



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2025-0107320
(43) 공개일자 2025년07월14일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
G16C 10/00 (2019.01) C23C 16/455 (2006.01)
G16C 20/20 (2019.01) G16C 20/80 (2019.01)
(52) CPC특허분류
G16C 10/00 (2019.02)
C23C 16/45553 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2024-0001455
(22) 출원일자 2024년01월04일
심사청구일자 2024년01월04일

(71) 출원인
한국기술교육대학교 산학협력단
충청남도 천안시 동남구 병천면 충절로 1600 (한국기술교육대학교내)
(72) 발명자
김영철
충청남도 천안시 동남구 청당4로 60, 108동 1403호 (청당동, 청당동 한양수자인 블루시티)
김선훈
전라북도 정읍시 북면 화평길 236
이나영
경기도 김포시 유현로 19, 102동 503호
(74) 대리인
특허법인 강인

전체 청구항 수 : 총 7 항

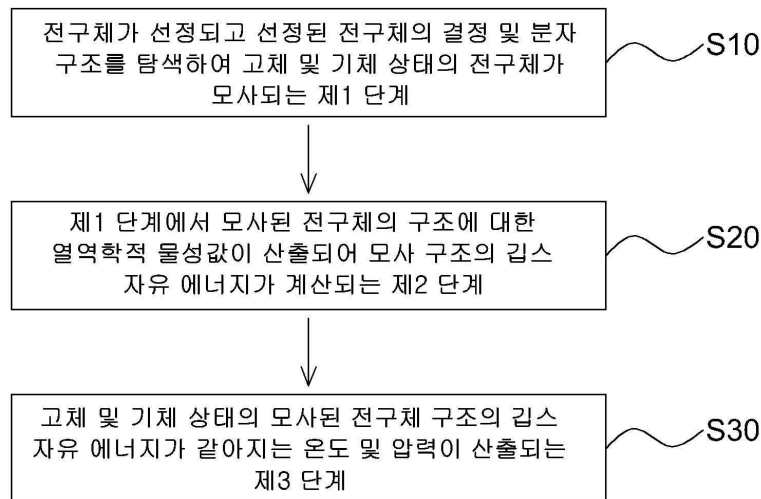
(54) 발명의 명칭 원자층 증착용 전구체의 증기압 추정 방법

(57) 요약

본 발명은 컴퓨터 시뮬레이션을 이용하여 원자층 증착에 사용하는 전구체의 고체 및 기체 상태의 깁스 자유 에너지(Gibbs free energy)를 계산하여 전구체의 증기압을 추정하는 방법을 개시한다.

본 발명의 원자층 증착용 전구체의 증기압 추정 방법은, 전구체가 선정되고 선정된 전구체의 결정 및 분자 구조를 탐색하여 고체 및 기체 상태의 전구체가 모사되는 제1 단계; 상기 제1 단계에서 모사된 전구체의 구조에 대한 열역학적 물성값이 산출되어 모사 구조의 깁스 자유 에너지가 계산되는 제2 단계; 및 고체 및 기체 상태의 상기 제2 단계의 모사된 전구체 구조의 깁스 에너지가 같아지는 온도 및 압력이 산출되는 제3 단계;를 포함한다.

대표도 - 도1



(52) CPC특허분류

G16C 20/20 (2019.02)

G16C 20/80 (2019.02)

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호	1345370812
과제번호	2021RIS-004
부처명	교육부
과제관리(전문)기관명	한국연구재단
연구사업명	지자체대학협력기반지역혁신사업
연구과제명	(대전세종충남지역혁신플랫폼)충남대학교
과제수행기관명	(대전세종충남지역혁신플랫폼)충남대학교
연구기간	2023.04.01 ~ 2024.02.29

명세서

청구범위

청구항 1

전구체가 선정되고 선정된 전구체의 결정 및 분자 구조를 탐색하여 고체 및 기체 상태의 전구체가 모사되는 제1 단계;

상기 제1 단계에서 모사된 전구체의 구조에 대한 열역학적 물성값이 산출되어 모사 구조의 깁스 자유 에너지가 계산되는 제2 단계; 및

고체 및 기체 상태의 상기 제2 단계의 모사된 전구체 구조의 깁스 자유 에너지가 같아지는 온도 및 압력이 산출되는 제3 단계;를 포함하는 원자층 증착용 전구체의 증기압 추정 방법.

