

Si 모재 위의 $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ 박막에서 부정합 전위와 임계두께에 관한 연구

신정훈* · 김재현** · 엄윤용**

Study on Misfit Dislocations and Critical Thickness in a $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ Epitaxial Film on a Si Substrate

J. H. Shin, J. H. Kim and Y. Y. Earmme

Key Words : Misfit dislocation(부정합 전위), Critical thickness(임계두께), Dislocation formation energy(전위 생성 에너지), Epitaxial film(에피탁시 필름).

Abstract

The critical thickness of an epitaxial film on a substrate in electronic or optoelectronic devices is studied on the basis of equilibrium dislocation analysis. Two geometric models, a single dislocation and an array of dislocations in heteroepitaxial system, are considered respectively to calculate the misfit dislocation formation energy. The isotropic linearly elastic stress fields for the models are obtained by means of complex potential method combined with alternating technique, and are used for calculating the formation energies. As a result, the effect of elastic mismatch between film and substrate on critical thickness is presented and $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}/\text{Si}$ epitaxial structure is analyzed to predict the critical thickness with varying germanium concentration.

1. 서론

반도체 소자(semiconductor device)들은 다양한 재료들이 적층되어 있는 다층 재료(multi-layered materials)로 볼 수 있다. 그리고 반도체 소자로 대표되는 전자 및 광전자 소자들(electronic and optoelectronic devices)은 박막(film)이 모재(substrate)와 같은 방향성을 가지고 성장하는 구조물들로 이루어져 있고, 이러한 구조를 에피탁시(epitaxy)라고 부른다. 에피탁시는 적층되는 두 재료의 동일성에 따라 동종 에피탁시(homoepitaxy)와 이종 에피탁시(heteroepitaxy)로 나누어 진다.

일반적으로 모재의 격자 상수와 박막의 격자 상수는 다르지만, 증착되는 박막의 격자 길이는 모재의 격자 길이에 맞춰진다. 이 때 발생하는 변형을 부정합(misfit) 변형이라고 한다. 이러한 부정합 변형을 완화하기 위해서 부정합 전위 (misfit

dislocation)를 발생하는 현상이 존재한다. 에피탁시 구조 내에 존재하는 부정합 전위들은 반도체 내에 있는 전자(electron)나 정공(hole)과 같은 캐리어(carrier)들의 흐름을 방해하는 요소가 되는 동시에 잔류 응력을 완화시키는 역할을 한다.

Mattews 와 Blakeslee⁽¹⁾는 다층재료(multi-layer)에서의 계면 전위(interfacial dislocation)와 박막을 관통하는 쓰레딩 전위(threading dislocation)의 모양과 힘의 평형(force equilibrium)을 고려한 모델로 임계 두께를 계산하였다. Freund^(2,3)는 부정합 전위와 쓰레딩 전위에 관해 체계적인 연구를 수행하여 좀더 보완된 임계 두께를 구하였는데 최근 10 년간 수행된 연구들에서는 주로 Freund^(2,3)의 결과를 기초로 하고 있다. 한편, 박막/모재 계면에서의 등 간격 전위 배열(dislocation array)을 고려한 모델이 Willis 등⁽⁴⁾에 의해 제안 되었는데 이들은 Fourier 변환을 이용해서 전위 배열의 등방 탄성 응력장(Isotropic elastic stress field)을 구하였다. Zhang 등^(5,6)은 Willis 등⁽⁴⁾의 결과를 보완하고 전위가 포화 되어 발생하는 경화 현상(hardening effect)에 대해 토의 하였다.

* KT Link(주)

** 한국과학기술원 기계공학과, 정회원

지금까지 설명된 미스핏 전위의 모델은 모두 모재와 박막의 재료 물성치가 같다고 가정되었다. 이는 계산의 복잡함을 피하기 위한 가정이지만 일반적으로 박막과 모재의 재료 물성치는 다르다. 재료의 물성치가 다른 경우에 Zhang⁽⁷⁾은 Fourier 변환과 중첩법(Superposition)을 이용하여 임계 두께를 계산하였다.

