

Czochralski 방법에 의한 실리콘 단결정 성장에서 자장에 의한 산소의 전달 현상 제어

김창녕

경희대학교 기계공학과, 용인, 449-701

Effect of applied magnetic fields on oxygen transport in magnetic Czochralski growth of silicon

Chang Nyung Kim

Department of Mechanical Engineering, Kyung-Hee University, Yong-In 449-701, Korea

요 약 축방향의 균일한 자장이 Czochralski 도가니에 가하여졌을 때의 유동장, 온도장 및 산소의 농도장이 수치적으로 연구되었다. Czochralski 유동장과 농도장에 작용하는 부력, thermocapillarity, 원심력, 자성력, 산소의 확산계수, 산소의 segregation coefficient, SiO 형태의 evaporation, 도가니벽의 ablation 등이 고려되었다. 회전방향으로의 대칭성으로부터 자오면에서의 속도성분과 회전방향의 속도성분, 온도, 전류의 흐름 등이 먼저 정상상태에 도달하였다고 가정하고 초기에 일정한 산소의 농도가 주어진 상황에서 비정상 상태의 산소의 농도장이 해석되었다. Czochralski 유동장에서의 대류와 확산에 의한 산소의 전달현상이 파악되었으며 결정성장 표면으로 흡수되는 산소의 농도가 연구되었다.

Abstract The characteristics of flows, temperatures, and concentrations of oxygen are numerically studied in the Czochralski furnace with a uniform axial magnetic field. Important governing factors to the flow fields include buoyancy, thermocapillarity, centrifugal force, magnetic force, diffusion and segregation coefficients of the oxygen, evaporation coefficient in the form of SiO, and ablation rate of crucible wall. With an assumption that the flow fields have reached the steady state, which means that two velocity components in the meridional plane and circumferential velocity, temperature, electric current intensity become non-transient, then unsteady concentration field of oxygen has been analyzed with an initially uniform oxygen concentration. Oxygen transports due to convection and diffu-

sion in the Czochralski flow field and oxygen flux through the growing crystal surface has been investigated.

1. 서 론

단결정(single crystal)이란 균일한 원자구조를 갖는 고체를 의미하는데 실제로는 여기에 적당량의 불순물을 적절히 첨가하여 선택적으로 요구되는 특성을 가지도록 제조하고 있다. 이러한 원자구조가 균일한 단결정은 음파, 전자기파, 전하입자 등을 산란시키지 않고 그대로 통과시키므로 여러가지 전자기기와 전자광학부품에 많이 사용되고 있다. 최근의 첨단산업에서 이러한 단결정의 유용성이 크게 부각되고 있으며 이 단결정을 만들기 위한 기술들이 최근 수십년동안 발전되어 오고 있다.

도가니 안의 용융물질은 외부로부터의 가열에 의하여 강한 대류현상을 갖게 된다. 도가니가 회전하고 또 pull rod가 끌어 올려짐과 동시에 회전하여 성장표면 아래에 있는 용융물질과 그 밖의 용융물질 사이에 점성전단층이 형성되며 이들 도가니안의 용융물질은 회전으로 인한 원심력을 갖게 된다. 결정과 도가니의 회전은 회전방향으로의 열적인 비대칭 현상을 줄이기 위함이다. 이러한 대류현상과 원심력의 작용은 용융물질의 거동을 복잡하게 만드는데, 이들은 성장하는 단결정의 질을 결정하는 중요한 인자들이다.

용융물질(melt)의 자유표면에서의 반경방향의 온도구배도 결정성장에 중요한 또 다른 요인이 된다. 굳어진 결정은 온도가 상대적으로 낮고 도가니 벽은 온도가 높기 때문에 이 온도구배가 발생한다. 이 반경 방향의 온도구배 때문에 표면장력의 구배가 생기게 된다. 이러한 힘의 불균형때문에 melt는 표면장

력이 작은 곳에서 큰 곳으로 이동하게 되어 Marangoni convection(또는 thermocapillary convection)을 야기하게 된다. 위에서 언급된 바와 같이 도가니속의 melt에 영향을 미치는 인자들이 많아 melt의 유동은 매우 복잡하게 된다.

흔히 많은 결정성장의 경우에 대해, 도가니 속의 melt가 전기를 통하는 물질인 경우가 있다. 예를 들어 결정화된 silicon은 반도체이지만 이에 해당되는 melt는 수은과 같은 도체이다. 이 때문에 자장의 효과에 의해 발생하는 자성력(Electromotive force : $J \times B$)을 이용하여 도가니 안에서의 유동을 제어하여 고요하게 만들수 있다. 1980년 이래 시작된 이러한 연구들이 결정성장에 있어서 고무적인 결과[1-5]들을 제시하고 있다. 특히 어떻게 자장을 외부에서 걸어주느냐에 따라 melt의 유동특성이 좌우되는데 이에 따라 결정성장이 큰 영향을 받게 된다.