청구항 2

청구항 1에 있어서,

상기 제1 단계에서,

상기 고체 상태의 전구체는 유닛 셀(unit cell) 또는 슈퍼셀(supercell)을 사용하여 모사하고, 상기 기체 상태의 전구체는 $15 \times 15 \times 15 \text{ \AA}^3$ 크기 이상의 셀을 사용하여 모사하는 것을 특징으로 하는 원자층 증착용 전구체의 증기압 추정 방법.

청구항 3

청구항 1에 있어서,

상기 제2 단계의 열역학적 물성값은 DFT 에너지, 영점 에너지, 온도에 따른 엔탈피 변화 및 엔트로피를 포함하는 것을 특징으로 하는 원자층 증착용 전구체의 증기압 추정 방법.

청구항 4

청구항 1에 있어서,

상기 제2 단계에서,

상기 깁스 자유 에너지는 하기의 식 2에 의해 계산되는 것을 특징으로 하는 원자층 증착용 전구체의 증기압 추정 방법.

(식 2)

$$G = E + ZPE + \int C_p dT - T(S_t + S_r + S_v)$$

여기서, E는 DFT 에너지, ZPE는 영점 에너지, $\int C_p dT$ 는 온도에 따른 엔탈피 변화, S_t 는 병진 엔트로피(translational entropy), S_r 은 회전 엔트로피(rotational entropy), S_v 는 진동 엔트로피(vibrational entropy), T는 온도를 나타낸다.

청구항 5

청구항 4에 있어서,

상기 병진 엔트로피는 하기 식 3에 의해, 상기 회전 엔트로피는 하기 식 4에 의해, 상기 진동 엔트로피는 하기 식 5에 의해 계산되는 것을 특징으로 하는 원자층 증착용 전구체의 증기압 추정 방법.

(식 3)

$$S_t = k_B \left[\ln \left[\left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \frac{k_B T}{P} \right] + \frac{5}{2} \right]$$

(식 4)

$$S_r = k_B \left[\ln \left[\left(\frac{8\pi^2 k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \frac{\sqrt{\pi I_A I_B I_C}}{\sigma} \right] + \frac{3}{2} \right]$$

(식 5)

$$S_v = k_B \sum_i^{DOF} \left[\frac{h\omega_i}{k_B T (e^{h\omega_i/k_B T} - 1)} - \ln(1 - e^{-h\omega_i/k_B T}) \right]$$

여기서, h 는 플랑크 상수, m 은 분자의 질량, k_B 는 볼츠만 상수(Boltzmann constant), P 는 분자의 압력, I_A , I_B , I_C 는 분자의 주관성 모멘트, σ 는 분자의 대칭 수, DOF 는 분자의 자유도, i 는 진동 모드의 지수, ω 는 진동 모드의 각주파수, T 는 온도를 나타낸다.

청구항 6

전구체가 선정되고 선정된 전구체의 결정 및 분자 구조를 탐색하여 고체 및 기체 상태의 전구체가 모사되는 모사 모듈;

상기 모사 모듈에서 모사된 전구체의 구조에 대한 열역학적 물성값이 산출되어 모사 구조의 깁스 자유 에너지가 계산되는 에너지 계산 모듈; 및

고체 및 기체 상태에서 상기 에너지 계산 모듈의 모사된 전구체 구조의 깁스 자유 에너지가 같아지는 온도 및 압력이 산출되는 증기압 추정 모듈;을 포함하는 원자층 증착용 전구체의 증기압 추정 시스템.

청구항 7

전구체가 선정되고, 선정된 전구체의 결정 및 분자 구조를 탐색하여 고체 및 기체 상태의 전구체가 모사되는 모사 모듈;

상기 모사 모듈에서 모사된 전구체의 구조에 대한 열역학적 물성값이 산출되어 모사 구조의 깁스 자유 에너지가 계산되는 에너지 계산 모듈; 및

고체 및 기체 상태에서 상기 에너지 계산 모듈의 모사된 전구체 구조의 깁스 자유 에너지가 같아지는 온도 및 압력이 산출되는 증기압 추정 모듈;을 포함하는 원자층 증착용 전구체의 증기압 추정 시스템을 프로그래밍으로 구동하기 위한 프로그래밍을 저장한 저장 매체.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 원자층 증착용 전구체의 증기압 추정 방법에 관한 것으로, 보다 상세하게는 컴퓨터 시뮬레이션을 이용하여 원자층 증착에 사용하는 전구체의 고체 및 기체 상태의 깁스 자유 에너지(Gibbs free energy)를 계산하여 전구체의 증기압을 추정하는 방법에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 반도체 제조공정 중 증착 공정은 증발(evaporation) 또는 스퍼터링(sputtering)과 같이 물리적인 방법을 이용하는 물리기상증착법(Physical Vapor Deposition, PVD)과 기판의 표면에서 일어나는 화학반응을 이용하는 화학기상증착법(Chemical Vapor Deposition, CVD)으로 크게 구분할 수 있다. 화학기상증착법은 물리기상증착법에 비하여 막질이 우수하고 균일도가 높은 박막을 증착할 수 있는 장점을 가지고 있고, 계단 도포성(step coverage) 또

