Journal of KIIT. Vol. 15, No. 11, pp. 155–163, Nov. 30, 2017. pISSN 1598–8619, eISSN 2093–7571 **155** http://dx.doi.org/10.14801/jkiit.2017.15.11.155



Si_{0.55}Ge_{0.45} 박막에 증착되어 인장 응력을 가지는 Si 박막의 변형률 측정

장 원 재*

Quantitative Measurements of Strain in Tensile Strained Si on Si_{0.55}Ge_{0.45}

Wonjae Chang*

본 연구는 미시건 주립대학교 교내연구비 지원에 의해 이루어졌음.

요 약

박막의 변형률은 소자의 전기적인 특성에 영향을 미치기 때문에 변형률을 정확히 측정하고 분석하는 것이 매우 중요하다. 따라서 최근에는 투과전자현미경 이미지에서 격자들의 변형률을 분석할 수 있는 GPA (Geometric Phase Analysis)방법이 개발되었다. 본 논문에서는 GPA방법에서 디지털이미지프로세싱을 보강하기 위해서 Matlab기반의 GPA방법을 제안하고, Si_{1-x}Ge_x/Si 이종접합구조의 HAADF이미지에 적용한 변형률 분석결 과를 보여준다. Si_{0.55}Ge_{0.45}/Si 박막의 격자들의 변형률은 박막의 계면 방향으로는 Si_{0.55}Ge_{0.45}와 Si격자들의 변형률 에 차이가 없으며 박막의 수직방향으로 격자들의 변형률이 Si_{0.55}Ge_{0.45} 대비 Si에서 -2.3%±0.2%로 측정이 되었다. 다시 말하면, Si_{0.55}Ge_{0.45}위에 증착된 Si은 인장응력(Tensile Strained)박막이며 정방변형(Tetragonal Distortion) 되었다고 볼 수 있다. 측정값과 이론값 (-3.15%)에서 차이를 보이는 가능한 원인으로써 푸리에 변환을 이용한 디지털이미지프로세싱에 의한 오류와 전자현미경 샘플제작에 대한 오류에 대한 가능성에대해 논의하였다.

Abstract

Strain of thin films grown epitaxial techniques has a strong influence on electronic properties of semiconductor devices. Hence, quantitative measurement of strain should be precisely analysed. Recently, the GPA(Geometric Phase Analysis) method was developed to analyze strain on images with transmission electron microscopy. In this paper, GPA method using Matlab is proposed in order to strengthen digital image processing and strain analysis of Si_{1-x}Ge_x/Si heterostructure on a HAADF image is provided. The results reveal that strain along interface direction and growth direction of Si_{0.55}Ge_{0.45}/Si heterostructure is almost zero and $-2.3\%\pm0.2\%$ respectively such that the tensile strained Si is tetragonally distorted. Also, possible reasons causing difference between the measured value and the theoretical value are discussed: errors due to digital image processing with Fourier transform and TEM sample preparation.

Keywords							
SiGe,	strain	measurement,	HRTEM,	HAADF,	strained	silicon	

* 미시건 주립 대학교 전자공학과 - ORCID: http://orcid.org/0000-0002-9201-2855	 Received: Aug. 12, 2017, Revised: Nov. 06, 2017, Accepted: Nov. 09, 2017 Corresponding Author: Wonjae Chang Dept. of Electrical and Computer Engineering, Michigan State University, East Lansing, Michigan, 48824, USA
	Tel.: +82-70-4084-3942, Email: changwon@msu.edu

