

2차원 및 3차원 정상상태 모델에 의한 수평브리츠만 결정성장에서의 고-액 계면과 편석

김도현, 민병수*

한국과학기술원 화학공학과, 대전, 305-701

*현대중공업 산업기술연구소, 울산, 682-792

Melt- solid interface and segregation in horizontal bridgman growth using 2- and 3- dimensional pseudo- steady- state model

Do Hyun Kim and Byeong- Su Min*

Department of Chemical Engineering, Korea Advanced Institute of Science and Technology, Taejeon 305- 701, Korea

** Hyundai Industrial Research Institute, Hyundai Heavy Industries Co., Ulsan 682- 792, Korea*

요 약 수평 브릿지만법은 갈륨 비소 반도체 결정을 성장시키는 데 많이 사용된다. 수평 브릿지만법에 의하여 성장된 단결정 내에서 불순물 분포를 알아보기 위하여 성장 과정 중의 액 상에서 열전달, 물질전달, 유체흐름과 고상에서 열전달을 의사 정상상태를 가정하여 2차원 및 3차원 모델을 세우고 유한요소법에 의하여 수치모사하였다. 이때 고-액 계면의 위치와 형태도 해의 일부분으로 다른 해들과 동시에 구하였다. 2차원 단열 경계조건에서는 계면이 평평하지만 완전전도 경계조건에서는 계면이 휘어져 나타났다. 완전전도 경계조건에서는 3차원의 계면이 2차원의 경우보다 덜 휘어졌고, 대류 강도는 비슷하였다. 대류강도의 증가에 따라 수직 편석은 최대값을 보였으나 계면이 2차원에서 더 휘어져 최대값은 2차원에서 대류 강도가 더 작을 때 나타났다.

Abstract Gallium arsenide crystal is usually grown from the melt by the horizontal Bridgman method. We constructed pseudo-steady-state model for crystal growth of GaAs which include melt, crystal and the free interface. Mathematical equations of the model were solved for

flow, temperature, and concentration field in the melt and temperature field in the crystal. The location and shape of the interface were also solved simultaneously. In 2-dimensional model, the shape of the interface is flat with adiabatic thermal boundary condition, but it becomes curved with completely conducting thermal boundary condition. In 3-dimensional model, the interface is less curved than 2-dimensional case and the flow intensity is similar to that of 2-dimensional case. With the increase of flow intensity vertical segregation shows maximum value in both 2- and 3-D model. However, the maximum value occurs in lower flow intensity in 2-D model because the interface is more curved for the same flow intensity.

1. 서 론

단결정의 제조기술은 단결정의 수요에 맞추어 발전되어 왔다. 게르마늄과 실리콘 단결정의 제조법으로 이용되는 초크랄스키법이나, GaAs 등의 단결정 제조법으로 이용되는 브릿지만법, 수정의 제조법으로 이용되는 수열합성법은 단결정 소재의 수요에 맞추어 발전되었다. 단결정 제조의 기초 기술인 정밀온도제어기술, 열흐름-물질흐름의 제어기술 및 결정평가기술 등에는 공통적인 요소 기술이 많이 포함되어 있어서 장래방향에 하나의 좌표를 제시하고 있다. 그 중 GaAs 결정 성장기술은 크게 bulk와 에피 성장기술 그리고 특성 평가 기술로 나누어지는데 단결정 기판의 특성이 에피층이나 소자의 특성에 직접적으로 영향을 미치게 되므로 양질의 GaAs 단결정을 얻기 위한 노력이 계속되어 왔다. Bulk 성장 기술에 있어 대표적인 것에는 HB(horizontal Bridgman)법과 LEC (liquid encapsulated Czochralski)법이 있으며 이 중 HB법은 결정의 stoichiometry 조절이 용이하고 저결함의 GaAs 단결정을 얻는 반면 직경 3 인치 이상의 단결정 성장이 어렵다.

단결정 GaAs를 성장시키기 위하여 두 온도영역을 갖는 로(furnace)를 사용하는 HB

장치의 개략도는 Fig. 1에서와 같다. 왼쪽 영역은 As의 과압력을 얻는 데 요하는 온도(610°C)로 유지되며 오른쪽 영역은 GaAs의 용융점(1240°C) 이상으로 유지된다. 봉합관은 석영을 사용하며 보트는 흑연으로 만들어진다. 결정 성장 조업이 시작되기 전에 보트는 다결정 GaAs로 채워지고 As는 관의 다른쪽 끝에 위치시킨 후 노를 가열하여 다결정 GaAs 장입물과 종결정의 일부를 녹인다. Fig. 1에서 보트가 오른쪽으로 움직이면 용

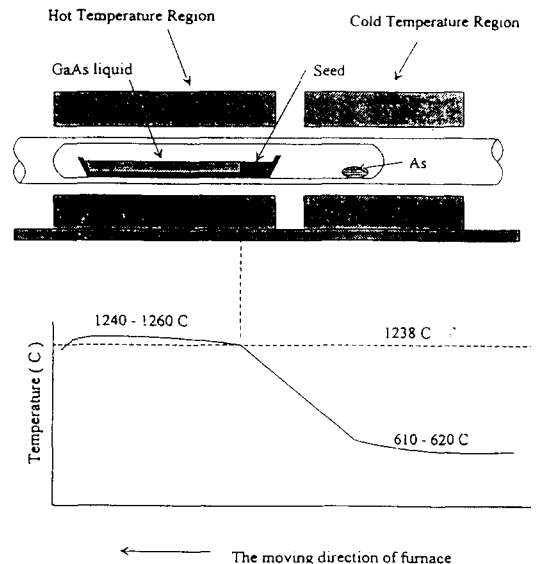


Fig. 1. The schematic diagram of horizontal Bridgman furnace for GaAs growth.

