

CFTM 방법을 이용한 Si 박막과 격자불일치 전위결함의 변형을 분포에 대한 고찰

장원재^a

미시건주립대학교 전자공학과

Investigation of Strain Field on a Misfit Dislocation in a Strained Si Layer Using the CFTM Method

Wonjae Chang^a

Department of Electrical and Computer Engineering, Michigan State University, Michigan 48824, USA

(Received September 10, 2017; Revised October 2, 2017; Accepted October 14, 2017)

Abstract: The computational fourier-transform moire (CFTM) method has been briefly explained and this method was used to perform strain analysis of a misfit dislocation in a strained Si/Si_{0.55}Ge_{0.45} layer. An essential advantage of the CFTM method is that it does not require unwrapping, such that errors due to improper unwrapping can be excluded. The analysis results revealed that the Si layer was grown with tensile stress on Si_{0.55}Ge_{0.45} and lattice constant of the Si layer along the growth direction was 1.9% smaller than that of Si_{0.55}Ge_{0.45}. On the other hand, strain of the misfit dislocation in the strained Si/Si_{0.55}Ge_{0.45} layer was maximum at the dislocation core due to an extra half-plane and the e_{xx} and e_{yy} values were positive and negative, respectively, along the direction of a burgers vector.

Keywords: Strain measurement, CFTM, SiGe, Transistor, Solar cells

1. 서론

에피택셜 성장 기법을 이용하여 단결정 박막을 성장시키는 다양한 소자들이 있으며 예를 들면 실리콘 트랜지스터, 태양전지, 그리고 LED 등의 소자들이 있다. 이때 하부 박막의 격자상수와 다른 격자상수를 가지는 박막이 성장할 때 임계 두께 이상으로 증착되면 격자불일치 전위결함(misfit dislocation)이 발생하고 이러한 결함으로 인해 증착된 박막은 변형률(strain)이 완화(relaxed)된다. 이렇게 격자불일치 전위결함이 발생하게 되면 변형률에 변화가 발생한다. 이러한 격자불일치 전위결함이 발생하면 소자의

전기적인 특성에 영향을 주며 예를 들면 실리콘 트랜지스터에서는 [1] 변형률에 의해 증가된 캐리어의 이동도의 특성이 완화된 변형률에 의해 캐리어의 이동도가 저하되며 태양 전지 소자의 경우 격자불일치 전위결함에서 캐리어의 재결합이 발생하여 변환효율을 저하시키는 원인이 된다.

이와 같이 다양한 소자들에서 중요한 역할을 하는 변형률 측정 및 분석을 위해 GPA (geometrical phase analysis) 방법이 개발되어 사용되어 왔다 [2,3]. 예를 들면 양자점(quantum dot) [4], 도메인 벽(domain wall) [2,5], 변형률을 가지는(strained) 박막 [6-8], 역위상 경계(antiphase boundaries) [9], 탄소 나노튜브(carbon nanotube) [9]에 분석 방법으로 사용되어 왔다.

그러나 GPA 방법을 사용하게 되면 한 가지 단점이 있는데, 변형률 계산 과정에서 위상이미지(phase image)가 필요하고 그 위상이미지에 존재하는 불연속 값들을 제거하기 위해 언래핑(unwrapping) 절차를 사용해야 한

a. Corresponding author; changwon@msu.edu

다. 이러한 불연속 값들은 변형률이 간단하면 불연속 값들도 이미지에 규칙적으로 존재하여 언랩핑 알고리즘을 만들기 비교적 쉬우나, 변형률이 규칙적이지 않고 복잡한 경우는 불연속 값들이 불규칙적으로 존재하여 언랩핑 알고리즘을 만들기 상당히 어려우며 언랩핑 알고리즘에 오류가 있는 경우 측정된 변형률이 부정확할 수 있다. 따라서 언랩핑 알고리즘 없이 변형률을 분석할 수 있는 방법이 필요하다. 본 논문의 저자는 언랩핑 알고리즘이 필요 없는 CFTM (computational fourier transform moire) 알고리즘을 격자들로 이루어진 투과전자현미경 이미지에 처음으로 적용하여 변형률 분석에 이용하였다 [10]. 본 논문에서는 CFTM 방법의 언랩핑 알고리즘이 필요 없는 장점을 활용하여, 박막 내에 결함이 있는 위치에 변형률을 측정하고 분석하였다. 측정 및 분석된 샘플은 실리콘 트랜지스터 [1] 혹은 이종접합 태양전지 [11,12]에서 사용되는 SiGe/Si 박막이다. 본 논문에서는 저자에 의해 소개된 CFTM 방법에 대해 기술하고 SiGe/Si에서의 변형률 측정 결과에 대해 기술한다.