실리콘을 Czochralski 방법으로 성장시키는 경우 도가니는 silica로 만들어 진다. 도가니 벽에서 발생하는 용발(ablation)로 인하여 산소가 melt속으로 용융되어 진다. 과다한 양의 산소는 실리콘 결정의 성질을 저하시키기 때문에 산소는 어떤 의미에서 불순물이다. 그러나 산소는 실리콘안의 금속성 불순물을 제거하기 때문에 소량의 산소는 오히려 이롭다. 실제로 소량의 산소는 집적회로(integrated circuit)의 칩(chip)의 항복점을 높혀준다. 그리하여 결정을 성장시킬 때에 산소를 제거하는 것이 목표가 아니라 균일하게 약 30 ppm 정도의 산소 농도를 유지하는 것이 바람직하다. 항복점을 높히기 위해서는 산소의

절대량과 균일성이 모두 중요하다. 이러한 산소 및 다른 불순물의 대류현상을 적절히 억제하기 위하여 Czochralski 결정성장 과정에 자장을 걸어주면 고순도의 실리콘 결정을 얻을 수 있다.

자장의 영향 아래에서의 Czochralski 유동장에는 온도차에 의한 대류의 효과, 도가니와 결정의 회전으로 인한 원심력의 효과, 표면장력의 효과, 자장의 효과 등이 나타나게 된다. 이와 같이 결정의 성장에 영향을 끼치는 인자들이 많고 Czochralski 유동장을 지배하는 식이 비선형적인 특성을 갖기 때문에 이를 해석하기 위하여 수치해법을 사용한다.

본 수치해법에서는 staggered grid를 이용한 finite volume method를 이용하였으며, 유동속도, 자장, 부력 등이 적절한 압력장을 형성하도록 해주는 coupling을 사용하였다. 이러한 축방향의 균일한 자장의 영향아래에서의 Czochralski 유동장의 특성이 고려되었고, 이러한 자장의 영향아래에서의 낮은 농도의 solute(산소)의 전달현상이 연구되었다.

2. 문제설정 및 수치해법

Magnetohydrodynamics(MHD)의 이론을 Czochralski 방법에 적용한 본격적인 연구가 1982년에 제시되었다[6]. 여기에서는 MHD 유동에서의 quasi-static 가정을 적용하여 displacement current와 charge density의 변화를 무시하였다. 또한 여기에서는 도가니안에서의 유동에서 전류와 자장에 관한 time scale이 유체유동의 time scale에 비해 매우 작기 때문에 액체금속 유동의 경우와 마찬가지로 취급될 수 있다는 것이 밝혀졌다.

축방향으로 균일한 자장을 걸어 주어 결정 성장 과정에서 melt의 유동을 대칭적으로 만

들어 주는 경우가 많은데 이 때에는 melt의 유동이 회전방향 대칭의 특성을 갖게 된다. 이 경우 도가니(furnace)의 자오면(meridional plane)에서 미분방정식을 풀어 유동을 해석할 수 있는데 이러한 회전방향대칭형태를 갖는 결정성장 과정은 실제로 매우 중요하다 [7].

2.1. 농도 분포에 관한 고려

국소 농도구배가 buoyant convection에 큰 영향을 주는 경우를 제외한다면 boron이나 산소와 같은 농도가 낮은 solute의 이동은 수동성(hydrodynamically passive)을 갖는다. 즉 속도장, 전기장, 온도장에 관한 지배방정식과 경계조건은 solute에 무관하다. 그리하여 melt의 운동은 solute transport와는 무관하여 따로 계산될 수 있다. 그러나 solute에 관한 지배방정식에 melt의 속도가 포함되어 있다.

중요한 불순물(impurity)들은 확산율(diffusivity)이 매우 낮기 때문에, 자장의 영향을 받는 Czochralski 유동에서 속도장, 전기장, 온도분포가 정상상태로 유지되는 반면 solute distribution은 계속 시간에 따라 변화하는 경우를 종종 관찰할 수 있다. 이러한 상태가 되면 속도, 전류, 온도를 다시 풀 필요가 없이 이들 값이 고정(freeze)되어 있다고 간주하고 시간에 따른 농도의 변화만을 계산하면 된다.

Czochralski 유동장에 걸린 자장은 대류작용을 억제하고 따라서 temperature fluctuation도 억제한다. 이러한 대류작용의 억제로 인하여 일정한 power로 가열되는 도가니에서 자장의 세기가 증가함에 따라 도가니 벽과 결정성장 표면에서의 온도의 차이가 크게 되며 도가니 벽의 온도는 상승하게 된다.

Silica로 만들어진 도가니의 벽에서 발생하

는 용발(ablation)로부터 산소가 melt속으로 들어가며 산소의 sink는 결정에 들어가는 산소의 물질전달과 SiO의 형태로 자유표면에서 증발하는 물질전달로 이루어진다. 여기에서 증발은 빠른 속도로 이루어지는 반면, 자장의 영향으로 인하여 대류작용이 억제되고 산소의 확산계수도 매우 작으므로 대류와 확산을 통해 melt의 내부에서 자유표면으로 산소가 이동하는 과정은 매우 느리다. 산소농도에 관한 정상 또는 준 정상 상태를 얻기 위한 시간을 줄이기 위하여 적절한 초기 산소 농도를 가정할 수 있다.

