

Si (001) 표면 결함 원자힘 현미경 전산모사

조준영*·김대희*·김유리**·김기영*·김영철**

*† 한국기술교육대학교 에너지신소재화학공학부, **포항공과대학교 창의IT 융합공학과

Atomic Force Microscopy Simulation for Si (001) Surface Defects

Junyeong Jo*, Dae-Hee Kim*, Yurie Kim**, Ki-Yung Kim* and Yeong-Cheol Kim**†

*† School of Energy Materials and Chemical Engineering, Korea University of Technology and Education

**Department of Creative IT Engineering, Pohang University of Science and Technology

ABSTRACT

Atomic force microscopy (AFM) simulation for Si (001) surface defects was conducted by using density functional theory (DFT). Three major defects on the Si (001) surface are difficult to analyze due to external noises that are always present in the images obtained by AFM. Noise-free surface defects obtained by simulation can help identify the real surface defects on AFM images. The surface defects were first optimized by using a DFT code. The AFM tip was designed by using five carbon atoms and positioned on the surface to calculate the system's energy. Forces between tip and surface were calculated from the energy data and converted into an AFM image. The simulated AFM images are noise-free and, therefore, can help evaluate the real surface defects present on the measured AFM images.

Key Words : Atomic Force Microscopy (AFM), Density Functional Theory (DFT), Silicon Surface Defects, Computer Simulation

1. 서 론

규소(silicon, Si) (001) 표면은 반도체 칩을 제조하는 공정에서 가장 널리 사용되며, Si 재료가 채택된 1950년대 이후 가장 많은 연구가 진행되어왔던 표면이다. Si (001) 표면은 크게 세 가지의 결함을 보인다: A, B, C 결함. 표면에는 표면 원자들의 재배열을 통하여 2개의 Si 원자로 구성된 다이머 (dimer)들이 배열되어 있다. A는 표면 다이머 1개가 제거된 결함, B는 인접한 다이머 2개가 제거된 결함, C는 인접한 다이머에서 원자가 각각 1개씩 제거된 결함이다[1].

원자힘 현미경 (atomic force microscopy, AFM)은 표면과 팁 (tip) 사이에 발생하는 힘을 측정하여 이미지로 보여주는 현미경으로 원자 크기 수준에서 표면을 분석할 수 있는

기술이다[2]. 우수한 이미지 해상도를 위해 캔틸레버 (cantilever)에 부착되어 있는 AFM 팁은 매우 날카로워야 한다. 만약 팁의 끝부분 곡률이 표면의 곡률보다 크거나 비슷할 경우 이미지는 표면과 팁의 혼합된 정보를 갖는다[3]. AFM 분석 중 팁은 또한 표면과 반응하여 마모와 변형이 생겨 이미지의 왜곡이 발생한다[4]. 캔틸레버는 또한 열에 의해 진동하기 때문에 이미지에 열에 의한 노이즈가 추가된다[5]. 그동안 연구가 많이 진행된 Si (001) 표면에 있어서도 이와 같은 여러 한계로 높은 해상도를 갖는 AFM 이미지를 얻기가 어려웠기 때문에, 전산모사를 이용하여 노이즈가 없는 AFM 이미지를 획득할 수 있으면 노이즈가 포함된 측정 AFM 이미지의 해석에 많은 도움이 될 수 있다[6].

본 연구에서 사용한 표면은 재배열된 Si (001) 표면이며, 이를 바탕으로 실험적으로 관찰되는 3가지 결함이 있는 표면 구조를 만들었다. 팁은 마모에 우수한 다이아몬드

