

저압 증기 화합물 증착 공정에서 복사열전달 및 물질전달 해석

박경순* · 최만수** · 조형주***
(1999년 3월 5일 접수)

Analysis of Radiative Heat Transfer and Mass Transfer During Multi-Wafer Low Pressure Chemical Vapor Deposition Process

Kyoung Soon Park, Mansoo Choi and Hyoung Joo Cho

Key Words: LPCVD(저압 증기 화합물 증착), Heat and Mass Transfer(열 및 물질전달), Specular Surface(정반사 표면), Diffuse Surface(확산 표면)

Abstract

An analysis of heat and mass transfer has been carried out for multi-wafer Low Pressure Chemical Vapor Deposition (LPCVD). Surface radiation analysis considering specular radiation among wafers, heaters, quartz tube and side plates of the reactor has been done to determine temperature distributions of 150 wafers in two dimensions. Velocity, temperature and concentration fields of chemical gases flowing in a reactor with multi-wafers have been then determined, which determines Si deposition growth rate and uniformity on wafers using two different surface reaction models. The calculation results of temperatures and Si deposition have been compared and found to be in a reasonable agreement with the previous experiments.

기호설명

c_p : 정압 비열
 D_{ij} : 확산 계수
 F_{A-B} : 보기 계수
 h : 비 엔탈피
 H : 엔탈피
 ΔH : 웨이퍼 사이의 간격
 k_B : Boltzmann 상수
 L : 원관의 길이
 l_p : 복사 에너지의 반사 횟수
 m : 질량
 M : 분자량
 p : 압력
 q : 복사 열유속

r : 반경 방향 좌표
 r_i : 웨이퍼의 반경
 r_o : 외부 원관의 반경
 R_G : 일반 기체 상수
 S : 거리
 t : 시간
 \vec{V} : 속도 벡터
 x : 보기 계수를 구할 때 고려하는 이미지의 실제 축 방향 위치
 X : 몰 분율
 Y : 질량 분율
 V : 확산 속도

그리스문자

δt_{wafer} : 웨이퍼의 두께
 δt_{quartz} : 석영관의 두께
 ε : 방사율
 θ_i, θ_j : plane angle
 $\theta_2, \theta_3, \theta_4$: 보기 계수를 구할 때 고려하는 이미지의 위치를 결정하는 변수(방위각)
 λ : 파장

* LG 전선

** 회원, 서울대학교 기계항공공학부, 정밀기계설계 공동연구소, 나노입자제어기술 연구단

E-mail : mchoi@plaza.snu.ac.kr

TEL : (02)880-7128 FAX : (02)883-0179

*** 서울대학교 대학원 기계공학과

- μ : 점성계수
- ξ : 이미지의 축 방향 위치
- ρ : 밀도
- ρ_w : 웨이퍼의 반사율
- σ : Stefan-Boltzmann 상수
- τ : 응력 텐서
- ϕ : 보기 계수를 구할 때, 고려하는 이미지의 원주 방향 위치의 경계값
- ω : 반응 속도

하첨자

- i : i 화학종

1. 서 론

LPCVD(low pressure chemical vapor deposition) 공정은 낮은 압력과 높은 온도에서 화학 반응을 일으켜 polysilicon, silicon nitride(Si_3N_4), silica(SiO_2) 등을 반도체 웨이퍼 위에 증착시키는 데 사용되는 공정이다. 1970년대 후반에 고안되었으며, 한번에 많은 웨이퍼에 균일한 박막을 증착시킬 수 있다는 장점 때문에 반도체 집적회로 제조에 널리 사용되고 있다. Fig. 1은 LPCVD 반응기의 한 모델인 SEMATEC LPCVD 반응기를 보여 주고 있다. 이 장치에서는 입구를 통해 들어간 화학 물질들이 반응하여 실리콘계 여기분자(silicon based radical molecule)들을 형성하고, 이 분자들이 외부 히터(5 furnace elements)에 의해 복사열로 가열되고 있는 150 ~ 200장 정도의 웨이퍼 표면에 증착되며, 표면 반응을 통하여 실리콘 분자들이 남게된다.

LPCVD가 APCVD (atmospheric pressure chemical vapor deposition)에 비해 갖는 장점은 균일한 박막을 얻을 수 있으며, APCVD에 비해 전체적인 증착률이 높을 수 있다는 점이다. 그것은 LPCVD의 경우 희석 가스(diluent gas)를 소량만 사용하므로 웨이퍼 당 증착률이 APCVD의 1/10 ~ 1/5정도밖에 되지 않지만, 낮은 압력에서는 표면 반응 속도에 비해 물질의 확산 속도가 더 크므로 동시에 많은 수의 웨이퍼에 균일한 박막을 증착시킬 수 있기 때문에, 많은 웨이퍼를 사용할 경우 전체적인 증착률을 높일 수 있다.

Hot wall multiwafer LPCVD에 대한 연구는 두

개의 개별 모델링과 관련해서 이루어지고 있다. 하나는 반응기 모델링(reactor modeling)으로서 증착률 및 박막의 균일성에 대한 예측에 중점을 두고 있으며, 물질 전달, 화학 반응물 등을 해석한다. 다른 하나는 열 복사 모델링(thermal radiation modeling)으로서 웨이퍼를 반응기에 넣고 꺼낼 때의 열 응력 예측에 중점을 두고 있다.

반응기 모델링과 관련된 지금까지의 연구는 Duvereuil과 Couderic⁽¹⁾의 2차원 해석 모델을 제외하면 거의 모든 연구들이 Jensen과 Graves⁽²⁾의 1차원 해석 모델을 기본으로 하여 실리콘의 증착률을 올바르게 예측할 수 있는 표면 반응식을 구하려는 것들이었다. Roenigk과 Jensen⁽³⁾은 Jensen과 Graves⁽²⁾의 연구를 다종의 화학종에 대해 확장시켰다. Devereuil과 Couderic⁽¹⁾은 각각의 웨이퍼 사이에 주기적인 상태가 존재한다고 가정하여 2차원적인 해석을 하였다. Houf와 Grcar⁽⁴⁾는 표면에서의 화학종 방정식을 해석하여 실리콘 증착에 대한 예측을 하였다. Badgewell 등⁽⁵⁾은 광범위한 실험을 통해 Si 증착 표면 반응식을 제시하였다.

열 복사 모델링과 관련된 지금까지의 연구는 다음과 같다. Hirasawa 등⁽⁶⁾은 웨이퍼와 히터의 직경이 동일하다고 가정하고 시간에 따른 웨이퍼의 온도 분포를 계산하여 열 응력을 예측하는 연구를 수행하였다. Badgewell 등⁽⁷⁾은 실제 형상에 대해 웨이퍼와 히터간의 복사 열 전달을 연구하였지만, 웨이퍼를 확산 표면(diffuse surface)으로 가정하였다. Houf 등⁽⁴⁾은 웨이퍼의 기하학적 형상을 단순화시키고, 정반사 표면(specular surface)으로 가정하여 보기 계수(view factor)를 구하였다. Coronel과 Jensen⁽⁸⁾은 Monte Carlo 해석을 하면서, 물성치의 변화를 고려하였지만 웨이퍼의 반경 방향 온도 분포가 일정하다는 가정을 하였다.