2. 실험 방법

GPA의 단점을 보완하기 위해 저자에 의해 적용된 CFTM 방법의 가장 큰 장점은 언랩핑 알고리즘이 필요 없다는 점이다. 여기서 언랩핑이라는 알고리즘은 GPA 방법에서 사용하는 위상이미지를 미분하기 위해 위상이미지에 존재하는 불연속 값들을 제거하는 절차이다. 그러나 격자들이 있는 이미지에서 격자들의 변형률이 복잡하면 복잡할수록 위상이미지에 존재하는 불연속 값들이 더욱 불규칙적으로 복잡한 형태로 존재하게 되기 때문에 이렇게 복잡하게 얽혀 있는 불연속 값들을 찾는 과정이 복잡하여 언랩핑 과정에서 오류가 발생할 수 있다. 이와는 반대로, CFTM 방법은 변형률을 도출하는 과정에서 위상이미지를 사용하지 않으며 또한 미분을 주파수 영역에서 진행하기 때문에 언랩핑 과정이 필요 없다.

이러한 CFTM 방법의 절차는 크게 3가지로 나눌 수 있다. 첫 번째로, 격자들이 있는 이미지, 예를 들면 투과 전자 현미경을 이용한 HAADF-STEM (high-angle annular dark-field scanning transmission electron microscopy) 혹은 HRTEM (high-resolution transmission electron microscopy) 이미지를 푸리에 변환을 진행하여 푸리에 파워 스펙트럼을 구한다. 두 번째는, 푸리에 파워 스펙

트럼에서 분석하고자 하는 방향에 위치해 있는 한 개의 푸리에 파워 스펙트럼을 선택하여 원점으로 이동시킨다. 예를 들면 e_{xx} 를 계산하고 싶으면 이미지의 X축 방향에 있는 푸리에 파워 스펙트럼 중에 한 개를 선택하여 원점으로 이동시키면 되고, e_{yy} 를 계산하고 싶으면 이미지의 Y축 방향에 있는 푸리에 파워 스펙트럼 중에 한 개를 선택하여 원점으로 이동시키면 된다. 마지막으로 세 번째는, 아래 식 (1)과 (2)를 이용하면 변형률의 e_{xx} 와 e_{yy} 를 도출할 수 있다 [10].

$$e_{xx} = \mathbf{n}_1 \cdot \nabla u_x(\mathbf{r}) = \frac{\partial u_x(\mathbf{r})}{\partial x} - \frac{F^{-1}[\tilde{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{n}_1 I_{g_1}(\tilde{\mathbf{k}})]}{|\mathbf{g}_1| F^{-1}[I_{g_1}(\tilde{\mathbf{k}})]} \quad (1)$$

$$e_{yy} = \mathbf{n}_2 \cdot \nabla u_y(\mathbf{r}) = \frac{\partial u_y(\mathbf{r})}{\partial y} - \frac{F^{-1}[\tilde{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{n}_2 I_{g_2}(\tilde{\mathbf{k}})]}{|\mathbf{g}_2| F^{-1}[I_{g_2}(\tilde{\mathbf{k}})]} \quad (2)$$

