자가 상호작용하는 위치에 따라 형성되는 포논이 달라지며, 이로써 관측되는 광학 포논모드가 결정된다.

라만 산란 측정에서 어떤 광학포논모드가 관측되는지는 라만 선택 규칙에 의해 결정되며, 이는 산란 배치에 따라 정의되는 4개의 벡터 k_i , k_s , E_i , E_s 로 구성된다. 여기서 k_i 와 k_s 는 각각 입사 및 산란된 광자의 진행 방향을, E_i 와 E_s 는 각각 입사광과 산란광의 전기장 방향을 나타낸다. 이러한 관계는 일반적으로 $k_i(E_i, E_s)k_s$ 로 표기된다. 예를들어 Fig. 3(a)에서 [100], [010], [001] 방향을 각각 x, y, z라고 정의하면, 본 연구에서 사용한 라만 산란 배치는 $x(z, y+z)-x$ 로 표현할 수 있다. 결국, 라만 산란에서 관측되는 광학포논모드는 입사광 및 산란광의 진행 방향과 전기장의 방향이 결정 격자와 어떻게 상호작용하는가에 의해 결정된다.

단사정계 결정구조를 가지는 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 는 공간군 $C_{2h}(2/m)$ 에 속하며, Γ 점($k=0$)에서 계산된 포논모드는 $\Gamma = 10A_g + 5B_g + 10B_u + 5A_u$ 로 나타난다 [13]. 이 중 광학포논모드(Optical phonon mode)는 $\Gamma_{opt} = 10A_g + 5B_g + 8B_u + 4A_u$ 로 분류되며, $10A_g + 5B_g$ 는 라만활성모드(Raman active mode, 라만산란법에서 관찰됨)이고, $8B_u + 4A_u$ 는 적외활

성모드(Infrared active mode, 적외분광법에서 관찰됨)에 해당한다[14]. Figure 4에 나타난 것처럼, $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 는 단사정계 결정 구조(VESTA software 사용)를 가지며, 격자 상수는 $a = 1.223\text{ nm}$, $b = 0.304\text{ nm}$, $c = 0.580\text{ nm}$ 이고, a축과 c축 사이의 각도는 $\beta = 103.7^\circ$ 이다. 구조 내에는 서로 다른 두 개의 Ga 위치와 세 개의 O 위치가 존재하며, 각각 Ga_I , Ga_{II} , O_I , O_{II} , O_{III} 원자로 표시된다. Ga_I 원자는 네 개의 O 이온과 약간 왜곡된 사면체 결합을 형성하고, Ga_{II} 원자는 여섯 개의 O 이웃 원자와 함

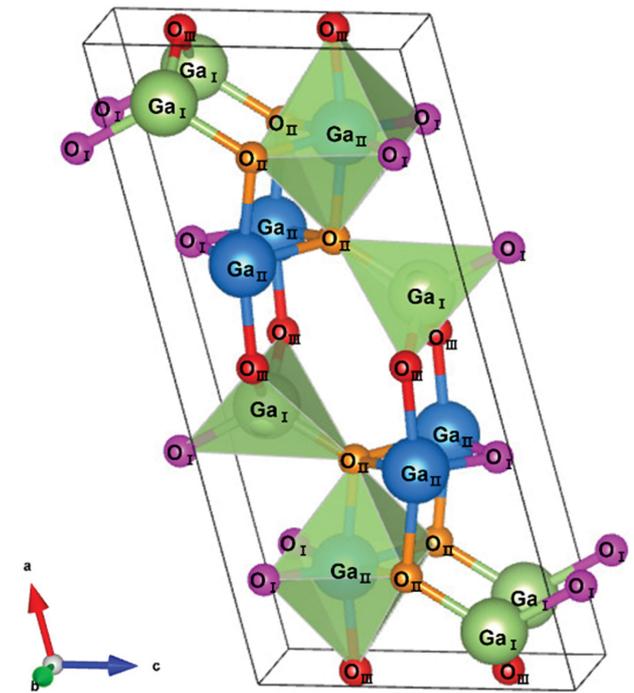


Fig. 4. Monoclinic crystal structure of $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$.