Ⅰ.서 론

단결정 위에 단결정박막을 성장시키는 에피택설 성장기법은 다양한 소자에 응용되고 있다. 이때 이 웃하는 박막의 계면에서 격자상수 차이가 나면 박 막내의 원자들의 배열이 물질고유의 격자 상수 값 에서 벗어날 수 있다. 크게 보면 두 가지로 나눌 수 있으며, 격자들의 위치가 원래 위치에서 이동하면서 격자들이 변형률을 가지는 박막과 격자불일치전위 결함(Misfit Dislocation)을 통한 변형률이 완화된 박 막으로 나눌 수 있다. 예를 들면 격자상수가 유사한 SiGe/Si 이종접합(Heterostructure)은 반도체 소자와 태양전지 소자에서 최근에 많이 적용되는데, 반도체 소자에 적용되었을 때 변형률을 가지는 SiGe 박막 으로 증착되면 캐리어의 이동도를 증가시키는 역할 을 하고 반대로 격자불일치전위결함이 있는 박막으 로 증착되면 캐리어의 비국소화(Delocalization)와 이 동도 손실에 의해 소자의 성능이 저하 된다[1]. 또 한 SiGe/Si 이종접합은 태양전지에서 광전류를 개선 하기 위해 최근부터 연구되고 있다. SiGe 박막이 격 자불일치전위결함 없이 변형률을 가지고 증착되었 을 경우 흡수계수(Absorption Coefficient)가 개선되어 태양전지의 광전류가 증가하고 태양전지의 변환효 율이 개선된다[2]. 여기에서 변환효율이 개선되기 위해서는 개방전압이 감소하지 않는 범위에서 광전 류가 개선되는 최적의 Ge함량과 SiGe 박막의 두께 가 중요하며[3] Ge함량이 10%일때 SiGe 태양전지의 변환효율이 최대임을 실험적으로 보여주었고[2] Ge 함량에 따른 광전류와 개방전압에 대한 이론적인 예측과[4] SiGe 태양전지의 모델링이 제시되었다[5]. 이와 같이 격자들의 변형률은 소자의 전기적인 특 성에 중요한 역할을 한다. 따라서 격자들의 변형률 을 측정하는 방법이 중요하며 SiGe 박막의 변형률 을 측정하기 위해 NBD(Nanobeam Electron Diffraction)[6]와 GPA(Geometric Phase Analysis)[7]-[9] 방법이 사용되어져 왔다. NBD의 경우는 저배율에 서 많은 영역의 변형률을 분석하기 위해 유용하지 만 1차원으로 변형률 측정결과를 제공하며 GPA방 법은 분석하고자하는 원래 이미지와 같은 크기의 2 차원이미지로 변형률 분석결과를 제공하는 장점이 있으며 상업용 소프트웨어로[10] 제공된다. 여기서 기존의 소프트웨어를[10] 사용하게 되면 GPA방법을 처음 접하는 사용자도 쉽게 변형률을 계산하고 측 정할 수 있는 장점이 있으나 사용자 목적에 맞게 디지털이미지프로세싱을 다양하게 적용하는데 제한 이 있는 단점이 있다. 따라서 본 논문에서는 GPA알 고리즘 기반에서 다양하게 디지털이미지프로세싱을 사용자가 목적에 맞게 변형하기 위한 방법을 제시 하기 위해 매트랩(Matlab)기반의 GPA알고리즘을 구 현하였다. 매트랩을 사용하게 되면 기본적인 GPA알 고리즘을 제외한 나머지 부분은 사용자가 원하는 데로 목적에 맞게 새로운 함수를 적용하거나 기존 의함수를 변형할 수 있는 장점이 있다. 예를 들면 주파수영역 즉 역공간에서 사용하는 마스크의 모양 과 크기를 사용자가 원하는 함수를 적용하여 분석 하고자하는 이미지에 맞게 정확도와 노이즈(Noise) 를 적절하게 조절할 수 있다. 또 다른 장점으로는 매트랩에서 제공하는 다양한 2차원 및 3차원 그래 프를 활용하면 변형장(Strain Field)를 사용자가 원하 는 방식으로 다양하게 구현할 수 있기 때문에 분석 에 더욱 용이한 장점이 있다.

따라서 본 논문에서는 매트랩 기반의 GPA 분석 방법을 제시하고 유첨에서는 매트랩 코딩을 제공한 다. 이러한 코딩을 사용자가 직접 하기 위해서는 GPA알고리즘에 대한 이해가 필요하기 때문에 본 논문의 2장에서는 GPA알고리즘을 기술하고 3장에 서는 Si_{0.55}Ge_{0.45}/Si 박막에 적용한 결과에 대해 기 술한다.

Ⅱ. 측정 방법

결정성 박막이 증착된 샘플에서 격자들의 변위 (Displacement) 혹은 화학적 정보를 분석하기 위해 HRTEM(High-Resolution Transmission Electron Microscopy) 혹은 HAADF(High-Angle Annular Dark-Field)을 사용한다. 이때 GPA방법은 HRTEM 혹은 HAADF 이미지에서 격자들의 변위에 대한 정보를 분석하는 방법으로써 유용하며, GPA방법에서 위상 (Phase)의 의미는 이미지상의 격자들이 변형이 없는 완벽한 격자위치에서 벗어나는 위치에 존재하는 격 자들의 변위정보를 의미한다. 따라서 GPA방법에서 의 위상이미지는 이미지상의 각각의 픽셀에서의 격 자들의 변형에 의한 변위된 위치정보를 가지고 있 고 GPA방법은 위상이미지를 이용하여 변형률을 계 산할 수 있도록 하는 알고리즘이다. 위상이미지를 도출하는 방법을 수식으로 표현하면 다음과 같다. 먼저 격자들의 변형이 없는 완벽한 격자는 식 (1)로 표현할 수 있다[11].

