

Si_{1-y}Ge_y 위에 성장시킨 Si_{1-x}Ge_x에서 성장방향과 응력변형 조건에 따른 정공의 이동도 연구

논문
11-4-3

Dependence of Hole Mobilities on the Growth Direction and Strain Condition in Si_{1-x}Ge_x Layers Grown on Si_{1-y}Ge_y Substrate

전상국*
(Sang-Kook Chun)

Abstract

The band structures of Si_{1-x}Ge_x layers grown on Si_{1-y}Ge_y substrate are calculated using *k·p* and strain Hamiltonians. The hole drift mobilities in the plane direction are then calculated by taking into account the screening effect and the density-of-states of the impurity band. When Si_{1-x}Ge_x is grown on Si substrate, the mobilities of (110) and (111) Si_{1-x}Ge_x layers are larger than that of (001) Si_{1-x}Ge_x. However, due to the large defect and surface scattering, (110) and (111) Si_{1-x}Ge_x layers may not be useful for the development of the fast device. Meanwhile, when Si is grown on Si_{1-y}Ge_y substrate, the mobilities of (001) and (110) Si layers are greatly enhanced. Based on the amount of defect and the surface scattering, it is expected that Si grown on (001) Si_{1-y}Ge_y substrate, where the Ge contents is larger than 10%(y>0.1), has the highest mobility.

Key Words (중요용어) : growth direction(성장방향), strain(응력변형), SiGe, hole mobility(정공이동도)

1. 서 론

Si에서 정공의 이동도는 전자의 이동도보다 작으므로 CMOS와 같은 소자를 만드는데 어려움이 따른다. 정공의 이동도가 전자의 이동도보다 낮은 이유는 에너지 구조로 이해할 수 있다. Si의 가전자대를 이루고 있는 heavy hole(HH), light hole(LH), 그리고 spin-orbit 밴드(SO)가 *I* 지점에서 매우 근접하여 있으며 대부분의 정공이 머무르는 HH의 상태 밀도(density-of-states)는 전도대의 상태 밀도보다 매우 크다. 전도대에서 전자가 산란되는 경우와 비교해 볼 때, 가전자대에서 세 밴드는 근접하여

있으므로 정공이 다른 밴드로 천이 하는 현상인 interband 산란이 크며 HH의 상태 밀도가 크기 때문에 정공이 같은 밴드로 천이 하는 intraband 산란도 크다. 따라서, 정공의 이동도를 향상시키기 위해서는 에너지 구조를 인위적으로 변화시킬 필요가 있다.

Molecular beam epitaxy(MBE)나 다른 저온 성장방법을 이용하여 Si 위에 Si_{1-x}Ge_x을 성장시켜 응력변형(strain)을 인위적으로 집어넣을 수 있다. Si의 격자 상수와 같아지게 길러진 Si_{1-x}Ge_x은 평면방향으로 압축 응력변형을 겪게된다. 이 경우, 가전자대에서 근접해 있던 세 개의 밴드는 에너지 상에서 서로 멀리 떨어지게 되어 interband 산란이 줄어든다. 또한, 떨어진 HH와 LH의 상태 밀도는 작아지므로 intraband 산란도 줄어든다. 결과적으로, 응력변형을 첨가하여 에너지 구조를 변화시킴으로써 정공의 이동도를 향상시킬 수 있다.^{1,2)}

지금까지는 (001) Si 위에 Si_{1-x}Ge_x 층을 성장시

* : 인하대학교 전자전기컴퓨터 공학부
(인천광역시 남구 용현동 253, Fax:032-875-5882
E-mail: sangkook@dragon.inha.ac.kr)
1998년 1월 22일 접수, 1998년 3월 16일 심사완료

켜 이동도의 향상을 꾀하여 왔다. (110) 또는 (111) Si 위에 성장시킨 Si_{1-x}Ge_x 층에는 defect이 많이 생기며 표면산란도 크다. 그러나, defect와 표면 산란을 줄일 수 있는 방법을 연구하면, (110) 또는 (111) Si_{1-x}Ge_x 층을 이용하여 전기적 특성을 향상시킬 수 있다. 한 편, relaxed SiGe를 buffer로 이용하여 성장시킨 박막은 다양한 응력변형 조건을 갖출 수 있으므로 band engineering을 통해 새로운 구조의 소자를 개발할 수 있다. 따라서, 성장방향과 응력변형 조건에 따른 에너지 구조의 변화를 통하여 전기적 특성을 이해하는 것은 Si 기술을 기반으로 하는 다양한 SiGe 소자를 개발하기 위하여 반드시 필요하다.

