

# Silicon-Silicon dioxide 계면에서의 defect 거동 연구

이동석, 윤용

서울대학교 재료공학부, 서울특별시 관악구 관악로 1, 대한민국.

e-mail: aalllds@snu.ac.kr, yybbbyb@snu.ac.kr

본 연구에서는 제일원리 계산을 이용하여 Si(100)/SiO<sub>2</sub> 계면 내부에서 발생하는 point defect들의 거동에 대해 살펴보았다. Defect 계산에 앞서 안정한 Si/SiO<sub>2</sub> 계면을 찾아보았고 찾은 계면을 바탕으로 계면에서 point defect의 formation energy를 계산해 보았고 이를 통해 Si defect의 경우 Si층 쪽 보다는 SiO<sub>2</sub> 층에서, 그리고 계면 내부 보다는 계면 경계 근처에서 발생할 가능성이 높음을 보였다.

## INTRODUCTION

Semiconductor을 바탕으로 한 전자 소자 분야는 20세기 들어 많은 관심을 받으며 크게 성장하였다. 이 중 Complementary metal oxide semiconductor(CMOS) 소자는 metal로 구성된 source와 drain을 metal oxide로 구성된 gate oxide로 연결한 것으로 semiconductor를 이용한 전자 소자의 하나이다. Si-SiO<sub>2</sub> CMOS 소자는 Si-SiO<sub>2</sub> 계면이 dangling bond 등의 전기적 결함이 매우 작기 때문에 가장 많이 사용되고 있다. 연구자들은 그 물성을 좀 더 향상시키기 위하여 많은 연구들을 진행시켰다. 특히, 계면의 orientation에 대해서도 많은 연구가 진행되어 왔는데 그 중 Si 100 방향으로 계면이 주목되었다. [1-6]

CMOS device에서 source와 drain 사이에 threshold voltage에 의해서 device가 작동하기에 threshold voltage가 device의 성능에 크게 영향을 미친다. 이 때 계면내부의 point defect가 gate oxide 내 carrier 밀도에 영향을 주고 이로 인해 threshold voltage 값 또한 shift하게 된다. [6] 따라서 device 효율 향상을 위해서는 defect의 거동에 대해서 파악하는 것이 중요하다. 본 연구에서는 알려져 있는 계면 정보를 바탕으로 Si/SiO<sub>2</sub> 계면 구조를 모델링하고 계면 근처에서의 point defect의 거동을 제일원리 계산을 사용하여 계산해 보았다.

다.

## METHOD

본 연구에서는 계면과 point-defect의 simulation을 위하여 density functional theory(DFT)를 기반으로 한 Edison Nanophysics의 전자구조계산 프로그램과 Vienna ab-initio simulation package(VASP)를 사용하여 진행하였다. Si/SiO<sub>2</sub> 계면은 결정질 Si(100)표면 위에 beta-cristobalite SiO<sub>2</sub>(100) 구조가 결합한 형태로 이 때 두 격자 사이의 mismatch는 6.76%이다. 계면에 수직인 길이는 37.77 Å, 계면의 면적은 29.48 Å<sup>2</sup> 이다. Si기판 위에 SiO<sub>2</sub>을 film형태로 deposit하는 구조이기 때문에 격자크기는 Si에 맞추었다. 계면에너지를 계산하여 안정한 계면을 찾고 계면 경계로부터 거리에 따라 point defect 하나를 생성해 가면서, 위치에 따른 formation 에너지를 계산해 보았다. 그 계산식은 다음과 같다.

$$E_F(Si) = E_t^D(Si) - E_t(Si) + \mu_{Si} \quad (a)$$

$$E_F(O) = E_t^D(O) - E_t(O) + \mu_O \quad (b)$$

Eq 1. Defect formation 에너지 계산식 [8]

이 때,  $E_F$ 는 defect formation 에너지,  $E_t^D$ 는 defect 존재시 total 에너지  $E_t$ 는 온전한 상태에서의 total 에너지,  $\mu$ 는 각 구성 성분의 chemical potential 값을 의미한다. [8] defect는 구성 성분에 따라 Si defect와 O

defect로 나누어 계산하였다.

## DISCUSSION

Defect 계산에서는 원자의 수가 변하기 때문에 Eq. 1에서 볼 수 있듯이 각 원자의 chemical potential을 계산하여야 한다. 실제 chemical potential 값은 metal-rich한 환경에서의 값과 oxygen-rich한 환경에서의 값을 가지는데, 우리는 여기서 metal-rich한 값을 이용하였다. metal-rich한 환경에서 Si의 chemical potential은 Si층에서의 원자당 에너지와 같고 O의 chemical potential은 SiO<sub>2</sub>층에서 O 원자 하나당 에너지로 정의된다. 그 결과 Si의 chemical Potential은  $-5.96\text{eV/atom}$ , O는  $-9.86\text{eV/atom}$ 로 계산되었다.

Si/SiO<sub>2</sub>계면에서 계면의 위치에 따라 두 가지 종류의 계면을 얻을 수 있다. Fig. 1에서 (a) 계면은 SiO<sub>2</sub>층의 O 원자가 Si 층과 계면을 형성하는 것이고 (b)계면은 SiO<sub>2</sub>층의 Si 원자가 Si층과 계면을 형성하는 것이다. 각각의 계면에너지를 계산해 보면 (a)계면은  $6.51\text{eV}$ , (b) 계면은  $5.97\text{eV}$ 로 (b) 모델이 더 안정하다. 따라서 (b)계면이 더 선호될 것이고 우리는 defect계산을 진행할 때 (b)계면을 이용하였다.

