論文 90-27-7-9

PECVD 비정질 실리콘 증착 반응의 이론적 모델과 실험결과

(Theoretical Model and Experimental Results of PECVD Amorphous Silicon Deposition Process)

金 鎭 洪*, 南 哲 祐*, 禹 誠 一*, 金 龍 泰**

(Jin Hong Kim, Chul Woo Nam, Seong Ihl Woo, and Yong Tae Kim)

要 約

비정질 실리콘의 PECVD 공정에서 평행판형 반응기에 대한 수학적 모델식을 세우고, 이로부터 반응기내의 온도, 속도, 그리고 농도구배를 계산하였다. a-Si:H 박막의 반응 mechanism을 세우고, 서로 다른 반응 조건에서의 RF 방전변수를 계산함으로서 박막의 증착 속도와 균일도에 대한 이론적 접근을 시도하였다. 모델식은 control volume balance를 통한 유한 요소법을 사용하여 해를 구하였으며, 평균 전자 에너지는 모델식 계산에서의 변수로 사용되었다. 계산된 정착속도는 실험치와 잘 일치 하였으며, $r/R_b=0$에서 $r/R_b=0.4$ (R_b : 하단 전극의 반경, r : 증착 표면의 stagnant point 로부터의 반경 방향거리)사이에서 균일한 증착 속도를 나타내었다.

Abstract

Mathematical modeling equations of a parallel plate type reactor were obtained in the PECVD process in preparing hydrogenated amorphous silicon. Velocity profiles, temperature profiles and concentration profiles in the reactor were calculated from the model. The theoretical approach was attempted to obtain the deposition rate and film uniformity at different operating conditions by calculating RF discharge parameters and establishing the reaction mechanisms of a-Si:H thin film. The modelling equations are solved by a finite difference method with control volume balance. The mean electron energy in discharge was applied to model simulation parameter. The magnitudes of the predicted deposition rate are in good aggrement with those of experiment. The results of computer simulation shows that uniform deposition profiles can

*正會員, 韓國科學技術院 化學工學科
(Dept. of Chemical Eng., KAIST)
**正會員, 韓國科學技術研究院 半導體 材料研究室
(Semiconductor Material Laboratory, KIST)
接受日字 : 1990年 5月 14日

I. 서 론

최근 Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition (PECVD)에 의하여 얻은 비정질 실리콘이 새로운 박막 소자, 즉 태양전지, 트랜지스터, 센서, 그리고 charge coupled device (CCD) 등에 많이 응용되고 있으며 중요한 신소재로써 많은 관심을 끌고 있다.[1] 하

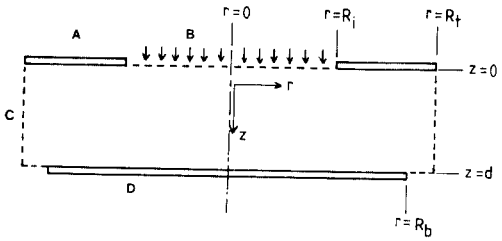
지만 지금까지는 PECVD에 의해 성장된 박막의 전기적 특성이나 결정 구조에 대한 연구가 주로 진행되었으며, 이러한 공정의 이론적 접근은 플라즈마 상태의 여러가지 복잡성 등으로 인하여 제한된 해석만이 되어 왔다. Turban등[2]은 axial flow 반응기를 간단한 1차원 model을 이용하여 해석 하였고, Chen[3]는 axial, radial flow 반응기의 두가지 형태를 다루었으며, Rhee[4] 등은 silicon 증착에 있어서 열과 플라즈마에 의한 증착속도의 상대적 영향을 수학적 모델식 들로부터 구하였다. 최근에 Kushner[5]는 discarge의 박막성장 매카니즘에 관심을 두고 공정 변수에 따른 박막의 구성 원자비와 증착 속도에 대한 이론적 해석을 시도하였다. 플라즈마가 없는 기존의 열 CVD에 대한 수학적 해석은 stagnant layer,[6-8] boundary layer concept,[9,10] 그리고 fully parabolized flow model[4,11-13] 등의 개념을 적용하여 이루어 지고 있다.

본 연구에서는 평행판 구조의 PECVD 장치에 의한 a-Si:H 박막 성장시 일어나는 반응기내의 현상들에 대한 수학적 모델식을 세우고, RF 방전에 대한 electron kinetics와 반응 메카니즘을 예상하여 공정 변수들의 영향에 따른 증착 속도와 기판 위치에 따른 박막의 균일도를 계산하고 실험결과와 비교하고자 한다.

Ⅱ. 이　　론

1. Model Formulation

그림 1은 수치 모사에 적용된 평행판형 PECVD 반응기를 나타낸 것으로 axisymmetric 형태이며 r, z의 2차원 원통 좌표계에서 해석하였다.



(R_i = 10cm, R_t = 16cm, R_b = 14cm, d = 4cm,
A: Top Electrode, B: Inlet, C: Outlet,
D: Bottom Electrode or Substrate Holder

그림 1. 모델식에 사용된 PECVD 반응기의 개략도
Fig. 1. Schematic of PECVD reactor used in model formulation.

Flow pattern을 구하기 위해 운동량 수지식(Momentum Balance Equation)을 이용하였으며 가열되는 기판의 영향에 의한 온도 분포는 에너지 수지식(Energy Balance Equation)으로 부터 구하고, 박막 증착에 영향을 주는 반응기체와 라디칼들의 물질 전달은 물질 수지식(Mass Balance Equation)을 도입하여 해석하였다. 반응기 해석에 사용된 식들을 아래에 나타내었다.