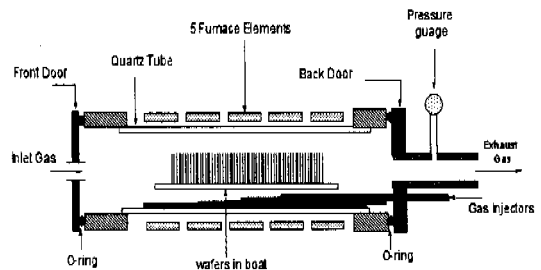


Fig. 1 Geometry of SEMATEC LPCVD reactor

본 연구에서는 웨이퍼를 정반사 면으로 가정하여, 150장의 웨이퍼의 반경 방향 온도 분포와 석영관의 축 방향 온도 분포를 구하였고, 이 계산 결과를 바탕으로 반응기 내의 혼합 기체의 속도 분포, 온도 분포 및 화학종 분포를 해석하여 웨이퍼에서의 실리콘 증착 특성을 예측하였다. 정반사 복사 열전달 해석을 이용하여 150장의 웨이퍼의 2차원 온도 분포를 본 연구에서 처음 구하였으며, 기존의 해석 결과와 비교하였다.

2. 반응 기내에서의 복사 열전달 해석

2.1 복사 물성치에 대한 가정

복사 열 유속을 구하기 위해서는 각각의 파장에서의 복사 열 유속 값을 모두 고려해야 하지만, 계산량이 너무 많아지기 때문에, 본 연구에서는 band approximation 방법을 사용하여 단순화하였다.⁽⁹⁾ Band approximation은 파장의 전 영역을 몇 개의 구간으로 나누고, 각각의 구간 내에서는 복사 물성치가 일정하다고 가정하는 방법이다. 본 연구에서는 석영관에 대해 4.5 μm 이하의 파장에서는 투명하며, 4.5 μm 이상의 파장에서는 모든 빛을 흡수한다는 가정을 사용하였다. 그리고 가열 히터, 반응기 표면, 웨이퍼 등의 물성치들은 전 파장에서 하나의 값을 갖는 것으로 간주하였다.

석영관에 대해 위와 같은 가정을 하면 4.5 μm 보다 작은 파장에서의 복사 열 전달의 고려는 석영관이 없는 것으로 간주하여, 히터 벽면, 웨이퍼, 양 측면간의 표면 복사 에너지 교환만을 포함한다. 한편, 4.5 μm 보다 큰 파장에서의 복사 열 교환은 석영관이 히터 벽면과 웨이퍼 사이의 열

교환을 완전히 방해하기 때문에, 석영관 내부에서는 석영관, 웨이퍼, 양 측면간의 표면 복사에너지 교환만을 고려하고, 석영관 외부에서는 히터 벽면, 석영관, 양 측면간의 표면 복사 에너지 교환만을 고려한다.

2.2 보기 계수 결정

dA_i 라는 지점에서 dA_j 라는 지점을 보는 보기 계수는 다음과 같이 정의된다.

$$F_{dA_i \rightarrow dA_j} = \int_{dA_j} \frac{\cos \theta_i \cos \theta_j}{\pi S^2} dA \quad (1)$$

여기에서 θ_i 은 dA_i 면에 수직인 직선과 dA_i 와 dA_j 지점을 연결한 직선이 이루는 각을 말하고, θ_j 는 dA_j 면에 수직인 직선과 dA_j 와 dA_i 를 연결한 직선이 이루는 각을 말하며, S 는 dA_i 와 dA_j 사이의 거리를 뜻한다.

본 연구에서는 웨이퍼를 정반사 면으로 취급하기 때문에, dA_i 에서 dA_j 로의 보기 계수를 구할 때 직접적인 보기 계수 외에 다중 반사로 인한 보기 계수도 고려해야 한다.

LPCVD 반응기에서 복사열교환은 웨이퍼, 석영관, 히터, 반응기의 양 측면 사이에서 일어나고, 파장에 따라 복사 열전달에 관여하는 표면들이 달라지며, 구해야 할 총 보기 계수를 Table 1에 나타내었다. 아래에 그 중 중요한 몇 가지 보기 계수를 구하는 방법을 설명하였으며, 다른 보기 계수에 관한 자세한 수식은 박경순⁽¹¹⁾을 참조하기를 바란다.

Table 1 View factors to be considered

Case 1 : $\lambda > 4.5 \mu\text{m}$			
wafer \leftrightarrow wafer	wafer \leftrightarrow quartz tube	wafer \leftrightarrow inner side wall of quartz tube	
quartz tube \leftrightarrow quartz tube	quartz tube \leftrightarrow inner side wall of tube	inner side wall of tube \leftrightarrow inner side wall of tube	
wafer rim \leftrightarrow quartz tube	wafer rim \leftrightarrow outer side wall of tube	heater \leftrightarrow quartz tube	
heater \leftrightarrow heater	heater \leftrightarrow outer side wall of tube	quartz tube \leftrightarrow outer side wall of tube	
outer side wall of tube \leftrightarrow outer side wall of tube			
Case 2 : $\lambda < 4.5 \mu\text{m}$			
wafer \leftrightarrow heater	wafer \leftrightarrow side wall	heater \leftrightarrow heater	heater \leftrightarrow wafer rim
heater \leftrightarrow side wall	side wall \leftrightarrow side wall	wafer rim \leftrightarrow side wall	

2.2.1 웨이퍼 위의 한 점에서 자기 혹은 인접한 웨이퍼로의 보기 계수

웨이퍼가 정반사면임을 고려하면, 웨이퍼 위의 임의의 한 점에서는 인접한 웨이퍼 및 자기 자신을 볼 수 있다. 보기 계수를 구하기 위해 Fig. 2에서와 같이 서로 인접한 두 장의 웨이퍼 및 그들의 상을 측면에서 고려해 보자. 두 장의 웨이퍼 중 한 쪽을 약호로 *i*라고 하고, 다른 쪽을 약호로 *j*라고 하자. *i-j-i*는 웨이퍼 *i*의 모습이 두 웨이퍼 사이를 3번 반사하고, 웨이퍼 *j*에 맺힌 상을 뜻한다.

