

## GaAs/Si Heteroepitaxy 구조에서 GaAs의 초기 핵생성에 관한 이론적 고찰

최덕균  
한양대학교 무기재료공학과

### A Theoretical Study of GaAs Nucleation in GaAs/Si Heteroepitaxy Structure

Duck-Kyun Choi  
Department of Inorganic Materials Engineering, Hanyang University

#### 요 약

GaAs를 Si 웨이퍼에 성장시킬 때 초기단계의 핵생성에 대하여 computer simulation을 통해 이론적으로 고찰하였다.

기존의 핵생성이론과는 달리 초기의 미세한 핵의 경우 핵을 구성하는 ledge와 ledge간의 상호작용은 핵의 크기 및 모양에 의하여 결정되는 ledge간의 거리에 따라 변화함을 알 수 있었다. 따라서 여러 형태의 핵에 대하여 분석하여 본 결과 다층의 피라미드 형태로 GaAs 핵이 생성될 때 가장 낮은 excess에너지가 요구되었고 이와 같은 결과는 이러한 형태가 필연적으로 포함하게 되는 에너지가 낮은 Ga(111) facet 때문인 것으로 밝혀졌다. 그러므로 GaAs/Si에서 가장 문제가 되고 있는 전위 결함도 초기의 핵생성에 크게 기인함을 알 수 있다.

#### ABSTRACT

Early stage of GaAs nucleation on Si substrate was theoretically studied by computer simulation.

Compared to the constant ledge interaction energy in conventional nucleation theory, functional behavior of ledge-ledge interaction resulted in small size clusters depending on the cluster size and shape. Among various kinds of clusters, the multilayer pyramidal shape GaAs cluster requires smallest excess free energy due to the formation of Ga(111) facet planes. Therefore this result suggests that the defects involved in GaAs/Si are originated from the early stage nucleation.

#### 1. 서 론

갈륨비소 화합물 반도체를 실리콘 웨이퍼에 기르려는 노력은 완속된 1) 실리콘 반도체 공

정과 갈륨비소 화합물 반도체가 갖는 광전특성 및 캐리어의 빠른 전송속도 등의 매력을 결합하여 응용의 폭을 넓히고 2) 갈륨비소 화합물을 실리콘 기판위에 성장시킴으로써 가격이 비싼 갈륨비소 웨이퍼를 가격이 비교적 저렴한

실리콘 웨이퍼로 대체할 수가 있으며 3) 갈륨 비소 화합물 반도체 웨이퍼가 갖는 단점인 취성을 보완할 수 있다는 장점 때문에 많은 연구가 진행되어 왔다 [1-4].

그러나 이와같은 장점에도 불구하고 아직까지 집적회로에 응용이 어려운 것은 특성이 서로 다른 두개의 물질이 만남으로써 접합계면에 생기는 여러가지 결합에 의하여 물리적, 전기적 특성이 크게 저하되기 때문이다. 이러한 결합은 근본적으로 heterogeneous 핵형성시 미세한 초기 핵형성으로부터 비롯되므로 초기단계의 미세핵(cluster)에 대한 연구를 통해 결합의 생성원인을 이해하고 이를 효과적으로 제어하여야 한다. 그러나 초기단계의 핵생성에 관련된 kinetic변수들을 실험적으로 규명하기에는 많은 어려움이 따른다. 이는 수백개 미만의 원자로 이루어진 초기 단계의 핵생성에 수반되는 에너지의 값들이 매우 미세하여 실험적으로 얻는 값의 오차범위내에 속하여 정확한 해석이 어렵기 때문이다. 따라서 여러가지 kinetic 변수들이 실험보다는 타당성있는 가정을 통한 예측치로부터 유도되어 왔다. 즉 단순히 dangling bond 수로부터 과잉에너지를 계산하는 방법 [5] 으로부터 computer simulation에 의한 계산방법이 시도되어 왔으며, 특히 다수의 원자들로 구성된 계에 관한 computer simulation은 물질의 여러가지 특성을 파악하는 데 이용되어 최근 5-6년 동안 물질의 구조, 표면에너지, bulk 에너지, cluster 에너지 및 구조 등의 연구에 많은 도움을 주어왔다. 반경험적(semi-empirical) 포텐셜에너지함수(potential energy function : PEF)를 이용하는 simulation방법도 이중한 방법으로 수천개의 원자를 포함하는 거대한 계에 관한 해석까지도 가능하게 되었다 [6-9].

