

CVD 반응로 내부 회전 원판 주위의 유동 특성 연구

차 관* · 김윤제** · 부진효***

A Study on the Flow Characteristics over the Rotating Susceptor in CVD Reactor

Kwan Cha, Youn J. Kim and J.-H. Boo

Key Words: CVD(화학증착법), Rotating susceptor(회전 기관 지지대), Epilayer growth rate(박막 성장율), Finite volume method(유한 체적법), Plug flow(플러그 유동)

Abstract

The characteristics of the fluid flow and mass transfer in a vertical atmospheric pressure chemical vapor deposition (APCVD) are numerically studied. In order to get the optimal process parameters for the uniformity of deposition on a substrate, Navier-Stokes and energy equations have been solved for the pressure, mass-flow rate and temperature distribution in a CVD reactor. Results show that the thermal boundary condition at the reactor wall has an important effect in the formation of buoyancy-driven secondary cell when radiation effect is considered. Results also show that reduction of the buoyancy effect on the heated reactor improves the uniformity of deposition.

기호설명

c_p	정압 비열	R_c	회전기관 반경
D_{AB}	확산 계수	Re	Reynolds 수 = $W_c R_c / \nu_c$
E_c	Eckert 수 = $U_c^2 / c_{p,c} \Delta T$	Re_c	유효 Reynolds 수 = $U_c R_c / \nu_c = (Re^2 + Re_D^2)^{1/2}$
Ga	Gay-Lassac 수, $\Delta T / T_{in}$	Re_D	회전 Reynolds 수 = $Re_c^2 \Omega / \nu_c$
Gr	Grashof 수 = $g R_c^3 \Delta \rho / \rho_c \nu_c^2$	r, z	무차원 실린더 좌표계 = $(R, Z) / R_o$
k	열전도 계수(thermal conductivity)	Sc	Schmidt 수 = $\nu_c / D_{AB,c}$
Nu	Nusselt 수	Sh	Sherwood 수
P	압력(pressure)	T	온도(temperature)
Rg	기체 상수	ΔT	온도차 = $(T_s - T_{in})$
Pr	Prandtl 수 = ν_c / α_c	u, v, w	무차원 반경, 접선, 축 방향 속도 요소 = $(U, V, W) / U_c$

* 성균관대학교 대학원
 ** 성균관대학교 기계공학부
 *** 성균관대학교 자연과학부

그리스 문자

α_T	열확산 계수(thermal diffusion factor)
ρ	반응 가스의 밀도
μ	반응 가스의 동점성 계수
φ	종(species) 질량
Ω	회전기판의 회전율
τ	시간(time)

하첨자

in	입구(inlet state)
s	회전 기판(susceptor or substrate)

1. 서론

화학증착법(Chemical Vapor Deposition; CVD)은 기체원료로부터 화학반응을 거쳐 박막이나 입자 등의 고체재료를 합성하는 공정이다. 동일 목적의 재료공정으로 증발법(evaporation)이 있는데, 이는 고체를 열적으로 승화시켜 증착하고자 하는 물체 위에 박막을 형성하거나 또는 공간에서 미립자를 발생시킨다. 고체의 승화는 전기적 가열 이외에 전자선(electron beam)이나 레이저 등이 쓰이는 경우도 있다. 이 경우 전체가 물리적 공정이므로 이러한 공정들은 PVD(Physical Vapor Deposition)라고 하며 CVD공정과 구분하고 있다.

CVD는 재료 및 전자 분야에서 널리 이용되고 있으며 각종 코팅 형성에도 쓰이고 있는 실용 기술이다. 잠재적 가능성 면에서 보면 아직도 발전 중에 있는 기술이며 규명되지 않은 부분도 많다.

CVD 공정의 특징은 첫째, 그 적용 대상의 다양성에 있다. 우선 세라믹, 금속, 반도체, 유기 고분자 등 합성할 수 있는 물질이 다양하다. 또한 공정을 통하여 박막, 섬유, 분체, 복합재 등 다양한 재료를 얻을 수 있다. 또 다른 면으로는 VLSI로 대표되는 마이크로, 서브마이크론 단위의 미세 가공으로부터 미터 규모의 배관 재료 코팅에 이르는 등 스케일이 다양하다. 반도체 레이저용 다층 박막 등과 같은 소량 생산에서 세라믹 재료로서의 분체와 같은 대량 생산에 이르기까지 서

로 다른 생산규모에의 적용도 가능하다.