본 연구에서는 두 가지 기하학적인 모델, 즉 한 개의 부정합 전위가 박막과 모재의 계면에 존재하는 모델과 등간격의 전위배열이 계면에 존재하는 모델을 다룬다. Choi 와 Earmme⁽⁸⁾가 교번법(alternating technique)으로 구한 삼중재료의 등방 탄성해를 이용하여, 두 가지 모델에서 일반적인 등방 이중 에피택시 구조의 임계두께를 계산하고 기존의 결과와 비교해 본다. 이중 에피택시 구조의 전형적인 예인 Si_xGe_{1-x}/Si 구조에 연구결과를 적용하여 게르마늄 농도와 임계두께와의 관계를 예측한다.

2. 이차원 등방 탄성 이론

2.1 복소 포텐셜 함수

이차원 등방 탄성 문제에서 면내 변형 (in-plane deformation)의 응력장과 변형장은 두개의 복소 포텐셜 $\Phi(z)$ 와 $\Omega(z)$ 으로 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\begin{aligned} \sigma_{11} + \sigma_{22} &= 2[\Phi(z) + \overline{\Phi(z)}], \\ \sigma_{22} + i\sigma_{12} &= \overline{\Phi(z)} + \Omega(z) + (\bar{z} - z)\Phi'(z), \\ -2i\mu \frac{\partial}{\partial x_1}(u_2 + iu_1) &= \kappa \overline{\Phi(z)} - \Omega(z) - (\bar{z} - z)\Phi'(z). \end{aligned} \quad (1)$$

여기서 κ 는 평면 변형률(plane strain) 조건에서는 $3-4\nu$ 이고, 평면 응력(plane stress) 조건에서는 $(3-\nu)/(1+\nu)$ 이다. ν 는 프와송 비(Poisson's ratio), μ 는 전단 탄성계수(shear modulus)를 나타낸다. 기호 $(\bar{})$ 은 공액 복소수(complex conjugate)를 의미하고 기호 $()'$ 은 $z = x_1 + ix_2$ 에 관한 미분을 뜻한다.

면외 변형(anti-plane deformation) 문제는 위의 면내 변형 문제와는 독립적으로 처리된다. 면외 문제의 응력과 변위는 복소 포텐셜 $w(z)$ 로 다음과 같이 표시 된다.

$$\sigma_{32} + i\sigma_{31} = w(z), \quad \frac{\partial}{\partial x_1} u_3 = \frac{1}{2\mu i} [w(z) - \overline{w(\bar{z})}]. \quad (2)$$

2.2 균질 무한체 내의 특이성 해

무한 등방 균질 재료에서의 점특이성 (point singularity)의 복소 포텐셜은 아래와 같은 형태로 주어진다^(9,10).

$$\begin{aligned} \Phi_0(z) &= \frac{B_c}{z-s}, \quad \Omega_0(z) = \frac{B_c(\bar{s}-s)}{(z-s)^2} + \frac{\bar{B}_c}{z-s}, \\ w_0(z) &= \frac{B_s}{z-s}. \end{aligned} \quad (3)$$

여기서 s 는 점특이성의 위치, 점특이성이 전위(dislocation)일 경우 B_c 는 $\mu(b_1 + ib_2)/(\pi i)$, B_s 는 $\mu b_3/(2\pi)$ 이고, b_1, b_2, b_3 는 전위의 Burgers 벡터의 x_1, x_2, x_3 성분이다. 점특이성이 점하중(point force)이나 점모멘트(point moment)일 때의 복소 포텐셜도 유사한 형태로 구할 수 있다.