본 연구에서는 반경험적 PEF를 이용한 computer simulation을 통하여 GaAs의 ledge에너지가 ledge와 ledge사이의 간격에 따라 어떻게 변화하며 이 변화가 핵형성에 미치는 영향을 이론적으로 고찰하고 이 결과가 실제로 박막형성에 어떻게 반영되는가를 살펴 보았다.

## 2. 반경험적 포텐셜 에너지 함수

N개의 원자로 구성되어 있는 계의 전체에너지는 그 계를 구성하고 있는 원자상호간의 결합에너지를 모두 합한 형태로 나타낼 수 있다. 즉,

$$\Phi = \sum_{i=2}^N \Phi_i = \Phi_2 + \Phi_3 + \dots + \Phi_{n-1} + \Phi_n \quad (1)$$

여기서  $\Phi_i$ 는 i개의 원자상호간의 interaction 에너지의 합으로 주어진다. 위와 같은 식은 소위 many-body 전개라고 불리며 전체에너지  $\Phi$ 는 급격히 수렴하는 함수이므로 보통  $\Phi_2$ 와  $\Phi_3$ 만을 고려해도 오차를 거의 줄일 수 있다. 따라서, 식 (1)은

$$\begin{aligned} \Phi &= \Phi_2 + \Phi_3 \\ &= \frac{1}{2!} \sum_i^N \sum_j^N U_{\alpha\beta}(\bar{r}_i, \bar{r}_j) \\ &\quad + \frac{1}{3!} \sum_i^N \sum_j^N \sum_k^N U_{\alpha\beta\gamma}(\bar{r}_i, \bar{r}_j, \bar{r}_k) \end{aligned} \quad (2)$$

식 (2)에서  $U_{\alpha\beta}(\bar{r}_i, \bar{r}_j)$ 는 각각  $\bar{r}_i, \bar{r}_j$  위치에 있는 2개의 원자  $\alpha, \beta$ 간의 2-body interaction을 뜻하며  $U_{\alpha\beta\gamma}(\bar{r}_i, \bar{r}_j, \bar{r}_k)$ 는 각각  $\bar{r}_i, \bar{r}_j, \bar{r}_k$ 에 위치하는 3원자  $\alpha, \beta, \gamma$  사이의 3-body interaction을 뜻한다. 2-body interaction의 경우  $\bar{r}_i$ 의 위치에 있는 원자와  $\bar{r}_j$ 의 위치에 있는 원자의 interaction 에너지의 중복계산을 피하기 위해 2!로 나누어 주었으며 마찬가지로 이유로 3-body interaction의 경우 3!로 나누어 주고 있다. 2-body interaction과 3-body interaction을 구체적으로 표현하는 방법 즉,  $U_{\alpha\beta}$ 와  $U_{\alpha\beta\gamma}$  함수의 선택은 항상 simulation의 핵심요소가 된다. 일반적으로 특성이 다른 여러 계에 동시에 적용될 수 있는  $U_{\alpha\beta}$ 와  $U_{\alpha\beta\gamma}$ 의 선정은 대단히 중요하고도 어렵다.

본 연구에서는 2-body 포텐셜함수로 Mie

포텐셜 중 척력의 지수가 12이고 인력의 지수가 6인 Lennard-Jones함수 [10] 를, 3-body 포텐셜에너지함수로 Axilrod-Teller함수 [11] 를 택하였으며 그 형태는 다음과 같다.

$$U_{\alpha\beta}(\bar{r}_i, \bar{r}_j) = \epsilon_{\alpha\beta} \left[ \left( \frac{r_{\alpha\beta}^0}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left( \frac{r_{\alpha\beta}^0}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (3)$$

$$U_{\alpha\beta\gamma}(\bar{r}_i, \bar{r}_j, \bar{r}_k) = \frac{Z_{\alpha\beta\gamma} (1 + 3\cos\theta_i \cos\theta_j \cos\theta_k)}{(r_{ij} r_{jk} r_{ki})^3} \quad (4)$$

윗식에서  $r_{ij}$ 는 두 원자 사이의 거리, 즉  $r_{ij} = |\bar{r}_i - \bar{r}_j|$  를,  $r_{\alpha\beta}^0$  는  $\alpha$ 와  $\beta$ 사이의 평균원자거리,  $\epsilon_{\alpha\beta}$ 는  $r_{ij} = r_{\alpha\beta}^0$  에서의 2-body 에너지(결합에너지)를 나타낸다. Axilrod-Teller함수는 triple dipole-dipole의 interaction을 표현하는 함수로서 Fig. 1과 같이  $\theta_i, \theta_j, \theta_k$ 와  $r_{ij}, r_{jk}, r_{ki}$ 는 각각 3개의 원자로 구성되는 삼각형의 내각과 변의 길이를 나타내며  $Z_{\alpha\beta\gamma}$ 는 3-body의 강도를 나타내는 parameter이다.