한 우수하기 때문에 반도체 제조공정에 널리 사용되고 있다.

[0003] 최근에는 이러한 종래의 증착방법에 비하여 막질이 우수하고, 막의 균일도와 계단 도포성이 매우 뛰어난 박막증착이 가능한 원자층 증착법(Atomic Layer Deposition, ALD)의 적용 범위가 넓어지고 있다. 특히, 원자층 증착법은 결함이 적은 막질이 요구되는 게이트 산화층, 커패시터 유전층 및 확산방지막 등의 증착공정에 이용되고 있다.

[0004] 원자층 증착 공정은 전구체 주입, 전구체 퍼지, 반응물 주입 그리고 반응물 퍼지의 반복 공정으로 구성되며, 전구체 주입 공정은 반응 챔버 내에 위치한 기판 표면에 흡착되는 전구체를 주입하는 공정으로, 전구체는 추가적으로 공급되는 반응물과 화학반응하여 최종 물질로 변화하는 원료물질로, 반응물보다 먼저 기판 표면에 흡착되어 원자층이 형성될 수 있는 기본 층을 형성한다. 전구체 퍼지 공정은 전구체와 반응하지 않는 퍼지 가스를 주입해 잔여 전구체를 반응 챔버 외부로 배출하는 공정으로, 반응 챔버 내에 잔여 전구체가 존재하면 반응물과 원치 않는 반응을 일으킬 수 있기 때문에 반응물 주입 전 잔여 전구체를 제거한다. 반응물 주입 공정은 반응 챔버 내로 반응물을 주입해 표면에 흡착된 전구체와 결합되도록 하는 공정으로, 전구체와 반응물의 반응을 통해 원자층을 형성한다. 반응물 퍼지 공정은 반응물 주입이 완료된 후 반응 챔버 내에 존재하는 잔여 반응물을 외부로 배출하는 공정이다.

[0005] 원자층 증착에서는 전구체의 선별이 중요한데, 원자층 증착을 위한 전구체를 선별하기 위해서는 전구체의 증기압을 통해 적합한 전구체를 선별할 수 있다. 증기압이 너무 낮은 전구체는 전구체로 사용할 수 없기 때문에 전구체의 개발 또는 선별 과정에서 전구체의 증기압을 사전에 미리 산출하는 것이 중요하다.

선행기술문헌

특허문헌

- [0006] (특허문헌 0001) 대한민국 등록특허공보 제10-1323885호
(특허문헌 0002) 대한민국 등록특허공보 제10-2184971호
(특허문헌 0003) 대한민국 공개특허공보 제10-2023-0001521호

비특허문헌

- [0007] (비특허문헌 0001) I. Nuta, R. Viro, E. Fischer, C. Chatillon, Thermodynamic assessment of RuO₄ oxide, Calphad, 80 (2023) 102508
(비특허문헌 0002) Y. Koda, Boiling Points and Ideal Solutions of Ruthenium and Osmium Tetraoxides, J. Chem. Soc., Chem. Commun., 17 (1986) 1347-1378.

발명의 내용

해결하려는 과제

- [0008] 본 발명은 상기와 같은 문제점을 해결하기 위한 것으로, 컴퓨터 시뮬레이션을 이용하여 원자층 증착에 사용하는 전구체의 고체 및 기체 상태의 깁스 자유 에너지(Gibbs free energy)를 계산하여 전구체의 증기압을 추정하는 방법을 제공하는 것을 목적으로 한다.

