

나노압입에 의한 반도체 소재의 구조상전이 해석

김동연¹, 오수익[#]

Structural Phase Transformations in Semiconductor Material Induced by Nanoindentation

D. E. Kim, S. I. Oh

Abstract

Structural phase transformations of silicon during nanoindentation were investigated in detail at the atomic level. The molecular dynamics simulations of nanoindentation on the (100), (110) and (111) surface of single crystalline silicon were simulated, and this supported the theoretical prediction of the anisotropic behavior of structural phase transformations. Simulations showed that microscopic aspects of phase transformation varied according to the crystallographic orientation of the contact surface and were directly linked to the slip system.

Key Words : Molecular Dynamics(분자동역학), Nanoindentation(나노압입), Silicon(실리콘), Structural Phase Transformation(구조상전이), Slip System(슬립계),

1. 서론

나노미터 스케일에서 물성 및 변형 메커니즘은 마크로 스케일과 크게 다르다고 알려져 있다. 따라서 나노미터 스케일의 공정 및 제품 개발을 위해서는 이에 대한 명확한 이해가 선행되어야 한다. 나노압입은 이러한 목적으로 수행되는 가장 보편적인 방법이다. 나노압입은 탐침의 변위에 따라 측정되는 하중을 이용하여 미세 박판과 같은 소재에 대한 탄성계수, 항복강도, 경도 등 물리적 기계적 성질을 측정하는 방법이다. 나노압입이 물리적인 변형에 대한 많은 정보들을 가지고 있지만, 나노압입시 발생하는 큰 응력으로 인한 결함과 균열 및 소재의 piling-up 으로 인해 우리가 필요로 하는 물성을 정확하게 계산하는 것은 쉽지 않다. 그러므로 표면 및 표면아래(subsurface)의 현상에 대한 이해가 필요하다.

단결정 실리콘은 NEMS 및 반도체에 가장 많이 사용되는 재료이다. 실리콘 소재의 나노미터 스케일 패턴은 생산공정과 작동 중에 하중과 열팽창, 마찰과 같은 변형을 겪게 되고 이는 소자의 품질을 변화시키는 주요 요인이 된다. 이러한 이유로 나노압입을 이용한 실리콘 연구가 활발히 이루어지고 있다. 실리콘은 높은 정수압에 의해서 구조상전이가 이루어진다고 알려져 있다. 각각의 결정 구조는 전기저항[1] 및 X-ray 회절법, Raman 분광법, Transmission electron microscopy (TEM)을 이용하여 확인되고 있다. 실리콘의 전기저항은 나노압입시 급격하게 감소한다. 이러한 실험 결과들은 하중이 증가함에 따라서 반도체의 다이아몬드 결정 구조에서 금속성의 β -tin 결정구조로의 구조상전이를 보여주고 있다. 또한 High Resolution TEM[2]을 이용한 연구에서는 압입하중을 제거하는 속도에 따라서 비정질 또는 준안정성 (metastable) 결정구조가 발견되고 있다.

1. 서울대학교 기계항공공학부 대학원
교신지자: 서울대학교 기계항공공학부, sioh@snu.ac.kr

이번 연구에서는 나노압입에 의한 실리콘 소재의 구조상전이 메커니즘을 나노미터 스케일 관점에서 연구를 진행하였다. 이를 위해 대규모 분자동역학 연산을 통한 실리콘 (100)와 (110), (111)에 대한 나노압입 해석을 수행하였으며 실리콘의 나노미터 스케일에서의 구조상전이는 슬립계와 밀접한 연관이 있다는 것을 확인하였다.

