

원통형 화학증착로에서 균일한 박막형성을 위한 입구 농도분포의 최적화

조원국* · 최도형* · 김문언*

(1997년 7월 15일 접수)

Optimization of Inlet Concentration Condition for Uniform Film Growth in a Cylindrical CVD Chamber

W. K. Cho, D. H. Choi and M.-U. Kim

Key Words : CVD(화학기상증착), Uniformity(균일성), Optimal Boundary Condition(최적 경계조건), Random Search Technique(임의탐색 기법), Gas Flow(기체 유동), FVM(유한체적법)

Abstract

An optimization procedure to find the inlet concentration profile that yields the most uniform deposition rate in a cylindrical CVD chamber has been developed. Assuming that the chemical reaction time is negligibly small, a SIMPLE based finite-volume method is adopted to solve the fully elliptic equations for momentum, temperature, and concentration. The inlet concentration profile is expressed by a linear combination of Chebyshev polynomials and the coefficients of which are determined by the local random search technique. It is shown that the present method is very effective in improving the uniformity of the deposition rate, especially when Re is high and/or the wafer is placed close to the inlet. The optimal profiles have been obtained for various Re , Gr , and geometry combinations.

기 호 설 명

<p>A_{wafer} : 웨이퍼의 면적</p> <p>C : 반응기체의 농도</p> <p>E : 목적범함수</p> <p>G : Grashof 수 ($= g\beta\Delta T r_s^3 / \nu^2$)</p> <p>$H$: 반응로 입구와 웨이퍼 간의 거리</p> <p>Le : Lewis 수 ($= \alpha_M / \alpha_T$)</p> <p>Pr : Prandtl 수 ($= \nu / \alpha_T$)</p> <p>Re : Reynolds 수 ($= v_0 r_s / \nu$)</p> <p>Res : 유수</p> <p>S : 탐색방향</p> <p>T : 온도</p>	<p>V : 속도 벡터</p> <p>a_k : 선형조합 계수</p> <p>g : 중력 가속도</p> <p>n : 단위 수직 벡터</p> <p>p : 중력항을 포함하는 압력, ($= (p^* + \rho_0 g x) / \rho_0 v_0^2$)</p> <p>$r$: 반경방향 좌표</p> <p>r_s : 반침대의 반경</p> <p>v_0 : 입구의 평균 유속</p> <p>v_r : 반경방향 속도 성분</p> <p>v_x : 축방향 속도 성분</p> <p>x : 축방향 좌표</p> <p>α_M : 물질 확산계수</p>
---	---

*한국과학기술원 기계공학과, 대전 305-701

- α_T : 열 확산계수
 β : 열 팽창계수
 ϕ : 임의의 증속 변수
 γ : 선형조합 계수의 최적 이동 거리
 ν : 동점성 계수
 ψ : 짝수 차수의 Chebyshev 다항식

1. 서 론

화학기상증착이란 기체상태의 원소나 화합물로부터 모재표면에 고체상태 증착물을 생성하는 과정으로 정의할 수 있으며 최초의 공업적 응용은 19세기 말엽의 백열전구 산업에서 찾을 수 있다. 당시의 쉽게 끊어지는 필라멘트를 강화하는데 이용된 이 기술은 이후 기계부품의 내마모성 코팅에 응용되면서 공학적인 중요성을 인정받기 시작하였으며 최근 단결정 박막성장 등 반도체 제조에의 활용으로 중요성이 더욱 커지고 있다.⁽¹⁻³⁾

반도체 제조는 화학기상증착법에 의해 도체, 반도체 및 유전체 박막을 모재인 웨이퍼 위에 생성하고 필요한 형상대로 깎아내는 식각(etching)과정을 주요 공정으로 하며 화학기상증착에 관한 연구는 증착막의 성능예측에 관한 것이 주종을 이룬다. 단결정 구조의 반도체 박막은 압력 0.1~1 기압, 온도 1000K 내외의 작업조건을 가지는 상압형 반응로에서 주로 생성되는데 증착막의 두께는 전도율이나 절연율 등 전기적 특성을 결정하게 되므로 이의 균일성을 확보하는 것은 화학기상증착 공정중 가장 중요한 요소라 할 수 있다. 이러한 상압형 반응로의 작업조건에서 화학반응에 관한 시간척도는 반응물질전달에 관한 시간척도에 비하여 무시할 수 있을 정도로 작아 증착막의 성장률은 반응기체의 확산량에 의해서 결정되므로 반응로 내의 유체역학적 특성을 파악함으로써 증착특성을 예측/조절할 수 있다.⁽⁴⁻⁷⁾

수직형 화학기상증착 반응로의 개략적인 형태는 Fig. 1에서 볼 수 있듯이 반응로 위의 입구에서 반응물질이 아래로 흐르는 형태이며 다공성 매질(예: stainless mesh, shower head 등)을 이용한 유동 분배기(flow distributor)⁽⁶⁾를 사용하여 유입되는 속도를 균일하게 만들어 웨이퍼 표면의 증착물 균일화를 꾀하는 것이 현재 쓰이는 방법이다. 그러나 수평형 및 배럴형의 반응로에 비하여 균일한 박막을 제공하는 수직형 반응로 역시 반응로의

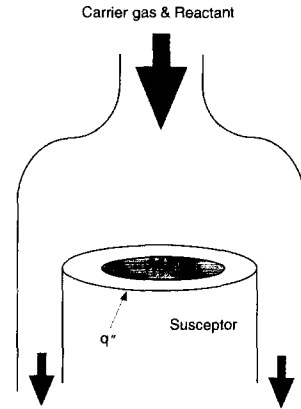


Fig. 1 Sketch of a vertical CVD reactor.

크기가 제한되어 있어 반응로 내의 유동이 웨이퍼의 바깥쪽을 돌아 출구쪽으로 가며 가속되므로 웨이퍼 바깥쪽의 증착률이 상대적으로 높게 나타나는 경향이 존재하며⁽⁶⁾ 이를 억제하려는 노력(반응로 내의 압력 감소, 웨이퍼의 회전 등)에도 불구하고 아직 개선의 여지가 많다고 하겠다.