과제의 해결 수단

- [0009] 상기와 같은 목적을 달성하기 위하여 본 발명의 일 실시 예에 의한 원자층 증착용 전구체의 증기압 추정 방법은, 전구체가 선정되고 선정된 전구체의 결정 및 분자 구조를 탐색하여 고체 및 기체 상태의 전구체가 모사되는 제1 단계; 상기 제1 단계에서 모사된 전구체의 구조에 대한 열역학적 물성값이 산출되어 모사 구조의 깁스 자유 에너지가 계산되는 제2 단계; 및 고체 및 기체 상태의 상기 제2 단계의 모사된 전구체 구조의 깁스 자유 에너지가 같아지는 온도 및 압력이 산출되는 제3 단계;를 포함한다.

- [0010] 상기 제1 단계에서, 상기 고체 상태의 전구체는 유닛 셀(unit cell) 또는 슈퍼셀(supercell)을 사용하여 모사하

고, 상기 기체 상태의 전구체는 $15 \times 15 \times 15 \text{ \AA}^3$ 크기 이상의 셀을 사용하여 모사하는 것을 특징으로 한다.

[0011] 상기 제2 단계에서 모사된 구조의 열역학적 물성값은 DFT 에너지, 영점 에너지, 온도에 따른 엔탈피 변화 및 엔트로피인 것을 특징으로 한다.

[0012] 상기 제2 단계에서, 상기 깁스 자유 에너지는 하기의 식 2에 의해 계산되는 것을 특징으로 한다.

[0013] (식 2)

$$G = E + ZPE + \int C_p dT - T(S_t + S_r + S_v)$$

[0014] 여기서, E는 DFT 에너지, ZPE는 영점 에너지, $\int C_p dT$ 는 온도에 따른 엔탈피 변화, S_t 는 병진 엔트로피(translational entropy), S_r 은 회전 엔트로피(rotational entropy), S_v 는 진동 엔트로피(vibrational entropy), T는 온도를 나타낸다.

[0016] 상기 병진 엔트로피는 하기 식 3에 의해, 상기 회전 엔트로피는 하기 식 4에 의해, 상기 진동 엔트로피는 하기 식 5에 의해 계산되는 것을 특징으로 한다.

[0017] (식 3)

$$S_t = k_B \left[\ln \left[\left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \frac{k_B T}{P} \right] + \frac{5}{2} \right]$$

[0019] (식 4)

$$S_r = k_B \left[\ln \left[\left(\frac{8\pi^2 k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \frac{\sqrt{\pi I_A I_B I_C}}{\sigma} \right] + \frac{3}{2} \right]$$

[0021] (식 5)

$$S_v = k_B \sum_i^{DOF} \left[\frac{h\omega_i}{k_B T (e^{h\omega_i/k_B T} - 1)} - \ln(1 - e^{-h\omega_i/k_B T}) \right]$$

[0023] 여기서, h는 플랑크 상수, m은 분자의 질량, k_B 는 볼츠만 상수(Boltzmann constant), P는 분자의 압력, I_A , I_B , I_C 는 분자의 주관성 모멘트, σ 는 분자의 대칭 수, DOF는 분자의 자유도, i는 진동 모드의 지수, ω 는 진동 모드의 각주파수, T는 온도를 나타낸다.

[0024] 본 발명의 일 실시 예에 의한 원자층 증착용 전구체의 증기압 추정 시스템은 전구체가 선정되고, 선정된 전구체의 결정 및 분자 구조를 탐색하여 고체 및 기체 상태의 전구체가 모사되는 모사 모듈; 상기 모사 모듈에서 모사된 전구체의 구조에 대한 열역학적 물성값이 산출되어 모사 구조의 깁스 자유 에너지가 계산되는 에너지 계산 모듈; 및 고체 및 기체 상태에서 상기 에너지 계산 모듈의 모사된 전구체 구조의 깁스 자유 에너지가 같아지는 온도 및 압력이 산출되는 증기압 추정 모듈;을 포함한다.

[0025] 본 발명의 일 실시 예에 의한 원자층 증착용 전구체의 증기압 추정 시스템을 프로그래밍으로 구동하기 위한 프로그래밍을 저장한 저장 매체는 전구체가 선정되고, 선정된 전구체의 결정 및 분자 구조를 탐색하여 고체 및 기체 상태의 전구체가 모사되는 모사 모듈; 상기 모사 모듈에서 모사된 전구체의 구조에 대한 열역학적 물성값이 산출되어 모사 구조의 깁스 자유 에너지가 계산되는 에너지 계산 모듈; 및 고체 및 기체 상태에서 상기 에너지 계산 모듈의 모사된 전구체 구조의 깁스 자유 에너지가 같아지는 온도 및 압력이 산출되는 증기압 추정 모듈;을 포함한다.

