반도체디스플레이기술학회지 제15권 제1호(2016년 3월)
Journal of the Semiconductor & Display Technology, Vol. 15, No. 1. March 2016.

Si 선택적 성장을 위한 대형 CVD 반응기 내의 열 및 유동해석

장연호* · 고동국** · 임익태**†
*전북대학교 대학원 기계설계공학과, **†전북대학교 기계설계공학부

Analysis on the Flow and Heat Transfer in a Large Scale CVD Reactor for Si Epitaxial Growth

Yeon-Ho Jang*, Dong Guk Ko and Ik-Tae Im**†**

*Dept. of Mechanical Design Eng., Graduate School, Chonbuk National University
**†Dept. of Mechanical Design Eng., Chonbuk National University

ABSTRACT

In this study, gas flow and temperature distribution in the multi-wafer planetary CVD reactor for the Si epitaxial growth were analyzed. Although the structure of the reactor was simplified as the first step of the study, the three-dimensional analysis was performed taking all these considerations of the revolution of the susceptor and the rotation of satellites into account. From the analyses, a reasonable velocity field and temperature field were obtained. However, it was found that analyses including the upper structure of the reactor were required in order to obtain more realistic temperature results. DCS mole fraction above the satellite surface and the susceptor surface without satellite was compared in order to check the gas species mixing. We found that satellite rotation helped gases to mix in the reactor.

Key Words : CVD (Chemical vapor deposition), SEG (Selective Epitaxial Growth), Si epitaxial, Planetary reactor, Multiple wafers, DCS (Dichlorosilane), Revolution, Rotation

1. 서 론

Si MOSFET 공정은 1960년 벨 연구소의 강대원, Martin Atalla에 의해 발명된 이후 지금은 매우 폭넓게 쓰이고 있다. 반도체 소자의 크기는 점차 작아지고 있는데 그 이유는 날이 갈수록 증가하는 메모리 용량의 필요성 때문이다. 크기를 키울 수 없는 반도체의 특성상 집적도를 높여 용량을 증가시키는 방법을 주로 사용하는데 이로 인해 반도체의 크기는 작아져 나노 사이즈 크기의 반도체를 개발하기에 이르렀다. 현재 나노 사이즈 크기 트랜지스터의 경향을 보면 20 nm의 트랜지스터는 이미 개발되어 생산되고 있다. 한편 게이트 길이가 계속 줄어들면서 소자의 성능이 저하되는 현상이 발견되었다. 이 현상을 단채널 효과(Short size effect)라고 한다. 이 문제의 해결방법으로서 소스와 드레인 부분에 선택적 성장(Selective Epitaxial Growth)을 이용하는 방법이 사용되고 있다. 이에 따라 Si, SiGe의 Epitaxy는 10 nm 이하 사이즈의 트랜지스터에서 중요한 기술로 연구되고 있다[1-2].

반도체는 역사적으로 생산비용을 낮추기 위해 대량생산을 통해 단가를 낮추는 방법이 이용되어 왔다. 대량 생산을 위해서는 양품의 수율을 높이는 것이 필수적인데 이는 많은 기술자들의 목표였다. 기술의 복잡성 때문에 SEG반도체 제작 장비는 수치해석을 통한 접근이 필수적이다. CVD 반응기에 대한 수치해석적 연구는 SEG기술을 접목하기 이전부터 진행되어 왔는데, 1989년 Visser 등은 MOCVD 반응기의 수평형 채널에 대한 수치해석을 통해 가열된 단일 웨이퍼(Wafer) 위를 지나는 유동을 분석하였으며[3], Ouazzani와 Rosenberger는 1990년 수치해석 연구를 통해 웨이퍼 반경 변화에 따른 GaAs의 성장률을 분석하였다[4]. 이후SEG

†E-mail : itim@jbnu.ac.kr

기술이 대두되면서 SEG장비에 대한 수치해석적 연구도 진행되었다. Ni 등은 TCS (trichlorosilane) 전구체를 이용하여 단일 웨이퍼를 가진 Simens CVD 반응기 내에서의 Si 선택적 성장을 수치해석적으로 연구하였다[5]. 최근에는 장비의 발달에 맞춰 다수의 웨이퍼를 가진 planetary 반응기에 대한 수치해석 연구도 진행되고 있다[6]. 또 Martin 등은 수치해석 연구를 통하여 다수의 웨이퍼를 가진 planetary CVD 반응기에서의 입구 구조 변경에 따른3족 원소의 성장률을 분석하기도 하였다[7].

