



ALD 설비의 NH₃(Ammonia)누출 시나리오에 대한 내부유동 및 제어 속도 해석

이성삼 · †안형환*

한국교통대학교 안전공학전공 박사수료, *한국교통대학교 안전공학전공 교수
(2022년 8월 11일 접수, 2022년 9월 14일 수정, 2022년 9월 15일 채택)

Analysis of Internal Flow and Control Speed for NH₃ (Ammonia) Leakage Scenario of ALD Facility

Seoung-Sam Lee · †Hyeong-hwan An

Dept. of Safety Engineering, Korea national University of Transportation, 50, Daehak-ro,
Daesowon-myeon, Chungju-si, Chungcheongbuk-do, Republic of Korea
(Received August 11, 2022; Revised September 14, 2022; Accepted September 15, 2022)

요약

반도체 생산 설비 중 ALD는 열이나 플라즈마로 분해한 Gas를 Wafer에 증착시켜 원자층을 형성시키는 설비로 주로 인화성 물질인 NH₃와 SiH₄이 사용된다. 이중 NH₃는 연소·폭발 범위가 상한(UFL) 33.6%, 하한(LEL) 15%로 폭발 범위가 비교적 좁지만 많은 양이 갑자기 한곳에 모이면 폭발할 수 있고, 피부에 닿거나 흡입하면 치명적이다. NH₃는 ALD Gas inlet의 배관과 전기·기계 기구를 통해 Chamber로 공급되는데 많은 누출 가능성이 존재하여 누출 시 화재·폭발 또는 중독 사고로 이어질 수 있어 NH₃ 누출 시나리오에 대한 내부 유동과 제어 속도를 이해하고 고환기가 가능한 배기장치를 설계하는 것이 필요하여 본 연구자는 NH₃의 누출시나리오를 CFD에 적용하여 내부유동과 제어 속도를 수치 분석하여 설계 시 반영할 수 있도록 하였다.

Abstract - Atomic Layer Deposition (ALD) is a facility that deposits an atomic layer on a wafer by causing a chemical reaction after decomposition using heat or plasma by inputting two or more gases during the semiconductor process. The main gas used at this time is NH₃ (Ammonia). NH₃ has a relatively narrow explosive range with an upper limit (UFL) of 33.6% and a lower limit (LEL) of 15%, but it can explode if a large amount suddenly gathers in one place. It is Velocity and fatal if inhaled or in contact with the skin . NH₃ (Ammonia) of ALD (Atomic Layer Deposition) facility is supplied to the chamber through the gas inlet and discharged after the reaction.

Key words : ALD, CFD, explosion range, explosive Limits - LEL & UEL, degree of dilution

1. 서 론

반도체 산업에 사용되는 설비 중 ALD(Atomic Layer Deposition)는 Wafer에 원자층을 증착하는 설비로 인화성 물질인 NH₃(Ammonia)를 많이 사용하며 NH₃(Ammonia)를 공급하는 Gas Cabinet과 화학반응을 통해

원자층 증착이 이루어지는 Chamber, 그리고 부산물을 외부로 배출하는 Exhaust로 구성되어 있다. 특히 NH₃(Ammonia)를 주입하는 Fig. 1과 Fig.2와 같은 Gas Cabinet은 Regulator, MFC (Mass Flow Controller), Valve 등이 복잡하게 설치된 내부는 NH₃(Ammonia) Gas의 누출 원인이 될 수 있다. 이러한 장소를 화재·폭발 위험장소라 하며 「폭발위험장소의 구분도(區分圖)」를 산업표준화법에 따라 작성하고 화재·폭발 위험 범위에 있는 전기 기계·기구에 대하여 점화원을 관리할 수 있는

†Corresponding author:hhahn@ut.ac.kr

Copyright © 2022 by The Korean Institute of Gas

방폭형을 사용하도록 하고 있다. 하지만 기술적인 한계와 비용 문제로 ALD 설비 Gas Cabinet에 설치되는 모든 전기 기계·기구를 방폭형으로 설치하는 것은 불가능하기 때문에 환기를 통해 누출된 Gas를 폭발 범위 이하에서 배출하는 방법으로 설계에 적용하는 것이 일반적이다. 하지만 기존에 주로 사용되는 수학적 계산 방법은 Gas Cabinet 내부 모든 부분의 유동과 제어 속도를 확인할 수 없어 신뢰성이 떨어지기 때문에 본 연구자는 CFD 프로그램을 활용하여 Gas Cabinet 전체에 대하여 입체적으로 수치화하여 환기 덕트 설계에 필요한 신뢰성 높은 기본 자료를 제공하고자 하였다.