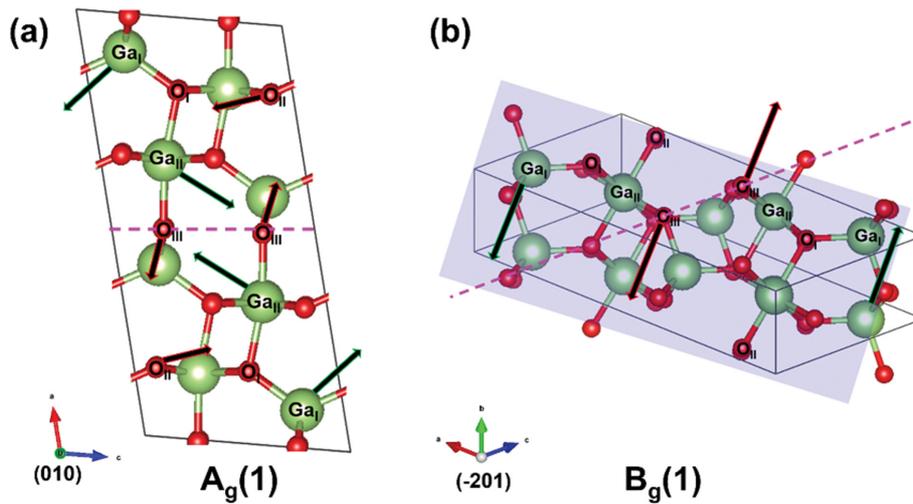


Fig. 5. Optical phonon modes of $A_g(1)$ and $B_g(1)$ observed in Raman spectroscopy.

계 심하게 왜곡된 입방 밀집 배열(cubic close packing)을 형성한다. O_I 와 O_{II} 는 3배위(3-fold coordinated) 구조를 가지며, O_{III} 는 세 개의 팔면체와 하나의 사면체의 모서리에 위치하여 4배위(4-fold coordinated) 구조를 가진다[15].

격자 진동 양식(포논모드)의 경우, 단사정계의 복잡한 결정 구조에 의해 격자 진동양식도 복잡하게 나타나게 된다. Figure 5에 β -Ga₂O₃에서 관측되는 15개의 광학포논모드 중 $A_g(1)$ 모드와 $B_g(1)$ 모드를 대표적으로 나타내었다. $A_g(1)$ 모드의 경우 각 Ga 원자와 O 원자가 (010) 면내에서 진동하는 in-plane 진동 모드이며, $B_g(1)$ 모드는 각 Ga 원자와 O 원자가 (-201) 면내(보라색으로 표시한 면)에서 진동하는 in-plane 진동 모드이다. 따라서, 두 면의 격자 진동양식은 서로 직교 관계임을 알 수 있다.

3. 결과 및 고찰

3.1. XRD 분석 결과

(100) 면 β -Ga₂O₃ 시편의 상분석을 위해 XRD 법을 이용해 θ -2 θ scan을 진행하였다. Figure 6에 Ga₂O₃ 시편에 대한 XRD의 θ -2 θ scan 결과를 나타내었다. (100) 시편에서 (200), (400), (600), (800) 면의 회절각에 해당하는 14.95°, 30.05°, 45.75°, 62.55°에서 회절 peak이 관찰되었으며, 이를 통해 결정면이 (100) 면임을 확인하였다.

