

< 논 문 >

수정된 부유띠결정성장법에서 결정봉의 회전이 유동 및 열전달에 미치는 효과

서정세*

(1996년 3월 7일 접수)

Effects of the Crystal Rotation on Heat Transfer and Fluid Flow in the Modified Floating-Zone Crystal Growth

Jeong-Se Suh

Key Words : Crystal Growth(결정성장), Floating-Zone(부유띠), Phase-Change(상변화),
Rotation(회전), Natural Convection(자연대류)

Abstract

A numerical analysis has been conducted to investigate a modified floating-zone crystal growth process in which most of the melt surface is covered with a heated ring. The crystal rod is not only pulled downward but rotated around its axisymmetric line during crystal growth process in order to produce the flat interface of crystal growth and the single crystal growth of NaNO₃ is considered in 6mm diameter. The present study is made from a full-equation-based analysis considering a pulling velocity in all of solid and liquid domains and both of solid-liquid interfaces are tracked simultaneously with a governing equation in each domain. Numerical results are mainly presented for the comparison of the surface shape of rotational crystal rod with that of no-rotational crystal rod and the effects of revolution speeds of the crystal rod. Results show that the rotation of crystal rod produces more its flat surface. In addition, the shape of crystal growth near the centerline is more concaved with the increase in the revolution speed of crystal rod. The flow pattern and temperature distribution is analyzed and presented in each case. As the pulling velocity of crystal rod is increasing, the free surface of the melt below the heated ring is enlarged due to the crystal interface migrating downward.

기 호 설 명	
C_p : 비열 ($J \cdot kg^{-1} \cdot ^\circ C^{-1}$)	r, z : 직교 좌표계 (m)
h : 엔탈피 ($J \cdot kg^{-1}$)	R : 반지름 (m)
h_{sf} : 용융잠열 ($J \cdot kg^{-1}$)	T_a : 대기온도 ($^\circ C$)
h_T : 열전달 계수 ($W \cdot m^{-2} \cdot ^\circ C^{-1}$)	T_c : 용재봉/결정봉의 끝단 온도 ($^\circ C$), 식 (10) ~ (11)
k : 열전도율 ($W \cdot m^{-1} \cdot ^\circ C^{-1}$)	T_f : 용융온도 ($^\circ C$)
p : 압력 (Pa)	T_R : 원통가열기 온도 ($^\circ C$)
	u, v, w : r, z, θ 방향의 속도성분 ($m \cdot s^{-1}$)
	V_i : 용재봉/결정봉의 이동속도 (인출 또는 결정

*회원, 경상대학교 기계공학과 항공기부품기술연구센터

성장속도) ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$)

그리스문자

- β : 열팽창 계수 ($^{\circ}\text{C}^{-1}$)
 γ : 표면장력 계수 ($\text{N}\cdot\text{m}^{-1}\cdot^{\circ}\text{C}^{-1}$)
 θ : 두차원 온도, $(T - T_f)/(T_R - T_f)$
 ε : 방사율
 μ : 점성 계수 ($\text{kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$)
 ξ, η : 변환좌표
 ρ : 밀도 ($\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$)
 σ : Stefan-Boltzmann 상수 ($\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-4}$)
 ω : 각속도
 Ω : 스윙, rw