산소에 대한 물질전달이 대류작용에 의존하는가 또는 확산작용에 의존하는가에 관한 문제는 산소의 물질전달에 관한 Peclet number를 고려함으로써 파악될 수 있다. 산소의 확산계수를 $1.0 \times 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$ 라 하고 특성길이를 0.1m, 특성속도를 $2.5 \times 10^{-5} \text{ m/s}$ 라고 할 때 물질전달에 관한 Peclet number는 250이 된다. 여기에서 Peclet number가 크기 때문에 diffusion boundary layer 안에서의 산소농도의 변화를 제외하면 유동장에서의 농도의 변화는 상당히 작다. 즉 도가니 벽에 형성된 diffusion boundary layer안에 있는 유체입자는 벽으로부터 확산과정을 통하여 산소를 얻고 이 유체 입자가 자유표면에 접한 boundary layer로 이동한 후 여기에서 역시 확산과정을 통하여 자유표면으로 산소(SiO의 형태로)를 잃는다. 산소의 segregation coefficient가 1보다 크므로(1.25) 결정성장표면 바로 아래의 melt에서는 다른 부분의 melt보다 산소의 농도가 낮게 된다.

2.2. 지배 방정식

Melt의 운동이 액체금속유동과 마찬가지로 취급될 수 있다는 가정에 의하여, 유도된 자

장을 무시할 수 있으므로 유동장 안의 자장 B는 걸어진 자장 B_0 와 같게 된다. 또한 걸어진 자장이 정상적(steady)이라면 전장(electric field)은 비회전성(irrotational)이 되고 전위(electric potential) Φ 를 고려할 수 있다. 전류는 Ohm의 법칙에 의하여 나타내도록 한다. 전하(electric charge)의 보존법칙에 관한 식도 고려하기로 한다. Melt의 유동은 비압축성 유동으로 간주하여 연속의 법칙을 적용한다. Melt의 유동은 Navier-Stokes 식에 의해 지배받게 되는데 여기에서 열팽창은 부력의 항에서만 고려하고(Boussinesq Approximation) 자성력 $\mathbf{J} \times \mathbf{B}_0$ 를 포함시킨다.

점성소산과 Joule heating은 furnace에서 공급되는 열에 비해 무시할 만하다고 가정한다. 또한 대류현상(convection)과 확산현상(diffusion)이 균형을 이루는 에너지방정식이 온도의 거동을 지배한다. 여기에서 solute는 충분히 농도가 낮아, 농도의 차이가 운동방정식에 영향을 주지 않는다고 가정한다. 이와 같은 가정으로 지배방정식은 다음과 같이 나타낼 수 있다.

질량 보존의 법칙

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0$$

운동 방정식

$$\rho(\vec{u} \cdot \nabla \vec{u}) = -\nabla(p + \rho gz) + \rho \alpha g(T - T_s)\vec{i} + \vec{J} \times \vec{B} + \mu \nabla^2 \vec{u}$$

전하 보존의 법칙

$$\nabla \cdot \vec{J} = 0$$

Ohm의 법칙

$$\vec{J} = \sigma[-\nabla\phi + \vec{u} \times \vec{B}]$$

에너지 방정식

$$\vec{u} \cdot \nabla T = \kappa \nabla^2 T$$

농도 방정식

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla C = D \nabla^2 C$$

에너지 방정식과 농도 방정식은 외관상 같아 보이지만 온도와 농도가 전달되는 현상은 크게 다르다. Silicon안의 대부분의 용융물질에 대하여 온도확산계수 κ 는 농도확산계수 D 에 비하여 약 1000배 가량 크다. 이 때문에 물질전달에 관한 Peclet 수가 온도전달에 관한 Peclet 수 보다 훨씬 크게 된다.

2.3. 경계조건

Czochralski 유동에서 경계조건을 살펴보면, melt 속에는 용융된 금속 또는 비중이 큰 액체들이 들어 있으므로 melt가 회전유동을 한다고 하더라도 자장의 영향아래에서는 중력의 방향으로는 melt가 움직이지 않기 때문에 자유표면은 평평하다고 생각되어질 수 있다. 또 도가니와 성장표면에서는 점착조건을 적용한다. 또 자유표면에서는 수직방향의 속도성분은 없으며 thermocapillarity 때문에 수평속도 성분의 수직방향으로의 구배는 온도 구배에 비례하게 된다. 결정성장 표면은 등온(Isothermal) 표면을 이루고 이때의 온도는 응고온도 T_s 를 나타내게 된다. 또한 도가니 벽과 바닥에서 온도가 경계조건으로 주어진다. 자유표면은 복사의 형태로 주위에 열을 빼앗기고 있으며 그 주위는 주어진 온도를 가진 black hemisphere로 간주될 수 있다.

도가니의 벽은 전기가 통하지 않는다고 간주할 수 있다. 성장중인 결정도 전기를 통하지 않는다고 가정한다. 그리하여 도가니의 벽과 바닥, 자유표면과 결정성장 표면에서 각각의 면에 직각인 전류성분은 없다고 가정한다. Ohm의 법칙에서 볼 때 위의 조건은 electric potential의 Neumann 조건으로 바뀌게 된다.