본 연구에서는 수직형 반응로 유입부의 농도장을 지배하는 설계변수를 정의하고 이를 최적화하여 증착물의 균일도를 향상시키는 방안을 찾고자 한다. 과거에도 일부 반응로의 최적화에 대한 연구⁽⁸⁻¹⁰⁾가 있었으나 최적화 설정 또는 수학적 정의에 미흡한 점이 많았다고 생각한다. 한편 본 논문에서와 같이 입구의 농도조건을 최적화 변수로 설정한 것이 얼핏 실현키 어려워 실용적이지 않나 생각할 수도 있으나 연구결과가 경제성 등에서 얼마나 실현 가능성이 있는 분포를 갖느냐 하는 것 자체가 중요한 정보이고 입구조건 제어를 통해 최적분포에 다소라도 가깝게 만들 수 있다면 증착물 균일화에 크게 기여할 수 있을 것이라고 믿는다. 또 연구결과 개발된 최적화 기법을 보다 복잡한 유동장에 확장·적용하면 보다 제어가 용이한 설계변수 최적화에 응용될 수 있다는 데서도 그 중요성을 찾을 수 있다 하겠다. 유동해석에는 Patankar가 제시한 SIMPLE⁽¹¹⁾ 방법을 이용한 유한체적법(FVM, Finite Volume Method)을, 설계변수 최적화에는 임의탐색기법(Random Search Technique)⁽¹²⁾을 사용하였다.

2. 해석방법

2.1 유동장 해석

본 연구에서 다루려는 반응로는 수직원통형(Fig. 1 참조)으로 비압축성 유동에 대한 정상상태의 축대칭 Navier-Stokes 방정식을 지배방정식으로 갖는다. 반응기체가 이송기체(carrier gas)에 $10^{-3} \sim 10^{-5}$ 의 몰 비율로 희석되어 사용되는 점을 감안하여 반응기체의 농도구배에 의한 자연대류 효과는 고려하지 않았고 온도구배에 의한 부력의 영향은 Boussinesq 근사를 적용하였다.

2.1.1 지배방정식

지배방정식은 $v_r = v_r^*/v_0$, $v_x = v_x^*/v_0$, $r = r^*/r_s$, $x = x^*/r_s$, $p = (p^* + \rho_0 g x)/\rho_0 v_0^2$, $T = (T^* - T_0)/(T_s - T_0)$, $C = C^*/C_0$ 등으로 무차원화 하였는데 여기서 첨자 *, s, 0은 각각 차원이 있는 변수, 받침대(susceptor)에서의 값과 기준으로 설정한 값을 나타낸다. 무차원화된 연속방정식, 운동량, 열 전달 및 물질전달 방정식은 다음과 같이 표현된다.

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(rv_r) + \frac{\partial}{\partial x}(v_x) = 0 \quad (1)$$

$$(V \cdot \nabla) v_r = -\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{1}{Re} \left(\nabla^2 v_r - \frac{v_r}{r^2} \right) \quad (2)$$

$$(V \cdot \nabla) v_x = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{Gr}{Re^2} T + \frac{1}{Re} (\nabla^2 v_x) \quad (3)$$

$$(V \cdot \nabla) T = \frac{1}{PrRe} (\nabla^2 T) \quad (4)$$

$$(V \cdot \nabla) C = \frac{Le}{PrRe} (\nabla^2 C) \quad (5)$$

여기서 대류항과 Laplace 연산자는 다음과 같다.

$$V \cdot \nabla = v_r \frac{\partial}{\partial r} + v_x \frac{\partial}{\partial x} \quad (6)$$

$$\nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad (7)$$

위 식에 사용된 무차원 인자인 Reynolds 수와 Grashof 수는 $Re = v_0 r_s / \nu$, $Gr = g \beta \Delta T r_s^3 / \nu^2$ 로 정의되며 이들은 각각 유체의 관성력과 점성력의 비 그리고 부력의 영향을 나타낸다. 물성치 또한 무차원화되어 동점성계수, 열 확산계수 및 물질 확산계수를 나타내는 ν , α_T , α_M 대신 운동량과 열의 확

산속도 비인 Prandtl 수($Pr = \nu / \alpha_T$)와 물질 확산속도와 열 확산속도의 비인 Lewis 수($Le = \alpha_M / \alpha_T$)로 대체되며 이송기체를 수소로 반응기체를 TMG $[(CH_3)_3Ga]$ 로 설정하여 $Pr = 0.7$, $Le = 0.3$ 을 적용하였다.

2.1.2 경계조건

위 식 (1)~(5)의 해를 구하기 위해 입구조건은 부여하고 다른 경계에서는 실제현상을 가장 잘 묘사할 수 있게 다음과 같이 경계조건을 주었다.

입구 :

$$v_x = 2[(r/r_0)^2 - 1], \quad v_r = T = 0, \quad C = C(r) \quad (8)$$

대칭축 :

$$\frac{\partial v_x}{\partial r} = v_r = \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{\partial C}{\partial r} = 0 \quad (9)$$

출구 :

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} = \frac{\partial v_r}{\partial x} = \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial x} = 0 \quad (10)$$

고체 벽 :

$$v_x = v_r = \frac{\partial p}{\partial n} = 0 \quad (11)$$

$$T = 1, \quad C = 0 \quad (\text{웨이퍼 표면})$$

$$T = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial n} = 0 \quad (\text{웨이퍼를 제외한 벽})$$

식 (11)의 웨이퍼에서의 농도 경계조건은 이곳에서의 화학반응 시간이 다른 시간척도에 비하여 충분히 짧다는 것을 의미하여 통상적인 상압형 반응로의 운전조건(서론 참조)에서 화학반응 시간척도가 반응기체의 공급에 필요한 물질확산 시간척도의 1/300이하인 사실⁽⁷⁾에 근거를 두고 있다.