연속 방정식

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(\rho ru)+\frac{\partial}{\partial z}(\rho v)=0$$

운동량 수지식

$$\frac{\partial}{\partial r}(\rho uu)+\frac{\partial}{\partial z}(\rho vu)=-\frac{\partial P}{\partial r}+\frac{\partial}{\partial r}\{\frac{\mu}{r}\frac{\partial}{\partial r}(ru)\}+\frac{\partial}{\partial z}(\mu\frac{\partial u}{\partial r})+\rho gr\frac{\partial}{\partial r}(\rho uv)+\frac{\partial}{\partial z}(\rho vv)=-\frac{\partial P}{\partial r}+\frac{\partial}{\partial r}(r\mu\frac{\partial v}{\partial r})+\frac{\partial}{\partial z}(\mu\frac{\partial v}{\partial z})+\rho g_z$$

에너지 수지식

$$\frac{\partial}{\partial r}(\rho uT)+\frac{\partial}{\partial z}(\rho vT)=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\frac{k}{C_P}\frac{\partial T}{\partial r}+\frac{\partial}{\partial z}(\frac{k}{C_P}\frac{\partial T}{\partial z}) \quad (3)$$

물질수지식

$$\frac{\partial}{\partial r}(\rho uw_i)+\frac{\partial}{\partial z}(\rho vw_i)=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\rho D_i\frac{\partial w_i}{\partial r})+\frac{\partial}{\partial z}(\rho D_i\frac{\partial w_i}{\partial z})+R_i \quad (4)$$

위의 식들은 정상 상태일때 이며, u, v는 각각 r및 z방향의 속도, k와 μ는 각각 thermal conductivity 와 visocity, C_P는 heat capacity 그리고 w_i와 D_i는 각각 성분 i의 농도 및 diffusivity를 나타낸다. 식(4)에서 R_i는 플라즈마내에서 반응 기체의 전자 충돌과 라디칼과 분자 상호간의 균일반응에 의한 성분 i의 생성 속도이다. 모델식에 사용된 transport property는 온도, 조성 그리고 압력의 함수 형태로 적용하였으며,[14] 기체의 밀도는 이상 기체의 상태 방정식을 적용하였다.

$$\rho=\frac{PM}{RT},\quad M=\sum_i x_iM_i \quad (5)$$

여기서 x_i, M_i는 각각 i species의 몰 분율 및 분자량을 나타낸다.

반응기 모델식들의 경계조건으로 입구에서는 주어진 초기 조건과 z방향의 속도만 고려하였으며, 출구에서는 normal gradient를 zero로 하였다. Centerline

에서는 r성분에 대한 구배가 없는 axisymmetric 인 경우로 하고, 양단 전극에서는 no-slip 조건을 적용하였다. 다음식들은 그림 1에 대한 경계 조건을 나타낸 것이다.

$$\text{at } z=0 \text{ and } 0\le r\le R_t \quad u=0, v=v_0, T=T_0, w_i=w_{i0}$$

$$\text{at } z=d \text{ and } R_b\le r\le R_t \quad \frac{\partial u}{\partial z}=0, \frac{\partial T}{\partial z}=0, \frac{\partial w_i}{\partial z}=0$$

$$\text{at } 0\le z\le d \text{ and } r=R_t \quad \frac{\partial u}{\partial r}=0, \frac{\partial T}{\partial r}=0, \frac{\partial w_i}{\partial r}=0$$

$$\text{at } 0\le z\le d \text{ and } r=0 \quad u=0, \frac{\partial v}{\partial r}=0, \frac{\partial T}{\partial r}=0, \frac{\partial w_i}{\partial r}=0$$

$$\text{at } z=d \text{ and } 0\le r\le R_b \quad u=0, v=0, T=T_s, -\rho D_i\frac{\partial W_i}{\partial Z}=F_i$$

$$\text{at } a=0 \text{ and } R_t\le r\le R_t \quad u=0, v=0, \frac{\partial T}{\partial r}=0, -\rho D_i\frac{\partial w_i}{\partial z}=F_i \qquad (6)$$

여기서 F_i는 양전극으로의 성분 i의 mass flux이다.

2. Kinetic Expression

반응기에 유입된 기체는 높은 운동에너지를 가진 전자와의 충돌에 의해 분해되어 증착에 참여하는 반응성 라디칼들을 생성하며, k_{di}를 ith process에 대한 분해속도 상수, n_e를 전자 밀도 그리고 [i]를 i성분의 농도라고 하면 분해속도는 다음과 같이 표현된다.

$$R_{di}=k_{di}\, n_e[i] \qquad (7)$$

보통 RF discharge는 양 전극 사이의 중앙에서 가장 높은 전자 밀도를 가지며 이 영역에서 기체의 분해과정이 가장 활발한 영역이라고 알려져 있다.[15,16] 본 연구에서는 전자밀도 분포를 반경 방향에 무관하고 축방향의 함수로서 Allis[17] 등과 Bell[18]이 제안한 ambipolar 분포 형태를 취하고 Dalvie[19] 등이 사용한 식을 적용하였다.

$$n_e=\langle n_e\rangle \pi/2\, \cos[(z/d-1/2)\pi] \qquad (8)$$

위식에서 d는 전극사이의 거리이고, $\langle n_e\rangle$는 평균전자 밀도로 전형적인 plasma 상태에서의 값인 $10^{10}/cm^3$을 적용하였다.[18]

전자 충돌에 의한 분해속도 상수 k_{di}는 전자 에너지 분포함수, $f(\in)$와 각 species의 dissociative cross section, σ_i 그리고 충돌하는 전자가 가지고 있는 에너지, $\in$의 영향을 받으며 다음식으로 표현된다.

$$k_{di}=\left(\frac{1}{2}\right)^{1/2}\int_0^\infty \in^{1/2} f(\epsilon)\,\sigma_i(\epsilon)\,d\epsilon \qquad (9)$$

전자 에너지 분포 함수, $f(\in)$는 Druyvesteyn 함수를 적용하였으며 식 (10)과 같다.

$$f(\in)=1.04\langle\in\rangle^{-2/3}\in^{1/2}\exp(-0.55\in^2/\langle\in\rangle^2) \qquad (10)$$

여기서 $\langle\in\rangle$는 평균 전자 에너지이다.

