

< 논문 >

반응로 형상에 따른 주기적으로 배열된 패턴위의 GaN 성장 특성

강성주* · 백병준† · 김진택** · 박복춘*** · 이철로****
(2006년 8월 16일 접수, 2007년 1월 10일 심사완료)

Characteristic of GaN Growth on the Periodically Patterned Substrate for Several Reactor Configurations

Sung Ju Kang, Byung Joon Baek, Jin Taek Kim, Bock Choon Pak and Cheul Ro Lee

Key Words: GaN(질화갈륨), Conformal Deposition(등각증착), Opening Width(개구도), Coverage(차폐도), Feature Scale Model(미시규모형태모델)

Abstract

The growth of GaN on the patterned substances has proven favorable to achieve thick, crack-free GaN layers. In this paper, numerical modeling of transport and reaction of species is performed to estimate the growth rate of GaN from the reaction of TMG(trimethyl-gallium) and ammonia. GaN growth rate was estimated through the model analysis including the effect of species velocity, thermal convection and chemical reaction, and thermal condition for the uniform deposition was to be presented. The effect of shape and construction of microscopic pattern was also investigated using a simulator to perform surface analysis, and a review was done on the quantitative thickness and shape in making GaN layer on the pattern. Quantitative analysis was especially performed about the shape of reactor geometry, periodicity of pattern and flow conditions which decisively affect the quality of crystal growth. It was found that the conformal deposition could be obtained with the inclination of trench $\Theta > 125^\circ$. The aspect ratio was sensitive to the void formation inside trench and the void located deep in trench with increased aspect ratio.

기호설명

$D_{i,j}$: 혼합물내 화학종 i 의 확산계수(m^2/s)
 D_i^T : 화학종 i 의 열확산계수(m^2/s)
 C_p : 비열($J/kg \cdot K$)

g : 중력가속도($g_z = -9.81m/s^2$)
 M : 혼합물 분자
 M_i : 화학종 i 의 분자량($kg/kmol$)
 T : 혼합물 온도(K)
 \bar{v} : 속도(m/s)
 ρ : 혼합물 밀도(kg/m^3)
 μ : 유체의 점성($kg/m \cdot s$)
 ω : 질량소부분

* 전북대학교 대학원 정밀기계공학과
† 책임저자, 회원, 전북대학교 기계항공시스템공학부, 자동차신기술연구센터
E-mail : baekbj@chonbuk.ac.kr
TEL : (063)270-2373 FAX : (063)270-2388

** 회원, 전북대학교 자동차신기술연구센터
*** 회원, 전북대학교 기계항공시스템공학부
**** 전북대학교 신소재공학부

1. 서론

GaN 발광소자를 Si 기판 위에 성장시키는 이종 에피택시 성장법은 사파이어나 SiC위에 성장시키는 방법과 비교하여 경비, 대형화, 전기적 또는 열전도

도의 관점에서 우수한 이점이 있으나, 결정격자 상수(결정 격자내의 원자들간 또는 이온들 간의 평균 거리), 결정격자 구조(원자나 이온들의 집합 또는 군집의 형태/구조), 열팽창계수(온도변화에 따른 원자 또는 이온간의 평균거리 변화의 계수화 값)의 큰 차이와 그 밖의 원인에 의해 GaN 표면에서 많은 크랙과 공동에 의해 그 품질에 문제가 있다. 최근 선택적인 마스크를 이용한 방법이 격자 상수 및 열적 불일치를 개선하기 위해 시도되고 있으며, 패턴된 기판 위에 GaN을 성장시키는 방법이 두껍고 크랙이 없는 GaN층을 얻을 수 있는 양호한 방법으로 인정되고 있다.⁽¹⁾ 이 방법을 기본으로 하여, 주기적으로 배열된 Si 기판을 설계하여, 불순물의 오염 및 공정의 손상이 없고 고품질의 GaN 결정을 얻을 수 있었다.⁽²⁾

이 공정의 기본적인 메커니즘을 규명하기 위해서는 반응로 규모의 거시적인 유동 특성뿐만 아니라 반응 표면에서의 미시적인 거동의 해석이 요구되고 있으나, 이에 대한 분석이 부족한 실정이다.

Fotiadis 등⁽³⁾은 유기금속증기 에피택시(MOVPE)를 위한 수직형 반응로에서 유동 형태, 열전달 및 증착율의 균일성에 미치는 작동조건, 반응로 형태의 영향을 검토하였다.

Pawlowski 등⁽⁴⁾은 trimethyl-gallium(TMGa)과 암모니아로부터 생성되는 GaN의 MOVPE에 대한 기본적인 반응과 전달모델을 개발하였으며 그 모델을 활용하여 기판위의 광범위한 영역에서 박막성장의 최소의 변동과 관련된 변수영역을 나타내는 성능선도를 개발하였다.

Safvi 등⁽⁵⁾은 GaN 성장을 정확하게 예측할 수 있는 화학모델은 어렵다고 판단하고 비교적 단순한 새로운 가스상 화학 모델을 제시하였다. 이를 적용하여 반응로내의 유동형태, 온도 및 농도를 예측하고 실험적 결과와 비교하여 그 유용성을 제시하였다.

