

SiC-CVD 공정에서 CFD 시뮬레이션의 응용

김 준 우,^{1,2} 한 윤 수,¹ 최 균,^{*1} 이 종 혼²¹한국세라믹기술원 이천분원²고려대학교 신소재공학부

APPLICATION OF CFD SIMULATION IN SiC-CVD PROCESS

J.-W. Kim,^{1,2} Y.-S. Han,¹ K. Choi^{*1} and J.H. Lee²¹Icheon Branch, Korea Institute of Ceramic Eng. & Tech.²Dept. of Ceram. Sci. & Eng., Korea Univ.

Recently, the rapid development of the semiconductor industry induces the prompt technical progress in the area of device integration and the application of large diameter wafers for the price competitiveness. As a result of the usage of large wafers in the semiconductor industry, the silicon carbide components which have layers of silicon carbide on graphite or RBSC substrates is getting widely used due to the advantages of SiC such as high hardness and strength, chemical and ionic resistant to all the environments superior than other ceramic materials. For the uniform and homogeneous deposition of silicon carbide on these huge components, it needs to know about the gas flow in the CVD reactor, not only for the delicate adjustment of the process variables but more essentially for the cost reduction for the shape change of specimens and their holders on the stage of reactor. In this research, the CFD simulation is challenged for the prediction of the inner distribution of the gas velocity. Chemical reaction simulation is used to predict the distribution of concentration of the reacting gas with the rotating velocity of the stage. With the increase of the rotating speed, more uniform distribution of the reacting gas on the surface of the stage was obtained.

Key Words : 탄화 규소(Silicon Carbide), 화학기상증착(CVD, Chemical Vapor Deposition), 전산유체역학(CFD), 화학 반응(Chemical Reaction)

1. 서 론

최근 세계 반도체 시장은 점유율 확보를 위한 치열한 경쟁이 진행되고 있으며 가격 경쟁력 확보를 위하여 반도체의 고집적화 및 웨이퍼의 대구경화가 빠르게 진행되고 있다. 대구경 반도체 제조공정은 현재 450 mm까지 제조공정 개발이 이루어져 있으며 웨이퍼가 커짐에 따라 반도체 장비에 사용되는 치구의 크기도 대형화 되고 있는 추세이다[1]. 반도체 장비에 사용되는 치구는 기존 석영 혹은 흑연 제품의 단점을 보완하기 위하여 제조공정이나 가공이 까다로움에도 불구하고

고 그 특성이 우수한 탄화규소 치구가 단일로 혹은 흑연이나 반응소결 탄화규소(RBSC, Reaction bonded Silicon Carbide) 위에 코팅되어 사용되고 있다[2]. 탄화규소 소재는 높은 경도와 강도, 내산화성으로 인하여 활용범위가 확대되고 있는 대표적인 세라믹소재이다. 특히, 산이나 염기에 대한 내식성이 뛰어나고 플라즈마와 같은 이온성 가스에 대한 저항성도 큰 소재로써 플라즈마 리액터 등 가혹 환경에서의 적용이 늘어나고 있는 추세이다[3].

화학기상증착(CVD, Chemical Vapor Deposition)을 이용한 탄화규소의 증착은 실리콘 및 탄소를 함유한 원료기체를 이용하여 기상에서 고상으로 반응이 일어나므로, 다른 소결 방법보다 비교적 저온에서 고순도의 탄화규소를 얻을 수 있다는 장점을 갖고 있다. 특히, 흑연이나 RBSC 위에 CVD를 이용하여 탄화규소를 코팅하게 되면 고순도 탄화규소의 증착이 가능하여 흑연이나 불순물로 인한 파티클의 생성을 억제할

Received: August 5, 2013, Revised: September 6, 2013,
Accepted: September 6, 2013.

* Corresponding author, E-mail: knchoi@kicet.re.kr

DOI <http://dx.doi.org/10.6112/kscfe.2013.18.3.067>

© KSCFE 2013

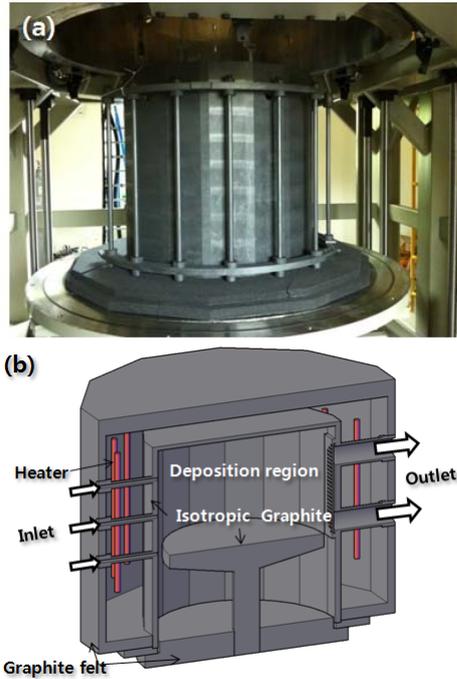


Fig. 1 SiC-CVD reactor (a) and its schematic 3-dimensional cross-section (b)

