D20

다층박막에서의 고상 비정질화 반응 및 결정상 생성에 관한 이론적 고찰

(Theoretical Consideration of Solid-State Amorphizing Reaction and Crystalline Phase Formation in Multilayer Thin Film)

연세 대학교 지 응준, 백 홍구

고집적 회로에 이용되는 다층박막의 열처리 시, 많은 계에서 고상 비정질화 반응이 일어나는 것으로 보고되고 있다. 이러한 고상 비정질화 반응은 학문적인 측면에서, 결정상의 생성 및 그 순서에도 영향을 미치기 때문에 많은 관심이 모아지고 있다. 또한 기술적인 측면에서도, 실제 반도체 소자에의 응용 뿐만 아니라 제조된 반도체 소자의 안정성 및 재현성에도 영향을 주는 중요한 역할을 한다. 따라서 본 연구에서는 고상 비정질화 반응과 결정상 생성에 관한 여러 이론들을 비교하고, 이를 기초로 하여 여러 계에 대한 반응 경향성을 예측하였다.

고상 비정질화 반응을 설명하는 데에는 ① "2성분계에서 ΔH^M이 큰 음의 값을 갖고, 한 원소가 다른 원소에 비해 확산이 빨라야한다.", ② "ΔG^M이 큰 음의 값을 갖고 원자 부피비가 0.5 이하이어야 한다.", ③ "한 원소가 다른 원소보다 확산이 빠르기 위해서는, 확산해 가는 원소의 유효반경에 대한 확산이 진행되는 기지의 interstitial site 크기의 반경비가 1보다 커야 한다." 등의 이론들이 있다.

고상 비정질화 반응이 보고된 자료들과 이들 이론을 비교한 결과, 첫번째 이론으로는 Co-Ga-As계와 Co-In계에서의 고상 비정질화 반응을 설명하지 못 하였고, 두번째 이론은 금속/금속 계에서는 잘 적용되나 금속/반도체 계에서는 잘 맞지 않음을 알 수 있었다. 이에 비해 세번째 이론은 고상 비정질화 반응이 일어나는 전반적인 계에 모두 잘 적용되었다.

또한 본 연구에서는 비정질상과 금속간화합물들의 조성에 따른 자유에너지 값을 계산하여 고상 비정질화 반응의 열역학적 구동력을 조사하고 결정상의 생성을 예측하였다. 비정질상은 과냉된 액상이라고 가정하여 자유에너지를 계산하였으며, 결정질 고상과 과냉된 액상 간의 열용량의 차이는 온도에 따라 각기 다른 값을 적용하였다. 이 방법은 열용량의 차이를 무시하고 계산하는 경우에 비해 보다 정확한 방법이며, 특히 Si/W계의 경우 그 두 값은 현저한 차이를 보인다.

본 연구에서는 고상 비정질화 반응의 세번째 이론에서 제시한 반경비(R)와 열역학적 구동력인 자유에너지 차(ΔG)의 관계 "$R\Delta G$"를 이용하여 여러 계의 반응 경향성을 예측하였으며 이를 Bene가 제시한 "$D\Delta G$"와 비교하였다. 또한 속도론적 고찰을 위하여 박막 내에서의 확산 원자의 이동을 ① 계면으로부터의 이탈, ② 생성상 내에서의 확산, ③ 기지로의 침입, ④ 기지 내에서의 확산 등의 단계로 나누어 고찰하였다.

참고 문헌

1) R.W.Bene, J.Appl.Phys. 61(5), 1826 (1987)

2) S.F.Gong and H.T.G.Hentzell, J.Appl.Phys. 68(9), 4542 (1990)