위와 같은 연구를 수행하기 위해서 본 논문에서는 $k \cdot p$ 방법을 이용하였다. $k \cdot p$ 방법은 특정지점 근처에서만 정확한 에너지 값을 얻을 수 있지만, 대부분의 정공은 Γ 근처에 머물게 되므로 $k \cdot p$ 방법은 이동도 계산에 유용하다. 또한, $k \cdot p$ 방법은 응력변형에 의한 밴드의 변화를 쉽게 첨가할 수가 있어 strained SiGe의 이동도를 얻을 수 있다. 특히, 이 논문에서는 불순물 농도가 높을 경우에 중요시 되는 정공에 의한 screening 현상과 불순물 띠에 의한 상태 밀도의 증가를 고려하여 정공의 평면방향 drift 이동도를 계산하였다.

2. Hamiltonian

$k \cdot p$ 및 strain Hamiltonian을 계산할 때, 고려하는 밴드의 수가 많을수록 에너지 구조의 정확성은 높아지나 필요한 밴드 매개 변수의 숫자도 증가하여 실험적으로 얻는 데 어려움이 따르며 계산시간이 증가하는 단점이 있다. 따라서, 고려하는 밴드의 숫자를 제한할 필요가 있다. 1개의 전도대와 3개의 가전자대를 고려하여 만든 8×8 Hamiltonian을 이용하면 발생하는 오차는 무시할 정도로 줄일 수 있다. 특히, Si 또는 Si을 많이 함유한 SiGe의 경우, 전도대는 에너지 상에서 가전자대보다 매우 높은 곳에 위치하고 있으므로 전도대를 제외한 6×6 Hamiltonian을 이용할 수 있다. 전도대를 제외함으로써 추가로 발생할 수 있는 오차는 전도대와 가전자대와의 coupling interaction을 포함한 inverse mass band parameter(IMBP)를 이용함으로써 최소화시킬 수 있다. HH, LH, 그리고 SO를 (J, m_i) 표현법으로 정한 6개의 기초 함수를 이용하여 $k \cdot p$ Hamiltonian을 얻을 수 있으며 그 표현 식은 아래

와 같다.^{3,4)}

$$H_k = A(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) - \frac{1}{3}N[k_x k_y(J_x J_y + J_y J_x) + c.p.] - B[k_x^2(J_x^2 - \frac{1}{3}J^2) + c.p.] \quad (1)$$

$c.p.$ 는 cyclic permutation을 의미한다. A, B , 그리고 N 은 전도대의 영향을 고려한 IMBP이며⁵⁾ J 는 angular momentum operator이다.

Si_{1-y}Ge_y 위에 성장시킨 Si_{1-x}Ge_x 층은 ($x \neq y$) 평면방향으로 압축 또는 팽창 응력변형을 겪는다. 이때, 평면방향의 응력변형은 hydrostatic 응력변형과 uniaxial 응력변형으로 나뉜다. Hydrostatic 응력변형은 가전자대 내의 3개의 밴드를 같은 양의 에너지만큼 이동시키지만 uniaxial 응력변형은 3개의 밴드를 상대적으로 다르게 이동시킨다.³⁾ Kleiner와 Roth⁶⁾는 HH와 LH만을 이용하여 응력변형에 의한 에너지 구조의 변형을 설명하였다. 그 후, Hasegawa³⁾는 SO를 포함하여 (J, m_i) 표현법으로 정한 6개의 기초 함수를 이용하여 strain Hamiltonian을 얻었으며 아래와 같다.

$$H_e = D_d^v(e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}) + \frac{2}{3}D_u[e_{xx}(J_x^2 - \frac{1}{3}J^2) + c.p.] + \frac{1}{3}D_u[e_{xy}(J_x J_y + J_y J_x) + c.p.] \quad (2)$$

D_d^v 는 hydrostatic 응력변형을 대변하는 변형 포텐셜(deformation potential)이며 가전자대의 상대적인 에너지 변화와는 무관하다. 따라서, 식 (2)에서 첫 번째 항은 고려하지 않아도 무방하다. 그러나, 첫 번째 항은 가전자대를 포함한 Hamiltonian을 이용할 때에 에너지 갭에 변화를 줄 수 있다. D_u 와 D_u' 는 $\langle 001 \rangle$ 및 $\langle 111 \rangle$ 방향의 uniaxial 응력변형을 대변하는 변형 포텐셜이다. Si과 Ge의 변형 포텐셜은 표 1에 있으며 SiGe alloy의 변형 포텐셜은 Si과 Ge의 값을 선형 내삽법(linear interpolation)을 이용하여 얻었다. e_{ij} 는 conventional strain component이며 성장방향에 따라 달라진다.