수 있다[4]. 현재, 탄화규소 증착에 사용되는 CVD 반응기로는 구경 1미터 이상의 대형 반응기를 사용하기 때문에 피증착물 위에 균일하고 치밀한 코팅 층을 형성하기 위해서는 노즐의 위치나 반응 가스의 유량 등을 정밀하게 조절하는 기술이 요구된다. 게다가 대면적의 피증착물에 증착을 하게 되는 경우에는, 두께 편차가 증가하게 되어 제품에 따라 수율이 50%에도 미치지 못하는 경우도 있다. 이런 문제점을 보완하기 위하여 Kim et al.[5]과 Choi and Kim[6]은 열역학적인 해석을 통하여 탄화 규소를 증착할 수 있는 범위를 제안하였고 탄화규소 CVD 공정에 대한 CFD (Computational Fluid Dynamics) 해석[7]이 가능함을 보여주었고 최근, Leone et al.[8]에 의하여 같은 계에서의 화학반응 CFD 해석이 제시된 바 있다.

본 연구에서는 실재하는 양산용 CVD 장치에 대한 CFD 해석을 통하여 기물을 올려놓을 지지대의 회전속도에 따른 반응기 내부의 유속 변화를 예측하고 더 나아가 서로 다른 두 가스가 이런 유속의 변화에 따라 어떻게 섞이는지를 해석하였다.

2. 실험방법

2.1 CVD 반응기

Fig. 1(a)는 실제 공정에 사용된 CVD의 사진으로 반응기의

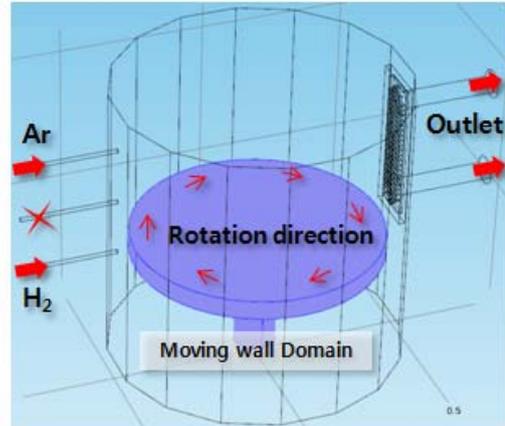


Fig. 2 Set-up of the fluid region and the moving wall during simulation

내부 증착 영역의 크기가 대략 1미터 정도 되는 양산용 CVD 장치이다. 이를 상용 CAD 프로그램을 사용하여 3차원 모델링을 하면 Fig. 1(b)와 같다. 이는 반응기의 내부를 절반으로 잘라 도시한 그림으로 외벽은 rigid carbon felt로 구성되어 있으며 반응기 내벽, 발열체와 증착 기물을 올려놓기 위한 스테이지는 등방성 탄소로 구성되어 있다. 가스 주입구는 총 3개로 구성되어 있으며 주입구를 통해 들어온 가스는 증착 영역을 지나 출구로 빠져나가는 수평 흐름 구조를 가지고 있다.

2.2 CFD 해석

CFD 프로그램으로는 상용 소프트웨어인 COMSOL multiphysics 4.3a를 사용하였으며, CFD 모듈과 화학반응 모듈을 커플링하여 열·유동 해석뿐만 아니라 화학반응에 대한 시뮬레이션을 동시에 수행하였다. 해석을 위한 워크스테이션은 DELL사의 PRECISION T7500(Intel(R) Xeon(R) CPU G2.67 GHz, RAM 192 GB)을 사용하였으며 결과 값을 얻기 위하여 stationary 해석에는 약 90분, time dependent 해석의 경우에는 210분 정도의 계산 시간을 요하였다. Fig. 2는 시뮬레이션 해석에 사용된 영역만을 도시한 것으로 Fig. 1(b)에서 유체가 채워지는 부분만을 따로 떼내어 적용한 그림이다. 대면적의 균일한 막을 형성하기 위하여 스테이지가 회전하는 구조로 되어 있으며 이를 구현하기 위하여 moving wall 조건으로 회전 속도(RPM)를 1, 3, 6, 9로 변화시키면서 그에 따른 가스의 흐름을 해석하였다.