발명의 효과

[0026] 상술한 바와 같이, 본 발명은 실제 실험을 통해 증기압을 측정하는 것이 아니기 때문에 전구체를 개발하기 전에

미리 전구체의 증기압을 알 수 있어 비용과 시간이 절약되는 효과가 있다.

도면의 간단한 설명

- [0027] 도 1은 본 발명의 일 실시 예에 의한 원자층 증착용 전구체의 증기압 추정 방법의 순서도이다.
- 도 2(a)는 본 발명의 원자층 증착용 전구체의 증기압 추정 방법에서 RuO_4 의 고체 상태가 모사된 예시도이고, 도 2(b)는 본 발명의 원자층 증착용 전구체의 증기압 추정 방법에서 RuO_4 의 기체 상태가 모사된 예시도이다.
- 도 3은 본 발명의 원자층 증착용 전구체의 증기압 추정 방법에서 고체(검은색 실선) 및 기체(빨간색 실선) 상태의 RuO_4 의 깁스 자유 에너지가 온도에 따라 산출된 예시도이다.
- 도 4는 실험에 의한 증기압(흰색 및 회색 도형) 및 본 발명의 일 실시 예에 의한 증기압(실선 및 검은색 도형)을 나타낸다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0028] 본 발명은 다양한 변경을 가할 수 있고 여러 가지 실시 예를 가질 수 있는 바, 특정 실시 예들을 도면에 예시하고 상세한 설명에 설명하고자 한다. 그러나, 이는 본 발명을 특정한 실시 형태에 대해 한정하려는 것이 아니며, 본 발명의 사상 및 기술 범위에 포함되는 모든 변경, 균등물 내지 대체물을 포함하는 것으로 이해되어야 한다. 각 도면을 설명하면서 유사한 참조 부호를 유사한 구성요소에 대해 사용하였다.
- [0029] 제1, 제2, A, B 등의 용어는 다양한 구성요소들을 설명하는 데 사용될 수 있지만, 상기 구성요소들은 상기 용어들에 의해 한정되어서는 안 된다. 상기 용어들은 하나의 구성요소를 다른 구성요소로부터 구별하는 목적으로만 사용된다.
- [0030] 예를 들어, 본 발명의 권리 범위를 벗어나지 않으면서 제1 구성요소는 제2 구성요소로 명명될 수 있고, 유사하게 제2 구성요소도 제1 구성요소로 명명될 수 있다. "및/또는"이라는 용어는 복수의 관련된 기재된 항목들의 조합 또는 복수의 관련된 기재된 항목들 중의 어느 항목을 포함한다.
- [0031] 어떤 구성요소가 다른 구성요소에 "연결되어" 있다거나 "접속되어" 있다고 언급된 때에는, 그 다른 구성요소에 직접적으로 연결되어 있거나 또는 접속되어 있을 수도 있지만, 중간에 다른 구성요소가 존재할 수도 있다고 이해되어야 할 것이다. 반면에, 어떤 구성요소가 다른 구성요소에 "직접 연결되어" 있다거나 "직접 접속되어" 있다고 언급된 때에는, 중간에 다른 구성요소가 존재하지 않는 것으로 이해되어야 할 것이다.
- [0032] 본 출원에서 사용한 용어는 단지 특정한 실시 예를 설명하기 위해 사용된 것으로, 본 발명을 한정하려는 의도가 아니다. 단수의 표현은 문맥상 명백하게 다르게 뜻하지 않는 한, 복수의 표현을 포함한다. 본 출원에서, "포함하다" 또는 "가지다" 등의 용어는 명세서상에 기재된 특징, 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부품 또는 이들을 조합한 것이 존재함을 지정하려는 것이지, 하나 또는 그 이상의 다른 특징들이나 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부품 또는 이들을 조합한 것들의 존재 또는 부가 가능성을 미리 배제하지 않는 것으로 이해되어야 한다.
- [0033] 다르게 정의되지 않는 한, 기술적이거나 과학적인 용어를 포함해서 여기서 사용되는 모든 용어들은 본 발명이 속하는 기술 분야에서 통상의 지식을 가진 자에 의해 일반적으로 이해되는 것과 동일한 의미를 가지고 있다. 일반적으로 사용되는 사전에 정의되어 있는 것과 같은 용어들은 관련 기술의 문맥 상 가지는 의미와 일치하는 의미를 가지는 것으로 해석되어야 하며, 본 출원에서 명백하게 정의하지 않는 한, 이상적이거나 과도하게 형식적인 의미로 해석되지 않는다.
- [0035] 이하에서는 본 발명의 일 실시 예에 의한 원자층 증착용 전구체의 증기압 추정 방법에 대해 도면을 참조하여 설명한다. 도 1은 본 발명의 일 실시 예에 의한 원자층 증착용 전구체의 증기압 추정 방법의 순서도이다. 도 1을 참조하면, 본 발명의 일 실시 예에 의한 원자층 증착용 전구체의 증기압 추정 방법은 하기의 세 단계로 구성될 수 있다.
- [0036] 제1 단계(S10)는 전구체가 선정되고, 선정된 전구체의 결정 및 분자 구조를 탐색하여 고체 및 기체 상태의 전구체가 모사되는 단계이다. 원자층 증착용 공정에 적합한 전구체가 선정되고 전구체의 가장 안정한 결정 및 분자 구조가 탐색된다. 예를 들어, 사용하려는 전구체가 사산화 루테튬(RuO_4)이면 사산화 루테튬의 가장 안정한 결정

