

탄소에 의한 실리콘 (001)면의 1차원 및 2차원 구조 형성

김한철, 김원동, 이근섭*, 구자용
한국표준과학연구원 물질량표준부, *인하대학교 물리학과

$\text{Si}_{1-x}\text{C}_x$ 계는 다양한 응용가능성을 지니고 있으나, 탄소의 원자 크기가 실리콘에 비해 매우 작기 때문에 정렬된 구조 보다는 불규칙한 원자 배열을 이룰 것이라고 믿어져 왔다. 뿐만 아니라 실리콘 표면에 혼입되는 탄소가 어디에 위치하는지 또 탄소 혼입에 의한 실리콘 격자의 변형은 어떠한지 등에 대한 원자수준의 이해는 거의 없다. 에 대해서는 잘 알려지지 않아왔다. 이 발표에서는 scanning tunneling microscopy (STM) 실험과 제일원리계산을 이용하여 최근에 이루어진 Si(001)에의 탄소혼입에 대한 연구 결과를 보고하려 한다.

먼저 초기 혼입의 경우 즉 1개의 탄소 원자가 혼입되는 경우를 살펴보면, 기존의 연구 결과들과는 달리, 혼입된 탄소가 4번째 층의 α 자리에 치환되며 Si dimer vacancy를 형성하는 구조 (DV41)가 가장 낮은 에너지를 가짐을 알았다. 혼입된 탄소의 양이 늘어나면 탄소원자들은 상호작용을 하게 되어서, Si dimer row 방향으로서는 서로 반발하고, dimer row에 수직한 방향으로서는 서로 끌어당긴다. 따라서, DV41들은 dimer row에 수직한 방향으로 정렬하여 1차원의 사슬을 형성하고, 이 사슬들은 일정한 간격으로 떨어져 있게 된다. 즉, $2 \times n$ ($n=10$) 구조가 형성된다. 혼입되는 탄소의 양이 더 많아지면 $c(4 \times 4)$ phase가 형성된다는 것이 오랜 전부터 보고되어 왔는데, $2 \times n$ 과 $c(4 \times 4)$ 구조가 공존하는 수많은 STM 이미지들을 분석한 결과 $c(4 \times 4)$ phase의 탄소 혼입량은 $1/8$ ML임을 밝혔다. 즉, $c(4 \times 4)$ 셀 당 1개의 탄소 원자가 혼입된다. 결정된 탄소량을 바탕으로 $c(4 \times 4)$ phase의 원자 구조를 결정할 수 있었다. 결정된 $c(4 \times 4)$ 원자구조는 표면 밑 4째층에 형성된 탄소의 2차원 배열, 각 탄소 원자 위에 형성된 Si dimer vacancy, 그리고 Si dimer vacancy 양 옆의 90° 회전된 Si dimer 로 특징지어진다.

이 연구의 계산들은 한국과학기술정보연구원의 '제5차 슈퍼컴퓨팅 응용연구 전략지원 프로그램'을 통해 수행되었다.