

실리콘 나노와이어의 나노역학 비교연구

이 병 찬†

(2009년 5월 10일 접수, 2009년 7월 7일 수정, 2009년 7월 7일 심사완료)

Comparative Study of the Nanomechanics of Si Nanowires

Byeongchan Lee

Key Words : Silicon Nanowires(실리콘 나노와이어), Nanomechanics(나노역학), Atomistic Calculations (원자이론계산)

Abstract

Mechanical properties of <001> silicon nanowires are presented. In particular, predictions from the calculations based on different length scales, first principles calculations, atomistic calculations, and continuum nanomechanical theory, are compared for <001> silicon nanowires. There are several elements that determine the mechanics of silicon nanowires, and the complicated balance between these elements is studied. Specifically, the role of the increasing surface effects and reduced dimensionality predicted from theories of different length scales are compared. As a prototype, a Tersoff-based empirical potential has been used to study the mechanical properties of silicon nanowires including the Young's modulus. The results significantly deviates from the first principles predictions as the size of wire is decreased.

기호설명

- $[M]$: N 개의 원자를 가진 시스템의 총 결합에너지
- ν : 푸아송 비(Poisson's ratio)
- B : 체적 탄성률(Bulk modulus) (GPa)
- $E_{<001>}$: <001>방향 영률(Young's modulus) (GPa)
- C_{11} : 탄성계수(GPa)
- C_{12} : 탄성계수(GPa)

1. 서론

실리콘(규소, Si) 소재 나노와이어는 거시적인 구조물과는 전혀 다른 특성, 그리고 반도체 공정을 이용한 반도체기반 전자회로와의 집적 가능성등으로 인해 많은 관심을 받아왔으며, 반도체 소자부터 센서나 공진기 등의 transducers 에 이르기까지

기계적, 전기적 소자로서의 다양한 가능성이 활발히 연구되고 있다.⁽¹⁻⁴⁾

그중에서도 기계적인 성질의 경우 미세한 크기와 그에 따른 지배적인 표면효과때문에⁽⁵⁾ 실험적인 접근이 용이하지 않아, 다양한 이론적 접근이 시도되었다. 하지만 이론에 따라 상반된 결과도 출되는 등, 정확한 이론과 검증의 부재가 기계 소자로서의 실리콘 나노와이어의 응용을 가로막는 원인 중 하나로 작용하였다. <001> 방향 실리콘 나노 와이어의 영률(Young's modulus)을 살펴보면, Stillinger-Weber 의 경험포텐셜을 바탕으로한 연속체이론 연구에서는 와이어의 두께가 줄어들에 따른 영률의 감소를 예측하였으나,⁽⁶⁾ 결합차수(bond order)를 바탕으로한 연구에서는 오히려 영률의 증가를 예측하였다.⁽⁷⁾ 최근에 이르러 기계적 성질이 크기에 의존하여 변하는 현상이 제일원리 기반의 이론으로 설명되었고, 지금까지의 혼란을 종식시키는 계기가 되었다.^(8,9)

나노와이어의 응용을 위해서 필요한 다양한 실험은 실험 자체도 어려울 뿐더러, 비용 절감과 실험결과의 분석이라는 측면에서 볼 때 이론적인 예

[이 논문은 2009년도 CAE 및 응용역학부문 춘계학술대회 (2009. 5. 14.-15., 한국관광공사 T2 아카데미) 발표논문임]

† 회원, 경희대학교 기계공학과
E-mail : airbc@khu.ac.kr
TEL : (031)201-2350 FAX : (031)202-8106

측이 선행 또는 병행되는 것이 최선이다. 하지만 양자역학기반의 전산모사는 계산의 비용으로 인하여 현실적인 크기의 구조에 적용하기는 힘들기 때문에, 밝혀진 실리콘 나노와이어의 크기 의존 역학이 본격적인 응용으로 이어지진 못하고 있는 실정이다. 따라서, 제일원리 결과와 대등한 정확성을 가지며, 동시에 비용의 측면에서 훨씬 효율성이 높은 전산모사/모델링 방법이 요구되고 있다.

