

화학기상 성장법에 의한 실리콘 부착에 관한 수치해석

김 인*·백병준**·윤정모***·이철로****

Numerical Analysis of Silicon Deposition in CVD Reactor

In Kim, Byung Joon Back, Jeong Mo Yoon, Cheul Ro Lee

Key Words: CVD (화학증착법), Deposition Rate (부착율), Deposition thickness (부착두께), Mass Fraction (질량분율), Susceptor (반응부), Uniformity (균일도)

Abstract

The fluid flow, heat transfer and the local mass fraction of chemical species in the chemical vapor deposition(CVD) manufacturing process are numerically studied. The deposition of silicon from dilute silane is hydrogen carrier gas in a horizontal CVD reactor is investigated. The effect of inlet carrier gas velocity, mass fraction of silane, susceptor angle on the deposition thickness and uniformity was represented.

기 호 설 명

- H : 채널의 높이 (m)
- L : 채널의 반응영역 길이 (m)
- Nu : Nusselt 수
- P_{silane} : 사일렌 가스의 분압 (pa)
- Re : Reynolds 수 ($=\rho u_{\infty}H/\mu$)
- T_s : 반응면 온도 (K)
- T_c : 냉각면 온도 (K)
- u : x축 방향의 속도 (m/s)
- u_{∞} : 입구 유입 속도 (m/s)
- ρ : 유체의 밀도 (kg/m^3)
- γ : 반응면의 기울기 ($^{\circ}$)
- μ : 유체의 점성계수($\text{kg}/\text{m sec}$)

1. 서 론

반도체 제작공정에서 폭넓게 사용되는 화학 부

착법(Cheical Vapor Deposition)은 반응물질을 포함한 가스를 유도전류로 가열되는 반응부(susceptor)를 통과시켜 웨이퍼와의 물질전달을 통하여 박막을 형성하는 방법으로 정의할 수 있으며 최소의 공업적 응용은 19세기말엽의 백열전구 산업에서 찾을 수 있다.⁽¹⁾

반도체 제조는 화학 부착공정에 의해 도체, 반도체 및 유전체 박막을 모재인 웨이퍼 위에 생성하고 필요한 형상대로 깎아내는 식각(etching)과정을 주요 공정으로 한다. 단결정 구조의 박막은 압력 0.1~1.0 기압, 온도 1000K 내외의 작업 조건에서 생성되며, 반응기의 형상, 가스의 유량 및 속도 분포, 열적 경계조건, 반응 가스의 성분 등의 매개변수들은 부착되는 막의 균일성과 성장률에 큰 영향을 미친다. 따라서 웨이퍼의 부착율과 균일성을 높이기 위해서는 CVD 반응기의 물리적 현상 규명을 통한 매개변수들의 최적 운전조건을 구하는 것이 필수적이다.⁽²⁾

일반적인 수평 CVD 반응기의 구성은 수평채널 내에 가열되는 반응부(susceptor)와 반응 영역 앞에 반응물의 침전을 막기 위해 냉각된 입구부분으로 되어 있다. 이러한 반응기 내부에서 일어나

* 전북대학교 대학원 정밀기계공학과
 ** 전북대학교 기계공학부
 *** 전북대학교 신소재공학부
 **** 전북대학교 신소재공학부

는 반응은 채널의 형상과 여러 가지 유입조건에 따라 '부착율이 변하게 된다.'³⁾ 반응기의 형상에 관한 연구는 Jensen 등 과 Evans 와 Greif⁴⁾에 의해 이루어 지고있다.

최근에는 전산 유체역학의 발달로 실제 CVD 공정과 가깝게 수치모사를 수행하는 연구가 많이 진행되고 있다. Chiu⁵⁾등은 2차원에서 반응면을 주 유동방향과 같은 방향과 반대 방향으로 이동시키며 연속적인 CVD 시스템의 부착율을 해석한 결과, 반응면의 이동은 증착율에 크게 영향을 미치지 않는다고 하였다. Eversteyn⁶⁾은 채널내에서 발생하는 경계층에 관한 연구를 하여, 채널내의 온도 분포에 관한 경계층 두께를 실험적으로 분석한바 있다.

CVD 과정에서 균일성과 부착율은 내부에서 유동하는 원료가스의 유동특성에 따라 큰 차이를 보이게 된다. 따라서 CVD 반응기 설계에 있어서 반응기 내부의 열전달 및 유동특성을 규명하는 것이 먼저 선행되어야 한다.

