

반응기판의 회전 속도에 따른 CVD 반응기 내의 유동 특성과 증착률에 관한 수치적 연구  
(A Numerical Study on the Flow Characteristics in the CVD Reactor with Rotating Disk)

백재상<sup>1</sup>, 부진효<sup>2</sup>, 한전건<sup>2</sup>, 김윤제<sup>1,2\*</sup>  
(1) 성균관대학교, 기계공학부  
(2) 성균관대 플라즈마응용표면기술연구센터

초 록 : 화학 기상 증착법 (Chemical Vapor Deposition)은 기체 원료의 화학반응을 이용하여 박막, 미립자, nano-tube 등 고체 재료를 합성하는 증착 방법이며, 현재 산업적으로 확산되어 반도체 공정과 같은 박막제조에 이용되고 있다. 박막제조에 있어서 중요한 관심사인 기판의 증착률은 기판의 회전 속도에 의하여 영향 받을 수 있다. 따라서 본 연구에서는 최적의 회전 속도를 찾아내기 위해 박막특성에 직접적으로 연관이 있는 CVD 반응기 내의 유동특성을 유한체적법 (Finite volume method)과 SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equation) 알고리즘을 사용하여 수치모사 하였고 기판에서 화학 반응을 계산하기 위해 Arrhenius 모델을 사용하였다.

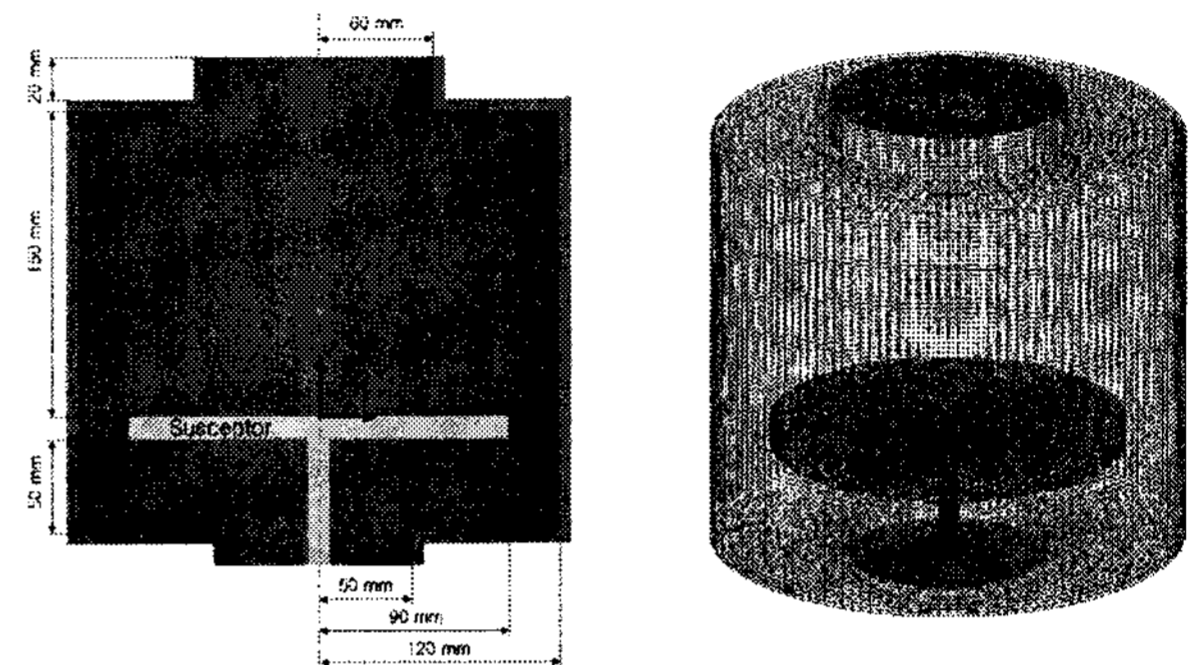


그림 1. CVD 반응기 개략도 및 격자계

1. 서 론

박막형성 기술의 대표적 방법으로는 CVD, PVD법이 있으며 CVD법에 의한 박막 형성은 PVD법에 비하여 고속입자의 영향이 작기 때문에 기판 표면의 손상이 작은 장점이 있고, 많은 기술 선진국에서 기술 개발을 서두르고 있는 분야이기도 하다. CVD 공정은 그 적용대상이 다양하다는 특징이 있으며 세라믹, 금속, 반도체, 유기 고분자 등 다양한 물질의 합성이 가능하고, 공정을 통하여 박막, 섬유, 분체, 복합재 등 다양한 재료를 얻을 수 있다.