표 1. Si과 Ge의 밴드 매개 변수.

Table 1. Band parameters of bulk Si and Ge.

Parameter	Si	Ge	Unit
D_u (100)	3.41	3.32	eV
D_u (111)	4.42	3.81	eV
ν	0.28	0.273	none
a	0.64	0.60	none

식 (2)에서 e_{ij} 는 성장시킨 박막의 평면방향에서 변형률이 등방성이라는 사실을 이용하여 다음과 같이 얻을 수 있다. 결정 방향 중, [100], [010], 그리고 [001] 방향을 Cartesian 좌표계 $r(x, y, z)$ 의 세 축으로 설정한다. 박막의 성장방향을 z' 로 선택하고 박막의 평면방향을 x' 와 y' 로 정하면 새로운 Cartesian 좌표계 $r'(x', y', z')$ 를 정의할 수 있다. 두 좌표계는 Euler angle을 이용한 direction cosine $\|\alpha(\theta, \phi)\|$ 에 의해 아래와 같이 상호 연관된다.

$$[r'] = \|\alpha(\theta, \phi)\| \cdot [r] \quad (3)$$

z' 방향으로 박막을 성장시킬 때, 박막의 격자상수 변화는 평면방향의 힘 때문이므로 stress tensor $\|T\|$ 는 아래와 같이 정의될 수 있다.

$$\|T\| = \begin{bmatrix} T_{x'} & 0 & 0 \\ 0 & T_{y'} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_{x'} \\ T_{y'} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (4)$$

좌표계 $r(x, y, z)$ 에서의 stress tensor $\|T\|$ 는 unitary transformation을 이용하면

$$\|T\| = \|\alpha^{-1}\| \cdot \|T'\| \cdot \|\alpha\| \quad (5)$$

이며, $\|T\|$ 와 cubic elastic compliance tensor $\|s\|$ 의 곱인 strain tensor $\|\epsilon\|$ 는

$$\|\epsilon\| = \|s\| \cdot \|T\| \quad (6)$$

이다. Cubic material의 대칭성 때문에 $\|s\|$ 는 3개

의 상수로 표시할 수 있으며 다음과 같다.⁴⁾

$$\|s\| = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{12} & 0 & 0 & 0 \\ s_{12} & s_{11} & s_{12} & 0 & 0 & 0 \\ s_{12} & s_{12} & s_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4}s_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4}s_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4}s_{44} \end{bmatrix} \quad (7)$$

$$s_{12} = -\nu s_{11} \quad (8)$$

$$s_{44} = 2a(s_{11} + s_{12}) \quad (9)$$

s_{ij} 는 재료의 특성을 나타내는 상수로서 Poisson 비율인 ν 와 anisotropy factor인 a 에 의해 상호 연관된다. 식 (6)에서 얻은 $\|\epsilon\|$ 는 좌표계 $r'(x', y', z')$ 에서의 값으로 아래와 같이 변환시킬 수 있다.

$$\|\epsilon'\| = \|\alpha\| \cdot \|\epsilon\| \cdot \|\alpha^{-1}\| = \begin{bmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{zz} \\ \epsilon_{xy} \\ \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} \end{bmatrix} \quad (10)$$

여러 과정을 거쳐 $\|\epsilon'\|$ 를 얻은 이유는 $\|s\|$ 가 좌표계 $r(x, y, z)$ 에서만 유효하므로 $\|\epsilon'\|$ 를 $\|T'\|$ 로부터 직접 얻을 수 없기 때문이다. z' 방향으로 성장시킨 박막은 $x'y'$ 평면에서 등방성의 응력변형을 겪으므로 식 (10)에서 ϵ_{xx} 은 ϵ_{yy} 와 같아야한다. 이와 같은 조건으로부터 식 (4)의 $T_{x'}$ 와 $T_{y'}$ 를 구할 수 있으며, $\|T\|$ 와 $\|\epsilon\|$ 를 차례로 얻을 수 있다. 최종적으로, e_{ij} 를 아래의 정의에 의해서 정해진다.