이 논문에서는 경험포텐셜을 이용한 예측과 제일원리계산결과의 비교 연구를 통하여 기존 경험포텐셜의 정확성과 가능성을 살펴보고, 앞으로의 개선 및 응용가능성을 살펴보고자 한다. 그중에서 Tersoff 포텐셜과^(10,11) 이를 상속하는 포텐셜을⁽¹²⁾ 이용하여 수소로 표면을 덮은 나노와이어의 기계적 성질을 계산하고, 이를 통하여 경험포텐셜의 한계를 살펴보았다.

2. 이론 및 계산방법

2.1 Tersoff 포텐셜

Tersoff 포텐셜은 다양한 형태로 상속 또는 확장되어 왔으나 그 기본 골격에는 변화가 없다. N 개의 원자를 가지고 있는 시스템의 총 결합에너지(binding energy)는

$$V[N] = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N V_{ij} \quad (1)$$

이며 여기서 V_{ij} 는 i 와 j 의 두 원자간의 결합에너지이다. 두 원자간의 결합에너지의 일반적인 형태는

$$V_{ij} = f_c(r_{ij}) [F_1(n)f_R(r_{ij}) + F_2(n)b_{ij}f_A(r_{ij})] \quad (2)$$

으로, f_c 는 cutoff 함수, F_1 과 F_2 는 한 원자에 체결된 결합수(coordination number) n 의 함수로, 특정 원자 주위의 국소 전자구조에 따른 원자간 결합에너지의 변화를 나타낸다. b_{ij} 는 i 와 j 의 두 원자간의 결합차수이다. F_1 과 F_2 는 비교적 결합특성이 비슷한 Si, Ge, C 등 공유결합 물질에겐 영향이 적고, 결합차수 b_{ij} 와도 겹치는 부분이 있다. 이 두 함수는 실제 Tersoff 포텐셜의 원형에는 없는 항으로, C-H 또는 Si-H 등의 결합력을 보다 세밀하게 모델링하기 위해 확장된 포텐셜에 나타나기 시작하였다. f_R 과 f_A 는 각각 반발력과 인력에 의한 결합에너지 성분으로

$$f_R(r_{ij}) = A \exp(-\lambda_1 r_{ij}) \quad (3)$$

$$f_A(r_{ij}) = B_0 \exp(-\lambda_2 r_{ij}) \quad (4)$$

의 모양을 가지며, 두 성분 모두 i 와 j 의 두 원자간의 길이 r_{ij} 의 함수로 정의된다. 원자간의 평형 결합 에너지(equilibrium binding energy)는 이 두 성분이 균형을 이루는 상태에서 구해진다. 여기서 A , B_0 는 각각 반발력과 인력의 최대값을 나타내는 상수로, fitting 에 의해 결정이 되며, λ_1 과 λ_2 역시 fitting 에 의해 결정되는 상수로 두 힘의 작용범위를 결정하는 상수이다.

2.2 확장된 Tersoff 포텐셜

실험에서 만들어지는 실리콘 나노와이어의 표면 원자들은 반응성이 매우 높기 때문에, 이물질이나 산화막이 쉽게 생성된다. 이를 제거하기 위해 HF 로 씻어내면 자연스럽게 수소 표면층이 생기게 되고, 이 상태의 나노와이어를 전산모사를 하기 위해서는 실리콘-수소 원자간 포텐셜(interatomic potential)이 필요하다. 확장된 Tersoff 포텐셜은⁽¹²⁾ 원래의 Tersoff 포텐셜이 가지고 있는 공유결합 물질의 포텐셜을 계승하면서, 세부적인 함수 꼴을 수정하고 식 (2)에 있는 F_1 과 F_2 를 활용하여 실리콘-수소 원자간 포텐셜을 fitting 하였다.