무한 등방 균질 재료 내에서 일정 간격(p)을 가지고 x_1 축 위에 배열된 전위의 복소 포텐셜은 다음과 같이 표현된다.

$$\begin{aligned} \Phi_0(z) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(\frac{B_c}{z-pn} \right) = \frac{\pi B_c}{p} \cot\left(\frac{\pi}{p} z\right), \\ \Omega_0(z) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(\frac{\bar{B}_c}{z-pn} \right) = \frac{\pi \bar{B}_c}{p} \cot\left(\frac{\pi}{p} z\right), \\ w_0(z) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(\frac{B_s}{z-pn} \right) = \frac{\pi B_s}{p} \cot\left(\frac{\pi}{p} z\right). \end{aligned} \quad (4)$$

2.3 삼중 재료(tri-material)에서의 특이성 해

삼중 재료 내의 특이성을 나타내는 Fig. 1와 같은 구조의 문제를 풀기 위해서, 앞 절에서 기술한 균질 무한체 내의 점특이성 해와 교번법(alternating technique)을 적용한다. 교번법은 그림에서 표시된 두개의 계면에서의 연속성을 한 번의 계산으로 동시에 만족시키기 어려운 이유로, 각 계면에서의 연속성을 번갈아 적용시키는 것이다. 이 교번법을 이용하여 등방성(isotropy) 삼중 재료의 특이성 탄성해가 수열형태로 Choi 와 Earmme⁽⁸⁾에 의해 구해졌고, 여기서는 그 결과를 이용한다.

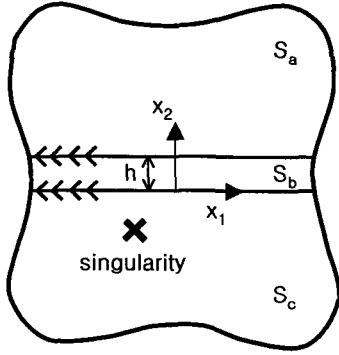


Fig. 1 A singularity in a tri-material system.

무차원 재료 상수 $\Lambda_{ab}=(\alpha_{ab}+\beta_{ab})/(1-\beta_{ab})$, $\Pi_{ab}=(\alpha_{ab}-\beta_{ab})/(1+\beta_{ab})$ 와 $t_{ab}=(\mu_a-\mu_b)/(\mu_a+\mu_b)$ 를 정의한다. 여기서 α_{ab} 와 β_{ab} 는 Dundurs 매개변수이며, 각각 $(\mu_a(\kappa_b+1)-\mu_b(\kappa_a+1))/(\mu_a(\kappa_b+1)+\mu_b(\kappa_a+1))$ 와 $(\mu_a(\kappa_b-1)-\mu_b(\kappa_a-1))/(\mu_a(\kappa_b+1)+\mu_b(\kappa_a+1))$ 로 정의된다. 가장 아래의 재료 S_c 에 특이성이 존재할 때의 면내 문제의 복소해는,

$$\Phi(z) = \begin{cases} (1+\Lambda_{ab})\sum_{n=1}^{\infty}\Phi_n(z) & \text{in } S_a, \\ \sum_{n=1}^{\infty}[\Phi_n(z)+\Lambda_{cb}^{-1}\bar{\Omega}_{n+1}(z)] & \text{in } S_b, \\ \Phi_0(z)+\Pi_{bc}\bar{\Omega}_0(z)+(1+\Lambda_{cb}^{-1})\sum_{n=1}^{\infty}\bar{\Omega}_{n+1}(z) & \text{in } S_c. \end{cases} \quad (5a)$$

$$\Omega(z) = \begin{cases} (1+\Pi_{ab})\sum_{n=1}^{\infty}\Omega_n(z)+2ih(\Lambda_{ab}-\Pi_{ab})\sum_{n=1}^{\infty}\Phi'_n(z) & \text{in } S_a, \\ \sum_{n=1}^{\infty}[\Omega_n(z)+\Pi_{cb}^{-1}\bar{\Phi}_{n+1}(z)] & \text{in } S_b, \\ \Omega_0(z)+\Lambda_{bc}\bar{\Phi}_0(z)+(1+\Pi_{cb}^{-1})\sum_{n=1}^{\infty}\bar{\Phi}_{n+1}(z) & \text{in } S_c. \end{cases} \quad (5b)$$