하첨자

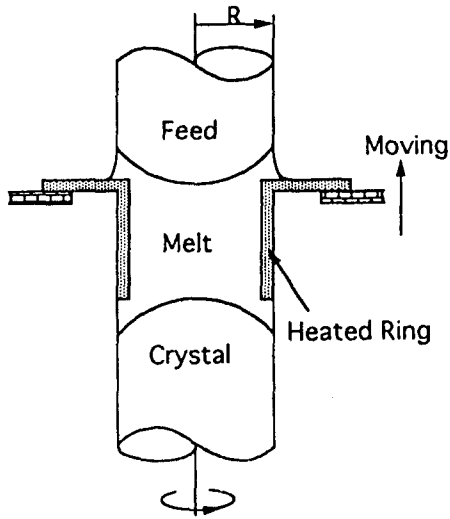
- f : 용융점
 l : 액상
 s : 고상

1. 서 론

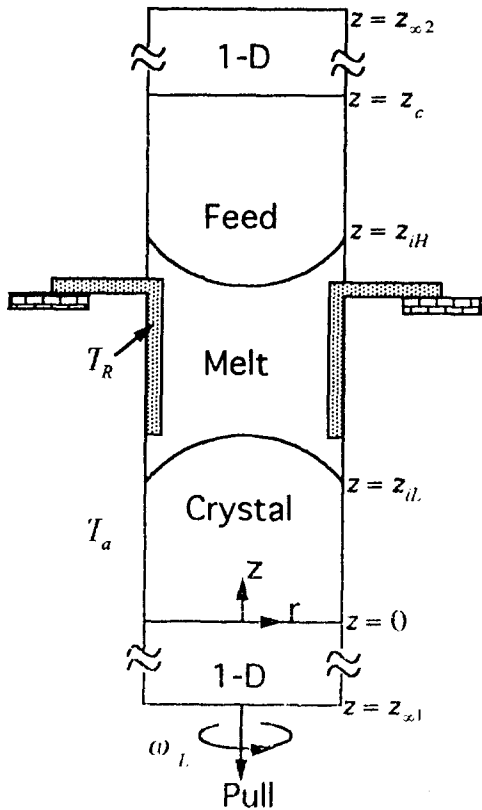
결정성장법은 반도체 분야에서 사용되는 실리콘 웨이프, 항공기 분야의 초합금 (superalloy), 광학 분야의 광학 모듈레이션, 복사 감지기, 적외선 센스, 음향분야의 음향 트랜스듀스, 의학분야 등에 이르기까지 실로 다양하게 이용되는 신소재를 만드는 데 사용되는 기술이다. 사용용도 및 분야에 따라 결정의 순도가 매우 높거나, 결정내 불순물이 균일하게 분포하며, 결손이나 줄무늬와 같은 결함이 없는 것 등을 요구하기도 한다. 지금까지 결정 성장공정에 대해 여러 가지 방법들이 개발되어 왔으며, 대표적인 것으로 초크랄스키 (Czochralski) 법, 보우트법 (boat method), 브릿지만 (Bridgman) 법과 부유띠 (floating-zone) 법 등이 있다. 특히 부유띠에 의한 결정성장법은 노 (crucible) 를 사용하지 않음으로 해서 다른 공정에 비해 결정내 용질의 분포를 더욱 균일하게 하거나, 높은 순도의 결정을 성장시키는 데 많이 이용되어 왔다. 부유띠결정 성장법은 용재봉과 결정봉 사이에 설치된 무선주파수 원형가열기 (radio-frequency ring heater) 를 이용하여 용융영역에 열을 가하면서, 상하로 이동시켜 결정을 성장시켜 나간다. 이때 대기와 접하는 용융 영역의 자유표면은 보통 S자 형태로 나타난다.