$$\|e_{ij}\| = \begin{pmatrix} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} & (i \neq j) \\ \frac{\partial u_i}{\partial x_i} & (i = j) \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{zz} \\ 2\epsilon_{xy} \\ 2\epsilon_{yz} \\ 2\epsilon_{zx} \end{bmatrix} \quad (11)$$

(001), (110), 그리고 (111) 성장방향에 대해서 얻은

$\|e_{ij}\|$ 는 표 2에 요약되어있다. 표 2에서 j 는 변형된 격자상수의 차이를 원래의 격자상수로 나눈 값이다.

표 2. (001), (110), 그리고 (111) 방향으로 성장시킬때의 conventional strain component.

Table 2. Conventional strain components for (001), (110), and (111) growth directions.

e_{ij}	(001)	(110)	(111)
e_{xx}	$-j$	$-\frac{1-2\nu-\nu a}{1+a-2\nu} j$	$\frac{-2(1-2\nu) f}{(2+a)-\nu(4-a)}$
e_{yy}	$-j$	$-\frac{1-2\nu-\nu a}{1+a-2\nu} j$	$\frac{-2(1-2\nu) f}{(2+a)-\nu(4-a)}$
e_{zz}	$\frac{2\nu f}{1-\nu}$	$-j$	$\frac{-2(1-2\nu) f}{(2+a)-\nu(4-a)}$
e_{xy}	0	$\frac{a(1+\nu)}{1+a-2\nu} j$	$\frac{2a(1+\nu) f}{(2+a)-\nu(4-a)}$
e_{yz}	0	0	$\frac{2a(1+\nu) f}{(2+a)-\nu(4-a)}$
e_{zx}	0	0	$\frac{2a(1+\nu) f}{(2+a)-\nu(4-a)}$

3. 이동도 계산

6×6 $k \cdot p$ 및 strain Hamiltonian을 이용하여 I 근처의 에너지구조를 계산할 수 있다. Relaxation time approximation을 이용하여 Boltzmann transport equation을 풀면 이동도는 아래와 같이 얻을 수 있다.

$$\mu_D^j = \frac{-e \int \tau_T \frac{\partial f_{FD}}{\partial E} v_j^i v_j^j g_j(E) dE}{\int f_{FD} g_j(E) dE} \quad (12)$$

j 는 밴드의 종류를 나타내며, γ 는 정공이 움직이는 방향을 의미하며, v_j^i 는 j 밴드의 일정 에너지 표면(constant energy surface)에 있는 정공이 γ 방향으로 움직이는 속도이다. f_{FD} 는 Fermi-Dirac 분포함수이며, $g_j(E)$ 는 에너지 E 에서 j 밴드의 상태 밀도이다. τ_T 는 relaxation time으로서 acoustic phonon, optical phonon, ionized impurity, 그리고

alloy 산란에 의한 relaxation time을 Mattiessen 방식에 의해 구할 수 있다.

f_{FD} 는 Maxwell-Boltzmann 분포함수와는 달리 Fermi 에너지의 함수이다. Fermi 에너지는 불순물의 종류와 농도가 주어지면 온도의 함수로 결정된다. 일반적으로, 불순물에 의한 상태 밀도의 증가는 무시하며 불순물 에너지 준위는 일정하다고 가정한다. 그러나, 불순물 농도가 증가함에 따라 불순물에 의한 상태 밀도는 무시하지 못할 정도로 커지며 이온화된 정공이 Coulomb 힘을 차단함으로써 인해 불순물 에너지 준위도 변하게 된다.^{7,8)} 전자를 broadening 현상이라 부르며 후자를 screening 현상이라 지칭한다. 따라서 두 현상을 고려하여야 정확한 Fermi 에너지 준위를 구할 수 있다.