이고, 점화식 $\Phi_n(z), \Omega_n(z)$ 은

$$\Phi_{n+1}(z) = \begin{cases} (1+\Lambda_{bc})\Phi_0(z) & \text{for } n=0, \\ \Pi_{cb}[\Lambda_{ab}\Phi_n(z+2ih)-2ih\Pi_{ab}\Omega'_n(z+2ih) \\ -4h^2\Pi_{ab}\Phi''_n(z+2ih)] & \text{for } n=1,2,3,\dots, \end{cases} \quad (6a)$$

$$\Omega_{n+1}(z) = \begin{cases} (1+\Pi_{bc})\Omega_0(z) & \text{for } n=0, \\ \Pi_{ab}\Lambda_{cb}[\Omega_n(z+2ih)-2ih\Phi'_n(z+2ih)] & \text{for } n=1,2,3,\dots, \end{cases} \quad (6b)$$

이다. 이 복소 포텐셜을 식 (1)에 대입하면 삼중 재료 특이성의 면내 변형에 대한 응력과 변위를 구할 수 있다.

한편, 면의 변형 문제의 해는

$$w(z) = \begin{cases} (1+t_{ab})\sum_{n=0}^{\infty}w_n(z) & \text{in } S_a, \\ \sum_{n=0}^{\infty}[w_n(z)+t_{cb}^{-1}\bar{w}_{n+1}(z)] & \text{in } S_b, \\ w_0(z)+t_{bc}\bar{w}_0(z)+(1+t_{cb})\sum_{n=0}^{\infty}t_{cb}^{-1}\bar{w}_{n+1}(z) & \text{in } S_c. \end{cases} \quad (7)$$

이고, 점화식 $w_n(z)$ 은 다음과 같다.

$$w_n(z) = (t_{ab}t_{cb})^n(1+t_{bc})w_0(z+2hni), \quad n=0,1,2,\dots, \quad (8)$$

이 복소 포텐셜을 식 (2)에 대입하여 삼중 재료 특이성의 면외 변형에 대한 응력과 변위를 구할 수 있다.

여기서 $\Phi_0(z), \Omega_0(z), w_0(z)$ 는 특이성이 균질 무한체 내에 있을 때의 복소 포텐셜이다. 특이성의 종류에 따라(전위, 점하중, 점모멘트 등) 균질 무한체 내에서의 복소 포텐셜은 다르게 표현되지만, 삼중 재료에서의 특이성 해는 균질 무한체 내의 특이성의 종류에 상관없이 일정한 규칙을 가지고 나타낼 수 있음을 알 수 있다. 본 연구에서는 부정합 전위에 관한 연구를 진행하므로 2.2 절에서 주어진 전위와 전위배열에 대한 균질 무한체 내에서의 복소 포텐셜을 이용한다.

3. 에피택시 구조와 부정합 전위

3.1 에피택시 구조의 부정합 응력(misfit stress)
등방 재료에서 박막, 모재간의 격자 상수 차이에 의한 부정합 변형은 이축응력(biaxial stress)을 유발한다. 에피택시 박막의 두께는 모재에 비하여 매우 얇다고 볼 수 있으므로, 박막의 두께 방향

수직 응력은 0 이 된다. 박막과 모재가 이루는 계면에 수직인 방향을 x_2 방향, 계면을 x_1 - x_3 평면으로 정의할 때(Fig. 2), 선형 탄성 Hook 법칙을 이용하면 부정합 변형율은 다음과 같이 표현된다⁽²⁾.

$$\varepsilon_{11} = \frac{(1-\nu)}{2(1+\nu)\mu} \sigma_{11}, \quad \varepsilon_{22} = -\frac{\nu}{2(1+\nu)\mu} \sigma_{11}. \quad (9)$$