CFD 시뮬레이션 조건으로는 반응기 내부의 온도를 1300°C, 압력은 100torr로 설정하였으며 3곳의 가스 주입구 중 상부와 하부의 주입구를 통해 각각 아르곤과 수소 가스를 0.3 m/s의 속도로 주입하는 경계 조건을 설정 하였다. 가스 주입구, 증착영역과 출구에 각각 다른 크기의 사면체(tetrahedral) 격자를 생성하였는데 특히 주입구에서의 수렴성을 개선하기

위하여 Table 1과 같이 더 조밀하게 mesh를 구성하여 약 54만개의 mesh를 생성하였다.

화학 반응 조건으로는 온도, 압력 조건은 위와 동일하고 반응기에 유입되는 아르곤과 수소의 몰분율을 1:1로 설정하였다. 다성분계의 확산에 대한 해석은 Maxwell-Stefan 확산식 (식 1)을 적용하였으며 Stationary (Steady state)와 Time dependent 모드에서 각각 계산을 진행하였다.

$$\begin{aligned} \frac{\nabla \mu_i}{RT} &= \nabla \ln a_i = \sum_{j=1}^n \frac{\chi_i \chi_j}{D_{ij}} (\vec{v}_i - \vec{v}_j) \\ &= \sum_{j=1}^n \frac{c_i c_j}{c^2 D_{ij}} \left(\frac{\vec{J}_i}{c_i} - \frac{\vec{J}_j}{c_j} \right) \end{aligned} \quad (1)$$

- ∇ : vector differential operator
- χ : Mole fraction
- μ : Chemical potential
- a : Activity
- i, j : Indexes for component i and j
- n : Number of components
- D_{ij} : Maxwell - Stefan-diffusion coefficient
- V_i : Diffusion velocity of component I
- C_i : Molar concentration of component I
- c : Total molar concentration
- J : Flux of component I

3. 결과 및 고찰

3.1 지지대의 회전 조건에 따른 유속 변화

Fig. 3은 유속의 변화를 yz 평면으로 잘라낸 그림으로 우측 하단의 그림은 지지대 바로 윗부분의 유동층을 xy 단면에서 나타낸 그림이다. 계산 결과 주입구 부근에서 가장 빠른 유속인 0.66 m/s를 나타내는 것을 확인하였으며 지지대 부근에서는 비교적 유속의 흐름이 안정되었다. 전체적인 유속의 경우 회전 속도가 빠를수록 지지대 부근의 유속 또한 빨라지는 경향을 확인할 수 있었다. 하지만 정상 상태가 되는 시간은 1 RPM일 때 360초, 3 RPM일 때 210초, 6 RPM일 때 345

Table 1 Mesh setting conditions according to the flow regions

Element size parameters	Position	Inlet & outlet regions	Inner region
Maximum element size		0.0371	0.0531
Minimum element size		0.00401	0.01
Maximum element growth rate		1.1	1.13
Resolution of curvature		0.4	0.5
Resolution of narrow regions		0.9	0.8