두 번째 특징은 고순도의 기체 사용이 가능하므로 고순도 재료 합성에 적합하다는 점이다. 셋째로 공정의 제어가 가능하다.

CVD 반응로는 장치의 형태나 기판 배치 방법, 기체의 공급 방법 등에 따라 수직형, 수평형, 배럴형, 회전형 등으로 구분한다.⁽¹⁾ CVD 반응로에서 유동에 영향을 미치는 중요한 요소는 작동압력 P , 유량 Q , 그리고 반응로 형상 등이다.⁽²⁾

본 연구에서는 수직형 반응로(MOD-153)⁽³⁾를 모델로 하여 헬륨(He)의 주입 유량과 회전 기판 지지대(rotating susceptor)의 회전속도를 변화시켜 직경 12" (=30cm)를 갖는 회전 기판 주위의 유동 특성을 수치적으로 고찰하고자 한다.

2. 이론적 배경

2.1 물리적 모델과 지배방정식

Fig. 1은 본 연구에서 사용된 CVD 반응로의 개략도 및 격자계를 나타낸다. Ω 로 회전하는 기판 지지대 중심점이 원통 좌표계 (R, θ, Z) 원점에 놓여져 있다. 반응로의 반경, 높이를 R_c, L , 그리고 기판의 반경, 높이를 각각 R_s, H 라 한다. 해석을 용이하게 하기 위해서 다음과 같은 가정을 한다.⁽⁴⁾

- (1) 반응로 내의 유동은 층류, 정상상태, 그리고 축대칭 유동이다.
- (2) 점성 소산(viscous dissipation)은 엔탈피 변화에 비하여 무시한다.
- (3) 확산에 의한 상호 영향(Soret and Dufour effects)은 무시한다.

본 연구에서는 해석의 편의성을 도모하기 위하여 다음과 같은 무차원 변수를 이용하였다.⁽⁵⁾

$$U_c = V_c = W_c = \sqrt{[W_c^2 + (R_c \Omega)^2]}, \quad P_c = \rho_c U_c^2,$$

$$\Delta T = T_s - T_{in}, \quad \Delta \rho = \rho_{in} - \rho_s, \quad u = \frac{U}{U_c},$$

$$c_p^* = \frac{c_p}{c_{p,c}}, \quad Ga = \frac{\Delta T}{T_{in}}, \quad k^* = \frac{k}{k_c}, \quad \mu^* = \frac{\mu}{\mu_c},$$

$$v = \frac{V}{V_c}, \quad w = \frac{W}{W_c}, \quad \theta = \frac{(T - T_{in})}{\Delta T}, \quad Pr = \frac{\nu_c}{\alpha_c},$$

$$Sc = \frac{\nu_c}{D_{AB,c}}, \quad Re_\Omega = \frac{R_c^2 \Omega}{\nu_c}, \quad Gr = \frac{g R_c^3 \Delta \rho}{\rho_c \nu_c^2},$$

$$Re_c = \frac{U_c R_c}{\nu_c} = \sqrt{(Re^2 + Re^2_{\frac{z}{2}})}, \quad Re = \frac{W_c R_c}{\nu_c},$$

$$Ec = \frac{U_c^2}{c_{p,c} \Delta T}, \quad D_{AB}^* = \frac{D_{AB}}{D_{AB,c}}, \quad \rho^* = \frac{\rho}{\rho_c} \quad (1)$$

위 식을 이용하여 CVD 반응로 내의 유동을 고찰하기 위한 지배방정식은 다음과 같이 나타낼 수 있다.

연속 방정식 :

$$\frac{\partial \rho^*}{\partial \tau} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\rho^* r v) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho^* u) = 0 \quad (2)$$

운동량 방정식 :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \tau} (\rho^* u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\rho^* r u v) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho^* u w) \\ &= -\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{1}{Re_c} \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\mu^* r \left(2 \frac{\partial u}{\partial r} \right) \right] \right. \\ & \quad \left. - \frac{\mu^*}{r} \left[2 \left(\frac{u}{r} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu^* \left(\frac{\partial w}{\partial r} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) \right] \right\} + \frac{\rho^* v^2}{r} \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \tau} (\rho^* v) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\rho^* r u v) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho^* v w) \\ &= \frac{1}{Re_c} \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[\mu^* r^2 \left(r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{v}{r} \right) \right) \right] \right. \\ & \quad \left. + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu^* \left(\frac{\partial v}{\partial z} \right) \right] \right\} - \frac{\rho^* u w}{r} \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \tau} (\rho^* w) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\rho^* r u w) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho^* w w) \\ &= -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{1}{Re_c} \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\mu^* r \left(\frac{\partial w}{\partial r} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) \right] \right. \\ & \quad \left. + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu^* \left(2 \frac{\partial w}{\partial z} \right) \right] \right\} + \frac{Gr}{Re_c^2} \left(\frac{1 - \rho^*}{1 - \rho_s} \right) \end{aligned} \quad (5)$$