Fig. 1은 전형적인 planetary CVD 반응기로 반응이 일어나는 내부 부분을 3D CAD로 묘사한 모습이다. 중앙에 위치한 것은 인젝터로 반응가스(DCS, HCl)와 수송가스(H_2)를 공급한다. 인젝터는 상중하로 나누어져 있으며 이 세 곳의 입구에서 가스를 공급한다. 주위를 둘러싸고 있는 다섯 개의 원은 웨이퍼가 놓이는 새틀라이트(Satellite)로 불리는 부분이다. 이들 모두를 받치고 있는 바닥은 서셉터(Susceptor)로 인덕션 코일에 의해 높은 온도로 유지된다. 웨이퍼는 새틀라이트 위에 위치해있다. 인젝터를 통해 들어온 가스는 높은 온도로 유지되 는 반응기 안에서 기체상반응(Gas phase reaction)과 표면반응(Surface reaction)을 일으키고 이 반응을 통하여 웨이퍼 표면 위에 결정이 성장하게 된다.

이후 공급된 가스는 서셉터 바깥쪽 배플(Baffle)에 뚫려있는 통로를 통해 반응기를 빠져나간다. 반응기의 천장은 표면 반응에 의한 결정성장을 방지하기 위해 천장 위를 흐르는 퍼지용 가스에 의해 냉각된다. 반응기에서의 실제 유동을 보면 중앙에서 공급된 가스가 방사형으로 퍼져 출구로 빠져나가는 흐름을 보인다. 반응기 안은 매우 낮은 기압으로 유지되는데 이는 가스가 분자들의 충돌에 의해 발생되는 기체상반응을 억제하고 웨이퍼 위에 고루 퍼지게 하기 위한 것이다. 동일한 운전 조건의 웨이퍼라고 하더라도 1°C의 온도 차이에도 선택 필름의 두께와 균일도에 영향을 끼칠 수 있다. 중앙에서 나오는 가스는 반응기 내부보다 훨씬 차가운 온도이므로 웨이퍼는 중앙에 가까울수록 온도가 낮아지는 온도구배를 갖는다. 이러한 문제를 해결하기 위해 서셉터와 새틀라이트는 각각 반시계방향, 시계방향으로 회전하게 된다. 새틀라이트 밑에서 토출되는 가스에 의해 이 회전이 이루어지게 되는데 가스 공급 조절을 통해 회전 속도가 결정되게 된다. 실제 공정과정에서 이 회전 속도를 얼마로 하느냐에 따라 웨이퍼 표면의 온도분포가 결정되므로 회전 속도에 따른 온도분포를 예측하는 것이 중요하다고 할 수 있다. 이번 연구에서는 초기 연구임을 감안해 화학반응을 제외하고 가스 혼합만을 고려하여 다수의 새틀라이트를 가진 planetary 반응기 안에서 일어나는 열 및 물질 전달 현상을 수치해석하였다. 이를 통해 반응기 안에서의 유동흐름과 서셉터와 새틀라이트의 회전이 유동장 또는 온도장에 끼치는 영향을 알아보고자 하였다.

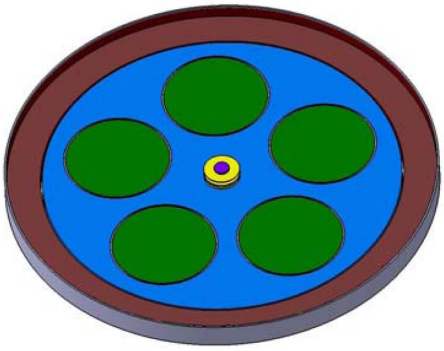


Fig. 1. Susceptor part with satellites of a multi-wafer CVD reactor.

2. 수치해석

2.1. 모델링

본 연구에서는 Fig. 1과 같이 수치해석 영역을 반응기안의 유동장으로 한정하였다. CVD 반응기 바깥에서 열을 공급하는 코일은 경계조건으로 묘사하였다. 이번 연구는 유체 흐름과 서셉터, 새틀라이트 회전이 유동장에 끼치는 영향을 파악하기 위한 것으로 이 코일을 해석영역에 포함하게 되면 모델의 크기가 커지므로 계산속도를 저해하여 처음 목적을 벗어날 수 있기 때문에 배제하였다.