$$I(r) = \sum_{g} H_{g} \exp 2\pi i (g \cdot r)$$
(1)

식 (1)에서 진폭 H_g 는 이미지상의 각각의 픽셀 에서의 명암에 대한 정보를 가지고 있고, 격자들의 변형이 있을 경우 식 (2)의 변위장(Displacement Field)에 의해 식 (1)은 식 (3)으로 다시 표현할 수 있다[11].

$$r \rightarrow r - u,$$
 (2)

$$I(r) = \sum_{g} H_{g}(r) \exp 2\pi i (g \cdot r - g \cdot u(r))$$
(3)

여기에서 격자들이 g_1 방향으로만 이루어진 1차원 이미지로 단순화하면 식 (4)로 주어진다.

$$I(r) = H_{g1}(r) \exp 2\pi i (g_1 \cdot r - g_1 \cdot u(r)) \tag{4}$$

식 (4)의 위상에는 이미지에서 픽셀에서의 위치 정보를 가지고 있으며 식 (4)의 이미지를 푸리에변 환을 적용하여 공간영역에서 주파수영역으로 변환 하면 역공간으로 표현할 수 있다. 이때 역공간에서 역격자 벡터 g_1 를 마스크를 사용하여 원점으로 이 동하고 다시 푸리에역변환을 하면 식 (5)의 이미지 로 표현 된다[11].

$$H'_{g1}(r) = H_{g1}(r)\exp(-2\pi i g_1 \cdot u(r))$$
(5)

식 (5)를 도출하는 과정에서 역격자 벡터 g_1 를 마스크를 사용하여 원점으로 이동함으로써 식 (5)의 위상에는 g_1 의 기준주파수에 해당하는 완벽한 격자 위치에서 벗어나는 위치에 존재하는 격자들의 지역 변위 정보가 담겨있다. 식 (5)를 이용하여 이미지상 의 각각의 픽셀에서의 지역변위정보를 가지고 있는 위상이미지는 식 (6)으로 계산할 수 있다[11].

$$P_{g1}(r) = Phase[H'_{g1}(r)] = -2\pi g_1 \cdot u(r)$$
(6)

식 (6)의 위상이미지를 이용하여 변형률을 계산 하는 GPA방법의 절차는 그림 1과 같다. 그림 1에서 보면, 주기적으로 반복되는 격자들이 있는 HRTEM 혹은 HAADF 이미지에서 푸리에변환을 하면 푸리 에 파워스펙트럼을 구할 수 있고, 푸리에 파워스펙 트럼에서 푸리에필터를 사용하여 2개의 파워스펙트 럼을 선택한다. 이때 2개의 파워스펙트럼을 선택할 때 서로 비공선(Non-collinear) 이어야 한다. 선택된 2개의 파워스펙트럼은 각각 원점으로 이동하여 푸 리에역변환을 하면 위상이미지를 얻을 수 있다. 여 기서 위상이미지를 미분을 하면 격자들의 변형률을 구할 수 있다.



그림 1. GPA방법의 절차를 나타내는 흐름도 Fig. 1. Flow chart of the GPA method

그러나 위상이미지에 미분을 적용하기 위해서는 언랩핑(Unwrapping) 이라는 중간과정이 필요하다. 이유는 위상이미지가 불연속적인 값들을 갖기 때문 이며 미분하기 위해 불연속적인 값들을 제거하기 위한 언랩핑절차가 필요하다. 그림 1에서 위상이미 지를 도출한 후 위상 이미지와 비례관계에 있는 변 위장을 식 (7)과 식 (8)을 통해서 계산하고나면 변 형률은 식 (9)을 통해 계산할 수 있다[11].