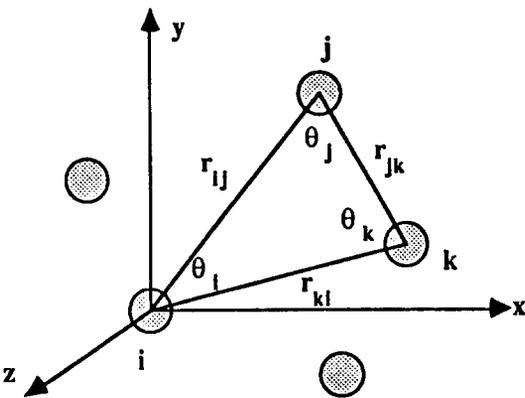


Fig. 1. Atomic geometry involved in the three-body interaction(Axilrod - Teller) function.

이상에서 본 함수의 특징은 원자의 위치가 주어진 계의 전체에너지는  $\epsilon_{\alpha\beta}, r_{\alpha\beta}^0$  및  $Z_{\alpha\beta\gamma}$  오직 3개의 변수로 나타내어질 수 있다는 것이

다. 물론 계를 구성하는 원자가 여러 종류일 때는 위의 변수의 조합도 이에 따라 증가하게 되지만 다른 형태의 함수에 비해 변수의 수가 최소라는 본 함수의 장점 때문에 많은 원자로 구성된 계의 computer simulation이 가능하다. 이러한 변수는 실험적으로 알려진 값들 예를 들면, 고체의 승화열, 분자의 구조, 최근접원자간의 거리, 분자의 결합에너지 등을 최소한의 오차로 만족시킬 수 있도록 최적화 작업을 통해 얻어진다. 일단 모든 parameter가 결정되면 이 함수로부터 주어진 계의 에너지를 계산할 수 있다.

이들 함수를 이용 실제 계의 여러가지 물성을 구하는 simulation 방법에는 일반적으로 Static [12], 몬테칼로(Monte Carlo) [13, 14], 그리고 Molecular Dynamics [15, 16]의 세가지 방법이 있으며 본 연구에서 주로 사용한 몬테칼로 방법을 소개하면 다음과 같다.

몬테칼로 방법은 주어진 온도에서의 통계적 앙상블 평균치(statistical ensemble average)에 기초하며 인위적으로 주어진 원자구조로부터 계산이 시작된다. 예를 들어 1000개의 동일한 종류의 원자로 구성된 계의 평형에너지와 구조를 연구하려면 먼저 1000개의 원자를 구조에 근거 규칙적으로 배열하여 PEF에 따라 전체에너지를 구한다. 다음 computer가 각 원자에 random number를 부여하여 초기의 원자위치로부터 이 random number에 비례하여 원자의 위치를 변화시킨 후 원자간의 거리의 변화에 따라 변화된 계의 에너지를 계산하여 이러한 원자의 위치변화가 타당한가를 판정한다. 만일 이동 후의 계의 전체에너지가 이동 전의 전체에너지보다 낮으면 물론 이동을 허용하고 이동 후의 에너지가 높더라도 주어진 온도에서의 두 형태의 에너지 차이에 해당되는 Boltzmann factor [ $\exp(-\Delta E/kT)$ ]를 계산하여 컴퓨터에 주어진 random number와 비교하여 채택의 여부를 결정하는 소위 Metropolis test를 거치게 된다. 이와 같은 과정을 수없이 반복하면 원자들의 위치나 전체에너지가 수렴하게 되며 이에 해당하는 구조 및 에너지를 평형구조 및 평형

에너지로 간주한다.