반응기체로 사용한 SiH_4[20]와 H_2[21]에 대한 electron collision cross sections은 식 (11)과 같은 함수형태를 적용 하였으며, 여기서 사용된 상수들을 표 1에 나타내었다.

$$\begin{aligned}&\sigma=\sigma_I && \in_I\le\in\le\in_{II}\\ &\sigma=\sigma_{II}(\in-\in_{II}) && \in_{II}\le\in\le\in_{III}\\ &\sigma=\sigma_{III} && \in_{III}\le\in\end{aligned} \qquad (11)$$

따라서 분해 속도 상수 k_{di}는 식(9)로 부터 구할 수 있으며 그림 2에 평균 전자 에너지의 함수로서 나타내었다. 평균 전자 에너지는 압력, 반응 기체 유량, RF power, SiH_4/H_2 비에 대한 실험 결과로 부터 결정된 값으로서 모사화의 parameter로 사용되었다.

3. 반응 메카니즘

반응기내로 유입된 반응기체는 전자 충돌에 의하여 다양한 종류의 라디칼 및 이온등으로 분해된다. 따라서 여러 경로의 primary reaction을 고려할 수 있지만, 비정질 실리콘 증착에서 지배적인 반응성 라디칼들은 SiH_2[22]와 SiH_3[23,24]라고 알려져 있으므로 본 연구에서는 다음과 같은 primary reaction만이 주로 일어난다고 가정하였다.

$$\begin{aligned}SiH_4+e &\rightarrow SiH_2+H_2+e\\ SiH_4+e &\rightarrow SiH_3+H+e\\ H_2+e &\rightarrow 2H+e\end{aligned}$$

생성된 라디칼들은 플라즈마내에서는 각종 homogdneous reaction을 일으키지만 비교적 다른 반응들에 비하여 속도상수가 크다고 알려진 반응만을 고려하였으며 표 2에 나타내었다.

위의 반응들로부터 생성된 라디칼들이 기판 표면으로 이동되어 흡착되는 과정에서 박막의 밀도를 ρ, 라디칼 i의 flux를 F_i, sticking coefficient를 s_i라고 하면 증착속도는 다음식과 같이 표현된다.

$$\text{Deposition Rate}=(\textstyle\sum F_i s_i)/\rho \qquad (12)$$

여기서 표면이 amorphous일 경우 물리적 흡착만 고려될 수 있으므로 sticking coefficient는 1로 주었다.[5,26]

표 1. Dissociation cross section 정의에 사용된 상수

Table 1. Constants defining the dissociation cross section.

	ϵ_I	σ_I	ϵ_{II}	σ_{II}	ϵ_{III}	σ_{III}
$SiH_4 \rightarrow SiH_2 + H_2$	2.2	6.0×10^{-19}	7.47	1.65×10^{-16}	22.4	2.46×10^{-15}
$SiH_4 \rightarrow SiH_3 + H$	4.0	6.0×10^{-18}	7.47	1.65×10^{-16}	22.4	2.46×10^{-15}
$H_2 \rightarrow 2H$	0.0	0.0	8.8	7.74×10^{-18}	23.0	1.10×10^{-16}

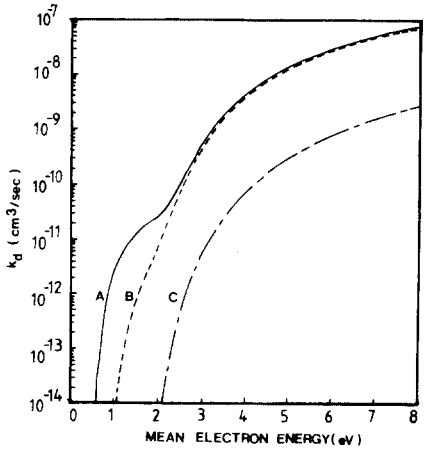


그림 2. 평균전자 에너지에 따른 실렌과 수소의 전자 충돌에 의한 분해속도 상수의 계산치

Fig. 2. Computed electron impact dissociation rate constants of SiH_4 and H_2 as a function of mean electron energy (A: $SiH_4 \rightarrow SiH_2 + H_2$ B: $SiH_4 \rightarrow SiH_3 + H$, C : $H_2 \rightarrow 2H$)

표 2. SiH_4/H_2 플라즈마에서 고려된 homogeneous reactions.

Table 2. Homogeneous reactions considered in SiH_4/H_2 plasma.

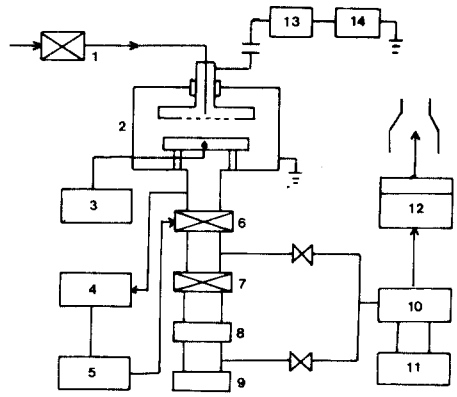
Reaction	Rate constant (cm^3/sec)	Reference
$H + SiH_4 \rightarrow SiH_3 + H_2$	4.6×10^{-13}	[25]
$H + Si_2H_6 \rightarrow Si_2H_5 + H_2$	3.9×10^{-12}	[26]
$SiH_2 + SiH_4 \rightarrow Si_2H_6$	9.5×10^{-13}	[27]
$SiH_3 + SiH_3 \rightarrow Si_2H_6$	3.0×10^{-10}	[27]