여기에서 \mathbf{g}_1 벡터는 푸리에 파워 스펙트럼에서 X축에 있으면서 e_{xx} 를 도출하기 위해 선택된 역격자 벡터이며 \mathbf{g}_2 벡터는 푸리에 파워 스펙트럼에서 Y축에 있으면서 e_{yy} 를 도출하기 위해 선택된 역격자 벡터이다. 또한 식 (1)에서 $I_{g_1}(\tilde{\mathbf{k}})$ 은 선택된 \mathbf{g}_1 벡터를 원점으로 이동한 푸리에 파워 스펙트럼이고 식 (2)에서 $I_{g_2}(\tilde{\mathbf{k}})$ 은 선택된 \mathbf{g}_2 벡터를 원점으로 이동한 푸리에 파워 스펙트럼이다. 요약하면, 격자들이 있는 이미지, 예를 들면 HRTEM 혹은 HAADF-STEM 이미지에서 e_{xx} 를 산출하기 위해서는 이미지를 푸리에 변환을 해서 얻어지는 푸리에 파워 스펙트럼에서 X축에 있는 푸리에 파워 스펙트럼 한 개를 선택하여 예를 들면 \mathbf{g}_1 벡터를 선택하여 원점으로 이동하여 $I_{g_1}(\tilde{\mathbf{k}})$ 을 도출하면 식 (1)과 같이 주파수 영역에서 $I_{g_1}(\tilde{\mathbf{k}})$ 에 방향 도함수(directional derivative)를 이용하여 미분하고 푸리에 역변환을 하면 e_{xx} 를 산출할 수 있다. 따라서 CFTM 방법은 GPA 방법과 같이 위상이미지를 사용하기 않기 때문에 언랩핑 과정이 필요 없다.

3. 결과 및 고찰

그림 1은 HAADF-STEM를 이용하여 촬영된 $\text{Si}_{0.55}\text{Ge}_{0.45}/\text{Si}$ 박막을 나타내고 있고 여기서 투과 전자 현미경은

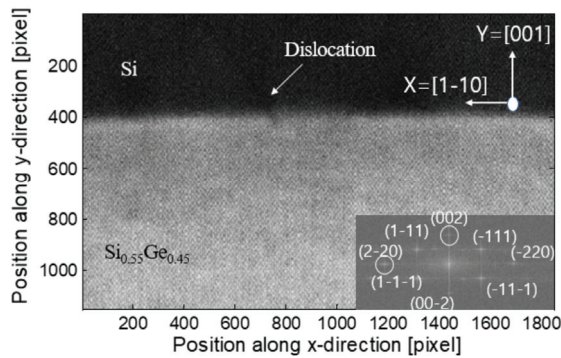


Fig. 1. A cross-sectional HAADF-STEM image of Si_{0.55}Ge_{0.45}/Si.

JEOL 2200FS 200kV field emission TEM을 사용하였다. 여기서 Ge의 함량은 EDX (energy dispersive x-ray spectrometry)로 결정하였다. 그림 1의 X축과 Y축은 픽셀 단위로 이미지의 위치를 나타내며 이미지 사이즈는 X축으로 1,850픽셀이고 Y축으로 1,150픽셀이다. HAADF-STEM 이미지의 아래쪽은 Si_{0.55}Ge_{0.45} 박막이고 그 위에 증착된 박막은 Si이다. Si 박막과 Si_{0.55}Ge_{0.45} 박막의 계면에서 격자불일치 전위결함의 위치가 그림 1에 표시되어 있으며 전위결함은 Si 박막 전체까지 연장되어 있다. 박막의 성장 방향(growth direction)과 계면 방향(in-plane)이 화살표로 그림 1에 표시되어 있고 Si_{0.55}Ge_{0.45}/Si 이미지를 푸리에 변환을 적용한 푸리에 파워 스펙트럼 결과는 오른쪽 아래에 삽입되어 있다. 삽입된 푸리에 파워 스펙트럼에서 보면 (002)와 (2-20) 파워 스펙트럼이 변형률을 측정하기 위해 선택되었고 원형으로 표시되어 있다. (002)는 Y축에 있는 푸리에 파워 스펙트럼이기 때문에 e_{yy} 를 도출하기 위해 선택되었고 (2-20)는 X축에 있는 푸리에 파워 스펙트럼이기 때문에 e_{xx} 를 도출하기 위해 선택되었다.