†E-mail: yckim@koreatech.ac.kr

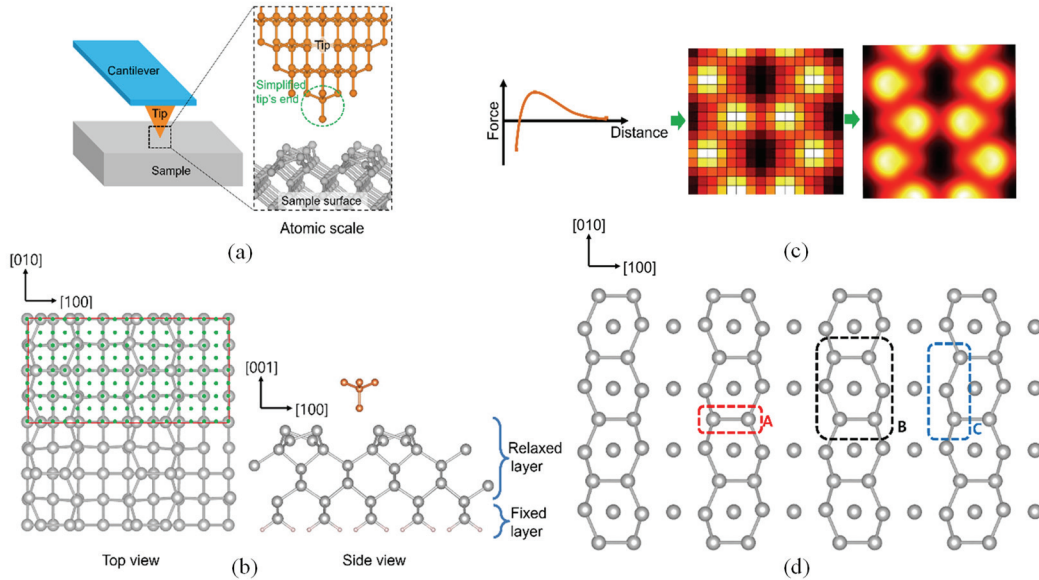


Fig. 1. Computational procedure for atomic force microscopy (AFM) simulation. (a) Schematic of AFM setting showing a tip located on top of a sample surface. The C (carbon) tip and Si (001) surface are shown in atomic scale. (b) Top and side views of Si (001) surface. The tip locations are indicated as green dots on the top view of the surface. The Carbon tip composed of 5 Carbon atoms is shown at the side view of the surface. (c) Force curve obtained by the DFT calculation based on the setting shown in (a) and (b), the resulting force surface image with low resolution, and the surface image with better resolution via interpolation. (d) A, B, and C surface defects on the Si (001) surface.

코팅된 팁으로 5개의 탄소 (Carbon, C) 원자로 구성된 구조로 팁을 모사하였다. 탄소 팁을 Si 표면에 가까이 위치시키고 밀도범함수이론 (density functional theory, DFT)에 기반한 코드를 이용하여 에너지를 계산하였다. 에너지 값으로부터 힘을 구하여 AFM 이미지를 형성하였고, 보간법을 이용하여 이미지의 해상도를 향상시켰다.

2. 계산 절차

밀도범함수이론을 이용한 계산을 위해 Vienna ab-initio simulation package (VASP) code를 사용하였다[7-10]. Perdew, Burke 및 Ernzerhof (PBE)의 generalized gradient approximation (GGA)를 교환 상관 에너지 (exchange and correlation energy)로 사용하였다[11]. K-points는 Monkhorst-Pack grid 방법을 이용하였다[12]. 전자와 구조에 대한 최적화 수렴 조건으로 각각 10^{-4} 과 10^{-3} eV를 사용하였다. AFM에서 측정에 사용되는 팁은 탄소 원자를 이용하여 만들었으며, Fig. 1(a)과 같이 총 5개의 탄소를 정사면체로 만들어 한 꼭지점의 원자는 표면을 향하도록 하였다. 4개의 탄소가 정사면체 꼭지점에 위치하고 1개의 탄소가 사면체 중심에 위치한다. 측정

하고자 하는 물질은 Si이며, 64개의 원자로 구성된 벌크 초격자 (supercell)를 최적화하였다. (001) 면을 갖는 표면 초격자는 최적화된 벌크 초격자로부터 생성되었다(Fig. 1(b) 참조). 표면 다이머 구조를 표현하는 $c(4 \times 2)$ 표면 단위 격자를 [010] 방향으로 2배 증가시켜 표면 초격자를 생성하였다[13]. 표면 결함이 생기면 표면 원자들이 이동하여 $c(4 \times 2)$ 표면 단위 격자로는 결함이 있는 표면을 충분히 설명할 수 없기 때문에, [010] 방향으로 2배 증가시킨 표면 초격자를 선정하였다. Si (001) 표면에서는 대표가 되는 표면 결함인 A, B, C 결함이 있다(Fig. 1(d)). A는 다이머 1개가 제거된 결함, B는 이웃하는 다이머 2개가 제거된 결함, C는 2개의 이웃 다이머에서 Si 원자가 1개씩 제거된 결함이다[1]. 표면 초격자를 구성하는 Si 원자 수는 96이며, 크기는 $15.3 \times 15.3 \times 7.9 \text{ \AA}^3$ 이다. Si 표면 위에 30 \AA 크기의 진공 공간을 두어 표면 초격자의 반복에 의한 표면 원자들의 상호 작용을 최소화하였다. 아래에서 첫번째 Si 층의 원자들에는 각각 2개의 수소 (hydrogen, H) 원자를 부착하고 고정된 상태에서 표면 초격자를 최적화하였다.