기존의 부유띠결정성장법에 대해 여러 분야에서

최근까지 연구가 활발히 진행되어 오고 있으며, 지금까지의 대표적 연구들을 조사하여 보면, Keller와 Muhlbauer⁽¹⁾이 실리콘 결정 성장에 관한 연구들을 종합적으로 정리하였으며, 이들 연구의 대부분이 실험에 기초하여 수행되었다. 이론적인 연구들은 초기에 대부분이 고액상경계면의 계산 없이 용융영역내의 열모세관 (thermocapillary) 유동에 초점을 맞추어 이루어졌으며, 대표적인 연구자로 Kobayashi⁽²⁾가 있다. 이후로 용융영역내 용질의 물질전달이 있는 경우,⁽³⁾ 용재봉/결정봉을 회전하는 경우,^(4,5) 전자기력과 자기장을 외부에서 걸었을 경우,⁽⁶⁾ 열모세관과 자연대류가 동시에 있는 경우⁽⁷⁾ 등에 대해 유동 및 열전달특성을 다루는 연구들이 이루어졌다. 한편, 에너지 및 힘 균형식으로부터 고/액 상경계면과 자유표면을 계산할 수 있는 식이 제시됨으로써 이에 대한 연구가 활기를 띠기 시작하였다. Kozhoukharova와 Slavchev⁽⁸⁾이 Young-Laplace 식을 이용함으로써 대기중에 노출된 액상표면을 자유표면으로 취급하였으며, Duranceau와 Brown⁽⁹⁾ 그리고 Young과 Chait^(10,11)는 용융영역내 전도만을 고려하여 고/액상경계면과 자유표면의 형상을 계산하였으며, Lan과 Kou⁽¹²⁾는 평평한 고/액상경계면의 형성을 위해 용재봉 및 결정봉을 회전시켰을 경우에 대해 연구하였다. 또한, 용융영역내에 발생하는 자연대류 및 열모세관 유동이 액상내의 용질을 불균일하게 하며, 원봉의 직경을 증가시키는 것을 어렵게 만드는 경향이 있다. 최근에 이러한 유동을 최대로 억제하기 위한 여러 가지 방법이 개발되고 있으며, 다양한 실험 및 해석적 연구가 이루어지고 있다. 대표적인 연구로 Muller⁽¹³⁾는 대류를 일으키는 인자인 중력을 최소화하기 위해 우주공간의 미소중력 (microgravity) 하에서 실험 및 해석을 시도하였으며, 이런 경우에 안정적인 자유표면의 형성으로 인해 원봉의 직경을 상당히 크게 할 수 있다고 보고하고 있다. 그러나 기존의 부유띠법은 넓은 액상의 자유표면으로 인해 여러 가지 한계를 가지고 있다. 즉 결정단면이 자유표면의 불안정으로 인해 불규칙적인 원형을 이루며, 결정봉의 표면이 거칠게 형성된다. 자유표면의 안정적인 형성을 위해 부유띠의 길이를 짧게 하면 결정봉의 직경은 크게 할 수 있겠지만, 생산성과 직결되는 결정봉의 인출속도를 높일 경우 용재봉과 결정봉 사이의 용융영역이 사라져 결정성장이 이루어지지 않을 수 있는 한계가 있다.⁽¹⁴⁾



(a) Schematic diagram



(b) Physical model for schematic diagram

Fig. 1 Schematic representation of a modified floating-zone crystal growth process in which most of the melt surface is covered with a heated ring

자유표면의 불안정에서 비롯된 기존의 부유띠법이 가지고 있는 단점들을 극복하기 위해 최근에 새로운 연구⁽¹⁵⁾가 이루어지고 있다. 즉 Fig. 1(a)와 같이 기존의 방법에서 사용하는 무선주파수 원형가열기 대신에 원통가열기를 사용하여 자유표면을 대부분 덮음으로써 이를 안정화시키는 수정된 부유띠법이 그것이다. 이러한 수정된 부유띠법은 결정의 표면을 매끄럽게 성장시킬 수 있다는 것과 용융영역에서 강하게 진동하는 열모세관유동의 발생을 최대한 억제함으로써 용융영역내의 유동을 보다 안정화시킬 수 있다는 장점을 가지고 있다. 그러나, 용융액과 원통가열기의 접촉을 고려해 화학적으로 안정된 물질에만 국한된다는 단점을 가지고 있지만, 최근의 자료조사⁽¹⁶⁾에서 여러 종류의 물질에 대해 이러한 방법으로 결정을 성장시킬 수 있음이 보고된 바 있다. 수정된 부유띠법에서 원통가열기를 사용하여 자유표면의 불안정성을 줄임으로써 기존의 부유띠법을 상당히 개선시켰음에도 불구하고, 균일한 결정성장에 요구되는 결정봉의 평평한 상경계면 형성에 관해서는 여전히 연구가 미흡한 점이 많다. 결정을 더욱 균일하게 성장시키기 위해 우선 용융영역내 특히, 결정봉과 용융면이 접하는 상경계면 근처에서의 온도를 균일하게 형성시켜 주는 것이 무엇보다 중요하다. 이를 위해 결정봉을 적절히 회전시켜 줌으로써 용융영역내에 활발한 회전대류를 유발시켜 결정성장면 근처의 온도를 균일하게 할 수도 있을 것이며, 이것이 본 연구를 착수하게 된 동기이기도 하다. 이러한 결정봉의 회전방법은 기존의 부유띠법에서는 이미 이용되고 있음이 보고된

Table 1 Physical properties of NaNO_3 ⁽¹⁵⁾ used in the present study.