### 3. 초미세핵생성의 이론적 고찰

일반적으로 반경이  $r$ 이고 높이가  $h$ 인 디스크 형태의 핵생성시 관여하는 전체자유 에너지 변화는

$$\Delta G = -\pi r^2 h \Delta G_v + 2\pi r h \gamma_l \quad (5)$$

로 주어지며  $\Delta G_v$ 는 상변태시 수반되는 단위 부피당의 자유에너지 변화,  $\gamma_l$ 은 단위길이당의 ledge excess 에너지(이후 ledge 에너지라 함)를 나타낸다. 일반적으로  $\gamma_l$ 을 상수로 취급한 기존의 식에서 핵이 존재할 수 있는 임계반경 및 임계활성화 자유에너지는 각각

$$r^* = \gamma_l / \Delta G_v, \quad \Delta G^* = \pi h \gamma_l^2 / \Delta G_v \quad (6)$$

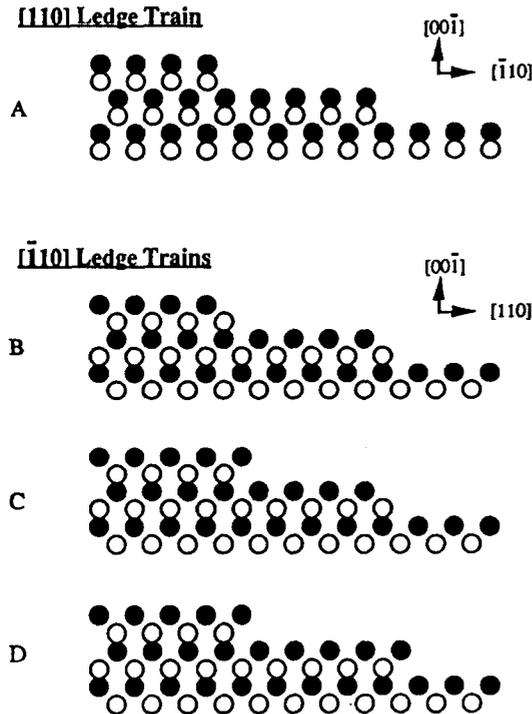


Fig. 2. Side view of the  $[110]$  and  $[\bar{1}10]$  type ledge.

주어진다.

그러나 computer simulation 결과 초기상태의 핵생성시는 핵의 크기가 매우 미세하므로 ledge-ledge간의 상호작용으로 인하여  $\gamma_l$ 은 상수가 아니며 핵의 반경( $r$ )에 따라 변화함을 알 수 있었다. 특히 다이아몬드 구조를 갖는 Si와 GaAs의 주요 ledge인  $[110]$ 과  $[\bar{1}10]$  ledge는 Fig. 2와 같이 그 형태 및 에너지가 동일하지 않기 때문에 interaction경향도 달라진다(Fig. 3). 따라서 Fig. 3으로부터  $\partial\gamma_l/\partial r \neq 0$ 인 경우  $\gamma_l$

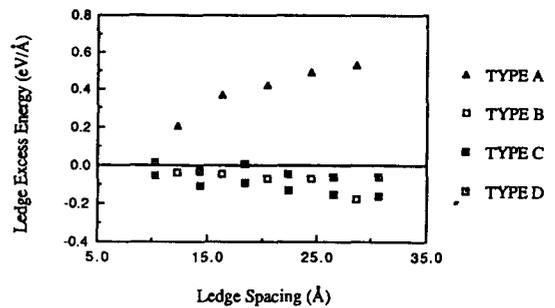


Fig. 3. Ledge interaction energies for 4 different, one molecular layer high,  $\langle 110 \rangle$  type ledges as a function of ledge spacing.

( $r$ )의 함수형태를

$$\gamma_l = \gamma_0 + \Delta\gamma \{1 - \exp(-br)\} \quad (7)$$

라 하면

$$\Delta G = -\pi r^2 h \Delta G_v + 2\pi r h [\gamma_0 + \Delta\gamma \{1 - \exp(-br)\}] \quad (8)$$

이므로 임계반경  $r^*$ 에서

$$\left. \frac{dG}{dr} \right|_{r=r^*} = -2\pi r^* h \Delta G_v + 2\pi h [\gamma_0 + \Delta\gamma \{1 - \exp(-br^*)\}] + 2\pi h [br^* \Delta\gamma \exp(-br^*)] = 0 \quad (9)$$

으로부터

$$r^* \Delta G_v = \frac{\gamma_0 + \Delta \gamma [1 + \exp(-br^*) (br^* - 1)]}{\beta} \quad (10)$$

식 (10)을 dimensionless quantity  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $x^*$ 를 써서 간략히 하면,

$$\alpha = \frac{x^*}{1 + \beta [1 - (1 - x^*) \exp(-x^*)]} \quad (11)$$

여기서

$$\alpha = \frac{br_0}{\Delta G_v}, \quad \beta = \frac{\Delta \gamma}{\gamma_0}, \quad r^* b = x^* \quad (12)$$