먼저 원자 i 와 j 간의 결합차수는

$$b_{ij} = (1 + \zeta_{ij}^\eta)^{-\delta} \quad (5)$$

이고, 여기에 필요한 결합각에 의존하는 일종의 유효결합수(effective coordination number) 함수는

$$\zeta_{ij} = \sum_{k \neq i, j} f_c(r_{ik}) [c + d \{H(n) - \cos \theta_{jik}\}^2] \times \exp[\alpha \{(r_{ij} - R_{ij}^{(e)}) - (r_{ik} - R_{ik}^{(e)})\}^\beta] \quad (6)$$

로 표현된다. H 는 결합수의 함수이고 ζ_{ij} 는 i 와 j 의 두 원자간의 국소구조-결합길이, 결합각 등을 반영한다. 여기서 r_{ij} 와 $R_{ij}^{(e)}$ 는 각 i 와 j 의 두 원자간의 길이와, 평형상태의 길이를 나타내며, 식 (5)와 (6)에 나타난 α , β , δ , η , c , d 는 모두 fitting 에 의해 결정되는 상수로 원소에 따라 다르게 나타난다. 식 (6) 역시 cutoff 함수에 의해 일정범위 밖의 원자간의 상호작용은 사라지게 된다. 식 (2)와 식 (6)에 공통으로 사용되는 cutoff 함수는 이웃하는 두 원자 사이에 결합력이 존재하는지를 수식으로 나타내는 함수로,

$$f_c(r_{ij}) = \begin{cases} 1, & r_{ij} < R-D \\ \frac{1}{2} - \frac{9}{16} \sin \pi \left(\frac{r_{ij}-R}{2D} \right) - \frac{1}{16} \sin 3\pi \left(\frac{r_{ij}-R}{2D} \right), & R-D < r_{ij} < R+D \\ 0, & r_{ij} > R+D \end{cases} \quad (7)$$

로 정의된다. R 와 D 는 원자간의 영향력이 미치는 범위를 정하는 상수로, 원자간 거리 r_{ij} 가 $(R-D)$ 이내일 경우 영향력은 최대이고, 거리가 $(R+D)$ 를 벗어날 경우, 원자간의 영향력은 무시된다. 이 함수는 에너지식뿐만 아니라 그 미분식 또한 연속성을 유지하면서 부드럽게 줄여주기 때문에, 원자에 작용하는 힘을 구하는데도 문제없이 사용이 가능하다. 또한 식 (6)의 결합각은 이웃한 두 결합으로 표현이 가능하므로

$$\cos \theta_{jik} = \frac{\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{r}_{ik}}{r_{ij} r_{ik}} \quad (8)$$

결국 전체 결합에너지는 상호작용하는 두 원자간의 거리로 미분이 가능한 함수가 된다.

확장된 Tersoff 포텐셜은 실리콘 표면 구조를 연구하는데 사용되었으며,⁽¹²⁾ 이후 자세한 분석과 함께 표면에서의 수소원자의 이동 경로 및 표면 결합 구조등의 kinetics 를 연구하는데 적용되었다.⁽¹³⁾

3. 나노와이어 구조

3.1 나노와이어의 표면 구조

수소가 덮인 실리콘 나노와이어의 표면은 Fig. 1의 (a)나 (b), 또는 (a)와 (b)가 혼재된 구조가 안정한 것으로 알려져 있다. 또한 온도에 따라 안정한 구조의 모양이 변하며, 상온에서는 (b)가 안정한 구조이다. 하지만 (b)의 구조는 수소간의 강한 반발력으로 인해, (c)의 형태로 변하며 에너지가 낮아지게 된다.⁽⁸⁾

3.2 나노와이어의 단면 구조

Fig. 1의 표면 구조를 이용하여 와이어 표면의 dangling bonds 를 모두 수소원자로 passivate 시켜, 표면의 실리콘 원자를 안정화 시켰다. 와이어 단면은 Wulff construction 에 따라 표면에너지가 최소화 되는 모양을 기준으로 하였다. <001> 방향의 와이어가 가질 수 있는 안정한 표면이 (100) 표면과 (110) 표면이기 때문에, 이 두 가지의 표면이 대칭으로 둘러싼 와이어 모양을 선정하였다. 제일

