

論文93-30A-8-11

MBE장치에 의한 에피 성장 두께 균일도 계산

(Calculations of Thickness Uniformity in Molecular Beam Epitaxial Growth)

尹慶植*, 金銀奎**, 閔碩基**

(Kyung Sik Yoon, Eun Kyu Kim and Suk-Ki Min)

要約

MBE장치에서 분자선원과 기판의 상대적 배치와 crucible의 제원으로부터 에피층의 성장 두께 균일도를 계산하여 연구용 MBE장치의 최적 설계조건을 구하였다. 3인치 기판전체에서 5% 이내의 두께 균일도를 얻으려면 기판과 crucible간의 거리는 20cm, crucible의 tapering angle은 6° 이상이 적합하며, 기판중심의 수선과 crucible 중심축이 이루는 각은 클수록 양호한 균일도를 얻을 수 있음을 알 수 있다. 또한, 기판과 crucible의 orifice간의 거리가 25cm 이상이면 성장수율은 51% 이하로 떨어진다.

Abstract

The growth thickness uniformity of epitaxial layers deposited using a molecular beam epitaxy system is calculated from the arrangement of molecular beam source and the substrate and the geometric dimensions of the crucible in order to predict the optimum design conditions of the prototype MBE system. The thickness uniformity better than 5% over a 3-inch wafer can be obtained by keeping the distance between the substrate and the crucible's orifice longer than 20 cm, the tapering angle of the crucible larger than 6°, and the angle between the normal to the substrate at the center and the crucible axis as larger as possible. In addition, the growth yield decreases to below 51% as the distance between the substrate and the orifice becomes longer than 25cm.

1. 서론

1960년대말 처음 제안된 MBE(Molecular Beam Epitaxy)기술은 미국, 일본, 프랑스, 영국 등의 여러 연구자들의 꾸준한 연구결과로 오늘날 반도체 박막성장 제조분야에서 핵심기술의 하나가 되었다. 즉,

MBE장치는 에피층의 성장공정을 정확히 제어할수 있으므로 에피층의 균일한 두께와 조성원소비가 요구되는 MQW LD, HEMT, Resonant Tunneling Diode와 같은 신기능 첨단소자의 개발과 제조에 필수적 장비로 현재 일본은 1000 여대, 미국은 500 여대의 MBE 장치를 각각 보유하고 있으며, 국내에는 프랑스(Riber), 영국(V.G), 일본(Eiko)에서 도입한 10 여대가 운용되고 있는 실정이다.

이 MBE 기술은 초고진공 (10^{-10} torr) 기술이 필요하여 그동안 국내제작이 어려웠으나, 최근 국내 연구소 및 대학의 기초연구 활성화와 산업계의 초고진공 기술의 국내정착으로 한국과학기술연구원에서 연

* 正會員, 高麗大學校 情報工學科

(Dept. of Information Eng., Korea Univ.)

**正會員, 韓國科學技術研究院 半導體材料研究室

(Semiconductor Materials Lab., KIST)

接受日字: 1992年 10月 2日

구용 MBE 장치의 설계 및 제조기술을 개발중에 있다.

MBE 장치에서 성장시키는 에피층의 성장 균일도는 분자선원 (molecular beam source)과 기판 (substrate)의 상대적 배치관계 뿐만 아니라 crucible의 모양에도 크게 영향을 받는다. 그러므로, 본 연구에서는 MBE장치의 분자선원과 기판의 배치와 crucible의 모양을 결정짓는 기하학적 제원을 입력하여 성장시키는 에피층의 두께균일도를 계산하는 computer simulation 프로그램을 개발하였다. 이 프로그램을 이용하여 3인치 웨이퍼 상에 성장시키는 에피층의 두께 균일도를 계산하여, 연구용 수직형 MBE장치의 성장 chamber 설계에 필요한 최적 제원을 성장 수율(growth yield)을 고려하여 도출하였다.

II. 모형 및 계산 방법

분자선 흐름(molecular beam flux)의 분포에 관한 이론은 Knudsen ^[1]에 의하여 최초로 확립되었다. 그는 이상기체를 담고 있는 effusion cell의 orifice로부터의 분자선 방출을 연구하여 분자선을 가로막는 기판표면에 입사하는 분자선 속(flux)은 다음 3가지 항에 비례하는 것을 밝혔다.

1. 기판표면과 orifice를 연결하는 선과 orifice의 수선이 이루는 각의 여현값.