액은 오른쪽 끝에서부터 응고된다. 보통 종 결정은 성장되는 단결정이 특정한 결정방향을 이루도록 사용되며 보트의 결정쪽 끝에 놓여진다. 용융액의 냉각에 따라 고-액 계면에서 단결정이 성장되어 GaAs의 최종 단결정을 얻게 된다[1].

용융액으로부터 성장된 반도체 단결정의 품질은 결정구조의 완벽성과 단결정 내의 전기적으로 활성인 용질이나 불순물 분포의 균일성으로 측정할 수 있다. 거의 모든 경우에 용융액으로부터 단결정의 성장은 반도체 물질을 용해시키기 위한 높은 열을 필요로 하며 따라서 이들 단결정의 성장은 필연적으로 고온 분위기에서 행해지게 된다. 이러한 고온 분위기 아래에서 성장되는 반도체 단결정의 품질은 상호 영향을 미치는 결정성장 시스템의 열전달, 물질전달, 용융액의 유체 흐름에 의해 많은 영향을 받는다. 최근 20년간에 용융액에서 단결정을 성장시키는 공정에서 조업조건과 최종 단결정의 품질 사이에 있는 인과관계를 이론적으로 규명하는데 많은 연구가 수행되었다. 이러한 연구에는 결정성장 시스템에서 열전달, 물질전달, 유체 흐름 등의 이동현상 이론들이 포함된다[2]. 용융액으로부터 단결정을 성장시키는 공정에서 열전달에 기인한 온도 구배는 결정의 성장 혹은 용융액의 응고에 필요한 구동력의 구실을 한다. 따라서, 열전달 기구는 결정의 성장속도, 고-액 계면의 곡율을 결정하는 주요한 인자이며, 특히 초크랄스키법이나 부유대법과 같이 결정이 용기에 담겨 성장하지 않는 방법에서는 성장된 결정의 직경을 결정하는 역할을 한다. 또한, 열전달 기구는 부력에 의한 열대류를 유발하게 되고 이에 따라 결정내의 용질분포에 영향을 미치고 열전달에 의한 결정내의 열응력 분포는 결정의 결함을 생성시키는 원인이 된다.

액상에서의 대류는 고-액계면 근방의 용질 확산층의 구조를 바꾸고 용질의 혼합을 초래한다. 이러한 용질 분포의 변화는 결정내로 포함되어 들어가는 용질의 양에 영향을 미쳐서 결정 내의 용질 분포를 변화시키며 이 변화는 성장된 결정 내의 편석으로 나타난다. 수직 방향으로 용질분포의 불균일한 정도는 백분율 수직편석(percent vertical segregation)이라고 하고, 결정의 수직 방향으로 농도의 최대차를 국부 평균치 $\langle C \rangle_l$ 로 나누어서 나타낸다.

$$\Delta C(\%) \equiv \frac{(C_{S, \max} - C_{S, \min})}{\langle C \rangle_l} \times 100 \quad (1)$$

$$= \frac{(C_{\max} - C_{\min})_{interface}}{\langle C \rangle_l} \times 100 \quad (2)$$

Crochet등[3,4]은 수평 브릿지만 방식에 의한 갈륨비소 결정성장 시스템에서 갈륨비소가 액상으로만 존재할 때 2차원 모델을 사용하여 수치 모사를 행함으로써 용해액 내의 운동 에너지가 주기적으로 변함을 보였으며 이를 3차원 모델[5] 혹은 결정상과 고-액 계면이 존재하는 2차원 모델[6]로 확장하였다. 그러나, 이들은 물질 전달에 대한 것은 분석에 포함시키지 않음으로써 편석 현상을 고찰하지 않았으며 고-액 계면의 위치를 고정한 상태에서 모사를 행하여 결정 성장시에 고-액 계면의 위치 변화의 영향을 고찰하지 못하였다.

본 연구에서는 액상에서의 유체흐름, 열전달, 물질전달과 고상에서의 열전달을 포함하는 2차원 및 3차원 수학적 모델을 의사정상상태를 가정하여 수립하고 유한요소법을 사용하여 수치모사를 행하였다. 대류강도를 나타내는 무차원변수인 Grashof 수를 변함에 따라 유체의 흐름구조, 온도 및 농도 분포의 변화를 살펴보고 아래 윗면의 온도경계조건

이 계면의 모양에 미치는 영향을 살펴보았다.

2. 수평 브릿지만 시스템 모델

2.1. 2차원 정상 상태 모델

수평 브릿지만 장치의 보트를 2차원 사각형으로 가정하였으며 여기서 액상과 고상을 담는 보트의 두께는 충분히 얇다고 보고 모델링에서 제외하였다. 개략적인 그림을 Fig. 2에 나타내었다. 고-액 공존에서 정상 상태식의 유도에 사용된 가정은 다음과 같다. 액상은 Boussinesq 유체라고 가정하여 온도변화에 의한 밀도의 선형적 변화가 Navier-Stokes 식의 부력항에만 영향을 준다고 가정하고 그 외의 밀도는 상수라고 가정한다. 액상에서 용질의 재분포 시간 스케일은 성장속도에 비해 작은 것으로 가정한다. 용질은 유선을 따른 대류와 용질분포 기울기에 따른 확산 두가지에 의해서 전달되는데 이들은 각각 다른 시간 스케일을 가진다[7]. 결정 내에서는 대류와 전도에 의한 열전달만 일어난다고 본다[8]. 반투과성 물질에서는 복사 열

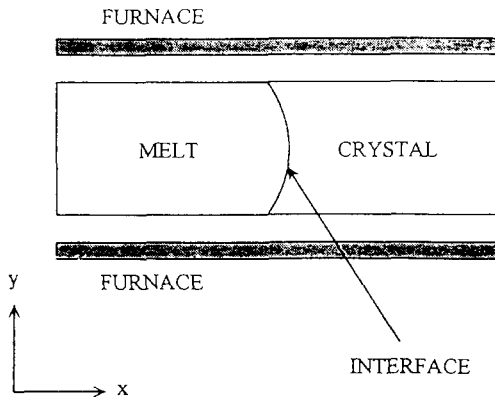


Fig. 2. The simplified diagram of HB furnace for 2-dimensional PSSM.