$T_f = 306.8^\circ\text{C}$
$h_{sf} = 182 \times 10^3 \text{ J kg}^{-1}$
$k_s = 5.65 \times 10^{-1} + 33.5(T - 230) \times 10^{-5} \text{ W m}^{-1} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$
$k_l = 5.65 \times 10^{-1} + 47.7(T - T_f) \times 10^{-5} \text{ W m}^{-1} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$
$C_{ps} = C_{pl} = 1.255 \times 10^3 + 2.18(T - 100) \text{ J kg}^{-1}$
$\mu = 0.0302 \times 10^{-1} - 1.533 \times 10^{-4}(T - T_f) \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}$
$\rho_s = 2.11 \times 10^3 \text{ kg m}^{-3}$
$\rho_l = 1.904 \times 10^3 \text{ kg m}^{-3}$
$h_T = 9.0 \text{ W m}^{-2} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$
$\beta = 6.6 \times 10^{-4} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$
$\gamma = -0.056 \times 10^{-3} \text{ Nm}^{-1} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$
$\epsilon = 0.7$

바 있다.⁽¹²⁾

본 연구에서는 원통가열기와 화학적 반응이 없는 NaNO_3 (Table 1 참조)를 사용해, 수정된 부유띠결정성장법에서 균일한 결정성장이 이루어지기 위한 방안의 하나로 결정봉을 회전시켰을 경우에 용융영역내에 형성되는 유동장 및 열전달 특성, 결정성장면의 형상변화 등을 파악하고, 부가적으로 결정봉의 인출속도가 결정성장면에 미치는 영향에 대해 살펴보고자 한다.

2. 해석 모델

2.1 지배방정식 및 경계조건

본 연구에서 연구하고자 하는 수정된 부유띠결정성장법의 시스템에 대한 물리적 모델을 Fig. 1(b)에 개략적으로 나타내었다. 전체시스템은 반경 R 인 용재봉, 원통가열기, 결정봉이 중력방향으로 연속적으로 배열되어 있다. 원통가열기는 정지된 채 수직방향으로 설치되어 상변화물질의 용융온도 T_f 보다 높은 T_R 를 유지하고 있으며, 내부에 용융영역이 형성된다. 용재봉과 결정봉이 중력방향으로 일정한 속도 V_r 로 이동하면서 동시에 대칭축을 중심으로 회전한다. 본 연구를 보다 효과적으로 수행하기 위해 다음과 같은 가정을 도입함으로써 문제를 설정하고자 한다. 즉 (a) 용융영역내의 대류는 2차원 축대칭인 정상상태이며, 뉴턴 유체이고, 층류유동이다. (b) 물성치들은 밀도가 온도변화에 따라 Boussinesq 근사를 따른다는 것을 제외하고는 일정하다. (c) 용융영역의 형태는 원통가열기를 벗어난 자유표면에서도 역시 원통형태를 유지한다. 위의 가정들 중에서 (a)와 (b)는 일반적으로 기존의 연구를 통해 많은 검증이 이루어졌으나, (c)는 계산의 편의성을 위해 취해졌으며, 차지하는 비율이 매우 적어 계산결과에 거의 영향을 미치지 못할 것으로 여겨진다.⁽¹⁵⁾

본 연구의 해석은 전도열전달이 이루어지는 고상영역과 대류열전달이 이루어지는 액상영역에 대해 각각 행해진다. 따라서, 이를 위한 일반지배방정식을 직교좌표계에 대해 보존식 형태⁽¹⁷⁾로 나타내면

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r \rho u \phi - r \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(r \rho v \phi - r \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) = r S(r, z) \quad (1)$$

이다. 특히 액상내의 방위속도(w)방향 운동량방정

Table 2 Variables in the governing equation for the solid and liquid regions.

