

Si 박막해석을 위한 Surface Relaxation Model

A Surface Relaxation Model for Si thin film

정 하 영* · 김 원 배** · 조 맹 효***

Chung, Hayoung · Kim, Wonbae · Cho, Maenghyo

요 약

표면의 물성은 표면효과를 고려한 나노 스케일의 구조물의 기계적 거동 해석에 있어서 필수적인 요소이다. 이러한 해석을 위한 방법론 중 surface relaxation model을 이용하여 박막의 표면 물성을 계산하는 방법은 이미 FCC 모델에서는 검증된 바 있으나, 동일한 방법론을 diamond 구조를 가지는 실리콘에 일괄적으로 적용할 수는 없다. 이는 FCC 구조를 갖는 금속과는 달리 실리콘이 공유결합 물질이라는 점과, 박막 표면에서 다양한 surface reconstruction이 가능하다는 점, 그리고 실리콘의 diamond lattice가 FCC lattice에 비해 추가적인 자유도가 존재한다는 점으로부터 기인한다. 본 논문에서는 이와 같은 조건을 고려하여 Si 박막의 표면 물성을 해석하기 위한 surface relaxation 모델을 제시한다.

keywords : Surface relaxation model, Silicon, Surface reconstruction, surface stress, surface energy, surface modulus

1. 서 론

표면과 부피의 비가 무시할 수 없을 정도로 크기 때문에 발생하는 표면효과에 대한 연구는 일찍이 많이 연구되어진 바 있으나, 나노 공학의 발전과 함께 다양한 나노스케일의 구조물이 등장함에 따라 다시 재조명되고 있다. 특히 나노 박막과 같이 표면효과가 두드러지는 경우, 표면효과에 대한 분석은 기계적 거동을 해석하는 데에 있어 중요한 단계를 차지한다. 그러나 이러한 표면물성을 구하는 명확한 해법은 아직 나와 있지 않으며, 이에 따라 고전적인 분자동역학이나, 제일원리 계산과 같은 전산모사 방식이 대안으로 제시되어 왔다. 그러나 이러한 방법은 계산이 복잡하고 계산 자원을 많이 소모할 뿐만 아니라, 계산하고자 하는 구조물의 스케일이 변할 때마다 매번 시뮬레이션을 해주어야 하는 불편함이 존재한다.

이러한 불편함을 해결하기 위해 매크로 스케일의 연속체역학으로부터 표면의 물성을 계산하는 방법이 다각도로 제시되었다. Dingreville 과 Qu(2005)는 무한한 깊이를 가진 평판을 가정하고 평판 내 원자들이 같은 스트레인 장 내에 있다고 가정함으로써 FCC구조를 가진 금속들을 해석하기 위한 Semi-analytic 방법론을 제시하였다. 이 방법론은 평형상태를 기준점으로 한 스트레인을 이용해 원자간 에너지를 기술하는 EAM 포텐셜 식을 먹급수 전개함으로써 원자의 위치를 통해 표면 에너지, 스트레스, 강성 행렬과 같은 표면물성을

* 학생회원 · 서울대학교 기계항공공학부 석사과정 chunghy@snu.ac.kr

** 정회원 · 서울대학교 기계항공공학부 박사과정 wbkim@snu.ac.kr

*** 정회원 · 서울대학교 기계항공공학부 교수 mhcho@snu.ac.kr

구하는 방식이다. 그러나 이 방법론은 분자동역학을 이용한 전산모사와 마찬가지로 두께가 달라질 때마다 원자의 위치를 계산해내어야 하는 불편함이 존재한다. 이러한 불편함을 해결하기 위해 Kim 과 Cho(2010)는 FCC구조의 surface relaxation model을 제시하였는데, 이는 박막의 relaxation을 두께의 함수인 면내 방향(in-plane relaxation)과 두께의 영향을 받지 않는 두께 방향의 relaxation(surface relaxation)으로 구분하고, 물질의 특성에 의해서만 영향을 받는 surface relaxation model을 통해 해석적인 표면물성을 계산하는 방식이다.

그러나, FCC 구조를 갖는 금속들과는 달리, 14족의 반도체 소자들은 공유결합을 하기 때문에 포텐셜 에너지에 bond order의 영향이 개입되었을 뿐만 아니라, lattice당 sublattice가 두 개인 diamond symmetry를 갖기 때문에 FCC에서의 방법론을 단순히 적용하기에는 문제가 있다. 또한 표면의 Dangling bonding의 존재로 인해 다양한 surface reconstruction model이 존재하는데, 이 또한 surface property에 영향을 미치는 익히 알려져 있다. 본 논문에서는 위의 사항들이 고려된 실리콘의 surface relaxation model을 제시하고, 두께에 의존적인 박막의 물성을 제시하여 결과를 확인하였다.