평면방향의 압축 또는 팽창 응력변형으로 인한 이동도의 증감은 주로 세 가지 이유로 설명할 수 있다. 첫째, uniaxial 응력변형은 I 지점에서 붙어있는 HH와 LH를 떨어트린다. HH(LH)에 있는 정공이 LH(HH)로 이동하기 위해서는 에너지의 변환이 동반되어야하므로 interband 산란은 크게 감소된다. 둘째로, 떨어진 HH와 LH의 상태 밀도가 달라진다. 즉, 정공이 이동할 수 있는 공간의 크기가 달라지며, 이는 같은 밴드 사이를 오가는 현상인 intraband 산란의 값이 달라짐을 의미한다. 셋째로, 정공의 평면방향의 속도가 달라진다. 평면방향 속도는 응력변형에 따라 크게 변하는 일정 에너지 표면의 모양에 의해 결정된다. 식 (12)에서, 첫째와 둘째 현상은 $g_j(E)$ 와 τ_T 에 반영되며 셋째 현상은 v_j^i 에 반영된다. 밴드가 등방성이고 포물형이라면, 속도는 밴드의 어느 곳에서나 일정하게 되어 식 (12)는 일반적으로 알려진 이동도의 표현식인 $e\tau(E_j)/m_c \sim 1/m_c m_d^{1.5}$ 로 된다. 이 때, 첫째와 둘째 현상은 m_a 의 변화로 설명이 되며, 셋째 현상은 m_c 의 변화로 설명이 된다.

식 (12)에서 얻은 이동도(μ_D)를 이용하여 총 이동도(μ_D)를 아래와 같이 구할 수 있다.

$$\mu_D^j = \frac{p_h \mu_D^h + p_l \mu_D^l + p_s \mu_D^s + p_{im} \mu_{Dim}^j}{p_h + p_l + p_s + p_{im}} \quad (13)$$

p_{im} 은 불순물 에너지 띠를 통하여 움직이는 정공의 농도이며 μ_{Dim}^j 은 그 정공들에 의한 이동도이다. 식 (13)에서 μ_{Dim}^j 은 불순물 에너지 띠의 에너지 구

조를 모르기 때문에 구하기 힘들다. 불순물 농도가 낮을 경우, p_{im} 과 μ_{Dim}^y 은 무시할 정도로 작다. 불순물 농도가 증가하면 p_{im} 과 μ_{Dim}^y 의 크기도 증가 하리라 예측된다. 그러나, μ_{Dim}^y 을 고려하지 않고 계산된 SiGe의 이동도 값이 높은 불순물 농도 영역에서도 ($N < 9 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$) 실험 값을 잘 설명하는 것으로 보아 불순물 띠를 통한 정공의 흐름은 무시해도 좋을 듯 싶다.

4. 결과

그림 1은 상온에서 (001), (110), 그리고 (111) 방향의 Si 기판 위에 길러진 strained p-type $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 의 평면방향 이동도를 Ge 함량의 함수로서 보여준다. 첨가한 boron의 농도는 10^{17} cm^{-3} 이며 Ge의 함량은 5%씩 증가시켰다. Ge의 함량이 증가함에 따라 이동도는 증가하며 증가하는 율은 성장방향에 따라 다르다. Si 기판 위에 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 을 기를 경우, $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 는 평면방향으로 압축변형을 겪게된다. 이때, HH는 LH위에 위치하게 되어 대부분의 정공은 HH에 존재하게 되어 interband 산란이 줄어든다. 또한, HH와 LH의 상태 밀도는 응력변형이 없는 경우에 비해 작아지므로 intraband 산란도 작아진다. Ge 함량이 많을수록 응력변형은 커지게 되어 HH와 LH는 더욱 떨어지게 될 뿐만 아니라 HH와 LH의 상태 밀도도 더욱 작아진다. 따라서, Ge의 함량이 증가할수록 interband 및 intraband 산란이 줄어들어 이동도는 증가하게 된다. 성장방향에 따라 이동도의 증가율이 다른 이유는 아래와 같다. Si 기판 위에 $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ 를 기를 경우, HH와 LH는 성장방향에 관계없이 30 meV 정도 떨어진다. 이 때, Γ 지점의 HH보다 10 meV 낮은 곳에서 HH의 m_a 를 보면, (001) $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ 은 $0.254 m_0$ 이고 (110) $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ 은 $0.391 m_0$ 이고 (111) $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ 은 $0.474 m_0$ 이다. 이 값들은 Si의 $m_a(0.54 m_0)$ 보다 작다. 반면, m_c 는 (110)와 (111) $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ 의 경우에 매우 작다. 결과적으로, Si에 비해 interband 및 intraband 산란이 크게 줄어든다. 가장 영향력이 큰 것은 m_c 의 변화로서 (110)와 (111) $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ 이동도가 (001) $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ 의 이동도보다 큰 이유가 된다. 위의 결과로 본다면, (110)와 (111) $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 가 (001) $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 보다 전기적 특성이 좋다. 그러나, 그림 1에서 보여주는 이동도

는 defect에 의한 산란과 표면 산란을 전혀 고려하지 않은 값이다. Defect에 의한 산란과 표면 산란이 (001) $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 에서 가장 적은 것을 감안하면, (001) $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 에 비해 (110)와 (111) $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 의 이동도가 크다고 볼 수는 없다. 따라서, (110)와 (111) 방향을 이용하기 위해서는 defect를 줄일 수 있는 성장기술의 발달이 요구되며 표면 산란을 줄일 수 있는 소자구조를 선택하여야 한다.