AFM 전산모사 이미지를 얻기 위해서 팁의 위치 선정, DFT를 이용한 에너지 계산, 팁의 위치에 따른 에너지 분

포 자료 추출, 보간 (interpolation)을 통한 부드러운 에너지 분포 자료 추출의 순서로 연구 절차가 진행되었다. 팁은 Fig 1(b)와 같이 일정 간격으로 위치하였다. $c(4 \times 2)$ 표면 단위 격자 기준으로 16×8 개의 팁 위치를 선정하였다. $c(4 \times 2)$ 표면 단위 격자는 벌크 기준 표면 단위 격자의 4배로 Fig 1(b) top view에 빨간색 네모로 표시되어 있고, 표면 단위 격자에 팁의 위치를 초록색 점들로 표시하였다. 실제 전산모사에 사용된 표면 초격자는 $[010]$ 방향으로 표면 단위 격자를 2배로 크기를 키운 것으로 총 16×16 개의 팁 위치에서 팁과 표면과의 힘을 계산하였다.

팁 위치는 $[001]$ 방향으로 가장 높은 위치의 표면 원자와 팁과의 힘이 0이 되는 부분을 기준으로 위아래 0.1 \AA 씩 움직여 3개의 팁 위치를 선정하였다. 각 팁 위치에서 팁과 표면 초격자의 에너지를 DFT를 이용하여 계산하였다. 에너지를 $[001]$ 방향 기준으로 미분하여 16×16 개의 힘 자료를 추출하였다. 표면 초격자와 팁의 좌표가 정해지면 총 16×16 개의 팁 위치와 각각 3개의 높이에 의해 총 768개의 에너지 계산이 필요하다. 에너지 계산을 연속적으로 진행하기 위해 코드를 만들어 계산시간을 줄였다. 16×16 개의 데이터로부터 부드러운 이미지를 추출하기 위해 보간법을 이용하였다. MATLAB의 spline법을 이용하여 16×16 개의 데이터를 1000×1000 개의 데이터로 추출하였다[14].

3. 결과 및 고찰

Fig 2(a)는 에너지 계산을 통해 최적화된 Si (001) 표면 구조로서 $[100]$ 방향으로 다이머가 형성되고, 다이머를 구성하는 2 개의 Si는 $[001]$ 방향으로 높이 차이가 있는 buckling 구조를 보여준다. 이 다이머들은 $[010]$ 방향으로 buckling이 교대로 반복인 줄 (line) 형태를 형성하며, 인접 다이머 줄 형태는 거울대칭으로 형성된다. $[001]$ 방향으로 더 높게 위치하는 Si 원자를 크기가 상대적으로 크고 밝은 빨간색으로 표현하였다[15-17]. Fig 2(b)는 초저온 (5 K)에서 측정된 AFM 이미지로, 다이머 중 $[001]$ 방향으로 더 높은 위치에 있는 원자 (최상층 원자)가 두드러지게 나타나는 것을 보여준다[18]. Fig 2(c)는 Si (001) 표면 (Fig 2(a))을 AFM 전산모사로 얻은 이미지로서 AFM으로 측정된 실험 이미지 (Fig 2(b)) 대비 노이즈가 없다. 다이머에서 표면 위쪽에 위치한 최상층 원자가 아래 쪽 원자에 비해 AFM 계산 이미지에 대부분의 영향을 주는 것을 알 수 있다.

Fig 3(a)의 왼쪽은 A 결함을 만들어 최적화한 표면 원자 구조이다. 다이머 1 개가 제거되어 결함 주위의 다이머들이 $[00\bar{1}]$ 방향으로 이동했다. Si 원자 1과 2는 다이머 원자 중 $[001]$ 방향으로 높은 위치에 있는 원자이다. 이 Si 원자