II. 연구의 범위 및 방법

2.1. 연구의 범위

본 연구는 Fig. 1.과 Fig. 2.와 같이 ALD 설비의 Gas 공급을 위해 설치된 Gas Cabinet 측면의 내부 Pipe, MFC, Valve 등 각종 전기·기계 기구의 연결부 하단 1 stage에서 NH₃ Gas가 누출되는 시나리오로 배기 포트를 Fig 4와 같이 Gas Cabinet 중앙에 설치한 경우와 Fig 1에서처럼 Regulator, MFC 등이 설치된 Gas Cabinet 측면 끝단 상부에 배기 포트를 설치하였을 때 배기 포트를 중심으로 내부유동과 제어 속도가 어떻게 변하는가를 분석하였다.

2.2. 연구의 방법

분석에 사용된 전산유체역학(CFD: Computational Fluid Dynamics)은 Siemens(社)의 Simcenter FLO EFD model로 CAD와 3차원에서 설계단계와 단일과정에서 항공 우주 분야와 열교환기, 펌프, 밸브를 포함한



Fig. 1. ALD Gas Inlet Cabinet.

플랜트 산업, 자동차 분야 등에 적용되고 있는 CFD 전문 프로그램으로 3D CAD 환경에서 Fig. 2. ALD Gas Cabinet 내부에서 Fig. 1의 Pipe 연결부를 누출 원으로 NH₃ Gas가 누출될 경우 ALD Gas Cabinet 내부의 유동과 제어 속도가 어떤지를 분석하였다. 분석은 누출 원, 누출 빈도, 누출 등급, 누출 지속 시간 및 누출률 등은 안전보건공단(KOSHA)의 KOSHA GUIDE E-180-2020에서 정한 기준을 적용하였다. 분석 조건은 환기(Ventilation) 설비에 설치된 배기 포트를 통해 대기로 강제 배출되는 것을 적용하였으며, 누출 원은 배관(Pipe)의 접속 부 및 밸브 패킹 등의 주요 연결부(Flange)를 선정하였으며, 누출 양은 누출감지기(leak detector) 동작 시 interlock에 의해 즉시 차단되어 (Fail Close) 최소 누출 양을 선정하였다. NH₃의 증기 밀도는 0.59로 공

Table 1. NH₃(Ammonia) MATERIAL SAFETY DATA SHEET SUMMARY

물질명	Ammonia (NH ₃)			
	CAS NO	7664-41-7		화학식 NH ₃
위험 유해성	위험등급 (0~4단계)	보건	화재	반응성
		2	4	3
인화점 및 발화등급	인화점		132°C	
	폭발하한값		15%	
	폭발상한값		33.6%	
물리화학 적 특성	끓는점		-33.35°C	
	증기밀도(공기=1)		0.59	
	비중(물=1)		해당없음	
	휘발성		100%	
안정성 및 반응성	반응성		결렬하게 중합반응하여 화재와 폭발을 일으킬 수 있음	

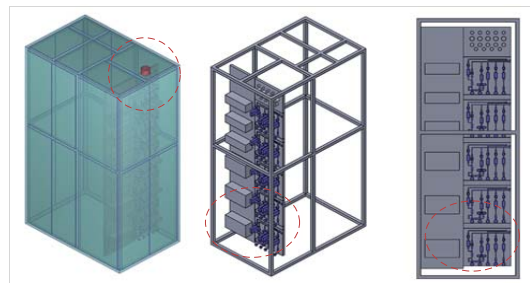


Fig. 2. ALD(Atomic Layer Deposition) Gas Cabinet.

기 1보다 낮아 강제 배기를 통해 외부로 배출되는 것을 적용하였으며 NH₃ Gas의 제어 속도 분석은 공기와 난류 혼합과 강제 환기로 인해 농도가 0이 될 때까지의 공기와 희석(Dilution)되는 과정을 분석하였다.

2.3 NH₃(Ammonia)와 NH₃(silane)의 특성

NH₃(Ammonia)는 인화성 물질로 디스플레이, 반도체 및 태양전지 산업에서 재료에 원자층을 증착시키기 위한 ALD 설비에 사용되는 물질로 인화점 132℃, 폭발범위는 폭발 하한값 15%, 폭발 상한값 33.6%, 분자량 17.03으로 공기의 분자량 28.82보다 많아 공기에 비해 가벼우며 기타 특성은 Table 1과 같다.