Ⅲ. 실험장치 및 방법

본 실험에 사용된 PECVD 장치의 구조도를 그림 3에 나타내었다. 반응기의 상단 전극에는 13.56 MHz 주파수의 RF power를 공급하고 반응기체가 공급되도록 하였다. 하단 전극은 접지되어 있으며 heating coil로 가열할 수 있고 K형 열전대로 감지하여 PID 제어 방법의 자동 온도 조절기로 제어한다. 반응기체는 증착 조건에 따른 유량과 분압을 MFC (mass flow controller)로 조절 하였으며 반응기의 진공도는 rotary와 diffusion pump를 사용하여 1×10^{-6} Torr까지의 고진공을 유지시킬 수 있다. a-SiH 박막 증착에 사용한 반응기체는 순도 99.999% SiH_4와 99.999% H_2를 사용하였다. 사용된 기판은 직경 4인치, 결정방향(111), 비저항이 10μohm-cm인 Si wafer를 유기물, 무기물 세척후 1000 A의 SiO_2를 도포한 후 사용하였다. 성장된 박막의 두께는 Nanospec AFT-210, 표면 roughness 측정기를 사용하였다. 표3에 본실험의 비정질 실리콘의 증착 조건을 나타내었다.

Ⅳ. 결과 및 고찰

평행판 형 PECVD 반응기에 의한 a-Si:H 박막 증착공정에서 continuum mechanics의 이론을 도입하였다. 증착 조건에 따른 반응기 내의 flow, 온도 및 반응물의 농도 분포를 계산하여 위하여 식(1)-(4)의 미분 방정식들을 유한 요소법을 사용하여 풀었다. 공정 변수에 따른 박막의 성장 속도와 박막의 균일도의 변화는 수학적 모델식, RE discharge parameter



(1:Mass flow controller, 2:Reactor, 3:Temperature Controller, 4:Capacitance Manometer, 5:Automatic Pressure Controller, 6:Throttle Valve, 7:Gate Valve, 8:Liquid N2 Trap, 9:Diffusion Pump, 10:Rotary Pump, 11:Oil Filter, 12:Gas Scrubber, 13:Matching Network, 14:RF Generator)

그림 3. PECVD 장치의 개략도

Fig. 3. Schematic diagram of PECVD system.

표 3. 비정질 실리콘의 증착 조건
Table 3. Deposition condition for amorphous silicon film.

Parameter	Range
Base Pressure	10^{-6} torr
Pressure	0.1−0.4Torr
Feed Flow Rate	14−35 sccm
SiH_4/H_2 ratio	7/7−7/28
Substrate Temp.	100−300℃
RF Power	20−50W
Electrode Spacing	4cm

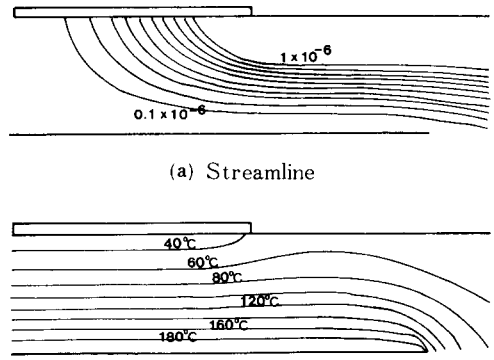
및 예상된 반응 메카니즘을 통하여 이론적 해석을 시도하였다. 수치해석에 적용된 영역은 그림 1의 $0\leq r\leq R_t, 0\leq z\leq d$ 인 반응기 내부로 30×20개의 grid로 나누어 staggered grid에 의한 control volume balance를 사용하여 해석하였으며 Patankar[28]에 의하여 제안된 SIMPLER algorithm을 이용하였다.

1. 반응기 내의 flow, 온도 및 반응물 농도 분포

반응기의 모델식으로 부터 얻은 flow streamline과 온도분포는 그림 4와 같이 나타났다. Flow 형태는 axisymmetric flow 형태를 갖는 laminar flow 형태를 나타내며 inlet velocity(Vo)에 의한 Re 값은 0.1 정도이다. Flow rate는 radial 방향과 함께 증가하고 axial 방향에 따라 감소함을 알 수 있다. 이로 부터 하단 전극 표면에 stagnant layer의 형성을 예상할수 있으며, 이것은 반응기의 기하학적 변화에 영향을 받으며[29] 증착 속도와 박막의 균일도에 영향을 준다고 알려져 있다.[30]

기판으로 사용된 하단 전극의 가열로 인하여 형성된 반응기 내의 온도 분포는 axial 방향으로 일정한 변화를 보이며 반응기 축으로 부터 radial 방향으로 진행됨에 따라서 flow convection의 영향이 증가됨을 볼 수 있다. 하단 전극 표면에서 온도 구배가 균일하여 thermal diffusion 효과는 박막의 균일도에 영향을 미치지 않음을 예상할 수 있다.

그림 5는 반응 기체인 SiH_4와 H_2의 농도 분포를 나타낸 것이다. 이 농도 분포로 부터 반응기 내의 반응물에 대한 분해 정도를 알 수 있다. SiH_4의 농도 분포는 양단 전극의 중심에서 가장 많이 분해된 것을 알 수 있다. 이러한 결과는 평행판 형 discharge에서 양단 전극의 중심부분이 가장 높은 전자 밀도를 가지므로 이 영역에서 반응물의 분해 속도가 가장 빠르기 때문이다.[15] H_2의 경우는 해리 에너지가

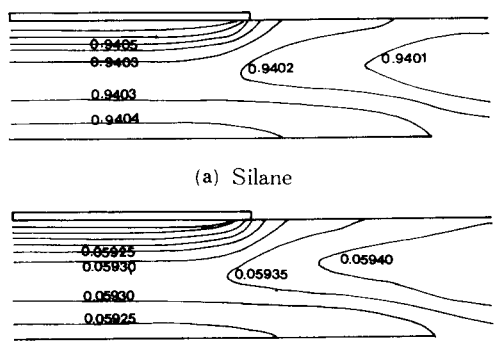


(a) Streamline

(b) Temperature

(Contour spacing: (A); 0.1cm₃/sec, (B); 20℃, Pressure=0.1 Torr, RF power=40W, SiH_4 flow rate=7 sccm, H_2 flow rate=7 sccm, substrate temperature=200℃)

그림 4. 유체 흐름 및 온도 분포
Fig. 4. Contours of flow streamlines and temperature distribution.



