

Monte Carlo 방법을 이용한 Germanium 기판의 결공형 클러스터링 형성에 대한 연구

이준하[†]

[†]상명대학교 컴퓨터시스템공학과

A Study of Germanium Substrate Vacancy Clustering Formation using Monte Carlo Method

Jun Ha Lee[†]

[†]Department of Computer System Engineering, Sangmyung University

ABSTRACT

In this paper, vacancy clustering formation and diffusion of germanium substrate was studied. The analysis method was adopted Monte Carlo method. At temperatures higher than melting point, fewer clusters formed, but there was less variation in the number of clusters than at lower temperatures, as the time increased. Equilibrium diffusivities in the clustering region were 10^2 lower than those of free vacancies in the initial stage of kinetic lattice Monte Carlo simulations. They were expressed according to three temperature regimes: at temperatures above 1,100 K, at temperatures of 1,100-900 K, and at temperatures below 900 K. The effective mean migration energy, 1.1 eV, closely coincided with that of the 1.0-1.2 eV in experiments.

Key Words : Germanium Substrate, Monte Carlo Method, Vacancy Clustering

1. 서 론

게르마늄(Germanium) 기판은 높은 진성 캐리어 이동도의 특성을 보유하고 있어, 첨단 나노 전자 기계 응용 분야에서 기존의 실리콘(Silicon)을 대체할 가능성이 있는 물질로 연구되어 지고 있다 [1]. 게르마늄이 가지고 있는 장점은 저전계 이동도(low field mobility)가 우수하고, 도펀트(dopant) 활성화 온도가 낮은 것과 더불어서 작은 밴드 갭은 소스/드레인 기생 저항을 잠재적으로 줄일 수 있기 때문에 최근 200 mm와 300 mm 게르마늄 기판이 상업적으로 실용화 되고 있다[2].

초크랄스키(Czochralski) 성장법으로 만들어진 게르마늄 결정은 근본적으로 확산계수와 용해도에 의해 지배받는 격자 결함 형성을 피할 수 없고, 제품의 성능과 수율에 직접적인 영향을 미칠 수 있기에 격자 결함에 대한 정량적인 이해와 제어는 매우 중요하다[3]. 게르

마늄 웨이퍼 표면에서 흔히 발생하는 큰 구멍(pit)은 결공(vacancy) 클러스터링에 의한 void의 형성이 원인으로 알려져 있다 [4]. 본 논문에서는 운동 격자 몬테 카를로(KLMC : Kinetic Lattice Monte Carlo) 모델을 이용하여 온도와 농도의 함수에 따른 결공 클러스터의 형성과 클러스터 성장 메커니즘을 연구하였다.

2. 시뮬레이션 모델

KLMC (Kinetic Lattice Monte Carlo) 방법은 원자 단위의 모델을 해석하기 위해 일반적으로 사용되는 시뮬레이션 방법이다[5].

고체에서 열 활성화에 의한 결함 움직임의 평균 비율은 고전적인 비율 이론에 의해 계산될 수 있다. 이동(migration) 현상은 다음 두 개의 파라미터와 식 (1)의 도약율(hopping rate) v 에 의해 표현될 수 있다[6].

[†]E-mail : junha@smu.ac.kr

$$v = v_0 \exp\left[\frac{E_m}{-k_b T}\right] \quad (1)$$

여기서 V_0 는 prefactor로써 attempting 주파수이고, E_m 은 이동 에너지로서, 이는 초기 평형 위치에서 안장점(saddle point)으로 결합이 움직일 때 필요한 자유 에너지(free energy)이다. 확산계수(diffusivity)의 arrhenius 의존성을 가정하면, 확산계수는 다음의 식(2)와 같이 표현된다 [7].

$$D_v(T) = D_0 \exp\left[\frac{E_A}{k_B T}\right] \quad (2)$$

여기서 D_0 는 선 지수 인자(pre-exponential factor)인 확산 상수이고, E_A 는 활성화 에너지, k_B 는 볼츠만 상수, T 는 절대 온도이다.