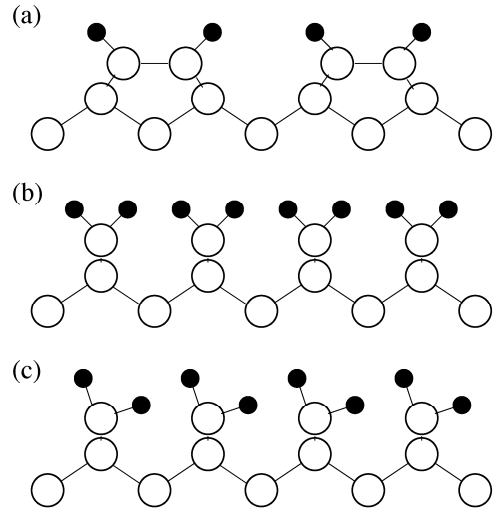


Fig. 1 Hydrogen passivation on Si(100) surface. (a) 2×1 monohydride, (b) 1×1 symmetric dihydride, and (c) 1×1 canted dihydride

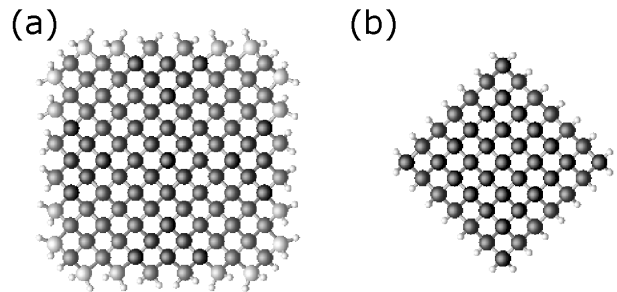


Fig. 2 Cross sections of fully related hydrogen-passivated nanowires: (a) Type I wire with the width of 2.04 nm, and (b) Type II wire with the width of 1.39 nm are shown

원리계산으로 얻어진 표면에너지를 이용하여 연속체 Wulff shape 의 모양을 결정할 수 있으나, 연속체 기반의 Wulff shape 는 실리콘 격자구조와 정확히 일치하지 않기 때문에 가장 가까운 모양을 기준으로 삼았다. 이 때의 (100) 표면과 (110) 표면의 넓이비는 3.5:1 이다.^(8,9)

또한 표면의 수소원자들의 영향을 살펴보기 위해 몇 가지 다른 단면모양을 조사하였다. 이미 다른 원자와 결합된 수소 원자들은 서로 강한 반발력을 보이는데, 이 수소간 반발력은 (100) 표면에서 크고 (110) 표면에서는 거의 없으므로, 수소간 반발력을 최소화한 구조 - (110) 표면으로만 둘러싸인 와이어 - 를 이용하여 비교연구하였다. Fig. 2 에서 볼 수 있는 것과 같이, (100) 표면과 (110) 표면을 모두 가진 와이어를 type I, (110) 표면만 가지고 있는 와이어를 type II 로 분류하였다.

Table 1 Bulk elastic properties calculated with empirical potentials. The bulk modulus (B), the Poisson's ratio (ν), and the Young's modulus in the $\langle 001 \rangle$ direction ($E_{\langle 001 \rangle}$) have been derived from the elastic moduli C_{11} and C_{12} , and compared with the results from density functional theory (DFT) and experiment

Mechanical properties	Empirical (This work)	DFT (Ref. 9)	Experiment (Ref. 14, 15)
ν	0.35	0.27	0.28
B (GPa)	98.1	89.0	99.2
C_{11} (GPa)	142.6	154.6	167.7
C_{12} (GPa)	75.8	58.1	65.0
C_{11}/C_{12} ratio	1.89	2.66	2.58
$E_{\langle 001 \rangle}$ (GPa)	89.9	122.8	131.4