Theodoropoulos 등⁽⁶⁾은 가스상의 운동학적 모델과 가스-표면간의 반응을 고려한 기초적인 모델을 개발하고, Petrov-Galerkin FEM을 적용하여 GaN 성장층의 균일성에 미치는 작동조건(입구속도, 반응면 온도, 반응면 회전 및 입구와 반응면 길이 등)의 영향을 제시하였다. 또한 균일성장을 위한 최적 입구형태를 제시하였으며, 중간 생성 기체 성분들의 역할 등 총괄적인 연구 결과를 제시하였으나, 표면에서의 미시적인 거동의 해석이 이루어지지 못하였다.

미시적 거동 관찰은 Pai⁽⁷⁾에 의해 실험적으로 수행된 바 있다. 이 연구에서는 중형비가 큰 구조의 트랜

치 위의 증착에 미치는 화학기(chemical radical)와 이온의 영향을 조사하고 산화박막의 미세구조 및 품질에 미치는 각종 영향이 검토되었다.

미시 규모 형태 모델(feature scale model) 해석을 위해서는 반응로 규모의 자료 즉, 반응로 내의 속도, 온도 분포 및 각 반응물의 유량 유속 값을 또 다른 경계조건으로 하는 미시적인 분석이 요구된다.

이를 위한 시도로서 Gobbert 등⁽⁸⁾은 다중 시뮬레이터(multiscale simulator)를 개발하였다. 기존의 반응로 규모 및 미시형태의 시뮬레이터와 함께 그 중간 규모의 시뮬레이터를 조합한 융합 시뮬레이터를 개발하여, 서로 독립적으로 계산된 결과를 서로 연결시킬 수 있도록 하였다. 최근에는 3D 및 일반적인 화학모델 적용이 가능하도록 프로그램⁽⁹⁾이 개발되어 상용화되고 있다(CFD-TOPO).

이상에서 살펴본 바와 같이 반응로내의 유동 및 표면반응에 대한 연구가 대부분이며, 이들의 표면형태학적인 고찰이 미흡한 실정이다. 따라서 본 연구에서는 이 시뮬레이터를 Mihopoulos⁽¹⁰⁾에 의해 제안된 화학모델을 CFD-TOPO에 적용하여 표면형태학적인 고찰을 수행하였다. 반응로 규모 모델에서 반응물질의 속도, 열적 대류현상 및 화학 반응을 고려한 모델해석을 통하여 GaN 증착율을 예측하고 다양한 반응로 형상에 대해 균일한 증착을 위한 열적 조건을 제시한다. 또한 표면해석을 위한 시뮬레이터를 사용하여 미시적인 패턴의 형상 및 구조의 영향을 검토하여 패턴위에 형성되는 GaN층의 정량적인 두께 및 형상에 대하여 검토한다. 특히 결정 성장의 품질에 결정적인 영향을 주는 반응로 형태, 패턴의 형상, 주기성 및 유동 조건에 대한 정량적 분석을 수행하였다.

2. 해석모델

2.1 반응기형상

반응로의 구성은 비 반응 영역인 저온 벽면 및 입구영역과 출구영역, 고온의 반응 영역으로 구분할 수 있다. Fig. 1은 해석에 사용된 각종 반응로 내의 채널과 반응면을 나타내고 있다. 반응로(I)는 채널 벽면이 수평인 가장 일반적인 형태로서 반응물이 반응면과 평행하게 이동하는 구조로서 간단하고 비교적 안정된 유동을 얻을 수 있다. 이 수평형 반응로에서 반응면 또는 채널 벽면[반응로(II)]의 경사에 의해 증착 두께의 균일성

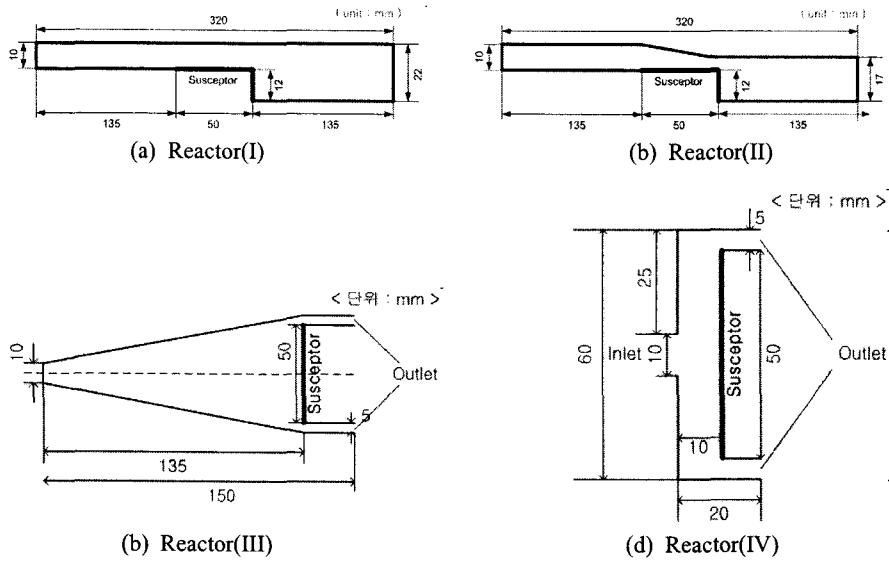


Fig. 1 Several reactor configurations

을 향상시키기 위한 방법도 시도되고 있다. 또한 반응로(III)과 같이 입구와 반응면의 거리를 증가시켜 TMG와 암모니아 및 수송가스의 양호한 혼합에 의해 반응면에 도달되는 TMG 질량을 증가시킬 수 있는 구조도 검토되고 있다. 반응로(IV)는 반응물을 포함한 수송가스가 반응면과 수직 방향으로 공급되는 형태로서 다량의 박막 성장에 유리한 형태이나, 부력의 영향 등 균일한 증착에 불리한 단점이 있다. 최근 박막 두께의 감소 및 반응면의 대형화 추세에 따라 이 요구를 충족할 수 있는 반응로의 구조를 개선하기 위한 반응물들의 전달현상의 해석이 강조되고 있다. TMG와 암모니아 그리고 수송가스인 수소는 특별히 고안된 입구에서 완전히 혼합되어 균일한 속도로 유입된다. 이 반응로 규모의 해석을 위해 상업용 코드인 CFD-ACE+를 사용하여 가스 유동, 열전달 및 표면 화학 반응을 고려한 보존방정식의 해를 구하였다.