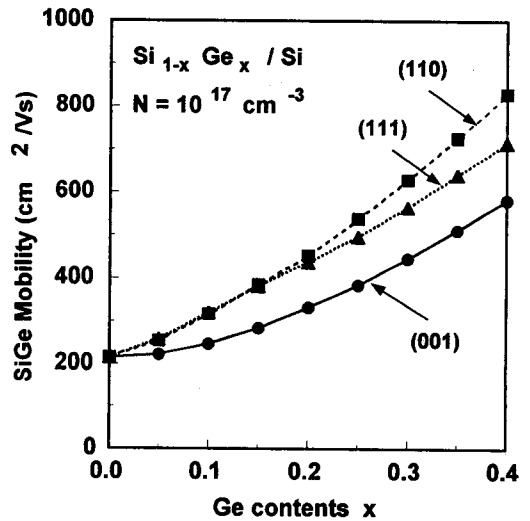


그림 1. Si 위에 기른 strained SiGe의 Ge 함량에 따른 이동도 변화.

Fig. 1. Drift mobility for the strained SiGe grown on Si as a function of Ge content.

그림 2는 상온에서 (001), (110), 그리고 (111) 방향의 Si 기판 위에 길러진 strained p-type $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 의 평면방향 이동도를 불순물 농도의 함수로서 보여준다. Ge의 함량은 20%이다. 불순물 농도가 낮은 곳에서, (001) $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ 에 비해 (110) $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ 는 25%의 이동도 증가를 보여주며 (111) $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ 는 18%의 이동도 증가를 보여준다. 불순물 농도가 높아지면서 (110) $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ 와 (111) $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ 는 비슷한 이동도 값을 보여주며 불순물 농도가 10^{18} cm^{-3} 에서 (001) $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ 에 비해 35% 가량의 이동도의 증가를 보여준다. 불순물의 농도가 높은 경우, 불순물에 의한 산란이 커져 defect에 의한 산란과 표면 산란의 영향은 상대적으로 줄어든다. 따라서, defect와 표면 산란이 (001) 방향보다 큰 (110)와 (111) 방향의 이용은 불순물이 높은 곳에서 용이해진다.

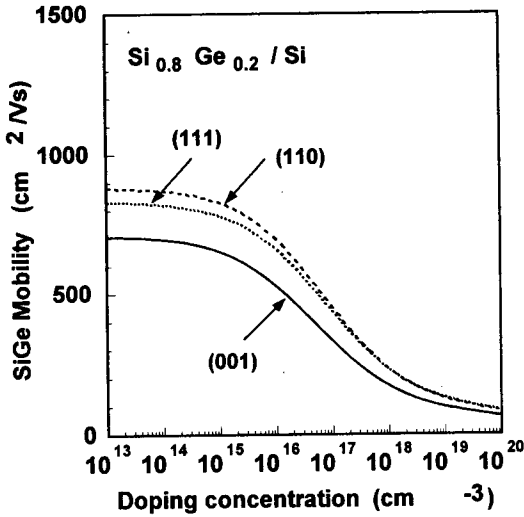


그림 2. Si 위에 기른 strained SiGe의 불순물 농도에 따른 이동도 변화.

Fig. 2. Mobility for the strained SiGe grown on Si as a function of doping concentration.