그림 2는 CFTM 방법을 이용하여 그림 1의 Si_{0.55}Ge_{0.45}/Si 박막에서 격자들의 변형률 결과를 보여 준다. 그림 2(a)는 e_{xx} 정보를 3차원으로 보여주고 있고 그림 2(b)는 e_{yy} 정보를 3차원으로 보여주고 있다. 그림 2의 X축과 Y축은 그림 1 이미지의 X축과 Y축과 같다. 여기서 e_{xx} 는 박막의 계면 방향(X축)의 격자상수 변형에 대한 정보이고 e_{yy} 는 박막의 성장 방향(Y축)의 격자상수 변형에 대한 정보이다. 그림 2의 e_{xx} 와 e_{yy} 의 결과는 CFTM 방법을 통해 도출되었고 따라서 식 (1)과 식 (2)가 각각 사용되었다. 그림 2(a)의 e_{xx} 를 도출하기 위해 그림 1의 푸리에 파워 스펙트럼에서 (002)를 선택

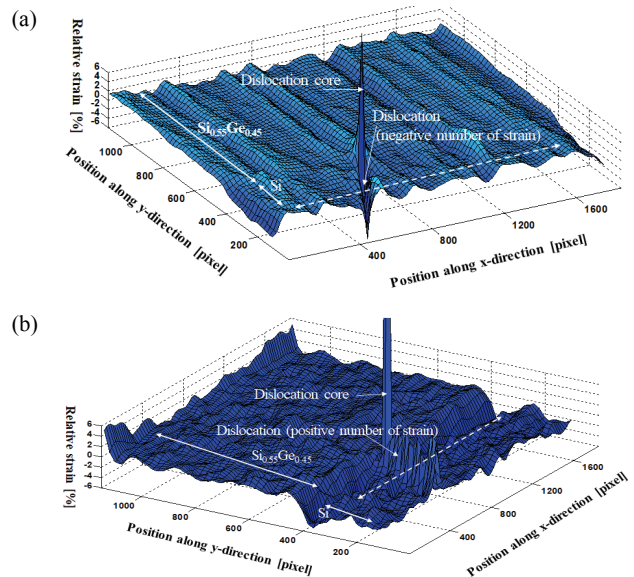


Fig. 2. A 3-dimensional image showing strain analysis of the Fig. 1. (a) e_{xx} and (b) e_{yy} .

하여 원점으로 이동하여 식 (1)을 이용하여 계산하였고 그림 2(b)의 e_{yy} 를 얻기 위해 (2-20)를 선택하여 원점으로 이동하여 식 (2)를 이용하여 계산하였다.

먼저 Si 박막 영역에서의 e_{xx} 와 e_{yy} 결과를 보면, 그림 2(a)의 e_{xx} 는 Si_{0.55}Ge_{0.45} 박막과 Si 박막 간에 계면 방향 격자상수의 차이가 없어서 Si_{0.55}Ge_{0.45} 박막과 Si 박막의 구분이 명확하지 않음을 알 수 있고 그림 2(b)의 e_{yy} 는 Si_{0.55}Ge_{0.45} 박막과 Si 박막에서 성장 방향 격자상수의 차이가 발생하여 Si_{0.55}Ge_{0.45} 박막과 Si 박막이 명확하게 구분됨을 알 수 있다. 따라서 그림 2에서 e_{xx} 와 e_{yy} 결과를 요약해서 보면, Si_{0.55}Ge_{0.45} 박막과 Si 박막의 격자상수가 각각 5.533 Å과 5.431 Å으로, 다름에도 불구하고 Si 박막의 계면 방향의 격자상수와 Si_{0.55}Ge_{0.45} 박막의 계면 방향의 격자상수가 같다. 따라서 Si_{0.55}Ge_{0.45} 박막에 증착된 Si 박막은 정합(lattice matching)되어 성장되었고 인장 응력(tensile strain)을 가지고 있다고 볼 수 있다. 이와는 반대로, 성장 방향의 격자상수는 Si 박막이 Si_{0.55}Ge_{0.45} 박막보다 작기 때문에 그림 2(b)에서 Si 박막과 Si_{0.55}Ge_{0.45} 박막이 명확하게 구분됨을 알 수 있다.