최근 CVD 반응기에 대한 수치 해석적 연구가 많이 이루어지고 있다. Kusumoto 등<sup>[1]</sup>은 MOD-153 반응기 내 지름 4" (10 cm) 회전기판을 모델로 하여 유량과 압력 변화가 반응기 내부의 유동 특성에 미치는 영향을 연구하였다. Evans와 grief<sup>[2]</sup>는 수직, 수평 원통형 반응기에서 상사 해법을 이용하여 반응 기체의 온도와 속도 특성을 무차원수로 표현하였으며 약한 부력 효과에서의 1차원 유사해가 2차원 계산 결과와 유사하다는 결론을 내렸다. 반응기의 형상을 고려한 열 및 유체역학적 해석이 Jensen 등<sup>[3]</sup>에 의해 수행되었으며, 최근에는 물질전달 및 화학반응을 고려한 실제 CVD 공정과 가깝게 수치해석을 수행하는 연구가 많이 진행되고 있다.

본 연구에서는 반응기판의 회전 속도에 따른 CVD 내부의 유동특성 및 증착율을 고찰하며, 이를 통하여 박막 형성에 적합한 조건을 찾는 데 목적이 있다.

2. 해석 방법

2.1 지배방정식

반응기 내 유동 특성을 고찰하기 위해 다음과 같은 일반적인 질량, 운동량, 에너지 보존방정식을 적용하였다.

연속 방정식:

$$\nabla \cdot \rho \vec{u} = 0 \quad (1)$$

운동량 방정식:

$$\nabla \cdot \rho \vec{u} \vec{u} = -\nabla p + \nabla \cdot \vec{\tau} + \rho \vec{g} \quad (2)$$

에너지 방정식:

$$C_p \nabla \cdot \rho \vec{u} h = \nabla \cdot (k \nabla T) + \vec{u} \nabla P \quad (3)$$

화학종 (chemical species)에 대한 보존 방정식은 *i*번째 화학종에 대한 대류-확산식의 해를 통하여 국소 질량분율 (local mass fraction)을 예측할 수 있는 식을 적용하였다.

$$\nabla \cdot (\rho \vec{u} Y_i) = -\nabla \cdot \vec{J}_i + R_i \quad (4)$$

여기서  $\vec{J}_i$ 는 *i*번째 화학종의 농도 기울기에 의한 확산 플럭스이며 다음 식으로 나타낸다.

$$\vec{J}_i = -\rho D_{i,m} \nabla Y_i \quad (5)$$

위 식에서  $D_{i,m}$ 은 화합물에서 화학종 *i*의 확산계수이다.  $R_i$ 는 생성되거나 소멸되는 화학종의 반응율이며, 다음과 같은 Arrhenius 모델 계산식을 적용하였다.