3.2. 라만산란 분석 결과

Figure 7에 β -Ga₂O₃ (100) 시편에서 얻어진 라만 스펙트럼을 나타내었다. (100) 면에서 관측된 광학포논모드

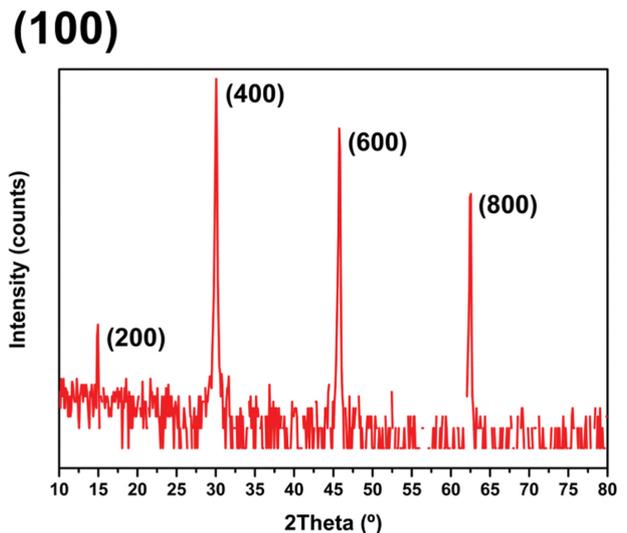


Fig. 6. XRD spectra from θ -2 θ scan of (100) β -Ga₂O₃ sample.

중 $A_g(10)$ 모드의 강도가 다른 포논모드와 비교했을 때 가장 높은 강도를 보였다. (100) 면의 $A_g(10)$ 의 경우, O_I 과 O_{II} 사이트의 두 O 원자가 주요하게 진동하는 모드이다. 따라서, 이 면방위에서는 해당 방향의 진동이 결정 내에서 가장 규칙적으로 배열(주기성 높음)되어 있음을 확인할 수 있다. 특히 (100) 면에서는 $A_g(10)$ 모드가 다른 모드에 비해 가장 강하게 나타나, 이 모드에 대해 입사 빔의 전기장 방향과 밀접한 상관관계를 추적할 수 있을 것으로 판단하였다. 한편, 기존 연구에서 관측된 다른 면방위에서 나타나지 않는 $A_g(9)$ 모드가 추가적으로 관찰되는데, 이 모드는 O_I , O_{II} , O_{III} 모든 산소 원자가 (010) 면 내에서 in-plane 방향으로 진동하는 고주파 모드로, 이러한 결과는 입사 빔의 전기장 방향과 결정면 내 원자 배열이 관측되는 포논 모드와 그 강도 변화를

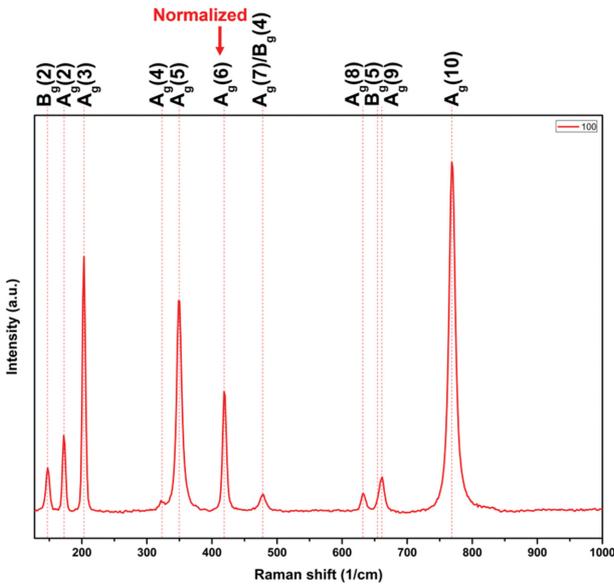


Fig. 7. Room temperature Raman spectrum of $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ (100) sample.

민감하게 결정함을 보여준다.

$\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 단결정 결정의 기본 진동모드는 저파수($< 300\text{ cm}^{-1}$), 중파수($300\sim 500\text{ cm}^{-1}$), 고파수($> 500\text{ cm}^{-1}$)의 세 가지 구간으로 나눠서 분석할 수 있다[10]. 저파수 모드에서 관찰되는 $A_g(1)\sim A_g(3)$, $B_g(1)$ 및 $B_g(2)$ 모드의 경우 Ga_2O_3 사슬의 진동완화(release) 및 전이(translation)와 관련이 있으며, 격자의 장주기성과 관련이 있으므로 결정성 및 응력 평가의 지표로 활용될 수 있다. 중파수 모드에서 관찰되는 $A_g(4)\sim A_g(6)$ 및 $B_g(4)$ 모드는 Ga_2O_3 및 Ga_2O_3 의 변형(deformation)과 관련이 있다. $A_g(7)$ 모드는

Ga_2O_3 의 신축진동(stretching) 및 굽힘진동(bending)과 관련이 있다. 또한 고파수 모드에서 관찰되는 $A_g(8)\sim A_g(10)$ 및 $B_g(5)$ 모드는 Ga_2O_3 사면체의 신축진동과 굽힘진동에 기인한다[12]. 본 연구에서는 12개의 라만활성 모드인 $B_g(2)$, $A_g(2)\sim A_g(7)$, $B_g(4)$, $A_g(8)$, $B_g(5)$, $A_g(9)$, $A_g(10)$ 밴드가 관측되었으며, 이는 이전 보고된 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 결정에서 관찰가능한 포논밴드와 일치한다[12,13].