웨이퍼 *i*위의 중심에서 *r*만큼 떨어진 지점 dA_i 에서 l_p 번 반사해서 생긴 상 위의 고리 형상 미소 면적 A_{l_p} (반경 r' , 두께 dr')로의 보기 계수는 dA_i 과 A_{l_p} 내의 미소 면적($r' dr' d\varphi_1$)과의 기하학적 관계를 고려한 뒤, φ_1 에 대해 적분을 수행하여 구할 수 있다. 또한 복사 에너지는 반사에 의해 그 세기가 줄어드는데, 1회 반사당 줄어드는 비가 웨이퍼의 반사율(ρ_w)과 같으므로 dA_i 에서 A_{l_p} 로의 보기 계수에는 $\rho_w^{l_p}$ 가 곱해져야 한다. 따라서 최종적인 식은 아래와 같이 된다.

$$F_{dA_i-A_{l_p}} = 2 \rho_w^{l_p} r' dr' \int_0^\pi \frac{(l_p+1)^2 \Delta H^2 d\varphi_1}{\pi (r'^2 + r^2 - 2rr' \cos \varphi_1 + (l_p+1)^2 \Delta H^2)^2} \quad (2)$$

웨이퍼 위의 한 점에서 인접한 웨이퍼를 보는 정 반사 보기 계수는 위의 경우 중 반사가 없거나 짝수 번 반사에 해당하므로, l_p 가 0인 경우와 짝수인 경우를 모두 합하면 구할 수 있다. 이때, 보기

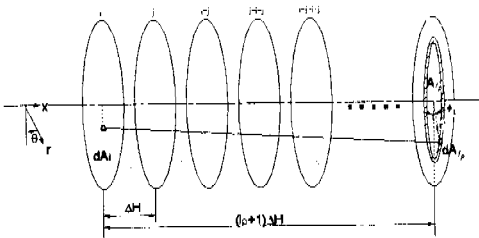


Fig. 2 Real and image wafers for wafer-to-wafer view factor

계수를 구한 인접한 웨이퍼 위의 미소 면적 A_j 는 A_{l_p} 와 동일한 기하학적 형상을 갖는다.

$$F^{s_{dA_i-A_j}} = \sum_{l_p=0,2,4,\dots} 2 \rho_w^{l_p} r' dr' \int_0^\pi \frac{(l_p+1)^2 \Delta H^2 d\varphi_1}{\pi (r'^2 + r^2 - 2rr' \cos \varphi_1 + (l_p+1)^2 \Delta H^2)^2} \quad (3)$$

웨이퍼 위의 한 점에서 자기 웨이퍼를 보는 정 반사 보기 계수는 위의 경우 중 홀수 번 반사에 해당하므로, l_p 가 홀수인 경우를 모두 합하면 구할 수 있다. 이때, 보기 계수를 구한 자기 웨이퍼 위의 미소 면적 A_i 는 A_{l_p} 과 동일한 기하학적 형상을 갖는다.

$$F^{s_{dA_i-A_i}} = \sum_{l_p=1,3,5,\dots} 2 \rho_w^{l_p} r' dr' \int_0^\pi \frac{(l_p+1)^2 \Delta H^2 d\varphi_1}{\pi (r'^2 + r^2 - 2rr' \cos \varphi_1 + (l_p+1)^2 \Delta H^2)^2} \quad (4)$$

2.2.2 웨이퍼 위의 한 지점에서 원관 벽면(석영관 또는 히터)으로의 보기 계수

웨이퍼 위의 한 지점에서 원관 벽면(석영관 또는 히터)으로 전달되는 복사 에너지는 원관 벽으로 직접 전달되거나, 그 웨이퍼와 인접한 웨이퍼 사이에서 반사되다가 도달한다. 보기 계수를 구하기 위해 원관 벽면과 인접한 두 장의 웨이퍼 및 그들의 반사된 상(image)들을 고려해 보자.

Fig. 3에서와 같이 웨이퍼 위의 점 A에서 $(l_p+1)\Delta H$ 만큼 떨어진 이미지 웨이퍼의 가장자리 위의 한 점 A'에 광원을 비추었을 때, 원관 내부에 맺히는 영상 A'를 생각하자. 이 영상 A'의 위치는 공간 도형에 관한 몇 가지 원리 및 삼각 함

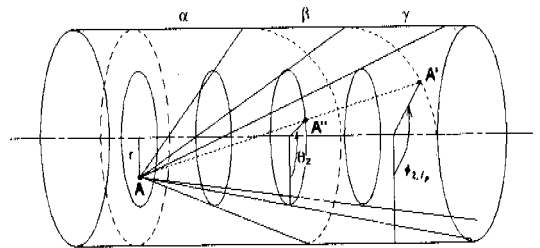


Fig. 3 Real and image wafers and tube wall for wafer-to-tube view factor

수를 이용하면 구할 수 있다. A'의 축 방향 위치 (ξ_{2,l_ρ}) 및 원주 방향 위치 (ϕ_{2,l_ρ})는 다음과 같다.

$$\xi_{2,l_\rho} = p(l_\rho + 1)\Delta H \quad (5)$$

$$\phi_{2,l_\rho} = \cos^{-1}\left(\frac{p(r_i \cos \theta_2 - r) + r}{r_o}\right) \quad (6)$$

$$p = \frac{-r(r_i \cos \theta_2 - r) + \sqrt{r_o^2(r_i^2 + r^2 - 2rr_i \cos \theta_2) - r^2 r_i^2 \sin^2 \theta_2}}{(r_i^2 + r^2 - 2rr_i \cos \theta_2)} \quad (7)$$

한편, A"의 원주 방향 위치 (θ_2)의 변화에 따라 A'의 위치가 변하면서 어떤 궤적이 형성된다. 즉, 식 (5)와 식 (6)에서 l_ρ 가 고정된 가운데 θ_2 를 매개 변수로 해서 궤적이 형성된다(Fig. 4). 이 궤적이 Fig. 3, Fig. 4에 표시된 각 구역 ($\alpha, \beta, \gamma, \dots$ 구역)의 경계가 되며, Fig. 4의 궤적 ①은 l_ρ 가 0일 때, 궤적 ②는 l_ρ 가 1일 때의 궤적이다.

α 구역만이 웨이퍼로부터의 복사 에너지가 직접 전달되는 실제 구역이다. β 구역은 웨이퍼 i에서 방사되는 복사 에너지가 인접한 웨이퍼(웨이퍼 j)에 한번 반사된 후 도달하게 되는 원관 벽면의 한 구역이, 웨이퍼 j에 한번 반사되어 생긴 상이다. γ 구역은 웨이퍼 i에서 방사되는 복사 에너지가 인접한 웨이퍼(웨이퍼 j)와 자신(웨이퍼 i)에 한번씩 반사된 후 도달하게 되는 원관 벽면의 한

구역이, 웨이퍼i와 웨이퍼j에 두 번 반사되어 생긴 상이다. 즉 $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \dots$ 구역은 웨이퍼 위의 한 점 A에서의 복사 에너지가 원관 면에 직접 도달하는 구역과, 한 번, 두 번, 세 번, ... 반사되어 도달하는 원관 벽면 구역들의 이미지들이다.

