

DEMS와 H-terminated Si (001) 표면의 상호작용: 제일원리연구

김대현, 김대희, 박소연*, 서화일**, 이도형*, 김영철

한국기술교육대학교 신소재공학과, *(주)아토, **한국기술교육대학교 정보기술공학부

Interaction of DEMS with H-terminated Si (001) surface : a first principles study

Dae-Hyun Kim, Dae-Hee Kim, So-Yeon Park*, Hwa-Il Seo**, Do-Hyeong Lee*, and Yeong-Cheol Kim

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

Abstract : 최근 고집적화 구조는 저항 (resistance)과 정전용량 (capacitance)에 의한 신호 지연 (RC delay) 증가로 인한 혼선 (cross-talk noise)과 전력소모 (power dissipation)등의 문제를 발생시킨다. 칩 성능에 영향을 미치는 제한인자를 최소화하기 위해서는 저저항 배선 금속과 저유전상수 (low- k)의 층간 절연막 (IMD, intermetal dielectric) 물질이 필요하다. 최근 PECVD (plasma enhanced chemical vapor deposition)를 이용하여 증착시킨 유기실리케이트 (OSG, organosilicate glass)는 가장 유망한 저유전상수 물질로 각광받고 있다. 본 연구에서는 제일원리 연구를 통하여 OSG의 전구체 중에 하나인 DEMS 분자를 모델링하고, 에너지적으로 가장 안정한 구조를 찾아서 각 원자 간의 결합에 따른 해리에너지 (dissociation energy)를 계산하고, DEMS가 H-terminated Si 표면과 반응하는 기구에 대해 고찰하였다. 최적화된 DEMS 분자의 구조를 찾았고, DEMS 분자가 결합이 깨져 조각 분자군으로 될 때의 에너지들을 계산하였다. 계산된 해리에너지로부터 DEMS 분자의 O 원자와 C분자의 결합이 깨져서 C_2H_5 를 조각 분자군으로 생성할 확률이 총 8가지의 경우에서 가장 높다는 것을 알 수 있었다. 8 가지의 해리된 DEMS 조각 분자군들이 H-terminated Si 표면과 반응할 때의 반응에너지를 계산한 결과, 표면의 Si 원자와 DEMS 분자에서 C_2H_5 가 해리되어 생성된 조각 분자군의 O 원자가 결합을 하고 부산물로 C_2H_6 를 생성하는 반응이 가장 선호된다는 것을 알 수 있었다. DEMS 분자로 증착시킨 OSG에 대하여 제일원리법을 이용하여 계산한 연구는 보고된 바 없기 때문에, DEMS 분자의 각 원자 간의 해리에너지와 Si 기판과의 반응에너지는 추후 연구개발의 중요한 기초 자료가 될 수 있다.

Key Words : DEMS, low- k , diethoxymethylsilane, first principles, SiOCH

Acknowledgement

본 연구는 지식경제부 나노반도체장비 원천기술상용화사업에서 지원받았으며 이에 감사드립니다.