여기서 모재는 박막에 비하여 매우 두꺼우므로 모재의 변형은 무시하였다. 따라서 부정합 응력은 부정합 변형율 ε_m 에 의하여 다음과 같이 주어진다.

$$\sigma_{11}^m = \sigma_{33}^m = -\frac{2\mu_f(1+\nu_f)}{1-\nu_f} \varepsilon_m, \quad \text{and other } \sigma_{ij}^m = 0. \quad (10)$$

서로 다른 격자 상수를 가진 재료의 결합에서 발생하는 부정합 변형만을 고려하면, 부정합 변형율 ε_m 은 $(a_f - a_s)/a_f$ 로 주어지며, a_f 와 a_s 는 각각 박막과 모재의 격자 상수이다.

3.2 부정합 전위와 전위배열

모재와 박막의 격자 상수 차이로 인해 변형된 에피탁시층(epitaxial layer)은 부정합 전위에 의해서 그 변형이 완화된다. 부정합 전위의 개수가 늘어날수록 박막이 완화되는 정도도 커지는데, 이러한 일련의 완화 과정은 부정합 변형율, 전위들의 형상이나 운동 경로에 따라서 달라질 수 있다.

Figure 2 는 모재의 두께가 무한하고 박막의 두께 h 를 가진 에피탁시층의 수학적 모델링을 나타낸다. 모재와 박막 사이에 있는 계면을 x_1 - x_3 평면으로 잡고 계면의 수직방향을 x_2 방향으로 잡는다. 에피탁시 박막과 모재는 서로 다른 등방(isotropic) 선형 탄성 재료로 가정한다. 원점에 위치하는 전위의 Burgers 벡터 $\mathbf{b}=[b_1, b_2, b_3]$ 이다. 이제 전위가 생성되기 전후의 탄성 에너지의 차이로부터 전위 생성 에너지(dislocation formation energy) E_f 를 다음과 같이 정의한다⁽⁵⁻⁷⁾.

$$E_f = \frac{1}{2} \iint_{\Sigma} (\sigma_a + \sigma_m) (\varepsilon_a + \varepsilon_m) dx_1 dx_2 - \frac{1}{2} \iint_{\Sigma} \sigma_m \varepsilon_m dx_1 dx_2. \quad (11)$$

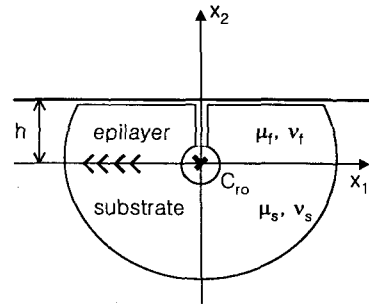


Fig. 2 Integration path for a dislocation⁽⁷⁾.

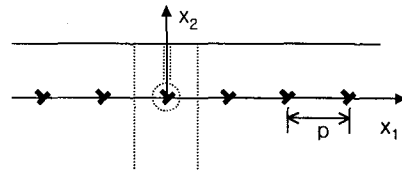


Fig. 3 Integration path for a dislocation array⁽⁴⁾.

여기서 ε_a , σ_a , ε_m , σ_m 은 각각 전위에 의해 생성된 변형율과 전위에 의해 생성된 응력 그리고 부정합 변형율과 부정합 응력을 나타낸다. Σ 는 Fig. 2 에서 적분경로로 둘러싸인 모든 영역이다. 전위 생성 에너지 E_f 는 전위의 자기 에너지(self energy) E_s 와 상호작용 에너지(interaction energy) E_{int} 로 다음과 같이 표현된다.

$$E_f = E_s + E_{int},$$

$$\text{where } E_s = \frac{1}{2} \iint_{\Sigma} \sigma_a \varepsilon_a dx_1 dx_2, \quad E_{int} = \iint_{\Sigma} \sigma_m \varepsilon_a dx_1 dx_2.$$

(12)

여기서 E_f , E_s , E_{int} 등은 에피탁시 구조의 x_3 방향 두께가 단위길이일 때의 에너지를 의미한다. Figure 2 에서와 같이 적분 영역(Σ)은 전위의 코어(core)를 제외한 박막과 모재의 모든 영역에 걸쳐 있다. 전위 코어영역에서는 탄성해가 맞지 않기 때문에, 본 연구에서는 코어 반경 r_0 에 해당하는 영역의 탄성에너지는 무시하였다.

