

Enhanced electron mobility of strained silicon channel layer in field emission transistor

강영호*

서울대학교 재료공학부, 서울특별시 151-755, 대한민국.
e-mail: kildong.hong@edisonnano.ac.kr

이번 연구에서는 제일원리 계산을 통해 실리콘의 전자구조를 분석하였다. 특히 strain이 걸렸을 때에 실리콘의 전자이동도는 전자구조의 변화와 밀접하게 관련이 있음을 밝혔다. Strain 이 걸린 경우와 그렇지 않은 경우에 대한 conduction band의 effective한 유효질량 계산을 하였고 이를 통해 tensile strain이 걸린 경우 전자의 이동도가 증가하는 것을 보였다.

Introduction

실리콘 기반 MOSFET은 전자의 이동을 능동적으로 제어 함으로서 오늘날 많은 논리 또는 메모리 소자의 핵심 부품으로 자리매김 하여 왔다. 전자 기기의 소형화 및 기억 매체의 대용량화와 맞물려 MOSFET에서 가장 중요한 이슈들은 신뢰성 있는 소자를 얼마나 작게 만드는지 또는 전자의 이동도 향상을 통해 신호를 얼마나 빠르게 처리할 수 있는지 이다. 그러한 문제들을 해결하는 방법 중 하나는 Si_xGe_{1-x} 기판과 실리콘의 격자 상수의 차이를 이용하여 실리콘 격자를 인위적으로 늘리는 것이며 이는 실리콘에서의 carrier의 이동도를 높임으로서 소자의 성능을 향상시키는데 중요한 역할을 한다.[1]

Method

이번 연구에서는 실리콘의 격자 상수의 변화가 전자구조에 어떤 영향을 미치는지 Density Functional Theory (DFT)에 근거한 계산을 통해 알아보았다. 먼저 SIESTA[2] 코드를 사용하였고 Local density approximation (LDA) 방법을 통해 이론적인 격자상수를 결정하였으며 그 격자 상수로부터 strain을 계산하였다. 전자구조의 계산은 VASP코드를 이용하였으며 plane wave의 cutoff energy는 350 eV으로 하였고 5x5x5 Monkhorst pack k point grid를 사용하였다. 전자의 유효질량 계산을 위해서 실리콘의 conduction band minimum 근처를 2차 함수로 근사하였으며 유효질량은 다음과 같은 관계식에 의해 계산하였다.

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{d^2 E}{dk^2} \right). \quad (1)$$

실리콘의 밴드구조는 이방성이 있고 6개의 valley가 degenerate 되어 있다. 따라서 각 valley에 존재하는 전자의 밀도를 고려한 유효 이동도 질량(m^*)은 사용한 코드는 VASP[3]을 사용하였다. 나아가 밴드 구조로부터 각 격자 상수에 해당하는 전자의 유효질량을 얻어내었고 각 valley에 존재하는 전자의 밀도를 고려한 유효 이동도 질량(m^{eff})을 다음과 같이 계산하였다.[4]

$$\frac{1}{m_x^{eff}} = (n_{100} / m_{100}^{Lx} + n_{010} / m_{010}^{Tx} + n_{100} / m_{001}^{Tx}) / (n_{100} + n_{010} + n_{001}). \quad (2)$$

이 때, x는 방향을 의미하고 100,010와 001은 lattice 방향을 의미하며 L의 longitudinal 그리고 T는 transverse를 나타낸다. 또한 n은 각 주어진 valley에서의 전자의 농도를 의미하게 된다.

Discussion

실리콘의 이론적 격자 상수는 5.40 Å이므로 이는 실험값인 5.43 Å 보다 약 0.6% 작은 값으로 일반적으로 LDA에 경우 실험 격자 상수를 작게 기술한다는 측면에서 충분히 작은 예러라고 할 수 있다. Strain은 이러한 이론적 격자상수를 기준으로 격자를 늘이거나 줄이는 것으로 이루어졌다. 먼저 strain이 걸리지 않은 bulk 실리콘의 전자구조를 살펴보기로 하자. 실리콘은 conduction band의 minimum이 Γ 포인트에 있지 않은 indirect gap 반도체 물질로서 그 밴드갭은 1.17 eV로 알려져 있다. 하지만 LDA의 경우 밴드갭이 약 0.44 eV로서 실험값의 비해 상당히 작은 값을 알 수 있다. 그럼에도 불구하고 전체적인 밴드의 구조는 이 물질의 근본적인

전기적 물성을 잘 기술할 것이라는 것은 다른 다양한 연구를 통해 밝혀져 있다.

실리콘의 경우 Δ 포인트 근처에서 conduction band의 최소값을 가지며 이는 총 6개의 벨리로 ([100],[-100],[010],[0 -10],[001],[00 -1]) 이루어져 있다. 이는 strain이 걸리지 않고 결정의 symmetry가 유지되어 있는 경우 완벽히 동등한 band가 되며 각 방향의 longitudinal 방향에 대한 밴드의 유효질량은 transverse한 방향의 유효질량에 비해 4배 이상 크다는 특성을 가지고 있다.