Silicon안의 산소에 대하여 도가니 바닥과 벽에서 melt로 들어가는 oxygen flux는 도가니 바닥 및 벽의 면적, ablation rate 등에 비례하며, 자유표면에서 증발되는 oxygen flux는 자유표면 바로 아래의 산소의 농도와 실험적으로 얻어진 증발계수와와의 곱에 비례한다. 또 산소가 결정속으로 흡수되는 단위면적당의 속도는 결정성장표면 바로 아래의 산소농도와 segregation coefficient, 결정을 들어 올리는 속도들의 곱에 비례한다.

이러한 경계조건들은 아래와 같이 수학적으로 나타내어질 수 있다.

2.3.1. 결정성장표면

$$u_r = 0$$

$$u_\theta = \Omega_c r$$

$$u_z = 0$$

$$T = T_s$$

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -\rho g[1 - \alpha(T - T_0)] + \mu \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2}$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial z} = 0$$

$$n_s = P k_s c_s$$

(여기에서 n_s 는 결정성장표면에서의 산소의 flux, c_s 는 결정성장표면에서의 산소농도)

2.3.2. 자유표면

$$\frac{\partial u_r}{\partial z} = \frac{1}{\mu} \frac{d\gamma}{dT} \frac{dT}{dr}$$

(여기에서 $\frac{d\gamma}{dT} = -1.04 \times 10^{-4} \text{ N/mK}$)

$$\frac{\partial u_\theta}{\partial z} = 0$$

$$u_z = 0$$

$$\frac{\partial T}{\partial z} = \frac{\epsilon \sigma_r}{k} (3T_s^4 + T_e^4) - \frac{4\epsilon \sigma_r T_s^3}{k} T$$

(여기에서 $T = T_s + T_{ex}$, T_s 는 결정물질의 용융온도이며 $T_e = T_s = 1685\text{K}$ 로 가정함[8])

$$n_f = c_f \cdot c_{ev}$$

(여기에서 n_f 는 자유표면의 산소의 flux, c_f 는 자유표면에서의 산소 농도)

2.3.3. 도가니의 측면벽

$$u_r = 0$$

$$u_\theta = \Omega R$$

$$u_z = 0$$

$$T = T_s + \Delta T$$

(여기에서 $\Delta T = 100\text{K}$)

$$\frac{\partial p}{\partial r} = \mu \left[\frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{\partial^2 u_r}{\partial r^2} \right]$$

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial r} = u_\theta B_z \right|_{r=R} = \Omega R B_z$$

$$n_c = \left[\frac{32.00}{60.06} \right] A$$

(여기에서 n_c 는 도가니 측면 벽에서의 산소의 flux)

2.3.4. 도가니의 바닥면

$$u_r = 0$$

$$u_\theta = \Omega r$$

$$u_z = 0$$

$$T = T_s + \left[\frac{\Delta T}{2} \right] \left[1 + \frac{r}{R} \right]$$

$$\frac{\partial P}{\partial z} = -\rho g [1 - \alpha (T - T_0)] + \mu \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2}$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial z} = 0$$

$$n_c = \left[\frac{32.00}{60.06} \right] A$$

(여기에서 n_c 는 도가니 바닥면에서의 산소의 flux)

2.3.5. 회전축

$$u_r = 0$$

$$u_\theta = 0$$

$$\frac{\partial u_z}{\partial r} = 0$$

$$\frac{\partial T}{\partial r} = 0$$

$$\frac{\partial p}{\partial r} = 0$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial r} = 0$$

$$\frac{\partial c}{\partial z} = 0$$

2.4. 수치해법

흔히 속도나 압력으로 표시되지 않는 큰 체적력(body force)이 포함된 유동을 생각할 수 있다. 이러한 체적력이 유동장에서 어떤 물리법칙을 만족시키는 변수를 포함하고 있을 때 system에서의 지배방정식을 수치방법으로 연립으로 계산할 때 필요한 coupling에는 이러한 힘의 효과가 고려되어야 한다. 이러한 유동의 예로는 interaction parameter가 큰 경우의 액체금속 자기유체 유동과 Grashof number가 큰 경우의 자연대류를 들 수 있다. (그러나 magnetic Czochralski growth에서는 위의 두가지 경우가 동시에 나타나고 있다.) 만약 걸려있는 자장의 세기가 커져서 자성력의 크기가 관성력이나 점성력의 크기와 같거나 더 클 경우, 또는 자연대류에서 온도차이가 아주 커져서 관성력이나 부력이 점성력에 비하여 훨씬 클 경우에는 Finite Volume Method를 사용하더라도 기존의 수치해법(예 : SIMPLE, SIMPLER)으로는 수렴된 해를 얻기가 쉽지 않다.

이러한 경우에 대해 압력에 관한 Poisson 형태의 식을 얻어 MAC 또는 SMAC 방법에서 처럼 압력을 계산하면 수치계산에 있어서 안정적인 해를 얻을 수 있다는 것이 밝혀져 있다. 또한 효과적인 수치계산을 수행하기 위해 계산 영역에 있는 각각의 cell에 추가적인 질량 보존의 식과 전하(electric charge) 보존의 식을 적용시킨다. Finite volume method를 이용하여 관성항과 점성항을 계산함에 있어 central differencing과 upwind differencing을 선택하여 사용하는 hybrid 방식을 채택하고, 계산을 수행할 때에는 TDMA를 사용

하였다.