Figure 8에 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 의 (100) 면에 대한 각도분해 라만 스펙트럼을 나타내었다. Figure 3(b)에서 정의한 것처럼 시편은 (100) 면을 표면으로 위치시키고, [010] 방향을 위쪽으로 하는 법선축을 정의하여 이를 기준 0° 로 설정했다. 각도 θ 는 표면 법선축을 기준으로 시편을 회전하여 정의하였으며, θ 는 시계방향 회전을 양(+) 방향으로 하였다. 라만 스펙트럼은 $\theta = 0^\circ$ 에서 90° 까지 10° 간격으로 측정하였고 $A_g(6)$ 모드를 기준으로 강도 정규화(Intensity normalization)를 실시하여 비교하였다.

(100) 면의 시편을 0° (최하단 스펙트럼)에서 90° (최상단 스펙트럼)까지 10° 간격으로 회전했을 경우, 앞서 언급한 $A_g(10)$ 모드의 강도가 눈에 띄게 감소하는 것을 알 수 있다. 이는 (100) 면 내의 O_{\parallel} 와 O_{\perp} 사이트의 두 O 원자가 외부의 전기장 방향에 민감하게 상호작용한다는 것을 의미하며 결정 구조의 대칭성이 변화한다고 할 수 있다. 관측된 각 광학포논모드에 대해 (100) 면 시편의 각도 변화에 대한 강도를 플롯하는 폴라로그래프(polarogram)를 Fig. 9에 나타내었다. 그 결과, 각 광학포논모드의 시편 회전에 따른 강도변화 특성이 뚜렷하게 관찰되었다.

$A_g(6)$ 모드의 경우, 이 모드에서 강도 정규화를 실시하였으므로 각도 변화에 영향을 받지 않는 원형 분포를 나

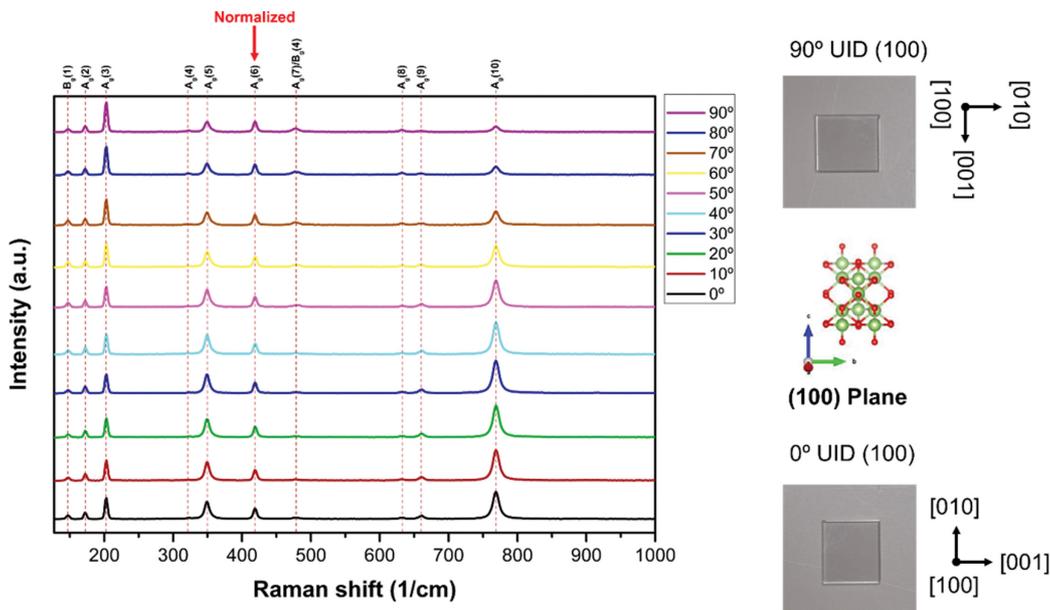


Fig. 8. Angle-resolved Raman measurements were performed on the (100) surface of $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$.