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{P_{g1}} \\ \boldsymbol{P_{g2}} \end{pmatrix} = -2\pi \begin{pmatrix} g_{1x} g_{1y} \\ g_{2x} g_{2y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{u_x} \\ \boldsymbol{u_y} \end{pmatrix}$$
(7)

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{u}_{\boldsymbol{x}} \\ \boldsymbol{u}_{\boldsymbol{y}} \end{pmatrix} = -\frac{1}{2\pi} \begin{pmatrix} g_{1x} g_{1y} \\ g_{2x} g_{2y} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \boldsymbol{P}_{\boldsymbol{g}\boldsymbol{1}} \\ \boldsymbol{P}_{\boldsymbol{g}\boldsymbol{2}} \end{pmatrix}$$
(8)

$$\boldsymbol{e} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}} \ \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}} \\ \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{y}\boldsymbol{x}} \ \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{y}\boldsymbol{y}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \boldsymbol{u}_{\boldsymbol{x}}}{\partial x} & \frac{\partial \boldsymbol{u}_{\boldsymbol{x}}}{\partial x} \\ \frac{\partial \boldsymbol{u}_{\boldsymbol{x}}}{\partial x} & \frac{\partial \boldsymbol{u}_{\boldsymbol{x}}}{\partial x} \end{pmatrix}$$
(9)

여기서 식 (6)의 위상이미지의 의미와 위상이미지가 불연속적인 값을 갖는 이유는 그림 2로 설명할 수 있다. 예를 들면 그림 2와 같이 격자 A가 B로 이동 한 이미지가 있다고 할 때 격자들의 g₁ 방향의 변 위정보를 가지고 있는 위상이미지 P_{g1}을 산출 하였 다고 하면, P_{g1}은 격자 B 위치에서 g₁ 방향의 변위 정보 |u(r)|cosα 값을 가지고 있다. 여기서 변위정 보 |u(r)|cosα 은 다음 식 (10)과 (11)로 대체할 수 있다:

$$|\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r})|\cos\alpha = \frac{1}{|\boldsymbol{g}_1|}\boldsymbol{g}_1 \cdot \boldsymbol{u}(\boldsymbol{r}) \tag{10}$$

$$\frac{1}{|g_1|}g_1 \cdot u(r) = \frac{1}{\frac{1}{d}}g_1 \cdot u(r) = dg_1 \cdot u(r) \quad (11)$$

여기서 식 (11)을 위상이미지 식 (6)의 형태로 표현 하면 다음과 같다

 $0 \le d\boldsymbol{g_1} \boldsymbol{\cdot} \boldsymbol{u(r)} \le d \tag{12}$

$$0 \le 2\pi \boldsymbol{g_1} \boldsymbol{\cdot} \boldsymbol{u(r)} \le 2\pi \tag{13}$$



그림 2. 변위벡터에 따른 격자의 이동과 (A에서B) g₁ 벡터의 관계 Fig. 2. Relationship between lattice movement (from A to B) and g₁

따라서 위상이미지는 0~2π 범위의 값만 갖는다. 다시 말하면, 위상이미지에서 격자들의 변위가 격자 상수 값만큼 변할 때마다 위상이미지에서는 0에서 2π 혹은 2π에서 0으로 값이 점프하고 그 위치에서 불연속적인 값을 갖는다. 이러한 불연속 값을 제거 하는 절차가 언랩핑이다. 본 논문에서는 GPA알고리 즘을 매트랩으로 구현하여 위상이미지를 도출하고 언랩핑을 통해 Si0.55Ge0.45/Si 박막의 변형률을 측정 하고 분석하였다.

Ⅲ.결 과

Si_{0.55}Ge_{0.45} 위에 증착된 Si박막의 원자들의 배열 상태 및 변형률을 측정하기 위해 투과전자현미경을 이용하였으며, 장비는 JEOL 2200FS 200kV field emission TEM을 사용하였다. 그림 3은 Si_{0.55}Ge_{0.45}/Si 박막의 단면 HAADF 이미지를 보여주고 있다. Si_{0.55}Ge_{0.45}/Si 이미지의 왼쪽이 Si_{0.55}Ge_{0.45}이고 오른쪽 이 Si 박막이며 이미지 사이즈는 800 by 800 픽셀 이다. 여기서 Ge함량은 EDX(Energy Dispersive X-ray Spectrometry)로 결정하였다. 그림 3의 화살표는 박 막의 성장방향[001]과 계면방향을 보여준다. 여기서 박막의 성장방향을 X축으로 계면방향을 Y축으로 표기하였다.

