

# Ab initio DFT 를 통한 Si/SiO<sub>2</sub> Band Offset 계산

송호철

서울대학교 재료공학부

e-mail : nr2327shc@snu.ac.kr

Ab initio DFT 계산을 통해서 Si/SiO<sub>2</sub> 계면의 Band offset을 계산 했다. Si과 SiO<sub>2</sub> 각각의 물질을 계산한 결과로 얻은 로컬 퍼텐셜을 기준으로 Valence band와 Conduction band의 band edge의 위치를 결정할 수 있다. 그리고 계면 계산으로 얻은 로컬퍼텐셜을 이용하여 두물질의 로컬 퍼텐셜의 상대적인 위치를 결정할 수 있고 이를 이용하여 Band offset을 결정 할 수 있었다.

## INTRODUCTION

기기의 반도체/부도체 계면에서 일어나는 밴드 구조의 불연속은 기기의 성능에 큰 영향을 미친다. 반도체와 부도체의 계면에서 Conduction band와 Valence band의 불연속이 발생하게 되며 이러한 불연속은 전자와 양공이 이동하는데 장벽으로 작용한다.[1] 그렇기 때문에 반도체와 부도체의 Band offset은 적당한 범위안에 존재해야한다. 본 연구에서는 가장 널리 쓰이는 반도체인 Si과 부도체인 SiO<sub>2</sub>의 계면에서 두 물질간의 Band offset을 계산해보려한다. 실험적으로 얻어진 두 물질의 Band offset과 비교해본다.[2]

## METHOD

EDISON 나노물리의 양자계산 도구인 LCAODFTLab와 양자계산 프로그램으로 유명한 Vasp을 통하여 LDA[3]근사를 이용한 DFT 계산을 진행하였다. 실제 소자에서는 비정질 SiO<sub>2</sub>를 가장 많이 사용하지만 계산 자원상의 한계로 인해 비정질 SiO<sub>2</sub>와 유사한 성질을 가진다고 알려진  $\alpha$ -quartz 구조를 선택하여 Si위에  $\alpha$ -quartz를 얹힌 형태의 계면을 모델링 하였다. 주기 경계 조건에 의해서 두 물질은 주기적으로 계면을 가진 형태가 되었으며 단위 셀 내에 두 개의 계면이 있는 형태이다. Si의 경우 격자 상수가 5.40 Å 이고,  $\alpha$ -quartz의 경우 a = 4.87Å 와 c =

5.40Å의 격자상수를 가지고 있다. 두 물질의 계면을 만들 경우 격자가 불일치 하므로  $\alpha$ -quartz에 x축방향으로 10.8%의 인장 변형률이 존재한다. LCAODFTLab을 이용하여 원자간의 힘이 0.04 eV/Å 이하로 작용하는 구조를 얻을 때까지 최적화를 하였다. 계면에서의 로컬 퍼텐셜은 계면 부위의 국소적인 영역에서만 변형이 일어나기 때문에 각각의 물질의 로컬퍼텐셜 상대적인 위치를 계면 계산을 통해 얻을 수 있다. 또한 각 물질에 대해서 로컬 퍼텐셜과 Conduction band 및 Valence band의 Band edge의 상대적인 위치 또한 크게 변하지 않으므로 계면의 로컬 퍼텐셜을 기준으로 각 물질의 Band edge의 위치를 결정할 수 있고 이에 따라 두 물질의 Band offset을 결정 할 수 있다.[4]

## RESULTS & CONCLUSION

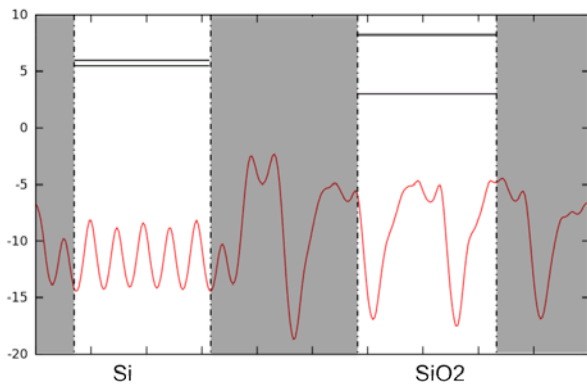
흔히 알려진 LDA 계산상의 한계로 인해 밴드갭이 실험값보다 작은 결과를 얻었다. 각각의 물질에서 계산한 결과 Si의 밴드갭은 0.5eV, SiO<sub>2</sub>의 밴드갭은 5.2eV로 나타났다. 각각의 물질에서 y축 방향을 따라 평균 로컬 퍼텐셜 그래프를 그려서 로컬퍼텐셜의 평균값과 Band edge사이의 거리를 계산했다. 그리고 계면 계산에서도 로컬 퍼텐셜을 계산한 결과 각 물질 계산에서 얻은 로컬퍼텐셜 그래프와 크게 변하지 않은 것을 확인했다. 각각의 물질에서 계산한 로컬 퍼텐셜과 Band edge의 거리를 계면 산으로 얻은 로컬 퍼텐셜

그래프에 적용할 경우 Band offset은 2.5eV로 나타났다. 이는 실험값보다 작은 값으로 나타났는데 이는 LDA의 특성상 나타나는 오차이다.[5] 보다 더 정확한 예측을 하기 위해서는 LDA근사에서 Quasi-Particle Level까지 고려하는 GW 계산[6]이나 Hartree-Fock exchange[7]를 포함하는 Hybrid Functional 계산을 통해 개선된 결과를 얻을 수 있다.

**TABLE I.** LDA계산 결과로 얻은 Valence Band Offset, Conduction Band Offset, 실험값과 비교

	LDA	Exp. <sup>a</sup>
VBO	2.5	4.4
CBO	2.2	3.5

<sup>a</sup>Reference 2



**FIG 1.** Si 와 SiO2 에서 로컬포텐셜을 기준으로 결정한 Band offset

## REFERENCES

- [1] J. Tersoff, Phys. Rev. B 30, **4874** (1984)
- [2] J. Robertson, J. Non-Cryst. Solids **303**, 94 (2002)
- [3] C. G. Van de Walle and R. M. Martin, Phys. Rev. B **35**, 8154 (1987)
- [4] J.K. Schaeffer *et al.*, Appl. Phys. Lett. **85**, 1826 (2004)
- [5] A. Alkauskas *et al.* Phys. Rev.Lett. **101**, 106802 (2008)
- [6] R. Shaltaf *et al.* Phys. Rev.Lett. **100**, 186401 (2008)
- [7] A.D. Becke, J. Chem. Phys. **98**, 5648 (1993)