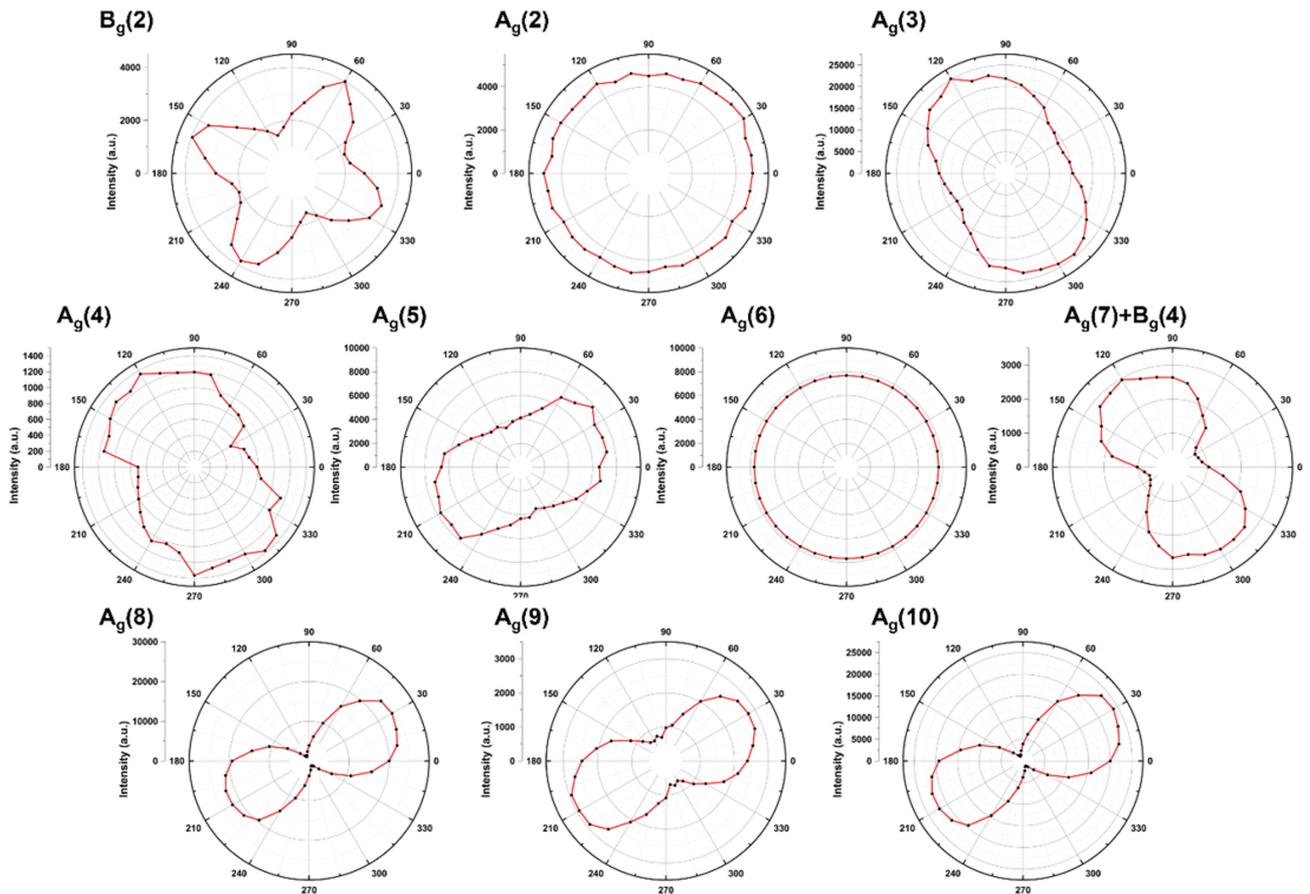


Fig. 9. Polarogram of UID (100) β -Ga₂O₃ sample.