4. 결과 및 토의

4.1 벌크(bulk) 상태의 기계적 성질

주요 벌크 물성을 계산하여 표 1에 정리하였으며, density functional theory (DFT)를 이용한 제일원리계산 결과 및 실험값과 비교해 보았다. 여기서

$$\nu = \frac{C_{11}}{C_{11} + C_{12}} \quad (9)$$

$$B = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3} \quad (10)$$

$$E_{\langle 001 \rangle} = \frac{(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12})}{C_{11} + C_{12}} \quad (11)$$

는 모두 C_{11} 과 C_{12} 로 유도해낼 수 있는 값이므로 이 두 탄성계수를 이용하여 계산하였다. 또는 다른 두 개의 값을 계산하여 나머지를 유도해 낼 수 있다. Tersoff 포텐셜로 예측한 값을 보면, 대부분 실험값이나 DFT 값과 큰 차이가 있지만 체적탄성률(bulk modulus)은 실험값과 잘 들어맞는다. 이는 실제로 잘 들어맞는다고 보다는 우연히 그렇게 된 것으로 보인다. 식 (9)-(11)에서 볼 수 있듯이, 표 1에 열거된 값들은 절대값도 중요하지만 C_{11} 과 C_{12} 의 비율에 의해 결정됨을 알 수 있다. DFT의 경우, 실험값과는 약간의 차이가 있으나 경향이 일정하고 전체적으로 일관된 결과가 나오는 이유도 C_{11}/C_{12} 비율이 실험값과의 오차가 3% 정도이기 때문이다. 이에 반해 Tersoff 포텐셜의 C_{11}/C_{12} 예측 결과는 30%에 가까운 오차를 보인다. 그

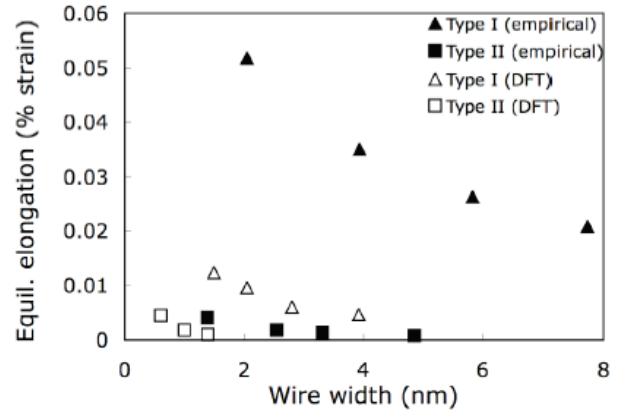


Fig. 3 Silicon nanowire equilibrium elongation calculated with Tersoff-based empirical potentials as a function of wire width. DFT results from Ref. 7 are compared

결과 $\langle 001 \rangle$ 방향 영률도 30% 이상의 오차를 보인다.

현재 사용되는 Tersoff 포텐셜 및 거기에서 파생된 경험포텐셜은 모두 초기 Tersoff 포텐셜에서 제시된 fitting 과 parameters 를 상속하고 있다. 처음의 fitting 에서 기계적 성질이 reference 로 사용되지 않았고, 이 문제가 해소되지 않은 채 포텐셜이 확장되다보니 원래의 Tersoff 포텐셜의 오차 또한 그대로 상속하였다.

4.2 평형 인장

이 연구에 사용된 포텐셜은 Si-Si 결합특성을 가진 원래의 Tersoff 포텐셜과, 이를 확장/변형하여 hydrocarbon 이나 silane 에 적용한 변형 Tersoff 포텐셜을 조합한 일종의 조합형 포텐셜이다.⁽¹²⁾ 이렇게 서로 다른 데이터베이스를 조합하여 만들어진 포텐셜을 실리콘 $\langle 001 \rangle$ 나노와이어에 적용하여 평형 인장(equilibrium elongation) 을 살펴보았다. 평형 인장이란, 나노미터 규모의 작은 구조물에서 극대화된 표면적 대 부피비로 인해 표면응력이 크게 작용하여 와이어의 격자구조가 벌크상태의 격자구조와 달라진 정도를 말한다. 이 연구와 DFT 계산과의 비교결과를 Fig. 3에 정리하였다. Fig. 3에서 나타난 것처럼 계산에 사용된 조합형 포텐셜은 기계적 성질을 예측하는데 있어 두 가지 문제를 드러냈다.