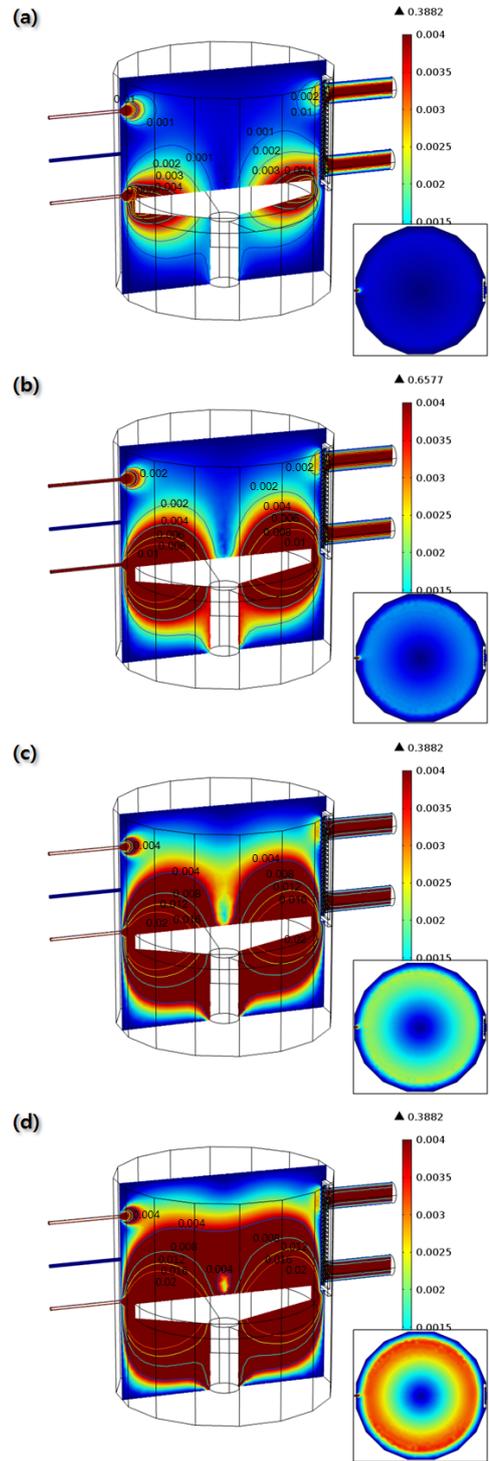


Fig. 3 Variation of flow velocity(m/s) in the CVD reactor varying rotation speed of stage. (a) 1 RPM, (b) 3 RPM, (c) 6 RPM and (d) 9 RPM

초, 9 RPM일 때 750초로 나타났으며, 3 RPM에서 가장 짧은 시간 내에 정상 상태로 유지되는 것을 확인할 수 있었다.

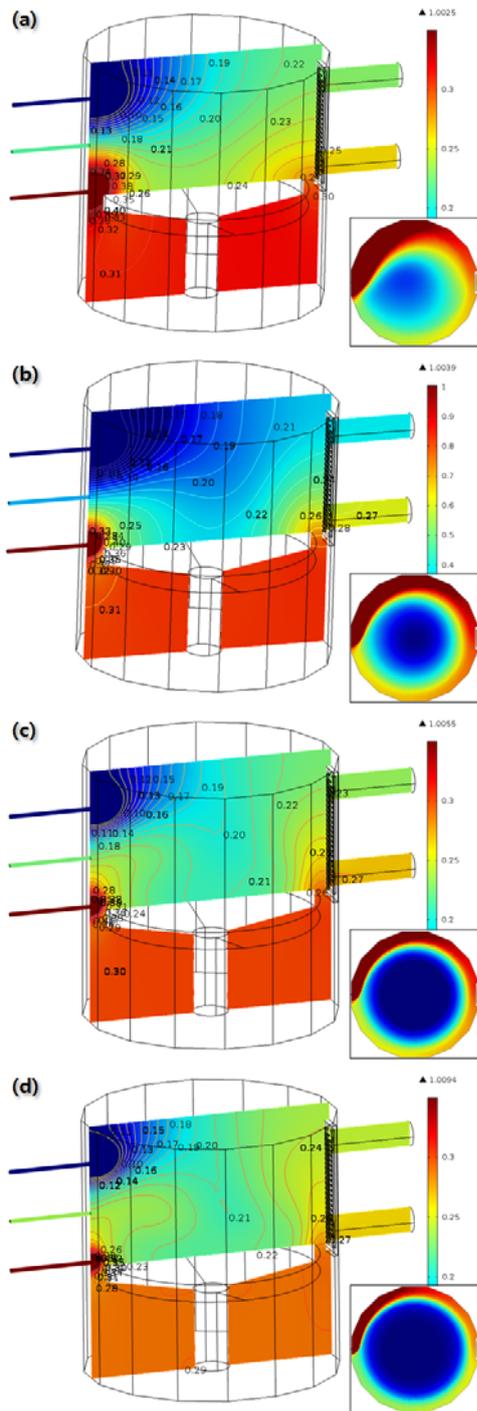


Fig. 4 Variation of molar concentration (mol/m^3) of hydrogen varying rotation speed of stage, (a) 1 RPM, (b) 3 RPM, (c) 6 RPM and (d) 9 RPM

3.2 지지대의 회전 조건에 따른 농도 변화

앞서 계산한 CFD 시뮬레이션과의 커플링을 통하여 동일한 조건에서 아르곤과 수소의 몰농도를 예측할 수 있다. 두 가스가 1:1의 몰분율로 유입될 때 지지대의 회전속도에 따라