다음으로, 그림 2에서 화살표로 표시된 격자불일치 전위결함 주위의 변형률이 어떻게 형성되어 있는지 분석해 보면 일차적으로 그림 2(a)와 그림 2(b)에서 격자 불일치 전위결함 중심(core)에서 현격히 큰 e_{xx} 와 e_{yy}

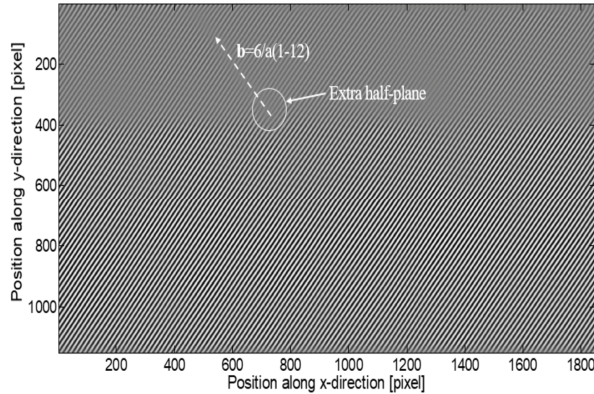


Fig. 3. A (1-11) Bragg filtered image.

를 보여주고 있다. 따라서 격자불일치 전위결함의 중심에서 변형률이 집중되어 e_{xx} 와 e_{yy} 최대가 됨을 알 수 있다. 그리고 격자불일치 전위결함의 중심에서 멀어지면서 변형률이 감소됨을 알 수 있다. 여기서 격자불일치 전위결함 중심에서 변형률이 집중되는 원인을 확인하기 위해 특정 방향의 격자들로 이루어진 브래그 필터 이미지(bragg filtered image)를 이용하였다 [2]. 본 논문에서는 그림 1의 오른쪽 아랫부분에 삽입된 푸리에 파워 스펙트럼에서 (1-11) 파워 스펙트럼을 선택하여 (1-11) 브래그 필터 이미지를 그림 3에 보여주고 있다.

그림 3은 (1-11) 파워 스펙트럼을 선택하였기 때문에 $B_{1-11}(\mathbf{r})$ 라고 부른다. 그림 3에서 보이는 바와 같이 $B_{1-11}(\mathbf{r})$ 의 격자들의 방향은 (1-11) 역격자 벡터와 수직이며 격자들의 선과 선의 간격은 박막의 (1-11) 평면의 격자상수이다. 그림 3과 그림 2를 비교해 보면 격자불일치 전위결함의 중심에서 적층 결함(stacking fault)에 의한 잉여 반평면(extra half-plane)이 형성됨을 알 수 있다. 여기서 잉여 반평면은 그림 3에 원형으로 표시되어 있다. 따라서 전위결함의 중심에서 변형률이 최대로 갖는 이유는 (1-11) 평면의 적층결함에 의한 잉여 반평면에 의해 Si 박막의 계면 방향과 성장 방향에서 격자상수의 팽창(lattice expansion)으로 인한 e_{xx} 와 e_{yy} 가 증가했다고 볼 수 있다.

또한, 그림 2에서 격자불일치 전위결함을 따라 e_{xx} 는 음의 값을 갖고 e_{yy} 는 양의 값을 갖는 것을 알 수 있다. 자세히 조사하기 위해 그림 2의 격자불일치 전위결함 위치에 라인 프로파일(line profile)을 그림 4에서 보여주고 있다.

