

양자 이종구조의 역학적 해석

- 전 석 기 | 한국과학기술원 기계공학과, 초빙교수
e-mail : sjun@imhp.kaist.ac.kr
- 임 세 영 | 한국과학기술원 기계공학과, 교수
e-mail : sim@mail.kaist.ac.kr

특히 양자점에 대하여 간략히 살펴보기로 한다.

에너지 띠 간격이 서로 다른 반도체 재료를 구조적으로 접합 또는 배열하여 특정한 방향으로의 전하 운동을 구속시키는 양자적 가둠(quantum confinement) 효과를 구현하는 나노스케일 구조체를 양자 이종구조(quantum heterostructure)라 부른다. 이와 같이 구조적으로 실현시킨 양자 효과를 이용하면 벌크 상태의 반도체와는 전혀 다른 전기전도 및 광학적 특성을 얻을 수 있기 때문에 초고속 광전 소자 등을 비롯한 각종 차세대 소자에 널리 이용될 것으로 기대를 모으고 있다. 이에 학계뿐만 아니라 산업계에서도 양자 이종구조에 관한 폭 넓은 연구가 진행되고 있다.

이와 같은 저차원 양자구조에 관한 연구는 1970년대에 서로 다른 두 개의 반도체를 이종 접합시키는 양자우물(quantum well) 구조가 처음 실현됨으로써 시작되었는데 현재 양자우물 구조는 레이저 다이오드 등으로 개발되어 레이저 프린터나 CD ROM

등에 이용되고 있다. 1980년대에는 전하의 자유도를 일차원으로 제한하는 양자선(quantum wire)과, 영차원으로 구속하는 양자점(quantum dot)이 잇달아 실현되어 다시 한 번 반도체 물리학의 새로운 도약의 가능성을 제시하게 하였다.(그림 1, 2)

양자우물 구조와는 또 다르게 양자선 구조에서는 전자가 일차원 계에서 존재하기 때문에 전자들끼리의 아주 미약한 상호작용도 전체 계의 특성을 완전히 변화시킨다. 즉, 전자들 간의 상관성

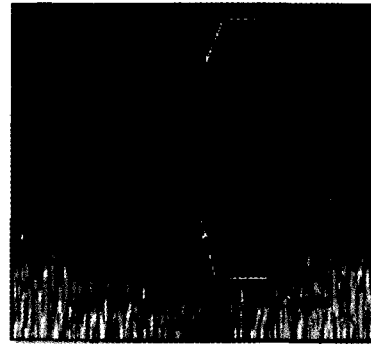


그림 1 X선 회절을 이용한 양자선의 변형을 측정 [Shen and Kycia, 1996]

이 매우 강해지고 그에 따른 고유한 전기전도 및 광학적 특성을 보

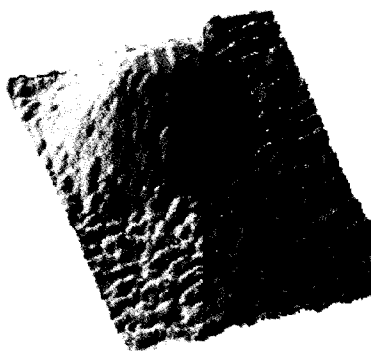
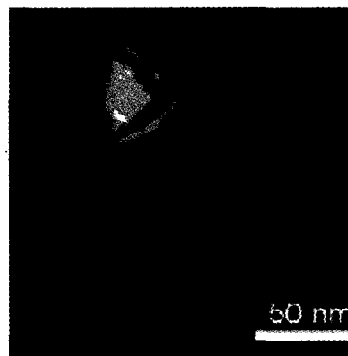


그림 2 피라미드 형태의 양자점 [http://www.research.ibm.com/], [Leifeld et al., 1999]