식 (1)~(5)의 해는 전체 계산영역에 대하여 지배방정식을 적분하여 얻을 수 있는데 본 연구는 비엇물림 격자계(nonstaggered grid)에서 SIMPLE 알고리즘⁽¹¹⁾을 채택하였으며 비엇물림 격자계를 사용할 때 발생할 수 있는, 물리적으로 타당하지 않은 높고 낮음이 반복되는, 압력분포(checker-board pressure pattern) 문제는 Rhie와 Chow⁽¹³⁾가 제시한 운동량 보간법을 써 처리하였다. 대류항과 확산항의 차분은 각각 상류도식과 중앙차분법을 사용하였으며 수렴은 다음과 같이 유수의 절대값을 전체 계산영역에 대하여 합한 값으로부터 판정하였다.

$$\max \left[\sum_{i=1}^N |Res(\phi_i^k)| \right] \leq 10^{-4} \quad (12)$$

여기서 $|Res(\phi_k^i)|$ 은 k 번째 방정식의 i 번째 미소체적에서의 유수의 절대값을 나타내며 N 은 전체 미소체적의 수를 나타낸다.

2.2 최적화 방법

본 연구의 가장 큰 목적은 입구의 농도조건을 조절하여 웨이퍼상의 증착물을 최대로 균일하게 만들어 보려는 것이다. 반응로의 입구조건이 최적인지는 증착물의 불균일한 정도로 정의되는 목적범함수가 최소화되었는지로 판단한다. 유동해석에 따른 증착물은 웨이퍼 표면에서 농도구배에 비례하므로 식 (13)으로 기술될 수 있어 증착물의 목표치를 1로 설정하면 목적범함수 E 는 증착물과 목표치와의 오차를 제곱한 양의 면적가중치로 식 (14)로 정의된다. 식 (13)의 미분항은 3점 전방차분으로 평가하였고 식 (14)의 적분은 Simpson 공식을 사용하였다.

$$Growth\ Rate \sim \left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_{on\ wafer} = G(r) \quad (13)$$

$$E = \int_{A_{wafer}} [G(r) - 1]^2 dA \quad (14)$$

웨이퍼의 반경은 받침대(susceptor)의 0.8배로 설정하여 $r=1$ 부근(받침대의 끝)에서 나타나는 농도구배의 발산하는 거동에 대한 수치적 문제를 피하였다. 실제 증착로의 경우 받침대는 웨이퍼 보다 항상 크고 이 역시 증착물의 명백한 불균일을 피하기 위한 것으로 본 연구에서의 설정은 수치적인 문제를 해결하기 위한 방법일 뿐 아니라 실제 상황을 정확하게 묘사하는 것이다.

반응로 입구에서의 농도분포를 다음과 같이 기초함수 $\phi_k(r)$ 의 선형조합으로 표현할 수 있다.

$$C_{in}(r) = \sum_{k=1}^m a_k \phi_k(r) \quad (15)$$

기초함수로는 근사식으로의 좋은 특성을 갖고 또 서로 직교하는 Chebyshev 다항식을 사용하였으며 여기서 m 은 다항식의 개수를 나타낸다. 수직형 반응로의 기하학적 형상과 경계조건이 $r=0$ 에서 대칭인 점을 고려하여 짝수 차수의 다항식만 사용하였으므로 $\phi_k(r)$ 는 $2(k-1)$ 차의 Chebyshev 다항식을 나타낸다.

각 $\phi_k(r)$ 에 대하여 증착물을 $G_k(r)$ 이라 하면 농도 보존방정식이 선형이기 때문에 $C_{in}(r)$ 에 대한 증착물은 다음과 같이 나타낼 수 있다.

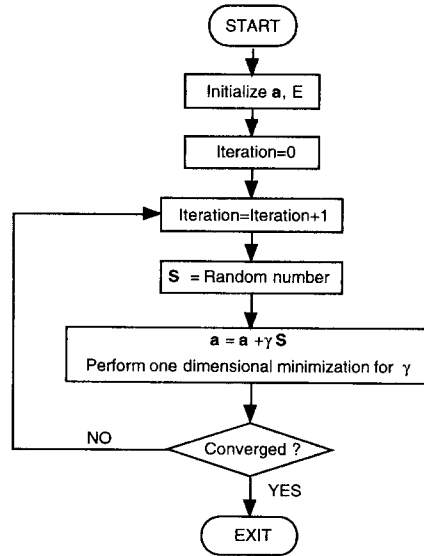


Fig. 2 Flow chart of random search technique.

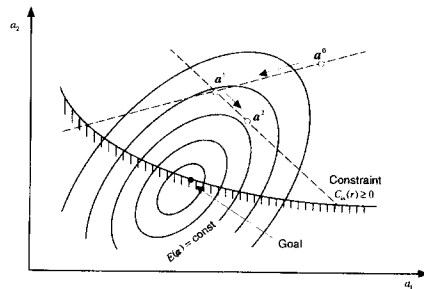


Fig. 3 Geometric interpretation of random search technique.

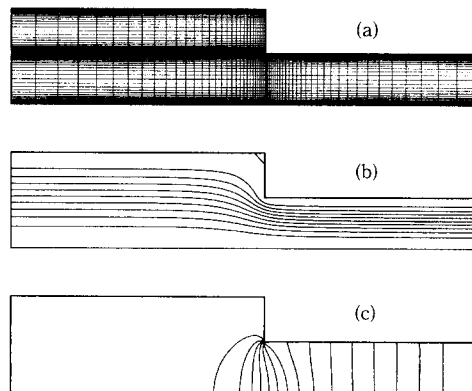


Fig. 4 Flow in a pipe with sudden contraction : (a) Computational grid, (b) Streamlines, (c) Iso-bars.

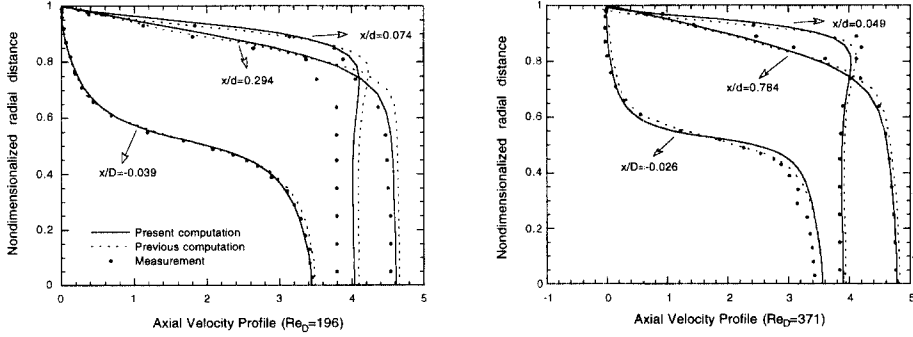


Fig. 5 Axial velocity distribution at various cross-sections for flow in a pipe with sudden contraction.