ξ_2 는 반사된 상의 좌표를 의미하고, 실제 원관의 축 방향 좌표 x_2 는 기하학적 고찰을 통하여 아래와 같이 쓸 수 있다.

$$x_2 = \begin{cases} \xi_2 - l_\rho \Delta H + x_{dA_i}, & l_\rho = 0, 2, 4, \dots \\ (1 + l_\rho) \Delta H - \xi_2 + x_{dA_i}, & l_\rho = 1, 3, 5, \dots \end{cases} \quad (8)$$

또한 원관 이미지의 축 방향 상한(upper limit)은 반사 회수 l_ρ 에 따라 다음과 같이 구할 수 있다.

$$\xi_{2,L} = \begin{cases} L + l_\rho \Delta H - x_{dA_i}, & l_\rho = 0, 2, 4, \dots \\ (1 + l_\rho) \Delta H + x_{dA_i}, & l_\rho = 1, 3, 5, \dots \end{cases} \quad (9)$$

웨이퍼 위의 한 점 A의 미소면적 dA_i 에서 원관 표면의 실제 축 방향 위치 x_2 지점의 미소면적 A_j (반경 r_0 , 폭 dx_2 의 circular strip)로의 복사 열 전달은 축 방향 좌표 x_2 에서 원주 방향 각도에 따라서, 직접 전달되거나, 한 번, 두 번, 혹은 여러 번 반사되어 도달하게 된다. 따라서 웨이퍼 위의 한 지점에서 원관 벽면으로의 보기 계수는 다음과 같이 구할 수 있다.

실제 원관 위치 x_2 가 결정되면, 반사 횟수 l_ρ 에 따라 식 (8)로부터 ξ_2 와 ϕ_{2,l_ρ} 를 구한다.

ϕ_2 에 대해 적분을 수행할 때, 복사 에너지가 직접 전달되는 구간(α 구간, $l_\rho=0$)인 경우에는 적분 구간이 $-\pi$ 에서 $\phi_{2,0}$ 이고, 복사 에너지가 한번 반사되어 전달되는 구간(β 구간, $l_\rho=1$)인 경우에는 적분 구간이 $\phi_{2,0}$ 에서 $\phi_{2,1}$ 이며, 다른 구간에 대해서도 이와 같은 방법으로 한다(그림 4 참고). 따라서 웨이퍼 위의 미소면적 dA_i 에서 원관 표면의 실제 축 방향 위치 x_2 지점의 미소면적 A_j (반경 r_0 , 폭 dx_2 의 circular strip)로의

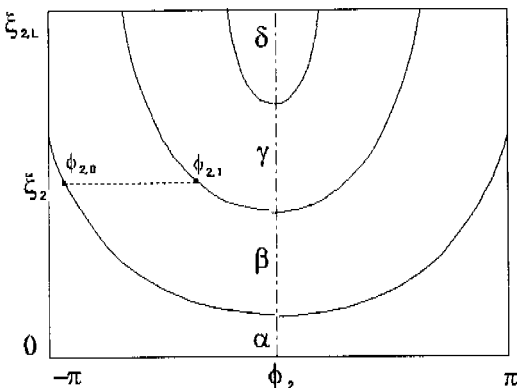


Fig. 4 Evolution of wafer images on tube wall

정반사 보기 계수는 아래와 같이 쓸 수 있다.

$$F^s_{dA_i-A_i} = \sum_{l_p=0}^{\infty} 2 \rho_w^{l_p} \xi_2 d\xi_2 \cdot \int_{\phi_{2,l_p}}^{\phi_{2,l_p+1}} \frac{(r_o - r \cos \phi_2)}{\pi(r_o^2 + r^2 - 2r r_o \cos \phi_2 + \xi_2^2)} r_o d\phi_2 \quad (10)$$

2.2.3 웨이퍼와 양 측면간의 보기 계수

웨이퍼 위의 한 지점에서 양 측면으로 전달되는 복사 에너지는 측면으로 직접 전달되거나, 그 웨이퍼와 인접한 웨이퍼 사이에서 반사되어 전달된다. 복사 에너지가 인접한 웨이퍼와 자기 자신에 l_p 번 반사된 후 도달하게 되는 경우에 해당되는 보기 계수는 위의 경우(웨이퍼 위의 한 지점에서 원관 벽면으로의 보기 계수)와 비슷하게 구할 수 있다.

먼저 웨이퍼 위의 점 A에서 $(l_p + 1)\Delta H$ 만큼 떨어진 이미지 웨이퍼의 가장자리 위의 한 점 A"에 광원을 비추었을 때, 원관 측면에 맺히는 영상 A'를 생각하자. 이 영상 A'의 위치는 기하학적 고찰을 통하여 구할 수 있으며, A'의 축 방향 위치 (ξ_3), 원주 방향 위치 (ϕ_3), 반경 방향 위치 (r_3)는 다음과 같다. 이때, dA_i 는 현재 보기 계수를 구하고자 하는 웨이퍼의 위치이다.

$$\xi_3 = \begin{cases} L + l_p \Delta H - x_{dA_i} & l_p = 0, 2, 4, \dots \\ (1 + l_p) \Delta H + x_{dA_i} & l_p = 1, 3, 5, \dots \end{cases} \quad (11)$$

$$\phi_{3,l_p} = \cos^{-1} \left(\frac{\xi_3 (r_i \cos \theta_3 - r)}{(l_p + 1) \Delta H} + r \right) \quad (12)$$

$$r_3 = \left\{ \left(\frac{r_i \xi_3}{(l_p + 1) \Delta H} \right)^2 + r^2 \left(1 - \frac{\xi_3}{(l_p + 1) \Delta H} \right)^2 + \frac{2 r r_i \xi_3}{(l_p + 1) \Delta H} \left(1 - \frac{\xi_3}{(l_p + 1) \Delta H} \right) \cos \theta_3 \right\}^{1/2} \quad (13)$$

원관 측면이 Fig. 5의 굵은 선으로 나타나 있으며, 점선은 웨이퍼의 가장 자리를 나타낸다. 주어진 l_p 에 대해 A'의 원주 방향 위치 (θ_3)의 변화에 따라 위치가 변하면서, A'이 어떤 궤적을 형성하게 되는데, 그 궤적은 θ_3 을 매개 변수로

ϕ_{3,l_p} , r_3 와의 관계로부터 구할 수 있으며, Fig. 5에서 궤적 (l_p)로 나타나 있다.