계면 내부에서 Point defect의 형성위치를 파악하기 위하여 계면으로부터 거리를 늘려 가며 defect formation energy를 계산해보았다.

우선 Fig. 2 전체적인 그래프 양상을 보면 defect 발생 위치가 계면 경계에서 멀어질수록 에너지가 수렴하는 것을 확인해 볼 수 있었다. 이를 바탕으로 우리가 계산한 구조가 충분한 크기임을 알 수 있다.

Fig. 2 (b)를 보면 Si defect의 경우 Si층 내부에서의 defect가 발생했을 때의 formation energy가 SiO<sub>2</sub> 층에서 발생했을 때 보다 훨씬 낮았다. 즉, Si층 내부에서 defect가 생성되는 것이 더 안정하다는 것을 알 수 있다. 이는 원자들 사이의 결합에너지를 통해서 이해할

수 있는데 이 값에 대해서는 이미 많은 연구가 진행되었다. Si사이의 결합에너지는 ( $54\text{kcal/mol}$ )로 Si-O 사이의 결합에너지인 ( $111\text{kcal/mol}$ )이 더 강하기 때문에 [7] 결합이 약한 곳에서 defect 발생이 용이한 것이다.

또한 계면 근처에서 defect 생성이 계면 중간보다 더 용이함을 알 수 있다. 계면 중간으로 갈수록 Si는 crystalline 구조이므로 매우 안정하지만 계면 근처에서의 Si는 amorphous한 SiO<sub>2</sub> 계면과 결합하였기에 대칭성이 약하기 때문에 defect가 더 잘 형성된다. O defect의 경우도 Si defect와 비슷하게 계면 근처에서 defect가 더 잘 발생함을 알 수 있다.

## CONCLUSION

Si/SiO<sub>2</sub> 계면의 구조와 point defect의 위치에 따른 defect formation 에너지를 계산해보았다. 그 결과 Si defect의 경우, SiO<sub>2</sub>층 보다 Si층 내에서 defect가 더 용이하게 발생하였으며 또한, defect의 종류에 관계 없이 계면 경계 근처에서 defect가 쉽게 발생하고 있음을 알 수 있었다. 본 연구는 semiconductor device의 효율을 높이기 위한 device defect 감소와 관련된 이론적 연구의 사례가 될 수 있을 것이다.

## ACKNOWLEDGEMENT

연구 주제 선정과 연구 진행에 큰 도움을 주신 서울대학교 재료공학부의 한승우 교수님과 서울대학교 전산재료과학 연구실에 감사 드립니다.

## REFERENCES

- [1] Yuhai Tu et al., Physical Review Letters **84**, 4393 (2000).
- [2] Kwok-On Ng et al., Physical Review B **59**, 10132 (1999).
- [3] C. Guerin et al., Journal of Applied Physics **105**, 11453 (2009).

- [4] G. Lucovsky et al., *Journal of Vacuum Science & Technology B* **14**, 2832 (1996).
- [5] S. Carniato et al., *Philosophical Magazine A* **75**, 1435 (1997).
- [6] G. Pacchioni et al., *Defects in SiO<sub>2</sub> and Related Dielectrics: Science and Technology*, Kluwer Academic Publishers, 599-615, (2000).
- [7] R. Walsh, *Bond Dissociation Energies in Organosilicon Compounds*, <http://www.gelest.com/goods/pdf/Library/10BondDiss.pdf> (accessed 02/10/14).
- [8] Tsuyoshi Maeda et al., *Japanese Journal of Applied Physics* **50**, 04DP07 (2011).

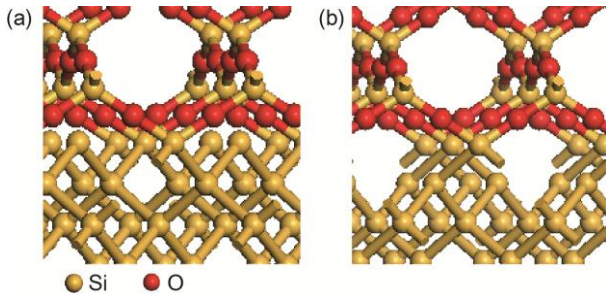


Fig 1. Si/SiO<sub>2</sub>계면, (a) 계면은 SiO<sub>2</sub>층의 O 원자가 Si 층과 계면을 형성하는 것이고 (b)계면은 SiO<sub>2</sub>층의 Si 원자가 Si층과 계면을 형성하는 것이다.

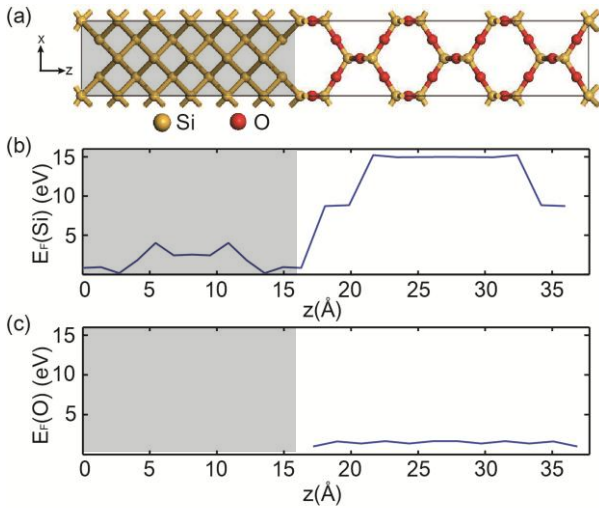


Fig 2. (a) Si/SiO<sub>2</sub> 계면 모델, (b) Si defect의 formation energy, (c) O defect의 formation energy. 그림자는 Si 층 영역이다.