

Density Functional Theory를 이용한 orthorhombic-NiSi (010)/Si 계면 층의 구조 연구

김대희*, 김대현*, 서화일**, 김영철*
 한국기술교육대학교, 신소재공학과*, 정보기술공학부**

Structural study of interface layers in orthorhombic-NiSi (010)/Si using density functional theory

Dae-Hee Kim*, De-Hyun Kim*, Hwa-Il Seo**, Yeong-Cheol Kim*

Dept. Materials Engineering*, School of Information Technology**, Korea University of Technology and Education

Abstract : We calculated orthorhombic-NiSi (010)/Si superstructure. Orthorhombic-NiSi was changed to tetragonal structure to be matched with Si substrate. Eight models were produced by the type of Si substrate. In the case of orthorhombic-NiSi (010)/Si (020)[00-1], it was the most favorable energetically and the shortest of the distance between two superstructures. However, in the case of orthorhombic-NiSi (010)/Si (010)[00-1], it was the most unfavorable energetically and the longest of the distance. The energy and distance of orthorhombic-NiSi (010)/Si superstructure were changed by the coordination number of Ni atom and the bond length of atom-atom at the interface.

Key Words : DFT calculation, orthorhombic-NiSi, interface layer

1. 서론

CMOS 구조에서 소스, 드레인, 게이트의 저항을 감소시키는 것은 매우 중요하다. 고속 소자가 구현되기 위해서는 금속 실리사이드 물질의 저항이 감소되어야 한다. 그 중 니켈 실리사이드 (NiSi)는 65 nm 노드에서 45 nm 노드로 변화하는 과정의 핵심 물질 중 하나이다. NiSi는 다른 금속 실리사이드 (TiSi₂, CoSi₂)에 비하여 낮은 형성 온도, 적은 실리콘 소모량, 선폭이 줄어들어 따른 면저항의 감소 등의 장점을 가지고 있다.

본 연구에서는 orthorhombic-NiSi (010) 면이 Si 기판과 접합되었을 때, 에너지 관점에서 안정한 계면구조를 계산하여 평가하였다.

2. 계산 방법

본 연구는 projector augmented wave (PAW) 포텐셜과 local density approximation (LDA)이 포함된 Vienna *ab-initio* Simulation Package (VASP) code가 사용되었다. 전자의 바닥상태는 residual minimization scheme direct inversion in the iterative subspace (RMM-DIIS)로 계산되었다. 사용된 cut off 에너지는 500 eV이고, k-point mesh는 Monk-horst pack이 사용되었으며 4x1x4 크기가 사용되었다.

최적화된 orthorhombic-NiSi의 *a*와 *c* 축을 Si과의 에피택시 접합 (epitaxy contact)을 위하여 Si의 격자 상수와 맞추고 *b* 축의 길이 변화를 확인하였다. Orthorhombic-NiSi (010)/Si 계면에서 Si 기판의 계면 terminating 층의 Si 원자 배열에 따라서 8 개의 모델을 제시하고, 각각의 Si 모델과 orthorhombic-NiSi (010)과 접합시켜 계산하였다.

3. 결과 및 고찰

계면에서 Si 기판과의 에피택시 접합을 위해서

orthorhombic-NiSi의 *a*와 *c* 축의 길이가 6.16 % 와 -1.36 % 로 확장 또는 축소되어야 한다. 그림 1은 *b* 축의 길이 변화에 따른 에너지 변화를 보여준다. *b* 축의 길이가 3.10 % 감소된 3.204 Å 일 때 에너지 관점에서 가장 안정하였다. NiSi에서 orthorhombic 구조의 단위격자 (-55.02 eV)보다 *a*와 *c* 축이 변한 tetragonal 구조 (-54.85 eV)가 에너지 관점에서 더 불안정하지만, Si 기판과의 에피택시 접합을 위해서 tetragonal 구조가 되어야 한다.

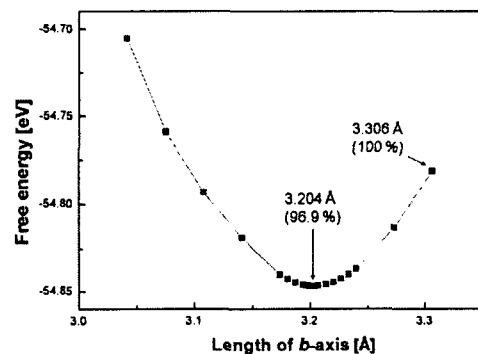


그림 1. Orthorhombic-NiSi 구조에서 *b* 축의 길이 변화에 따른 에너지 변화.

Orthorhombic-NiSi (010) 구조와 Si 기판이 접합되었을 때, Si 기판은 계면 terminating 층에 따라서 (010), (020), (040)_{1/4}, (040)_{3/4} 면의 [010] 방향과 [0-10] 방향으로 orthorhombic-NiSi (010) 구조와 접합된다. 본 연구에서는 각각의 Si 기판과 orthorhombic-NiSi (010) 구조를 접합시킨 orthorhombic-NiSi (010)/Si 초격자구조를 계산하여 에너지와 두 초격자구조 사이의 거리를 확인하였다. 그림 2는 모델에 따른 에너지와 두 초격자구조 사이의 거리를 보여

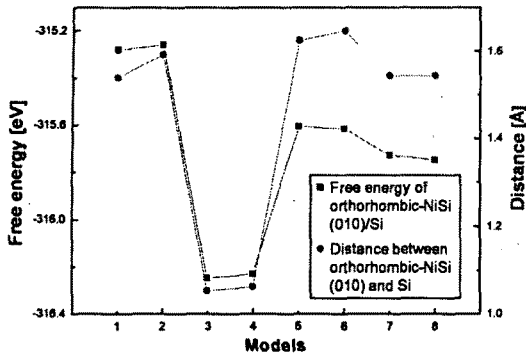


그림 2. Orthorhombic-NiSi (010) 초격자구조가 각각의 모델에 접합되었을 때의 에너지와 두 초격자구조 사이의 거리.