2.2 기판표면형상

주기적으로 배열된 패턴 위의 박막 성장에 대한 미시적 형태변화를 고찰하기 위해 $2\ \mu\text{m} \times 2\ \mu\text{m}$ (AR=1) 인 트렌치(trench)와 길이 $4\ \mu\text{m}$ 의 테라스(terrace)를 기본 모델로 한 사각 및 사다리꼴 패턴에 대한 분석을 수행하였다. CFD-ACE+를 사용하여 구한 반응로 규모의 유동 특성 자료를 미시 규모형태

모델 해석을 위한 시뮬레이터(CFD-TOPO) 프로그램에 대입함으로써 표면 형태의 영향을 검토하였다. 계산에 적용된 격자계는 채널의 벽면과 반응면 양단에 격자를 밀집시킨 불균일 격자계를 채택하였다. 반응면 위의 증착율은 유동방향보다 수직방향 격자수에 의해 예민하게 변화하였으며, 격자수 300×100 개 이상에서 격자수 증가에 따른 영향이 적었다. 따라서 본 연구에서는 격자계 300×100 을 채택하였다.

3. 지배방정식 및 증착률

3.1 지배방정식

반응로내의 열 및 물질전달의 분포를 구하기 위해서는 다음과 같은 운동량 방정식, 에너지 방정식 및 화학종 전달방정식에 관한 결합된 편미분 방정식의 해를 구해야 한다. 유동매체는 대부분의 MOCVD와 마찬가지로 수송가스로서 수소를 사용하였으며, N과 Ga의 소스로서 암모니아와 TMG가 사용되었다.

운동량방정식

$$\nabla \cdot (\rho \bar{v} \bar{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot \mu(\nabla \bar{v}) + \rho \bar{g}$$

에너지방정식

$$\rho C_p(\bar{v} \cdot \nabla T) = \nabla \cdot (k \nabla T)$$

화학종방정식

$$\bar{v} \cdot \nabla (\rho m \omega_i) = -\nabla \cdot J_i \quad i = 1, \dots, n-1,$$

Table 1 Gas phase surface reaction mechanism for GaN growth

	Reaction	Rate= $k_0 \times \exp(-E_a/RT)$	k_0	E_a
[G1]	Ga(CH ₃) ₃	→GaCH ₃ +2CH ₃	3.5×10^{15}	59.5
[G2]	Ga(CH ₃) ₃ + NH ₃	↔Ga(CH ₃) ₃ :NH ₃	1.0×10^{12}	0.0
[G3]	Ga(CH ₃) ₃ :NH ₃	↔Ga(CH ₃) ₃ +NH ₃	9.5×10^9	19.0
[G4]	Ga(CH ₃) ₃ :NH ₃	→Ga(CH ₃) ₂ N ₂ + CH ₄	1.0×10^{13}	32.0
[G5]	Ga(CH ₃) ₃ :NH ₃ + NH ₃	→(CH ₃) ₂ N ₂ +CH ₄ +NH ₃	1.0×10^{12}	15.0
[G6]	3Ga(CH ₃) ₂ NH ₂	→[Ga(CH ₃) ₂ NH ₂] ₃	1.0×10^{21}	0.0
[G7]	[Ga(CH ₃) ₂ NH ₂] ₃	→3"GaN"+6CH ₄	4.0×10^{15}	60.0
[S1]	Ga(CH ₃) ₃ + S	→Ga*+3CH ₃	S = 0.1	0.0
[S2]	Ga(CH ₃) ₃ :NH ₃ + S	→Ga*+3CH ₃ +NH ₃	S = 0.1	0.0
[S3]	GaCH ₃ + S	→Ga*+CH ₃	S = 1.0	0.0
[S4]	Ga(CH ₃) ₂ NH ₂ + S	→Ga*+2CH ₄	S = 1.0	0.0
[S5]	"GaN" + S	→GaN*	S = 1.0	0.0
[S6]	[Ga(CH ₃) ₂ NH ₂] ₃ + 3S	→3GaN*+6CH ₄	S = 1.0	0.0
[S7]	Ga*	→[GaN] _s + S	1.0×10^{10}	37.0
[S8]	GaN*	→[GaN] _s + S	2.0×10^8	22.0
[S9]	[GaN]	→1/2N ₂	2.0×10^3	75.0

여기에서 농도 기울기에 의한 확산 플럭스는

$$J_i = \rho \frac{M_i}{M} \sum_{j=1, j \neq i}^n D_{ij} (\nabla \omega_j + \omega_j \frac{\nabla M}{M}) - D_i^T \frac{\nabla T}{T}$$

3.2 증착률

반응로에 유입된 반응물들은 고온의 활성화에너지를 활용하여 기체상 반응 및 표면반응을 통해 표면에 증착하게 되며, 본 연구에서 사용된 반응물 TMG, 암모니아 및 수소의 반응 메커니즘은 Mihopoulos⁽¹⁰⁾에 의해 제안된 과정을 활용하였다. 제시된 가스상 및 표면 화학반응 및 관련 상수값은 Table 1과 같다. 특히 반응을 상수 k 는 Arrhenius식, $k = k_0 \exp(-E_a/RT)$ 을 사용하였으며, 활용가능한 실험 자료의 제한 때문에 열역학적 물성치들은 프로그램에 내장된 운동이론(kinetic theory)⁽¹¹⁾로부터 계산하였다.