구조는 tetragonal $P4_2/mnm$ 이다.

[0037] 고체 및 기체 상태의 전구체의 깁스 자유 에너지를 계산하기 위하여 전구체의 구조를 모사하여야 한다. 고체 상태의 전구체는 유닛 셀(unit cell) 혹은 슈퍼셀(supercell)을 사용하여 모사하고, 기체 상태의 전구체는 $15 \times 15 \times 15 \text{ \AA}^3$ 크기 이상의 셀을 사용하여 모사하는 것이 바람직하다. 모사는 컴퓨터 시뮬레이션 프로그램에 의하고 컴퓨터 시뮬레이션 프로그램을 통해 전구체의 고체 및 기체 상태가 모사된다. 본 발명의 일 실시 예에서는 VESTA 또는 VASP을 컴퓨터 시뮬레이션 프로그램으로 사용할 수 있다. 컴퓨터 시뮬레이션 프로그램은 구조 모델, 전자/핵 밀도와 같은 체적 데이터, 결정 형태를 위한 3D 시각화 프로그램으로 전구체의 분자 및 결정 구조를 시각화한다. 고체 상태의 전구체는 일반적으로 유닛 셀로 모사할 수 있고, 유닛 셀보다 큰 단위가 필요한 경우에는 슈퍼셀을 사용하여 모사한다. 기체 상태의 전구체는 원자의 위치가 고정되지 않기 때문에 $15 \times 15 \times 15 \text{ \AA}^3$ 크기 이상의 셀을 사용하여 기체 상태의 전구체를 모사하는 것이 바람직하다. 도 2(a)는 본 발명의 원자층 증착용 전구체의 증기압 추정 방법에서 RuO_4 의 고체 상태가 모사된 예시도이고, 도 2(b)는 본 발명의 원자층 증착용 전구체의 증기압 추정 방법에서 RuO_4 의 기체 상태가 모사된 예시도이다.

[0038] 제2 단계(S20)는 제1 단계(S10)에서 모사된 구조의 열역학적 물성값이 산출되어 모사 구조의 깁스 자유 에너지(Gibbs free energy)가 계산되는 단계이다. 여기서, 열역학적 물성값은 DFT(Density Functional Theory) 에너지, 영점 에너지, 온도에 따른 엔탈피 변화 및 엔트로피이다. 열역학적 물성값은 깁스 자유 에너지 산출에 필요하고, 제1 단계에서 사용한 컴퓨터 시뮬레이션 프로그램을 통해 DFT 에너지, 영점 에너지, 온도에 따른 엔탈피 변화 및 엔트로피는 계산될 수 있다.

[0039] 고체 상태 및 기체 상태 전구체의 깁스 자유 에너지 G는 하기의 식 1에 의해 계산된다.

[0040] (식 1)

$$[0041] \quad G = H - TS$$

[0042] 여기서, H는 엔탈피, T는 온도, S는 엔트로피이다. H는 DFT 에너지, 영점 에너지, 온도에 따른 엔탈피 변화의 합으로 나타낼 수 있으며, S는 병진 엔트로피, 회전 엔트로피, 진동 엔트로피의 합으로 나타낼 수 있다. 따라서, 모사 구조의 깁스 자유 에너지(Gibbs free energy) G는 하기 식 2로 계산된다.