이제 E_s 와 E_{int} 에 Divergence 정리를 적용시켜 면적분(area integral)을 선적분(line integral)으로 바꾼다. $x_2=h$ 인 자유표면에서 표면력(traction)이 0 인

사실과 전위로부터의 거리가 무한대인 지점의 응력은 0 이라는 사실을 이용하면, 자체 에너지 E_s 와 상호작용 에너지 E_{int} 는

$$E_s = E_0 + E_c, \quad E_0 = -\frac{1}{2} \int_0^h \sigma_{ij}^a n_j b_i ds, \quad (13)$$

$$E_c = \frac{1}{2} \oint \sigma_{ij}^a n_j u_{,ai} ds, \quad E_{int} = -\int_0^h \sigma_{ij}^m n_j b_i ds,$$

이 된다. 2장에서 기술한 삼중 재료 내의 전위에 대한 복소 포텐셜을 이용하여 σ_{ij}^a 를 구하고, 3.1절에서 기술한 부정합 응력 σ_{ij}^m 을 이용하면, 자체 에너지 E_s 와 상호작용 에너지 E_{int} 를 계산할 수 있다.

Figure 3 과 같은 전위배열의 경우도 식(4)를 이용하여 같은 과정을 거쳐 전위생성에너지를 구할 수 있다⁽⁴⁾. 다만, 전위들이 등간격, p 를 가지고 배열되어 있으므로 한 개의 전위가 포함되어 있는 폭이 p 인 단위셀에서 전위생성에너지를 계산한다.

3.3 임계 두께

앞 절에서 정의한 전위 생성 에너지는 전위가 생성되기 전후의 탄성에너지의 차이로 정의되었고, 이는 전위가 생성되기 위해 필요한 에너지로 이해할 수 있다. 박막과 모재의 탄성계수, 부정합 변형률, 생성될 전위의 Burgers 벡터가 일정한 경우에 전위생성 에너지는 박막의 두께가 증가함에 따라 증가하다가 다시 감소하는 경향을 보인다. 전위생성 에너지가 두께에 따라 감소하다가 0 이 되는 두께가 존재한다. 전위 생성 에너지가 0 이 된다는 것은 전위가 생성되는 데에 에너지가 더 이상 필요치 않다는 것을 의미한다. 본 연구에서는 Zhang⁽⁷⁾과 마찬가지로 전위 생성 에너지 E_f 가 0 이 되는 박막의 두께를 임계두께(critical thickness)로 정의한다.

4. 결과 및 토의

4.1 전위 생성 에너지

전위 생성 에너지는 코어 반경(r_0)을 얼마로 정하는가에 따라 변화할 수 있다. 본 연구에서는 Zhang⁽⁷⁾과 마찬가지로 Burgers 벡터의 1/4 배로 정하였다(Freund⁽³⁾와 Willis 등⁽⁴⁾은 Burgers 벡터와 같은 크기로 정하였다.). 식 (13)을 이용하여 전위 생성 에너지를 구하였다. 박막과 모재의 탄성계수가

같은 경우에, 단일 전위에 대한 결과는 Freund⁽³⁾가 구한 결과와 전위 배열에 대한 결과는 Willis 등⁽⁴⁾이 구한 결과와 잘 일치하고 있음을 확인하였다.

4.2 임계 두께

식 (15)로부터 전위 생성 에너지 E_f 가 0 이 되는 조건을 이용하여, Fig. 4 와 Fig. 5 와 같이 부정합 전위가 생기기 시작하는 임계두께를 구하였다.