Strain이 걸린 경우에 대한 밴드구조에 대해 살펴보기로 하자. 이번 연구에서는 격자의 symmetry를 깨기 위해 biaxial한 strain을 걸었으며 hydrostatic한 strain을 걸게 되면 현재와 같은 논의는 성립할 수 없음을 미리 언급해 둔다. Biaxial strain의 경우 xy면에 대한 격자상수를 조절함을 통해 계산하였다. 이 때 tensile에 해당하는 strain을 xy평면에 걸게 되면 z축 방향에 격자상수는 줄어들게 되고 이는 곧 z방향에 있던 valley를 다른 쪽 방향에 있던 valley보다 에너지적으로 내리게 되는 효과를 가져온다. 반대로 compressive strain의 경우 z 방향의 격자상수는 늘어나게 되므로 그 방향의 valley의 에너지를 더 높은 곳에 위치시키도록 만들며 이는 그림 1에 나타나 있다.

그러면 왜 전자의 이동도가 실리콘 격자의 biaxial한 strain을 걸게 되면 늘어나거나 줄어드는지에 대한 이유를 살펴보도록 하자. 앞서 언급하였듯이 각 valley에서의 전자의 유효질량은 longitudinal 방향과 transverse 방향에 차이가 있다. 이러한 상황에서 tensile strain을 xy면에 걸어주게 되면 z 방향 valley의 에너지가 조금 더 낮은 상태가 되는데 결국 전자는 그러한 z 방향 valley에 더욱 많이 위치하게 된다. 그렇게 되면 상당량의 전자는 z방향 valley의 유효질량을 가질 수 있는데 MOSFET 소자에서 채널을 통과하는 전자의 이동방향이 실리콘의 x방향이라 하면 결국 z 방향 valley의 transverse방향의 유효 질량을 가질 수 있다. Table 1은 각 valley에 채워지는 전자의 농도를 고려한 전자의 유효 이동도 질량을 보여주며 총 전자의 농도가 10^{17} cm^{-3} 라는 가정하에서 식 (2)에 의해 결정된다. Table에서 보여주듯이 유효 이동도 질량은 tensile strain이 걸린 경우 작아지게 되며 반대로 compressive strain을 x 방향 valley의 longitudinal 유효 질량이 상대적으로 크게 기여하므로 유효 이동도 질량은 증가하게 된다. 결국 xy면에 tensile

strain을 걸어주는 것을 통해 전자의 이동도를 증가시킬 수 있는 것이다.

CONCLUSION

이번 연구에서는 실리콘에서 격자의 strain이 어떻게 전자의 이동도를 변화시키는 지에 대해 전자구조적 관점에서 살펴보았다. 전자의 이동도를 결정하는 주요 인자 중 하나인 유효 질량을 계산해 보았으며 각 valley의 전자의 농도를 고려한 유효 이동도 질량 계산을 통해 strain 효과를 판단하여 보았다. 그 결과 xy 방향에 tensile strain이 걸리는 경우 전자의 유효 이동도 질량을 낮추게 되고 결국 전자의 이동도를 높이는 효과를 가져왔으며 반대로 compressive strain이 걸리는 경우 유효 이동도 질량을 높이게 되어 전자의 이동도를 떨어뜨리는 결과를 나타내었다.

REFERENCES

[1] M. L. Lee *et al.*, J. Appl. Phys. **97**, 011101 (2005).
 [2] J. M. Soler *et al.*, Journal of Physics: Condensed Matter **18**, 2745 (2002).
 [3] G. Kresse *et al.*, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996).
 [4] D. Yu *et al.*, Phys. Rev. B **78**, 245204 (2008).

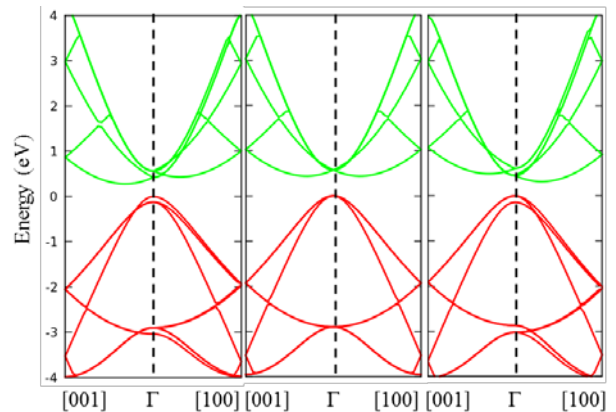


그림. 1. 왼쪽부터 차례로 1%, 0%, -1%의 biaxial strain 이 걸렸을 때에 실리콘의 전자 밴드 구조.

Strain	-1%	0	1%
m_x^{eff}	$0.31m_e$	$0.26 m_e$	$0.19 m_e$

표. 1. 각 strain 에 따른 전자의 유효 이동도 질량