그림 3의 Si_{0.55}Ge_{0.45}/Si 이미지를 그림 1에서 기술 한 것과 같은 절차로 진행하였다. 첫 번째 절차로써 그림 3을 푸리에변환을 진행하였고 결과는 그림 4 에 나타내고 있다. 그림 4는 푸리에파워스펙트럼을 나타내고 있다. 그림 4에서 비공선에 있는 (1-11)과 (-111)을 선택하였다. 선택된 (1-11)과 (-111)은 그림 4에 원으로 표시되어있다. 선택된 (1-11)과 (-111)은 원점으로 각각 이동하였고 원점으로 이동한 각각의 파워스펙트럼을 푸리에역변환을 진행하여 위상이미 지 P₁₋₁₁과 P₋₁₁₁을 얻고 각각의 위상이미지에 언랩핑 과정을 적용한 후 식 (8)과 식 (9)을 통해 격자들의 변형률을 계산하였다.



그림 3. Si_{0.55}Ge_{0.45}/Si의 단면 HAADF 이미지. Fig. 3. A cross-sectional HAADF image of Si_{0.55}Ge_{0.45}/Si



그림 4. 그림 3의 푸리에파워스펙트럼 Fig. 4. Fourier power spectrum of Fig. 3



그림 5. Si_{0.55}Ge_{0.45}/Si (그림3 참조)의 *e*_{xx} 변형률지도 Fig. 5. An *e*_{xx} strain mapping of the Si_{0.55}Ge_{0.45}/Si (See Fig. 3)

그림 5는 Si_{0.55}Ge_{0.45}/Si의 단면 HAADF 이미지(그 림 3참조)에 GPA방법을 적용한 결과이다. 그림 5의 이미지는 그림 3의 위치별로 X축방향의 격자상수 변형률(e_{xx}) 정보를 나타낸다. 그림 5의 오른쪽 명암 단계를 보면 범위는 0에서 - 3%로 설정했으며 명 암이 어두운색을 나타낼수록 X축방향의 격자상수가 작아짐을 의미한다. 그림 5의 결과를 보면 X축방향 의 격자상수가 Si_{0.55}Ge_{0.45} 박막에 비해서 Si 박막에 서 작아짐을 알 수 있다. 이것은 Si의 격자 상수 (5.431Å)가 Si_{0.55}Ge_{0.45}의 베가드법칙(Vegard's Law)에 의한 격자상수(5.533Å) 보다 작기 때문에 기판에 평 행한 Y축방향에서 인장응력이 존재함을 함축한다. 이것은 그림 6에서 X축방향의 변형률(e_{xx})과 Y축방 향의 변형률(e_{yy})를 동시에 보면 알 수 있다.

그림 6은 그림 3에서 변형률 e_{xx} 와 e_{yy} 를 수평방 향으로(그림 3 아래쪽 화살표 참조) 나타낸 라인프 로파일이다. 라인프로파일의 각각의 값들은 수직방 향의 값들을 평균한 값들이다. 그림 6에서 Y축방향 의 격자상수 값은 Si0.55Ge0.45와 Si에서 차이가 없으 며 X축방향으로 Si0.55Ge0.45와 Si의 격자 상수차이가 있으므로, Si은 인장응력 박막이 정방변형 되었다고 할 수 있다.

그림 6에서 인장응력 Si 박막의 성장방향(X축)으 로의 변형률(exx) 측정값을 상자그림을 이용하여 정 량화하면 - 2.3±0.2%이며 그림 7에 보여주고 있다. 그림 7은 그림 6의 Si 박막영역에서의 라인프로파 일 데이터를 상자그림으로 나타내고 있다.





GPA방법을 이용한 Si 박막의 변형률(exx) 측정값 은 -2.3% 이지만 이론값은 탄성이론에 의한 정방변 형으로 식 (14)과 같이 예측하면 이론값은 -3.15%이다.

$$a_{\perp} = a_{Si_{0.55}Ge_{0.45}} - \frac{1+\upsilon}{1-\upsilon} (a_{Si} - a_{Si_{0.55}Ge_{0.45}})$$
(14)

따라서 e_{xx} 의 측정값과 이론값은 차이가 발생하였 는데 격자불일치전위결함이 관찰되지 않았으므로 측정값과 이론값의 불일치 원인은 크게 2가지로 나 눌 수 있다. 첫 번째는 푸리에변환을 이용한 디지털 이미지프로세싱 과정에서 발생하는 오류와 두 번째 는 전자현미경의 샘플제작과 관련된 오류로 나눌 수 있다.