3.3 경계조건

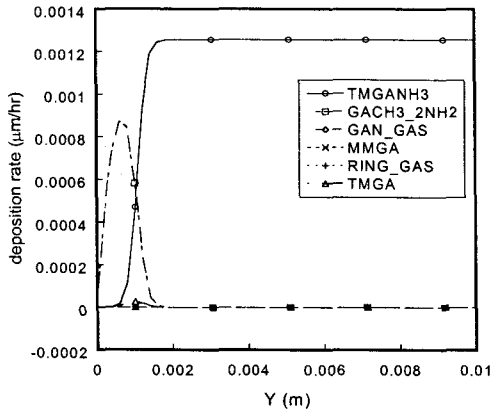
반응로 입구 속도는 사용된 유량으로부터 환산되었으며, 균일하게 유입된다. 사용된 수소의 유량은 1.0 slpm ~ 5.0 slpm 이며 암모니아는 1.0 slpm부터 3.0 slpm 까지 변화하는 조건을 사용하였다. TMG의량은 5.0sccm을 기준으로 하였다. 유입가스의 온도 및 비반응 벽면 온도는 300K로 일정하며, 고온의 반응면 온도는 1300K이다. 복사를 고려한 열적 조건의 경우

체널내 복사의 흡수, 방사, 산란은 무시하고 체널을 구성한 벽면간의 복사 열교환만을 고려한 표면대표면(surface to surface)모델을 채택하여 분석하였다. 작동압력은 250Torr이며 증착은 반응면 위에서만이 이루어지는 것으로 가정하였다.

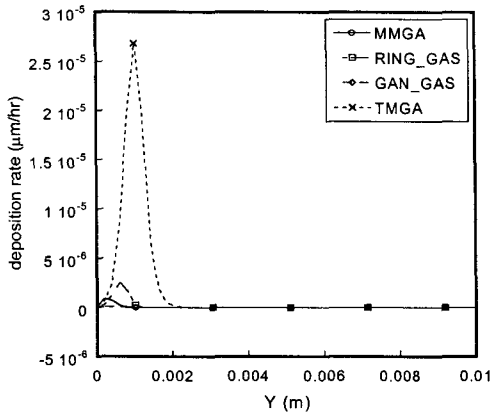
4. 결과 및 고찰

본 연구에서는 수평형 CVD 반응로에 주입된 수소와 TMG 및 암모니아 가스의 혼합에 관한 수치계산을 수행하여 반응면 위에 부착하는 GaN의 성장률에 미치는 입구형상, 주입가스량 등의 영향을 조사하였다.

TMG와 암모니아의 반응에 의한 GaN 성장의 미시적 분석을 위해서는 박막 성장에 관련된 Ga성분의 반응물의 상대적 분포를 검토할 필요가 있다. Fig. 2는 반응면의 수직방향을 따라 변화하는 중간 Ga성분 반응물(TMG, TMG:NH₃, (GaCH₃)₂:NH₂ 및 TGNCY)의 상대적 분포를 도시한 것이다. Fig. 2(a)에서 도시한 바와 같이 TMG는 암모니아와 고온의 영역에서 순간적으로 반응하여 순간적인 반응(Table 1의 반응 G3)을 함으로서 대부분 소비되어 반응면 주위에서 극히 소량만이 존재함을 알 수 있다. 이 TMG와 암모니아 반응의 중간 생성물인 TMG:NH₃



(a)



(b)

Fig. 2 Mass fraction distribution of Ga-containing species along the distance from the substrate surface

가스는 반응면과 멀리 떨어진 곳에 대부분 존재하며, 반응면으로부터 1.5mm까지 일정하게 유지되나, 고온의 반응면에 도달됨에 따라 분해되어 박막 형성을 위한 Ga를 생성함으로써 충분히 공급되는 N과 혼합되어 표면에서의 반응과정을 통해 GaN층을 형성하게 된다. Fig. 2(b)는 TMG:NH₃, (GaCH₃)₂:NH₂ 이외의 다른 중간가스분포를 나타낸 것이다. 반응면 주위에서 가스의 질량분율은 2차수 이상 작은 것을 알 수 있으며, 따라서 상대적으로 GaN 형성에 기여가 작은 것으로 판단할 수 있다.