[0043] (식 2)

$$[0044] \quad G = E + ZPE + \int C_p dT - T(S_t + S_r + S_v)$$

[0045] 여기서, E는 DFT 에너지, ZPE는 영점 에너지, $\int C_p dT$ 는 온도에 따른 엔탈피 변화, S_t 는 병진 엔트로피(translational entropy), S_r 은 회전 엔트로피(rotational entropy), S_v 는 진동 엔트로피(vibrational entropy), T는 온도를 나타낸다.

[0046] 또한, 병진 엔트로피는 하기 식 3에 의해, 상기 회전 엔트로피는 하기 식 4에 의해, 상기 진동 엔트로피는 하기 식 5에 의해 계산된다. 고체의 경우는 병진 엔트로피만 계산하면 되고, 기체의 경우에는 병진 엔트로피, 회전 엔트로피 및 진동 엔트로피의 계산이 모두 필요하다.

[0047] (식 3)

$$[0048] \quad S_t = k_B \left[\ln \left[\left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \frac{k_B T}{P} \right] + \frac{5}{2} \right]$$

[0049] (식 4)

$$[0050] \quad S_r = k_B \left[\ln \left[\left(\frac{8\pi^2 k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \frac{\sqrt{\pi I_A I_B I_C}}{\sigma} \right] + \frac{3}{2} \right]$$

[0051] (식 5)

$$S_v = k_B \sum_i^{DOF} \left[\frac{h\omega_i}{k_B T (e^{h\omega_i/k_B T} - 1)} - \ln(1 - e^{-h\omega_i/k_B T}) \right]$$

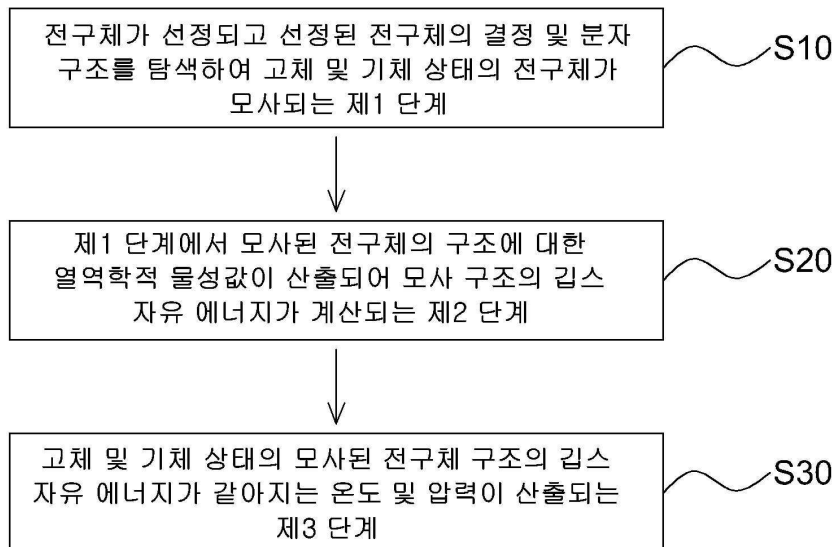
[0052] 여기서, h 는 플랑크 상수, m 은 분자의 질량, k_B 는 볼츠만 상수(Boltzmann constant), P 는 분자의 압력, I_A , I_B , I_C 는 분자의 주관성 모멘트, σ 는 분자의 대칭 수, DOF 는 분자의 자유도, i 는 진동 모드의 지수, ω 는 진동 모드의 각주파수, T 는 온도를 나타낸다.

[0053] 제3 단계(S30)는 고체 및 기체 상태의 모사 구조의 깁스 자유 에너지가 같아지는 온도 및 압력이 산출되는 단계이다. 도 3은 본 발명의 원자층 증착용 전구체의 증기압 추정 방법에서 고체(검은색 실선) 및 기체(빨간색 실선) 상태의 RuO_4 의 깁스 자유 에너지가 온도에 따라 산출된 예시도이다. 도 3을 참조하면, 고체와 기체의 깁스 자유 에너지가 같아지는 온도, 즉 승화 온도 값을 찾는 것을 보여준다. 본 발명은 제1 단계(S10) 내지 제3 단계(S30)를 통해 전구체를 컴퓨터 시뮬레이션 프로그램에 의해 모사하고, 모사된 전구체의 고체 상태 및 기체 상태의 깁스 자유 에너지를 계산하고, 온도를 변화하면서 고체 상태 및 기체 상태의 깁스 자유 에너지가 같아지는 온도 및 압력을 산출하여 전구체의 증기압을 추정하게 된다. 도 4는 실험에 의한 증기압(흰색 및 회색 도형) 및 본 발명의 일 실시 예에 의한 증기압(실선 및 검은색 도형)을 나타낸다. 도 4를 참조하면, 본 발명에 의해 계산된 증기압이 실제 실험에 의해 구해진 증기압에 접근하는 것을 확인할 수 있다. 따라서, 본 발명의 제1 단계(S10) 내지 제3 단계(S30)에 의한다면 전구체를 직접 제작하여 실제 실험을 통해 증기압을 구하지 않고도 컴퓨터 시뮬레이션 프로그램 및 깁스 자유 에너지 계산에 의해 증기압을 추정할 수 있다.