전달이 중요해지나 GaAs 결정에 대하여는 무시할 수 있다. 액상과 고상에서 열전도도는 등방성이라고 가정한다. GaAs 결정에 대하여, 결정 내의 열전도도가 등방성으로 가정하는 것은 타당하다고 보고된 바 있다[9]. 액상에서 고상으로 상변화 속도는 응고의 시간 스케일이 열전달에서 보다 매우 작기 때문에 굉장히 빠르다고 본다. 에너지식과 물질식은 서로 독립적이라고 본다.

이와 같은 가정 아래 액상에서의 연속식, 운동량식, 에너지식 및 용질의 분포를 위한 물질식은 다음과 같다.

$$\nabla \cdot v = 0 \quad \text{where } v = (u, v) \quad (3)$$

$$v \cdot \nabla v = -\nabla p + \nabla^2 v - Gr\theta e_y \quad (4)$$

$$Pr v \cdot \nabla \theta = \nabla^2 \theta \quad (5)$$

$$Sc v \cdot \nabla C = \nabla^2 C \quad (6)$$

여기서 Pr 은 Prandtl 수를, Sc 는 Schmidt 수를 나타낸다.

고상에서는 에너지 수지식만 적용되는데 여기서 대류는 결정 성장에 기인하는 대류항을 나타낸다.

$$Pee_c \cdot \Delta \theta = \gamma \nabla^2 \theta \quad (7)$$

위에서 Pe 는 무차원 결정성장 속도를 나타내는 Peclet 수이고 $\gamma \equiv \alpha_c / \alpha_m$ 으로 액상과 고상의 열확산계수의 비를 나타낸다.

고-액 계면에서 온도와 물질에 대한 경계 조건은 다음과 같이 flux의 수지에 의하여 주어진다.

$$[N \cdot \nabla \theta]_m - K_c [N \cdot \nabla \theta]_c = StPe (N \cdot e_x) \quad (8)$$

$$[N \cdot \nabla C]_m = \frac{PeSc}{Pr} (N \cdot e_x) (1-k) C \quad (9)$$

여기서, N 은 고·액 계면의 단위 수직벡터이며

$$N = \frac{e_x - H_y e_y}{\sqrt{1 + H_y^2}} \quad (10)$$

로 나타내어지고 $H_y \equiv dH/dy$ 이다. 아랫면과 윗면의 온도 경계 조건은

$$\left[\frac{\partial \theta}{\partial y} \right] = Bi(x) [\theta_\infty(x) - \theta] \quad (11)$$

at $y = 0, 1, 0 \leq x \leq L$

로 주어지고, 양쪽의 측면에서는

$$\theta|_{x=0} = \theta_\infty(0), \quad \theta|_{x=L} = \theta_\infty(L) \quad (12)$$

at $0 \leq y \leq 1$

로 주어지는데 여기서 $Bi(x)$ 는 무차원 열전달 계수이고 L 은 횡방향의 길이를 나타낸다. $Bi = hH/k$ 로 정의되며 보트와 로 사이의 복사, 전도, 대류 열전달을 포함한다. $\theta_\infty(x)$ 는 로에서의 온도분포를 나타내는데, $Bi(x)$ 와 $\theta_\infty(x)$ 는 로에 따라 결정되며 한가지 경우를 Fig. 3에 보였다.

정상상태 모델에서는 Fig. 2에서 왼쪽이 유체의 입구가 되는데 여기에서 농도 경계 조건은

$$[N \cdot \nabla C]_m = \frac{PeSc}{Pr} (1 - C) \quad (13)$$

이다. 용질은 액상의 아래와 위에서 사라지거나 생성되지 않아 flux가 영인 조건을 갖는다.

$$\frac{\partial C}{\partial y} \Big|_{y=0} = \frac{\partial C}{\partial y} \Big|_{y=1} = 0 \quad (14)$$

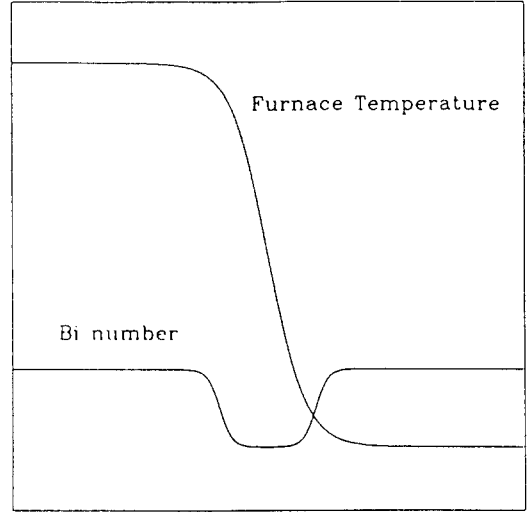


Fig. 3. Furnace temperature and Biot number profile.

고·액 계면의 위치와 형태가 미지수가 되는데 이 계면을 해로써 찾아내는 식으로 고·액 계면에서의 온도가 GaAs의 녹는점과 일치한다는 식을 사용하였다.

$$\theta = \theta_m \quad (15)$$

2.2. 3차원 정상상태 모델

3차원 정상상태 모델에서는 수평 Bridgman 장치의 보트를 3차원의 직육면체로 가정하였으며 여기에서도 액상과 고상을 담고 있는 보트는 충분히 얇다고 보고 모델링에서 제외하였다. 개략적인 그림을 Fig. 4에 나타내었다.