2.5. 무차원 파라미터들

무차원 변수를 만드는 과정에서 자성력(electromotive force)은 다른 어떤 힘보다도 작지 않다고 가정하여 이를 reference force로 삼았다. 그리하여 지배방정식의 system을 지배하는 무차원수는 관성력에 대한 자성력의 크기를 의미하는 interaction parameter(N), 점성력에 대한 자성력의 크기를 의미하는 Hartmann number(M), 자성력에 대한 원심력의 크기를 의미하는 원심펌프 parameter(λ), 자성력에 대한 부력의 크기를 의미하는 buoyancy parameter(β), 열확산 속도에 대한 대류속도의 크기를 의미하는 Peclet number(Pe) 등이며 이들은 다음과 같이 나타낼 수 있다.

Interaction parameter

$$N = \frac{\sigma B_0^2 R_c}{\rho U}$$

Hartmann number

$$M^2 = Re \cdot N = \frac{\rho B_0^2 L_0^2}{\mu}$$

원심 펌프 parameter

$$\lambda = \frac{\rho \Omega_c^2 R_c}{\sigma U B_0^2}$$

Buoyancy parameter

$$\beta = \frac{\rho g \alpha (\Delta T)}{\rho U B_0^2}$$

Peclet number

$$Pe = \frac{UR_c}{\kappa}$$

Peclet number for mass transfer

$$Pe_m = \frac{UR_c}{D}$$

3. 계산결과 및 고찰

자장의 영향 아래서 Czochralski 결정을 성장시키기 위한 장치가 Fig. 1에 나타나 있는데 좌표계의 원점은 도가니(crucible) 바닥의 중앙에 위치하고 있으며 횡축은 회전축 방향

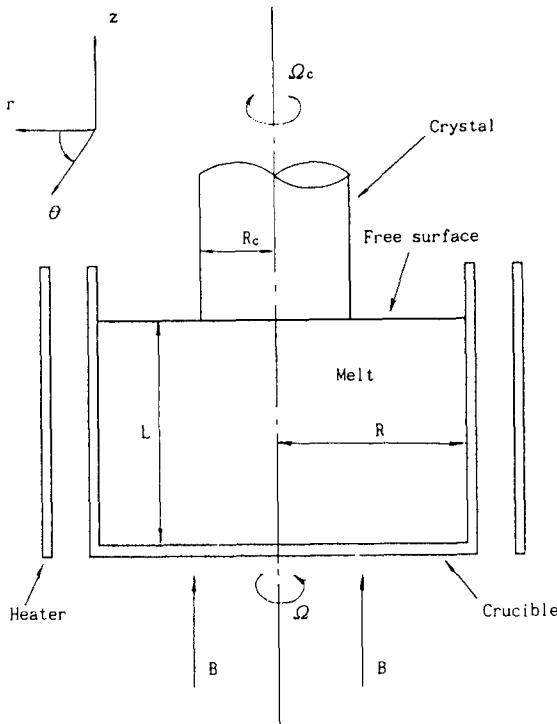


Fig. 1. Czochralski flow field with an axial magnetic field and cylindrical coordinate system (the origin is the center of the bottom).

을, 종축은 반경방향을 각각 나타낸다. Table 1에는 silicon 용융물질 속의 산소의 거동에 관한 여러 특성치가 제시되어 있다. 이 유동장에서 도가니 벽면의 회전속도를 기준으로 한 Re 수는 4.72×10^4 이고 열확산과 관계되는 Pr 수는 1.04×10^{-2} 이며 $Gr/(Re)^2$ 은 5.91×10^{-2} 이다. Table 2에는 자장의 세기 $B = 0.1, 0.2$ T에 대한 interaction parameter, Hartmann number, centrifugal pumping parameter, buoyancy parameter의 값이 나타나 있다.

Table 1, 2로 특징지워진 Czochralski 유동장에서의 세 방향에 대한 속도, 온도, 압력, 전위, 회전방향으로의 전류의 세기 등에 대한 연구가 본 연구논문의 저자에 의하여 이미 수행되었다[9,10]. Czochralski 결정성장 과정에서 유동이 정상상태에 도달하는 시간에 비하여 산소의 농도 상태가 준 정상상태에 도달하는 시간이 매우 크므로 유동장이 먼저 정상상태에 도달하였다고 가정하고 적절한 초기 산소 농도를 부여한 후 산소의 전달현상을 연구하였다.

$B = 0.1, 0.2$ T의 경우에 대하여 결정성장이 시작된 후 각각 5초, 50초, 200초가 경과하였을 때의 산소의 농도장이 Fig. 2, 3, 4에 각각 나타나 있다. 산소의 초기 농도는 75.9 g/m^3 이었다. 산소의 전달현상에서 산소의 확산 계수가 매우 작으므로 확산효과가 대류효과에 비하여 크게 억제된다. 또 이들 그림에서 볼 때 결정의 바로 아래에서 산소의 농도가 유동장의 평균 산소 농도보다 낮는데 그 이유는 산소의 segregation coefficient가 1보다 크기 때문이다.