궤적 (l_p)와 궤적 ($l_p - 1$) 사이의 구역은, 웨이퍼 위의 한 점 A에서의 복사 에너지가 인접한 웨이퍼와 자기 웨이퍼에 l_p 번 반사된 후 도달하게 되는 원관 측면의 구역이다. 물론 이 구역으로의 보기 계수는 $\rho_w^{l_p}$ 를 곱해야 한다. 따라서 웨이퍼 위의 한 점 A에서 측면의 미소 면적(반경 r , 두께 dr 의 ring) A_j 로의 정반사 보기 계수는, 원주 방향 각도 ϕ_3 따라 반사 회수가 달라진다는 사실을 고려해서 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$F^s_{dA_i-A_i} = \sum_{l_p=0}^{\infty} 2 \rho_w^{l_p} r' dr' \cdot \int_{\phi_{3,l_p-1}}^{\phi_{3,l_p}} \frac{\xi_3^2 d\phi_3}{\pi(r'^2 + r^2 \xi_3^2 - 2 r r' \cos \phi_3)^2} \quad (14)$$

위 식에서 $\phi_{3,-1}$ 은 0을 의미한다.

2.3 웨이퍼와 석영관에서의 온도 분포

웨이퍼, 석영관의 미소 면적(circular strip), 양 측면의 미소 면적(circular ring) 사이의 복사 열 유속은 아래와 같이 쓸 수 있다.

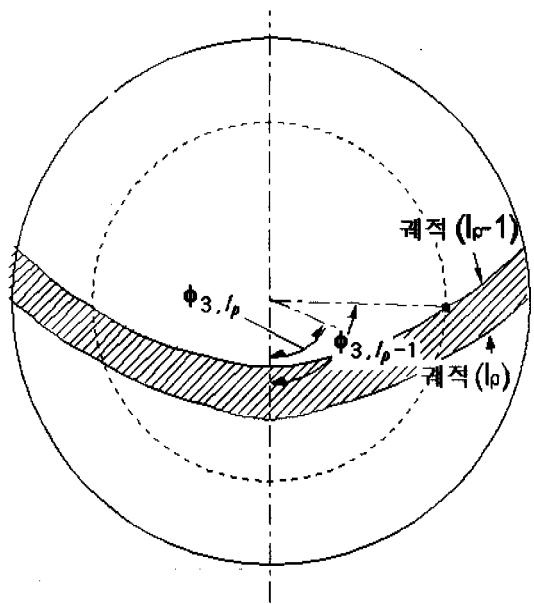


Fig. 5 Wafer images on tube side wall

$$q_k = \epsilon_k \left[\sum_{j=1}^d q_j \frac{1-\epsilon_j}{\epsilon_j} F^{s_{d\Delta_k-d\Delta_j}} + \sigma \sum_{j=1}^d T_j^4 F^{s_{d\Delta_k-d\Delta_j}} - \sigma T_k^4 + \sigma \sum_{j=d+1}^N \epsilon_j T_j^4 F^{s_{d\Delta_k-d\Delta_j}} \right] \quad (15)$$

여기에서 q_k 또는 q_j 는 순수하게 입사하는 복사 열 유속을 가리키며 $j=1$ 에서 d 까지는 확산 표면, $j=d+1$ 에서 N 까지는 정반사 면을 나타낸다.

$F^{s_{d\Delta_k-d\Delta_j}}$ 는 가능한 직접적인 복사열전달 뿐만 아니라 반사에 의한 복사 열전달까지 고려한 보기 계수이다. 10회 이상의 반사는 전체 열유속량에 비해 무시할 만 했으므로 반사 횟수는 15회까지만 고려하였다. 여기에 사용된 반응기내 물질의 복사 물성치는 Coronel과 Jensen⁽⁸⁾으로부터 구하였다.

웨이퍼의 온도 분포가 원주 방향으로 균일하다는 가정을 사용하였고, 웨이퍼의 두께가 얇으므로 두께 방향의 온도 변화를 무시하면, 아래와 같이 반경 방향의 열 전도와 표면에 주어지는 복사 열 전달과의 균형으로 온도가 결정된다.

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(rk \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{q_k}{\delta t_{wafer}} = 0 \quad (16)$$

여기에서 δt_{wafer} 는 웨이퍼의 두께를 가리키며, q_k 는 복사 열 교환에 의한 생성항이다.

석영관 표면에서의 온도 분포 역시 전도와 복사에 의한 열 전달을 해석하여 구할 수 있다.

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \frac{q_k}{\delta t_{wafer}} = 0 \quad (17)$$

여기에서 δt_{wafer} 는 석영관의 두께를 나타내며, q_k 는 복사 열 교환에 의한 생성항이다.

3. 실리콘의 증착 해석

웨이퍼 표면에서의 실리콘 증착을 계산하기 위

Table 2 Reactor configuration and simulation condition

Reactor	2.285 m
Quartz tube radius	16 cm
Quartz tube thickness	5 mm
Furnace radius	18 cm
Wafer radius	7.5 cm
Wafer thickness	0.5 mm
interwafer spacing	5 mm
First wafer	74.5 cm
Temperature	615 °C
Pressure	0.325 Torr
Flowrate	230 sccm
Inlet gas composition	SiH ₄ : H ₂ = 6 : 4

해서는 반응기내의 화학종에 대한 계산이 선행되어야 한다. 낮은 압력과 높은 온도의 반응조건 (Table 2)에도 불구하고, 기체의 평균자유 이동거리가 1mm 이하로서 웨이퍼사이의 간격보다 짧으므로 기체를 연속체로 간주하여, 다음과 같이 화학종 계산과 함께 질량 보존, 운동량 보존, 에너지 보존 식을 해석하였다.

질량 보존

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V}) = 0 \quad (18)$$

운동량 보존

$$\rho \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + \rho \vec{V} \cdot \nabla \vec{V} = -\nabla p + \nabla \cdot \vec{\tau} \quad (19)$$

에너지 보존

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_p \vec{V} \cdot \nabla T + \nabla \cdot (\rho \sum_{j=1}^n h_j Y_j V_j) = \nabla \cdot (k \nabla T) \quad (20)$$

화학종 보존

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \rho \vec{V} \cdot \nabla Y_i + \nabla \cdot (\rho Y_i V_i) = \dot{\omega}_i M_i \quad (21)$$

운동량 방정식을 해석할 때, SiH₄가 Si로 변환되어 웨이퍼 표면에 증착되므로, 반응기의 축 방

향으로 유동이 진행함에 따라 유량이 감소하게 되는데, 이 효과를 고려하기 위해 운동량 방정식에서 웨이퍼와 석영관 표면에서의 증착 속도를 경계 조건으로 처리하였다. 즉, 아래와 같이 표면으로 들어가는 속도 성분을 경계 조건으로 사용하였다.

$$V_k = -\frac{1-Y_k}{X_k} \frac{\nabla X_k}{\sum_{j \neq k}^K X_j/D_{jk}} \quad (22)$$

여기서 X_k 는 k 화학종의 mole 분율이며, Y_k 는 k 화학종의 질량 분율이다.