(a) Silane

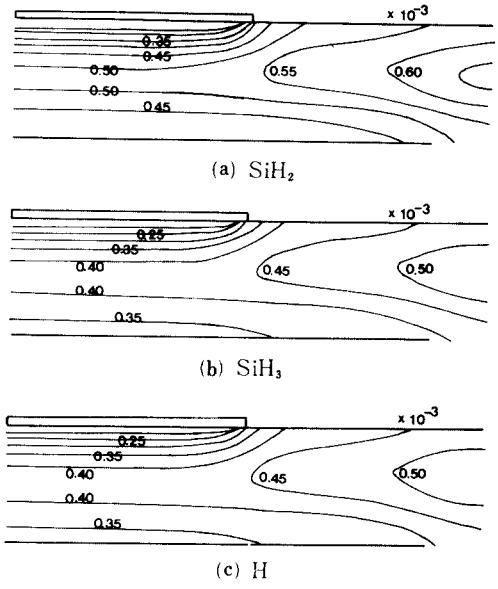
(b) Hydrogen

(Pressure=0.1 Torr, RF power=40W, SiH_4 flow rate=7 sccm, H_2 flow rate=7 sccm, Substrate temperature=200℃)

그림 5. 실렌과 수소의 농도 분포(무게 분율)
Fig. 5. Concentration distribution(weigth fraction) of silane and hydrogen.

8.8eV로서 SiH_4의 2.2eV보다 높기 때문에 분해 속도가 느리고[3,21] SiH_4의 분해에 의하여 수소가 생성되므로 양단 전극의 중심에서 가장 높은 농도를 보이는 반대의 결과를 나타낸다.

그림6은 비정질 실리콘 박막을 형성하는 반응성 라디칼들의 농도 분포를 나타낸 것이다. 이들 라디칼



(Pressure=0.1 Torr, RF Power=40W, SiH_4 flow rate=7 sccm, H_2 flow rate=7 sccm, Substrate temperature=200℃)

그림 6. 라디칼 SiH_2, SiH_3 및 H의 농도 분포 (무게 분율)

Fig. 6. Free radical concentration distribution (weight fraction) of SiH_2, SiH_3 and H.

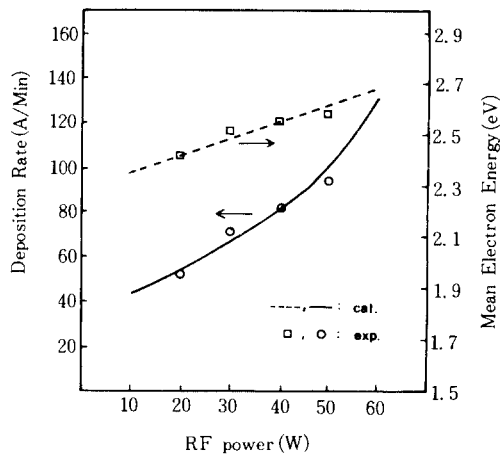
의 농도 분포는 하단 전극 표면의 중심 부근 에서는 일정한 분포를 갖지만 중간이후 부터 edge까지는 증가하였다. 이로부터 라디칼들의 기판 표면으로의 flux는 edge 근처에서 상대적으로 크고 따라서 박막의 균일도가 감소함을 예상할 수 있다.

2. 실험결과에 대한 모사화

증착 조건에 따른 실험 결과로 부터 수치모사에 대한 RF discharge parameter로 정한 평균 전자 에너지를 결정한 후 regression 하여 증착 변수에 따른 평균전자 에너지를 이론적으로 구하였다. 사용한 regression 방법은 nonlinear least square method 인 BSOLVE algorithm[31]을 이용하였다. 전형적인 RF discharge 조건에서 평균 전자 액너지는 약 2.0eV인데[21] 본 실험에서는 2.1eV에서 2.7eV 사이로 나타났다.

여러가지 공정 변수에 따른 증착 속도의 변화는 RFpower, 압력 및 SiH_4/H_2 비의 증가와 함께 증가하였는데, 이러한 경향은 문헌들과 일치하였다.[32,33]

그림 7에서 평균 전자 에너지는 RF power와 함께 증가하는데 이것은 RF discharge 내의 중심 영역에서 평균 전자 에너지의 증가는 반응기체의 분해속도



(Pressure=0.1 Torr, SiH_4 flow rate=7 sccm, H_2 flow rate=7 sccm, Substrate temperature=200℃)

그림 7. RF power에 따른 증착 속도와 평균 전자 에너지의 실험치 및 계산치

Fig. 7. Computed and experimental deposition rate and mean electrom energy as a function of RF power.

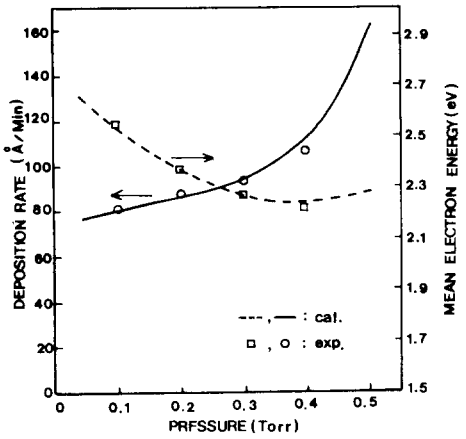
를 증가시키고 따라서 증착 속도를 증가시킨다고 설명될 수 있다.