이들 그림에서 공통적으로 발견되는 것은 $B = 0.1$ T보다 0.2 T의 경우에 유동이 더욱 억제되고 있다는 점이다. 시간이 경과함에 따라 유동장에서의 평균산소농도는 감소하고 있으며 도가니의 바닥과 측면벽은 산소의 공

Table 1

Numerical values in the formulation

Crucible radius	$R = 0.095 \text{ m}$
Crystal radius	$R_c = 0.038 \text{ m}$
Crucible Depth	$L = 0.095 \text{ m}$
Crucible angular velocity	$\Omega = 1.57 \text{ rad/s} (= 15 \text{ rev/min})$
Crystal angular velocity	$\Omega_c = -2.30 \text{ rad/s} (= 22 \text{ rev/min})$
Magnetic permeability	$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ H/m}$
Electric conductivity	$\sigma = 1.0 \times 10^6 \text{ S/m}$
Density	$\rho = 2330 \text{ kg/m}^3$
Volumetric expansion coefficient	$\alpha = 1.41 \times 10^{-5} / \text{K}$
Characteristic temperature difference	$\Delta T = 100 \text{ K}$
Kinematic viscosity	$\nu = 3.0 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$
Specific heat	$c_p = 1.0 \times 10^3 \text{ J/kg K}$
Thermal conductivity	$k = 67 \text{ W/mK}$
Melting point	$T_s = 1685 \text{ K}$
Melt emissivity	$\epsilon = 0.318$
Pull rate of growing crystal	$P = 2.117 \times 10^{-5} \text{ m/s}$
Initial oxygen concentration	$c = 75.9 \text{ g/m}^3$
Oxygen diffusion coefficient	$D = 1.0 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$
Oxygen segregation coefficient	$k_s = 1.25$
Oxygen evaporation coefficient	$c_{ex} = 3.36 \times 10^{-6} \text{ m/s}$
Ablation rate	$A = 1.5 \times 10^{-7} \text{ kg/m}^2 \text{ s}$

Table 2

Nondimensional parameters

	B = 0.1 T	B = 0.2 T
Reynolds number Re	4.72×10^4	
Prandtl number Pr	1.04×10^{-2}	
Prandtl number(mass transfer) Pr _m	3.0×10^4 for oxygen	
$\frac{Gr}{(Re)^2}$	5.91×10^{-2}	
Interaction parameter N	2.73	1.09×10^1
Hartman number M	3.59×10^2	7.19×10^2
Centrifugal pumping parameter λ	2.33×10^{-1}	5.83×10^{-3}
Buoyancy parameter β	2.16×10^{-2}	5.40×10^{-3}

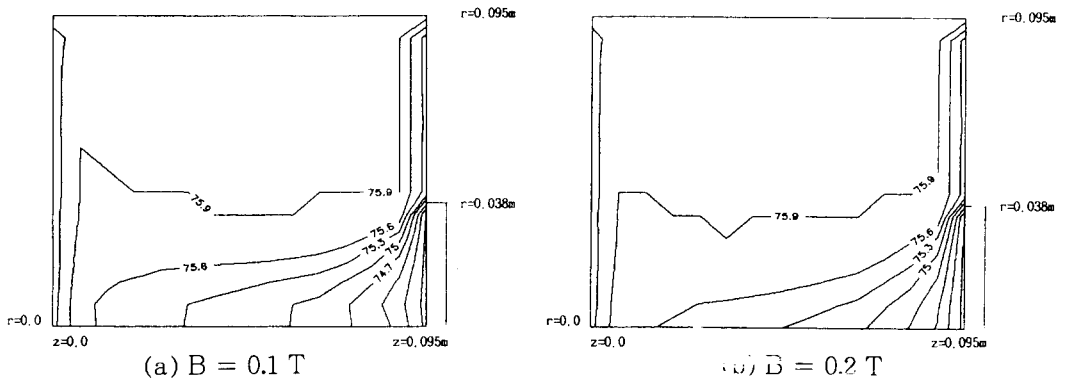


Fig. 2. Oxygen concentration fields at 5 seconds after the starting of the growth.

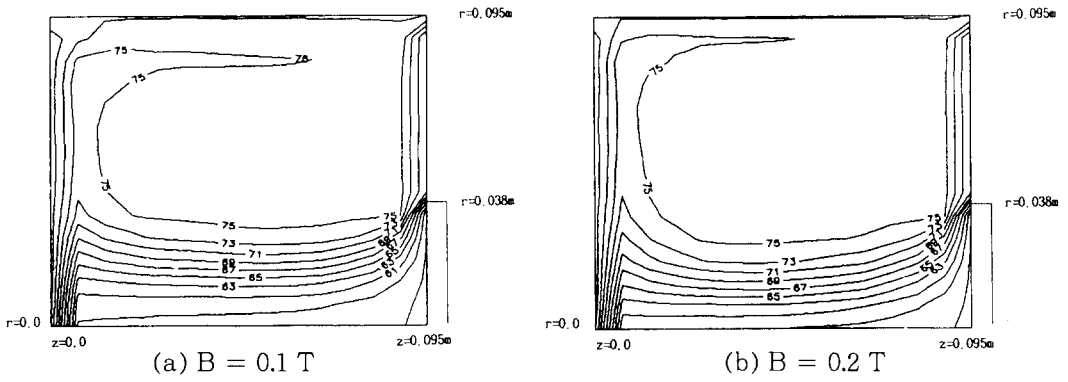


Fig. 3. Oxygen concentration fields at 50 seconds after the starting of the growth.