2. 실리콘 박막의 표면특성

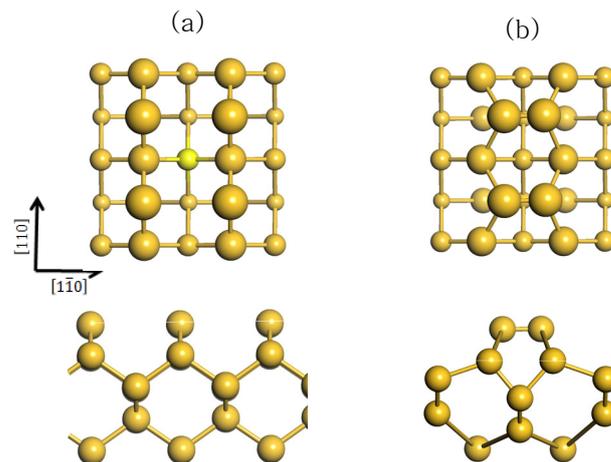


그림 1. 실리콘의 surface reconstruction model

반도체로 주로 이용되는 (100) 표면을 갖는 실리콘 박막은 최외각 전자가 4개인 실리콘의 특성에 의해, 순수한 실리콘의 bulk로부터 떼어냈을 때 그림 1(a)과 같이 원자 하나당 2개씩의 불안정한 dangling bonding을 갖는다. 이는 물론 이상적인 상태로, 실제로는 에칭시의 수소나 산소등으로 표면이 처리되거나 dangling bonding간에 결합이 일어나는 surface reconstruction이 일어난 실리콘의 박막을 이용하게 된다. 본 모델에서는 다른 원자들과 결합이 고려되지 않은 순수한 실리콘의 surface reconstruction만을 상정한다. surface reconstruction을 통해 dangling bonding은 다양한 방식으로 결합하는데, 그림 1(b)에 dimer가 순차적으로 형성된 p(2x1)를 도시하였다. 이 밖에도 dimer가 형성된 형태에 따라 다양한 surface reconstruction이 존재하나, 본 논문에서 사용된 Tersoff potential에 의하면 p(2x1)이 가장 낮은 에너지를 가지는 것이 알려져 있으므로 본 논문에서는 이를 (1x1)와 대비되는 낮은 에너지 상태라 상정하고 분석하였다. 이러한 reconstruction은 원자들간의 위치를 재배열하기에 표면의 물성에 영향을 미치는 것은 자명하므로, surface relaxation

model을 구성하는데 있어 이는 필히 고려되어야 한다.

3. Surface relaxation model for Si(100)

surface relaxation model을 구성하기 위해 필요한 평형 상태의 원자 위치는 Tersoff potential을 이용한 분자동역학 계산을 이용하여 계산되었다. 두께가 무한한 평판을 모사하기 위해 NVT 앙상블 하에서 x,y평면에 주기경계조건이 부과되었으며 온도의 영향을 줄이기 위해 0.1K에서 전산모사를 수행하였다. 전산모사를 바탕으로 구성된 surface relaxation model을 표 1에 제시하였다. 앞서 언급한 바와 같이 (1x1) 평면과 (2x1) 평면은 상이한 surface relaxation 거동을 보임을 알 수 있다.

(a) ideal (1x1) case

# Layer	Surface relaxation [Å]	
	z	y
1	0.0985	0
2	-0.0078	0
3	0.0027	0
4	0.0007	0
5	0	0

(b) (2x1) case

# Layer	Surface relaxation [Å]	
	z	y
1	0.196	0.738
2	-0.0174	0.658
3	-0.1080 /0.1080	0
4	-0.0069 /0.0069	0
5	0	-0.0031

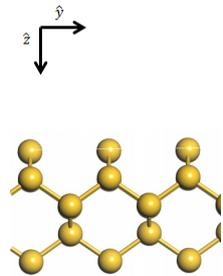


표 1 Surface relaxation model for Si(100) reconstruction.