2. 기판표면과 orifice를 연결하는 선과 기판표면의 수선이 이루는 각의 여현값.

3. orifice와 기판간의 거리의 제곱의 역수.

이로부터 그림 1의 기판상의 한 점 P에 입사하는 분자선 flux는 분자선원으로부터 직접 입사하는 것과 crucible의 벽에 충돌한 후에 입사하는 것의 합으로 다음과 같이 주어진다. ^[1,2]

$$F = \int_s \frac{E_s(n \cdot v)(-n \cdot v)}{\pi(v \cdot v)^2} da + \int_w \frac{E_w(n'' \cdot v)(-n \cdot v)}{\pi(v \cdot v)^2} da'' \quad (1)$$

여기서, 첫째 항은 분자선원으로부터 방출된 분자선이 기판위의 점 P에 직접 입사하는 분자선 flux를 의미하며, E_s 는 분자선원 표면상의 점 P'에서 방출되는 분자들의 면적 방출율이다. 둘째 항은 분자선원에서 방출되는 분자선이 crucible의 벽에 충돌한 후 재방출되어 기판에 입사하는 분자선 flux를 나타내며 E_w 는 crucible의 벽위의 점 P''에서 방출되는 분자들의 면적 방출율이다. n, n', n'' 은 각각 점 P, P', P''에서 표면에 수직인 단위수선이며, v 는 식(1)의 첫째 항에서 점 P'에서 점 P로 향하는 벡터이고, 둘

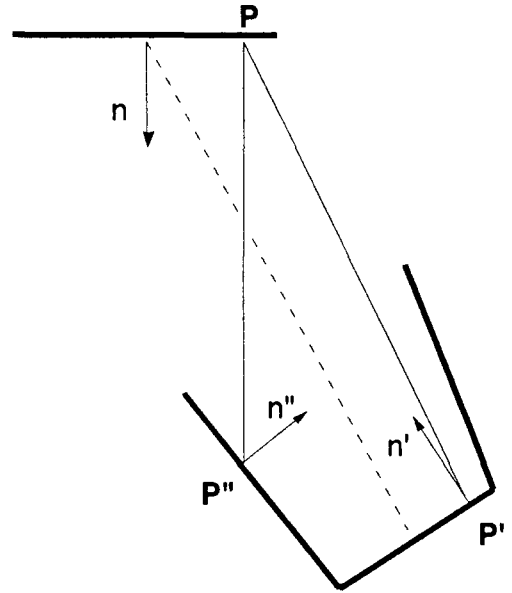


그림 1. 기판과 crucible의 배치도

Fig. 1. Configuration of a substrate and a crucible.

째 항에서는 점 P'에서 점 P로 향하는 벡터이다. 그리고 da' 와 da'' 는 점 P'과 P''를 포함하는 면적 요소이다. 점 P'에서 방출되는 flux는 바로 그점에 입사하는 flux와 같다고 가정한다.

본 계산에서는 그림 2와 같이 밀바닥이 열려있는 작은 crucible이 삽입된 이중 crucible을 사용하여 분자선이 삽입된 crucible의 밀바닥에서 방출되는 것으로 가정하면, 분자선원의 높이가 분자선의 방출에 따라 변하는 것을 무시할 수 있다. ^[3,4] 그러나, source가 삽입된 작은 crucible 내벽위로 올라올 정도로 과충전되는 경우는 conical crucible를 사용하는 경우와 같이 방출 flux가 분자선원의 높이에 따라 변하므로 본 계산에서는 고려하지 않았다. 또한, crucible을 기울이면 용융된 분자선원의 표면이 crucible의 중심축에 수직이 아니나, 분자선이 crucible 깊숙히 밀바닥 근처에서 방출된다면 분자선원의 표면이 crucible의 중심축에 수직인 경우의 전체 flux분포와 크게 다르지 않으므로 이의 영향은 무시하였다. ^[3,5] 따라서, crucible의 벽에서 재방출되는 면적 방출율 E_w 는 crucible 중심축에 대하여 대칭적이며 깊이만의 함수로 가정하여 자체일관적 (self-consistent)으로 계산하였다.