에너지 방정식 :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \tau} (\rho^* c_p \theta) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\rho^* c_p r u \theta) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho^* c_p w \theta) \\ &= \frac{1}{Pr Re_c} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(k^* r \frac{\partial \theta}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k^* \frac{\partial \theta}{\partial z} \right) \right] \\ & \quad + Ec \left(u \frac{\partial p}{\partial r} + w \frac{\partial p}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (6)$$

종(species) 보존 방정식 :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \tau} (\rho^* \phi) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\rho^* r u \phi) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho^* w \phi) \\ &= \frac{1}{Sc Re_c} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\rho^* D_{AB}^* r \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) \right. \\ & \quad \left. + \frac{\partial}{\partial z} \left(\rho^* D_{AB}^* \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) \right] \\ & \quad + \frac{1}{Sc Re_c} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\rho^* D_{AB}^* \alpha_T r \frac{\phi}{\theta + Ga^{-1}} \frac{\partial \theta}{\partial r} \right) \right. \\ & \quad \left. + \frac{\partial}{\partial z} \left(\rho^* D_{AB}^* \alpha_T \frac{\phi}{\theta + Ga^{-1}} \frac{\partial \theta}{\partial z} \right) \right] \end{aligned} \quad (7)$$

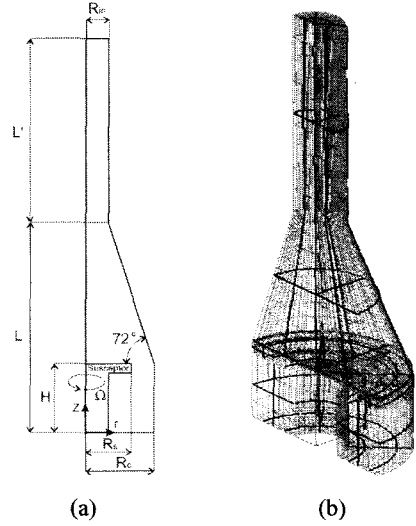


Fig. 1 Schematic diagram of CVD reactor (MOD-153) (a) geometry and (b) grid ; $R_{in} = 75\text{mm}$, $R_s = 150\text{mm}$, $R_c = 225\text{mm}$, $H = 225\text{mm}$, $L = 611.7\text{mm}$, $L' = 8 \times R_{in}$.

2.2 경계조건

- (1) 입구조건 ($Z = L + L'$): $w = -Re/Re_c$,
 $u = v = 0$, $\theta = \theta_{in}$, $\phi = 1$ (8)
- (2) 회전중심축 ($r = 0$): $u = 0$, $\partial \phi / \partial r = 0$ (9)
- (3) 회전원판 ($Z = H$): $\theta = \theta_s$, $u = w = 0$,
 $n \cdot \{ \nabla \phi + \alpha_T \phi \nabla [\ln(\theta + Ga^{-1})] \} = 0$,
 $v = (Re/Re_c) R/R_c$ (10)
- (4) 벽면조건: $n \cdot \{ \nabla \phi + \alpha_T \phi \nabla [\ln(\theta + Ga^{-1})] \} = 0$,
 $u = v = w = 0$ (11)
- (5) 출구조건 ($R_{out} = R_c - R_{in}$): $\frac{\partial \phi}{\partial n} = 0$ (12)

여기서 n 은 고체벽면(solid-wall)에 수직한 단위 벡터, ϕ 는 v, w, θ , 그리고 ϕ 를 나타낸다.

한편, 열 및 물질 전달율은 다음과 같이 정의한다.

$$Nu = -k^* \left[\frac{\partial \theta}{\partial Z} \right]_s, \quad Sh = D_{AB}^* \left[\frac{\partial \phi}{\partial Z} \right]_s \quad (13)$$

여기서 Nu 와 Sh 는 각각 Nusselt 수 및

Sherwood 수를 말한다.