2차원 정상 상태의 수식화와 다른 점은 $v = (u, v, w)$ 로 속도 성분과 공간의 차원이 하나 더 추가된다는 점이다. 사용한 가정은 2차원 모델에서 사용한 가정과 같으며 액상에서의 연속식, 운동량식, 에너지식 및 용질의 물질식은 다음과 같다.

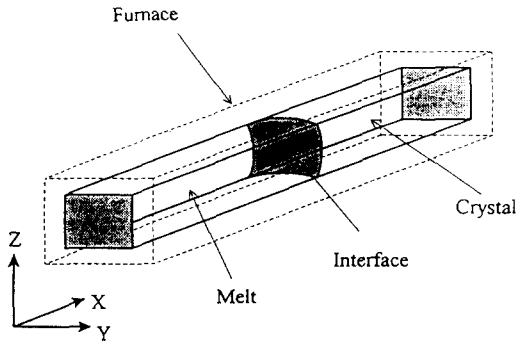


Fig. 4. The simplified diagram of HB furnace for 3-dimensional PSSM.

$$\nabla \cdot v = 0 \text{ where } v = (u, v, w) \quad (16)$$

$$v \cdot \nabla v = -\nabla p + \nabla^2 v - Gr\theta e_z \quad (17)$$

$$Pr v \cdot \nabla \theta = \nabla^2 \theta \quad (18)$$

$$Sc v \cdot \nabla C = \nabla^2 C \quad (19)$$

고상에서는 에너지 수지식만 사용되어 다음과 같이 주어진다.

$$Pe e_x \cdot \nabla \theta = \gamma \nabla^2 \theta \quad (20)$$

고-액 계면에서 온도와 물질에 대한 경계 조건은 다음과 같이 flux의 수지에 의하여 주어진다.

$$[N \cdot \nabla \theta]_m - K_c [N \cdot \nabla \theta]_c = St Pe (N \cdot e_x) \quad (21)$$

$$[N \cdot \nabla C]_m = \frac{Pe Sc}{Pr} (N \cdot e_x) (1 - k) C \quad (22)$$

여기서 N 은 단위 수직벡터로

$$N = \frac{e_x - H_y e_y - H_z e_z}{\sqrt{1 + H_y^2 + H_z^2}} \quad (23)$$

로 나타내어지고 $H_y \equiv dH/dy$, $H_z \equiv dT/dz$ 이다. 아랫면과 윗면의 온도 경계조건은

$$\left[\frac{\partial \theta}{\partial y} \right] = Bi(x) [\theta_\infty(x) - \theta] \quad (24)$$

at $z = 0, 1, 0 \leq x \leq L$

로 주어지고, 앞면과 뒷면의 온도 경계조건은

$$\left[\frac{\partial \theta}{\partial z} \right] = Bi(x) [\theta_\infty(x) - \theta] \quad (25)$$

at $y = 0, 1, 0 \leq x \leq L$

로 주어진다. 양쪽 끝에서 온도 경계조건은

$$\theta|_{x=0} = \theta_\infty(0), \theta|_{x=L} = \theta_\infty(L) \quad (26)$$

at $0 \leq y \leq 1$ and $0 \leq z \leq 1$

로 주어지는데 여기서 $Bi(x)$ 는 무차원 열전달 계수이고 L 은 횡방향의 길이이다. $Bi = hH/k$ 로 정의되어 보트와 로 사이의 복사, 전도, 대류 열전달을 포함하고 $\theta_\infty(x)$ 는 로에서의 온도 분포를 나타내는데 $Bi(x)$ 와 $\theta_\infty(x)$ 는 로의 운전 조건과 구조에 의하여 결정된다.

정상상태 모델에서 Fig. 4의 왼쪽이 유체의 입구가 되는데 여기에서 농도 경계조건은

$$[N \cdot \nabla C]_m = \frac{Pe Sc}{Pr} (1 - C) \quad (27)$$

이며, 용질은 액상의 아래와 위 그리고 앞뒤에서 사라지거나 생성되지 않아 flux가 영인 조건이 적용된다.

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial C}{\partial y} \right|_{y=0, z=0} &= \left. \frac{\partial C}{\partial y} \right|_{y=1, z=0} = \left. \frac{\partial C}{\partial z} \right|_{y=0, z=1} \\ &= \left. \frac{\partial C}{\partial z} \right|_{y=1, z=1} = 0 \end{aligned} \quad (28)$$

고-액 경계면의 위치와 형태가 미지수가 되는데 이 경계면을 해로써 찾아내는 식으로 고-액 계면에서의 온도가 GaAs의 녹는점과 일치한다는 식을 사용하였다.

$$\theta = \theta_m \quad (29)$$

3. 수치해법

본 연구에서는 앞에서 수립한 수학적 모델을 Galerkin 유한요소법으로 차분화하여 편미분 방정식을 대수방정식으로 변환하였다. 2차원 모델에서는 속도, 온도, 농도에 대하여 쌍2차 기본함수를 사용하였고 액상의 압력에 대하여는 불연속 구간별 선형 기초함수를 사용하였다. 3차원 모델에서는 속도, 온도, 농도에 대하여 3중 2차 기본함수를 사용하였고 액상의 압력에 대하여는 불연속 구간별 선형 기초함수를 사용하였다. 수치 적분은 유한요소내에서 Gauss 적분법을 이용하였다.