한편 이 임계반경  $r^*$ 를 갖는 미세한 핵의 임계 활성화에너지는 식 (12)로부터 유도될 수 있다. 즉,

$$r = \frac{x}{b} = \frac{x\alpha}{\alpha \Delta G_v} \quad (13)$$

이므로 식 (13)을 식 (5)에 대입한 후  $r$ 에 대해 미분하여  $\Delta G^*(\beta)$ 를 구하면

$$\Delta G^*(\beta) = \frac{\pi h r_0^2}{\Delta G_v} \left[ \left( \frac{x^*}{\alpha} \right)^2 - 2 \left( \frac{x^*}{\alpha} \right) \right] \quad (14)$$

그러므로  $\Delta G^*(\beta)$ 와 식 (6)에서 구해진  $\Delta G^*(0)$ 의 비를  $\xi$ 라 하면

$$\xi = \frac{\Delta G^*(\beta)}{\Delta G^*(0)} = \left( \frac{x^*}{\alpha} \right)^2 - 2 \left( \frac{x^*}{\alpha} \right) = [1 - \beta^2 \{1 - (1 - x^*) e^{-x^*}\}^2] \quad (15)$$

만일 ledge interaction이 없는 경우  $\beta=0$ 이므로 윗식에서  $\xi=1$ 이 되어 기존의 핵생성 이론과 동일해진다.

이상에서 ledge-ledge interaction으로 인하여 ledge energy 즉 표면과잉에너지가 핵의 크기에 따라 변화하는 범위에서는 핵의 임계반경 및 임계활성화에너지 등이 변화하기 때문에 그 결과 핵생성밀도 등도 영향을 받는다는 것을 알 수 있다. Fig. 4와 5는 각각 특정한  $\beta$ 값에서  $\alpha$ 의 변화에 따르는  $x^*$  및  $\xi$ 의 변화를 보여주고

있다.

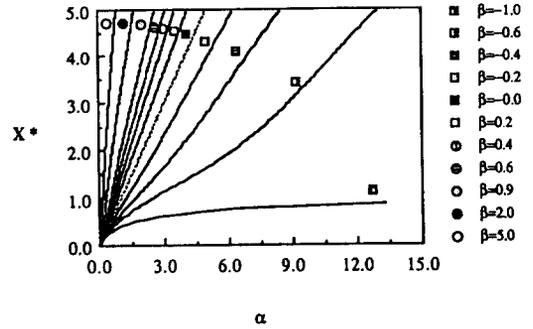


Fig. 4. Plot of modified dimensionless critical radius,  $x^* = br^*$ , versus dimensionless surface to volume energy parameter,  $\alpha = br_0 / \Delta G_v$ , for a range of the dimensionless ledge energy parameter,  $\beta = \Delta \gamma / \gamma_0$ .

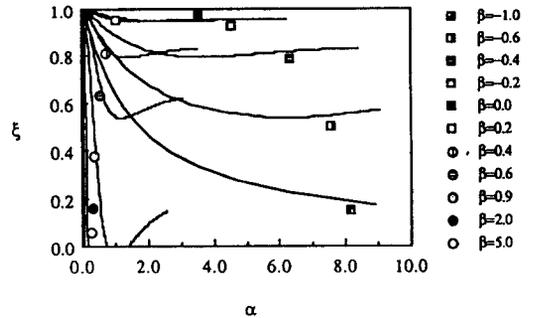


Fig. 5. Plot of dimensionless critical fluctuation parameter  $\xi = \Delta G^*(\beta) / \Delta G^*(0)$  as a function of the dimensionless surface to volume energy parameter  $\alpha = br_0 / \Delta G_v$ , for a range of the dimensionless ledge energy parameter,  $\beta = \Delta \gamma / \gamma_0$ .

#### 4. 갈륨비소 핵생성

앞에서 본 바와 같이  $\gamma_1$ 은 ledge의 방향 및 거리에 따라 변화하기 때문에 핵생성에 영향을 미치므로 cluster의 크기, 형태, 높이 등에 따라

어떤 형태가 에너지적으로 가장 안정한가를 연구하는 것은 핵생성 및 성장과정을 좀더 구체적으로 이해할 수 있어서 흥미롭다.