타낸다. $A_g(2)$ 모드 또한 각도변화를 따르지 않는 거의 원형 분포를 나타내므로 완전 대칭성을 가진다고 할 수 있다. 따라서, 이 두 모드의 강도를 기준으로 다른 포논 모드의 강도를 정규화하는 것이 적절하다고 할 수 있다. 반면, $B_g(2)$ 모드는 뚜렷한 4-fold 대칭성을 나타내어 가장 낮은 대칭성을 갖는 것으로 확인되었다. $A_g(3)$, $A_g(4)$, $A_g(7) + B_g(4)$ 모드의 경우, 120°와 300°에서 최대강도, 30°와 210°에서 최소강도를 보이는 2-fold 대칭성을 보인다. 하지만, $A_g(3)$ 의 경우, 165°~255° 각도영역과 그와 대칭인 345°~75° 각도영역에서는 강도가 일정하다. $A_g(5)$, $A_g(8)$, $A_g(9)$, $A_g(10)$ 모드의 경우는 $A_g(3)$, $A_g(4)$, $A_g(7) + B_g(4)$ 모드의 강도변화가 발생하는 각도와 대칭인 30°와 210°에서 최대강도를 120°와 300°에서 최소강도를 가지는 2-fold 대칭성을 보임을 알 수 있다. 이와 같이 각 광학포논모드는 입사되는 레이저 빔의 전기장방향(편광 방향)과 측정하는 시편의 결정 배향에 크게 의존한다고 할 수 있다.

Ga₂O₃ 기반 소자 제작 시 불순물 도핑이 필수적이며 도펀트 원소가 격자 사이트에 치환(침입)되는 경우 격자 진동(포논)에 영향을 주게 되므로 광학포논모드의 1) 강도변화, 2) 피크 시프트, 3) 반치폭(Full width at half

maximum) 증가, 4) 피크 분리(Peak separation), 5) 새로운 밴드 출현 등이 관찰될 수 있다. 따라서, UID를 포함한 도핑된 Ga₂O₃ 결정들의 광학포논모드 분석 시 시편 배치에 주의를 기울여 측정을 진행함으로써 보다 신뢰도 높은 분석결과를 얻을 수 있도록 해야 할 것이다.

4. 결 론

본 연구에서는 EFG 방법으로 성장된 UID β -Ga₂O₃ 단결정으로부터 10 mm × 10 mm 크기의 (100) 면 방향 시편을 제작하여 HR-XRD 및 라만 산란법을 통해 면방위를 특정하고 면방위에 따른 격자진동 특성을 분석하였다. HR-XRD 분석을 통해 시편의 결정학적 방위를 확인하였고 라만 산란법을 통해 (100) 면방위를 따르는 라만 스펙트럼을 얻었다. (100) 면방위의 β -Ga₂O₃ 시편에 대해 레이저 빔의 전기장 방향에 대응하는 시편의 배치 각도(0°~360°)를 따르는 각 광학포논모드의 강도를 플롯한 폴라로그래프(Polarogram)를 얻었다. 시편 회전 각도에 따라 각 광학포논모드의 대칭성을 확인하였다. $A_g(2)$ 모드의 경우 완전대칭성, $B_g(2)$ 모드는 대칭성이 가장 높은

4-fold 대칭성, 나머지 모드($A_g(3)$, $A_g(4)$, $A_g(7) + B_g(4)$ 와 $A_g(5)$, $A_g(8)$, $A_g(9)$, $A_g(10)$)들은 2-fold 대칭성을 보였다. 이러한 결과는 라만 산란법이 β - Ga_2O_3 단결정의 결정학적 배향을 비파괴적으로 판별할 수 있는 효과적인 도구임을 입증한다. 따라서 본 연구는 β - Ga_2O_3 기반 전력소자 및 자외선 검출기 응용을 위한 소자 설계, 가공 공정 최적화, 응력 및 결함 분석에 기초 자료를 제공하며, 향후 다양한 도핑 조건이나 성장 조건에서 나타나는 광학포논모드의 이방성 연구에도 활용될 수 있을 것으로 기대된다.