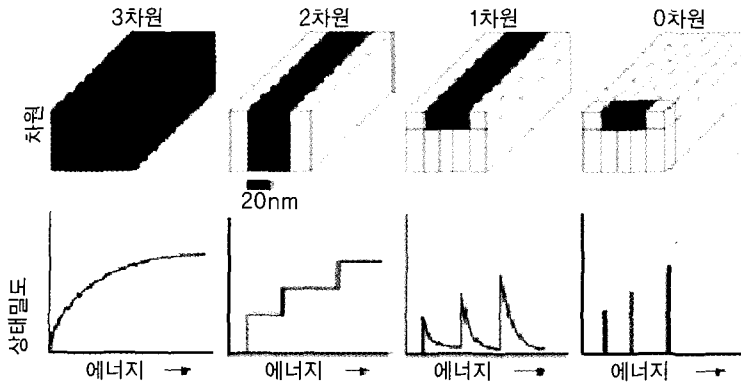


그림 3 양자 이종구조의 에너지 밴드 [http://www.scientificamerican.com/]

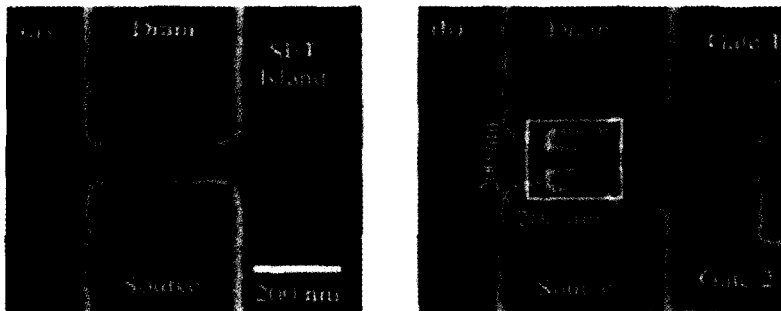


그림 4 단일 전자 트랜지스터의 예

여준다. 양자점 구조는 드디어 전하를 완전히 구속하여 영차원의 자유도를 갖게 하므로 마치 하나의 원자에 전자가 구속되어 있는 듯한 에너지 띠 구조를 보여준다. 일종의 '인공 원자'로 인식될 수 있는 것이다.(그림 3)

계단 형태나 불연속 형태의 에너지 띠 구조로 인해, 양자 이종구조에서는 한 전하의 존재가 다른 전하의 진입을 막는 쿨롱의 장벽효과(Coulombic Blockade)가 발생하게 된다. 이 현상을 이용하면 전하 단위의 제어 가능하기 때문에 단일 전자 소자(SED : Single Electron Device)에 대한 연구도 활발히 진행되고

있다(그림 4). 그밖에도 양자점 레이저나 데이터 저장 매체 등 수많은 분야에 응용이 가능할 것으로 기대를 모으고 있어서 양자점을 중심으로 한 양자 이종구조는 탄소 나노튜브와 더불어 나노 시대를 여는 대표적 첨단 나노구조 재료(nanostructured materials)로 여겨지고 있다. 이 글에서는 고체역학의 관점에서 이런 양자 이종구조, 특히 양자점에 대하여 간략히 살펴보기로 한다.