반응로 벽면의 적절한 열적 조건을 선택하기 위하여 Fig. 3에 도시한 바와 같이 4가지 경우의 조건을 검토하였다. 먼저 통상적으로 적용되는

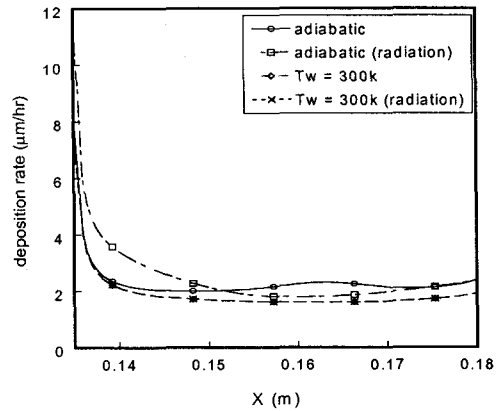


Fig. 3 Effects of thermal wall condition on the growth rate

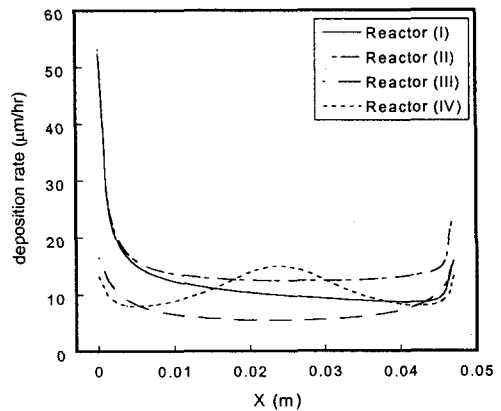


Fig. 4 Growth rate of GaN for several reactor configurations

벽면의 단열된 조건에 의한 해석은 하류영역의 온도상승을 야기하며, 이 온도상승에 의해 증착율의 급격한 증가에 의한 불균일한 증착이 이루어진다. 단열조건 및 복사열전달을 고려한 결과 비교적 균일한 증착을 나타내고 있으며, 고온의 단열조건인 경우에는 복사 열전달을 함께 고려하는 것이 타당하며, 이 혼합 조건에 의해 비교적 균일한 증착두께를 얻을 수 있음을 알 수 있다. 벽면을 냉각하여 일정한 온도($T_w=300K$)를 유지할 경우 반응로 내부의 온도분포 또한 유동방향으로 균일하게 분포됨으로서 균일한 증착을 얻기에 용이한 조건이 되나, 증착율은 낮게 나타난다. 또한 등온인 벽면의 온도 조건에 대해서는 채널

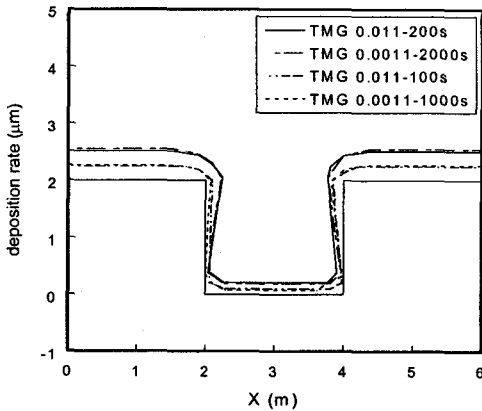


Fig. 5 Thickness change of GaN layer by time & TMG

내의 복사의 영향은 무시할 수 있음을 알 수 있다.

Fig. 4는 동일한 유동조건에 대해 박막 두께에 미치는 각종 반응로 형상의 영향을 도시한 것이다. 채널 벽면이 수평인 반응로(I)내의 유동은 가장 일반적인 형태로서 증착율은 반응면의 선단으로부터 유동의 진행 방향을 따라 감소하여 불균일한 두께를 갖는 증착이 이루어진다. 이 불균일 분포는 유동이 진행함에 따라 반응물이 희석되며, 특히 경계층 두께의 증가와 관련된 것으로 잘 알려져 있으며^(3,6) 후류영역의 경계층 두께를 조절하기 위한 수단으로 반응면을 경사시키는 방법이 사용되고 있다. 반응로(II)는 경사진 반응면을 사용하는 대신 채널의 윗벽면의 기울기 및 위치를 변화시켜 균일한 증착을 얻을 수 있도록 한 것이다. 경사진 벽면은 화학적인 확산에 의해 반응면에 도달되는 TMG의 양을 수직으로 이동시킨다. 또한 반응면과의 접촉이 용이하게 되어 증착율이 증가할 것이다. 그러나 급격한 경사도의 경우에는 반응면 후류영역에서 증착율이 증가하여 또 다른 불균일성이 나타나기 때문에 적정 경사각이 요구된다. 반응로(III)는 입구와 반응면의 거리를 증가시켜 TMG와 암모니아 및 수송가스의 양호한 혼합을 목적으로 한 것이다. 증착이 불균일성은 개선되었으나 증착율의 저하가 크게 나타남을 알 수 있다. 반응로(IV)는 반응물을 포함한 수송가스가 반응면과 수직 방향으로 공급되는 형태로서 GaN 박막형성에 결정적인 역할을 하는 TMG가 중심에서 공급되기 때문에 그 증착율은 반응면의 중

심에서 최대가 되며, 따라서 균일한 두께의 박막을 형성하는데 어려움이 있음을 알 수 있다. 반응물의 적정 주입구의 위치, 크기 및 유량 등의 고찰이 요구된다.