III. 즉원소 분자선의 기판 도달율은 성장율과 직접 관련이 있으므로 식(1)을 수치적분하여 분자선속을 계

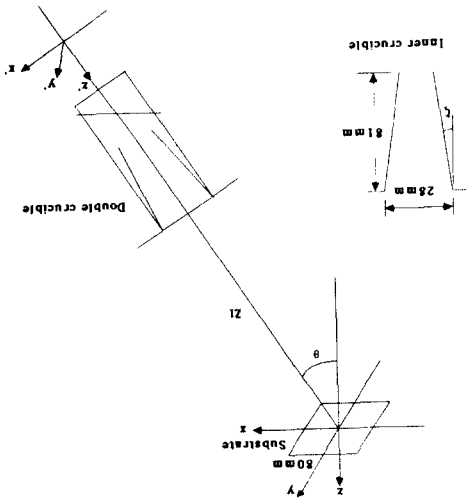


그림 2. 본 연구에 사용된 기판과 crucible의 배치 및 기하학적 제원

Fig. 2. Geometry of a crucible and a substrate for the MBE system simulated in this work.

산하면 이로부터 기판에 증착된 막의 상대적 두께를 알 수 있다. 식(1)은 면적분으로 Romberg 방법을 사용하여 이중적분값을 계산하였다.

분자선원 표면에서의 면적 방출율 E_s 는 다음과 같이 주어진다.

$$E_s = \frac{P}{(2\pi m k_B T)^{1/2}} \quad (2)$$

여기서 p 는 절대온도 T 에서의 열평형 압력이고 m 은 증기상태의 분자의 질량이며 k_B 는 Boltzmann 상수이다.

그러나, 기판전체의 에피층의 성장균일도 즉, 상대적 두께를 계산하고자 하는 본 연구에서는 면적 방출율로 식 (2)을 사용하는 대신 E_w 을 계산편의상 1로 하였다.

III. 프로그램의 구성

본 연구에서 개발된 프로그램의 흐름도는 그림 3과 같으며 표준 Fortran 77로 구조화 기법을 이용하여 작성되었다. 이 프로그램 흐름도에서의 각 block은 subroutine module에 해당한다. 따라서, 주 프로그램은 입력력 부분과 5개의 subprogram으로 구성된다. 본 프로그램의 입력부분에서 기판과 crucible의

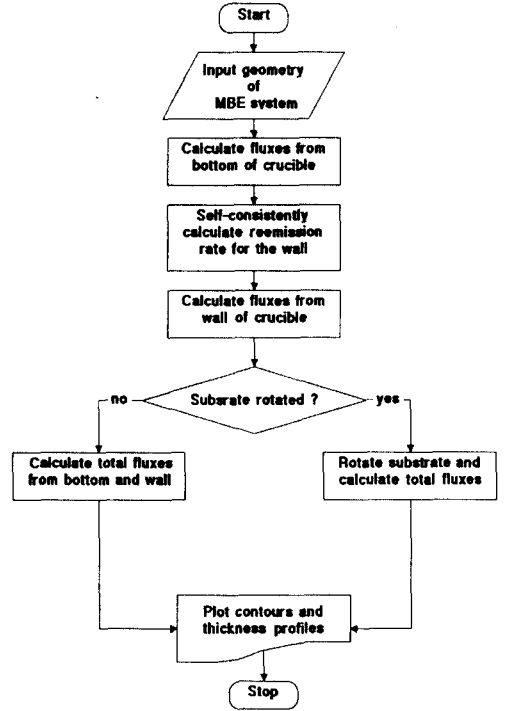


그림 3. 본 연구에서 개발된 프로그램 흐름도

Fig. 3. A program flowchart developed in this work.

기하학적 제원을 입력한다. 즉, 에피층의 두께균일도는 기판과 crucible의 상대적 위치와 그 crucible 모양에 영향을 받으므로 본 계산에는 기판과 crucible의 orifice간의 거리(Z_1), 기판중심 수선과 crucible 중심축이 이루는 각(θ), 그리고 crucible의 모양을 결정하는 orifice의 반경, crucible의 높이와 tapering angle(ζ)을 입력한다.