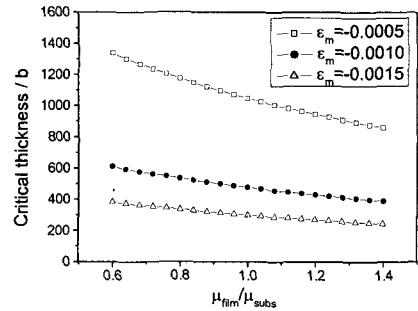


Fig. 4 Critical thickness vs. ratio of shear modulus ($v_f=v_s=0.25$, $b=b[1/2 \ 1/\sqrt{2} \ 1/2]$)

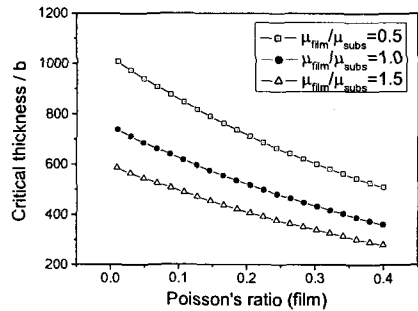


Fig. 5 Critical thickness vs. Poisson's ratio ($v_s=0.25$, $\epsilon_m=-0.001$, $b=b[1/2 \ 1/\sqrt{2} \ 1/2]$)

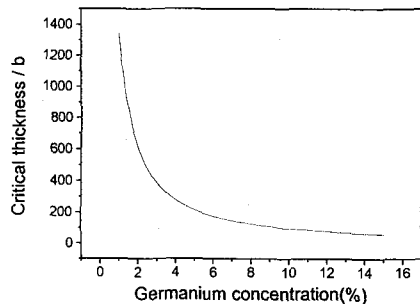


Fig. 6 Critical thickness vs. Ge concentration ($\mu_{Si}=68 \text{ GPa}$, $v_{Si}=0.21$, $a_{Si}=0.54 \text{ nm}$, $b=b[1/21/\sqrt{2} \ 1/2]$)

본 연구에서 사용한, 교변법을 이용한 삼중재료의 해와는 달리, Zhang⁽⁷⁾은 Fourier 변환 방법으로 탄성 계수가 서로 다른 박막/모재 구조의 단일 전위 탄성해를 유도하고 임계 두께를 계산한 바가 있다. Zhang⁽⁷⁾의 결과식에서 몇 가지 오차를 수정하면 본 연구의 결과와 일치하는 것을 확인할 수 있다. 박막에 비하여 모재의 탄성계수가 더 큰 에피탁시 구조가 모재의 탄성계수가 더 작은 구조보다 임계 두께가 더 커지는 것을 알 수 있다. 이는 모재의 탄성계수가 더 클수록 계면에서 부정합 전위가 발생하기 어렵다는 것을 의미한다. 모재의 포아송비가 일정하고, 박막의 포아송비가 변화하는 경우에 Fig. 5 와 같이 박막의 포아송비가 증가함에 따라 임계두께가 점차 작아지는 결과를 얻었다. 전위 배열의 임계두께도 같은 경향을 얻을 수 있지만, 수치계산 시간이 오래 걸리므로 여러 경우에 대해서 계산하지 않았다.

4.3 Si_{1-x}Ge_x/Si 구조

다수의 반도체 소자에서 발견되는 Si_{1-x}Ge_x/Si 구조는 근소한 물성의 차이를 가지는 이중 에피탁시 구조로 볼 수 있다. 박막에 해당하는 Si_{1-x}Ge_x 는 실리콘에 게르마늄(germanium)을 첨가한 혼합물로서, 게르마늄을 첨가하는 농도에 따라서 그 재료 기계적 물성들(탄성 계수, 격자 상수 등)이 변한다. 따라서 게르마늄의 농도에 따라 탄성 계수 뿐만 아니라 격자 상수의 차이에 의해서 발생하는 미스핏 응력도 변함을 알 수 있다. 게르마늄의 농도가 작을 경우 게르마늄 농도에 따라 Si_{1-x}Ge_x 박막의 탄성계수, 포아송비, 부정합 변형율을 다음과 같은 선형관계로 모델링할 수 있다.