그림 4는 그림 2의 격자불일치 전위결함 위치의 라인 프로파일이며 라인 프로파일의 위치는 그림 2의 점

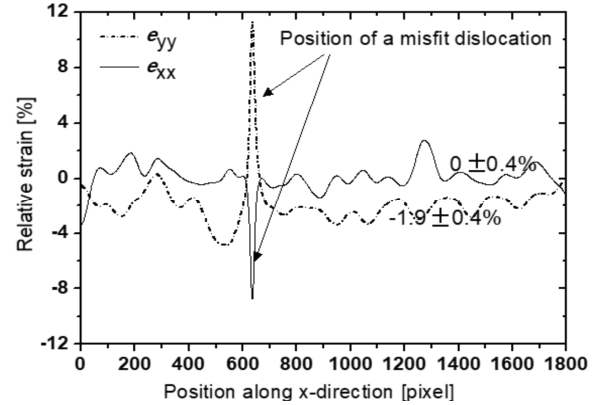


Fig. 4. Line profile of e_{xx} and e_{yy} .

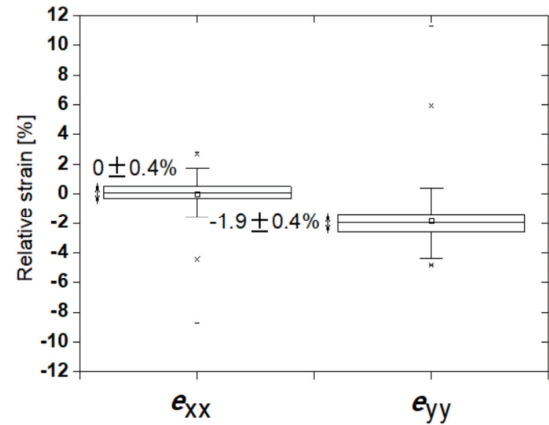


Fig. 5. Box plot of e_{xx} and e_{yy} of Fig. 4.

선으로 표시되어 있다. 그림 4에는 e_{xx} 와 e_{yy} 의 라인 프로파일을 동시에 보여주고 있다. 그림 4에는 격자불일치 전위결함 위치에서 e_{xx} 는 음의 값을, e_{yy} 는 양의 값을 갖는 것을 알 수 있다. 여기서 격자불일치 전위결함은 그림 3에서 표시되어 있듯이 버거스 벡터(burgers vector), $\mathbf{b} = a/6(1-12)$, 방향과 일치한다. 따라서 격자들의 슬립 방향(slip direction)으로 변형률이 존재하며 격자불일치 전위결함 라인을 따라 계면 방향(X축)으로는 격자 수축(lattice contraction)을 성장 방향(Y축)으로는 격자 팽창(lattice expansion)이 되어 음수의 e_{xx} 와 양수의 e_{yy} 를 갖는 것을 알 수 있다.

마지막으로 그림 4의 격자불일치 전위결함 위치를 벗어난 양쪽으로 Si 박막의 e_{xx} 와 e_{yy} 를 정량화하기 위해 상자 그림을 이용하였으며 그림 5에 보여주고 있다. 그림 5에서는 그림 4의 라인 프로파일의 모든 데

이터를 상자 그림으로 표현하였다. 그림 5에서 e_{xx} 와 e_{yy} 를 정량화하면 각각 $0 \pm 0.4\%$ 와 $-1.9 \pm 0.4\%$ 임을 알 수 있다. 따라서 격자불일치 전위결함을 벗어난 위치에서는 Si 박막의 격자들이, 계면 방향으로는 격자 정합(lattice matching)되어 성장하였고 격자상수의 성장 방향 성분은 $\text{Si}_{0.55}\text{Ge}_{0.45}$ 박막보다 Si 박막에서 1.9% 수축됨을 알 수 있다.