먼저 첫 번째의 푸리에변환을 이용한 디지털이미 지프로세싱의 대표적인 오류는 누설효과와 밀접하 게 연관되어있다[12]. 누설효과란 이미지에 있는 반 복되는 주기가 정수배로 존재하지 않을 때 혹은 이 미지의 해상도가 충분하지 않을 때 주파수영역에서 가짜주파수(Spurious Frequency)가 포함되는 현상이며 가짜주파수에 의해 디지털이미지프로세싱 과정에서 노이즈가 포함되는 현상이 누설효과이다. 이러한 노 이즈가 포함하게 되면 역공간에서 사용하는 마스크 의 크기가 어떻게 되느냐에 따라 노이즈가 포함되 는 양이 변하므로 마스크의 크기에 따라 변형률이 달라지는 특성이 발생한다. 따라서 본 논문의 측정 값과 이론값의 불일치의 원인이 누설효과인지 확인 하는 방법은 역공간에서 사용하는 마스크의 크기 변화에 따른 변형률의 변화를 확인함으로써 알 수 있다.

그림 8의 결과를 보면 마스크의 크기를 g/2 이 상으로 변화했을 때 변형률이 변화하지 않음을 알 수 있다. 따라서 본 논문에서의 오차는 푸리에변환 을 이용하는 디지털이미지프로세싱에 의한 오류보 다는 전자현미경과 관련된 오류로 볼 수 있다. 이렇 게 마스크의 크기를 사용자가 원하는 방법대로 변 경하여 변형률을 분석하거나 혹은 마스크의 형태를 사용자함수를 적용하여 정확성을 개선하기 위해서 는 GPA방법을 매트랩으로 구현하는 것이 필요하다. 두 번째로 전자현미경과 관련된 샘플제작이 변형 률에 영향을 줄 수 있다. 전자현미경 샘플처럼 두께 가 얇은 경우 2개의 자유표면을 통한 응력완화 (Stress Relaxation)가 발생하여 변형률에 영향을 줄 수 있다. SiGe/Si 박막의 경우 이전의 연구결과를 보면 전자현미경 샘플의 두께에 따라 자유표면을 통한 응력완화 때문에 변형률이 이론값보다 최대 25%까지 적게 측정됨을 알 수 있다[13]. 따라서 본 논문에서 변형률이 이론값보다 적게 측정된 원인으 로 전자현미경 샘플의 자유표면을 통한 응력완화로 설명이 가능한 것으로 생각된다.

Ⅳ. 결론 및 향후 과제

본 논문에서는 매트랩의 디지털이미지프로세싱의 다양한 장점을 활용하여 GPA알고리즘을 구현하였 고 Si_{0.55}Ge_{0.45}/Si 이종접합구조의 HAADF 이미지에 적용하여 변형률을 측정하였다. 박막의 계면방향과 수직인 성장방향으로 변형률 *e*_{yy}와 *e*_{xx}를 각각 측정 하였다. 박막의 계면 방향으로 Si_{0.55}Ge_{0.45}와 Si의 격 자상수 값은 차이가 없으며 박막의 성장방향으로 Si_{0.55}Ge_{0.45} 박막에 비하여 Si 박막에서 -2.3±0.2%로 측정이 되었다. 따라서 Si 박막은 인장응력 박막이 정방변형 되었다고 볼 수 있다. Si 박막에서 수직방 향의 변형률은 이론값 -3.15% 보다 적은 값이며 원 인으로는 푸리에변환을 이용한 디지털이미지프로세 싱에서 기인되는 오류와는 관련이 적고 전자현미경 샘플제작에서 기인되는 자유표면을 통한 응력완화 로 설명이 가능하다[13]. 향후에는 매트랩기반의 GPA방법을 Si_{1-x}Ge_x/Si 이종접합 소자에 적용하여 변 형장과 소자의 전기적특성의 연관성 및 격자결함이 변형장에 미치는 영향에 대해 분석할 예정이다.

V.유 첨

매트랩기반의 GPA알로리즘을 코딩하는 방법은 아래와 같이 크게 6가지 절차로 나눌 수 있다.

- 1. 분석하고자 하는 이미지의 푸리에변환.
- 주파수영역에서, 비공선에 있는 역격자 2개를 선 택하기 위한 마스크 정의.
- 마스크를 이용하여 역격자 2개를 선택하여 원점 으로 이동.
- 4. 위상이미지 도출.
- 5. 위상이미지의 언랩핑 실행.
- 6. GPA알고리즘을 이용하여 변형률 계산.

아래에 나타나는 코딩은 GPA알고리즘을 실행하기 위한 것으로써 상기에서 설명한 절차대로 보여준다.