III. 분석

3.1 누출 초기 농도

Gas Cabinet의 NH₃ Gas의 누출 시간과 농도는 누출 후 Leak Detector가 감지하여 Supply Valve를 Fail Close 한 후 누출 잔량이 Fig 3, Fig 4 및 Table 2와 같이 유지되는 누출 시간 6.5sec, 누출 농도 폭발 하한치의 9.5%로 분석되었다.

3.2 CFD 수치 해석

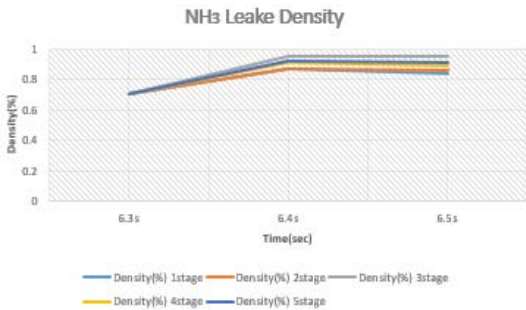


Fig. 3. Leak Concentration Analysis Graph.

Table 2. Concentration by time of leakage

Time (sec)	Stage	6.3s	6.4s	6.5s
Density(%)	1Stage	0.7	0.87	0.84
	2Stage	0.7	0.87	0.86
	3Stage	0.7	0.95	0.95
	4Stage	0.7	0.91	0.89
	5Stage	0.7	0.92	0.91

Gas Cabinet의 Gas 누출시나리오에 대한 내부유동과 제어 속도의 수치 해석은 다음 순서로 진행하였다.

- (1) Gas Cabinet의 Main 배기 포트를 중앙과 끝단 선정
- (2) Gas Cabinet 중앙에 배기 포트 설치한 경우 성능 확인
- (3) Gas Cabinet의 끝단에 배기 포트 설치한 경우 성능 확인
- (4) Regulator, MFC, Valve 등이 설치된 끝단을 중심으로 중앙에 배기 포트를 선정한 경우와 끝단에 배기 포트를 선정한 경우 성능 분석

3.3 Gas Cabinet Main 배기 위치 선정

- (1) Gas Cabinet 도식도 및 경계 조건
Gas Cabinet은 Fig 5과 같이 Gas Line이 있는 널을

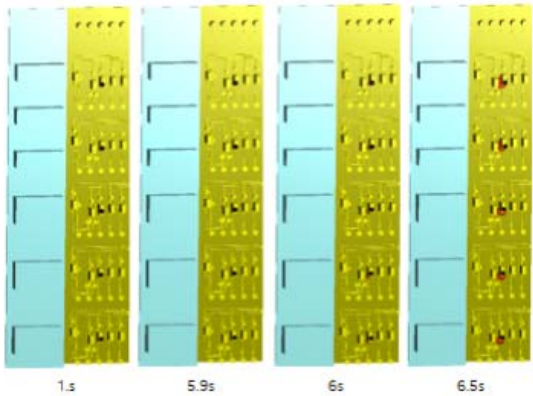


Fig. 4. NH₃ leak concentration (ISO Volume).

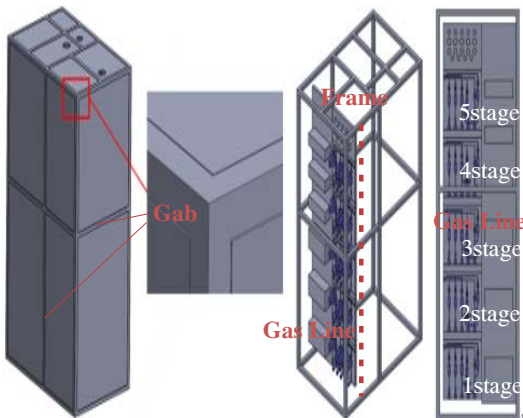


Fig. 5. Gas Cabinet Analysis Shape.



Fig. 6. Gas Cabinet Comparison Shape.

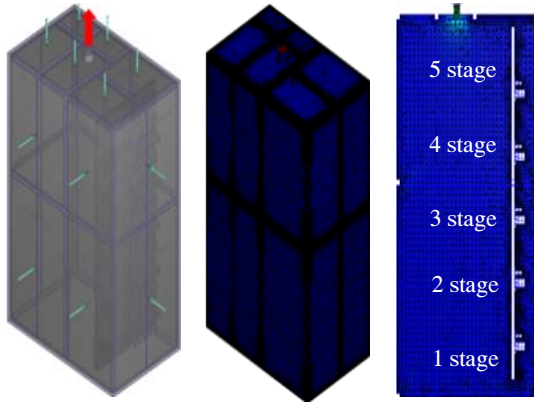


Fig. 7. Gas Cabinet Calculation Conditions and Grids.