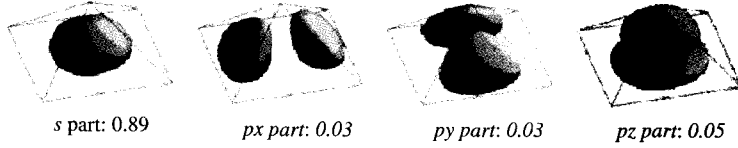
양자점의 응력해석

나노구조 재료의 전형적인 특징 중에 하나는 체적에 대한 표면

(혹은 계면)의 비(surface-to-volume ratio)가 매우 크다는 것을 들 수 있다. 즉, 벌크 재료와는 달리 표면에서의 원자 구조나 확산 등이 재료의 특성을 결정짓는 매우 중요한 인자가 된다. 양자선의 선폭이나 양자점의 높이 등, 양자 이종구조의 특성길이(characteristic length)도 대략 수 나노미터에서 수십 나노미터가 보통이다. 따라서 이종 재료간의 서로 다른 격자 상수(lattice constant)로 인해 계면을 중심으로 생기게 되는 격자 불일치(lattice mismatch)에 의한 응력이나 변형이 이들 재료의 전기 전도, 광학적 특성을 결정짓는 중요한 역할을 한다. 예를 들면, 양자점의 변형을 먼저 계산하여 그 결과를 유효포텐셜의 형태로 계의 $k \cdot p$ 해밀토니안에 포함시키면 양자점의 에너지 띠 구조와 파동함수를 계산할 수 있다. 이런 계산 결과의 예로서, 그림 5는 전자와 양공(hole)의 확률밀도가 변형된(strained) 피라미드 양자점을 중심으로 국소적으로 분포되어 있음을 보여준다. 따라서 양자점의 제반 물성에 관한 해석은 본질적으로 복합 물리적 성격(multi-physics nature)을 갖고 있으며, 그 중 중요한 한 부분을 역학적 해석이 차지한다고 볼 수 있다.

양자점의 응력 및 변형 해석은 원자론적(atomistic) 접근방식과 연속체적 접근방식의 두 가지로 나눌 수 있다. 원자론적 접근방법 중 대표적인 것은 분자동역학 시뮬레이션인데 그림 6은 166-노드

전자의 기저상태



양공의 기저상태

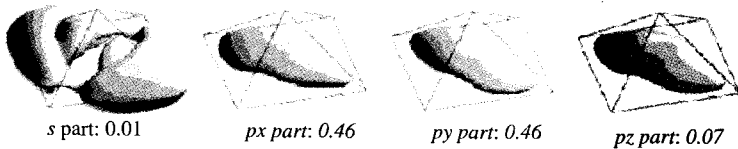


그림 5 변형된 피라미드 양자점 내 전하의 확률밀도 분포 [Stier et al., 1999]

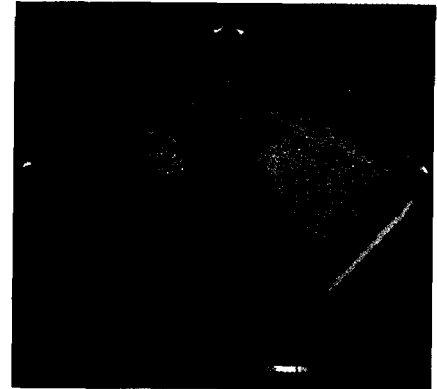


그림 6 분자동역학 시뮬레이션에 의한 나노메사의 응력분포 결과 [Su et al., 2001]

PC 클러스터를 사용, 200만 개 원자를 시뮬레이션하여 얻은 나노메사(nanomesa)와 그 아래 일정 깊이까지의 기판(substrate)에 대한 응력분포 결과이다. 분자동역학 시뮬레이션은 비교적 상세하게 모델을 다룰 수 있으나 대용량의 계산을 수행하여야 하기 때문에 양자점의 크기가 큰 경우나 여러 개의 양자점들이 정렬해 있는 경우처럼 계의 사이즈가 증가하면 현재로서는 적용이 어려운 실정이다.

따라서 양자점 응력해석의 한 방법으로 연속체적 접근이 비교적 많이 시도되고 있다. 연속체적 관점에서의 해석은 다시 이론적 방법과 수치적 해석으로 나뉠 수 있다. 이론적 접근은 탄성론에 기초한 방법들을 사용하는데 아직은 대칭성이 높은 단순한 형태의 모델에 대한 결과를 보여주고 있다. 그러므로 보다 복잡하고 실제적인 양자점의 해석은 유한요소법과 같은 수치적 방법에 많이 의존하고 있다. 그림 7은 양자점뿐만 아니라 기판, wetting layer, capping layer 등의 주변 재료를

모두 고려한 3차원 유한요소 응력 해석의 예를 보여준다. 또 그림 8은 여러 개의 양자점들이 규칙적으로 배열되어 있는 경우의 응력 분포를 역시 유한요소법으로 계산한 결과이다. 실제적인 응용을 위해서도 이와 같이 양자점들을 일정하게 배열시키는 기술은 매우 중요하다. 따라서 복잡한 계에서 양자점들간의 상관관계(correlation)를 보다 정확히 해석할 수 있는 계산 방법에 대한 필요성이 증대되고 있고 이를 위한 하나의 방편으로 원자론적 방식과 연속체적 방법을 적절히 결합하는 멀티스케일 해석이 주요 연구 과제로 떠오르고 있다.