1. 푸리에 변환

```
image=imread ('file name');
#Fourier transform
im=fftshift(fft2(image);
#An image of Fourier power spectrum
im2=fftshift(abs(fft2(image)));
```

2. 마스크 정의

[M N]=size(im); [X,Y]=meshgrid(1:N,1:M); mask_gl=zeros(M,N); mask_g2=zeros(M,N); mask_g1=exp(-4*pi*((X-((N/2+1)+g1x)).^2 +(Y-(M/2+1)+g1y).^2)/(r^2)); mask_g2=exp(-4*pi*((X-((N/2+1)+g2x)).^2 +(Y-(M/2+1)+g2y).^2)/(r^2));

여기에서 예시로써 보여주는 마스크는 가우시안 함 수를 사용하였다. 매트랩에서는 사용자가 다양한 함수를 적용할 수 있기 때문에 사용자의 목적에 맞 게 마스크의 형태와 크기를 결정할 수 있다. 상기 코딩에서 변수 g1x,g1y,g2x,g2y가 있으며 g1x 와 g1y는 파워스펙트럼 g1과 g2를 선택했을 때 g1 의 X축성분과 Y축성분을 각각 나타내며 단위는 픽 셀이다. 마찬가지로 g2x와 g2y는 g2의 X축성분과 Y축성분을 각각 나타낸다. 나머지 변수 r은 가우 시안 마스크의 반지름을 나타내다.

- 3. g₁, g₂ 선택 및 원점으로 이동 M1=mask_g1.*im; # Selection of g₁ M2=mask_g2.*im; # Selection of g₂ #Shifting to origin of g₁ and g₂ OM1=circshift(M1, [n2, -n1]); OM2=circshift(M2, [-n4, -n3]); #Inverse Fourier transform H1=ifft2(fftshift(OM1)); H2=ifft2(fftshift(OM2));
- 4. 위상이미지(**P**_{g1}, **P**_{g2}) 계산 [k1,k2]=meshgrid(-N/2:N/2-1,-M/2:M/2-1); k2=-k2; P1=-angle(H1); #Phase image of **P**_{g1} P2=-angle(H2); #Phase image of **P**_{g2}
- 5. 언랩핑 알고리즘
 - #Generation of two unwrapping matrixes WU1=zeros (size(P1)); WU2=zeros (size(P2)); #Loop for unwrapping of P_{g1} along x-direction for i=1:10 for j=2:N if p1(i,j)-p1(i,j-1)<-pi</pre>

```
WU1 (i, j) = WU1(i, j-1) + 1;
   else
   WU1 (i,j)=WU1 (i,j-1);
if p1(i,j)-p1(i,j-1)>pi
   WU1 (i,j)=WU1 (i,j-1)-1;
   else
   WU1 (i,j)=WU1 (i,j-1);
   end
   end
end
end
for j=1:10
for i=11:M
if p1(i,j)-p1(i-1,j)<-pi
   WU1 (i,j)=WU1 (i-1,j)+1;
   else
   WU1 (i,j)=WU1 (i-1,j);
if p1(i,j)-p1(i-1,j)>pi
   WU1 (i,j)=WU1 (i-1,j)-1;
   else
   WU1 (i,j)=WU1 (i-1,j);
   end
   end
end
end
for i=11:M
for j=10+1:N
if p1(i,j)-p1(i,j-1)<-pi
   WU1 (i,j)=WU1 (i,j-1)+1;
else
   WU1 (i,j)=WU1 (i,j-1);
if p1(i,j)-p1(i,j-1)>pi
   WU1 (i,j)=WU1 (i,j-1)-1;
else
WU1 (i,j)=WU1 (i,j-1);
  end
  end
end
end
상기의 언랩핑 알고리즘은 gi을 선택하여 만들어
```

진 위상이미지(**P**_{g1})를 x방향으로 언랩핑하는 방법이 며 마찬가지로 위상이미지(**P**_{g2})를 언랩핑하기 위해 서는 상기 코딩에서 p1을 p2로 WU1을 WU2로 대체 하여 반복하면 된다.