감사의 글

This work was supported by the Ministry of Trade, Industry and Energy and Korea Basic Science Institute (National research Facilities and Equipment Center) grant funded by the Ministry of Education (grant No. RS-2025-02317773).

References

- [1] M. Higashiwaki and G. H. Jessen, "Guest Editorial: The dawn of gallium oxide microelectronics", *Appl. Phys. Lett.* 112 (2018) 060401.
- [2] S. Zhang, X. Lian, Y. Ma, W. Liu, Y. Zhang, Y. Xu and H. Cheng, "Growth and characterization of 2-inch high quality β - Ga_2O_3 single crystals grown by EFG method", *J. Semicond.* 39 (2018) 083003.
- [3] J. B. Varley, H. Peelaers, A. Janotti and C. G. Van de Walle, "Hydrogenated cation vacancies in semiconducting oxides", *J. Phys.-Condes. Matter* 23 (2011) 334212.
- [4] K. Sasaki, A. Kuramata, T. Masui, E. G. Villora, K. Shimamura and S. Yamakoshi, "Device-quality β - Ga_2O_3 epitaxial films fabricated by ozone molecular beam epitaxy", *Appl. Phys. Express* 5 (2012) 035502.
- [5] M. Higashiwaki and S. Fujita, "Gallium oxide: Materials properties, crystal growth, and devices", Springer Nature 293 (2020) 60.
- [6] S. Sun, C. Wang, S. Alghamdi, H. Zhou, Y. Hao and J. Zhang, "Recent advanced ultra-wide bandgap β - Ga_2O_3 material and device technologies", *Adv. Electron. Mater.* 10 (2024) 2300832.
- [7] T. Igarashi, Y. Ueda, K. Koshi, R. Sakaguchi, S. Watanabe, S. Yamakoshi and A. Kuramata, "Growth of 6 inch diameter β - Ga_2O_3 crystal by the vertical Bridgman method", *Phys. Status Solidi B* 262 (2025) 2400444.
- [8] Y. Zhang and F. Xing, "Anisotropic optical and electric properties of β -gallium oxide", *J. Semicond.* 44 (2023) 071801.
- [9] K. Sasaki, "Prospects for β - Ga_2O_3 : now and into the future", *Appl. Phys. Express* 17 (2024) 090101.
- [10] R. Schewski, K. Lion, A. Fiedler, C. Wouters, A. Popp, S. V. Levchenko, T. Schulz, M. Schmidbauer, S. Bin Anooz, R. Grüneberg, Z. Galazka, G. Wagner, K. Irmischer, M. Scheffler, C. Draxl and M. Albrecht, "Step-flow growth in homoepitaxy of β - Ga_2O_3 (100)—The influence of the miscut direction and faceting", *APL Mater.* 7 (2019) 022515.
- [11] P. Wang, Q. Li, T. Hou, W. Mu, Z. Zhang, Y. Zhang and Y. Liu, "Nucleation kinetics of twins in bulk β - Ga_2O_3 crystal", *Mater. Des.* 243 (2024) 113012.
- [12] M.J. Chae, S.-Y. Seo, M.-S. Park, G.-H. Jung, J.-G. Kim and W.-J. Lee, "Characterization of structural and optical properties on (001) β - Ga_2O_3 doped with key impurities for n-type conductivity", *J. Kor. Cryst. Growth Cryst. Technol.* 35 (2025) 1.
- [13] D. Dohy, G. Lucazeau and A. Revcolevschi, "Raman spectra and valence force field of single-crystalline β - Ga_2O_3 ", *J. Solid State Chem.* 45 (1982) 180.
- [14] T. Onuma, S. Fujioka, T. Yamaguchi, Y. Itoh, M. Higashiwaki, K. Sasaki, T. Masui and T. Honda, "Polarized Raman spectra in β - Ga_2O_3 single crystals", *J. Cryst. Growth* 401 (2014) 330.
- [15] B. Fu, Z. Jia, W. Mu, Y. Yin, J. Zhang and X. Tao, "A review of β - Ga_2O_3 single crystal defects, their effects on device performance and their formation mechanism", *J. Semicond.* 40 (2019) 011804.