2. 해석 방법

전체 해석시스템은 단결정 구조의 실리콘 기판과 다이아몬드 인텐더로 이루어져 있다. 실리콘과 다이아몬드의 각각의 원자에 대한 공유결합을 모사하기 위해서 Tersoff 포텐셜[3]이 사용되었다. 기판의 실리콘과 인텐더의 다이아몬드 원자간에 작용하는 힘은 척력만을 모델링 하였다. 기판이 부동태화 (passivated) 되어 있다고 가정하고 표면의 물리흡착(physisorption)과 화학흡착(chemisorption)은 고려하지 않았다. 실리콘 기판은 인텐더와의 접촉면이 (100)와 (110), (111)이 되도록 하였으며 각각은 300K의 격자상수 357Å를 갖도록 모델링하여 전체크기 380Åx380Åx210Å의 약 1,600,000의 실리콘 원자로 이루어져 있다. 지름 110Å의 다이아몬드 인텐더는 125ms⁻¹의 속도로 압입하여

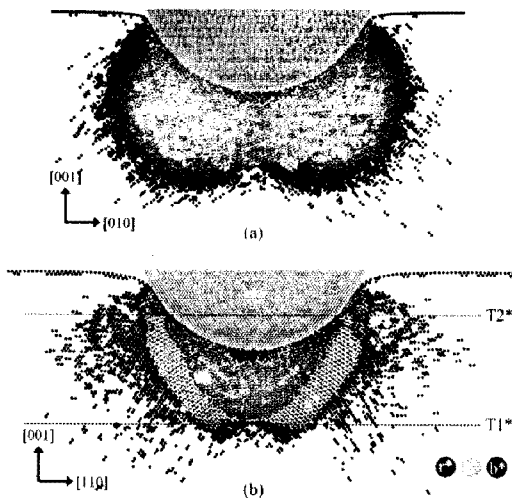


Fig. 1 Side cross-section view of transformed region induced by nanoindentation on the (100) silicon surface. (a) Cross section view on (100) plane, passing through the center of the simulation model (S1* of Figure 2); (b) Cross section view on (-110) plane (S2* of Figure 2)

최대 앞입 깊이는 75Å이다. 적분방법으로는 Gear 알고리즘을 사용하였으며 적분시간 간격은 1.0fs이다. 이 시간 간격은 실리콘과 다이아몬드 원자의 진동 시간과 비교하여 충분히 작은 값으로 Tersoff 포텐셜에서 충분히 정확한 결과를 얻을 수 있다고 알려져 있다. 대규모 연산을 위해 격자형셀을 이용한 Verlet neighbor list와 OpenMP를 이용한 병렬연산을 이용하였다.