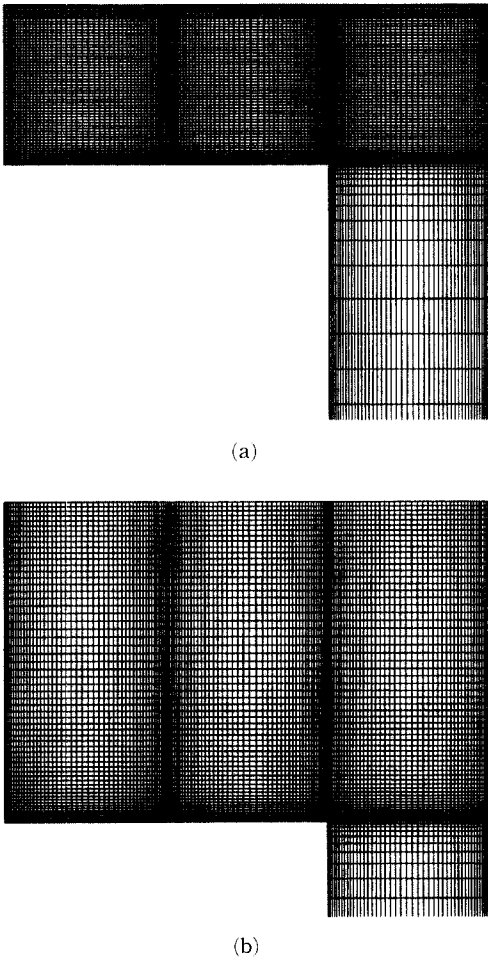


Fig. 6 Computational grid for flow analysis of a CVD chamber: (a) $H=0.5$, (b) $H=1.0$.

$$G(r) = \sum_{k=1}^m a_k G_k(r) \quad (16)$$

식 (16)은 증착률을 결정하는 변수가 a_k 임을 나타내며 목적범함수는 증착률 오차의 제곱을 적분한 양이므로 목적범함수 역시 a_k 의 함수가 된다. 따라서 해결해야 할 최적화 문제는 식 (17)의 목적범함수를 최소화하는 선형조합 계수 a_k 를 찾는 것으로 정의된다. 이때 문제의 성격에 따라 a_k 는 특정한 제약을 받을 수 있는데 여기에서는 농도장이 음(-)이 될 수 없다는 식 (18)을 만족해야 한다.

$$E(a_k) = \int_{A_{wafer}} \left[\sum_{k=1}^m a_k G_k(r) - 1 \right]^2 dA \quad (17)$$

$$C_{in}(r) \geq 0 \quad (18)$$

최적 설계변수 a_k 는 임의탐색기법⁽¹²⁾을 이용하여 구하였다. 이 방법은 효율이 낮은 것이 단점이나 적용이 쉽고 국부적인 극소점으로부터의 탈출이 용이한 강건성(robustness) 뛰어난 것이 장점이며 또 본 연구의 경우 농도장 방정식이 선형이기 때문에 설계변수가 바뀔 때 따라 지배방정식의 해를 반복적으로 구하지 않아도 되므로 이 방법의 낮은 효율성은 쉽게 극복된다 하겠다.

임의탐색기법의 기본 개념은 현 위치로부터 제한 조건을 만족하는 동시에 목적범함수 값을 낮출 수 있는 방향을 찾아가는 것인데 이때 탐색방향은 난수로부터 구하며 간략한 흐름도를 Fig. 2에 도시하였다. 탐색방향 S_k 를 이용하여 설계변수 a_k 를 다음과 같이 변경한다.

$$a_k^q = a_k^{q-1} + \gamma S_k \quad (19)$$

여기서 q 는 반복 횟수를 나타내고 γ 는 주어진 탐색방향내에서 최소의 목적범함수를 줄 수 있는 거리인데 γ 는 1차원 탐색(one-dimensional search)으로 결정된다. 위의 방법으로 목표점을 찾아가는

경로를 설계변수가 2개인 경우에 대하여 Fig. 3에 제시하였다. 탐색의 종료조건은 10⁴번의 반복탐색 동안 개선이 없는 경우로 정하였다.

3. 결과 및 고찰

해석 코드의 검증을 위하여 축소 부위로 흐르는 원관 내의 층류유동을 다뤄 앞선 연구자들의 실험⁽¹⁴⁾과 계산결과^(14, 15)와 비교하였다. 포물선 형태를 하고 있는 입구속도의 평균속도와 직경을 기준으로 한 Reynolds 수가 $Re_D=196$, 371인 경우를 해석하였는데 격자계는 기존연구와 동일한 수준인 60×80 을 사용하였다. Fig. 4(b)와 (c)는 $Re_D=196$ 일 때의 유선과 압력분포를 나타내며 유로의 급작스러운 축소로 인한 유동의 진행방향 변경과 이에 따른 등압선 분포가 축소부위에 밀집해 있는 특성을 나타낸다. 이는 기존의 해석결과와 일치하는 것이며 Reynolds 수가 증가하여도($Re_D=371$) 같은 경향을 보인다.

보다 정량적인 비교는 Fig. 5에 나타난 축소부위 전후의 축방향 속도에서 볼 수 있다. 두 경우 모두 기존의 결과와 잘 일치하는 것으로 축소부위 부근에서의 유동 변화와 이후 축방향으로 진행함에 따라 속도분포가 포물선 형태로 바뀌는 것과 Reynolds 수에 따른 이들 특성의 정량적인 변화 등 주어진 기하학적 형상에 대한 특징적인 사항을 정확히 재현하고 있다. 실험치와 비교하여 다소의 차이를 보이는 것은 유동의 비대칭성 또는 측정오차에 의한 것으로 사료되며 실험치가 전체적인 유량보존을 만족치 못한다는 사실이 이를 뒷받침한다 하겠다. 이로부터 본 연구에서 사용하는 계산방법은 주어진 형상 내의 유동장을 정확히 예측하며 이와 유사한 형상에 대한 해석에도 확장 응용될 수 있다고 할 수 있을 것이다.