화학종 계산에서 물질의 확산 속도⁽¹²⁾와 전성 계수, 열 전도도 등의 물성치⁽¹³⁾들은 다음과 같은 식으로 계산하였다.

$$D_{ij} = \frac{3k_B T}{8p} \left[\frac{k_b T}{2\pi} \left(\frac{m_i + m_j}{m_i m_j} \right) \right]^{1/2} \cdot \frac{1}{\sigma_{ij}^2 \Omega_D (k_B T / \epsilon_{ij})} \quad (23)$$

$$\mu_i = \frac{5}{16} \frac{(\pi m_i k_B T)^{1/2}}{(\pi \sigma_i^2) \cdot \Omega_\mu (k_B T / \epsilon_i)} \quad (24)$$

$$k_i = \frac{15}{4} \frac{R_G}{M} \mu_i \left[1 + \frac{4}{15} \left(\frac{C_p}{R_G} - \frac{5}{2} \right) \right] \quad (25)$$

에너지 식에 포함되는 SiH₄의 정압 비열과 엔탈피는 다음과 같은 식에 의해 구하였다(Table 3).

$$\frac{C_p}{R_G} = a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 + a_5 T^4 \quad (26)$$

$$\frac{H}{R_G T} = a_1 + \frac{a_2}{2} T + \frac{a_3}{3} T^2 + \frac{a_4}{4} T^3 + \frac{a_5}{5} T^4 + \frac{a_6}{T} \quad (27)$$

고체 표면에서의 SiH₄의 표면 반응식은 연구자에 따라 많은 차이를 보이는데, 본 연구에서는 Roenigk과 Jensen⁽³⁾과 Badgwell 등⁽⁵⁾의 표면 반응 모델(Table 4)을 사용하여 증착률을 비교해 보았다.

$$R_s(\text{SiH}_4) = \frac{k_1 \exp(-18500/T) p_{\text{SiH}_4}}{1 + k_2 p_{\text{H}_2}^{0.5} + k_3 p_{\text{SiH}_4}} \left[\frac{\text{mol Si}}{\text{m}^2 \text{s}} \right] \quad (28)$$

(18)~(21)의 지배 방정식의 해를 구하기 위해서, 이 방정식을 제어 체적에 대하여 적분을 하여 이산화한 후, 반복 계산을 통해 해를 구하였다.⁽¹⁴⁾ 제어 체적면에서의 유속 조건은 벽층 법칙에 의해 내삽을 하였고, 연속 방정식에서 유도되는 압력 방정식의 해를 구하기 위해서 SIMPLER 방법을 사용하였다.⁽¹⁴⁾

수치 해석을 위한 Grid의 개수는 다음과 같이 하였다. Radiation 계산의 경우 x/r/θ 순으로 450 × 25 × 30으로 하였다. 온도분포 계산의 경우 r방향에 대해, 웨이퍼는 15개, 석영관은 20개, 히터는 25개로 나누었으며, θ 방향에 대해, 좌우 대칭이므로 0°~180°를 30개로 나누었다.

Table 3 Properties of SiH₄ and H₂

	σ (Å)	$\epsilon/k_B(T)$	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6
SiH ₄	4.084	207.6	0.14516e-2	0.13987e-1	-0.42345e-5	-0.23606e-8	0.13712e-11	0.31134e4
H ₂	2.827	59.7	0.29432e1	0.34815e-2	-0.77713e-5	0.74997e-8	-0.25203e-11	-0.97695e3

Table 4 Kinetic constants of SiH₄ surface reaction

Researcher	k_1 (mol Si/m ² s atm)	k_2 (atm ^{-1/2})	k_3 (atm ⁻¹)
Roenigk and Jensen[3]	$(1.2 \leq 1.6 \leq 2.0) \times 10^9$	$(3.0 \leq 6.0 \leq 9.0) \times 10^1$	$(6.0 \leq 7.0 \leq 8.0) \times 10^4$
Badgwell et al.[5]	$(0.4 \leq 2.0 \leq 10.) \times 10^9$	$(0.6 \leq 3.7 \leq 24.) \times 10^2$	$(0.2 \leq 1.1 \leq 5.9) \times 10^3$

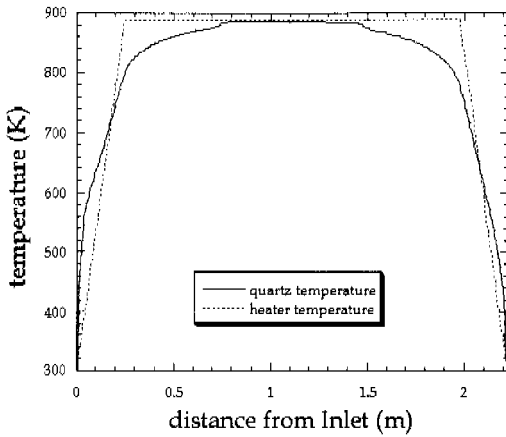


Fig. 6 Predicted quartz tube and assigned heater temperature

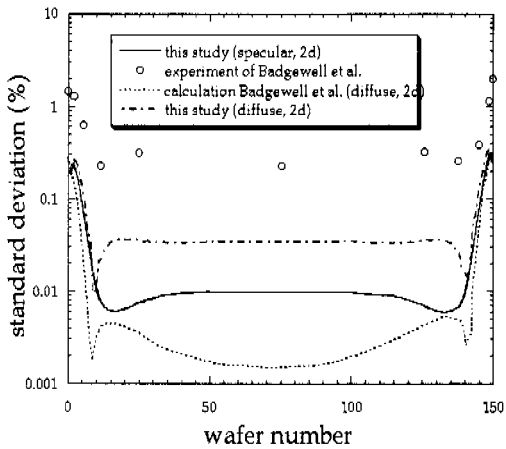


Fig. 8 Comparison of predicted temperature standard deviation from various models with experimental data

웨이퍼의 두께가 시간에 따라 변하지만, 웨이퍼 두께(500000Å)에 비해 증착량(분당 5Å)이 무시할 만 하기 때문에, 웨이퍼에서의 열전달을 계산할 때 시간에 따른 웨이퍼의 두께 변화는 무시하였다.