또한, 표면에서 반응물질이 매우 빠르게 반응한다면, Sherwood 수로 박막 성장률(relative growth rate; RGR)을 정의할 수 있다.

$$RGR = Sh / Sh_{r=0} \quad (14)$$

여기서 하첨자 $r = 0$ 은 회전 원판 정체점(stagnation point)에서의 값을 말하며, RGR은 박막의 균일한 정도를 알 수 있는 척도가 된다.⁽⁶⁾

3. 수치 해석

상용 코드 CFD-ACE⁽⁷⁾를 이용하여 비선형 방정식 (2)~(7)과 경계조건 (8)~(12)를 SIMPLER 알고리즘으로 해석하였다. 변수 U, V, W, P , 그리고 ϕ 에 대해 잔여분이 $\epsilon = \frac{|\phi_{ii}^{n+1} - \phi_{ii}^n|}{(\phi_{\max} - \phi_{\min})} \leq 10^{-5}$ 이 되면 최종 수렴된 유동장 및 온도장의 해를 구하였다. 격자 계산은 Fig. 1에 도시한 바와 같이 486,000개(90×90×60) 생성하여 기관 주위에 집중 배치하였으며, CPU 800MHz인 PC에서 약 24시간의 계산 시간이 소요되었다.

4. 결과 및 고찰

본 연구에서는 수직형 반응로(MOD-153)를 이용하여 헬륨의 주입 유량을 5, 10, 15 *slm*으로, 회전수를 0, 100, 200, 300, 400, 500 *rpm*으로 변화시켰을 때 12" 회전 기관 표면 주위에서의 유동 특성을 고찰하였다.

Figs. 2~7에서 Nu 수와 Sh 수는 비슷한 경향으로 변하는 것을 알 수 있다. 기관이 회전하지 않을 때 기관 위의 Nu 수와 Sh 수는 급격히 상승하는 데, 이는 기관 온도 영향으로 부력에 의한 유동(buoyancy-dominant flow)이 나타나고 있다. 이러한 유동은 유량과 회전수가 증가함에 따라 점차 감소됨을 알 수 있고, 유량 5 *slm*일 때 150 *rpm*, 10 *slm*일 때 100 *rpm*, 15 *slm*일 때 50 *rpm*에서 부력에 의한 유동이 완전히 사라짐을 알 수 있다. 이와 같은 영역을 plug 유동이라고 한다. 일반적으로 부력에 의한 유동은 CVD 공정에서 나쁜 영향을 미친다. 부력에 의해 반응물이

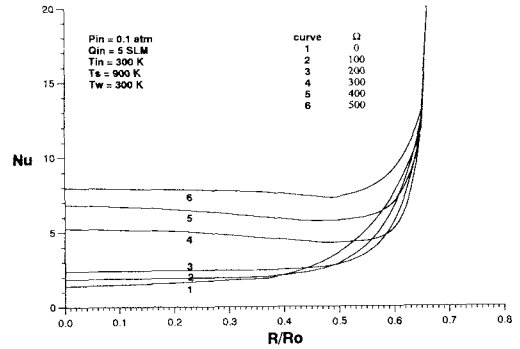


Fig. 2 Rotational effects on local heat transfer rates with $Q = 5 \text{ slm}$.

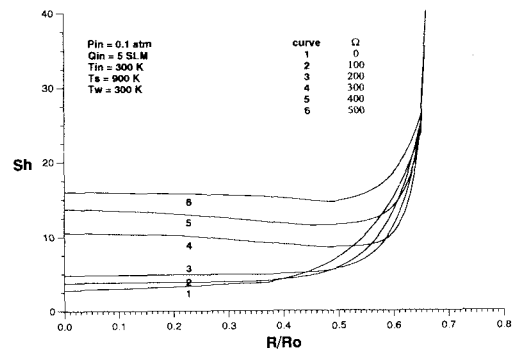


Fig. 3 Rotational effects on local mass transfer rates with $Q = 5 \text{ slm}$.

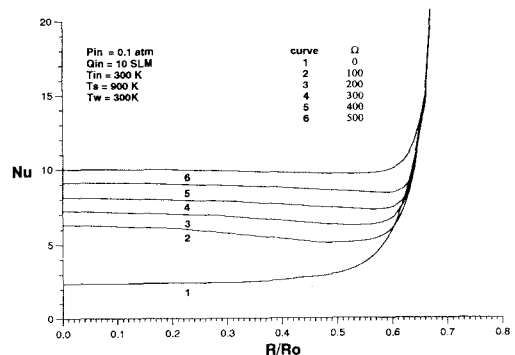


Fig. 4 Rotational effects on local heat transfer rates with $Q = 10 \text{ slm}$.