본 연구에서는 반응기의 형상, 즉 반응면의 경사각(γ)과 온도, 원료가스의 유입조건을 변화시키며 부착율에 미치는 영향을 규명하고자 하였다.

2. 수치적 연구

2.1 해석모델

본 연구에서 채택한 계산모델의 기하학적인 형상은 Fig. 1 과 같이 기술어진 고온부를 갖는 2차원 수평 채널을 사용하였다. 반응로의 구성은 미반응 영역인 입구영역과 출구영역, 그리고 고온의 반응영역으로 구분할 수 있다. 채널의 높이 H는 50mm이고 길이 L은 200~750mm로 변화시켰다. 반응이 일어나는 반응면(susceptor)의 온도 T_s 는 1000~1300K의 범위이다. 사일렌(silane, SiH_4)을 사용한 실리콘 부착을 고찰하기 위하여, 사일렌을 수송하는 기체로는 1기압의 수소 가스를 사

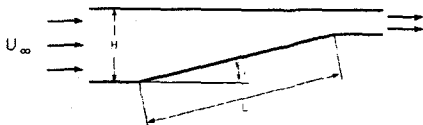


Fig.1 Schematic of Two-Dimensional CVD model

용하였다. 이때 가스의 속도는 0.1~0.7m/s로 변화시켜 그 영향을 검토하였다. 반응부는 0~10°의 각도로 변화시켜 유속 증가로 반응면에 부착되는 실리콘(Si) 두께의 균일성을 검토한다. 또한 입구를 통해 유입되는 가스의 사일렌과 수소 가스의 질량분율과 유속을 변화시켜 검토하였다.

2.2 해석방법 및 경계조건

반응기내에서의 유동특성과 화학반응을 고찰하기 위하여 유한체적 프로그램인 FLUENT를 사용하여 해석하였다. 반응면(susceptor)을 통한 열전달과 원료가스의 유동은 2차원 정상상태 층류유동에 대한 일반적인 질량 보존, 운동량 보존, 에너지식을 적용하였으며 화학종(chemical species)에 대한 보존 방정식은 i' 번째 화학종에 대한 대류-확산식의 해를 통하여 국소 질량분율(local mass fraction)을 예측할 수 있는 다음의 식을 적용하였다.⁷⁾

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho m_i) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i m_i) = -\frac{\partial}{\partial x_i} J_{i,i} + R_i + S_i \quad (1)$$

여기에서 농도 기울기에 의한 확산 플럭스는

$$J_{i,i} = -\rho D_{i,m} \frac{\partial m_i}{\partial x_i} \quad (2)$$

이고, $D_{i,m}$ 은 화합물에서 화학종 i 의 확산계수이다. R_i 는 생성되거나 소멸되는 화학종의 질량분율로서 전체관련 화학종의 반응에 걸쳐 (3)식으로 계산되며 반응시 i' 화학종의 생성율은 Arrhenius Rate 모델을 적용하여 계산하였다. 이 식의 자세한 내용은 FLUENT Manual에 설명되어 있다.

$$R_i = \sum_k R_{i,k} \quad (3)$$

운동량, 에너지식 등 보존식의 계산을 위한 경계조건은 다음과 같다. 반응기의 위쪽 면은 물에 의해 냉각된다는 가정하에 등온 ($T_c=300\text{K}$)으로 유지시키고, 아래 면은 단열조건 가정하였다. 반응이 일어나는 고온부 영역은 1000~1300K 범위의 온도로서 등온조건을 사용하였다. 반응면에서

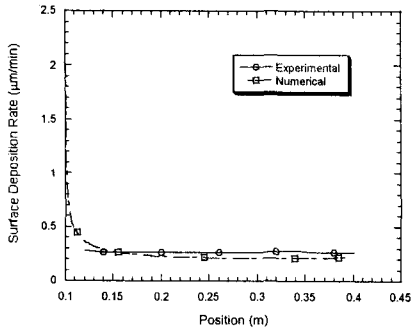


Fig. 2 Comparisons of current result with experimental data for silicon deposition

의 복사와 채널내의 부력효과는 무시하였다.⁽⁸⁾

입구가스의 온도, 농도, 속도는 균일한 값이며 출구에서는 그 변화율을 0으로 하였다.

3. 해석결과 및 고찰

수소가스를 수송가스로한 사일렌(SiH₄)으로부터 반응면에 부착된 실리콘의 두께에 대한 해석을 수행하였다. Fig.2 는 해의 타당성을 검증하기 위하여 유사한 조건에서 수행된 실험결과⁽⁶⁾와 비교한 것이다.