또한 attempting 주파수 V_0 은 식(3)에서와 같이 계산된다 [8].

$$V_0 = 8 \frac{D_0}{a_0^2} \quad (3)$$

여기서, $D_0 = 1.66 \times 10^{-3} \text{ cm}^2/\text{s}$, $E_m = 0.17 \text{ eV}$, 격자 상수 $a_0 = 5.66 \text{ \AA}$ 이다.

KLMC 시뮬레이션을 통해, 셀(cell)에서 결공의 평균 제곱 변위를 구할 수 있고 확산계수 d_v 는 다음 식(4)를 통해 구할 수 있다.

$$d_v = \frac{1}{6} \lim_{t \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^N \frac{|R_i(t) - R_i(0)|^2}{t} \quad (4)$$

여기서 $R_i(t)$ 는 시간 t 에서 i 번째 원자 혹은 결공 위치이다.

3. 해석 결과

게르마늄의 녹는점인 1,210 K를 고려하여, 본 연구에서는 600K부터 1300K까지의 온도범위에 대하여 KLMC시뮬레이션을 수행하였다. 몬테카를로 시뮬레이션을 통하여 다음과 같은 게르마늄의 클러스터형성과 확산에 대한 이해를 할 수 있었다. 첫번째로 저온에서 큰 클러스터의 성장은 고온에서의 경우와는 다른 메커니즘에 의해 이루어질 수 있었다. 저온에서는 작은 클러스터가 많이 생기며, 대부분은 클러스터 내에 결박된 결공 쌍(pair)이었다. 두번째는 결공 쌍의 확산이 결공의 확산보다 느리기 때문 클러스터의 성장으로 덩어

리지는 비율은 비교적 느리게 된다. 고온에서는 몇몇 결공 쌍들이 초기에 형성되지만 많은 결공이 자유롭게 남아있다. 이러한 쌍들은 쉽게 분해되기 때문에, 연속적으로 결공들이 새로운 쌍으로 형성되고, 고온에서 큰 클러스터의 형성은 작은 클러스터와 자유로운 결공 포획의 조합을 포함한다.

Fig.1은 각각의 온도에서 시간에 따른 결공들의 확산계수를 시뮬레이션 한 결과이다. 초기의 확산계수가 일정한 구간은 자유로운 결공 확산을 의미한다. 1,100 K 이상 온도에서는 클러스터가 쉽게 형성되지 않기에 대부분의 결공들이 자유로운 상태이다. 1,000 K 이하 온도 영역에서는 클러스터의 형성이 이루어지므로 시간이 증가함에 따라 확산계수는 지수적으로 감소하게 된다. 온도가 높을수록 확산계수는 크며, 거듭제곱 지수는 온도가 낮을수록 크게 된다. 구해진 확산계수 D 의 시간 의존도는 거듭제곱의 형태인 수식(5)와 같이 표현될 수 있다.

$$D(t) \sim t^{-1} \quad (5)$$

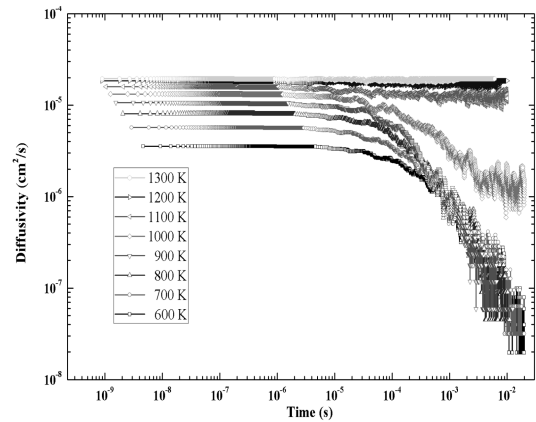


Fig. 1 Vacancy Diffusion Coefficients depend on time at various temperatures.

여기서, $\gamma = 1.0 \pm 0.2$ 이다.