이때 결정 성장 시스템의 모델에서 고려하여야 할 특이한 점은 계면에서 상의 변화가 수반되고 계면의 위치를 미리 알 수 없기 때문에 계면의 모양과 위치를 해의 일부로 구해야 한다는 점이다. 액상에서의 속도, 압력, 농도, 전체상에서의 온도로 표현되는 지배방정식들은 고-액 계면에서 경계조건을 통해 고-액 계면의 위치와 연계되어 있다. 고-액 계면에서의 경계조건은 필수 경계조건과 자유 경계조건이 있어 전자는 계면을 따라서 액상과 고상의 온도가 재료의 평형 녹는점과 일치해야 됨을 나타내고, 후자는 응고에 따라서 방출되는 잠열이 계면을 통한 전도에 의한 순 에너지 플럭스가 균형을 이루어야 함을 나타낸다. 계면을 따라서 두가지 조건이 동시에 만족되어야만 하지만 한가지 조건

은 에너지 수지를 위한 경계 조건으로 사용되고, 다른 조건은 계면의 형태를 결정하기 위하여 사용된다. 자유 계면을 결정하기 위한 조건의 선택은 자유 경계치 문제에서 수렴의 속도와 수치해의 정확성에 큰 영향을 미친다[10]. Ettouney와 Brown[11]은 계면의 위치를 결정하기 위해서 녹는점 등은 (melting point isotherm)조건을 계면의 위치를 결정하는 조건으로 사용하고 에너지 플럭스를 에너지 수지를 위한 경계조건으로 사용하는 것이 계면 에너지 수지를 계면의 위치를 결정하는 조건으로 사용하는 것보다 더 정확하고 효율적임을 유한요소 해석을 통해 보였고 본 연구에서도 녹는점 등온을 분별된 조건으로 사용하였다. 유한요소법을 적용하여 얻어진 비선형 대수방정식들은 Newton법을 사용하여 선형화시킨 후 반복에 의하여 해를 구하였는데 매 반복에서는 frontal법을 사용하였다.

4. 결 과

4.1. 2차원 정상 상태 모델

모든 수치 모사는 Table 1에서와 같은 GaAs의 열물리 성질을 사용하였다. 위아래면의 온도 경계 조건으로 단열 조건을 사용한 경우의 결과를 Fig. 5에 나타내었다. 이것은 수학적 모델에서 Bi 가 영인 경우에 해당하는 결과다. 단열 조건이기 때문에 온도 분포는 평평한 형태를 띤다. 흐름의 형태가 $Gr=0$ 일 때는 자연대류에 의한 상하 흐름이 발생하지 않기 때문에 왼쪽 끝에서 들어온 흐름이 오른쪽 끝 계면에서 교란이 없이 그대로 유지된다. $Gr=17$ 에서 흐름이 조금 윗쪽으로 휘어지나 아직은 흐름이 강하지 않기

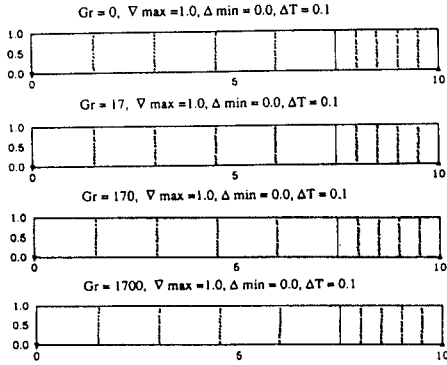
Table 1
Thermophysical properties of GaAs

Quantity	Symbol (units)	Value
thermal conductivity of the melt	K_m (W/°C·cm)	0.18
thermal conductivity of the solid	K_s (W/°C·cm)	0.071
density of the melt	ρ_m (g/cm ³)	5.7
density of the solid	ρ_s (g/cm ³)	5.2
specific heat of the melt	$C_{p,m}$ (J/°C·g)	0.44
specific heat of the solid	$C_{p,s}$ (J/°C·g)	0.42
melting temperature	T_m (°C)	1238.0
kinematic viscosity	ν (cm ² /sec)	0.0042
heat of solidification	ΔH_s (J/g)	726
thermal expansion coefficient	β_T (°C ⁻¹)	1.9×10^{-4}
diffusion coefficient of Se in GaAs	D (cm ² /sec)	1×10^{-4}
equilibrium distribution coefficient of Se	k	0.1

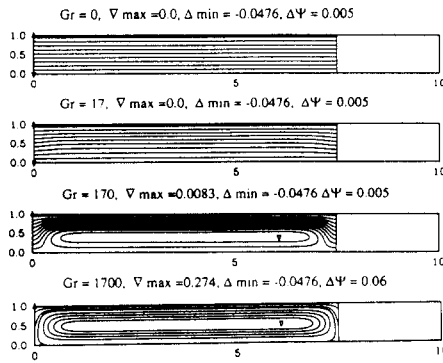
때문에 흐름 셀이 형성되지 않았고 $Gr = 170$ 에서는 흐름이 강해져서 흐름 셀이 형성되었다. 그림에서 굵은 윤곽선은 흐름 함수 값이 영인 부분이다. $Gr = 170$ 에서는 셀이 액상 가운데 나타나지만 $Gr = 1,700$ 에서는 셀이 커져서 아래면에 붙는다. $Gr = 0$ 에서는 흐름이 없기 때문에 농도 분포는 계면 근처에서 $c = 10$ 인 농도 경계층이 정확한 1차원적 형태로 형성되나 Gr 이 증가함에 따라 농도 분포는 유체의 흐름을 좇아 1차원 분포를 벗어나게 되고 혼합효과가 증가함을 볼 수 있다. 그림에서 굵은 선은 $c = 5$ 인 윤곽선이다.