4. 결과 및 검토

히터에서의 주어진 온도 분포와 복사 열 전달 해석으로 구한 석영관에서의 온도 분포를 Fig. 6에서 비교하였다. 석영관의 온도 분포가 히터의

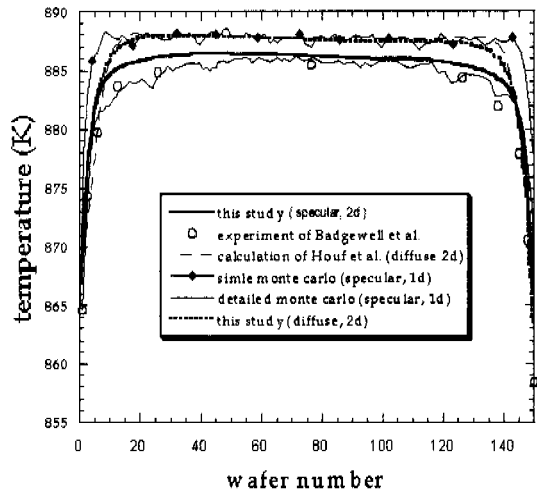


Fig. 7 Comparison of predicted averaged wafer temperatures from various models with experimental data

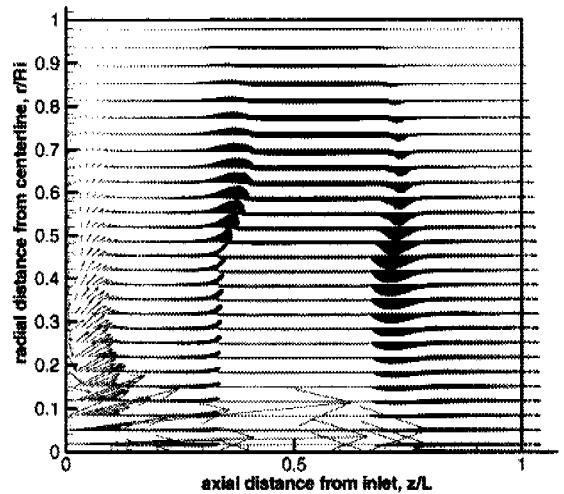


Fig. 9 Velocity vector in LPCVD reactor

온도 분포와 차이가 나는 것을 알 수 있다. 특히 반응기 입구와 출구 근처에서는 큰 차이를 나타내고 있다. 따라서 석영관에서 열 전달 해석을 하지 않고, 석영관의 온도 분포와 히터의 온도 분포와 동일하다고 가정하여 웨이퍼에서의 복사 열전달 해석을 하는 것은 큰 오류를 발생시킬 수 있다.

Fig. 7에서 본 연구의 정반사를 고려한 2차원 복사 열 전달 해석을 사용하여 구한 웨이퍼의 평

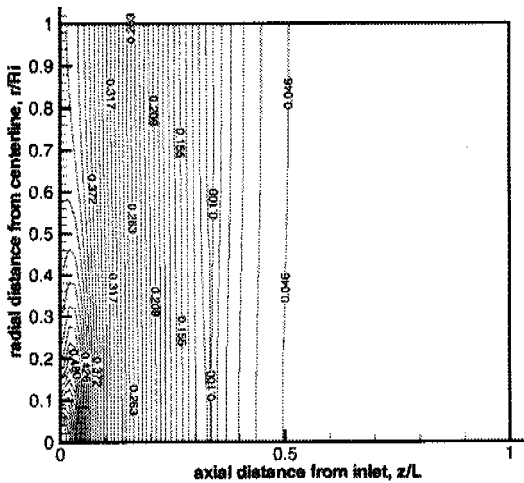


Fig. 10 X_{SiH_4} contour in LPCVD reactor

균 온도와 기존의 연구에서 얻어진 웨이퍼의 평균 온도를 비교하였다. 반응기 측면에 가까이 있는 웨이퍼들은 낮은 온도의 측면과 복사 열 교환이 활발하므로, 중심부 웨이퍼보다 낮은 온도를 보이는 것을 알 수 있는데, 본 해석 방법은 이런 경향을 잘 예측하고 있다. 본 연구 및 기존의 연구 결과 모두 웨이퍼의 온도 분포 경향이 비슷하지만, 그 중에서도 실험 결과와 가장 근접한 결과를 보이는 것은 정반사를 고려한 detailed monte carlo 해석이었다. 그러나 이 방법을 이용한 해석은 각 웨이퍼마다 온도가 일정하다는 1차원 가정을 하였기 때문에, 웨이퍼에서의 반경 방향에 대한 증착 불균일도를 예측하는데는 사용될 수 없다. 그 다음으로 실험 결과와 가장 근접한 결과를 보이는 것이 정반사를 고려한 본 연구의 결과인데, 이 방법은 웨이퍼의 반경 방향 불균일도를 예측하는데도 사용할 수 있다는 장점이 있다. 한편 본 연구에서 웨이퍼를 정반사 면으로 고려한 해석으로 얻은 온도 분포와 확산 면으로 고려한 해석으로 얻은 온도 분포를 비교했을 때, 경향은 비슷하지만 크기에서는 비교적 차이가 남을 알 수 있었다.

반응기내의 각각의 웨이퍼들은 평균 온도가 다른 뿐만 아니라, 웨이퍼의 반경 방향 온도 분포 또한 다르다. Fig. 8은 반경 방향 온도 분포의 표준편차를 나타내는데, 계산 결과가 실험측정치⁽¹⁾와 전체적으로 큰 차이를 보여주고 있지만 그 경향은 일치하고 있다. 특히 반경 방향 온도분포의

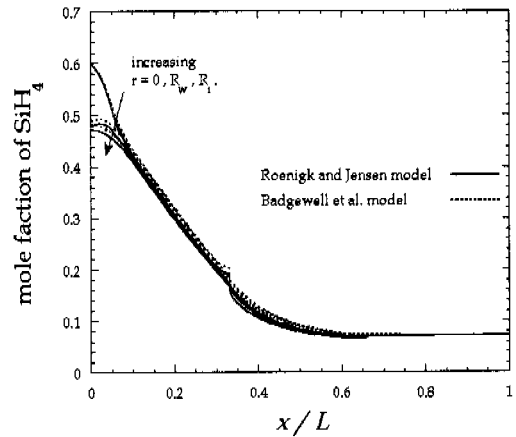


Fig. 11 Variations of mole fraction of silane along the reactor axis

불균일도가 최소가 되는 점을 잘 예측하고 있다(실험 측정치는 표본수가 평균값을 계산하는데는 충분하지만 표준편차를 구하는데는 충분치 않을 수도 있다). 웨이퍼를 확산 면으로 가정한 연구 결과가 실험 결과와 더 근접하며, 본 연구가 기존의 연구(Badgwell et al.)보다 발전된 결과를 보여 준다.

반응기 내에서 속도 분포, SiH_4 농도 분포를 Fig. 9, Fig. 10에 나타내었다. 유입구에서 분사되는 화학 기체는 웨이퍼들이 배열된 곳을 지나 배출구로 배출되는데, 웨이퍼들이 배열된 곳의 전 후에서의 와류가 형성되는 것을 볼 수 있다. 특히 웨이퍼들이 배열된 곳의 환상형 구간과 웨이퍼 사이에서 반경 방향 속도가 존재함을 알 수 있는데, 이는 웨이퍼에서 소비되는 SiH_4 를 보충하여 질량보존을 만족하기 위해 유동이 생기기 때문이다. SiH_4 의 농도 분포를 보면 유입구에서 나오자마자 급격히 감소하는 것을 알 수 있는데, 낮은 압력으로 인해 확산효과가 대류효과보다 매우 크기 때문이다. 특히 유입구 쪽을 제외하면 반경 방향의 화학종의 분포가 비슷한데(Fig. 11), 이는 Jensen과 Graves⁽²⁾가 혼합된 두 개의 일차원 모델에서 사용하였던 가정과 일치하는 것이며, 실제로 그러한 가정이 어느 정도 타당하다는 것을 보여주고 있다.