먼저 수치해석 영역을 생성하기 위해 3D CAD 프로그램인 CATIA를 이용하여 실제 크기와 같은 1:1 실물크기로 반응기를 모델링하였다. 그리고 Boolean operation을 통해 볼륨 부분만을 도메인으로 생성하고 이를 상용 수치해석 프로그램인 CFD-ACE+로 전달하여 3D 격자를 생성하였다. 격자는 정렬격자로 CFD-VISCART를 이용하여 생성하였다. 약 450,000개의 성긴 격자를 생성하여 초기 유동장을 해석하였으며 이후 최종적으로 약 2,213,000개의 격자를 갖는 격자계로 수치해석을 진행하였다. 최종모델에서는 입구 부분과 서셉터와 새틀라이트가 있는 바닥 등 벽 부근에 더 조밀하게 격자를 넣어 그 곳에서의 현상을 자세히 보고자 하였다. Fig. 2는 반응기를 수직으로 자른 단면 형상이다. 아래면 경계에 책상 다리처럼 튀어나온 부분은

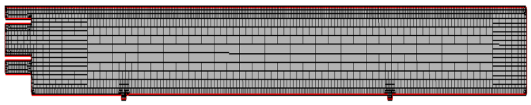


Fig. 2. Cross sectional view of the grid systems.

서셉터와 새틀라이트의 사이 틈새이며 이 두 다리 사이에 새틀라이트가 위치해 있다.

2.2. 가정 및 경계조건

수치해석에서 쓰인 가정은 다음과 같다. Re수 계산 결과 입구측에서 약 400으로 비교적 작기 때문에 반응기 내부 유동을 정상상태, 층류 유동장으로 간주하였다. 반응기 안의 천장 면은 대류 열전달 조건에 의해 냉각된다고 가정하였다. 별도의 수치해석을 통해 반응기 천장 위를 냉각을 위한 수소 가스가 지나갈 때 천장 벽의 평균 열전달계수값을 구하였으며 이 값을 경계조건에서 사용하였다. 반응기의 옆면은 단열되어 열출입이 없다고 가정하였다. 서셉터와 새틀라이트 그리고 배플의 온도는 코일에 의해 정해진 온도로 일정하게 유지된다고 가정하였다. 모든 벽은 그라파이트(Graphite)로 이루어졌다고 가정하였다. 바닥면의 온도가 고온인 만큼 벽면 사이의 복사열전달을 고려하였으며 이 때 방사율과 흡수율이 같다고 가정하였다. 서셉터는 반시계방향으로, 새틀라이트는 시계방향으로 각각 주어진 속도로 일정하게 회전한다고 간주하였다.

시뮬레이션 상에서 회전을 묘사하기 위해 Rotating wall 경계조건을 주었으며 서셉터의 공전은 MRF (Multiple Reference Frame) 기법을 이용하여 바닥면 위에 작은 두께의 유동층을 설정하고 운동량 생성항을 주어 회전을 묘사하였다. 별도의 해석을 통해 MRF기법에 쓰이는 유동층 두께의 크기가 격자 크기와 비교하여 일정 조건을 만족할 경우 두께 변화에 따른 결과의 차이는 없는 것을 확인했다. 입구를 통해 들어오는 반응가스와 수송가스는 충분하게 섞여 토출면의 수직방향으로 나간다고 가정하였다. 상부와 하부 입구에서는 HCl이 수송가스와 함께 배출되며 중간 입구에서는 DCS가 수송가스와 함께 배출된다. 반응가스와 수송가스의 토출 온도는 대기온도로 간주하였다. 반응기 안은 1,333 Pa의 낮은 압력으로 유지되며 중력가속도의 영향을 받도록 하였다.

2.3. 해석

해석을 위한 지배방정식으로서 연속방정식, 운동량 방정식, 열과 에너지 및 화학종 보존 방정식이 사용되었다. 반응기 안의 혼합가스의 밀도는 이상기체 상태방정식을 따른다고 가정하였으며 점성은 기체분자운동론(Kinetic theory)에 의해 계산하였다. 그 외의 열적 물성치인 비열과 열전도율은 Mix JANAF method와 Mix kinetic theory를 사용하여 각각 결정하였다. 화학종의 확산은 Multi component diffusion으로 계산하였고 보존방정식을 계산하기 위하여 Stefan Maxwell equation을 이용하였으며 열확산 항을 포함하였다. 복사 열전달 해석은 DOM(Discrete Ordinate Method)을 이용하였다.