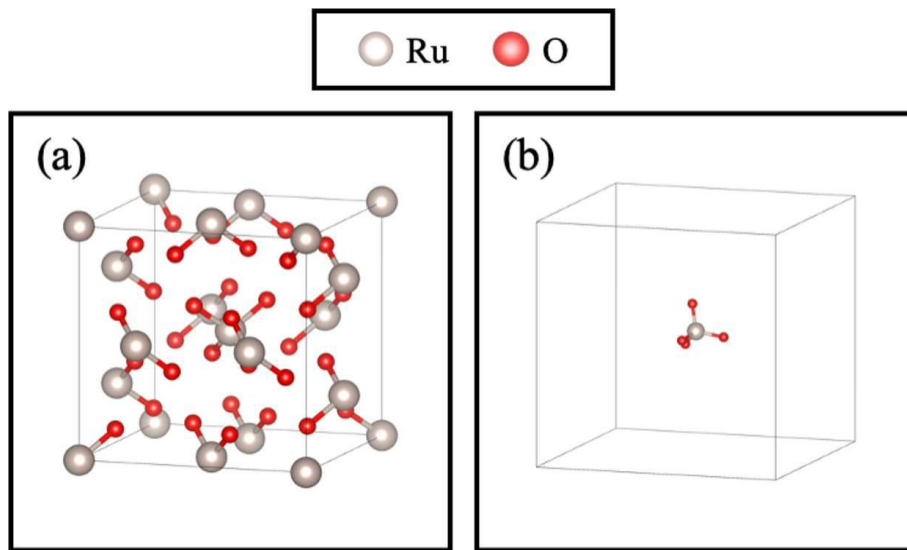
[0054] 본 발명은 상기 실시 예들에 한정되는 것이 아니라 서로 다른 다양한 형태로 제조될 수 있으며, 본 발명이 속하는 기술 분야에서 통상의 지식을 가진 자는 본 발명의 기술적 사상이나 필수적인 특징을 변경하지 않고서 다른 구체적인 형태로 실시될 수 있다는 것을 이해할 수 있을 것이다. 그러므로 이상에서 기술한 실시 예들은 모든 면에서 예시적인 것이며 한정적이 아닌 것으로 이해해야만 한다.

도면

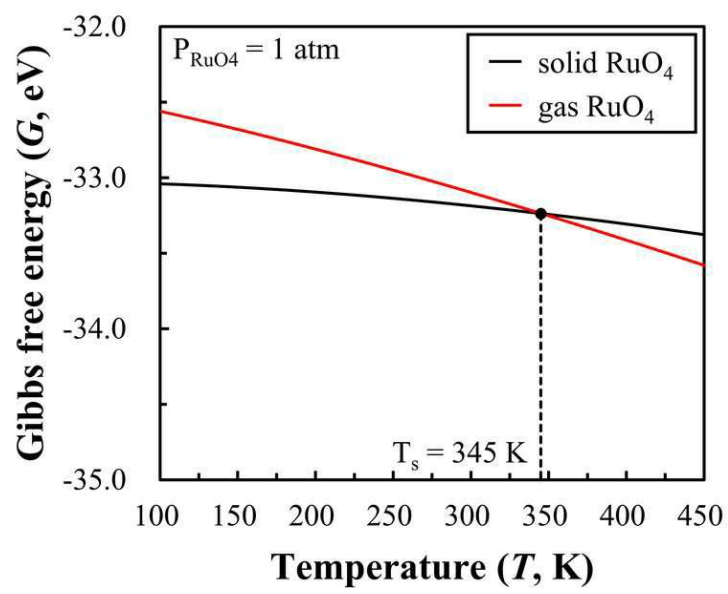
도면1



도면2



도면3



도면4