4. 결론

본 논문에서는 저자에 의해 발표된 언랩핑 절차가 필요 없는 CFTM [10] 방법을 이용하여 $\text{Si}_{0.55}\text{Ge}_{0.45}/\text{Si}$ 박막에서의 격자불일치 전위결함에서의 변형률을 측정하고 분석하였다. $\text{Si}_{0.55}\text{Ge}_{0.45}/\text{Si}$ 박막의 격자 이미지는 투과 전자 현미경의 HAADF-STEM을 이용하였다. HAADF-STEM 이미지에 CFTM 방법을 적용하여 분석한 결과는 $\text{Si}_{0.55}\text{Ge}_{0.45}$ 박막에 증착된 Si는 계면 방향으로 격자들이 정합(lattice matching)되어 성장된 인장응력(tensile strain)을 가지는 박막이며 Si 박막의 성장 방향으로는 $\text{Si}_{0.55}\text{Ge}_{0.45}$ 보다 격자상수가 1.9% 수축되어 있음을 알 수 있었다. 또한 $\text{Si}_{0.55}\text{Ge}_{0.45}$ 위에 증착된 Si 박막에 격자 불일치 전위결함이 관찰되었고 격자불일치 전위결함의 변형률은 적층결함에 의한 잉여 반평면에 의해 격자불일치 전위결함의 중심에서 변형률이 최대이며 버거스 벡터, $\mathbf{b}=\mathbf{a}/6(1-12)$, 방향으로 계면 방향(X축)으로는 격자 수축(lattice contraction)에 의해 음수의 e_{xx} 를 갖고 성장 방향(Y축)으로는 격자 팽창(lattice expansion)에 의해 양수의 e_{yy} 를 형성하였다.

REFERENCES

- [1] F. He, M. Htch, H. Bender, F. Houdellier, and A. Claverie, *Phys. Rev. Lett.*, **100**, 156602 (2008). [DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.100.156602>]
- [2] M. J. Htch, E. Snoeck, and R. Kilaas, *Ultramicroscopy*, **74**, 131 (1998). [DOI: [https://doi.org/10.1016/S0304-3991\(98\)00035-7](https://doi.org/10.1016/S0304-3991(98)00035-7)]
- [3] M. J. Htch, J. L. Putaux, and J. M. Pnisson, *Nature*, **423**, 270 (2003). [DOI: <https://doi.org/10.1038/nature01638>]
- [4] G. Ade and R. Lauer, *Ultramicroscopy*, **77**, 177 (1999). [DOI: [https://doi.org/10.1016/S0304-3991\(99\)00037-6](https://doi.org/10.1016/S0304-3991(99)00037-6)]
- [5] S. L. Sahonta, G. P. Dimitrakopoulos, Th. Kehagias, J. Kioseoglou, A. Adikimenakis, E. Iliopoulos, A. Georgakilas, H. Kirmse, W. Neumann, and Ph. Komninou, *Appl. Phys. Lett.*, **95**, 021913 (2009). [DOI: <https://doi.org/10.1063/1.3184593>]
- [6] G. Ade, *Microelectron. Eng.*, **51**, 3 (2000). [DOI: [https://doi.org/10.1016/S0167-9317\(99\)00454-2](https://doi.org/10.1016/S0167-9317(99)00454-2)]
- [7] E. Guerrero, P. Galindo, A. Yñez, T. Ben, and S. I. Molina, *Microsc. Microanal.*, **13**, 320 (2007). [DOI: <https://doi.org/10.1017/S1431927607070407>]
- [8] A. Delimitis, Ph. Komninou, G. P. Dimitrakopoulos, Th. Kehagias, J. Kioseoglou, and Th. Karakostas, *Appl. Phys. Lett.*, **90**, 061920 (2007). [DOI: <https://doi.org/10.1063/1.2470496>]
- [9] M. J. Htch, *Microsc. Microanal. Microstruct.*, **8**, 41 (1997). [DOI: <https://doi.org/10.1051/mmm:1997105>]
- [10] W. Chang and T. D. Brown, *Micron*, **42**, 392 (2011). [DOI: <https://doi.org/10.1016/j.micron.2010.11.002>]
- [11] A. K. Singh, J. Tiwari, A. Yadav, and R. K. Jha, *J. Energy*, **2014**, 1 (2014). [DOI: <https://doi.org/10.1155/2014/946406>]
- [12] M. K. Das and S. K. Choudhary, *Appl. Phys. A*, **112**, 543 (2013). [DOI: <https://doi.org/10.1007/s00339-013-7761-9>]