3. 결과 및 고찰

3.1. 반응기 내의 속도 분포

수치해석 결과 Fig. 3에서 볼 수 있듯이 반응기 안의 속도장은 입구와 출구부분에서 높은 속도를 보이며 입구 부근을 지난 이후에는 비교적 낮은 속도로 출구까지 유지되는 것을 볼 수 있다. 3차원적 유동 흐름을 확인하기 위해 Fig. 4에 나타낸 DCS의 경로를 보면 인젝터에서 분사된 가스가 방사형으로 퍼지면서 그대로 출구로 빠져나가는

흐름을 볼 수 있다. 이러한 흐름은 DCS 뿐만 아니라 다른 가스들에 대해서도 동일하며 입구 높이에 따른 약간의 차이를 확인할 수 있었다.

새틀라이트 회전이 속도장에 미치는 영향을 확인하기 위해 Fig. 5의 새틀라이트가 있는Section-A와 새틀라이트가 없는Section-B에서의 속도 분포를 나타내어 보았다. Fig. 6에 Section-A와 Section-B 에서의 속도 분포 그래프를 나타내었다. 중앙 높이에서는 새틀라이트가 있는 부분과 없는 부분 모두 거의 비슷한 속도 분

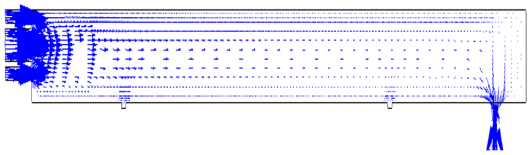


Fig. 3. Volocity vectors at the cross section of the reactor.

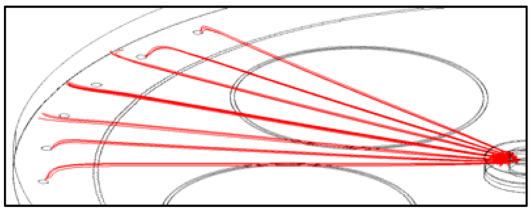


Fig. 4. Pathlines from the middle inlet where DCS diluted by hydrogen gas was introducing.

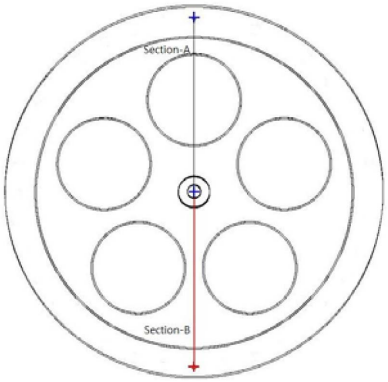


Fig. 5. Two cross sections in order to check flow field.

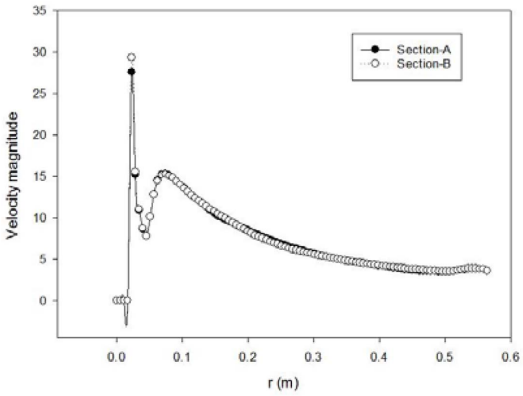


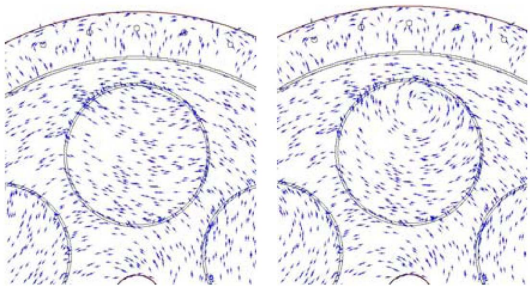
Fig. 6. Velocity magnitude along the two lines shown in Fig. 5 at the middle height of the reactor.

포를 가짐을 알 수 있다. 따라서 일정 높이를 지나면 새틀라이트의 회전이 유동장에 미치는 영향이 없음을 알 수 있다.

3.2. 회전 속도의 변화에 따른 표면에서의 유동 변화

새틀라이트 회전에 의해 바닥에서부터 가까울수록 속도장이 회전의 영향을 받는다는 것을 생각할 수 있다. Fig. 7에 웨이퍼 바로 위에서의 속도 벡터를 나타내었다. Fig. 7(a)는 정상 속도일 때 0.1 mm 높이에서의 속도 벡터를 나타낸 것이다. 유동 형태의 파악을 위해 벡터의 크기를 모두 동일하게 고정시켰다. Fig. 7(b)는 새틀라이트의 회전 속도를 두 배로 증가시켰을 때의 속도 벡터를 나타낸 그림이다. 이를 통해 바닥면의 서셉터, 새틀라이트 두 회전이 동시에 유동장 영향을 끼치는 것을 알 수 있다.