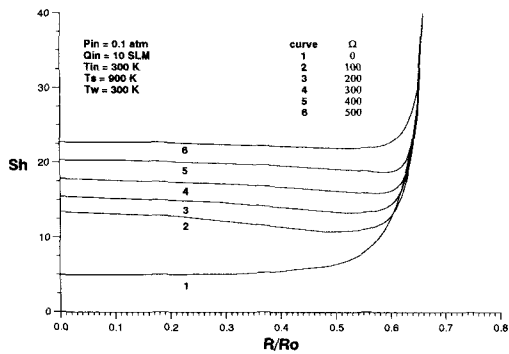


Fig. 5 Rotational effects on local mass transfer rates with $Q = 10 \text{ slm}$.

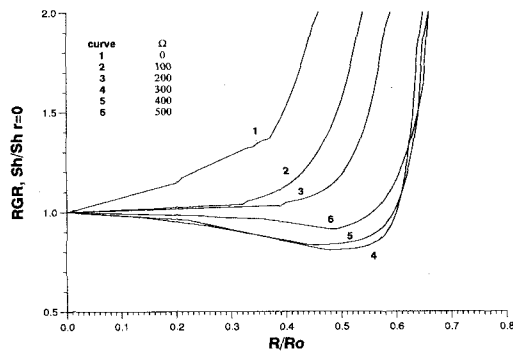


Fig. 8 Rotational effects on relative growth rates of epitaxy with $Q = 5 \text{ slm}$.

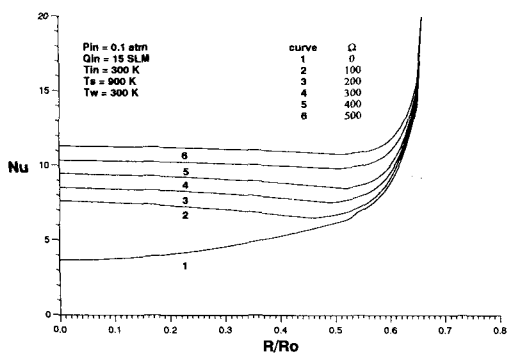


Fig. 6 Rotational effects on local heat transfer rates with $Q = 15 \text{ slm}$.

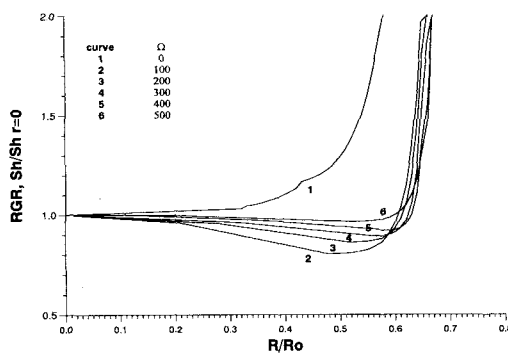


Fig. 9 Rotational effects on relative growth rates of epitaxy with $Q = 10 \text{ slm}$.

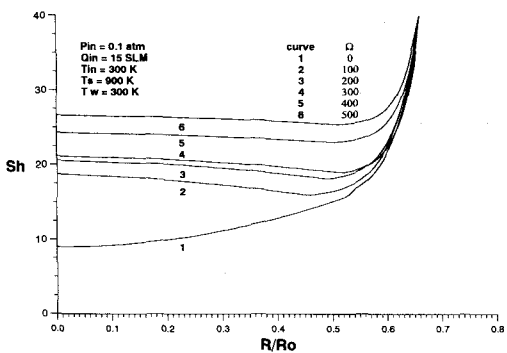


Fig. 7 Rotational effects on local mass transfer rates with $Q = 15 \text{ slm}$.

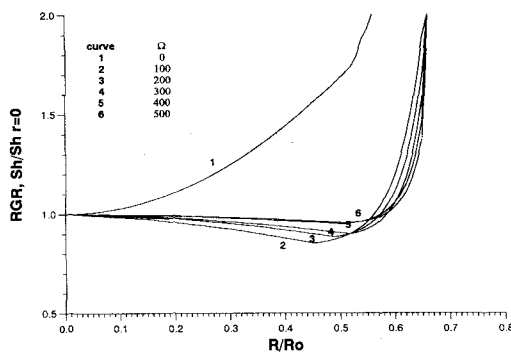


Fig. 10 Rotational effects on relative growth rates of epitaxy with $Q = 15 \text{ slm}$.