본 연구에서는 이중crucible을 사용하므로 분자선이 삽입된 crucible의 밑바닥에서 방출되는 것으로 가정하므로, 프로그램의 첫번째 block은 crucible 밑바닥의 분자선원으로부터의 분자선 flux를 계산하는 부프로그램이다. 두번째 block은 crucible 벽에서 재방출되는 면적율 E_w 를 계산하는 부프로그램으로 재방출 면적율은 밑바닥의 분자선원으로부터 방출과 벽으로부터 재방출의 합으로부터 1% 이내로 수렴할 때까지 자체 일관적으로 계산한다. 세번째 block은 위에서 계산한 재방출율을 사용하여 벽으로부터의 방출에 기인된 분자선 flux를 계산하는 부프로그램이다. 기판이 정지된 상태로 에피층을 성장시키는 경우는 crucible 밑바닥의 분자선원으로부터 방출되는 flux

와 crucible의 벽으로부터 입사되는 flux를 단순히 합하여 기판에 입사되는 전체 flux를 계산하는 부프로그램 모듈을 택하고, 만일 기판을 기판중심축을 중심으로 회전시켜 에피층을 성장시킨다면 정지된 기판의 flux 분포로부터 회전중심축을 중심으로 하는 회전을 수치적으로 시뮬레이션하여 에피층 두께의 평균치를 계산하는 부프로그램을 선택한다. 끝으로 기판에 입사하는 전체 flux의 분포를 출력화일로 만든다. 이로부터 성장된 에피층 두께를 기판전체에서 볼 수 있는 3차원 조감도와 2차원 contour plot, 그리고 기판의 중앙을 가로지르는 상대적 두께단면도를 PC-386상에서 도시할 수 있는 plotting software를 이용하여 출력시킨다.

IV. 계산 결과

MBE 장치에서 성장시키는 에피층의 성장 균일도는 기판과 crucible의 상대적 위치와 crucible의 모양에 영향을 받으므로, 본계산에서는 기판과 crucible의 입구(orifice)간의 거리, 기판의 수선과 crucible의 중심축이 이루는 각, 그리고 crucible의 모양을 결정하는 제원에서는 crucible의 tapering angle을 변수로 취하였다. 따라서, 이들 3 변수중 2 변수는 고정하고 나머지 한 변수를 변화시키는 방법으로 각각의 영향을 살펴보고자 한다.

본 계산에 사용된 기판과 crucible의 치수는 그림 2에 도시한 바와 같이 변의 길이가 80mm인 정사각형의 기판과, 높이는 81mm이고 orifice의 직경은 28mm이고 밑바닥은 열려있는 crucible을 사용하였다. 그리고, 기판에서 tapering angle이 7.5°인 crucible의 입구까지의 거리를 20cm로 고정된 후, 기판중심에서의 수선과 기판의 중심을 향하는 crucible중심축이 이루는 각(θ)이 20°일 때 기판에 도달하는 분자선 flux 분포를 그림 4에 도시하였다. 이그림에서 contour의 간격은 2%의 변화를 나타낸다. 그림 4-a는 crucible의 밑바닥의 분자선원에서 방출로 인한 flux 분포를 2차원 contour와 3차원 조감도로 도시한 것이다. 그림 4-b는 crucible의 벽으로부터 재방출에 의한 flux분포를 contour와 조감도로 도시하였다. 그림 4-c는 이들의 flux의 합을 나타낸 것으로 flux 최대값이 기판의 중심에서 우측으로 이동한 것을 알 수 있다. 이것은 기판수선과 crucible 중심축이 이루는 각이 클 수록 크게 우측으로 이동한다. 따라서 기판전체에서 성장시키는 에피층의 두께가 균일하도록 기판을 기판중심축을 중심으로 회전시키며 에피층을 성장시켰을 때의 flux 분포를 그