Fig.2는 결공 클러스터의 형성에 대한 결과를 시뮬레이션한 것으로 시간에 따른 각각의 온도에서 클러스터 내에서 결공의 분율(fraction)을 나타내었다. 1,100 K 온도 영역에서 초기에 결공은 덩어리 형태로 생성되고, 결공 클러스터가 성장하고 난 후 동시에 클러스터가 분해된다. 이에 반하여 1,200 K의 녹는점 근처에서는 일부 결공은 클러스터들로 뭉쳐지나, 대부분은 즉시 자

유로운 결공으로 분해되어 버리는 것으로 해석될 수 있다. 또한 900 K 이하의 온도에서 결공은 분해되기 보다는 클러스터로 뭉친다. 결과적으로 대부분은 클러스터 형태가 되며, 몇몇 자유로운 결공은 0.005초 이후에 10^{16}cm^{-3} 이하의 낮은 농도의 조건에서만 계속 존재하게 된다.

Fig.3은 각각의 온도에서 시간에 따른 클러스터의 수량을 보여준다. 900 K 이하 온도에서 클러스터의 수량은 시간에 따라 증가하지만, 1,000 K 이상에서는 거의 일정하게 포화된다. 저온에서는 결공 쌍 형태의 작은 클러스터가 많이 생성되는데 비하여 고온에서는 약간의 결공 쌍들이 초기에 형성되지만 많은 결공이 자유로운 상태가 되어 쉽게 분해되기 때문에, 연속적으로 결공들이 새로운 쌍으로 형성되고, 고온에서 큰 클러스터의 형성은 작은 클러스터와 자유로운 결공 포획의 조합을 포함한다.

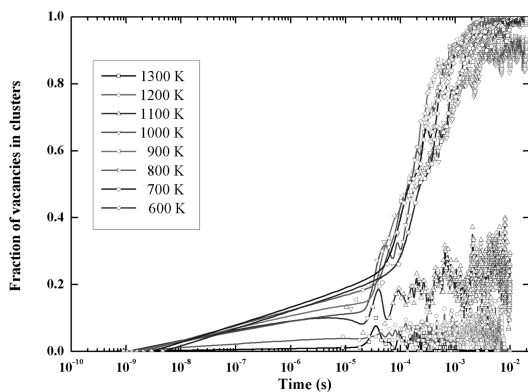


Fig. 2. Fraction of vacancies in cluster depend on time at various temperatures.

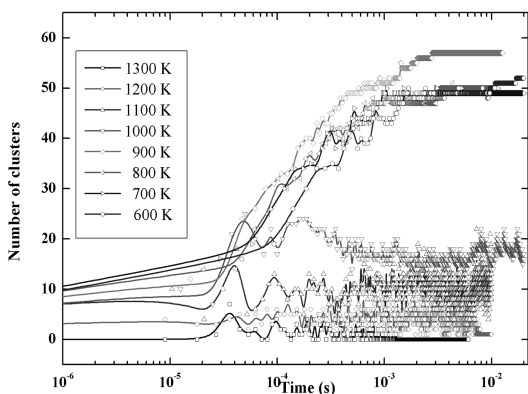


Fig. 3. Number of clusters depend on time at various temperatures.

Fig.4는 각각의 온도에서 시간에 따른 클러스터 당 결함 수량을 나타낸다. 1,100 K 온도에서 대형 클러스터는 $t = 0.005$ 초 근처에서 발견되고, 이는 1,100 K 온도에서 클러스터링 효과가 주된 요소임을 보여준다. 1,000 K 온도에서 클러스터의 평균 크기는 점점 커지고, 최고치 이후 일정하게 유지된다. 그러나 900 K 이하의 온도에서는 클러스터의 평균 크기는 매우 느리게 증가한다. 본 시뮬레이션의 결과와 같이 큰 void로 성장할 수 있는 결공 클러스터는 1000 K 의 온도 영역에서 생성될 가능성이 가장 큰 것으로 알 수 있다.