이러한 영향은 3 mm 높이까지 지속됨을 확인하였다. 또한 새틀라이트 속도가 증가함에 따라 소용돌이



(a) (b)

Fig. 7. Velocity vectors in the reactor at Z = 0.1 mm, (a) standard speed, (b) increased rotation speed.

모양의 와류도 발생함을 알 수 있다.

3.3. 온도분포

Fig. 8을 통해 반응기 단면에서의 온도분포를 확인할 수 있다. 바닥면의 열에 의해 반응기는 등온층을 형성하는데 입구에서 나오는 차가운 가스들에 의해 급격히 식혀지는 것을 볼 수 있다. 또한 바닥면 근처에서는 열경계층의 두께가 거의 동일한 것을 볼 수 있다. 이러한 두께의 경계층은 균일한 두께의 필름 성장에 매우 유리한 조건이지만 실제 반응기에서도 이와 같은 균일한 경계층이 형성된다고 단정할 수는 없다. 여기서는 천장면에 균일한 값의 대류열전달계수를 사용하였기 때문이다. 실제 천장에서의 대류열전달계수는 균일하지 않을 않을 것으로 예측된다. 바닥면에 대해서는 일정한 온도를 부여하였으므로 회전에 따른 바닥의 온도 변화는 없는 것으로 나타났다.

3.3. 회전에 따른 DCS 몰분율

Fig. 9는 Fig. 5에 나타낸 Section-A와 Section-B에서 새틀라이트 표면 위치에서의 DCS 몰분율을 나타낸 그래프이다. DCS는 전구체 반응가스로 DCS몰분율이 높

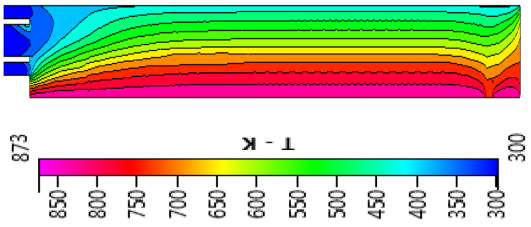


Fig. 8. Temperature distribution at the cross section of the reactor.

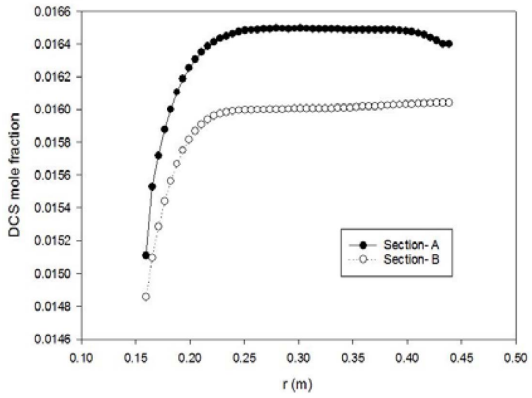


Fig. 9. DCS mole fractions along the two lines A and B on the surface.

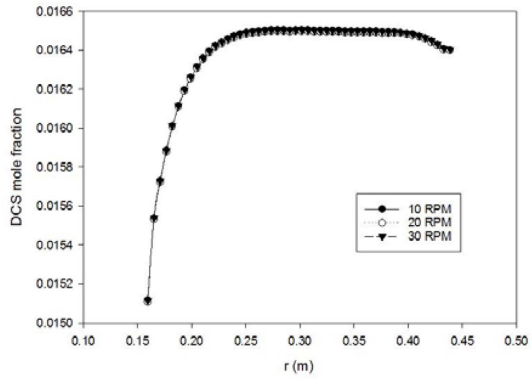


Fig. 10. DCS mole fractions on the surface along the two lines A and B for the different satellite rotation speed.

을수록 성장률이 높다고 볼 수 있다. 그림과 같이 새틀라이트의 회전이 혼합을 촉진하여 DCS분율이 새틀라이트 위치에서 높게 나옴을 알 수 있다. Fig. 10에 나타낸 것과 같이 새틀라이트의 회전 속도 변화에 따른 DCS몰분율의 차이는 나타나지 않았다. 이것은 반응기 내부의 유동장이 회전 속도에 큰 영향을 받지 않기 때문에 가스의 농도도 영향을 받지 않는 것으로 생각된다.

