S-P07

# Fixed charge problem of Modified-BMH potential during molecular dynamic simulation of $Si/SiO_2$ interface

김세진[1,2], 김상필[1,3], 최정혜[1], 이승철[1], 이광렬[1], 김도연[2], S. Plimpton[4]

[1]한국과학기술연구원 계산과학센터, [2]서울대학교 재료공학부,
[3]한양대학교 신소재공학부, [4]Sandia National Lab.

반도체의 크기가 점차 작아지면서 계면의 특성이 전체 물성에 미치는 영향이 상대적으로 커지고 있다. CMOS에서 사용되는 Si와 $SiO_2$가 이루는 계면의 경우, 이미 오래전부터 분자동역학 모사 (Molecular Dynamic simulation) 를 통해 그 특성을 규명하려는 시도가 있었다. 그러나 Si는 공유 결합을 하는 반면, $SiO_2$는 이온 결합을 하고 있으므로 양쪽 모두에 적합한 potential을 만드는 것이 대단히 중요하다. 본 연구에서는 1988년 Garofalini등[1)]이 발표한 Modified-BMH potential의 특성과 한계를 분석하여, Si과 $SiO_2$ 계면의 원자구조를 molecular dynamics로 해석할 때 발생하는 문제들을 분석하였다. Modified-BMH potential은 비정질 $SiO_2$와 다양한 $SiO_2$ 결정 구조를 계산할 때 유용한 것으로 알려져 있다. 그러나 Si와 O의 charge를 각각 4와 -2로 고정하고 있기에, $Si/SiO_2$ 계면의 경우처럼 charge의 분포가 있는 시스템을 다루는데 한계가 있다. 이러한 한계를 극복하기 위한 몇 가지 approximation을 제안하고 이를 통한 계면의 원자구조를 비교 분석하였다. 본 연구에서는 cut off radius 내의 charge balance를 유지하도록 원자들 간의 charge가 균일하게 분포하는 경우와 charge의 분포가 산소원자로부터의 거리에 exponetially decay한다는 모델을 적용하였을 때 형성되는 계면의 구조를 비교하였다.

1) Garofalini *et al.*, “Empirical three-body potential for vitreous silica.” J. Chem. Phys. 89(9), 1988