$$\begin{aligned} \mu_{film} &= -14x + 68(GPa), \\ \nu_{film} &= -0.01x + 0.21, \\ \epsilon_m &= 0.042x. \end{aligned} \quad (14)$$

이러한 모델을 이용하여 게르마늄 농도에 따른 임계두께를 계산하면 Fig. 6 과 같이 나타난다. Figure 6 에서 알 수 있듯이 Si_{1-x}Ge_x 박막을 두께 400b(b 는 Burgers 벡터의 크기) 정도 증착하는 경우에, 게르마늄의 농도가 3%이상 이 되면 부정합 전위가 발생하게 될 것이라는 예측을 얻을 수 있다.

5. 결론

본 연구에서는 현재 반도체 제조 공정시에 널리 사용되는 에피탁시 구조에서 부정합 전위의 생

성을 탄성론적인 관점에서 다루었다. 박막과 모재의 계면에 한 개의 부정합 전위가 생기는 모델과 등간격의 부정합 전위 배열이 생기는 모델을 해석하였다. 박막과 모재 사이의 서로 다른 탄성 계수를 고려하여 부정합 전위와 부정합 전위배열의 거동에 대한 탄성론적인 계산을 수행하고, 서로 다른 탄성 계수가 부정합 전위생성에 미치는 영향을 파악하였다. 기존의 연구자들과는 달리 교변법을 이용한 삼중재료 내의 전위 및 전위배열 해를 이용하여 전위 생성 에너지를 정확하게 계산할 수 있었다. 연구의 결과를 Si_{1-x}Ge_x/Si 구조에 적용하여 게르마늄 농도에 따라 임계두께가 변화하는 특성을 예측할 수 있었다.

후 기

이 연구는 과학재단 전자패키지재료센터(CEPM)의 지원으로 수행하였습니다.

참고문헌

- (1) J.W.Matthews and A.E.Blakeslee, 1974, "Defect in epitaxial multilayers I. Misfit Dislocations," J.Crystal Growth, Vol. 27, pp. 118~125.
- (2) L.B.Freund, 1993, "The Mechanics of Dislocations in Strained-Layer Semiconductor Materials," Adv. Appl. Mech. Vol. 30, pp. 1~66.
- (3) L.B.Freund, 1987, "The Stability of a Dislocation Threading a Strained Layer on a Substrate," J.Appl.Mech., Vol. 54, pp. 553~557.
- (4) J.R.Willis, S.C.Jain, and R.Bullough, 1990, "The Energy of an Array of Dislocations : Implications for Strain Relaxation in Semiconductor Heterostructures," Phil. Mag., Vol. 62, No. 1, pp. 115~129.
- (5) T.Y.Zhang, J.E.Hack, and L.J.Guido, 1994, "An array of dislocations in a strained epitaxial layer: I. Elastic energy," J.Appl.Phys., Vol. 75, No. 5, pp. 2358~2362.
- (6) T.Y.Zhang, J.E.Hack, and L.J.Guido, 1994, "An array of dislocations in a strained epitaxial layer: II. Work hardening," J.Appl.Phys., Vol. 75, No. 5, pp. 2363~2366.
- (7) T.Y.Zhang, 1995, "Effect of Elastic Constants on the Critical Thickness of an Epilayer," Phy.stat.sol, Vol. 152, pp. 415~429.
- (8) S.T.Choi and Y.Y.Earmme, 2001, "Elasticity of Singularities in an Isotropic Trimaterial," submitted to Int. J. Solids Structures.
- (9) N.I.Muskhelishvili, 1977, *Some Basic Problems of the Mathematical theory of Elasticity*, Trans. By Radok, J.R.M., Noordhoff, Leyden, Netherlands.
- (10) Z.Suo, 1989, "Singularities Interacting with Interfaces and Cracks," Int. J. Solids Structures, Vol. 25, pp. 1133~1142.