준다. Orthorhombic-NiSi (010) 초격자구조가 모델 3인 Si (020)[0-10] 초격자구조에 접합되었을 때 에너지 관점에서 가장 안정하였고, 또한 두 초격자구조 사이의 거리도 가장 짧았다. 하지만 orthorhombic-NiSi (010) 초격자구조가 모델 2인 Si (010)[0-10] 초격자구조에 접합되면 에너지 관점에서 가장 불안정하였고, 두 초격자구조 사이의 거리도 매우 멀었다. 이는 orthorhombic-NiSi (010)/Si 초격자구조에서 계면에 존재하는 Ni 원자의 배위수 때문이다. 벌크 orthorhombic-NiSi 초격자구조에서 Ni 원자의 배위수는 4이다. 모델 2인 경우, 계면에 위치한 Ni 원자의 배위수는 2이다. 이는 벌크 orthorhombic-NiSi 경우보다 2 작기 때문에 에너지 관점에서 불안정하다. 하지만 모델 3인 경우, 계면에 존재하는 Ni 원자의 배위수가 4로 벌크 구조인 경우와 동등하여 에너지 관점에서 유리하다. 두 초격자구조 사이의 거리 또한 Ni 원자의 배위수 차이로 인해 거리가 다르다고 판단된다.

그림 3은 모델 2와 3의 전하 밀도를 보여준다. Orthorhombic-NiSi (010)/Si (010)[0-10] 초격자구조에서, 계

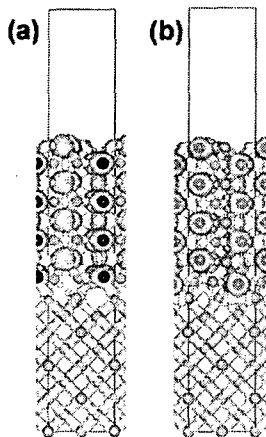


그림 3. (a) orthorhombic-NiSi (010)/Si (010)[0-10] 초격자구조와 (b) orthorhombic-NiSi (010)/Si (020)[0-10] 초격자구조의 전하 분포.

면에 위치한 Ni 원자 주변의 일부 전자들이 Si (010)[0-10] 초격자구조의 계면에 위치한 Si 원자를 향하여 분포한다. 또한 orthorhombic-NiSi (010) 초격자구조의 계면에 위치한 Si 원자와 Si (010)[0-10] 초격자구조의 계면에 위치한 Si 원자 간의 결합이 벌크 Si 경우보다 약하다는 것을 전하 분포를 통하여 알 수 있다. 하지만 orthorhombic-NiSi (010)/Si (020)[0-10] 초격자구조의 경우, 계면에 위치한 Ni 원자 주변의 일부 전자들이 Si (020)[0-10] 초격자구조의 계면과 두 번째 층에 존재하는 Si 원자를 향하여 분포한다. 또한 orthorhombic-NiSi (010) 초격자구조의 계면에 위치한 Si 원자와 Si (020)[0-10] 초격자구조의 계면에 위치한 Si 원자 간의 결합이 벌크 Si 경우와 유사하다. 이는 두 초격자구조 사이의 거리가 계면에 위치한 Ni 원자의 배위수에 영향을 받는다고 판단되고, 두 초격자구조 사이의 거리에 의해 계면에 위치한 Si-Si 결합의 세기가 결정된다고 판단된다.

4. 결론

Orthorhombic-NiSi는 Si 기판과 에피택시 결합이 되기 위하여 tetragonal 구조로 변형되어야 한다. Si 기판에 따라 8 개의 모델이 존재하며, 각각의 모델이 orthorhombic-NiSi (010) 초격자구조와 접합되면 에너지 관점에서 모델 3이 가장 안정하고 모델 2가 가장 불안정하였다. 이는 계면 근처에 존재하는 Ni 원자의 배위수의 차이에 의한 것이며, 또한 배위수 차이에 의하여 변화되는 두 초격자구조 사이의 거리에 의해 결정된다고 판단된다.

참고 문헌

- [1] Front End Process, International Technology Roadmap semiconductors (2005).
- [2] T. Morimoto, IEEE Trans. Electron. Devices, Vol. 42, p. 915 (1995).
- [3] G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B, Vol. 47, p. 558 (1993); ibid. Vol. 49, p. 14251 (1994).
- [4] G. Kresse and J. Furthüller, Comput. Mat. Sci., Vol. 6, p. 15 (1996).
- [5] G. Kresse and J. Furthüller, Phys. Rev. B, Vol. 54, p. 11169 (1996).
- [6] G. Kresse and D. Joubert, Phys. Rev. B, Vol. 59, p. 1758 (1999).
- [7] D. Vanderbilt, Phys. Rev. B, Vol. 41, p. R7892 (1990).
- [8] D. M. Wood and A. Zunger, J. Phys. A, Vol. 18, p. 1343 (1985).
- [9] P. Pulay, Chem. Phys. Lett., Vol. 73, p. 393 (1980).