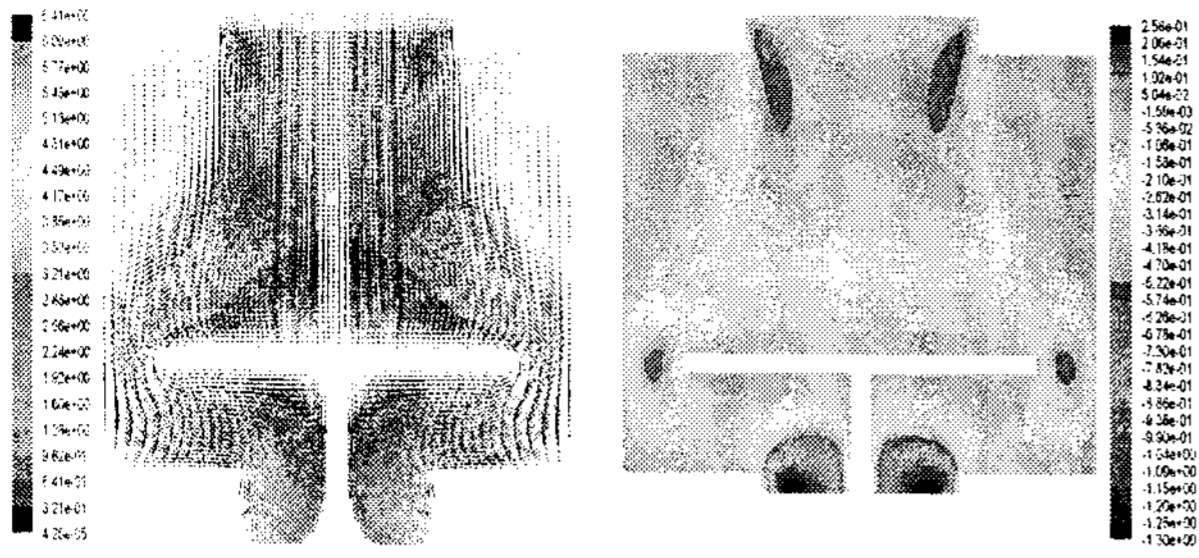
$$R_i = A \exp(-E/RT) \quad (6)$$

여기서 A는 반응에 참여하는 화학종의 빈도인자, E는 반응 활성화 에너지이다.

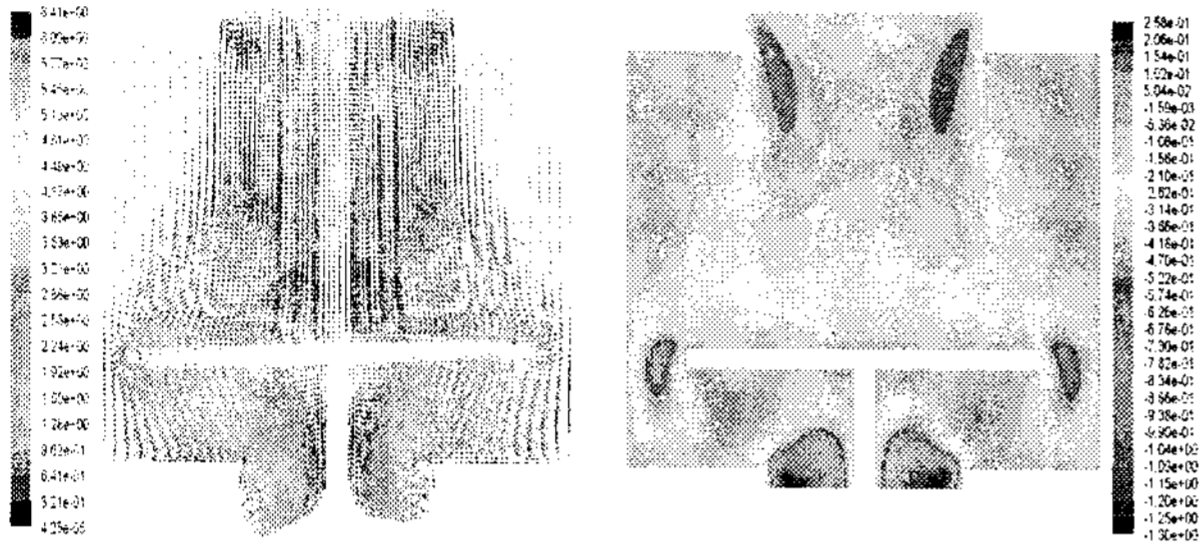
2.2 해석 모델 및 격자계

본 연구에서 채택한 계산모델의 기하학적인 형상은 반응면에 수직으로 원료가스가 주입되는 원통형 반응로를 사용하였다. CVD 반응기 구성은 그림 1에 도시하였듯이 반경 120 mm인 원통형 CVD 챔버 내에 반경 90mm인 회전기판로 구성되어있고 입구 노즐과 반응면의 높이는 150mm이다. 또한 CVD 내부의 유동 특성 및 증착율을 고찰하기 위한 격자계는 원통형 형상에 맞는 약 700,000개의 정렬격자를 사용하여 3차원 격자계를 구성하였고, 기판 증착에