경사도 2.9°, P_{silane}=124.1Pa, Re=12.3 에 대한 수치해석에 의한 결과는 반응면 선단에 근접한 위치를 제외하고 실험결과와 비교적 잘 일치함을

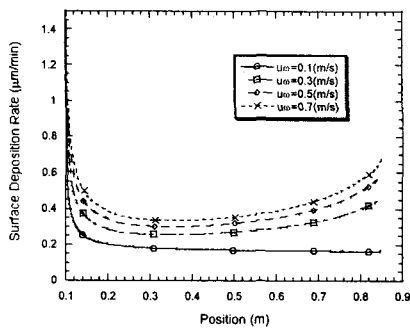


Fig. 3 Surface Deposition Rate Distribution of the susceptor (P_{silane}=124.1Pa, T_S=1323K, γ=2.9°, L=750mm)

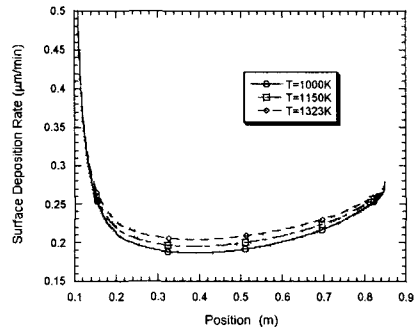


Fig. 4 Surface Deposition Rate Distribution of the susceptor (u_∞=0.15m/s, P_{silane}=124.1 Pa, γ=2.9°, L=750mm)

알 수 있다. 이 영역에서의 최대오차는 15%로서 사용된 수치모델 및 방법이 타당함을 나타내고 있다.

Fig. 3은 반응면의 위치에 따른 부착두께의 변화를 나타내고 있다. 또한 반응면의 위치에 따라 부착두께에 미치는 원료가스의 입구속도의 영향을 검토하였다. 각 반응면 위치에 따라 입구로의 유입 속도가 저속인 u_∞=0.1m/s 인 경우 반응면(susceptor)의 전반부와 후반부의 두께 차이가 거의 없이 균일한 부착율을 보여주고 있으나, 입구 유입 속도가 증가하여 0.3m/s 이상인 경우 아래면 중반부(x=0.4 m)이후부터 부착율이 완만히 증

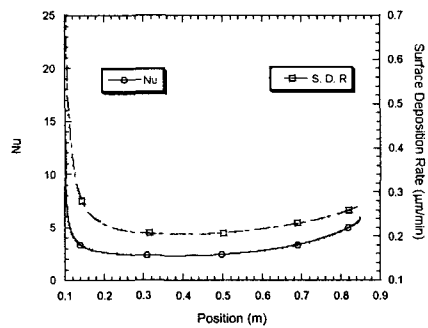


Fig. 5 Nusselt number distribution of the susceptor (u_∞=0.15m/s, P_{silane}=124.1Pa, γ=2.9°, T_S=1323K)

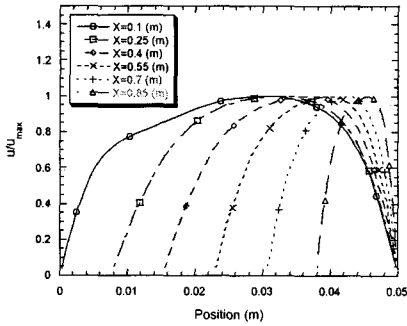


Fig. 6 Dimensionless Velocity Profile

가함을 알 수 있다. 반응면이 경사져 있으므로 후반부로 진행할수록 단면적이 감소하면서 속도가 증가하며, 이 속도 증가에 따른 경계층 길이의 감소와 반응면에서의 속도 및 온도 기울기의 급격한 변화에 의한 부착물의 증가를 나타내고 있다.

Fig. 4는 반응면 온도의 변화에 따른 부착물의 변화를 나타내고 있다. 일반적인 CVD 공정은 1000~1300K의 범위에서 이루어지고 있다. 그림에서 도시한 바와 같이 반응면의 양 끝단에서는 온도변화와 무관하게 유사한 두께의 실리콘(Si)이 부착되고 있으나 중심부의 대부분의 영역에서는 온도가 낮아질수록 부착물이 저하됨으로써 그 두께의 불균일성이 증가하고 있다.