순환을 하면서 화학 반응을 하고 반응물들이 증력에 의해 회전 기관 표면위로 곧바로 떨어지기 때문에 박막 균일에 악영향을 미친다.

Plug 유동 영역에서는 전반적으로 Nu 수와 Sh 수는 서서히 증가하는 매끄러운 유동이 형성됨을 알 수 있다. 또한 이 영역에서 회전수를 증가하게 되면 원심력에 의해 유입된 혼합가스가 분열하여 원판 모서리에서 유동이 정체되는 현상을 발견할 수 있는데, 이러한 영역을 회전 유발 유동(rotation-induced flow)이라고 한다. 이 영역에서는 회전 원판 모서리 부근에서 Nu 수와 Sh 수는 잠시 감소하다 급격히 증가한다.

Figs. 8~10은 박막 성장률을 나타내는데 부력에 의한 유동 영역에서는 RGR 의 값이 급격히 증가하기 때문에 균일한 박막을 형성하는데 있어 어려움이 많다는 것을 의미한다. Plug 유동 영역에서는 Nu 수와 Sh 수가 서서히 증가하여 비교적 균일한 박막을 형성하지만 회전 유발 유동에서는 기관의 모서리에 박막이 두껍게 생성됨을 알 수 있다. 그러나, 모서리를 제외한 영역에서는 RGR 값이 균등한 분포를 나타내기 때문에 균일한 박막을 형성하기에 만족스런 영역이라 할 수 있다.

유량과 회전율을 조절하는데 있어서 가능한 난류가 형성되지 않도록 조절하여야 한다. 회전 유발 유동 영역인 유량 15 *slm*, 회전수 400~500 *rpm*에서는 기관의 모서리 부근을 제외하고 RGR 값이 균등한 분포를 나타내고 있으므로 균일한 박막을 형성하기에 적합한 영역이라 할 수 있다.

5. 결 론

CVD 반응로에서 기관의 회전율과 유입가스의 유량은 중요한 요소임을 알 수 있었다.

선행 연구자들에 의해 정의된 부력에 의한 유동, plug 유동, 회전 유발 유동을 확인할 수 있었으며, RGR 를 계산한 결과 각각의 영역에 대해 박막 형성 특성을 파악하였다. 또한, 부력에 의한 유동은 유입가스 유량으로, 회전 유발 유동은 기관의 회전율로 조절할 수 있음을 확인할 수 있었다.

후 기

본 연구는 한국과학재단(ERC 2000)지정 “플라즈마 응용 표면기술 연구센터(CAPST)”의 지원하에 수행되었으며, 관계자 여러분께 감사드립니다.

참고문헌

- (1) Lin, Y. T., Choi, M. and Grief, R., 1991, "A three-dimensional analysis of the flow and heat transfer for the modified chemical vapor deposition process including bouyancy, variable properties, and tube rotation," Transaction of the ASME, Vol. 113, pp. 400~406.
- (2) Greg H. Evans, Ralph Grief, 1988, "Forced flow near a heated rotating disk : A similarity solution," Numerical Heat Transfer, Vol. 14, pp. 373~387.
- (3) Yoshiro Kusumoto, Tdshio Hayashi and Souji komiya, 1985, "Numerical anylysis of the transport phenomena on MOCVD Process," Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 24, No. 5, pp. 620~625.
- (4) Ohmine, T., Kotaoka, K. and Sato, Y., 1990, "Growth of AlGaInP in a high-speeds rotating disk OMVPE reactor," Journal of Electronic Materials, Vol. 19, No. 5, pp. 429~433.
- (5) Patnaik, S. and Brown, R. A., 1989, "Hydrodynamic dispersion in OMVPE reactor: Numerical simulation and experimental measurement," Journal of Crystal Growth, Vol. 96, pp. 153~174.
- (6) Kleijin, C. R., 1991, "A mathematical model of the hydrodynamics and gas-phase reactions in Silicon LPCVD in a single-wafer reactor," Journal of Electrochemical Society, Vol. 138, No. 7, pp. 2190~2200.
- (7) CFD Research Cooperation, 1998, "CFD-ACE, Theory manual", Ver. 5.