

다층박막확산쌍에서의 고상반응에 의한 비정질상 및 결정상 생성에 관한 이론적 고찰
(Theoretical Consideration of Amorphization by Solid State Reaction
and Crystalline Phase Formation in Multilayer Thin Film Diffusion Couple)

연세 대학교 곽준섭, 지웅준, 백홍구

다층박막확산쌍의 열처리시, 많은 계에서 비정질이 생성되는것으로 보고되고 있다. 이러한 고상 반응에 의한 비정질상의 생성은 학문적인 측면에서, 결정상의 생성 및 그 순서에도 영향을 미치기 때문에 많은 관심이 모아지고 있고 기술적인 측면에서도, 실제 반도체 소자에의 응용 뿐만 아니라 제조된 반도체 소자의 안정성 및 재현성에도 영향을 주는 중요한 역할을 한다. 따라서 본 연구에서는 고상 반응에 의한 비정질 생성과 결정상 생성에 관한 여러 이론들을 비교하고, 이를 기초로 하여 고상 반응에 의한 비정질 생성 및 성장의 경향성 예측 및 결정상 생성을 예측하였다.

고상 비정질화 반응을 설명하는 데에는 ① “2성분계에서 ΔH_M 이 큰 음의 값을 갖고, 한 원소가 다른 원소에 비해 확산이 빨라야한다.”, ② “ ΔG_M 이 큰 음의 값을 갖고 원자 부피비가 0.5 이하이어야 한다.”, ③ “한 원소가 다른 원소보다 확산이 빠르기 위해서는, 확산해 가는 원소의 유효반경에 대한 확산이 진행되는 기지의 침입형위치 반경의 비가 커야 한다.” 등의 이론들이 있다.

고상 비정질화 반응이 보고된 자료들과 이들 이론을 비교한 결과, 기존의 이론들은 고상반응에 의한 비정질의 생성 및 성장에 대한 경향성을 만족하게 예측하지 못하였다. 이에 본 연구에서는 고상 반응에 의한 비정질상 생성의 열역학적 구동력으로 비정질상과 물리적 혼합물간의 최대 자유에너지 차(ΔG_{max})를 고려하고 속도론적 요소로서는 반경비(R_m/n)를 고려하여 이들의 곱으로 새로운 기준을 제시하고 이를 이용하여 고상반응에 의한 비정질상의 생성 및 성장 경향성을 예측하고 보고된 실험결과와 비교하였다.

또한 본 연구에서는 비정질상과 금속간화합물들의 조성에 따른 자유에너지 값을 계산하여 고상 비정질화 반응의 열역학적 구동력을 조사하고 결정상의 생성을 예측하였다. 비정질상은 과냉된 액상이라고 가정하여 자유에너지를 계산하였으며, 결정질 고상과 과냉된 액상 간의 열용량의 차이는 온도에 따라 각기 다른 값을 적용하였다. 이 방법은 열용량의 차이를 무시하고 계산하는 경우에 비해 보다 정확한 방법이며, 특히 Si/W계의 경우 그 두 값은 현저한 차이를 보이는 것으로 나타났다.

참고 문헌

- 1) R. B. Schwartz and W. L. Johnson, Phys. Rev. Lett. 51(5), 415 (1983)
- 2) S. F. Gong and H. T. G. Hentzell, J. Appl. Phys. 68(9), 4542 (1990)