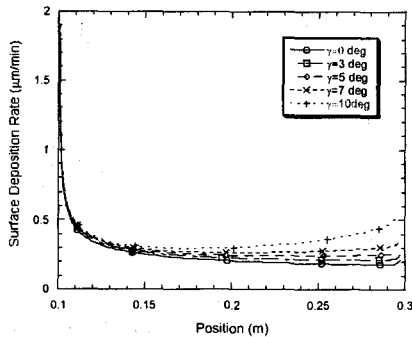


Fig. 7 Surface Deposition Rate Distribution of the susceptor ($u_{\infty}=0.15\text{m/s}$, $P_{\text{silane}}=124.1\text{Pa}$, $T_S=1323\text{K}$, $L=300\text{mm}$)

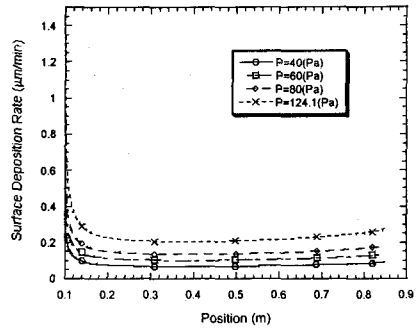


Fig. 8 Surface Deposition Rate Distribution of the susceptor ($u_{\infty}=0.15\text{m/s}$, $\gamma=2.9^\circ$, $T_S=1323\text{K}$, $L=750\text{mm}$)

이 부착두께의 변화는 경계층 내에서 반응면 온도 및 입구 속도와 관련된 열전달과 관련되어 변화한다고 할 수 있다.

Fig. 5는 반응면으로부터의 열전달과 부착두께의 정성적 비교를 나타낸 그림이다. 반응면의 열유속 값은 시작점 근처에서 급격한 감소를 한 후 경계층이 성장함에 따라 Nu는 유동방향으로 완만하게 감소하다가 저온 출구영역에 접근하면서 유동 단면적 감소로 인한 유속의 증가와 함께 증가한다. 실리콘(Si)의 두께변화는 이러한 Nu의 변화와 동일한 경향으로 변화함을 알 수 있다. 따라서 Nu의 변화를 예측함으로써 실리콘(Si)의 두께를 예측할 수 있다.

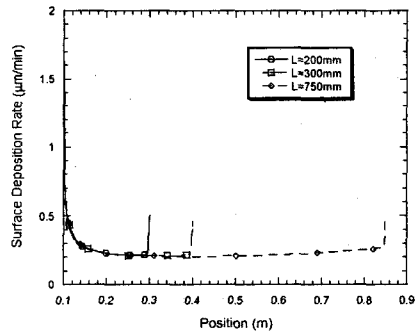


Fig. 9 Surface Deposition Rate Distribution of the susceptor ($u_{\infty}=0.15\text{m/s}$, $P_{\text{silane}}=124.1\text{Pa}$, $\gamma=2.9^\circ$, $T_S=1323\text{K}$)

Fig. 6은 반응면 위를 흐르는 채널내 기체의 속도 분포를 도시한 것이다. 반응면의 선단($x=0.1m$)에서의 완만한 속도 변화에 비하여 $x=0.7m$ 에서는 단면 감소에 따른 속도 증가와 함께 급격한 경계층내 속도변화가 야기된다. 이 속도변화는 부착입자 결핍을 완화시킴으로서 부착율을 증가시키는 것으로 판단된다.

Fig. 7은 반응면의 경사도(γ)에 따른 부착율의 변화를 보여주고 있다. 수평으로 놓인($\gamma=0^\circ$) 반응면에 대해서는 반응면의 선단부에서 실리콘(Si)의 부착율이 급격히 감소한 후 전 면적에 걸쳐 완만한 감소를 나타내고 있다. 이 급격한 감소는 얇은 경계층 내에 존재하는 부착 입자의 결핍에 기인된다. 이 결핍은 경사도를 증가시킴으로써 완화시킬 수 있다. 경사도가 증가함에 따라 반응면의 후반부에서의 단면적이 작아지게 되고 원료가스의 속도 증가에 따라 부착두께 또한 증가하고 있다. 경사도가 5° 에 도달될 때까지 선단부를 제외한 영역에서 균일한 부착두께를 나타내나, 그 이상의 경사각에서는 경사도의 증가에 따라 후반부에서의 부착두께가 급격히 증가함으로써 실제 응용시 바람직하지 않는 결과를 초래하고 있다. γ 값의 변화에 따른 증착율의 이러한 변화는 채널의 형상을 결정하는데 중요한 요소가 될 것이다.