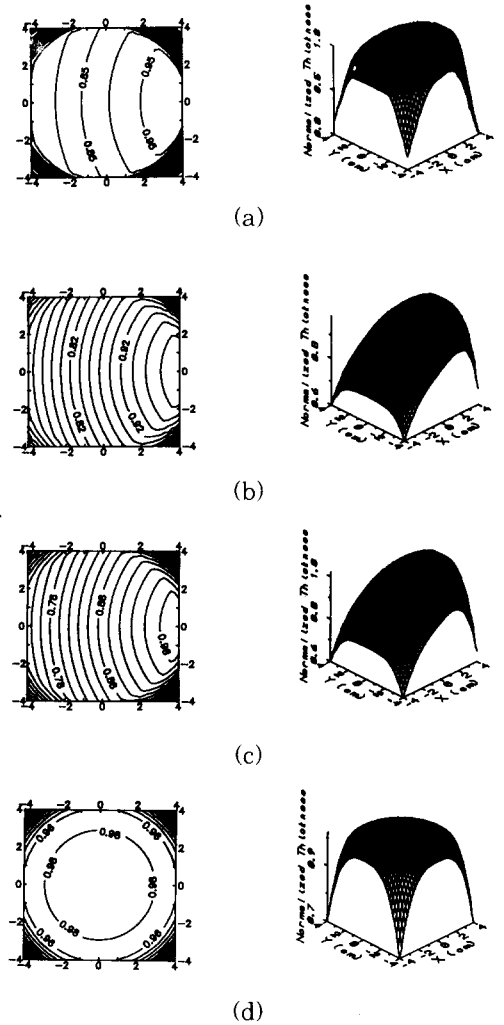


그림 4. (a) crucible 밑바닥의 분자선원으로부터 방출로 인한 flux, (b) crucible 벽으로부터 재방출로 인한 flux, (c) crucible 밑바닥과 벽으로부터 입사하는 전체 flux, (d) 기판을 기판중심축을 중심으로 회전시켰을 때 기판에 입사하는 flux 분포의 contour 및 조감도

Fig. 4. Contour plots and perspective profiles of flux distributions due to (a) the emission from the bottom, (b) the reemission from the wall, (c) the bottom and the wall, and (d) the bottom and the wall with respect to rotation about the center of the substrate.

림 4-d에 나타내었다. 그리고, θ 를 매개변수로 취하여 0° 에서 40° 까지 10° 간격으로 변화시켜가며 기판회전을 시뮬레이션하여 계산한 beam flux, 즉 에피층의 상대적 두께를 최대 두께로 정규화시켜 기판의 중앙을 가로지르는 단면을 그림 5에 도시하였다. 이로부터 기판과 crucible의 orifice간의 거리가 20cm 이상이면 기판전체에서 기판과 crucible중심축이 이루는 각에 관계없이 5% 이내의 두께균일도를 얻을 수 있음을 알 수 있다. 물론 각이 클 수록 좋은 균일도를 얻을 수 있으며 40° 의 경우 1% 이내의 균일도를 얻을 수 있다.

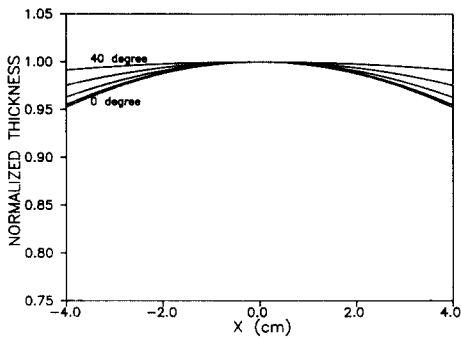


그림 5. Zl이 20cm이고 θ 을 0° 에서 40° 까지 10° 간격으로 변화시켰을 때 기판중심을 축으로 회전하여 성장시킨 에피층의 정규화된 두께 단면도

Fig. 5. Normalized thickness cross sections for epitaxy layers grown on a rotating substrate where θ changes 0° to 40° in 10° intervals with $Zl = 20\text{cm}$.

같은 제원의 crucible을 사용하여, crucible의 중심축을 기판중심의 수선과의 각도(θ)를 25° 로 고정한 후 기판과 crucible 입구까지의 거리(Zl)를 매개변수로 10cm, 15cm, 20cm, 30cm, 40cm로 변화시켜 성장시킨 에피층의 두께를 계산하여 최대 두께로 정규화시킨 기판의 단면을 그림 6에 도시하였다. 여기서 crucible 중심축과 기판수선이 이루는 각이 25° 인 경우 기판과 crucible orifice간의 거리가 15cm 이면 기판전체에서 8%이내의 두께 균일도를 얻을 수 있다. 따라서 기판과 crucible간의 거리가 짧으면 기판 모서리에서 두께가 급격히 변화하는 것을 알 수 있다. 그러므로 거리가 너무 짧으면 기판전체에서 균일도가 좋지 않지만 적절히 거리를 선택하

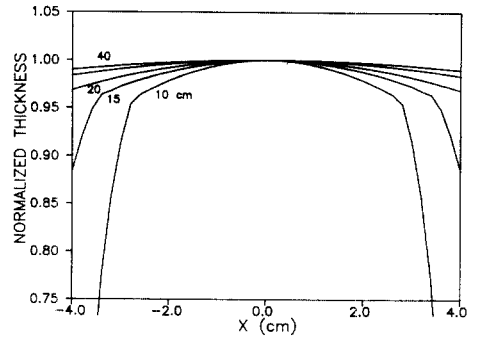


그림 6. θ 가 25° 이고 Zl이 10, 15, 20, 30, 40cm일때 기판중심을 축으로 회전하여 성장시킨 에피층의 정규화된 두께 단면도

Fig. 6. Normalized thickness cross sections for epitaxy layers grown on a rotating substrate where Zl changes from 10 to 40 cm in 10cm intervals with $\theta = 25^\circ$.