그림 3은 상온에서 (001), (110), 그리고 (111) 방향의 Si_{1-y}Ge_y 기판 위에 길러진 strained p-type Si의 평면방향 이동도를 Ge 함량의 함수로서 보여준다. 불순물로서 boron을 10¹⁷ cm⁻³ 넣었다. Ge의 함량은 5%씩 증가시켰으며, 비교하기 위하여 그림 1의 결과를 첨가하였다. Si_{1-y}Ge_y 기판 위에 기른 Si 박막 층은 양 방향 팽창 응력변형을 겪게 된다. 이 경우, LH이 HH보다 위에 존재하게 되므로 대부분의 정공은 LH에 존재하게 된다. 따라서, 이동도는 주로 LH에 있는 정공에 의해 결정되며, Si 기판 위에 SiGe을 기를 경우인 그림 1의 경우의 이동도와는 다른 양상을 보여준다. Si_{0.8}Ge_{0.2} 기판 위에 Si을 기를 경우, 성장방향에 관계없이 Si의 LH는 HH보다 90 meV 정도 위에 있다. Si 기판 위에 Si_{0.8}Ge_{0.2}를 기를 경우보다 HH와 LH는 많이 떨어지게 되어 interband 산란이 크게 줄어들음을 예측할 수 있다. 이 때, *I*지점의 LH보다 10 meV 낮은 곳에서 LH의 *m_a*를 보면, (001)Si_{0.8}Ge_{0.2}은 0.264 *m_o*이고 (110)Si_{0.8}Ge_{0.2}은 0.190 *m_o*이고 (111)Si_{0.8}Ge_{0.2}은 0.133 *m_o*이다. 반면, LH의 *m_c*는 (001)Si_{0.8}Ge_{0.2}의 경우에 제일 작고 (111)Si_{0.8}Ge_{0.2}의 경우에 제일 크다. 그러므로, (001)와 (110)Si_{0.8}Ge_{0.2}이 (111)Si_{0.8}Ge_{0.2}보다

높은 이동도를 보여준다. Si 기판 위에 Si_{1-x}Ge_x을 기를 경우와 비교해 볼 때, (001) Si은 주로 interband 산란의 감소 때문에 이동도가 향상되었으며 Ge 함량이 10%보다 큰 곳에서 (*y*>0.1) 이동도의 증가가 두드러지며, (110) Si은 *m_a*의 감소와 interband 산란의 감소 때문에 이동도가 향상되었으며 Ge 함량이 15%보다 큰 곳에서 (*y*>0.15) 이동도가 커지며, (111) Si은 주로 *m_c*의 증가로 인해 이동도가 오히려 감소했다. 성장방향의 defect를 고려해 볼 때, (001) Si_{1-y}Ge_y 기판 위에 길러진 Si이 가장 우수한 전기적 특성을 갖는다고 보여지며 Ge 함량은 10% 이상(*y*>0.1) 타당하다.

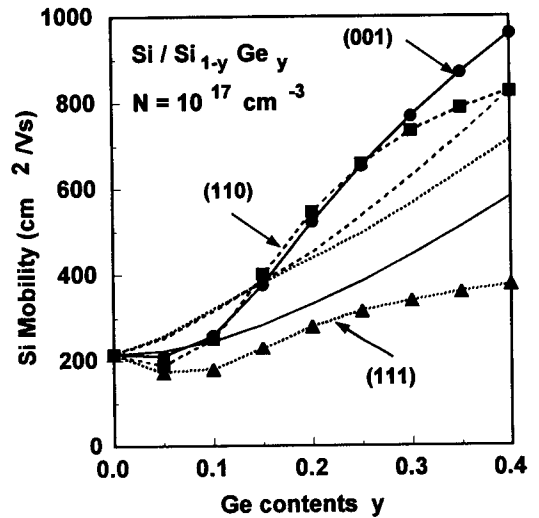


그림 3. SiGe 위에 기른 strained Si의 Ge 함량에 따른 이동도 변화.

Fig. 3. Drift mobility for the strained Si grown on SiGe as a function of Ge content.

그림 4는 상온에서 (001), (110), 그리고 (111) 방향의 Si_{1-y}Ge_y 기판 위에 길러진 strained p-type Si의 평면방향 이동도를 불순물 농도의 함수로서 보여준다. Ge의 함량은 20%(*y*=0.2)이다. (111) 방향으로 성장시킨 Si의 이동도는 다른 두 방향에 비해서 매우 작다. 불순물 농도가 10¹⁷ cm⁻³보다 낮은 곳에서는, (001) 방향이 가장 좋은 전기적 특성을 갖는다. 하지만, 농도가 높아지면 (*N*>10¹⁷ cm⁻³) (110) 방향의 전기적 특성이 좋아짐을 볼 수 있다.