Fig. 8은 1기압의 수송기체 H_2 에 포함된 SiH_4 의 Mole 비율에 따른 부착율의 변화를 나타낸 그림이다. 압력은 SiH_4 의 분압을 나타내고 있다. 경사도 2.9° , 입구 기체속도 $u_{\infty}=0.15m/s$, $P_{silane}=40Pa$ 일 때 길이를 750mm까지 증가시킨 반응면의 대부분의 영역에서 균일한 두께의 부착이 이루어지고 있다. 수송기체 내의 SiH_4 의 농도를 증가시킴에 따라 부착두께는 농도에 비례하여 증가하고 있으나, 농도의 증가에 따라 $P_{silane}=124.1Pa$ 에서 후반부 부착두께의 미세한 불균일성이 나타남을 알 수 있다. 따라서 Mole 비율을 제어함으로써 최적의 부착율 및 균일성을 제어 할 수 있음을 나타낸다.

Fig. 9는 길이에 따른 부착율의 변화를 나타낸 그림이다. 반응면의 길이가 200, 300, 750 mm로 변하더라도, 반응면 전단부($x=0.5m$)의 부착율 분포는 거의 변화가 없었다. $x=0.75m$ 에 대해서는 $x=0.5m$ 이후부터 부착두께가 증가함으로써 두께의

불균일성을 야기하고 있다. 따라서 생산량 증대를 위한 반응면 크기를 확대하기 위해서는 경사각을 조절하여 경사도 2.9° 이하로 유지하거나 또는 입구속도를 감소시키는 등의 적절한 조건을 동시에 고려해야 함을 알 수 있다.

4. 결론

본 연구에서는 기울어진 가열부를 갖는 2차원 채널내의 층류 열 및 물질전달 및 유동특성을 수치적으로 규명하였다.

(1) 원료가스의 유입속도가 저속일 경우 균일한 두께의 부착이 이루어지며, 속도가 증가할수록 그 두께의 증가와 함께 불균일성이 증가한다.

(2) 반응면의 온도가 낮을수록 반응면 중심부에서 부착율 저하에 의한 불균일성이 야기된다.

(3) 경사도에 따른 반응면의 후반부의 실리콘 부착두께의 변화는 적정 경사각을 필요로 한다. 길이 300mm의 반응면의 경우 경사각 5° 가 적정 경사각이었다.

(4) 희석된 원료가스의 농도의 증가에 따라 부착두께가 증가하나 반응면 후반부의 불균일성이 증가한다.

(5) 부착율 및 균일성은 반응면에서의 Nusselt 수의 변화와 유사한 거동을 보인다.

참고문헌

(1) Jensen, K. F., Einset, E. O. and Fortiadis, D. I., 1991. "Flow Phenomena in Chemical vapor Deposition of Thin Films," Ann. Rev. Fluid Mech., Vol. 23, pp.197-232

(2) 조원국, 최도형, 김문언, 1998, "원통형 화학 증착로에서 균일한 박막형성을 위한 입구 농도분포 최적화," 대한기계학회논문집 B권 제22권, 제2호, pp.173-183

(3) 오성진, 박경우, 김기문, 박희용, 1998, "수평 CVD 반응기에서의 3차원 혼합대류 열전달 특성," 대한기계학회 논문집 B권, 제22권 제5호, pp. 672-684.

(4) Evans, G. and R. Grief, 1987, "A Numerical Model of the Flow and Heat Transfer in a Rotating Disk Chemical Vapor Deposition Reactor," ASME

Journal of Heat Transfer, Vol. 109, pp. 928-935

(5) Chiu, W. K. S., and Jaluria, Y., 1998, "Heat and Mass Transfer in Continuous CVD Reactors," Proc. 11th Int. Heat Transfer Conf., Vol. 5, pp. 187-191.

(6) Eversteyn, F. C., P. J. W. Severin, v.d. Brekel, C. H. J., and H. L. Peek, 1970, "A Stagnant Layer Model for the Epitaxial Growth of Silicon from Silane in a Horizontal Reactor," Journal of the Electrochemical Society, Vol. 117, pp.925-931.

(7) Fluent Inc., 1998, Fluent User's Guide(V. 5), Fluent Inc.

(8) Chiu, W. K. S., and Jaluria, Y., 1999, "Effect of Buoyancy, Susceptor Motion, and Conjugate Transport in Chemical Vapor Deposition System," Journal of Heat Transfer Vol. 121, pp. 757-761.