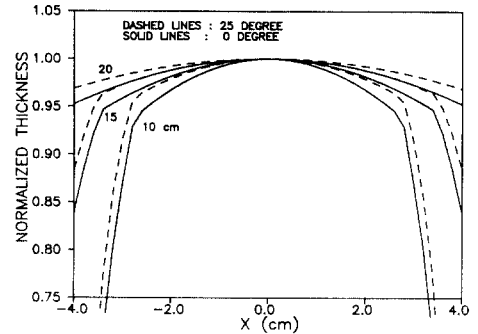


그림 7. θ 가 0° (실선)와 25° (파선) 이고 Zl이 10cm에서 20cm까지 5cm간격으로 변화시켰을 때 기판중심을 축으로 회전하여 성장시킨 에피층의 정규화된 두께 단면도

Fig. 7. Normalized thickness cross sections for epitaxy layers grown on a rotating substrate where Zl changes from 10 to 20cm in 5cm intervals with $\theta = 0^\circ$ (solid lines) and $\theta = 25^\circ$ (dashed lines).

면 5% 이내의 균일도를 유지하며 성장수율을 개선할 수 있다. 그림 7은 기판중심 수선과 crucible중심축이 이루는 각이 0° 이고 거리가 각각 10cm, 15cm, 20cm 일 때의 기판의 중앙을 가로지르는 상대적 두

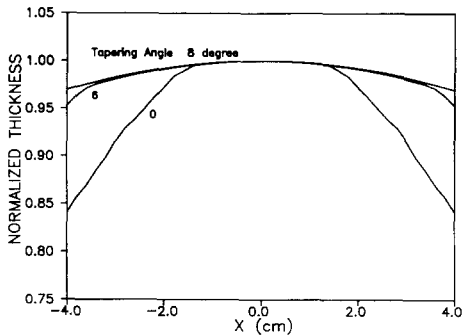


그림 8. θ 가 25° 이며 Z_1 이 20cm이고 ζ 을 0° , 6° , 8° 로 변화시켰을 때 기판중심을 축으로 회전하여 성장시킨 에피층의 정규화된 두께 단면도

Fig. 8. Normalized thickness cross sections for epitaxy layers grown on a rotating substrate : $\theta = 25^\circ$, $Z_1=20\text{cm}$, and $\zeta = 0^\circ, 6^\circ$ and 8° .

계 단면을 실선으로 나타내며, 기판과 crucible중심 축이 이루는 각이 25° 이고 거리가 각각 10cm, 15cm, 20cm 일 때의 두께 단면을 파선으로 나타내어 기판중심 수선과 crucible중심축이 이루는 각이 25° 인 경우와 0° 인 경우의 두께단면을 비교하여 봄으로써 이의 영향을 살펴보았다.

그림 8은 기판과 crucible의 orifice간의 거리가 20cm, 기판 중심 수선과 crucible 중심축이 이루는 각은 25° 이고 crucible의 tapering angle(ζ)을 매 개변수로 취하여 각각 0° , 6° , 8° 일 때 기판의 중앙을 가로지르는 상대적 두께의 단면도이다. 여기서 기판 전체에서 두께균일도를 5%이내로 유지하려면 tapering angle이 6° 이상은 되어야 함을 알 수 있다.

또한, orifice의 직경이 28mm, 높이 81mm, tapering angle이 7.5° 인 crucible를 사용하여 기판을 회전시키며 기판중심의 수선과 crucible중심축이 이루는 각을 25° 로 하고 기판과 crucible의 orifice간의 거리를 변수로 취하여 10, 15, 20, 30cm 일 때 32cm의 기판에 도달하는 flux분포를 그림 9에 도시하였다. 그림 9로부터 계산한 성장수율(growth yield)은 기판과 orifice간의 거리가 10cm 일 때 90.3%, 15cm 일 때 74.8%, 20cm 일 때 61.1%, 25cm 일 때 51.5%, 그리고 30cm 일 때 44.8%를 얻었다. 여기서의 성장수율은 crucible로부터 나오는 전체 방출 flux중에서 3인치 기판에 도달하는 양의 비로 정의하였다.