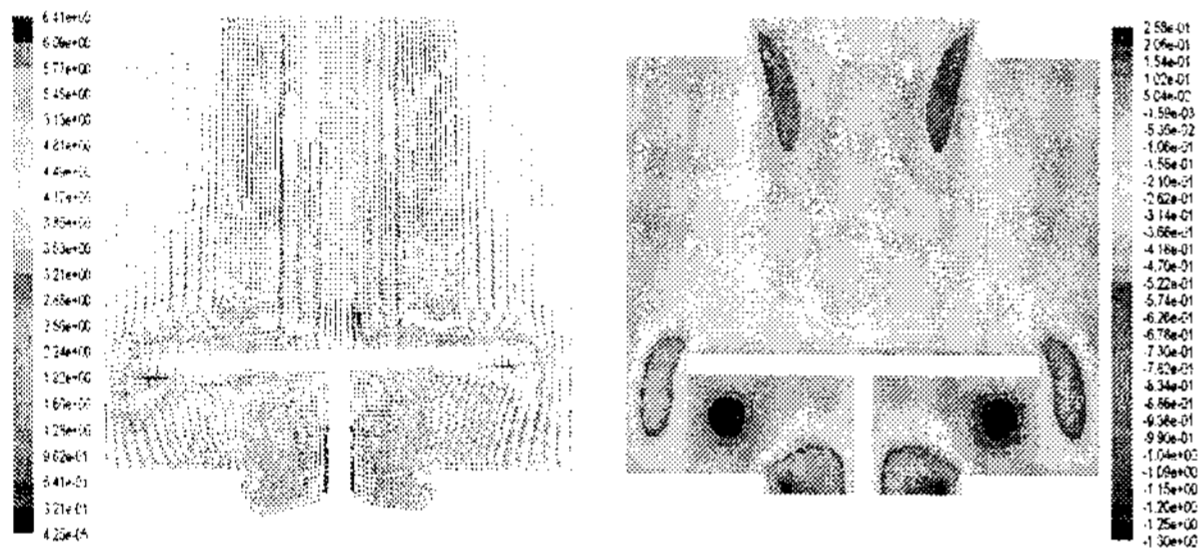
영향을 주는 기판 위 공간에 오차를 줄이기 위해 조밀한 격자계를 구성하였다.



(a)  $\Omega=0$  rad/s



(b)  $\Omega=40$  rad/s



(c)  $\Omega=80$  rad/s

그림 2. 기판의 회전 속도에 따른 CVD 반응기 내부의 속도 벡터와 z방향의 속도 분포

### 2.3 수치해석 방법 및 경계조건

CVD 반응기 내에서 유동 특성과 화학반응을 고찰하기 위해서 상용코드 프로그램인 FLUENT를 사용하여 수치해석을 수행하였다. 고온 반응면을 통한 열전달과 원료 가스의 유동은 정상상태, 층류 유동으로 가정하여 일반적인 질량, 운동량, 에너지 보존 방정식을 적용하였으며, 화학종의 조건은 표면과 수직방향으로의 질량분율 변화율이 0인 조건을 사용하여 표면에 도달된 질량분율에 의해 증착율을 계산하였다. 또한 매질이 복사에 관여하지 않는 물질이고, 반응면의 온도가 일정하기 때문에, 복사 영향은 고려하지 않았다.

CVD 반응기 내의 원료 가스인  $\text{GaCH}_3$ 와  $\text{AsH}_3$ 을 사용한 GaAs 부착을 고찰하였으며, 원료 가스를 수송하는 기체로는 1기압의 수소 가스를 사용하였다. 입구를 통해 유입되는  $\text{GaCH}_3$ 와  $\text{AsH}_3$ 의 질량분율은 0.15와 0.4, 이때 수송 가스의 속도는 0.36m/s로 고정하였고, 기판의 회전 속도를 0, 40, 80 rad/s로 변화시켜 CVD내부의 유동장과 증착율에 대한 결과를 고찰하였다.

경계면에 대한 조건은 반응이 일어나는 반응기판의 온도를 1023K의 등온 조건을 사용하였으며 반응기판을 제외한 모든 벽의 온도는 300K로 설정하였다. 또한 회전기판의 특성을 해석하기 위해 MRF (Moving Reference Frame) 기법<sup>[4]</sup>을 사용하였고, 수렴도는 오차 범위  $10^{-4}$ 이하에서 결정되었으며 계산 수 약 3000 iterations 범위에서 수렴하였다.