그러므로  $i$ 개의 원자로 이루어진 여러 형태의 갈륨비소 cluster excess 에너지  $\Delta E(i)$ 를  $(\frac{i}{2})^{1/2}$ 에 대해 조사해 보았다.  $E(i)$ 와  $(\frac{i}{2})^{1/2}$ 의 관계는 다음과 같이 유도될 수 있다. 만일 각각의 변이  $n_1, n_2$ 의 GaAs의 분자로 이루어진 직사각형 형태의 갈륨비소 cluster가 Fig. 6과 같이 존재한다면,

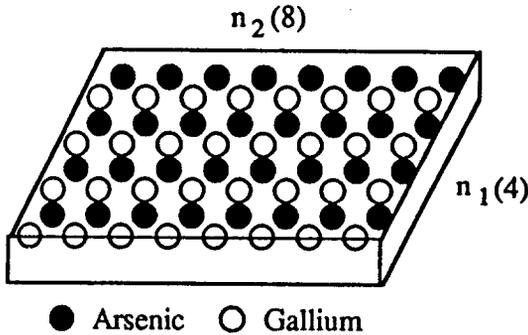


Fig. 6. Rectangular shape GaAs cluster with  $i$  atoms. The sides of this cluster have  $n_1$  and  $n_2$  GaAs molecules, respectively.

$$i = n_1 \times n_2, \text{ 그리고 } p = 2(n_1 + n_2) \quad (16)$$

여기서  $i$ 는 cluster를 이루는 Ga와 As 원자의 수를 나타내고  $p$ 는 변의 길이를 나타낸다. Cluster의 excess에너지가 주로 ledge의 형성에 기인한다고 가정하여(이 가정은 실제로 실리콘과 갈륨비소의 (100) 면의 reconstruction pattern이 동일하고 표면에너지가 근사하므로 타당성이 있다),

$$\Delta E(i) = \bar{\gamma} p \quad (17)$$

$\bar{\gamma}$ 는 단위길이당 ledge들의 평균 excess energy이다. 그러므로

$$\begin{aligned} \Delta E(i) &= 2(\gamma_1 n_1 + \gamma_2 n_2) \\ &= 2\gamma_1 n_1 \left(1 + \frac{\gamma_2 n_2}{\gamma_1 n_1}\right) \\ &= 2\gamma_1 \sqrt{\frac{i}{n_2/n_1}} \left(1 + \frac{\gamma_2 n_2}{\gamma_1 n_1}\right) \\ &= \left[2\gamma_1 \sqrt{\frac{1}{n_2/n_1}} \left(1 + \frac{\gamma_2 n_2}{\gamma_1 n_1}\right)\right] i^{1/2} \\ &= A i^{1/2} \\ A &= 2\gamma_1 \sqrt{\frac{1}{n_2/n_1}} \left(1 + \frac{\gamma_2 n_2}{\gamma_1 n_1}\right) \quad (18) \end{aligned}$$

물론 여기서  $\gamma_1, \gamma_2$ 는 ledge간 거리의 함수이며 실제 computer simulation에서는 이러한 관계가 모두 고려된다.

Fig. 7은 computer simulation 결과 excess 에너지가 GaAs cluster의 모양에 따라 어떻게 변화하는가를 보여주고 있다. 단층 cluster의 경

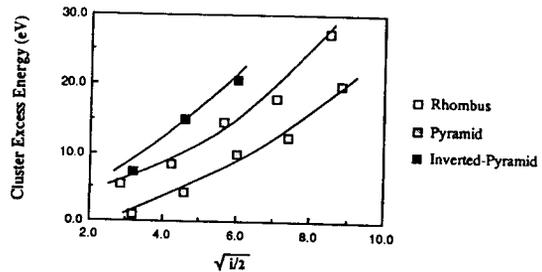


Fig. 7. Excess energy for the three different shaped cluster as a function of cluster size.

우 사방형(rhombus ; R), 역피라미드형(inverse pyramid ; I) 및 피라미드형(pyramid ; P) 중 피라미드 형태의 cluster가 에너지적으로 가장 유리함을 보여준다. 뿐만 아니라 동일한 수의 원자로 이루어진 피라미드 형태의 cluster 중에서도 단층보다는 다층일수록 cluster가 형성될 가능성이 가장 크다는 것이 Fig. 8에 나타나고 있다. 다시 말해서 동일한 구동력이 주어지면(성장온도와 반응가스 분압 등) 피라미드 형태의 ledge를 갖는 갈륨비소 핵이 성장할 가능성이 가장 크다는 것을 시사

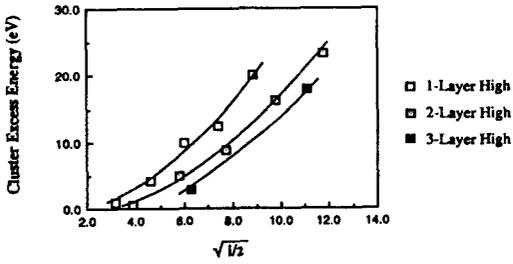


Fig. 8. Excess energy for pyramidal ledge clusters as a function of cluster size with three different layer heights.