3. 해석 결과 및 고찰

3.1 변형구간의 결정구조

전기저항을 이용한 구조상전이 연구 이후 정수압 변화에 따른 다양한 결정구조가 실험을 통해

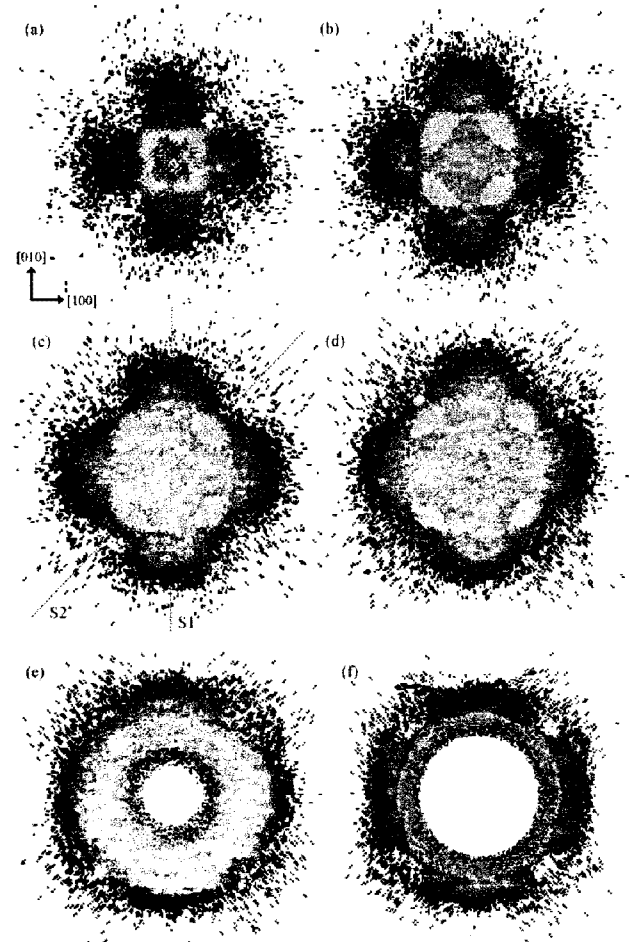


Fig. 2 Cross section view of transformed regions at different depths from the Si(100) surface. (a) At the depth of 13~14nm from the top surface (T1* of Figure 1); (b) 11~12nm; (c) 9~10nm; (d) 7~8nm; (e) 5~6nm; (f) 3~4nm.

알려져 있다. 일반적으로 분자동역학에서는 반지름 방향 분포함수(radial distribution function, rdf)를 이용하여 결정을 구분한다. 그러나 다양한 결정구조가 좁은 영역에 같이 존재하는 경우 rdf는 특정 영역의 결정구조를 구분하는 것이 불가능하다. 이번 연구에서는 각 원자의 주위 환경을 두 영역으로 구분하여 각 영역 안에 위치한 인접원자의 수를 이용하여 결정구조를 구분하였다. 첫 번째 영역은 최대 공유결합 길이를 포함하는 구역이며 두 번째 영역은 공유결합을 하지 않은 최근접 인접원자를 포함할 수 있는 범위로 한정된다.

이전 연구결과를 토대로 나노압입 해석을 수행하는 동안 Si-I, Si-II, Si-III, Si-XII, bct5-Si 이 발견될 수 있다고 가정하였다. 우선 첫 번째 영역은 배위수(coordination number)가 각각 4, 5, 6 인 Si-I, Si-II, bct5-Si 을 구분하기 위하여 사용되었다. 매 해석 단계마다 각각의 최대 공유결합 길이가 일정하지 않고 이에 대한 기준이 존재하지 않기 때문에 본 논문에서는 2.6Å을 첫 번째 영역에 대한 기준으로 잡았다. 두 번째 영역은 배위수 4의 준안정성 결정구조인 Si-III와 Si-XII를 구분하기 위해서 사용하였다. 이 준안정성 결정구조는 배위수 4의 뒤틀린 사면체결합이므로 배위수만을 이용해서는 Si-I과 구분할 수 없다. 그러나 Si-I과는 달리 배

위수 4인 준안정성 결정구조는 3.5Å 이내의 거리에서 공유결합을 하지 않은 특정한 5 번째 근접원자를 갖는 것을 확인하였다.[4] 이러한 차이점을 기반으로 두 번째 영역의 범위는 2.6Å에서부터 3.5Å로 설정하였다.

3.2 나노압입에 따른 구조상전이

일반적으로 나노압입시 Si-I에서 Si-II로의 상전이는 인덴터 아래에서 일어난다고 알려져 있다. 그러나 이번 논문에서는 접촉면의 결정방향에 따라 다른 결과를 보였다. (100)의 경우는 인덴터 아래부분에서 배위수 6의 결정구조가 관찰되는 반면 (110)와 (111)에서는 배위수 4, 5, 6의 혼합물 형태의 비정질 구조가 관찰되었다. 또한 (100)와 (111)의 상전이 영역을 비교할 경우 (100)이 깊이 방향으로 20Å 더 깊이 상전이가 일어난 것을 확인할 수 있다. 실리콘의 구조상전이는 접촉면에 따라서 메커니즘이 전혀 다른고 실리콘의 슬립계와 밀접한 연관이 있다는 것을 확인할 수 있었다.