이상과 같이 양자점과 관련한 응력 및 변형 해석은 현재 비교적 단순한 모델에 한정적으로 수행되고 있으므로 앞으로, 조성비율에 따른 응력의 변화, 외부 응력에 의한 영향,

trench 생성, 그리고 기판의 원자들이 양자점 내부로 침투하는 현상 등등 여러가지 요인들을 고려할 수 있고 동시에 보다 복잡하고 확대된 모델로의 적용이 가능한 해석방법이 실현된다면 실제로 나노 공정에서 매우 유용하게 쓰이는 기반기술이 될 수 있을 것으로 기대한다.

양자점의 형성 메커니즘

양자선과 양자점을 형성시키는 기술은 나노구조 연구에 있어서 핵심이 되는 사항으로서 재현 가

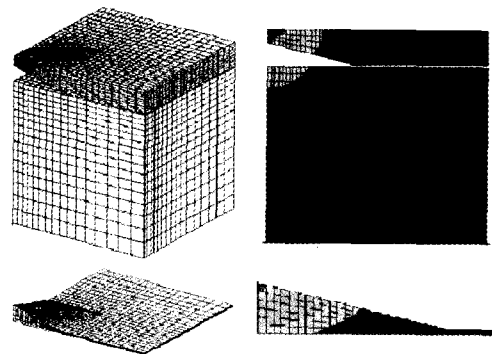


그림 7 피라미드 양자점과 주변 재료의 유한요소 해석 [Liu and S. S. Quek Jerry, 2002]

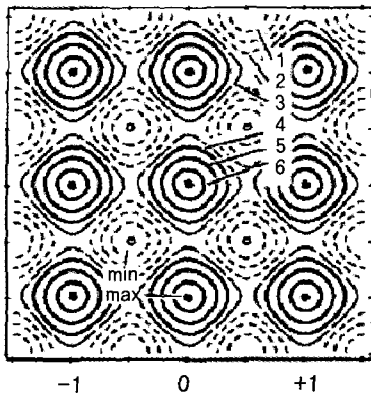


그림 8 규칙적으로 배열된 양자점들의 유한요소 해석 [Romanov et al., 2001]

능한 형성 기술을 개발하기 위해 세계적으로 많은 노력을 기울이고 있는 연구분야다. 형성 기술 중 잘 알려진 것으로는 전자빔 리소그래피를 이용하여 양자점들의 패턴을 형성하는 방법을 들 수 있다. 그러나 생산성의 측면에서 가장 바람직한 방법은 자기조립(self-assembly)에 의한 양자점의 패턴 형성이다. 이는 고가의 장비를 사용하지 않고도 양자점을 대량 생산하기에 적합한 경제적인 방법으로 반도체 나노구조 공정에 적용이 가능할 것으로 기대되기에 현재 집중적인 연구가 이루어지고 있다. 예를 들어 GaAs 기판 위에 InAs 박막을 입히면 격자 불일치에 의한 변형이 발생하고 층이 쌓여갈수록 그에 따른 변형에너지가 축적된다. 그러다가 어느 정도의 두께에 도달하면 더 이상 견디지 못하고 계의 변형에너지를 낮추기 위해 박막의 원자들이 한 곳으로 모이면서 섬을 형성하게 된다. 이런 성장법을 결맞는(coherent) Stranski-Krastanov(SK) 모드라 하는데

(그림 9), 이 때 섬의 크기가 적당히 작으면 양자 가둠현상이 일어나고 또한 격자의 비등방성으로 인해 피라미드 형태의 모양을 갖게 된다.