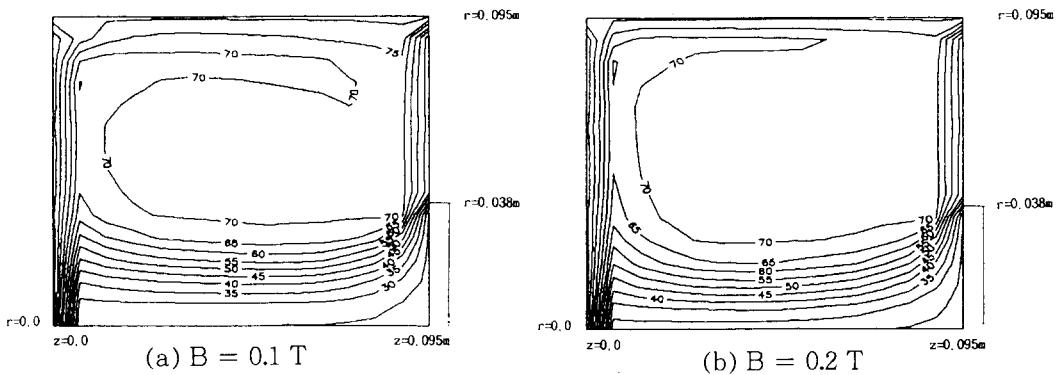


Fig. 4. Oxygen concentration fields at 200 seconds after the starting of the growth.

급처(source)로서, 자유표면과 결정성장표면은 산소의 배출처(sink)로서 작용하고 있다.

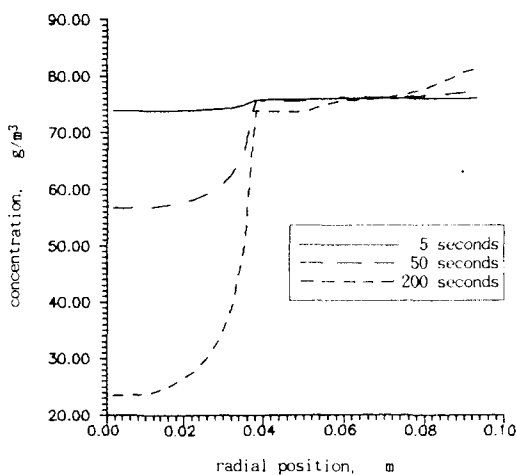
결정성장이 시작된 후 5초, 50초, 200초가 경과하였을 때에 성장표면의 아래 0.00142m 인 곳에서의 반경방향으로의 산소의 농도분포가 Fig. 5에 나타나 있다. 여기에서 성장하는 결정의 반경이 0.038m인데, 성장표면에서 나타나는 segregation에 의한 산소의 농도감소가 결정의 가장자리에서는 반경방향의 반대방향으로의 대류작용에 의하여 작게 나타나는데 특히 $B=0.2$ T인 경우에는 위의 대류작용이 크게 억제되어 시간이 경과함에 따라 결정의 가장자리에서의 산소 농도감소가 현저하다.

결정성장표면의 중심점, 반경방향으로 반경의 50%만큼 떨어진 지점과 결정성장 표면의 가장자리에서 시간의 경과에 따라 결정성장표면으로 흡수되는 산소의 농도가 각각 Fig. 6에 나타나 있다. 이 그림에는 성장표면에서 흡수되는 평균적인 산소의 농도가 함께 나타나 있는데 성장표면의 중앙부분보다 성

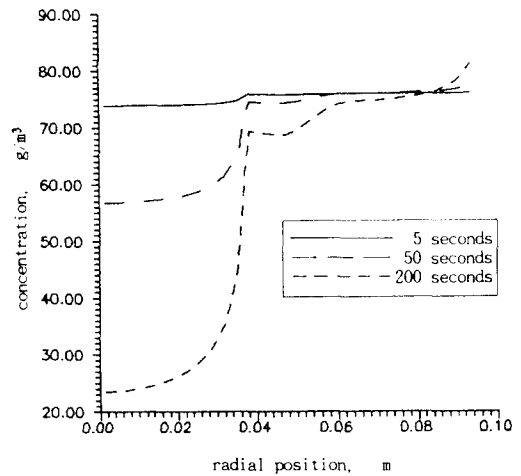
장표면의 가장자리에서 흡수되는 산소의 농도가 높은 것으로 나타나 있다. 이는 성장표면의 바깥쪽에서 성장표면의 중앙부분으로 용융물질이 이동하고, 산소의 segregation coefficient가 1보다 크다는 사실에 기인하고 있다.

4. 결 론

$B=0.1, 0.2$ T의 균일한 자장이 도가니에 가하여졌을 때에 정상상태의 Czochralski 유동장에 대한 비정상상태에서의 산소의 농도장이 수치적으로 해석되었다. 여기에서 온도차이에 의한 부력의 효과, 자유표면에서의 반경방향으로의 온도구배로 인한 thermocapillarity 효과, 도가니와 결정의 회전으로 인한 원심력의 효과, 외부에서 걸어준 자장의 효과 및 산소의 segregation 효과 등이 Czochralski 유동장과 농도장을 지배하고 있다.