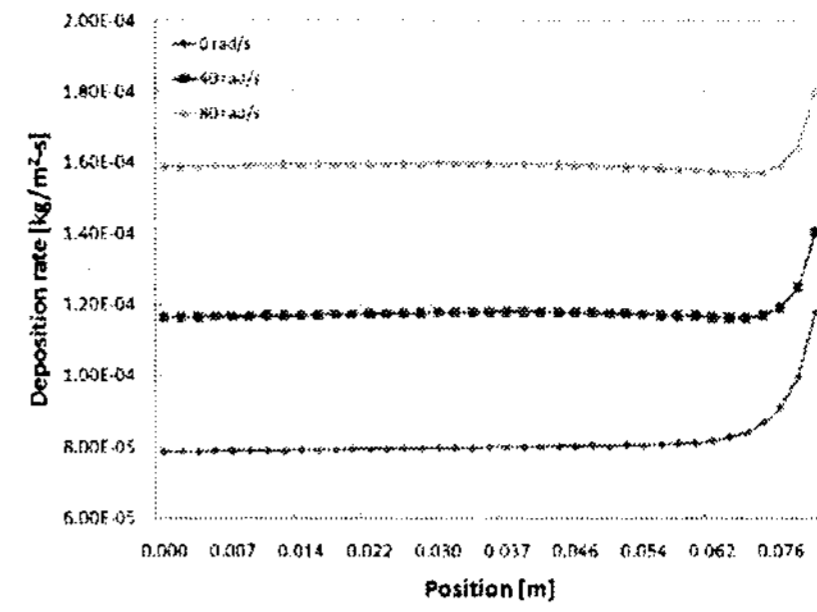


그림 3. 기판의 회전 속도에 따른 증착률

### 3. 결 론

반응 기판의 회전 속도는 박막의 증착률 및 균일도에 중요한 영향을 미치는 파라미터이다. 따라서 본 연구에서는 반응 기판의 회전속도에 따른 CVD 반응기 내부의 유동 특성 및 증착률을 고찰하였다. 그림 2는 기판 온도가 1023K일 때의 속도 벡터 및 z방향의 속도 분포를 나타낸다. 그림 2에 나타난 기판 회전 속도가 0일 때 기판위의 속도 벡터를 보면 높은 기판의 온도에 의하여 기판위에서 부력 효과가 유발됨을 알 수 있다. 즉, 부력효과는 기판위에 순환 영역을 발생시켜 입구로부터 유입되는 원료 가스인  $\text{GaCH}_3$ 와  $\text{AsH}_3$ 를 화학 반응이 일어나는 기판 표면에 도달하는 것을 방해하고 대부분의 가스는 속도 벡터로 도시 하였듯이 출구로 바로 빠져 나간다. 또한 반응 표면에서 화학반응을 일으키지 못한 유입 원료 가스는 기판 표면 위에서 화학반응을 일으켜 생성물이 석출하고 기판 표면으로 떨어져 증착 품질에 심각한 영향을 끼친다. 따라서 반응 기판위의 부력 효과를 억제하고 순환 영역을 최소화하기 위한 방법으로 회전 기판을 적용하게 되었다. 기판의 회전 효과는 반응이 일어나는 기판 표면에서 반경방향으로 빠른 유동을 발생시키며 그 결과 반응 표면에서의 압력이 감소한다. 이러한 압력 감소는 원료 가스를 반응 표면에 직접적으로 도달하게 만드는 유동을 발생시켜 증착률을 향상 시킨다. 그림 2의 z방향 속도 분포를 보면 기판위에서 원료가스의 유입 방향과 반대 방향인  $5 \times 10^{-2}$  m/s인 속도층이 나타난다. 이 속도층은 부력효과에 의한 순환 영역이며 기판의 회전 속도가 증가 할수록 그 영역이 현저히 사라짐을 볼 수 있다. 그림 3은 기판의 속도에 따른 증착률을 나타낸 그래프이고 회전 속도가 40 rad/s 증가할 때 마다 증착률이 약  $0.4 \times 10^{-4}$  kg/m<sup>2</sup>·s 만큼 증가함을 정량적으로 알 수 있다.

### 감 사 의 글

본 연구는 과학기술부 및 한국과학재단 지정 우수공학연구센터인 성균관대학교 플라즈마용 표면기술연구센터 (센터번호 : R11-2000-086-0000-0)와 2007년도 2단계 두뇌한국 (BK21) 사업의 지원으로 수행되었으며, 이에 감사드립니다.

### 참 고 문 헌

- [1] Kusumoto, y., Hayashi, t. and Komiya, S., 1985, "Numerical Analysis of the Transport Phenomena in MOCVD Process," Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 24, NO. 5, pp. 620~625.
- [2] Evans, G. and Grief, R., 1987, "A Numerical Model of the Flow and Heat Transfer in a Rotating Disk Chemical Vapor Deposition Reactor," ASME Journal of Heat Transfer, Vol. 12, pp. 928~935.
- [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] Fluent Inc., 1998, Fluent User Guide(V.5).