보다 일반적으로는 결정 표면에서 자기 정렬(self-ordering)에 의한 자기조립과정을 통해서 양자점처럼 규칙적으로 배열된 나노 이종구조를 얻을 수 있다. 이와 같은 나노구조의 자기 정렬은 그 형성과정(process)이 최소 자유에너지에 의해 주어지는 열역학적 평형에 의해 주로 결정된다. 확산(diffusion)이나 방향성 표류(directional drift)와 같은 kinetics도 자기 정렬 과정에 영향을 미치지만 주로 열역학적 평형점에 의해 자기정렬 형상이 결정된다고 볼 수 있다.

평형 형상을 결정하는 자유에너지에는 여러 가지 종류의 기여가 있지만 가장 주요한 기여는 변형에 의한 변형률에너지와 순수한 표면에너지이다. 특히 변형률 에너지는 결정의 격자상수에 비해 훨씬 큰 영역에까지 영향을 미치는 장역장(long range field)의 에너지로서 자기정렬에 의한 규칙적인 배열의 나노구조 형성에 중요한 역할을 한다.

고체의 표면은 원자와 원자의 결합고리의 일부가 끊어짐으로 인해 고체의 내부와는 달리 인장이

나 압축을 받고 있으며, 이 때의 응력을 고유표면응력(intrinsic surface stress)이라 한다. 즉, 외력이 없는 상태에서도 결정의 표면은 고유표면 응력을 받고 있다. 따라서, 이 고유 표면 응력에 의한 일량만큼 변형률에너지가 발생하고 고유 표면응력에 의한 변형률에너지는 단위표면의 생성에 소요되는 순수한 표면에너지와 함께 고체의 표면 또는 표면과 관련된 에너지를 구성한다. 즉, 액체와는 달리 고체의 표면에너지는 순수한 표면에너지와 고유표면응력에 의한 변형률에너지로 구성되어 있다.

결국 자유에너지는 전체 탄성 변형률에너지, 표면에너지, 모서리 에너지로 이루어지며, 이 자유에너지가 최소화되는 형상을 찾아감에 자기조립에 의한 3차원의 규칙적인 이종구조가 성장하게 되어 양자점의 자기조립 제조가 가능하게 된다. 특히 SK성장과 같은 3차원 이종구조가 성장하게

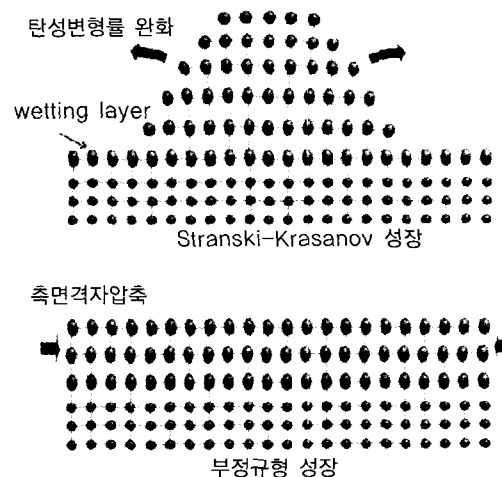


그림 9 결맞는 Stranski-Krastanov(SK) 성장 모드 [Eberl et al., 2001]

되는 주요 요인은 3차원 도메인 형성에 따라 발생하는 탄성 변형률에너지의 이완이 동시에 발생하는 표면에너지와 모서리에너지의 증가를 상쇄하기에 충분하기 때문이다.

앞에서 설명한 바와 같이 InAs/GaAs와 같은 SK성장 모드는 계면에서 전위가 전혀 없는 결맞는 섬구조(coherent island)로 이종구조가 성장한다. 이 경우 표면에너지 증가에 비해 계면에 전위가 생길 경우 발생하는 계면 전위에너지가 훨씬 큰 것으로 알려져 있다. 따라서, 전위가 발생하기보다는 결맞는 섬구조(coherent island)가 에너지 관점에서 유리하다. 실제로 3차원 이종구조 성장에 따른 표면에너지 증가 대비 계면에서 전위발생시 생기는 계면 전위에너지의 비가 이종증착 성장의 모드를 결정한다. 즉, 그림 10과 같이 이 비가 크면 증착 물질의 양이 증가함에 따라 균일한 적층 구조로부터 결

맞는 섬구조가 형성되지만 이 비가 낮으면 결맞는 섬구조로 자라지 못하고 전위를 포함한 계면구조로 자라게 된다.