기판의 패턴위에 증착하는 형상에 대한 고찰은 박막의 성능평가를 위한 중요한 수단이 된다. 특히 대부분 사각으로 고안된 패턴의 수평 및 수직 벽면 위에 증착하는 박막은 그 두께 및 구조가 상이하게 형성되어 증착 형상에 대한 미시적인 고찰이 요구된다. 패턴위에 형성된 박막의 성능은 균일한 두께의 증착을 나타내는 등각성(conformality)에 의해 평가될 수 있으며, 특히 사각단면의 등각성은 기판에 수직인 평면을 둘러싸는 증착 층의 얇아지는 정도를 나타내는 계단 차폐도(step coverage)에 의해 기술된다. Fig. 5는 사각단면 패턴위에 증착하는 GaN 층의 시간에 따른 두께 변화를 도시한 것이다. TMG 질량분율이 작은 경우($\omega=0.0011$)에는 증착시간이 2000초 이상 경과한 후에도 사각단면의 극히 일부분만이 증착된 전체 단면의 증착과정을 관찰하기 위해서는 많은 시간 및 컴퓨터 용량이 소요된다. TMG 질량분율을 10배로 증가한 경우에는 증착시간이 1/10로 감소되나 증착 두께 및 증착형상은 유사한 경향을 나타내고 있다. 즉 증착두께는 TMG 량 및 시간과 비례하기 때문에 본 연구에서는 TMG량을 증가시켜 비교적 짧은 시간에 사각단면 전체를 둘러싸는 미세구조 분석을 수행할 수 있었다.

Fig. 6은 각종 반응로의 형상 및 종횡비(AR=높이/폭)에 대하여 시간에 따라 패턴위에 증착하는 과정을 보여주는 그림이다. Fig. 6(a)는 사각인 패턴위에 형성되고 있는 전형적인 비등각(non-conformal)증착을 나타내고 있다. 테라스 위의 증착은 시간에 비례한 등각 증착이 이루어지나, 트렌치 내부에서는 수직면 상·하 부근의 심한 증착두께 변화에 의해 비등각 증착이 되어 내부에 빈 공간(void)의 형성을 피할 수 없다. 이 공간의 형성은 반응로의 구조 변화와 무관하게(반응로(I), 반응로(II), 반응로(IV)) 1200초 이후 증착이 트렌치 외부에 지속되어 박막 내부에 빈 공간이 형성된다. 반응로(III)의 경우, 증착이 지연되어 1800초 이후에도 지속적인 증착이 트렌치 내부에서 이루어지고 있으며, 따라서 빈공간의 크기가 확대될 것으로 추측된다. Fig. 6(e)는 빈공간의 형성이 반응로 및 유동특성에 비해 사각 단면의 경사도에 의해 예민하게 변화함을 나타내고 있다. 패턴의 수직단면의 경사각 $\theta=125^\circ$ 일 때 패턴위를 따라 우