(a) $B = 0.1$ T



(b) $B = 0.2$ T

Fig. 5. Distributions of oxygen concentration at 0.00142 m below the growing surface.

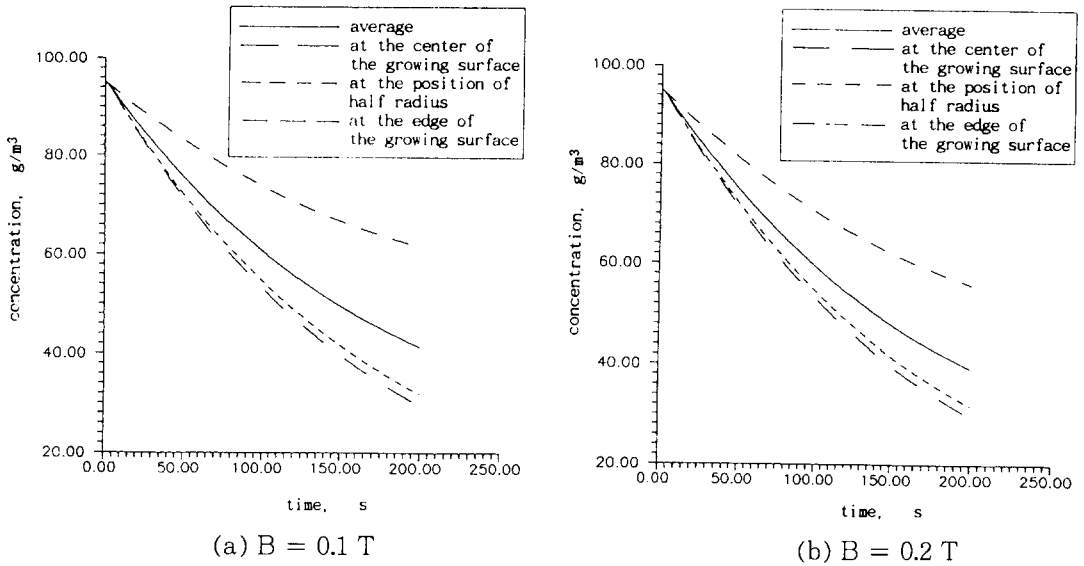


Fig. 6. Oxygen deposition rates at the growing surface.

자오면(meridional plane)에서의 속도성분과 회전방향의 속도성분, 온도, 전류의 흐름 등이 정상상태에 도달하였다고 가정하고 초기에 일정한 산소의 농도가 주어진 상황에서 비정상상태의 산소의 농도장이 해석되었다. Czochralski 유동장에서 자장의 세기가 클 때 유동이 더욱 억제되고 있다. 도가니벽과 성장결정의 아래에서 회전방향의 속도성분이 크며 결정의 가장자리에서 나타나는 반경방향으로의 온도구배가 Marangoni convection을 야기하고 있다.

비정상상태의 산소의 전달현상은 경계층을 제외하고는 주로 대류작용에 의존하고 있다. 그러나 산소의 공급원인 도가니의 바닥과 측면벽에서, 그리고 산소의 배출처인 자유표면과 결정성장 표면에서는 산소농도에 관한 경계층이 형성되며 여기에서는 산소의 확산 현상이 중요하다. 도가니의 자오면에서 나타나는 유동의 특성과 산소가 갖는 segregation coefficient값에 의하여 결정성장표면으로 흡

수되는 산소의 농도는 성장표면의 중앙보다 성장표면의 가장자리에서 높게 나타나고 있다.

감사의 글

본 연구는 1993년도 교육부 학술연구조성비(신소재 분야)에 의하여 연구되었으며 이에 감사드립니다.

참 고 문 헌

- [1] K. Hoshigawa, H. Kohda, H. Hirate and H. Nakanishi, Japanese Journal of Applied Physics 19 (1980) L-33.
- [2] K. Hoshigawa, H. Hirata, H. Nakanishi and K. Ikuda, Proc. 4th International Symposium on Silicon Materials, Science

- and Technology, Minneapolis, Vol. on Semiconductor Silicon (1981) 101.
- [3] K.M. Kim, Journal of the Electrochemical Society 129 (1982) 427.
- [4] K.M. Kim, G.H. Schwuttke and P. Smetana, IBM Technical Disclosure Bulletin 24 (1981) 3376.
- [5] T. Suzuki, N. Isawa, Y. Okubo and K. Hoshi, Proc. 4th International Symposium on Silicon Materials, Science, and Technology, Minneapolis, Volume on Semiconductor Silicon (1981) 90.
- [6] W.E. Langlois and J.S. Walker, Proc. 2nd Int. Conf. on Computational and Asymptotic Methods for Boundary and Internal Layers (1982) 209.
- [7] N. Kobayashi and T. Arizumi, Japanese Journal of Applied Physics 9 (1970) 361.
- [8] L.N. Hjellming and J.S. Walker, Journal of Fluid Mechanics 182 (1987) 335.
- [9] 김창녕, 김경훈, 한국결정성장학회지 3 (1993) 18.
- [10] 김창녕, 김경훈, 한국결정성장학회지 4 (1994) 46.