나아가서 양자점의 크기와 형상 또한 열역학적 평형에 의해 결정되며, 이 때의 주요한 에너지는 역시 탄성 변형률에너지와 표면에너지, 모서리에너지 등이다. 주어진 제어인자(control parameter)에 따라 에너지 최소점에 해당하는 형상과 크기가 존재할 수도 있지만, 경우에 따라서는 최소에너지에 해당하는 양자점 크기가 무한대가 될 수도 있다. 이 때 양자점은 합병을 통해 계속 성장하는 현상(ripening)이 발생한다. 따라서, 초기에 양자점 배열을 얻는다 하더라도 안정적이지 못한 경우가 된다.[Shchukin and Bimberg, 1999]

자기조립 과정에 의한 양자점의 형성 메커니즘을 완전히 이해하기 위해서는 아직도 많은 연구가 필요하다. 먼저, 생성되는 양

자점들의 크기를 가능하면 균일하게 맞추는 기술이 각종 소자로의 응용을 위해서 무엇보다도 중요하다. 또한 이런 양자점들의 모양이 단순히 피라미드 한 가지 형태가 아니고 돔(dome) 모양, 프리즘 모양 등 다양하며, 이런 모양들이 서로 바뀌는 전이(transition)현상도 일어나기 때문에 성장 조건에 따른 형태의 변화도 연구되고 있다[Floro et al., 1999]. 수평적 배열 상태를 조절하여 원하는 나노구조를 얻기 위한 패터닝 기술과 수직방향으로 규칙적으로 쌓아 올리는 기술을 위해서도 양자점의 자기조립 현상에 관한 이해는 필수적이라 하겠다. (그림 11, 12)

현재 양자점의 자기조립 메커니즘에 관한 수치해석은 간단한 모델에 제한적으로 수행되고 있다. 현상 자체가 rare event라는 특성상 분자동역학에 의한 시뮬레이션으로는 막대한 계산 시간을 감당할 수 없기 때문에 원자적 관점에서는 kinetic Monte Carlo 방법이 많이 사용된다. 초기에는 양자점들의 크기 분포에 관한 연구에 주로 이용되다가 최근 들어 패터닝 과정의 시뮬레이션에 적용되기 시작했다. 연속체적 방법으로는 응력에 의한 표면 확산 원리에 기초한 유한요소법을 사용하여, 비교적 단순화시킨 상황에서 양자점의 모양이 변화

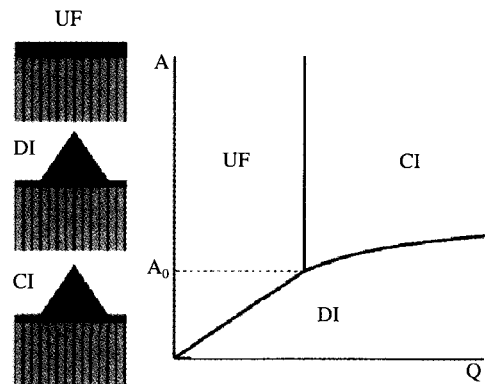


그림 10 양자점 형성의 phase diagram : UF(uniform film), DI(dislocated island), CI(coherent island) Q: amount of deposited material : ratio of the interface dislocation energy to the surface energy increase [Vanderbilt and Wickham, 1991]

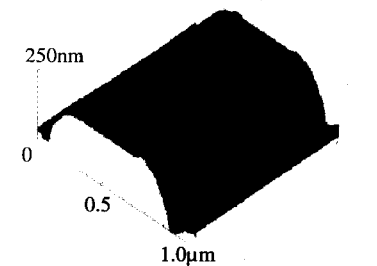


그림 11 Ge island의 수평 배열 [Kamins et al., 1999]

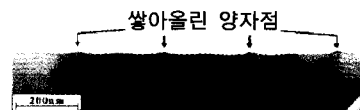


그림 12 양자점의 수직 배열