Fig. 6은 본 연구에서 다른 수직형 반응로로 $H=0.5$ 와 1.0 인 두 경우에 대한 135×90 격자계를 나타내는데 벽면, 입구, 웨이퍼 받침대 끝 부분에 격자를 밀집시켜 격자분포의 효율화를 기하였다. 유량, 형상비, 부력의 영향을 변화시켜가며 최적화를 시도하였으며 각 경우를 Table 1에 나타내었다. 적정한 격자수를 정하기 위하여 격자수를 60×40 에서 180×135 까지 증가시키면서 Case-B2에 대한 수치해를 입구의 농도를 1로 균일하게 주어 구하였는데 격자수에 따른 평균 증착률 및 최대 격자

Table 1 List of case names and their flow conditions.

Case name	Aspect ratio (H/r_s)	Flow condition	
		Re	Gr/Re^2
Case-A1	0.5	1	0
Case-A2	"	10	"
Case-A3	"	100	"
Case-B1	1.0	1	"
Case-B2	"	10	"
Case-B3	"	100	"
Case-C1	0.5	10	1
Case-C2	"	"	10
Case-C3	"	"	100

Table 2 Grid dependency on average growth rate.

Grid	Average growth rate	Relative Error (%)
60×40	2.852	0.6115
90×60	2.842	0.2393
135×90	2.838	0.1256
180×135	2.825	Ref.

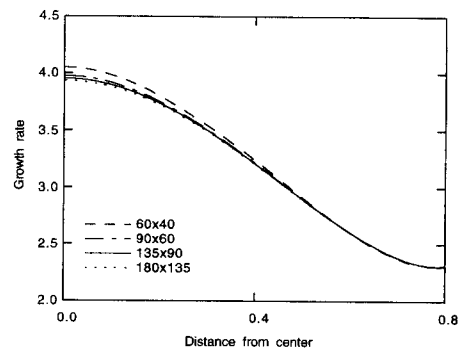


Fig. 7 Growth-rate distribution for various grids.

수(180×135) 결과에 대한 상대오차를 Table 2에 나타내었다. 판단기준이 되는 증착률은 수치 미분을 포함하므로 비교적 격자계에 민감한 특성을 보이나 증착률의 정상적인 특성은 Fig. 7에서 볼 수 있듯이 동일하며 평균 증착률의 상대오차는 모두 1% 이내로 수용할만한 수준이라 모든 계산에서 135×90 격자계를 사용하였다.

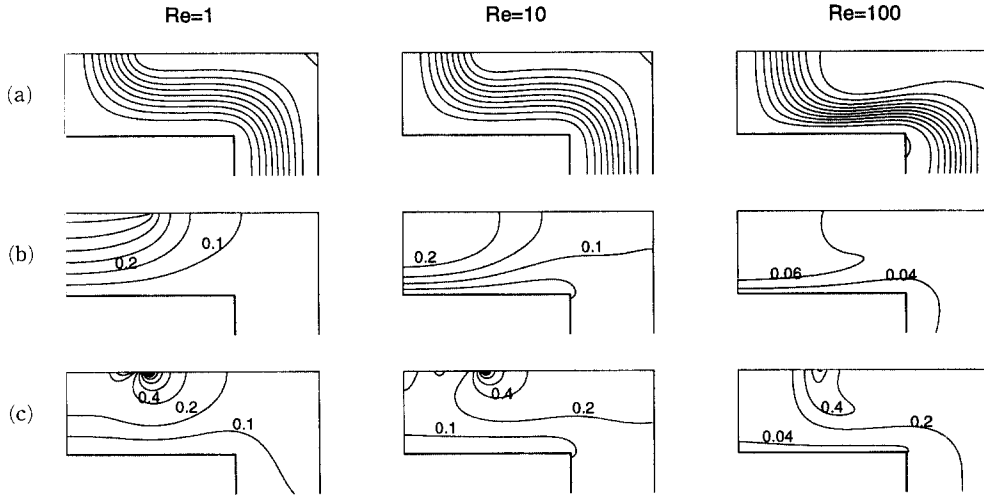


Fig. 8 Flow and concentration fields for Case-A: (a) Streamlines, (b) Unoptimized concentration fields, (c) Optimized concentration fields.

Reynolds 수 변화에 따른 Case-A에 대한 결과를 Fig. 8에 나타내었다. Fig. 8(a)에 보인 유선분포에서 Reynolds 수가 증가함에 따라 경계층이 얇아져 유선이 웨이퍼로 밀착되는 것이 관찰된다. Fig. 8(b), (c)는 농도분포를 보이는데 각각 입구 농도가 균일한 경우와 4개의 다항식을 사용해 최적화를 거친 경우에 대한 결과를 나타낸다. 웨이퍼에서의 속도구배는 경계층 두께에 반비례할 것이고 농도구배 역시 이와 동일한 경향을 보일 것이므로 입구에서의 농도 수준이 동일하다면 증착물은 Re 수 증가에 따라 커질 것이다. Fig. 8(b)는 이러한 유체역학적인 특징을 그대로 반영하는 결과로서 반응로내의 농도장이 Reynolds 수가 증가함에 따라 낮은 농도수준으로 동일한 증착률($G=1$)을 줄 수 있음을 보인다. 한편 농도분포는 웨이퍼 중심에서 가장 높고 반경방향으로 낮아지는데 이는 반응로 입구에서의 유속이 중심부에서 가장 높은 포물선 분포를 가지며 이러한 유동에 의해 운반되는 반응기체의 공급이 웨이퍼 중심부로 집중되기 때문이다. 따라서 반경방향으로 고른 농도장을 유지하기 위해서는 상대적으로 농도장이 낮은 웨이퍼의 바깥 쪽으로 반응기체의 공급을 확대해야 한다. Fig. 8(c)의 최적화한 결과는 Fig. 8(b)에 비해 웨이퍼 부근의 농도장이 일정한 값으로 유지됨을 보인다.