첫째, 유효결합수(effective coordination number)의 예측문제이다. Type II 1.39 nm 와이어에서 볼 수 있듯이, 수소간 반발력을 최소화하였음에도 불구하고 Tersoff 경험포텐셜(empirical potentials) 계산결과에서 작지만 무시할 수 없는 정도의 평형 인장이 나

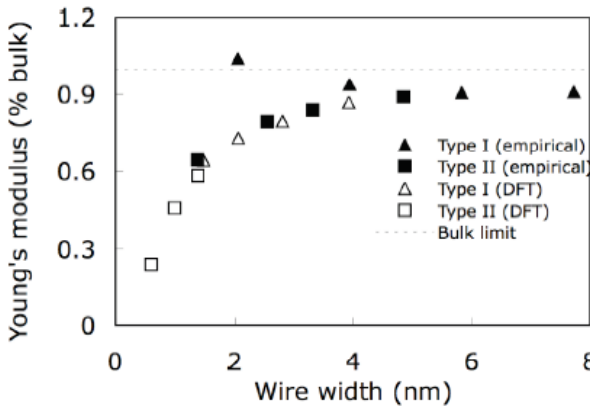


Fig. 4 Silicon nanowire Young's modulus calculated with Tersoff-based empirical potentials as a function of wire width. DFT results from Ref. 7 are compared

타났다. 특히, 제일원리 계산결과 똑같은 두께의 나노와이어에서는 평형 인장이 거의 나타나지 않았다는 사실과 비교하면, 수소와 결합을 하는 실리콘 원자들의 결합에너지 -근본적으로는 유효결합수-가 정확하지 않음을 알 수 있다. 즉, 표면의 실리콘 원자가 4 개의 실리콘 또는 수소와 결합되어 있는 한 bulk 와 유사한 거동을 보여야 하는데, 조합형 포텐셜에서는 차이를 나타내기 때문에 평형인장이 커진 것이다.

둘째, 조합형 포텐셜에 사용된 두 개의 서로 다른 데이터베이스가 균형이 맞지 않는다. Type I 와이어에서 보이는 것처럼, 2.04 nm 와이어의 경우 5% 이상의 평형인장을 보이고 있다. DFT 계산결과인 1% 정도의 평형인장과 비교한다면, 현재 상태로는 Tersoff 를 기반으로 하는 포텐셜을 나노와이어 구조해석에 적용하기에 적지 않은 문제가 있다. 또한 DFT 계산결과로 만든 연속체 모델을 이용하면 8 nm 두께의 와이어의 경우 0.24% 평형인장을 보이지만,⁽⁸⁾ 경험포텐셜의 예측값은 2% 정도로 10 배 정도의 차이를 보이고 있다. 따라서 이 문제가 첫번째 문제보다 더욱 심각하다.

각각의 Si-Si 결합력은 Tersoff 포텐셜의 문제를 그대로 상속하였기 때문에, 제일원리 예측값이나 실험에서 얻을 수 있는 값에 크게 못 미칠 수 밖에 없다. 반면에 Si-H 결합의 특성은 hydrocarbon 이나 silane 분자들을 바탕으로 비교적 정확하게 모델링하였기 때문에, 실험에서 측정할 수 있는 값이나 제일원리 DFT 에서 예측할 수 있는 결합력과 어느 정도 유사하다. 결과적으로 조합형 포텐셜에서 와이어 내부의 원자들은 DFT 보다 상당히 약한 결합력을 가지고, 표면은 DFT 와 비슷한

결합력을 가지게 되기 때문에 표면의 수소간 반발력이 지배적으로 작용하며, 와이어 크기가 작아질수록 그 불균형은 더욱 크게 나타난다. 이로 인해 경험포텐셜계산에서 얻어진 평형 인장은 제일원리계산결과보다 훨씬 크게 나타났다.