그림 8에서는 압력의 증가와 함께 증착 속도와 평균 전자 에너지는 상반된 경향을 나타낸다. 이러한 현상은 압력의 증가와 함께 평균 전자 에너지는 감소 하지만 반응 기체의 증가로 인하여 분해 속도는 증가하여 증착 속도는 증가된다. 이와같이 압력의 증가에 따른 평균 전자 에너지의 감소는 매탄 plasma에서 분해 속도의 실험적 측정으로 부터 얻어진 결과와 일치하였다.[34]

그림 9는 SiH_4/H_2 비의 변화에 대한 결과로써 비가 증가함에 따라 평균 전자 에너지는 감소하고 증착 속도는 증가하였다. 이러한 결과는 a-Si:H 박막에 주된 영향을 미치는 성분이 SiH_4임을 나타내주며 반응성 라디칼의 생성 속도는 주로 SiH_4의 부분압과 관련됨을 알 수 있다.

3. 증착변수에 따른 박막 균일도의 변화

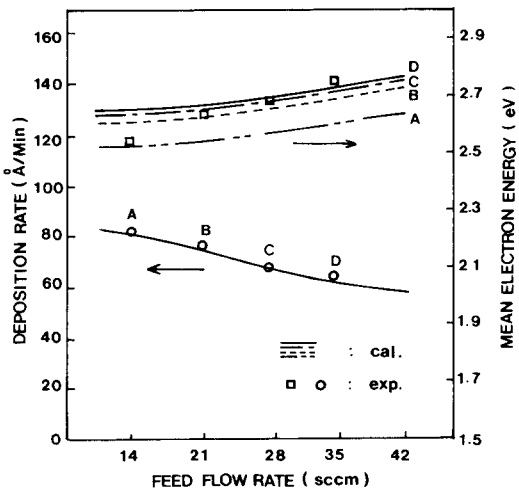
그림10은 하단 전극의 반경 방향 위치에 따른 증막 증착 속도를 실험치와 비교한 것으로 박막의 균일도는 반경방향 중심에서는 일정하게 나타났지만 edge 부근으로 갈수록 증착속도는 증가하였다. 이와 같이 기판에서 반경 방향에 따라서 증착 속도가 일정하지 않은 것은 박막의 균일도에 큰 영향을 미치



(RF power=40W, SiH_4 flow rate=7 sccm, H_2 flow rate=7 sccm, Substrate temperature=200℃)

그림 8. 반응 압력에 따른 증착 속도 및 평균 전자 에너지의 실험치 및 계산치

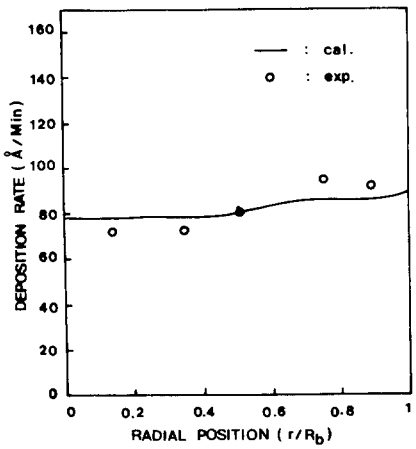
Fig. 8. Computed and experimental deposition rate and maen electron energy as a function of pressure.



(RF power=40W, Pressure=0.1Torr. Substrate temperature=200℃)

그림 9. SiH_4/H_2 비에 따른 증착 속도와 평균 전자 에너지의 계산치 및 실험치; SiH_4/H_2 = A:7/7, B:7/14, C:7/21, D:7/28

Fig. 9. Computed and experimental deposition rate and mean electron energy as a function of SiH_4/H_2; SiH_4/H_2 = A:7/7, B:7/14, C:7/21, D:7/28.



(RF power=40W, Pressure=0.1 Torr, SiH_4 flow rate=7 sccm, H_3 flow rate=7 sccm, Substrate temperature=200℃)

그림10. 반경 방향에 따른 증착 속도의 실험치 및 계산치

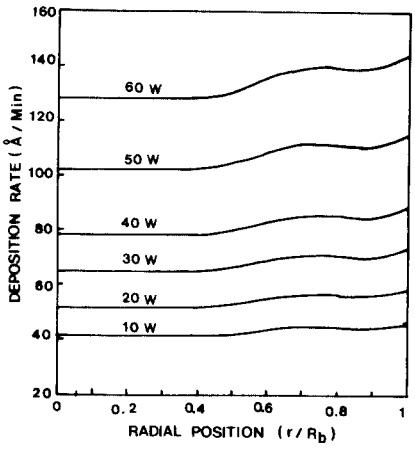
Fig. 10. Computed and experimental deposition rate as a function of radial position.

므로, 증착 변수에 따른 영향을 자세히 알아보기 위하여 컴퓨터 모사를 수행하였다.

그림11-13은 공정 변수에 따른 박막의 증착 속도와 균일도를 수치모사한 결과를 나타낸다. 하단 전극의 위치에 따른 박막 균일도는 반응기의 축에서 대체로 0.4 radial position까지는 일정하게 나타났고 점차 r방향과 함께 증착 속도가 증가하는 경향을 나타낸다. 이러한 결과는 하단 전극 표면에서 r방향의 flow에 대해 그림 6에 나타나듯이 precusor gas의 농도가 느리게 감소하므로 flow path에 따라 라디칼 농도의 gradient가 증가하여서 라디칼의 flux가 증가하게 되고 증착 속도가 커지게 된다.