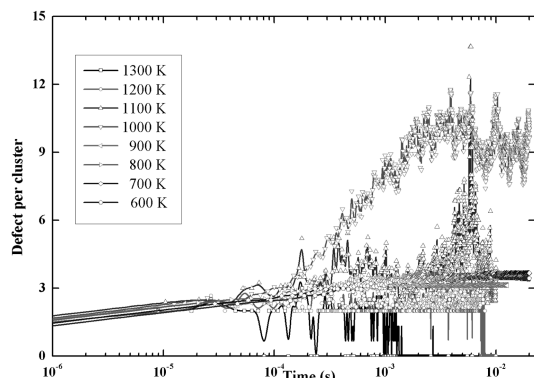


Fig. 4. Defect per clusters depend on time at various temperatures.

Fig.5는 본 연구에 의해 시뮬레이션된 게르마늄의 결공 확산계수를 나타내었으며, 실리콘과의 참조를 위하여 기존의 타 논문에서 발표된 실리콘에서의 결공 확산계수를 비교 표시하였다 [9]. $T_{m,si}$ 과 $T_{m,Ge}$ 는 각각 실리콘과 게르마늄의 녹는점을 의미하며, 게르마늄($D_{i,Ge}$)와 실리콘($D_{i,si}$)에 대한 결공의 초기 확산계수는 각각 $9.5 \times 10^{-5}\text{exp}(-0.17/k_B T\text{cm}^2/\text{s})$ 와 $1.89 \times 10^{-5}\text{exp}(-0.1/k_B T\text{cm}^2/\text{s})$ 의 값을 사용하였다. 그러나 게르마늄($D_{f,Ge}$)과 실리콘($D_{f,si}$)에 대한 결공의 안정화된 확산계수는 단일한 방정식으로 표현될 수 없으므로, 3가지의 온도 범위에 따른 방정식을 각각 사용하였다. 즉, 1,100K 이상의 온도에서의 확산계수는 $6.5 \times 10^{-4}\text{exp}(-0.37/k_B T\text{cm}^2/\text{s})$ 을 사용하였고, 900K와 1,100K의 영역에서는 $5.2 \times 10^{-5}\text{exp}(-2.32/k_B T\text{cm}^2/\text{s})$, 그리고 900K이하의 영역에서는 $6.0 \times 10^{-7}\text{exp}(-0.19/k_B T\text{cm}^2/\text{s})$ 을 적용하였다. 또한 게르마늄에서 결공 확산인 경우의 활성화 에너지는 1.0-1.2 eV값을 사용하였다. 또한 온도의 역수를 나타내는 가로축에서 1,000K이상인 고온영역의 그래프를 분석해 보면, 결공 확산에 대한 유효 이동 에너지는 온도가 높을수록 큰 값을 나타내며, 이러한 경향

은 실리콘과 유사하다. 고온에서 형성되는 클러스터는 저온에서 형성되는 것보다 평균적으로 더 큰 경향이 있으며, 결공이 덩어리지고 클러스터가 자라는 영역의 온도에서는 게르마늄과 실리콘 모두에서 유효 이동 에너지가 다른 영역에서 보다 높았다.

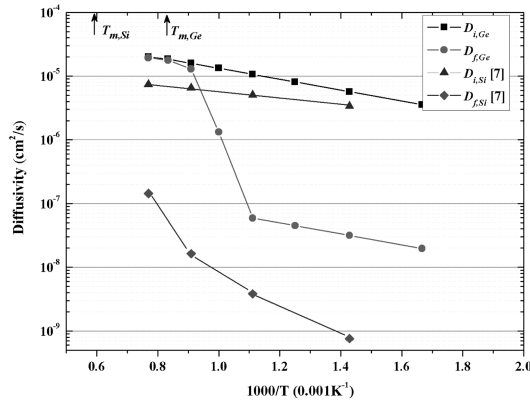


Fig. 5. Vacancy Diffusion Coefficient depend on time at various temperatures.