Fig. 6에 나타낸 결과는 액상 2차원 모델에서처럼 온도 경계조건이 완전 전도가 일어난다고 봤을 때 나오는 결과이다. $x = 5$ 에서 아래와 위가 녹는점 $\theta = 0.5$ 로 고정되어서 계면이 로의 중앙에서 생긴다. 여기서 계면의 형태가 단열에서와 달리 휘어진 형태를 나타낸다. 이 현상은 액상이 응고되면서 발생하는 잠열 때문이다. 단열에서는 발생한

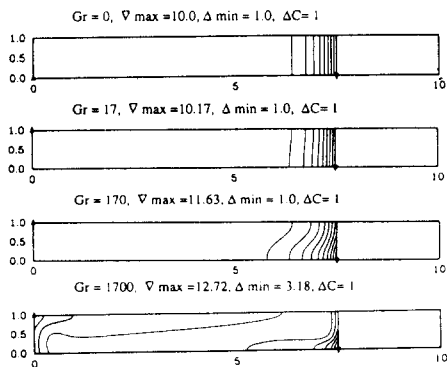
열이 그대로 보존되기 때문에 계면의 아래, 위, 중앙에서 온도 차이가 없다. 그렇지만 완전 전도에서는 아래와 위는 로의 고정된 온도 영역으로 응고에 의해서 발생한 열이 계속 빠져나가기 때문에 온도 차이가 생겨서 계면이 평평한 형태에서 벗어나게 된다. 그림에서 계면 근처에서 온도 분포가 휘어져서 나타나지만 높이 만큼 벗어난 지역에서는 휘어진 계면의 온도 분포가 영향을 미치지 못한다. 여기서 정의역의 무차원 이동 속도를 나타내는 Pe 는 0.00281이다. Pe 가 증가하면 계면은 더욱 휘게 되며 응고할 때 발생하는 잠열의 무차원 크기인 St 가 증가하여도 같은 결과를 보인다. 왜냐하면 모델링에서 사용한 경계조건에서 계면에서 발생하는 잠열의 크기는 $PeSt$ 에 비례하기 때문이다. 계면이 휘어져도 농도 윤곽선은 단열에서와 같이 1차원적 거동을 보이는 것을 알 수 있다. 이것은 처음 단열에서 평평하던 계면이 조금씩 휘어져 가는 경우를 생각해 보면 이해될 수



(a) Temperature

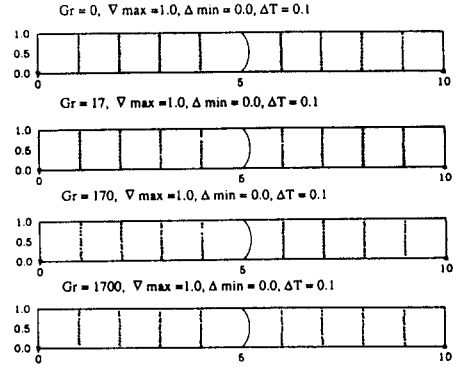


(b) Flow field

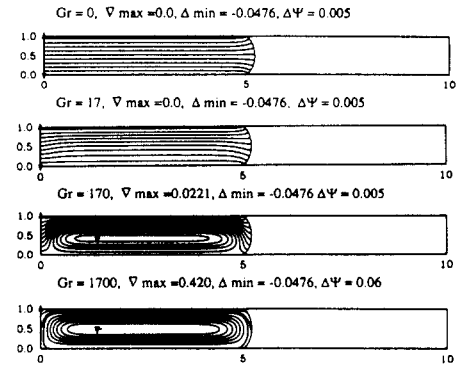


(c) Concentration field

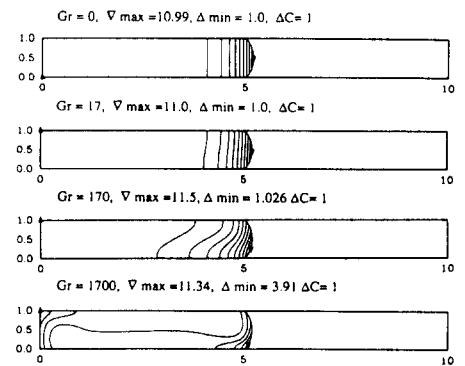
Fig. 5. (a) Temperature profiles, (b) streamlines and (c) solute distribution profiles from 2-dimensional model with adiabatic thermal boundary condition at $Pr = 0.059$, $St = 8.25$ and $Pe = 0.00281$.



(a) Temperature



(b) Flow field



(c) Concentration field

Fig. 6. (a) Temperature profiles, (b) streamlines and (c) solute distribution profiles from 2-dimensional model with completely conducting thermal boundary condition at $Pr = 0.059$, $St = 8.25$ and $Pe = 0.00281$. The thick lines in the melt phase of (c) correspond to $c = 5$.