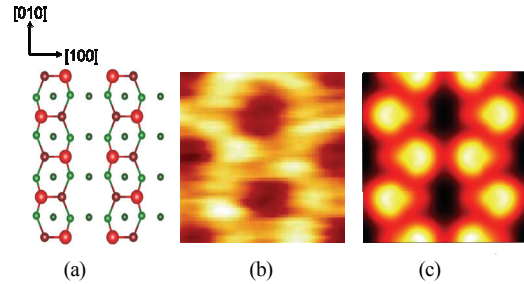


Fig. 2. Top view of atomic structure for Si (001) surface. (a) Schematic of reconstructed Si (001) surface showing the first and second top layers. Atoms at the first and second layers are red and green, respectively. Dark red and dark green atoms indicate deeper position at each layer along the $[00\bar{1}]$ direction. The atoms at the first layer form dimers and one atom in dimers is protruded upward relative to the other atom. The protruded atoms are presented bigger spheres. Bonds near the top layer are partially drawn for clarity. (b) An experimental NC-AFM topographic image of the Si (001) surface at temperature of 5 K [18]. (c) A simulated AFM image of the Si (001) surface obtained by DFT and MATLAB.

들은 $[00\bar{1}]$ 방향으로 0.09 \AA 움직였다. Fig 3(a)의 오른쪽은 AFM 계산 이미지로 Si 원자 1과 2는 주변의 다른 원자들에 비하여 상대적으로 크기가 작다. Fig 3(b)의 왼쪽은 B 결함을 만들어 최적화한 표면 원자 구조이다. B 결함은 인접한 다이머 2개가 제거된 경우로 주변 원자들이 A 결함보다 더 많이 이동한다. Si 원자 1과 2의 경우 $[00\bar{1}]$ 방향으로 0.19 \AA 이동하여 AFM 이미지에서 작아졌다. 결함 부분의 두번째 층 Si는 $[001]$ 방향으로 0.22 \AA 이동하여, AFM 이미지에서 미세한 흔적이 나타났다. Fig 3(c)의 왼쪽은 C 결함을 만들어 최적화한 표면 원자 구조이다. C는 인접한 다이머에서 Si 원자를 하나씩 제거한 결함이다. 두 다이머에서 원자가 하나씩 남게 되며, buckling 기준으로 각각 위와 아래에 있던 원자이다. Si 원자 1은 $[00\bar{1}]$ 방향으로 0.32 \AA 이동하여 AFM 이미지에서 주변 원자들에 비하여 작게 나타났다. Si 원자 2의 경우 $[00\bar{1}]$ 방향으로 0.18 \AA 이동하였다. 1과 2 Si 원자 모두 다이머의 중앙으로 이동하였으며, AFM 계산 이미지를 통해 확인할 수 있었다.

Fig 4(a)는 초저온에서 측정하여 얻은 STM 이미지로 buckled 다이머들이 45° 사선 방향의 줄 형태로 배열되어 있는 것을 보여준다[19]. Fig 4(b)는 (a)의 빨간 색 사각형 영

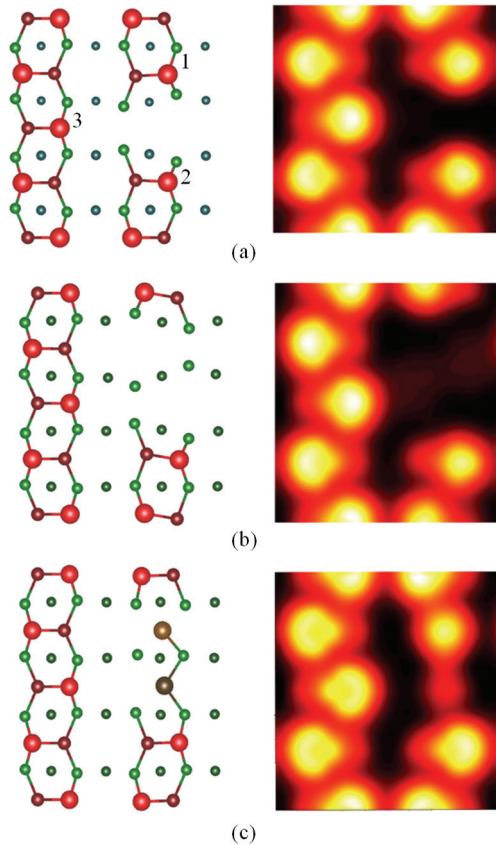


Fig. 3. Top view of atomic structure and AFM images for Si (001) surface with (a) A, (b) B, and (c) C defects. Left is reconstructed structures by visualization for electronic and structural analysis (VESTA)[19], and right is simulated AFM images.