4.3 영률

벌크 영률의 절대값이 DFT 결과와 30% 이상 차이가 난다는 점을 감안하고, 경향을 파악하기 위해 벌크값에 대한 비율을 구하여 Fig. 4 에 정리하였다. DFT 계산에서는 단면 모양에 상관없이 영률이 단일한 추세로 감소하는 경향이 파악되었으며, 이 경향은 1 nm 정도까지 연속체모델로도 비교적 정확하게 예측이 가능하였다.⁽⁸⁾ type II 와이어의 경우, 경험포텐셜로도 이 경향과 비교적 일치하는 예측 결과가 나왔다. 반면에 type I 와이어의 경우 두께가 작아지면서 감소하는 경향을 따르다가, 4~5 nm 근처에서 영률이 상승하기 시작하여 2.04 nm 와이어의 경우는 오히려 벌크값보다 더 커진 영률이 예측되었다.

Type I 와이어의 영률 증가는 DFT 와는 정반대의 결과로 작은 크기의 나노와이어에는 이 연구에 사용된 조합형 포텐셜 -내지는 사용된 parameters-을 적용할 수 없음을 말해준다. 즉, Si-Si, H-H, 그리고 Si-H 의 결합력이 일관성없이 조합되어 사용되었기 때문에 와이어 크기가 작아질수록 평형 인장이 커지고, 평형인장이 커질수록 DFT 예측과의 차이가 커지게 되고 벌크 평형상태로부터 심각하게 멀어지게 된다. 조합형 경험 포텐셜이 예측하는 평형 인장이 매우 크다보니, 원자간의 결합길이와 결합각이 DFT 에 비교해 크게 차이가 나게 되고, 결과적으로 결합에너지에 큰 변화가 생기게 된다. 이 때문에 오히려 두께가 큰 type I 와이어는 전체적인 영률 감소경향에 잘 따르고, 두께가 작은 type I 와이어는 영률 감소경향에서 벗어나는 것을 볼 수 있다.

5. 결론

정리하면, Tersoff 기반의 경험포텐셜을 이용하여 실리콘 나노와이어의 기계적 물성을 계산하여, 다른 스케일로 예측한 결과와 비교 분석하였다. 표면의 수소간 반발력이 적은 구조에서는 제일원리계산과 같은 경향을 보였으나, 수소간 반발력이 지배적인 경우 물성 예측에 문제점이 드러났다.

현재 반도체 공정으로 개발 또는 상용화 단계에 이른 실리콘 기반의 나노 구조물은 수십 나노미터

크기이다. 3.92 nm 크기의 나노와이어 한 개의 기계적 특성을 이론적으로 연구하는데 필요한 CPU 시간은, 제일원리계산이 평균 128 개의 프로세서, 최대 512 개의 프로세서를 이용하여 109285 CPU 시간이고,⁽⁹⁾ 경험포텐셜기반의 원자이론계산이 단일 CPU 에서 한 시간 전후이다. 더우기 제일원리계산의 비용은 일반적으로 $O(N^3)$ 으로 증가하는 반면에 원자이론계산의 비용은 $O(N^2)$ 으로 증가한다. 따라서 계산 비용의 격차는 크기가 커질수록 더욱 증가하여, 제일원리계산으로 현실적인 크기의 구조물을 연구하여 의미있는 결과를 내는 것은 현실적으로 불가능하다. 따라서 실제 응용에 사용되는 크기의 구조물 연구를 위해서는 정확한 경험포텐셜의 개발이 필수이다.

이 연구에서 살펴본 바와 같이 확장된 Tersoff 포텐셜은, 나노와이어 기계적 성질의 정성적인 경향성은 비교적 빠르게 예측하였지만, 그 정량적인 정확도는 떨어진다. 특히 초기 개발 단계에서 부터 기계적 성질이 고려되지 않았던 점이 가장 큰 문제로 드러났다. 앞으로 기계적 특성을 고려한 새로운 fitting parameters 를 구한다면, 정확하고 효율적인 경험포텐셜을 구할 수 있으며, 이를 이용하여 현실적인 크기의 구조물에 대한 이론적 접근이 가능하리라 생각한다.