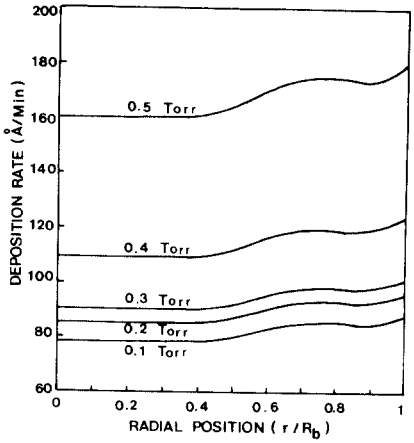
그림11과 12에서 RF power와 입력의 증가에 따른 균일도는 감소하는 것으로 나타났다. 이러한 결과는 flow pattern으로 부터 예상된 siagnant layer 에서의 반응성 라디칼 분포로써 설명된다. RF power와 압력이 낮아짐에 따라 전체적인 증착 속도는 감소할지라도 균일도는 향상됨을 알 수 있는데 이것은 diffusivity가 압력에 반비례하며, 또한 RF power와 압력이 낮을수록 radical 농도가 감소하고 따라서 기판 표면에서의 radical 농도의 gradient가 균일하여지기 때문으로 해석된다.

그림13은 SiH_4/H_2 ratio에 따라 균일도를 나타낸 것으로 거의 변화가 없음을 알 수 있다. 이러한 결과



(pressure=0.1 Torr, SiH_4 flow rate=7 sccm, H_2 flow rate=7 sccm, substrate temperature=200℃)

그림11. RF power에 따른 반경 방향 균일도의 변화
Fig. 11. Radial uniformity in deposition rate for various RF power.

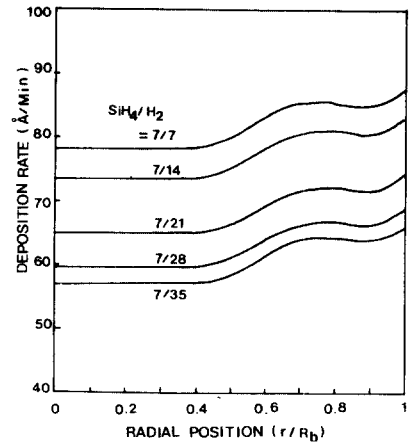


(RF power=40W, SiH_4 flow rate=7 sccm, H_2 flow rate=7 sccm, Substrate temperature=200℃)

그림12. 반응 압력에 따른 반경 방향 균일도의 변화
Fig. 12. Radial uniformity in deposition rate for various pressures.

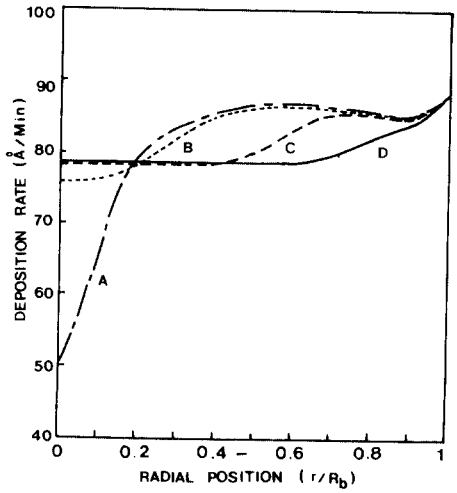
는 SiH_4 양이 일정하고 H_2의 양만 변화되므로 표면에서의 반응성 라디칼의 양은 변화하여도 박막 성장에 주된 영향을 미치는 SiH_2와 SiH_3 라디칼의 농도 분포의 변화가 없기 때문이다.

그림14는 반응기의 기하학적 변화로써 inlet sho-



(RF power=40W, pressure=0.1 Torr, Substrate temperature=200℃)

그림13. SiH_4/H_2 비에 따른 반경 방향 균일도의 변화
Fig. 13. Radial uniformity in deposition rate for various SiH_4/H_2 ratios.



(A=2cm, B=4cm, C=8cm, D=10cm, RF power=40W, Pressure=0.1 Torr, SiH_4 flow rate=7 sccm, H_2 flow rate=7 sccm, Substrate temperature=200℃)

그림14. Inlet shower 부분의 반경 크기에 따른 반경 방향 균일도의 변화
Fig. 14. Radial uniformity in deposition rate for various inlet radius.

wer 부분의 반경에 따른 박막의 균일도를 알아본 것이다. 반경이 증가함에 따라 증착 속도는 감소할지라도 균일도는 향상됨을 알 수 있으며, 이러한 결과는 flow pattern으로 설명할 수 있다. 즉, 반경이 감소하면 반응기 축 중심의 하단 전극 표면에서 stagnant layer가 거의 나타나지 않아 라디칼의 농도 감소가 빨라질 것이 예상된다. 그리고 radial position 중심에서 큰 stagnant layer가 형성되어 박막의 증착 속도가 증가된다. 따라서 반응기의 기하학적 변화는 flow pattern에 큰 영향을 주며, 본 반응기의 형태에서는 stagnant layer가 기판 표면에 일정하게 형성되도록 하여야만 균일도의 향상을 기대할 수 있음을 알 수 있다.

V. 결 론

비정질 실리콘의 PECVD 공정에서 평행판형 반응기에 대하여 flow dynamic model 식과 discharge 내의 electron kinetics, 그리고 reaction mechanism 을 묘사하였으며 다음과 같은 결론을 얻었다.

1. 평행판형 PECVD 반응기는 axysymmetric 한 laminar flow 형태를 나타냈으며 기판 표면에서 stagnant layer가 형성 되었다.

2. 모델식으로 부터 계산된 증착속도와 박막의 균일도는 실험 결과와 잘 일치하였다. RF power, 압력, 그리고 SiH_4/H_2 비가 증가함에 따라 증착손도는 증가하였다.

3. 기판의 반경 방향에 따른 박막의 균일도는 edge 부근에서는 나쁘지만, 중심에서 반경 방향의 위치(r/R_b)가 0.4까지는 일정한 경향을 나타내었다.