하고 있다. 이와같이 다층의 피라미드형태가 에너지적으로 유망한 것은 Fig. 9에서 설명될 수 있다. Fig. 9는 다층 피라미드형 cluster에

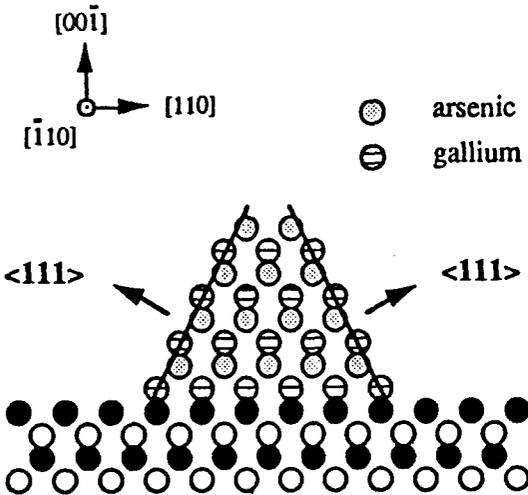


Fig. 9. The schematic diagram of Ga terminated (111) facet planes on the GaAs cluster by stacking layers in a pyramidal fashion.

나타나는 결정면을 도식화한 것으로서  $[\bar{1}10]$  ledge가 쌓여서 다층의 피라미드를 형성하면 필연적으로 (111) facet이 생긴다. 이 (111)면은 polar 면으로서 Ga 혹은 As 중 한 종류의

원자만으로 이루어지게 되는데 여기서는 Ga으로 이루어진 면이 바깥쪽에 노출된다.

또한 피라미드 형태 GaAs cluster가 각종 (100) 기판 위에 형성시 수반되는 excess 에너지는 GaAs 기판위에서 가장 작고 격자상수의 차이가 커짐에 따라 점차 큰 excess 에너지가 요구됨을 알 수 있다(Fig. 10). 특히 100개 이상의 원자로 이루어진 cluster가 As이 한층 덮

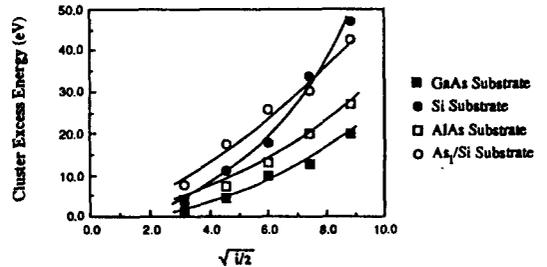


Fig. 10. Excess energy for clusters as a function of cluster size for the four different substrates.

혀진 Si 기판상에 형성될 경우 순수한 Si 기판 위에 GaAs가 형성될 경우보다 더 작은  $\Delta E(i)$ 가 요구됨을 보여준다. 실험적으로도 Ga 원자와 실리콘과의 sticking coefficient는 As 원자에 비해 10배 정도 크지만 열역학적으로 As와 Si의 결합력이 Ga과 Si의 결합력보다 강하기 때문에 실제로 GaAs를 Si 웨이퍼 위에 성장시킬 때 As 층을 먼저 Si 웨이퍼 위에 성장시킨 후 GaAs 성장을 시도하고 있다.

그러므로 GaAs cluster가 기판 위에 생성될 경우 GaAs 면중 가장 안정한 Ga-(111)면을 포함하는 다층의 피라미드 형태가 가장 유망하며 이것은 평면 기판 위에 GaAs 핵이 생성될 때 ledge-ledge의 상호작용으로 excess 에너지를 수반하기 때문에 다층의 cluster 형태를 이루어 에너지가 낮은 (111)면을 형성함으로써 전체 cluster의 에너지를 최소화하려 하기 때문이다. 실제 실험결과도 simulation결과와 잘 일치하여 Si 위에 GaAs를 성장시킨 시편의 단면

TEM 사진에서 종종 피라미드 형태가 발견된다 [17,18].

이러한 피라미드의 형성은 결국 GaAs/Si의 물리적 전기적 특성의 저하를 가져오는 근본원인이 된다. 왜냐하면 다층의 피라미드형 핵생성을 함으로써 핵과 핵 사이의 과냉각도가 심화하며 이에 따르는 등온선(isotherm)의 굴곡은 결국 dislocation과 같은 결함을 유발하게 된다.