4. 결 론

본 연구에서는 다수의 웨이퍼 위치 즉 새틀라이트를 가진 planetary반응기 안에서 일어나는 열 및 물질 전달 현상을 수치적으로 해석하였다. 이를 통해 반응기 안에서의 속도 분포와 회전 속도의 변화에 따른 표면에서의 유동변화를 살펴보았다. 또한 새틀라이트가 있는 부분과 없는 부분의 DCS농도의 차이를 확인하여 새틀라이트가 있는 부분이 농도가 더 높음을 확인하였다. 이를 정리하면 다음과 같다.

1. 새틀라이트의 회전은 반응기 내부 중앙 높이에서의 속도 분포에 큰 영향을 미치지 않는다. 이는 새틀라이트의 낮은 회전 속도에 기인하는 것이다. 3 mm 정도의 일정 높이를 지나면 회전이 미치는 영향이 거의 없어지는 것을 확인할 수 있었다.

2. 단순화한 경계조건과, 회전 속도에 큰 영향을 받지 않는 유동장 때문에 새틀라이트 표면 위에서의 온도 분포 및 농도 분포는 새틀라이트의 회전 속도의 변화에 거의 영향을 받지 않았다.

3. 새틀라이트 회전이 혼합을 촉진하여 새틀라이트 위치에서 DCS몰분율이 높음을 알 수 있었다. 하지만 회전 속도에 따른 몰분율의 차이는 볼 수 없었다.

감사의 글

이 연구는 산업통상자원부와 KSRC (Korea Semiconductor Research Consortium)가 공동으로 지원하는 미래소자 원천기술개발사업(과제번호10052928) 의 지원으로 수행되었습니다.

참고문헌

1. Imai, M., Miyamura, Y., Murata, D., Kanda, T., “Analytical model for epitaxial growth of SiGe from SiH_4 and GeH_4 in reduced-pressure chemical vapor deposition”, *Japanese J. of Applied Physics*, **47**(12), pp. 8733-8738, (2008).
2. Lee, H.K., Park, Y.K., Shim, K.H., Choi, C.J., “Simulation studies on the super-junction MOSFET fabricated using SiGe epitaxial process”, *Journal of the Semiconductor & Display Technology*, **13**(3), pp. 45-50, (2014).
3. Visser, E.P., Kleijin, C.R., Govers, C.A.M., Hoooendoorn, C.J., Giling, L.J., “Return flows in horizontal MOCVD reactors studied with the use of TiO_2 particle injection and numerical calculations”, *J. Crystal Growth*, **94**, pp. 929-946, (1989).
4. Ouazzani, J., Rosenberger, F., “Three-dimensional modeling of horizontal chemical vapor deposition I. MOCVD at atmospheric pressure”, *J. Crystal Growth*, **100**, pp. 545-576, (1990).
5. Ni, H., Lu, S., Chen, C., “Modeling and simulation of silicon epitaxial growth in Siemens CVD reactor”, *J. Crystal Growth*, **404**, pp. 89-99, (2014).

6. Parikh, R. P., Adomaitis, R. A., “An overview of gallium nitride growth chemistry and its effect on reactor design: Application to a planetary radial-flow CVD system”, *J. Crystal Growth*, **286**, pp. 259-278, (2006).
7. Martina, C., Dauelsberga, M., Protzmanna, H., Boydb, A.R., Thrushb, E.J., Heukena, M., Talalaevc, R.A., Yakovlevd, E.V., Kondratyevd, A.V., “Modelling of group-III nitride MOVPE in the closed coupled showerhead reactor and Planetary Reactor®”, *J. Crystal Growth*, **303**, pp. 318-322, (2007).
8. Frijlink, P.M., “A new versatile, large size MOVPE reactor”, *J. Crystal Growth*, **93**, pp. 207-215, (1988).
9. Parikh, R.P. and Adomaitis, R.A., “An overview of gallium nitride growth chemistry and its effect on reactor design: Application to a planetary radial-flow CVD system”, *J. Crystal Growth*, **286**, pp. 259-278, (2006).
10. Im, I.T., Kim, D.S., Kim, W.S., “A numerical study on the growth and composition of InGaAs, InGaP and InGaAsP films grown by MOCVD”, *Journal of the Semiconductor & Display Technology*, **4**(1), pp. 43-48, (2005).

접수일: 2016년 2월 24일, 심사일: 2016년 3월 8일,
게재확정일: 2016년 3월 23일