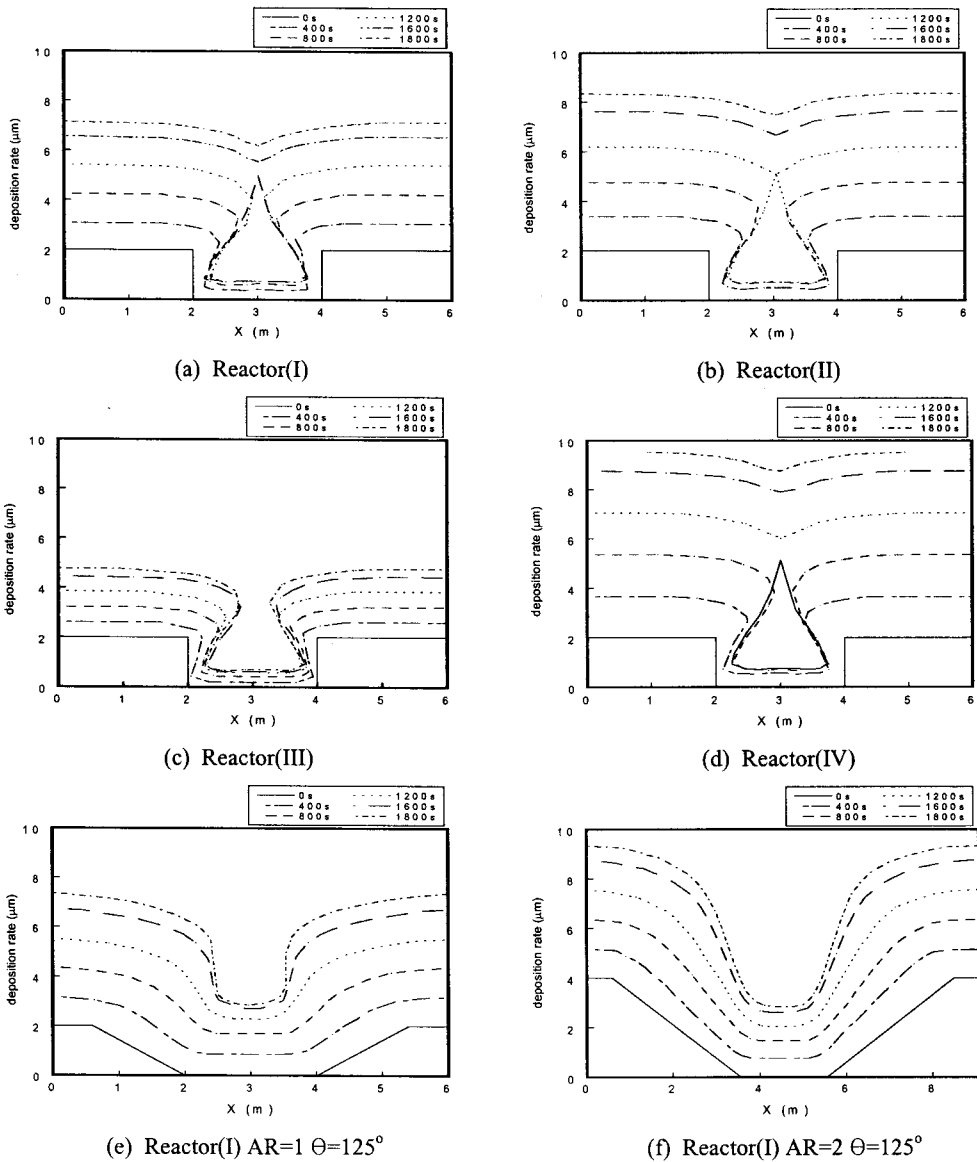


Fig. 6 Effects of reactor type and AR on the topography of patterned substrate

수한 등각 증착이 형성되고 있다. 종횡비가 클수록 수직단면 상·하 부근의 심한 증착 두께 차이의 증가에 의해 빈 공간의 크기 또한 증가한다. Fig. 6(f)는 종횡비가 증가할 경우(AR=2)에도 수직단면의 경사각에 의해 트렌치 내에 존재하는 빈 공간의 형성을 피하고 비교적 양호한 단면의 증진이 가능함을 보여주고 있다. 사각단면인 패턴위의 증착하는 박막의 등각성은 계단 차폐도에 의해 정량화 될 수 있다. 이 계

단 차폐도는 테라스 위의 박막 두께에 대한 트렌치 수직면의 얇아진 최소 박막 두께로 정의 된다. Fig. 7은 계단 차폐도에 미치는 반응로 형상, 트렌치의 종횡비 및 패턴 형상의 영향을 도시한 것이다. 일반적으로 시간에 따라 수평면의 박막 두께 증가에 비해 수직면 위의 두께 증가율이 낮기 때문에 계단 차폐도는 시간이 경과함에 따라 감소하며, 수평 및 경사진 벽면을 갖는 반응로[반응로 (I) 및 반응로(II)]에

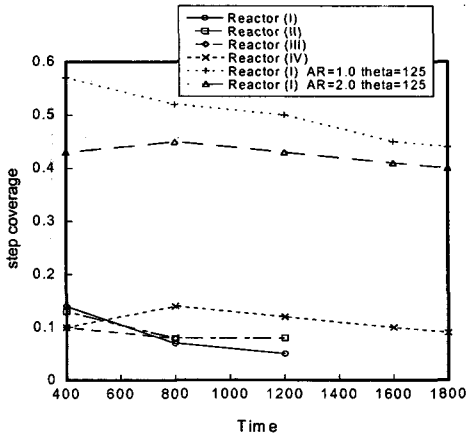


Fig. 7 The effect of reactor configuration on the step coverage

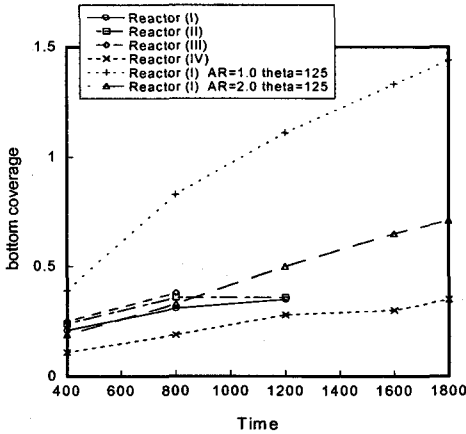


Fig. 8 The effect of reactor configuration and aspect ratio on the bottom coverage (b/h)

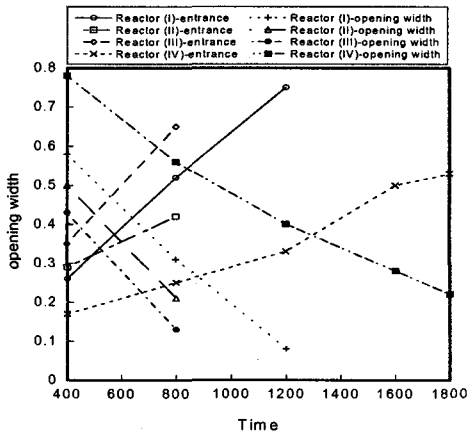


Fig. 9 The effect of reactor configuration on the reentrance & opening width

비해 반응로 (III)은 1200초 이후에는 폐쇄된 빈 공간 위에 증착이 이루어지며, 더 이상 차폐도를 정의할 수 없게 된다. 반응로(III)의 경우에는 1800초 이후에도 지속적인 차폐도의 감소가 예상된다. 벽면을 따라 증착이 균일하게 이루어 지지 못함으로서 트렌치 내부에 형성되는 빈 공간의 특성은 트렌치 바닥면에서의 증착 두께와 트렌치 높이의 비로서 정의되는 바닥면 차폐도(bottom coverage)에 의해 정량화할 수 있다. Fig. 8은 반응로 형상, 트렌치의 종횡비 및 수직면의 경사도가 바닥면 차폐율에 미치는 영향을 도시한 것이다. 차폐율은 종횡비가 클수록 사각 단면의 패턴의 내부 깊숙한 곳에 빈 공간이 형성됨을 알 수 있으며, 수직면의 경사도에 예민하게 변화하여 동일한 종횡비에 대해 $\theta=125^\circ$ 일 때 증착시간이 1000초가 되면 트렌치 내부는 완전히 박막이 그 내부를 채우게 되며, 바닥면 차폐도가 시간에 비례하여 증가함으로서 등각 증착(conformal deposition)에 가까운 증착을 나타내고 있다.