Frame과 그 Frame을 막는 패널로 구성되어 있다. 외부 패널과 Frame 사이에는 2mm의 Gab이 존재하며 외부에서 이를 통해서 유동의 입출이 가능하도록 가정하였다. Main 배기 포트의 위치를 정하기 위해서 Fig 6과 같이 배기 포트가 Gas Cabinet 상부 중앙과 Gas Cabinet 끝단에 설치할 때의 유동을 비교하고자 하였다.

해석 조건은 Fig 7에서 확인할 수 있듯이 Cabinet 상부 Main 배기 포트에서 1,050 m³/h로 내부의 공기를 배출시키고 외부 패널의 모든 틈을 통해서 공기가 흡입되면서 Cabinet 내에서 유동이 이루어질 수 있도록 설정하였다. 해석 영역은 580만 개 수준으로 설정하

였다.

○ 해석 조건 정의

Cabinet

· inlet(유입구)

- Pressure B.C (P=0 Pa) / State=Air

· Outlet (유출구)

- Volume flow rate (V=1,050 m³/h)

· 난류 모델 (Realizable K-ε model)

· Wall condition (벽 조건)

- No Slip condition ($u, v, w = 0$)

· 제어풍속(관리대상물질) 0.4(m/sec) 이상

: 가스 상태, 포위식 포위형

○ 메인 배기 포트가 중앙일 때 해석 결과 Fig 8에서 처럼 흑색 선을 중심으로 우측 끝단의 Gas Line과 그 외장소로 구별할 수 있는데 Gas Cabinet 중앙에 메인 배기 포트를 설치한 경우 누출 원이 존재하는 Gas Line 5 stage ~ 1 stage까지 대부분 요구하는 제어풍속 0.4(m/sec)를 충족시키지 못하는 것을 알 수 있으며 Gas Line 이외의 장소에도 메인 배기 포트가 설치된 장소 주변을 제외하면 제어풍속 0.4(m/sec)를 충족시키지 못하는 것으로 분석되었다. 이는 NH₃ 가스가 인화성 물질일 뿐만 아니라 관리대상 물질이라는 점을 감안하면 환기량의 개선이 필요하다는 것을 알 수 있다.

○ 메인 포트(배기)가 끝단일 때 해석 결과 Fig 9에서 처럼 흑색 선을 중심으로 우측 끝단의 Gas Line과 그 외장소로 구별할 수 있는데 Gas Cabinet 끝단에 메인 포트(배기 포트)를 설치한 경우 누출 원이 존재하는 Gas Line 5 stage ~ 4 stage까지 대부분 요구하는 제어풍속 0.4(m/sec)를 충족시키고 있으며 3 stag~1 stage의 배기 포트를 중앙에 설치한 것보다는 개선된 제어 속도를 보인다. 그러나 Gas Line 이외의 장소(중앙)의 경우는 배기 포트에서 멀어질수록 중앙에 배기 포트를 설치한 제어 속도보다는 제어풍속 0.4(m/sec)를 충족시키지 못하는 것으로 분석되었다. 이는 NH₃ 가스가 인화성 물질일 뿐만 아니라 관리대상 물질이라는 점을 감안하면 Gas Line의 1 stage ~ 3 stage뿐만 아니라 Cabinet 중앙까지의 제어 속도 등 환기를 개선할 필요하다는 것을 알 수 있다.

3.4 Gas Cabinet CFD 해석 결과 분석

Fig 8과 같이 중앙에 배기 포트를 설치하였을 때와 Fig 9과 같이 Gas Cabinet 끝단에 배기 포트를 설치하였을 때를 유동과 제어 속도를 분석하였다. Fig 8처럼 배기 포트를 Cabinet 중앙 상단에 설치한 경우 유동은

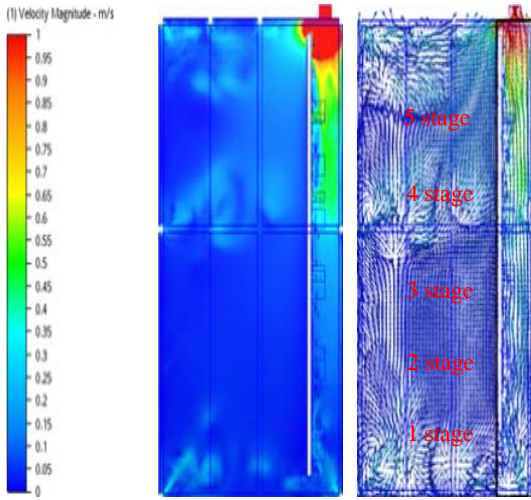


Fig. 8. Speed distribution when the main port is centered (Middle plane).