최적화에 따른 증착물의 균일성에 대한 개선 정도를 보다 정량적으로 관찰하기 위하여 Fig. 9에 입구 농도분포와 이에 대한 증착률을 반경에 대하

여 도시하였다. Re 수에 관계없이 최적화 이전의 증착률은 중심부에서 1.5 정도로 가장 높고 웨이퍼 끝에서 0.6 정도로 가장 낮은 분포를 보이며 또 공통적으로 입구의 끝 부분에서의 농도가 높은 것이 균일한 증착물을 주는 것으로 나타났다. 특히 $Re=10, 100$ 인 경우는 $n=3$ 이 되면 증착률이 완전히 균일하게 되며 이에 반해 $Re=1$ 의 경우는 같은 상황에서 개선이 정체되는 경향을 보인다. 이는 3 경우 중 $Re=1$ 인 때가 대류에 의한 영향이 상대적으로 약화되어 입구에서의 복잡한 변화가 빠른 속도로 혼합되어 특징을 잃기 때문이다. 이러한 사실은 Fig. 9(a)에서 $n=2, 3, 4$ 일 때 중심에서의 농도가 각각 0, 0.7, 0.3 변화하여도 증착률의 수준이 유사한 것으로 확인할 수 있다. $Re=100$ 일 때는 대류에 의한 영향이 커져서 입구 중심에서의 특성이 웨이퍼에 직접 전달되므로 $r < 0.25$ 영역에서 n 이 증가함에 따라 일정한 농도 수준으로 수렴된다.

반응로의 길이가 길어진 경우 ($H=1$, Case-B)에 대해서도 입구농도와 증착률 분포를 Fig. 10에 나타내었는데 입구 농도장은 Case-A와 유사한 형태가 최적인 것을 볼 수 있다. 그러나 최적화 이전의 증착률은, 특히 $Re=1$ 인 경우, 먼저 경우보다 훨씬 더 균일하게 되는데 이는 Reynolds 수가 작아 입구에서의 유속이 운동량확산에 의하여 주위로 고르게 전파되고 또한 반응로의 길이가 $H=1$ 로 길어져 반응기체가 고르게 섞일 충분한 공간이 주어졌기 때문으로 풀이된다. $Re=100$ 인 경우는 Case

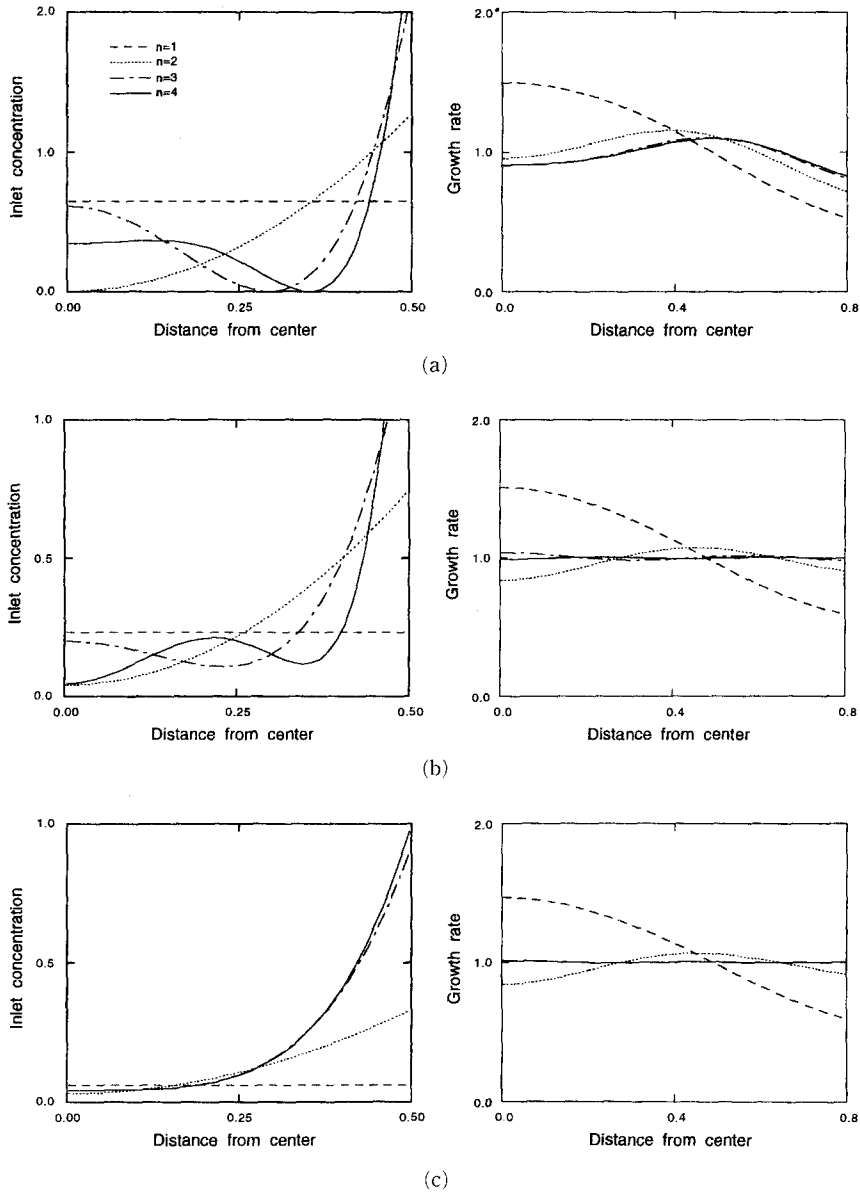


Fig. 9 Inlet concentration profiles and corresponding concentration-gradient distributions on wafer surface for case-A: (a) $Re=1$, (b) $Re=10$, (c) $Re=100$.

-A3와 동일한 특성을 가지며 $Re=10$ 일 때는 두 경우의 중간적인 특성을 보인다.