4. 반응압력과 RF power가 낮을수록, 반응가스의 inlet shower 부분의 반경이 증가할수록 증착속도는 감소하였지만 기판의 반경 방향에 따른 균일도는 증가하였다.

參 考 文 獻

[1] M. Hirose, in "*Plasma Deposited Thin Films,*" edited by J. Mort and F. Jansen, CRC Press, Florida, 1986.

[2] G. Turhan, Y. Gatherine and B. Grolleau. *Thin Solid Films.* 60. 147 1979.

[3] I. Chen, *Thin Solid Films,* 101, 41 1983.

[4] S. Rhee and I. Szekely, *J. Electrochem. Soc.,* 133, 2194, 1984.

[5] M.J. Kushner, *Msaterials Research Society Symposia Proceedings,* edited by J.W. Coburn, R.A. Gottscho and D.W. Hess, vol. 68, 293, 1986.

[6] F.C. Eversteyn, P.J.W. Severin, C.H.J.V.D. Brekel and H.L. Peek, *J. Electrochem. Soc.,* 117, 925, 1970.

[7] J. Subrahmanyam, A.K. Lahiri, and K.P. Abraham, *J. Electrochem. Soc.,* 127, 1394, 1980.

[8] J. Korec and M. Heyen, *J. Crystal Growth,* 60, 286, 1982.

[9] J. Juza and J. Cermak, *J. Electrochem. Soc.,* 129, 1627, 1982.

[10] M.E. Coultrin, R.J. Kee, and J.A. Miller, J. *Electrochem.Soc.,* 131, 425, 1984.

[11] E. Fujii, H. Nakamura, K. Haruna, and Y. Koga, *J. Electrochem. Soc.,* 119, 1106, 1972.

[12] C.W. Manke and L.K. Donaghey, *J. Electrochem. Soc.,* 124, 561, 1977.

[13] J. Van de Ven, G.M.J. Rutten, M.J . Raaijmakers, and L.J. Giling, *J. Crystal Growth,* 76, 352, 1986

[14] J.H. Koh and S.I. Woo, in Press, J. Electrochem, Soc., 1990.

[15] B. Chapman, "*Glow Discharge Processes,*" John-Wiley & Sons, New York, 1980.

[16] D.B. Graves and K.F. Jensen, *IEEE Trans. Plasma Sci.,* PS-14, 78, 1986.

[17] W.P. Allis and D.J. Rose, *Phys. Rev.,* 93, 84, 1954.

[18] A.T. Bell, in "Techniques and Application of Plasma Chemistry," ed. by J.R. Hollehan and A.T. Bell, John Wiley & Sons, New York, 1974.

[19] M. Dalvie, K.F. Jensen, and D.B. Graves. *Chem. Eng. Sci.,* 41, 653, 1986.

[20] I. Haller, *J. Vac. Sci. Technol.,* A1, 2376, 1983.

[21] S.J.B. Corrigan, *J. Chem. Phys.,* 43, 4381, 1965.

[22] G.G.A. Perkins, E.R. Austin, and F.W. Lampe, *J. Am. Chem. Soc.,* 101, 1109, 1979.

[23] P.A. Longeway, R.D. Estes, and H.A. Wiekliem, *J. Phys. Chem.,* 88, 73, 1984.

[24] R. Robertson, D. Mils, H. Chatham, and A. GaHagher Appl. Phys. Lett., 43, 544 (1983)

[25] G. Turban, Y. Catherine, and B. Grolleau, *Thin Solid Films,* 77, 287, 1981.

[26] P.E. Vanier, F.J. Kampas, R.R. Corderman, and G. Rajeswaran, *J. Appl. Phys.,* 56, 1812, 1984.

[27] D. Mihelic, V. Schubert, R.N. Schindler,

and P. Potsinger, *J. Phys. Chem.*, 81, 1543, 1977.
[28] S.V. Patankar, *"Numerical Heat and Mass Transfer and Fluid Flow,"* Van Nostrand Reinhold Company, 1980.
[29] C. Hotman, D.B. Graves, and K.F. Jensen, *J. Electrochem. Soc.*, 133, 961, 1986.
[30] G. Whal, F. Schmarderer, R. Huber, R. Weber, B. Boveri and Cie AG., Mannheim, *Proc. 10th Intern'l Conf. on CVD*, 42, 1987.
[31] J.L. Kuester and J.H. Mize, *"Optimization Techniques with Fortran,"* McGrow-Hill, New York, 1973.
[32] R.C. Ross and J. Jaklik, Jr., *J. Appl. Phys.*, 55, 3785, 1984.
[33] J. Shrafuji, M. Kuwagaki, T. Sato, and Y. Inuishi, *Jpn. J. Appl. Phys.*, 23, 1278, 1984.
[34] K. Tachibana, M. Nishida, H. Harima, and Y. Urano, *J. Phys. D.* 17, 1727, 1984.

著 者 紹 介

金 鎭 洪(正會員)
1963年 1月 20日生. 1986年 2月 서강대학교 화학공학과 졸업. 1989年 2月 한국과학기술원 화학공학과 석사학위 취득. 1989年～현재 삼성반도체 연구소 연구원

●

南 哲 祐(正會員)
1961年 6月 17日生. 1988年 2月 연세대학교 화학공학과 졸업. 1990年 2月 한국과학기술원 화학공학과 석사학위 취득. 1990年 2月～현재 한국과학기술원 화학공학과 박사과정 재학 중

禹 誠 一(正會員)
1951年 5月 19日生. 1973年 서울대학교 화학공학과 졸업. 1975年 한국과학원 화학공업과 석사학위 취득. 1983年 미국 Wisconsion 대학 박사학위 취득. 1983年～1985年 Toronto대학 화학과 3M company 연구원. 1985年～현재 한국과학기술원 화공과 부교수

●

金 龍 泰 (正會員) 第25卷 第8號 參照
현재 한국과학기술연구원 반도체재료 연구실 선임연구원