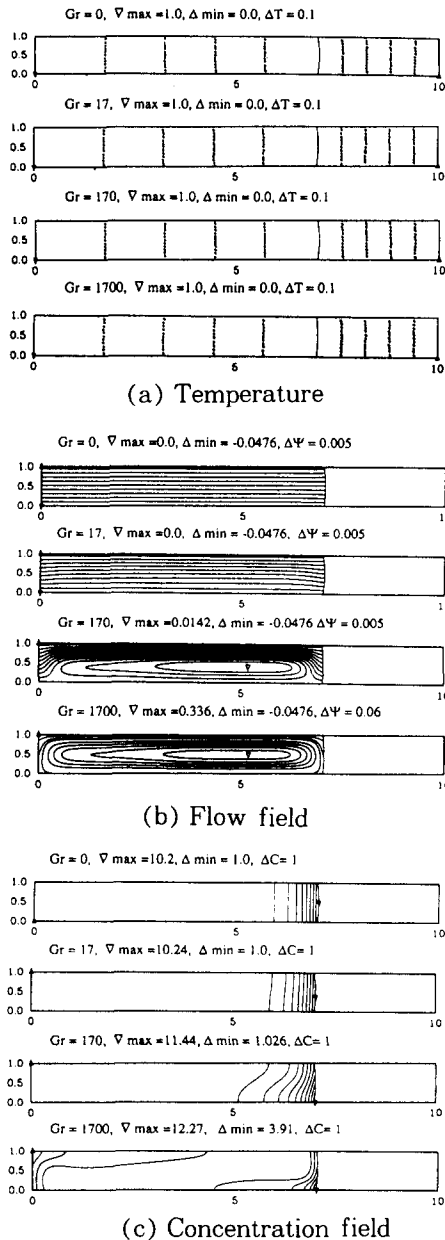


Fig. 7. (a) Temperature profiles, (b) streamlines and (c) solute distribution profiles from 2-dimensional PSSM with thermal boundary condition of $Bi_{max} = 0.03$ at $Pr = 0.059$, $St = 8.25$ and $Pe = 0.00281$. The thick lines in the melt phase correspond to $c = 5$.

있다. 또한 해석에 사용한 물질식에서 Sc 가 상당히 크기 때문에 확산에 의한 영향이 거의 나타나지 않고 대류에 의한 영향이 지배적임에서도 또한 유추해낼 수 있다. 물론 확산에 의한 영향도 그림을 자세히 보면 조금 나타남을 알 수 있다.

Fig. 7은 Bi_{max} 가 0.03으로 보트 주위에 온도 분포의 영향이 미칠 때 생기는 결과이다. 계면이 단열일 때보다는 왼쪽으로 이동해서 약간 휘어져 나타난다. 이때는 모든 거동이 앞에서 구한 두 경우의 중간적인 경향을 보임을 알 수 있다.

4.2. 3차원 정상 상태 모델

Fig. 8에 3차원 문제에서 구한 계면을 나타내었다. Pe 가 증가할수록 잠열의 영향이 증가하여 계면의 곡률이 증가함을 알 수 있다. 이때 온도 조건은 완전 전도의 조건을 사용했다.

Fig. 9에 $y = 0.5$ 인 단면에서 3차원 해석에서 얻은 농도 윤곽선과 2차원 해석에서 얻은 농도 윤곽선을 비교했다. $Gr = 1,700$ 에서 윤곽선을 비교하면 농도 윤곽선의 휨정도가 비슷하여 대류의 강도가 두 경우에서 유사함을 알 수 있다. Fig. 10에는 $y = 0.5$ 인 단면에서 3차원 해석에서 얻은 흐름 구조를 나타내었다.

Fig. 11에 Gr 에 따라 2차원 해석과 3차원 해석에서 얻은 수직 편석을 나타냈다. 대류 강도 증가에 따른 혼합의 효과가 강해지기 시작하는 최대점이 3차원 보다 2차원에서 먼저 나타난다. 계면이 휘는 정도가 2차원에서 더 크기 때문에 대류강도가 비슷하지만 최대값은 먼저 나타난 것으로 보인다.

5. 결 론

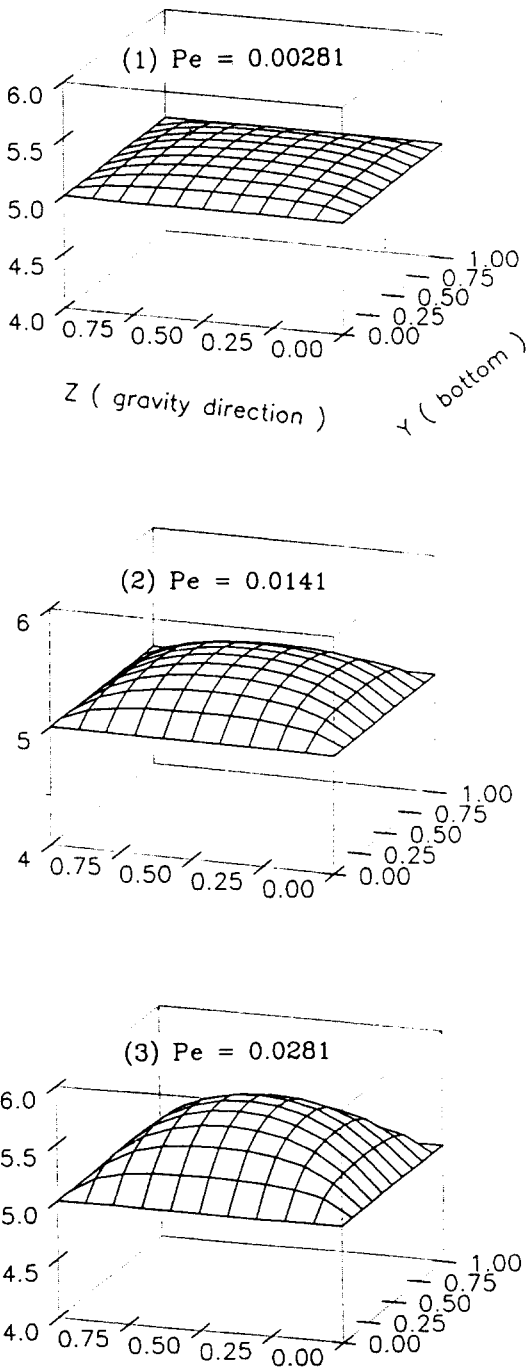


Fig. 8. 3-dimensional interface shape for $Gr = 0$ and $Pr = 0.059$.

