

## 실리콘 (001) 표면의 초기 산화 과정에 대한 원자 구조와 이론적 scanning tunneling microscopy 이미지 연구

장윤희, 황은경, 구자용, 김한철

한국표준과학연구원 전략기술연구부 첨단산업측정그룹

실리콘 표면에서의 산화에 대한 연구는 학문적으로나 기술적으로 중요하고 흥미로운 주제이다. 실리콘을 기반으로 한 반도체 소자의 소형화 기술이 발전하면서, 표면에서 원자 몇 개의 층을 정밀하게 조절할 수 있는 기술이 요구되고, 실리콘 표면의 산화 과정에 대한 미시적인 이해가 더욱 중요해지고 있다. 지난 40여 년 동안 실리콘 표면에서의 산화에 대한 광범위한 연구가 진행되어 왔지만, 산화 메카니즘과 관련된 원자 구조들에 대한 원자 수준에서의 이해는 없는 상태이다. 산소 원자 1개가 실리콘 (001) 표면과 반응하는 경우에는 back-bond 에 산소 원자가 침투한 구조가 에너지적으로 안정하다는 사실이 잘 알려져 있지만, 산소 분자의 경우에는 일치된 견해 없이 여러 가지 서로 다른 구조 모델들이 제안되고 있다.[1,2] 또한, 이런 이론적인 연구들은 표면 아래로 두 번째 층까지만 산소의 침투를 고려하여 어느 정도 한계점을 가지고 있다.

본 연구에서는 실리콘 (001) 표면의 초기 산화 과정에 대한 원자 구조를 제일원리계산 방법으로 연구하였다. 여러 가지 다양한 산소 분자들의 분해 흡착/혼입 구조들의 에너지 안정성을 비교하였다. 특히, 표면에서 두 번째 층보다 더 깊은 층에 대한 구조들도 고려하였다. 상대적으로 안정한 구조들에 대해 scanning tunneling microscopy 이미지를 모사하고, 실험 이미지와 비교 분석하였다.

### [참고문헌]

- [1] K. Kato and T. Uda, *Phys. Rev. B* **62**, 15978 (2000).
- [2] B. D. Yu, Y. J. Kim, J. J. Jeon, H. Kim, H. W. Yeom, I. W. Lyo, K. J. Kong, Y. Miyamoto, O. Sugino, and T. Ohno, *Phys. Rev. B* **70**, 33307 (2004).