Case-A, B 두 경우에 n 의 증가에 따른 균일도의 개선 정도를 Fig. 11에 나타내었다. Case-A의 경우 입구에서의 농도를 기술하는 다항식의 수가 증가함에 따라 목적범함수 값이 지수적으로 작아져 $10 \sim 10^4$ 배 정도의 개선도를 보여 단순한 입구 농도

분포변화가 증착물 균일화에 크게 효과가 있음을 알 수 있다. Case-B1은 최적화 이전에 이미 상당히 작은 목적범함수 값을 가지며 $n=2$ 이후에는 개선 정도가 정체된다. Case-B2는 $n=1$ 에서의 목적범함수는 Case-B1의 것 보다 크지만 $n=4$ 로 증가시킬 경우 Case-B1과 같은 수준으로 개선된다. 한편 Case-B3은 Case-A3과 유사한 특성을 보여

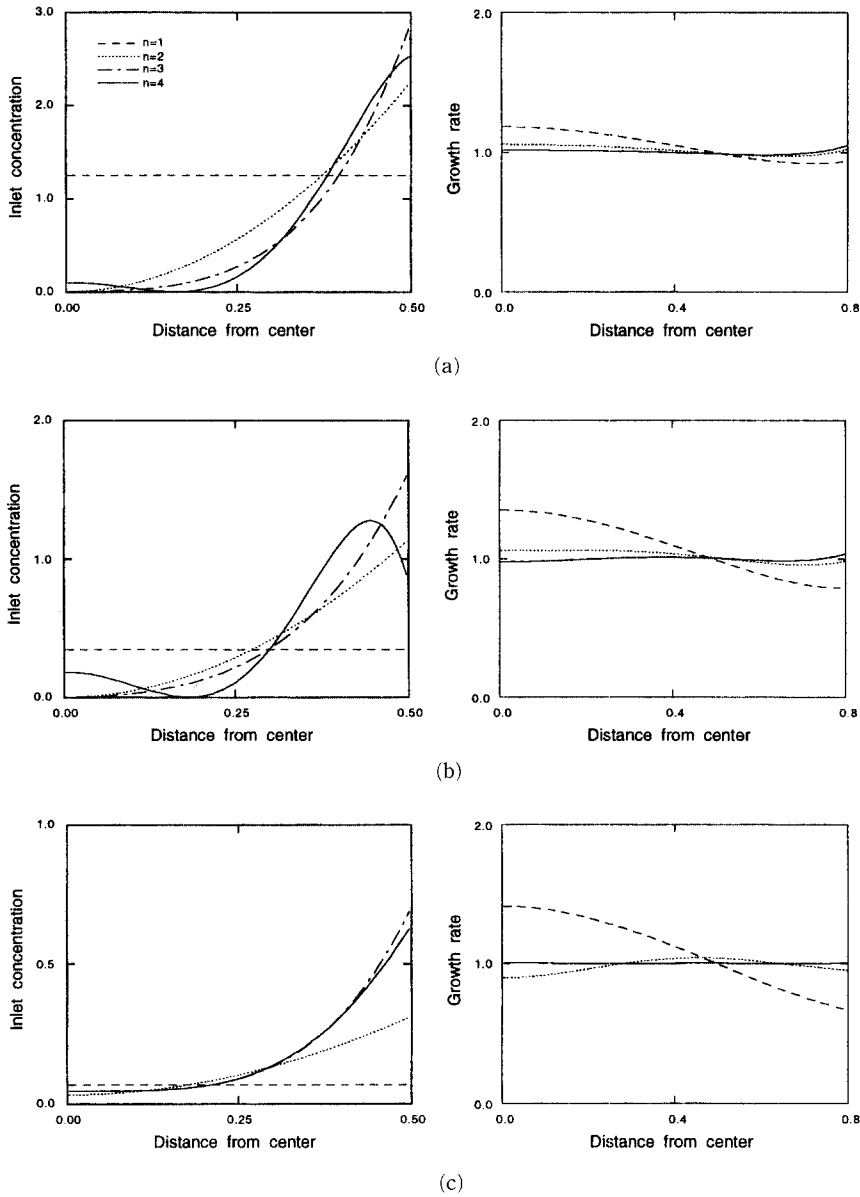


Fig. 10 Inlet concentration profiles and corresponding concentration-gradient distributions on wafer surface for case-B: (a) $Re=1$, (b) $Re=10$, (c) $Re=100$.

대류의 영향이 커질 경우 형상비에 의한 영향이 약화되는 경향을 보였다

온도차가 커져 자연대류의 영향이 무시될 수 없는 경우에 대한 최적화를 수행하기 위하여 Reynolds 수를 10으로 고정하고 Gr/Re^2 를 1, 10, 100으로 변화시켜 그 결과를 Fig. 12에 도시하였다. $Gr/Re^2=1, 10$ 일 때 유동장에 대한 자연대류

의 영향은 관찰되지 않으며 각각에 대한 최적 입구 조건 및 증착률도 Case-A2와 동일한 분포를 보인다. 그러나 $Gr/Re^2=100$ 인 경우는 웨이퍼 끝 부분에서 커진 부력의 영향에 의한 순환이 발생하며 이 순환영역에는 반응기체가 직접(대류에 의한) 전달되지 못하고 확산에 의한 반응기체의 교환만 존재하므로 자연히 이 부근에서 낮은 증착률을 보이

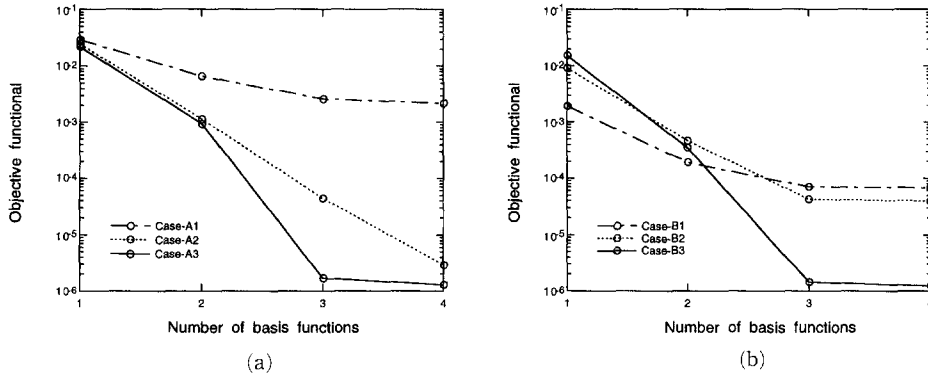


Fig. 11 Objective functional vs. number of basis functions: (a) Case-A, (b) Case-B.