사각단면의 증착과정에서 트렌치의 바닥면 주위보다 수직면 꼭지점 주위로 많은 양의 반응물도 도달될 것이다. 따라서 최대 계단 차폐도는 수직면의 꼭지점에서 형성되며, 최소 차폐율은 바닥부근에서 형성될 것이다. 상단의 최대 박막두께 영역과 측면의 최소 두께영역의 결합은 증착이 재투입되는 형상(re-entrant shape)을 만들게 되며, 그 두께와 트렌치 폭의 비는 재투입율로 정의된다. Fig. 9는 재투입율 및 개구도에 미치는 반응로 형상의 영향을 도시한 것이다. 개구도(opening width)는 최대박막 영역간의 거리와 트렌치 폭의 비로서 정의하였다. 증착시간이 경과함에 따라 재투입길이는 증가하며, 개구도는 감소한다. 수평인 벽면의 반응로에 비해 경사진 반응로와 수직인 반응로에서 빈 공간이 형성이 조기에 완성이 되며, 반응로(III)의 경우 반응이 느리게 이루어지고 있으며 1800초 이후에도 재투입길이 및 개구도의 지속적인 변화가 나타나고 있음을 알 수 있다.

5. 결론

주기적으로 배열된 패턴위에 형성되는 GaN층의 정량적인 두께 및 형상에 대한 시뮬레이션을 수행하였으며, 그 결과는 다음과 같이 요약할 수 있다.

수평 반응로의 불균일 증착 두께는 벽면의 경사도 변화에 의해 개선될 수 있으며, 균일한 증착을 얻을 수 있었다. 입구와 반응면의 거리 증가

에 의해 증착의 불균일성은 개선되었으나 증착율의 저하가 크게 나타나며, 수직형 반응로에서는 반응면의 중심에서 최대가 되어 최적 형상에 대한 고찰이 요구된다.

벽면의 단열된 조건에 의한 해석은 하류영역의 온도상승을 야기하며, 이 온도상승에 의해 증착율의 급격한 증가에 의한 불균일한 증착이 이루어진다. 단열조건 및 복사열전달을 고려한 결과 비교적 균일한 증착을 나타내고 있으며, 등은 냉각 벽면은 균일한 증착에 우수한 조건이 되나, 증착율은 낮게 나타난다.

사각 형태의 패턴은 심한 증착두께의 차이에 의해 트렌치 내부에 공동의 형성이 불가피하나, 종횡비의 감소 및 경사진 패턴을 사용함으로써 형성을 방지할 수 있었다. 개선된 차폐도 및 트렌치내부에 형성되는 빈 공간 형성을 피할 수 있는 패턴 형상을 제시하였다.

후 기

이 논문은 전북대학교 해외 연구년제지원(2004)에 의해 연구되었음.

참고문헌

- (1) Riemann, T., Christen, J., Kaschener, A., Laades, A., Hoffmann, A., Thomsen, C., Iwaya, M., Kamiyama, S. and Akasaki, I., 2002, "Direct Observation of Ga-rich Microdomains in Crack-free AlGa_N Grown on Patterned GaN/sapphire Substrate," *Applied Physics Letters*, Vol. 80, No. 17, pp. 3093~3095.
- (2) Kyong-Jun Kim, Seong-Hwan Jang, Seong-Suk Lee, Hyeong-Gon Kang, Yoon-Bong Hahn and Cheul-Ro Lee, 2004, "Characteristic Comparison of GaN Epitaxy Grown on Patterned and Unpatterned Si(111)," *2004 Fall KPS Conference*.
- (3) Fotiadis, D.I., Kieda, S. and Jensen, K.F., 1990, "Transport Phenomena in Vertical Reactors for Metal Organic Vapor Phase Epitaxy," *J. of Crystal Growth*, Vol. 102, pp. 441~470.
- (4) Pawlowski, R., Theodoropoulos, C., Salinger, A.G. and Thrush, T.J., 2000, "Fundamental Models of the Metal Organic Vapor-phase Epitaxy of Gallium Nitride and Their Use in Reactor Design," *J. of Crystal Growth*, Vol. 221, pp. 622~628.
- (5) Safvi, S.A., Redwig, J.M., Tischler, M.A. and Kuech, T.F., 1997, "GaN Growth by Metallorganic Vapor Phase Epitaxy," *J. Electrochem. Soc.*, Vol. 144, No. 5, pp. 1789~1795.
- (6) Theodoropoulos, C., Mountziaris, T.J., Moffat, H.K. and Han, J., 2000, "Design of Gas Inlets for the Growth of Gallium Nitride by Metalorganic Vapor Phase Epitaxy," *J. of Crystal Growth*, Vol. 217, pp. 65~81.
- (7) Pai, C.S., 1996, "High Quality Voids Free Oxide Deposition," *Materials Chemistry and Physics*, Vol. 44, pp. 1~8.
- (8) Gobbert, M.K., Merchant, T.P., Borucki, L.J. and Cale, T.S., 1997, "A Multiple Simulator for Low Pressure Chemical Vapor Deposition," *J. Electrochem. Soc.*, Vol. 144, No. 11, pp. 3945~3957.
- (9) Han, H.W., 2003, "Feature Scale Modeling by Using CFD-TOPO," *CFD-ACE User conference*.
- (10) Mihopoulos, T.G., Massachusetts Institute of Technology, 1998, Ph.D. Thesis.
- (11) CFDRC, CFD-ACE User's Guide, 2003.