4. 표면 물성 계산방법 및 결과

Lattice 내의 모든 원자가 외부의 변형에 의해 균일하게 변형되는 FCC 구조와는 달리, 한 lattice 내에 두 개의 Bravais sublattice가 겹쳐있는 형태의 diamond 구조는 추가적인 내부변위(internal displacement)가 존재한다. 이로 인해 표면물성을 계산하는데 있어 Lagrangian strain을 이용한 멱급수전개만으로 표현되는 Cauchy-Born rule을 적용할 수는 없게 된다. 이에 따라 원자간 거리는 deformation gradient \underline{F} 와 내부 변위 ξ 을 이용하여 다음과 같이 표현된다.

$$r^{nm} = \overline{F}r_o^{nm} + \xi$$

위와 같이 정의된 원자간 변위를 이용해 Tersoff 포텐셜을 멱급수전개함으로써 표면 물성을 얻을 수 있으며, 이를 이용하여 박막의 두께에 따른 면내변위를 계산할 수 있다. 이를 그림 3에 나타내었으며, 동일한 포텐셜을 이용한 분자동역학 결과와 비교하였다. 이를 통해 본 surface relaxation model을 이용하여 두께로부터 독립적으로 계산된 표면물성은 실제 거동을 잘 모사함을 알 수 있다.

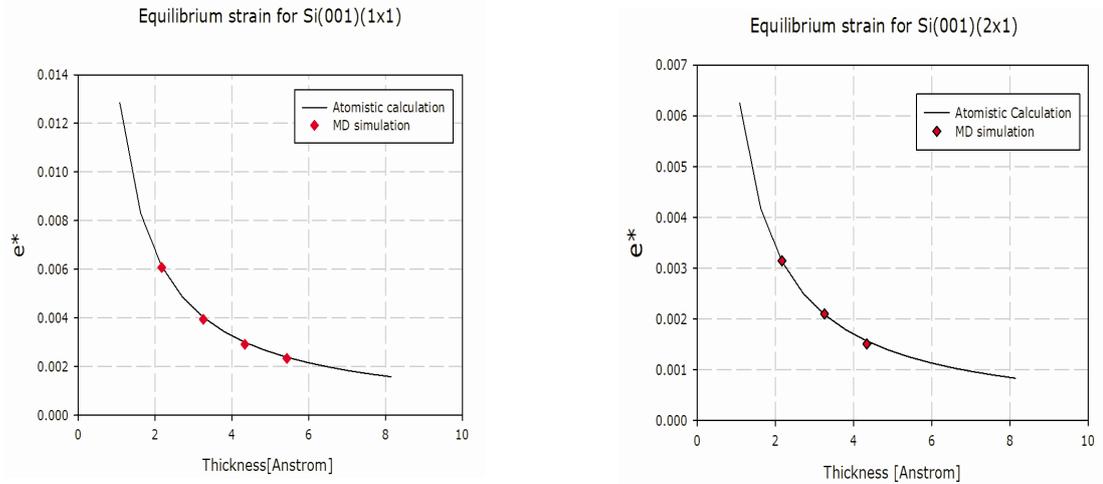


그림 4 분자동역학과 본 논문에서 제시한 surface relaxation model을 이용하여 구한 면내변위간의 비교

감사의 글

본 연구는 한국과학재단이 주관하는 세계수준의 연구중심대학(World Class University, WCU) 육성사업(R31-2009-000-10083-0)의 지원을 받아 수행되었습니다.

참고문헌

- Balamane, H., Halicioglu, T. and Tiller W. A.** (1992), Comparative study of silicon empirical interatomic potentials, *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 46, pp. 2250-2279.
- Chadi, D. J.** (1980), Reexamination of the Si(100) surface reconstruction, *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 43, pp. 43-47.
- Dabrowski, J. and Mussig H-. J.** (2000), *Silicon surface and formation of interfaces*, World Scientific, New Jersey.
- Dingreville, R. and Qu, J.** (2007), A Semi-analytical method to compute surface elastic properties”, *Acta Materialia.*, Vol. 55, pp. 141-147.
- Izumi, S., Hara, S, Kumagai, T. and Sakai, S.** (2004), A method for calculating surface stress and surface elastic constants by molecular dynamics: application to the surface of crystal and amorphous silicon, *Thin solid films*, Vol. 467, pp. 253-260.
- Kim, W. and Cho, M.** (2010), Surface effect on the self-equilibrium state and size-dependant elasticity of FCC thin films, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, Vol. 18 No. 8, 085006.
- Martin, J. W.** (1975), Many-body forces in solids and the Brugger elastic constants.-II. Inner elastic constants , *J. Phys. C: Solid State Phys*, Vol. 8, pp. 2858-2869.
- Park, H. S.** (2008), A Surface Cauchy-Born model for silicon nanostructures, *Comput. Methods. Appl. Mech. Engrg.*, Vol. 197, pp. 3249-3260.
- Tang, Z. Zhao, H. Li, G. and Aluru, N. R** (2006), Finite-temperature quasicontinuum method for multiscale analysis of silicon nanostructures, *Phys. Rev. B*, Vol. 74. 064110.