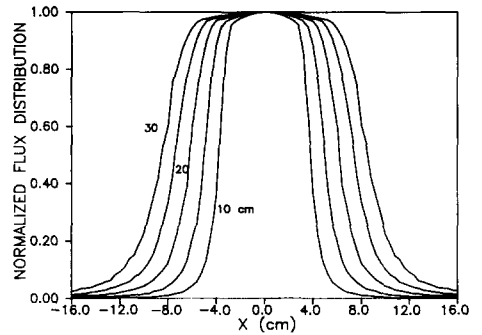


그림 9. θ 가 25° 이며 Z_1 이 15cm에서 30cm까지 5cm간격으로 변화시켰을 때 기판중심을 축으로 회전하여 성장시키는 32cm의 기판의 중앙을 가로지르는 정규화된 flux 분포

Fig. 9. Cross sections for normalized flux distributions incident to a rotating 32cm substrate where Z_1 changes from 10 to 30cm in 5cm intervals with $\theta = 25^\circ$.

V. 결 론

기판과 crucible의 orifice간의 거리가 20cm이면 기판중앙과 crucible 중심축이 이루는 각에 관계없이 기판 전체에서 5% 이내의 성장 균일도를 얻을 수 있으며, 40° 이상이면 1% 이내의 균일도를 얻을 수 있으나 성장 chamber가 커지게 되는 단점이 있다. MBE장치에서 5%이내의 성장 균일도를 원한다면 기판과 crucible 입구와의 거리는 20cm 이상이 적절하며, 거리를 증가시킬 수록 균일도는 향상되나 분자선원의 성장수율은 감소할 것이다. 또한, tapering angle이 6° 이상은 되어야 함을 알 수 있다.

한편, 기판과 crucible의 orifice간의 거리가 25cm 이상이면 성장수율은 51% 이하로 떨어진다. 따라서, 60% 이상의 성장수율을 유지하며 기판전체에서 5% 이내의 성장 균일도를 얻으려면 기판과 crucible간의 거리는 20cm, crucible의 tapering angle은 6° 이상이 적합하며, 기판중심의 수선과 crucible 중심축이 이루는 각은 클 수록 양호한 성장 균일도를 얻을 수 있음을 알 수 있다.

參 考 文 獻

[1] J. A. Curlless, "Molecular beam epitaxy beam flux modeling," *J. Vac. Sci.*

- Technol. B 3(2), 531 (1985).
- [2] T. Yamashita, T. Tomita and T. Sakurai, "Calculations of Molecular Beam Flux from Liquid Source," *Jpn. J. Appl. Phys.* 26, 1192 (1987).
- [3] Z. R. Wasilewski, G. C. Aers, A. J. SpringThorpe and C. J. Miner, "Growth uniformity studies in molecular beam epitaxy," *J. Cry. Grow.* 111, 70 (1991).
- [4] A. J. SpringThorpe, A. Majeed, C. J. Miner, Z. R. Wasilewski, and G. C. Aers, "Improved thickness uniformity in molecular beam epitaxial growth of GaAs using a tilted conical insert crucible," *J. Vac. Sci. Technol. A* 9(6) 3175 (1991).
- [5] Z. R. Wasilewski, G. C. Aers, A. J. SpringThorpe and C. J. Miner, "Studies and modeling of growth uniformity in molecular beam epitaxy," *J. Vac. Sci. Technol. B* 9(1) 120 (1991).

 著 者 紹 介



金 銀 奎(正會員)

1957年 3月 5日生. 1979年 2月
경북대학교 물리학과 졸업. 1984
年 2月 고려대학교 대학원 물리학
과 석사. 1988年 8月 고려대학교
대학원 물리학과 박사. 1985年 3
月 ~ 현재 한국과학기술연구원

반도체 재료연구실 선임연구원. 주관심분야는 반도체
재료의 결정성장 및 물성조사, 소자응용 연구 등임.

尹 慶 植(正會員) 第 29卷 A編 第 4號 參照

현재 고려대학교 정보공학과 교수

閔 碩 基(正會員) 第 28卷 B編 第 8號 參照

현재 한국과학기술 연구원 반도체
재료연구실 실장