

열분해 반응기 내에서의 Si 오염입자에 관한 수치해석적 연구

우대광¹, 김태성^{1,2}

¹성균관대학교 기계공학부, ²성균관대학교 성균나노과학기술원

열분해 반응기 내에서 실리콘 필름을 성장시키는 것은 반도체/디스플레이, 태양전지, 신소재 등 다양한 분야에서 중요한 공정이다. 더욱이 반도체 소자 선폭이 줄어들면서 나노입자의 오염 제어가 더불어 중요해지고 있다. 생산 공정 기술의 집적화에 따라 패턴 사이 거리가 작아지고, 이에 불과 수 십 나노미터크기의 오염입자에 의해서 패턴불량이 발생하고 생산수율을 감소시킨다. 일반적으로 반도체 공정 중 발생한 오염입자는 반응기 내의 가스가 물리/화학적 공정에 의해 핵생성(nucleation)이 일어나 핵(nuclei)이 생성되고, 이 때 표면반응 및 응집(coagulation)에 의해 성장하게 된다. 이에 본 연구에서는 열분해 반응기 내에서 사일렌(SiH₄) 가스를 열분해하여 발생하는 실리콘 오염입자의 핵생성과 성장 모델을 정립하고, 생성된 오염입자의 거동과 전달 현상을 이론적으로 고찰하였다.

열분해 반응기와 같은 기상공정(Gas to particle conversion)에서 오염입자가 생성될 때, 그 성질과 크기 등에 물리/화학적 영향을 주는 요소는 전구체/이송기체의 농도 및 유량, 작동 압력, 작동 온도와 반응기 고유 특성 등이 있다. 수치해석의 정당성과 빠른 계산을 위해 단순화시킨 0D 모델인 Batch 반응기와 1D모델인 plug flow 반응기 등에서 SiH₄ 가스의 열분해 과정시 생성되는 Si cluster를 상용코드인 CHEMKIN 4.1.1을 이용하여 계산하였으며, 2D모델인 Shear flow 반응기로 확장시켜 Si 오염입자가 생성특성을 연구하였다.

Keywords: 오염입자, 핵생성, 응집, 성장, 수치해석