이상에서 GaAs의 3차원적 핵형성은 ledge-ledge interaction에 의한 응력장의 발달에 기인하는 물질의 고유한 성질이지만, 응력장을 해소해 줌으로써 결함을 최소화 할 수가 있다. 즉 기판표면에 인위적으로 일정한 간격의 ledge를 형성함으로써 핵형성 위치를 제어하고 이에 따라 핵과 핵사이의 거리 및 응력장을 감소하는 방법이 제시될 수 있다. 실제로 일부 heteroepitaxy 성장에서 이 방법으로 결함의 밀도를 낮출 수 있음이 증명되었다 [19].

## 5. 결 론

이상적인 실험방법으로는 구하기가 어려운 GaAs 핵생성에 요구되는 excess 에너지와 이와 관련된 여러 현상을 computer simulation을 통해 알아보았다. 초기단계의 핵생성시와 같이 핵의 크기가 미세한 경우 수반되는 excess 표면에너지가 일반적으로 알려진 바와 같이 일정하지 않고 핵의 크기 및 형태와 함수관계가 있다는 것을 알 수 있었다. 이 때문에 기존의 핵생성 이론에 근거한 핵생성빈도도 핵의 크기 및 모양 등에 따라 크게 변화할 수 있음을 보여주었다. 결과적으로 GaAs의 핵형성은 다층의 피라미드형태를 취함으로써 전체에너지를 최소화함이 증명되었다. 즉 Ga으로 이루어진 표면에너지가 낮은 (111) facet를 갖는 핵을 형성하여 ledge-ledge 상호작용에 기인하는 excess 에너지를 줄이려 하고 있다. 마지막으로 이와 같은 피라미드 형태의 핵생성으로 유발되는 고밀도의 결함은 인위적으로 규칙적인 간격의 ledge를 갖는 기판위에 GaAs 핵생성을

ledge에 유도함으로써 줄일 수 있다.

## 참고문헌

- [ 1 ] H. M. Manasevit, J. Cryst. Growth, 55 (1981) 1.
- [ 2 ] J. P. Duchemin, M. Bonnet, F. Koelsch and D. Huyghe, J. Cryst. Growth, 45 (1978) 181.
- [ 3 ] J. L. Tandon and Y. c. M. Yeh, J. Electrochem. Soc., 132 (1985) 662.
- [ 4 ] M. J. Ludowise, J. Appl. Phys., 58 (1985) R31.
- [ 5 ] R. Kern, G. Le Lay and J. J. Metois, "Current Topics in Materials Science", vol. 3, ed. E. Kaldis(North Holland, New York, 1979).
- [ 6 ] T. Halicioglu, H. O. Pamuk, and S. Erkoc, Phys. stat. sol. (b), 149 (1988) 81.
- [ 7 ] J. Tersoff, Phys. Rev. Letters, 56 (1986) 632.
- [ 8 ] F. H. Stillinger and T. A. Weber, Phys. Rev., B 31 (1985) 5262.
- [ 9 ] B. W. Dodson, Phys. Rev., B 35 (1987) 2795.
- [10] J. E. Lennard-Jones, Proc. roy. Soc., A106 (1924) 463.
- [11] B. M. Axilod and E. J. Teller, J. Chem. Phys., 11 (1943) 299.
- [12] D. Beeman, J. Comp. Phys., 20 (1976) 130.
- [13] N. Metropolis, J. Chem. Phys., 21 (1953) 1087.
- [14] W. W. Wood and J. J. Erpenbeckm Ann. Rev. Phys. Chem., 27 (1976) 319.
- [15] J. Kushick and B. J. Berne, "Modern Theoretical Chemistry", vol. 6, ed. by B. J. Berne (Plenum Press, New York, 1977) 41.
- [16] W. G. Hoover and W. T. Ashurst, "Theoretical Chemistry : Advanced and

- Perspectives”, vol. 1, ed. by H. Eyring and D. Henderson (Academic Press, New York, 1975) 1.
- [17] K. Adom, S. Strite, H. Morkoc, Y. Nakamura and N. Otsuka, J. Appl. Phys., 69(1) (1991) 220.
- [18] K. I. Cho, W. K. Choo, J. Y. Lee, S. C. Park and T. Nishinaga, J. Appl. Phys., 69 (1) (1991) 237.
- [19] R. Hull, a. Fischer-Colbrrie, S. J. Rosner, S. M. Koch and J. S. Harris, MRS Proceeding, 94 (1987) 25.