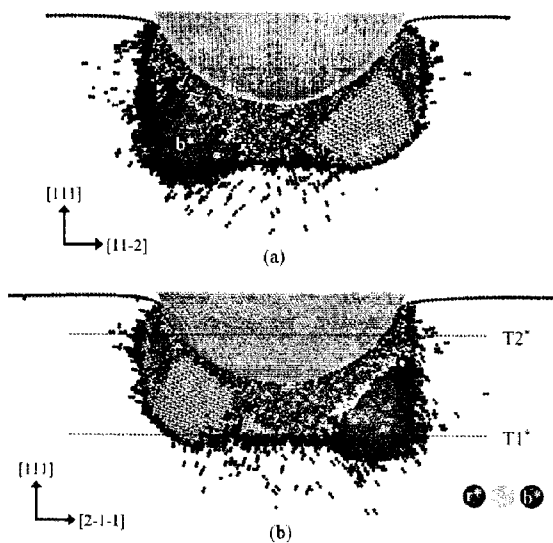


Fig. 3 Side cross-section view of transformed region induced by nanoindentation on the (111) silicon surface. (a) Cross section view on the (1-10) plane, passing through the center of the simulation model (S1* of Figure 4); (b) Cross section on the (0-11) plane (S2* of Figure 4).

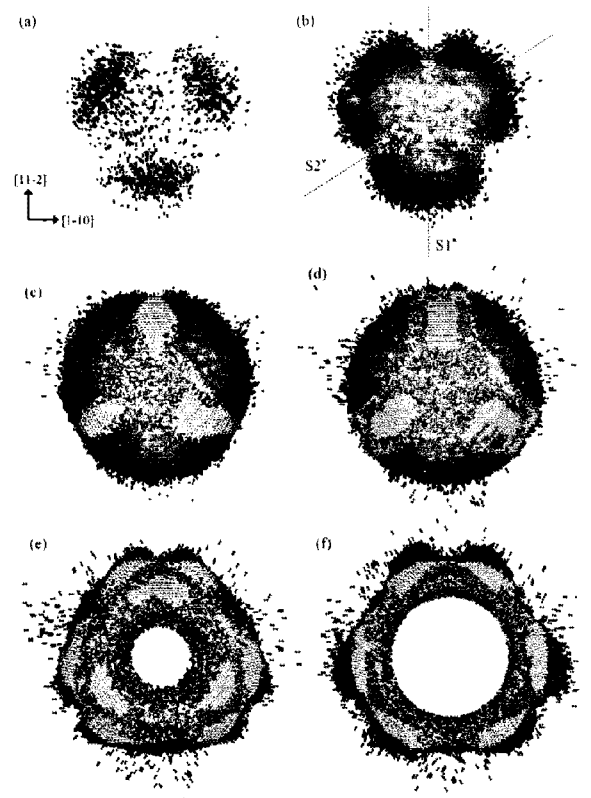


Fig. 4 Cross section view of transformed regions at different depths from the (111) silicon surface. (a) At the depth of 13~14nm from the top surface (T1* of Figure 3); (b) 11~12nm; (c) 9~10nm.; (d) 7~8nm; (e) 5~6nm; (f) 3~4nm.

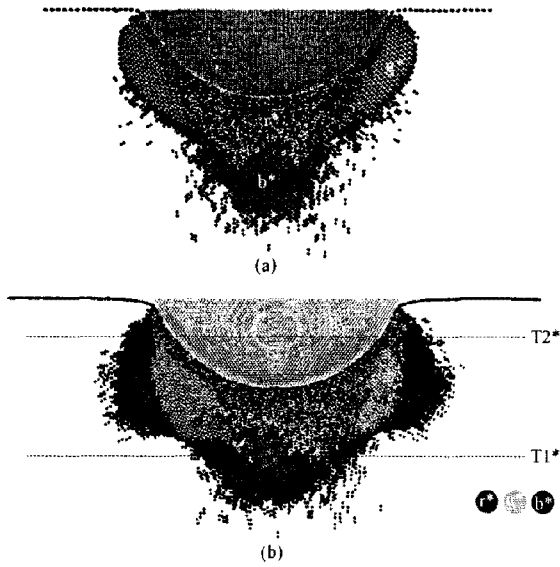


Fig. 5 Side cross-section view of transformed region induced by nanoindentation on the (110) silicon surface.