웨이퍼에서 Si의 증착은 표면 반응에 좌우되는데, 본 연구에서는 2가지 표면 반응식을 사용하여 증착률을 계산하고, 그 결과를 비교하였다.

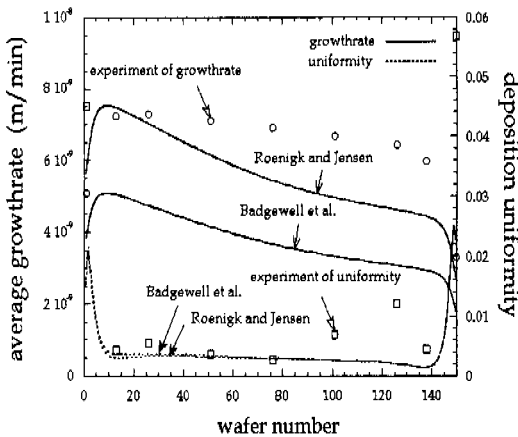


Fig. 12 Averaged growth rate and deposition uniformity along the wafers

Fig. 12는 Si의 증착률과 증착 불균일도를 표면 반응의 모델에 따라 나타낸 그림인데, 경향은 일치하고 있지만, 표면 반응식의 차이에 따라 증착률이 큰 차이를 보여주고 있다. 본 연구에서는 Roenigk과 Jensen⁽³⁾의 표면 반응 모델을 사용하였을 때, 실험 결과와 더 근접한 결과를 얻었다. 증착 불균일도는 두 가지 표면 반응 모델에 대해 비슷한 결과를 얻었으며, 두 모델 모두 실험 결과와 비교적 잘 일치하였다. 이러한 결과는 웨이퍼에서 Si의 증착을 제대로 예측하기 위해서는 표면 반응식을 정확히 알아야 하고, 이를 위해서는 반응기내의 온도 분포와 화학종 분포를 제대로 예측할 수 있어야 함을 나타내고 있다.

5. 결론

LPCVD 반응기에서 150 장의 웨이퍼와 석영관에서의 온도분포를 복사 열 전달 해석을 통해 예측하였고, 이 결과를 이용하여 반응기내의 유체 유동과 온도 분포, 화학종의 분포 등을 해석하여, 웨이퍼에의 Si 증착을 계산하였다.

아직까지 제대로 해석된 적이 없는 웨이퍼의 정반사를 고려한 복사 열 전달 해석을 통해 웨이퍼와 석영관의 온도를 예측하였고, 실험결과와 비교해 본 결과 잘 일치하였다. 복사 열 전달 해석으로 계산된 웨이퍼와 석영관의 온도 분포를 경계 조건으로 하여, 150 장의 웨이퍼와 이를 포함한 반응기 전체에서 속도, 온도, 화학종 분포를

해석하였고, 웨이퍼에서의 실리콘의 증착률을 계산하였다. 표면반응식에 따라 증착률의 절대값에서는 차이가 났지만, 그 경향은 일치하였다.

본 해석은 이제까지 LPCVD 해석에서 복사 열 유속을 구하거나 반응기내의 화학종 계산을 하는데 쓰였던 방법들의 단점을 상당히 보완하였기 때문에, 표면반응식의 예측과 실제 반응기 설계의 기초자료로 이용될 수 있을 것이다.

후 기

본 연구의 일부는 과학기술부의 창의적 연구진흥 사업(나노 입자 제어 기술 연구단)에 의해 지원을 받아 수행된 결과임.

참고문헌

- (1) Duverneuil, P. and Couderc, J., 1992, "Two-Dimensional Modelling of Low Pressure Chemical Vapor Deposition Hot Wall Tubular Reactor," *J. Electrochem. Soc.*, Vol. 139, No. 1, pp. 296~312.
- (2) Jensen, K. F. and Graves, D. B., 1983, "Modeling and Analysis of Low Pressure CVD Reactor," *J. Electrochem. Soc. : SOLID-STATE SCIENCE AND TECHNOLOGY*, Vol. 130, No. 9, pp. 1950~1957.
- (3) Roenigk, K. F. and Jensen, K. F., 1985, "Analysis of LPCVD Reactor," *J. Electrochem. Soc. : SOLID-STATE SCIENCE AND TECHNOLOGY*, Vol. 132, No. 2, pp. 448~454.
- (4) Houf, W. G., Grcar, J. F. and Breiland, W. G., 1993, "A Model for Low Pressure Chemical Vapor Deposition in a Hot-Wall Tubular Reactor," *Material Science and Engineering*, B17, pp. 163~171.
- (5) Badgewell, T. A., Edgar, T. F., Trachtenberg, I. and Elliott, J. K., 1992, "Experimetal Verification of a Fundamental Model for Multiwafer Low-pressure Chemical Vapor Deposition of Polysilicon," *J. Electrochem. Soc.*, Vol. 139, No. 2, pp. 524~532.
- (6) Hirasawa, S., Torii, T. and Takagake, T., 1989,

- "Analysis of Temperature Distribution in Rows of Wafers at Insertion into a Diffusion Furnace," National Heat Transfer Conference. Heat Transfer in Manufacturing and Material Processing, HTD-113, pp. 77~83.
- (7) Badgewell, T. A., Trachtenberg, I. and Edgar, T. F., 1994, "Modeling the Wafer Temperature Profile in a Multiwafer LPCVD Furnace," *J. Electrochem. Soc.*, Vol. 141, No. 1, pp. 161~172.
- (8) Coronell, D. G. and Jensen, K. F., 1994, "A Monte Carlo Simulation Study of Radiation Heat Transfer in the Multiwafer LPCVD Reactor," *J. Electrochem. Soc.*, Vol. 141, No. 2, pp. 496~501.
- (9) Siegel, R. and Howell, J. R., 1992, "Thermal Radiation Heat Transfer," 3rd Ed., Hemisphere Pub. Co.
- (10) 손정옥, 1992, "급속 고온 처리장치에서의 복사 열전달 연구," 공학석사학위논문, 서울대학교.
- (11) Park, K. S., 1997, "Studies of Heat and Mass Transfer and Particle Dynamics during Silicon-based Thin Film Fabrication Process," Ph.D., Thesis, Seoul National University.
- (12) Curtiss, C. F. and Hirschfelder, J. O., 1949, "Transport Properties of Multicomponent Gas Mixtures," *J. Chem. Phys.*, Vol. 17, No. 6, pp. 550~555.
- (13) Rosner, D. E., 1986, Transport Process in Chemically Reacting Flow Systems, Butterworth.
- (14) Patankar, S. V., 1980, Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, Hemisphere Pub. Co.