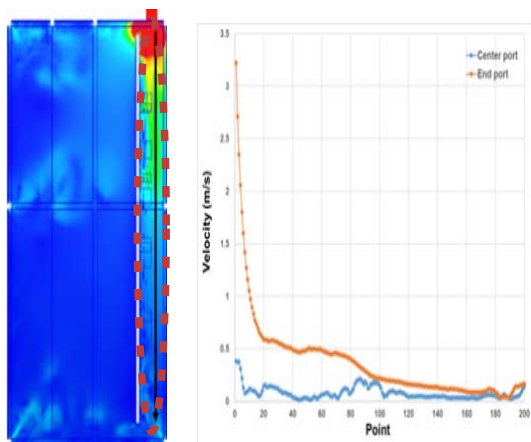


Fig. 9. Velocity distribution when the main port is at the end (Middle plane).

배기 포트 인입구를 중심으로 Cabinet 지면부터 인입구 쪽으로 유동하며 좌·우 벽면보다는 중앙이 좀 더 유동이 많은 것을 알 수 있으며 측면에 개구부가 일부 있는 Frame으로 분리된 Gas Line의 경우 흡입구가 있는 부분이 일부 있지만 전체적으로 정체된 상태로 유동이 없고 제어 속도 또한 기준치 0.4m/sec에 못 미치는 것을 알 수 있다. 결과적으로 배기 포트를 중앙의 상단에 설치하는 것은 제어 속도와 유동에 있어 기준을 충족시키지 못한다는 것을 알 수 있으며 특히 NH₃ Gas의 누출 위험이 높은 장소인 Gas Line에는 유동이 거

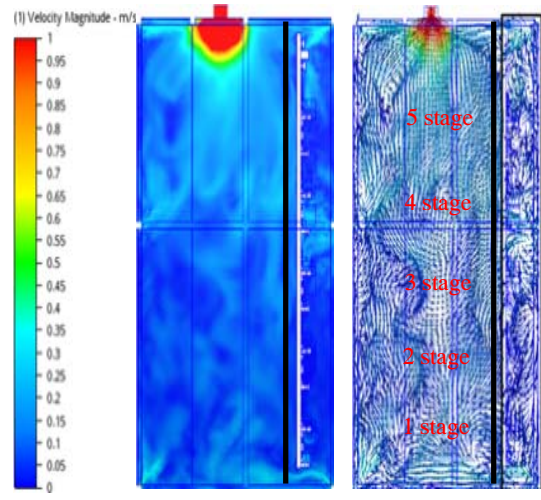


Fig. 10. Speed comparison between the two models at the location of the black arrow.

의 없어 제어 속도를 충족시킬 수 없으며, 환기량을 통해 교환기로 폭발범위를 벗어나게 하는 것은 불가능하다고 분석된다. Fig 9과 같이 끝단에 배기 포트를 설치하였을 때의 유동과 제어 속도를 분석 결과는 Fig 9처럼 Gas Line이 있는 끝단 상부에 배기 포트를 설치한 경우 유동은 배기 포트 인입구를 중심으로 Cabinet 지면부터 인입구 쪽으로 유동하며 좌·우 벽면보다는 Gas Line 중앙이 좀 더 유동이 많은 것을 알 수 있으며 제어 속도는 유동이 많은 부분과 동일하게 Gas Line의 상부 배기 포트를 중심으로 5~1 stage 중 3, 4, 5 stages는 제어 속도 기준을 충족시키고 있으며 이 외의 1,2stage의 경우는 0.15 ~ 0.35m/sec 정도의 제어 속도가 나오는 것으로 분석되었다.