일반적으로 준 안정성 결정구조인 Si-III 와 Si-XII 는 압입하중을 제거하는 구간에서 관찰된다고 알려져 있지만 이번 연구에서는 실리콘의 슬립방향과 동일한 $\langle 110 \rangle$ 으로 압입과정 중에 관찰되었다. 실리콘결정은 450°C 이하에서는 전위가 발생하지 않는다고 실험을 통해 알려져 있다. 강한 방향성을 갖는 사면체 구조의 공유결합으로 인해 특정 온도 이하에서는 전위 보다는 사면체 결합의 뒤틀림이 발생하고 이로 인해 준안정성 결정으로의 상전이가 슬립방향을 따라서 관찰된다고 판단된다.

4. 결론

이번 연구에서는 나노압입에 의한 실리콘의 구조상전이에 대한 연구를 수행하였다. 분자동역학 해석을 통해서 나노미터 스케일에서의 구조상전이를 관찰하여 구조상전이의 이방성에 대한 가능성을 제시하였다. (100)에 대한 나노압입의 경우 정수압 실험과 같이 Si-II 가 관찰되는 반면 (110)과 (111)의 경우는 비정질 실리콘이 확인되었다. 이와 더불어 압입과정에서 배위수 4 의 준안정성 결정구조가 전위 대신에 $\langle 110 \rangle$ 방향으로 발견되었다. 이를 통해 실리콘의 구조상전이는 접촉면의 결정방향에 따라 이방성을 보이며 이는 슬립계와 밀접한 연관이 있음을 확인하였다.

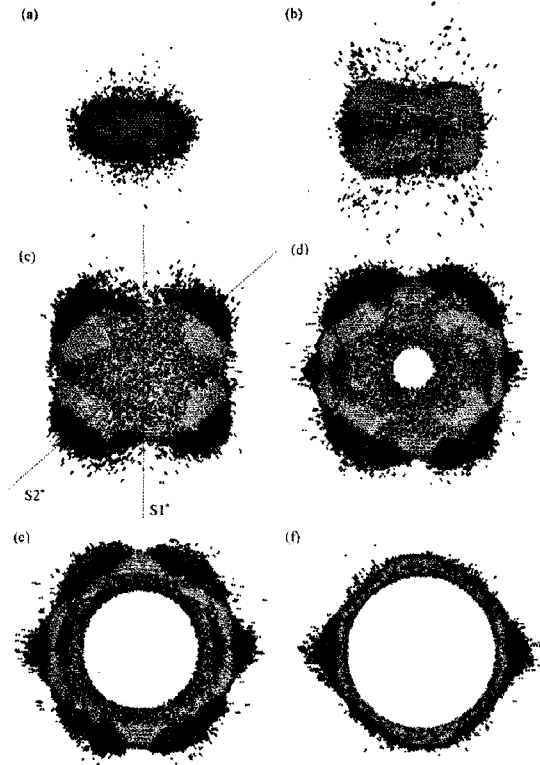


Fig. 6 Cross section view of transformed regions at different depths from the (110) silicon surface.

후 기

본 연구는 과학기술부가 주관하는 21 세기 프론티어연구개발사업의 일환인 나노메카트로닉스기술개발사업단의 연구비 지원 (M102KN010010-05K1401-01020)에 의해 수행되었습니다.

참 고 문 헌

- [1] M. C. Gupta, A. L. Ruoff, 1980, Static compression of silicon in the [100] and in the [111] directions, J. Appl. Phys., Vol. 51, pp. 1072~1075.
- [2] I. Zarudi, J. Zou, L. C. Zhang, 2003, Microstructures of phases in indented silicon: A high resolution characterization, Vol. 82, pp. 874~876.
- [3] J. Tersoff, 1989, Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponents systems, Vol. 39, pp. 5566-5568.
- [4] R. O. Piltz, J. Crain, Structure and properties of silicon XII: A complex tetrahedral bonded phase, Vol. 52, pp. 4072~4085.