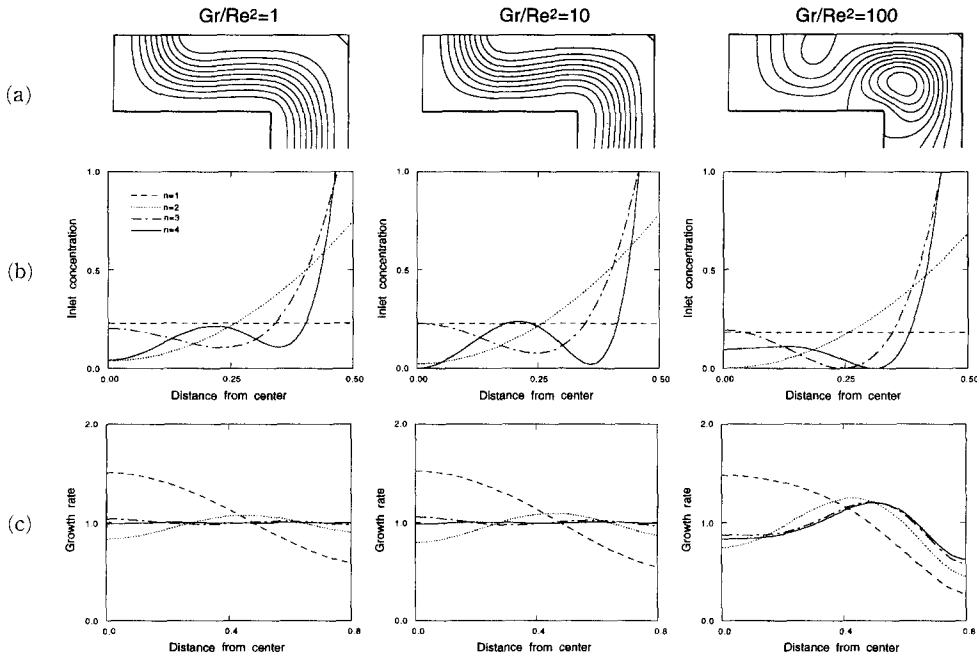


Fig. 12 Results of Case-C: (a) Streamlines, (b) Inlet concentration profiles, (c) concentration-gradient distributions on wafer surface.

며 또 이 지역은 입구의 반응기체가 직접 전달되지 못하므로 입구조건변화를 통한 증착률 제어가 제한적일 수 밖에 없게 된다. 다시말해 자연대류의 영향이 커져 순환이 발생하면 증착률 균일화가 최적화를 통해서도 이루기 어려우니 적극 피해야할 운전조건이라 결론지을 수 있을 것이다.

4. 결 론

상압 수직형 화학기상증착 반응로의 입구에서 농

도 경계조건을 최적화하여 웨이퍼 표면에서의 증착률에 대한 균일성을 획기적으로 증진시킬 수 있었다. 반응로 입구에서의 유입속도를 포물선형으로 가정한 본 계산에서 반응기체의 전달이 웨이퍼 중심부로 집중되어 유속이 작은 입구 바깥쪽의 농도가 중심부에 비하여 상대적으로 높아야 균일한 증착률을 주는 것으로 나타났다. 증착률의 개선은 대류의 영향이 큰 경우(Reynolds 수가 클 때) 그리고 입구와 웨이퍼의 거리가 짧은 반응로에 더 효과적이며 이에 비해 자연대류에 의한 영향으로 순환

이 있을 경우에는 증착물의 개선을 얻기가 어려웠다.

참고문헌

- (1) Powell, C. F., 1966, *Vapor Deposition*, Wiley.
- (2) 이시우, 이진, 1993, CVD 핸드북, 반도체출판사.
- (3) Jensen, K. F., Einset, E. O. and Fortiadis, D. I., 1991, "Flow Phenomena in Chemical Vapor Deposition of Thin Films," *Ann. Rev. Fluid Mech.*, Vol. 23, pp. 197~232.
- (4) Fotiadis, D. I., Kremer A. M., McKenna, D. R. and Jensen, K. F., 1987, "Complex Flow Phenomena in Vertical MOCVD Reactors: Effects on Deposition Uniformity and Interfacial Abruptness," *J. Crystal Growth*, Vol. 85, pp. 154~164.
- (5) Fortiadis, D. I., Kieda, S. and Jensen, K. J., 1990, "Transport Phenomena in Vertical Reactors for Metalorganic Vapor Phase Epitaxy," *J. Crystal Growth*, Vol. 102, pp. 441~470.
- (6) Wang, C. A., Patnaik, S., Caunt, J. W. and Brown, R. A., 1988, "Growth Characteristics of a Vertical Rotating-disk OMVPE Reactor," *J. Crystal Growth*, Vol. 93, pp. 228~234.
- (7) Moffat, H. and Jensen, K., 1986, "Complex Flow Phenomena in a MOCVD Reactors," *J. Crystal Growth*, Vol. 77, pp. 108~119.
- (8) Takenaka, C., Fujii, T., Kuramata, A. and Yamazaki, S., 1988, "Design of the Optimum Reactor Chamber for Uniform InP Epilayer Thickness Profiles Grown by OMVPE," *J. Crystal Growth*, Vol. 91, pp. 173~179.
- (9) Goodings, C., Mason, N. J., Walker, P. J. and Jebb, D. P., 1989, "A New Inlet Area Design for Horizontal MOVPE Reactor," *J. Crystal Growth*, Vol. 96, pp. 13~18.
- (10) Gadgil, P. N., 1993, "Optimization of a Stagnation Point Flow Reactor Design for Metalorganic Chemical Vapor Deposition by Flow Visualization," *J. Crystal Growth*, Vol. 134, pp. 302~312.
- (11) Patankar, S. V., 1980, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, McGraw-Hill.
- (12) Vanderplaats, G. N., 1984, *Numerical Optimization Techniques for Engineering Design*, McGraw-Hill, pp. 153~155.
- (13) Rhie, C. M. and Chow, W. L., 1983, "A Numerical Study of the Turbulent Flows Past an Isolated Airfoil with Trailing Edge Separation," *AIAA Journal*, Vol. 21, pp. 1525~1532.
- (14) Durst, F. and Loy, T., 1985, "Investigation of Laminar Flow in a Pipe with Sudden Contraction of Cross-Sectional Area," *Computers and Fluids*, Vol. 13, pp. 15~36.
- (15) Peric, M., 1985, "A Finite Volume Method for the Prediction of Three-Dimensional Fluid Flow in Complex Ducts," PhD Thesis, University of London, pp. 198~207.