Fig 10은 Fig 8과 같이 배기 포트를 중앙에 설치하였을 때와 Fig 9처럼 배기 포트를 끝단에 설치하였을 때 제어 속도 분포를 비교한 것으로 누출되어 화재·폭발 위험이 있는 Gas Line의 관점에서 분석하였을 때 끝단에 배기 포트가 위치한 모델의 제어 속도 및 유동 분포가 더 성능이 높은 것으로 확인할 수 있으며 Fig 10에서처럼 후색 화살표 방향으로 속도 값을 측정하였을 때 끝단의 배기 포트에서 더 높은 제어 속도 분포를 확인할 수 있었다.

IV. 결론

본 연구는 현재 대부분의 사업장에서 ALD 설비 구입 시 인화성 가스인 NH₃의 누출로 인한 화재·폭발 위험성을 적용하지 않은 설비를 구입하여 사용할 수

밖에 없는 현실에서 ALD의 Gas Cabinet 내부유동과 제어 속도를 분석하였다. NH₃는 폭발 하한값이 15%, 폭발 상한값이 33.6%로 비교적 좁은 폭발범위를 가지고 있다. 연구 결과 제조사에서 입고되는 ALD 설비 대부분이 Gas Cabinet 중앙에 1개의 배기 포트만 설치된 설비들이다. 이 경우 분석 결과 Fig 6에서 알 수 있듯이 하나의 배기 포트로는 내부 전체의 환기를 담당하는 것은 효과가 미비한 것으로 분석되어 Gas Line에서 NH₃가 누출될 경우 환기를 통해 폭발범위를 벗어나게 하는 것은 불가능하다는 결론을 얻었다. Gas Cabinet의 Gas Line 끝단의 상부에 배기 포트를 설치할 경우도 Fig 7처럼 상당한 개선 효과는 있으나 배기 포트와 많이 떨어진 1·2·3 stage는 충분한 제어 속도를 유지하기 힘들며 또한 Cabinet 중앙의 경우도 제어 속도가 충분하지 못하다고 분석되었다. 이러한 문제점을 개선하기 위한 방법은 Gas Line의 stage 별 배기 포트를 별도로 각각 설치하고 Gas Cabinet의 중앙 상단에 위치한 배기 포트 외에 지면에 가까운 부분에 배기 포트를 설치하면서 공기의 흡입구를 벽면에 추가 설치하여 공기가 흡입되면서 배기 포트를 통해 배출되는 방법을 적용하여 교환기 성능의 ALD 설비를 사용자에게 제공하여 사용자가 최초 설계 의도를 침해하면서 비용과 인력을 투입하여 개조하는 일이 없도록 하는 것이 필요하다.

REFERENCES

- [1] Kim, D.H., “Technical Guidelines for Field Booths in Explosive Places”, *KOSHA GUIDE E-11-2012 Korea Occupational Safety and Health Agency*, 3-4, (2012)
- [2] LEE, G.W., “Technical Guidelines for Calculation of Lower Explosive Limits for Combustible Gases and Vapor Mixtures”, *KOSHA GUIDED-22-2012 Korea Occupational Safety and Health Agency*, 1-5, (2012)
- [3] LEE, S. H., “Technical Guidelines for Design of Equipment with Fire and Explosion Hazard in Gas and Vapor”, *KOSHA GUIDE D-33-2012 Korea Occupational Safety and Health Agency*, 3-7, (2012)
- [4] Kim, G. Y., “Technical Guidelines for Modeling Leak Sources”, *KOSHA GUIDE P-92-2012 Korea Occupational Safety and Health Agency*, 2-11, (2012)
- [5] Kim, N. Y., “Technical Guidelines for Safety Measures for Leakage of Flammable Materials”, *KOSHA GUIDE P-18-2012 Korea Occupational Safety and Health Agency*, 3-4, (2012)
- [6] Kim, D. H., “Technical Guidelines for Prevention of Explosion in Explosive Locations”, *KOSHA GUIDE E-21-2012 Korea Occupational Safety and Health Agency*, 1-12, (2012)
- [7] Choi, S. G., “Technical Guidelines for Design, Selection, and Installation of Electrical Equipment Used in Explosive Places”, *KOSHA GUIDE E-172-2018 Korea Occupational Safety and Health Agency*, 3-19, (2012)
- [8] Jung, J. H., Ryu, b.h., “Guidelines for the establishment of gas explosion-hazardous places”, *KOSHA GUIDE E-180-2020 Korea Occupational Safety and Health Agency*, 9-27, (2012)
- [9] Hwang, S. S., “Guidelines for Industrial Ventilation Facilities”, *KOSHA GUIDE W-1-2019 Korea Occupational Safety and Health Agency*, 2-24, (2019)