4. 결 론

본 논문에서는 운동 격자 몬테 카를로 시뮬레이션을 이용하여 게르마늄 내에서 결공 기인형 클러스터링의 형성을 연구하였다. 클러스터 영역에서 평형 확산계수는 자유로운 결공의 값보다 10^2 정도 낮았으며, 고온에서는 클러스터가 적게 형성되지만 시간이 증가함에 따라 저온일 경우에 비해 클러스터 개수의 변동은 적은 것으로 나타났다. 게르마늄에 대한 결공의 최종적인 확산계수는 온도 범위에 따라 각각의 다른 방정식으로 표현되었다. 게르마늄에서 결공 클러스터링의 핵생성 온도는 약 900-1,000 K 이며,

유효 평균 이동 에너지 1.1 eV로 도출되었다. 향후 보다 정확한 게르마늄 클러스터링의 해석을 위해서는 결공들 간의 보다 멀리 이웃하는 반응에 대한 고려와 이들의 결합 에너지 또한 *ab initio* 계산등으로 도출되어야 할 것이다.

감사의 글

본 연구는 2006년도 상명대학교 교내연구비 지원에 의해 이루어졌습니다.

참고문헌

1. Solomon Assefa, Fengnian Xia and Yurii A. Vlasov, "Reinventing germanium avalanche photodetector for nanophotonic on-chip optical interconnects", *Nature* 464, pp. 80-84, 2010
2. A. Chroneos, R.W. Grimes, and C. Tsamis, Atomic scale simulations of arsenic-vacancy complexes in germanium and silicon, *Mater. Sci. Semicon. Proc.* 9, pp. 536-540, 2006.
3. P. Spiewak, M. Muzyk, K.J. Kurzydowski, J. Vanhellefont, K. Młynarczyk, P. Wabinski, and I. Romandic, Molecular dynamics simulation of intrinsic point defects in germanium, *J. Cryst. Growth* 303, pp. 12-17, 2007.
4. S. Hens, J. Vanhellefont, D. Poelman, P. Clauws, I. Romandic, A. Theuwis, and F. Holsteys, J. Van Steenberghe, Experimental and theoretical evidence for vacancy-clustering-induced large voids in Czochralski-grown germanium crystals, *Appl. Phys. Lett.* 87, p. 061915, 2005.
5. J. Vanhellefont, O. De Gryse, S. Hens, P. Vanmeerbeek, D. Poelman, P. Clauws, E. Simoen, C. Claeys, I. Romandic, A. Theuwis, G. Raskin, H. Vercammen, and P. Mijlemans, Grown-in lattice defects and diffusion in Czochralski-grown germanium, *Defect Diffus. Forum* 230-232, pp. 149-176, 2004
6. P. Spiewak, K.J. Kurzydowski, J. Vanhellefont, P. Clauws, P. Wabinski, K. Młynarczyk, I. Romandic, and A. Theuwis, Simulation of intrinsic point defect properties and vacancy clustering during Czochralski germanium crystal growth, *Mater. Sci. Semicon. Proc.* 9, pp. 465-470, 2006.
7. B.P. Hale, K.M. Beardmore, and M. Grønbech-Jensen, Vacancy clustering and diffusion in silicon: Kinetic lattice Monte Carlo simulations, *Phys. Rev. B* 74, 045217, 2006.
8. L. Pelaz, L.A. Marques, M. Aboy, and J. Barbolla, Atomistic modeling of amorphization and recrystallization in silicon, *Appl. Phys. Lett.* 82, pp. 2038-2040, 2003.
9. J. Dai, W.D. Seider, and T. Sinno, Lattice kinetic Monte Carlo simulations of defect evolution in crystals at elevated temperature, *Mol. Simulat.* 32, pp. 305-314, 2006.

접수일: 2011년 5월 5일, 심사일: 2011년 5월 19일,
게재확정일: 2011년 5월 31일