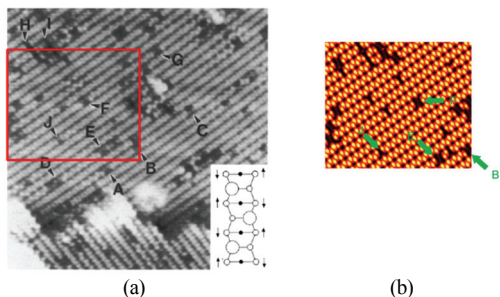


Fig. 4. Si (001) surface image. (a) Si (001) image of scanning tunneling microscope (STM) [20] and (b) Simulated image for the red box in (a).

역의 이미지를 결함 이미지의 조합으로 구성한 이미지이다. 본 이미지를 만들기 위해서는 측정 이미지 (Fig. 4(a))에

서 표면 결함을 정밀하게 파악해야 한다. Fig. 4(a)에서 J의 경우 다이머 한 층의 결함 크기를 가지기 때문에 A 결함으로, F와 E의 경우 다이머 2개의 크기를 가지며, C 결함에서 보이는 다이머 내의 남겨진 Si 원자가 보이지 않기 때문에 B 결함으로 추정하였다.

4. 결 론

본 연구는 DFT를 이용한 계산을 통하여 Si (001) 표면에서 자주 발견되는 표면 결함들의 AFM 이미지를 추출하는 것에 관한 것이다. 다이머들이 제거되면서 형성되는 표면 결함은 제거되는 방법과 갯수에 따라 A, B, 그리고 C 결함으로 명명되어 있다. 다이머가 제거된 주변 원자들은 재배열하면서 표면 결함 이미지는 복잡한 형태를 띠게 된다. AFM의 측정 메커니즘을 모사하기 위해 팁의 위치를 옮기며 각각의 표면 결함과 에너지로 DFT로 계산하였다. 이를 이용하여 위치에 대한 힘의 크기로 AFM 이미지를 추출하였다. 표면 구조를 만들고 AFM을 모사하는 이상적 상황을 통해 실제 AFM 측정에서 발생하는 artifact들이 제거된 A, B, 그리고 C 표면 결함에 대한 이미지를 얻었다. 본 연구를 통해 추출한 표면 결함 이미지는 노이즈를 포함하고 있는 실험 이미지의 표면 결함 판정에 도움을 줄 수 있다.

감사의 글

이 논문은 2018년도 한국기술교육대학교 교육연구진흥 과제 연구비 지원에 의하여 연구되었습니다.

참고문헌

1. R. J. Hamers and U. K. Kohler, *J. Vac. Sci. Technol.*, A, 7, 2854 (1989).
2. G. Binnig and C. F. Quate, *Phys. Rev. Lett.*, 56, 930 (1986).
3. K. L. Westra, A. W. Mitchell, and D. J. Tomson, *Appl. Phys.*, 74, 3608 (1998).
4. H.-J. Butt, B. Cappella, and M. Kappl, *Surf. Sci. Rep.*, 59, 1 (2005).
5. H.-J. Butt and M. Jaschke, *Nanotechnology*, 6, 1 (1995).
6. S. Sanna, C. Dues, and W.G. Schmidt, *Comput. Mater. Sci.*, 103, 145 (2015).
7. G. Kresse and J. Hafner, *Phys. Rev. B* 47, 558 (1993).
8. G. Kresse, Thesis, Technische Universität Wien

-
- (1993).
9. G. Kresse and J. Furthmuller, *Comput. Mater. Sci.*, 6, 15 (1996).
 10. G. Kresse and J. Furthmuller, *Phys. Rev. B* 54, 11169 (1996).
 11. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.*, 77, 3865 (1996).
 12. H. J. Monkhorst and J. D. Pack, *Phys. Rev., B* 13, 5188 (1976).
 13. L. Kantorovich and C. Hobbs, *Phys. Rev.*, 73, 245420 (2006).
 14. <https://www.mathworks.com/>.
 15. D. J. Chadi, *Phys. Rev. Lett.*, 43, 43 (1979).
 16. W. S. Verwoerd, *Surf. Sci.*, 90, 581 (1980).
 17. M. T. Yin and M. L. Cohen, *Phys. Rev.*, 24, 2303 (1981).
 18. C. Hobbs and L. Kantorovich, *Phys. Rev. Lett.*, 96, 106104 (2006).
 19. <http://jp-minerals.org/>
 20. R. A. Wolkow, *Phys. Rev. Lett.*, 68, 2636 (1992).
-
- 접수일: 2018년 10월 8일, 심사일: 2018년 12월 13일,
게재확정일: 2018년 12월 18일