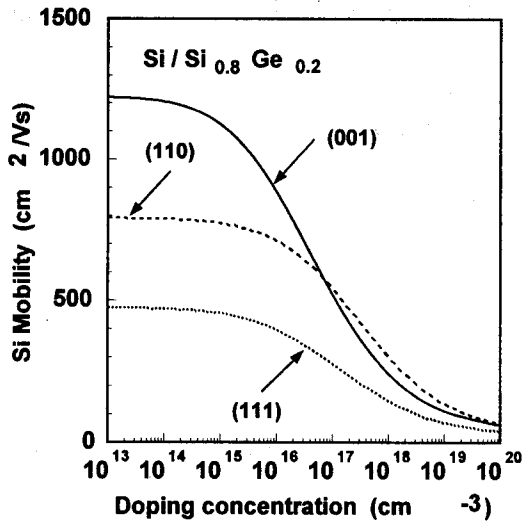


그림 4. SiGe 위에 기른 strained Si의 불순물 농도에 따른 이동도 변화.

Fig. 4. Mobility for the strained Si grown on SiGe as a function of doping concentration.

5. 결론

Si 위에 성장시킨 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 는 평면방향으로 압축 변형을 겪게 된다. 이 경우, 대부분의 정공은 HH에 존재한다. (110)와 (111) $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 는 (001) $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 보다 높은 이동도를 갖지만, defect 또는 표면에 의한 산란이 포함된다면 (001) $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 에 비해 (110)와 (111) $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 의 이동도가 크다고 볼 수는 없다. 따라서, (110)와 (111) 방향을 이용하기 위해서는 defect를 줄일 수 있는 성장기술의 발달과 표면 산란을 줄일 수 있는 소자구조가 필요하다. Si 층을 $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ 위에 성장시킨다면, Si 박막 층은 평면방향으로 팽창 변형을 겪게 된다. 이 경우, 대부분의 정공은 LH에 존재하게 되어 이동도는 주로 LH에 있는 정공에 의해 결정된다. Si 기판 위에 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 을 기를 경우와 비교해 볼 때, (001) Si은 주로 interband 산란의 감소 때문에 이동도가 향상되며 Ge 함량이 10%보다 큰 곳에서 ($y > 0.1$) 이동도의 증가가 두드러진다. (110) Si은 m_a 의 감소와 interband 산란의 감소 때문에 이동도가 향상되며 Ge 함량이 15%보다 큰 곳에서 ($y > 0.15$) 이동도가 커진다. 한편, (111) Si은 m_c 의 증가로 인해 이동도

가 오히려 감소했다. (001) 방향으로 성장시킨 박막에서 defect와 표면 산란이 가장 적음을 감안할 때, (001) $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ 기판 위에 길러진 Si이 가장 우수한 전기적 특성을 갖는다.

감사의 글

본 연구는 97년도 교육부 반도체분야 학술연구조성비(ISRC 97-E-1309)에 의해 수행되었습니다.

참고문헌

1. J. M. Hinckley and J. Singh, "Hole transport theory in pseudomorphic $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ alloys grown on Si(001) substrates", Phys. Rev. B, vol. 41, no. 5, pp. 2912-2926, 1990
2. S. K. Chun and K. L. Wang, "Effective mass and mobility of holes in strained $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ layers on (001) $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ substrate", IEEE T-ED, vol. 39, no. 9, pp. 2153-2164, 1992.
3. H. Hasegawa, "Theory of cyclotron resonance in strained silicon crystals", Phys. Rev., vol. 129, no. 3, pp. 1029-1040, 1963.
4. J. C. Hensel and G. Feher, "Cyclotron resonance experiments in uniaxially stressed silicon: valence band inverse mass parameters and deformation potentials", Phys. Rev., vol. 129, no. 3, pp. 1041-1062, 1963.
5. P. Lawaetz, "Valence band parameters in cubic semiconductors", Phys. Rev., vol. 4, no. 10, pp. 3460-3467, 1971.
6. W. H. Kleiner and L. M. Roth, "Deformation potential in germanium from optical absorption lines for exciton formation", Phys. Rev. Lett., vol. 2, no. 8, pp. 334-336, 1959.
7. S. K. Chun, "Screening effects on the degree of ionization and hole mobility for p-type Si and Ge", J. Appl. Phys. vol. 80, no. 8, pp. 4773-4775, 1996.
8. A. Schenk, "Unified bulk mobility model for low- and high-field transport in silicon", J. Appl. Phys., vol. 79, no. 2, pp. 814-831, 1996.