반응기 내부의 기체가 가장 잘 혼합되는 조건을 찾기 위하여 해석을 진행하였다. 실제 공정에서 반응 가스가 유입될 때 지지대 위 샘플의 위치에 따라 가스가 서로 다른 농도를 가지게 되면 막의 두께에도 영향을 줄 뿐만 아니라, 균질한 막을 얻는 것도 어려울 것으로 예상된다. Fig. 4는 지지대의 회전 속도에 따른 반응기내 농도 변화를 yz 단면에서 나타낸 그림으로 우측 하단의 그림은 지지대 바로 윗부분을 xy 평면에서 잘라내어 지지대 위에서의 농도 값을 나타낸 그림이다. 계산 결과, 1 RPM 일 때 농도 분포를 보면 주입구 쪽에서 높게 나타나며 이로 인해 기관 전체의 농도가 균일하지 않음을 확인할 수 있다. 하지만 3 RPM의 경우 농도 분포는 지지대 중심으로부터 비교적 좁은 영역에서 균일한 농도 분포를 나타내며, 지지대의 회전속도가 빠를수록 균일한 농도분포가 나타나는 영역의 크기가 넓어지는 것을 확인할 수 있었다.

4. 결 론

본 연구에서는 탄화규소 CVD 실제 반응기의 내부에서 일어나는 유체유동을 CFD 해석을 통하여 예측하였다. 그 결과, 지지대 회전수의 변화에 따라 유속과 농도 분포가 다르게 나타나는 것을 확인할 수 있었다. 유속의 경우 회전 속도의 증가에 따라 지지대 근처에서 유속이 증가하는 것을 확인할 수 있었고, 회전속도가 3 RPM일 때 가장 빠른 시간 내에 정상 상태로 진행됨을 알 수 있었다. 반응 가스의 농도의 경우에는 회전 속도가 1 RPM일 때 주입구 주위에서 농도가 높은 것을 확인하였으며, 지지대의 회전속도가 빨라질수록 지지대 중심으로부터 비교적 균일하게 두 종류의 가스가 혼합되는 것을 확인할 수 있었다.

후 기

이 논문은 지식경제부의 WPM 사업(사업번호: 10037913)의 지원으로 이루어졌으며 이에 감사드립니다.

Note

This paper is a revised version of a paper presented at the KSCFE 2013 Spring Annual meeting, Seogwipo, Jeju, May 15-16, 2013.

References

- [1] 2012, Lee, J.H., "Analysis on Development Process of

- Semiconductor Industry and Competitiveness of Semiconductor Equipment Industry in Korea," *Thesis for Degree of Master*, Gyunggi University, Suwon, Korea.
- [2] 1997, Hallin, C., "The material quality of CVD-grown SiC using different carbon precursors," *J. Crystal Growth*, Vol.183, pp.163-174.
- [3] 1986, Kim, H.J. and Davis, R.F., "Theoretically predicted and experimentally determined effects of the Si/(Si+C) gas phase ratio on the growth and character of monocrystalline beta silicon carbide films," *J. Appl. Phys.*, Vol.60, p.2897.
- [4] 2007, Cho, K.S., Yoon, S.H., Chae, S.H., Kim, Y.W. and Park, S.H., "SiC Materials Techniques for Semiconductor Production Line," *Ceramist.*, Vol.10, pp.33-48.
- [5] 2011, Kim, J.W., Kim, H.T., Kim, K.J., Lee, J.H. and Choi, K., "Application of 3-dimensional phase-diagram using Factsage in C₃H₈-SiCl₄-H₂ system," *J. Kor. Ceram. Soc.*, Vol.48, pp.621-624.
- [6] 2012, Choi, K. and Kim, J.W., "Thermodynamic comparison of silicon carbide CVD process between CH₃SiCl₃-H₂ and C₃H₈-SiCl₄-H₂ systems," *Kor. J. Met. Mater.*, Vol.50, pp.569-573.
- [7] In press, Choi, K. and Kim, J.W., "CFD Simulation of Chemical Vapor Deposition of Silicon Carbide in CH₃SiCl₃-H₂ System," *Current Nanoscience*.
- [8] 2012, Leone, S., Kordina, O., Henry, A., Nishizawa, S., Danielsson, O. and Janzen, E., "Gas-Phase Modeling of Chlorine-Based Chemical Vapor Deposition of Silicon Carbide," *Cryst. Growth Des.*, pp.1977-1984.