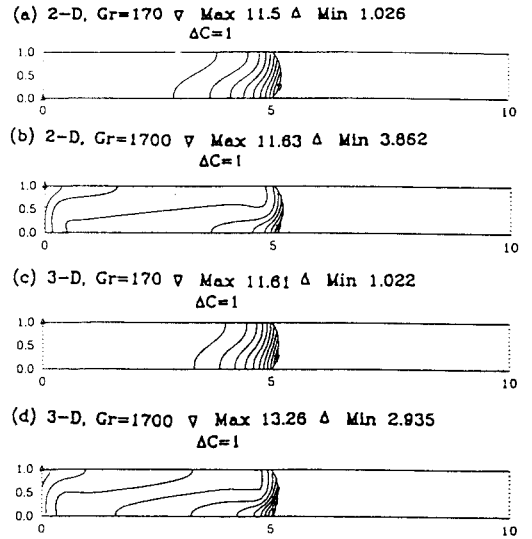


Fig. 9. Solute distribution profiles from 2- and 3-dimensional model with completely conducting thermal boundary condition at $Pr = 0.059$, $St = 8.25$ and $Pe = 0.00281$. (c) and (d) are in $x-z$ plane at cross section of $y = 0.5$. The thick lines in the melt phase correspond to $c = 5$.

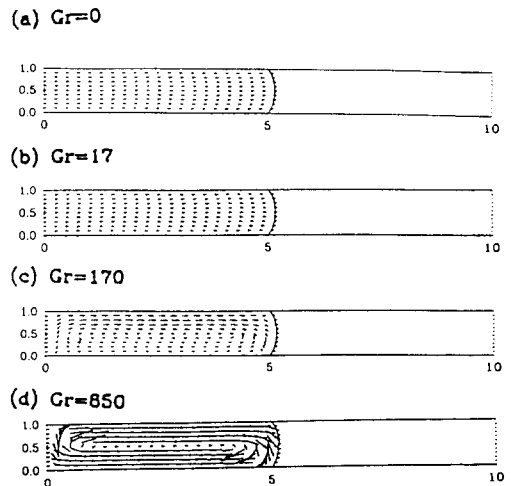


Fig. 10. Flow patterns at various Gr from 3-dimensional model in $x-z$ plane at cross section of $y = 0.5$.

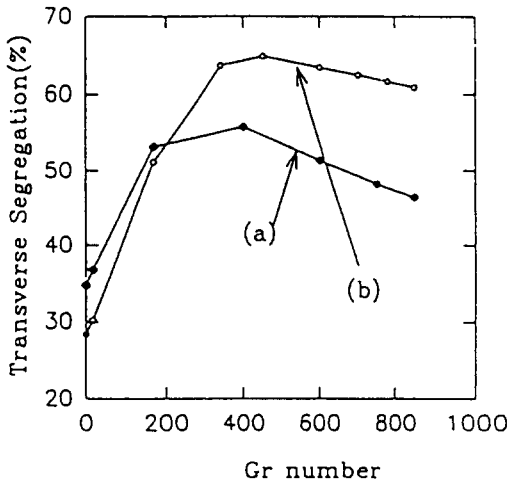


Fig. 11. Transverse segregation obtained from (a) 2- and (b) 3-dimensional model at $Pr = 0.059$, $Pe = 0.00281$ and $Sc = 42$.

수평브릿지만 시스템에 대하여 수학적 모델을 세우고 수치모사를 행하였다. 2차원 정상상태 모델에서는 고-액 계면의 형태는 단열 경계조건인 경우에는 평평하였으나 완전전도 경계조건인 경우에는 휘어지는 현상을 보였다. 보트와 로 사이에 열전달을 고려한 경우에는 고-액 계면이 단열 경계조건을 사용한 경우에 비하여 고상쪽으로 이동하였고, 휘어지는 현상을 보였다. 이 경우는 단열 경계조건과 완전 전도 경계조건을 적용한 결과의 중간적인 성질을 보임을 알 수 있었다. 3차원 정상상태 모델에서는 고-액 계면이 2차원 모델로부터 얻은 결과에 비하여 휨의 정도가 낮았고 흐름강도는 2차원 해석의 경우와 비슷하였다.

감사의 글

본 연구는 한국과학재단의 연구비 지원 (과제번호: 923-1000-002-2)에 의한 것으로 한국과학재단에 감사드립니다.

참고 문헌

- [1] S.M. Sze, VLSI Technology, 2nd ed., (McGraw-Hill, 1969) p. 85.
- [2] R.A. Brown, AIChE J. 34, (1988) 881.
- [3] M.J. Crochet, F.T. Geyling and J.J. Van Schaftingen, J. Crystal Growth 65 (1983) 166.
- [4] M.J. Crochet, F.T. Geyling and J.J. Van Schaftingen, Int. J. Num. Meth. Fluids 7 (1987) 29.
- [5] S. Dupont, J.M. Marchal, M.J. Crochet and F.T. Geyling, Int. J. Num. Meth. Fluids 7 (1987) 49.
- [6] P. Wouters, J.J. Van Schaftingen and M.J. Crochet, Int. J. Num. Meth. Fluids 7 (1987) 131.
- [7] P. Rhines and W.R. Young, J. Fluid Mech. 133 (1983) 133.
- [8] H. Matsushima and R. Viskanta, in : Collected Papers in Heat Transfer 1988, K.T. Yang, ed., (ASME, New York, 1988) p. 151.
- [9] H.S. Carslaw and J.C. Jaeger, Conduction of Heat in Solids, 2nd ed., (Oxford University Press, Oxford, 1959).
- [10] W.J. Silliman and L.E. Scriven, J. Comput. Phys. 34 (1980) 287.
- [11] H.M. Ettouney and R.A. Brown, J. Comput. Phys. 49 (1983) 118.