후 기

이 연구는 2008 년도 경희대학교 연구비지원에 의한 결과 임. (KHU-20080696)

참고문헌

- (1) Cleland, A. N. and Roukes, M. L., 1996, "Fabrication of High Frequency Nanometer Scale Mechanical Resonators from Bulk Si Crystals," *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 69, No. 18, pp. 2653~2655.
- (2) Solares, S. D., Blanco, M. and Goddard III, W. A., 2004, "Design of a Nanomechanical Fluid Control Valves Based on Functionalized Silicon Cantilevers: Coupling Molecular Mechanics with Classical Engineering Design," *Nanotechnology*, Vol. 15, No. 11, pp. 1405~1415.
- (3) Blencowe M., 2004, "Quantum Electromechanical Systems," *Phys. Rep.*, Vol. 395, No. 3, pp. 159~222.
- (4) Lim, J. H., Han, M., Lee, J.-Y., Earmme, Y. Y., Lee, S.-B., and Im, S., 2008, "A Study on the Thermomechanical Behavior of Semiconductor Chips on Thin Silicon Substrate," *Journal of Mechanical Science and Technology*, Vol. 22, No. 8, pp. 1483~1489.
- (5) Cahn, J. W., 1980, "Surface Stress and the Chemical Equilibrium of Small Crystals I. The Case of the Isotropic Surface," *Acta Metall.*, Vol. 28, No. 10, pp. 1333~1338.
- (6) Miller, R. E. and Shenoy, V. B., 2000, "Size-Dependent Elastic Properties of Nanosized Structural Elements," *Nanotechnology*, Vol. 11, No. 3, pp. 139~147.
- (7) Gu, M. X., Sun, C. Q., Chen, Z., Au Yeung, T. C., Li, S., Tan, C. M., and Nosik, V., 2007, "Size, Temperature, and Bond Nature Dependence of Elasticity and Its Derivatives on Extensibility, Debye Temperature, and Heat Capacity of Nanostructures," *Phys. Rev. B*, Vol. 75, No. 12, p. 125403.
- (8) Lee, B. and Rudd, R. E., 2007, "First-Principles Study of the Young's Modulus of Si <001> Nanowires," *Phys. Rev. B*, Vol. 75, No. 4, p. 041305(R).
- (9) Lee, B. and Rudd, R. E., 2007, "First-Principles Calculation of Mechanical Properties of Si <001> Nanowires and Comparison to Nanomechanical Theory," *Phys. Rev. B*, Vol. 75, No. 19, p. 195328.
- (10) Tersoff, J., 1988, "New Empirical Approach for the Structure and Energy of Covalent Systems," *Phys. Rev. B*, Vol. 37, No. 12, pp. 6991~7000.
- (11) Tersoff, J., 1989, "Modeling Solid-State Chemistry: Interatomic Potentials for Multicomponent Systems," *Phys. Rev. B*, Vol. 39, No. 8, pp. 5566~5568.
- (12) Ramana Murty, M. V. and Atwater H. A., 1995, "Empirical Interatomic Potentials for Si-H Interactions," *Phys. Rev. B*, Vol. 51, No. 8, pp. 4889~4893.
- (13) Hansen, U. and Vogl, P., 1998, "Hydrogen Passivation of Silicon Surfaces: A Classical Molecular-Dynamics Study," *Phys. Rev. B*, Vol. 57, No. 20, pp. 13295~13304.
- (14) McSkimin, H. J., 1953, "Measurement of Elastic Constants at Low Temperatures by Means of Ultrasonic Waves—Data for Silicon and Germanium Single Crystals, and for Fused Silica," *J. Appl. Phys.*, Vol. 24, No. 8, pp. 988~997.
- (15) McSkimin, H. J. and Andreatch, Jr., P., 1964, "Elastic Moduli of Silicon vs Hydrostatic Pressure at 25.0°C and -195.8°C," *J. Appl. Phys.*, Vol. 35, No. 7, pp. 2161~2165.