6. 변형률 계산

```
unwrap_p1=p1+WU1*2*pi;
unwrap_p2=p2+WU2*2*pi;
A=(1/(-2*pi))*((N*M)/(g1x*g2y-g1y*g2x)))*(g2y/M #Equation of (8)
B=(1/(-2*pi))*((N*M)/(g1x*g2y-g1y*g2x)))
*(-g1y/M) #Equation of (8)
K1=A*(1/6)* [-1,0,1; -1,0,1; -1,0,1];
K2=B*(1/6)* [-1,0,1; -1,0,1; -1,0,1];
GPA_g1=conv2(unwrap_p1,K1);
GPA_g2=conv2(unwrap_p2,K2);
GPA=GPA_g1+GPA_g2;
```

마지막으로 절차 6에서는 식 (9)의 **e**xx를 계산하 기 위한 코딩을 나타내고 있다. 위상이미지의 미분 은 컨볼루션(Convolution)함수를 이용하였다.

References

- [1] D. Li, C. Huang, B. Cheng, H. Wang, and Q. Wang, "Effect of low-temperature SiGe interlayer on the growth of relaxed SiGe", Journal of Crystal Growth, Vol. 213, No. 3-4, pp. 308-311, Jun. 2000.
- [2] M. H. Liao and C. H. Chen, "The investigation of Optimal Si-SiGe Hetero-Structure Thin-Film Solar Cell with Theoretical Calculation and Quantitative Analysis", IEEE Trans. Nanotechnology, Vol. 10, No. 4, pp. 770-773, Sep. 2011.
- [3] M. K. Das and S. K. Choudhary, "Ge-contect dependent efficiency of Si/SiGe heterojunction solar cell", Applied Physics A, Vol. 112, No. 3, pp. 543-548, Sep. 2013.
- [4] A. K. Singh, J. Tiwari, A. Yadav, and R. Kumar, "Analysis of Si/SiGe Heterostructure solar cell",

Journal of Energy, Vol. 2014, No. 946406, pp. 1-7, Jul. 2014.

- [5] E. Kadri, M. Krichen, and A. Arab, "Analytical method for the analysis of thin SiGe/Si solar cells with front surface field", Optical and Quantum Electronics, Vol. 48, No. 305, pp. 1-17, May 2016.
- [6] J. P. Liu, K. Li, S. M. Pandey, F. L. Benistant, A. See, M. S. Zhou, and L. C. Hsia, "Strain relaxation in transistor channels with embedded epitaxial silicon germanium source/drain", Applied Physics Letters, Vol. 93, No. 22, pp. 221912-1-3, Dec. 2008.
- [7] F. Hue, M. Hytch, H. Bender, F. Houdellier, and A. Claverie, "Direct Mapping of Strain in a Strained Silicon Transistor by High-Resolution Electron Microscopy", Physical Review Letters, Vol. 100, No. 15, pp. 156602-1-4, Apr. 2008.
- [8] C. W. Zhao, Y. M. Xing, J. Z. Yu, and G. Q. Han, "Quantitative strain characterization of SiGe heterostructures by high-resolution transmission electron microscopy", Physica B, Vol. 405, No. 16, pp. 3433-3435, May 2010.
- [9] M. J. Hytch, J. Putaux, and J. Penisson, "Measurement of the displacement field of dislocations to 0.03 Å by electron microscopy", Nature, Vol. 423, No. 6937, pp. 270-273, May 2003.
- [10] GPA for DigitalMicrograph, https://www. hremres arch. com/Eng/plugin/GPAEng.html [Accessed: Oct. 25, 2017]
- [11] M. J. Hytch, E. Snoeck, and R. Kilaas, "Quantitative measurement of displacement and strain fields from HREM micrographs", Ultramicroscopy, Vol. 74, No. 3, pp. 131-146, Apr. 1998.
- [12] W. Chang and T. D. Brown, "Reliability of the CFTM and GPA methods for strain analysis at ultra-thin layers", Micron, Vol. 42, No. 5, pp. 392-400, Nov. 2010.

[13] N. Cherkashin, M.J. Hytch, E. Snoeck, F. Hue, J. M. Hartmann, Y. Bogumilowicz, and A. Claverie, "Quantitative local strain measurement in compressive strained Ge/Tensile strained Si bi-layers grown on top of relaxed Si0.5Ge0.5 virtual substrates", Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B, Vol. 253, No. 1-2, pp. 145-148, Nov. 2006.

저자소개

장 원 재 (Wonjae Chang)



1998년 2월 : 경희대학교 전자공학과(공학사) 2005년 5월 : 플로리다대학교 전자공학과(공학석사) 2011년 1월 : 미시건주립대학교 전자공학과(공학박사) 2011년 2월 ~ 현재 : LG전자 양재

R&D 캠퍼스 책임연구원 관심분야 : 태양전지/LED, 화학물반도체, MEMS, 투과전자현미경. 디지털영상처리