	ϕ	Γ	S
Solid	h_s	k_s/C_{ps}	0
Liquid	1	0	0
	u	μ	$-\partial p/\partial r - \mu u/r^2 + \rho_s \Omega^2/r^3$
	v	u	$-\partial p/\partial z + \rho_s g \beta (T - T_f)$
	Ω	μ	$-2\mu/r \cdot \partial \Omega/\partial r$
	h_l	k_l/C_{pl}	0

식의 경우 코리올리힘에 의한 수치적 불안정이 야기될 수 있으며, 이를 극복하기 위해 본 연구에서는 새로운 변수 $\Omega (\equiv r\omega = r^2\omega)$ 를 도입하여 구성한 방정식^(18,19)을 풀었다. 위의 식 (1)에서 ϕ 는 일반 중속변수이며, Γ 와 S 는 ϕ 에 따라 적절히 정의되는 계수이다. 고상과 액상영역의 연속방정식, 운동량방정식, 에너지방정식에 대해 Table 2에 이들을 정리해 놓았다. 본 연구에서 해석상 궁극적인 어려움은 고상과 액상영역의 형상이 불규칙한 데 있다. 따라서, 이러한 난점을 극복하기 위해 경계고착좌표계 $r=r(\xi, \eta)$, $z=z(\xi, \eta)$ 를 도입하였으며, 이를 이용해 식 (1)을 변환하면

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\rho U \phi - \frac{\alpha_\xi \Gamma}{h_\xi} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\rho V \phi - \frac{\alpha_\eta \Gamma}{h_\eta} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right) = \bar{J} S(\xi, \eta) - \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\beta_\xi \Gamma}{h_\xi} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right) - \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\beta_\eta \Gamma}{h_\eta} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right) \quad (2)$$

으로 된다. 위 식에서 나타나는 변환계수들은 기존의 문헌⁽²⁰⁾에서 참고할 수 있다.

한편 각 영역을 둘러싸는 경계면에 대해 사용된 조건들은 다음과 같다.

(1) 중심축 :

$$u = \frac{\partial v}{\partial r} = \Omega = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad (3)$$

(2) 고/액 상경계면 :

$$u = 0, \quad v = V_i, \quad \Omega = r^2 \omega_L, \quad T = T_f \quad (4)$$

$$F_s = F_i, \quad J_s = J_i \quad (5)$$

(3) 액상의 자유표면 :

$$u = 0, \quad \frac{\partial v}{\partial r} = -\frac{\gamma}{\mu} \frac{\partial T}{\partial z}, \quad \frac{\partial \Omega}{\partial r} = \frac{2\Omega}{r} \\ -k \frac{\partial T}{\partial r} = h_T (T - T_a) + \varepsilon \sigma (T^4 - T_a^4) \quad (6)$$

(4) 원통가열기면 :

$$u = v = \Omega = 0, \quad T = T_R \quad (7)$$

(5) 용재봉/결정봉의 표면 :

$$-k \frac{\partial T}{\partial r} = h_T (T - T_a) + \varepsilon \sigma (T^4 - T_a^4) \quad (8)$$

(6) 용재봉 또는 결정봉의 끝단 접합면 :

$$T = T_c \quad (9)$$

여기서, F와 J는 각각 경계면에서의 질량유속과 열유속을, ω_L 은 결정봉의 각속도를 각각 나타내며, γ 와 h_T 는 표면장력계수 및 열전달계수를, T_a 와 T_R 는 대기온도와 원통가열기의 벽면 평균온도를 각각 나타낸다. 특히, 용재봉/결정봉 끝단에서의 온도를 나타내는 T_c 는 기존의 연구⁽¹⁵⁾에서와 같이 용융영역에 비해 용재봉과 결정봉이 충분히 길다고 하는 경우에 대해 결정하였으며, 뒤에서 결정 과정에 대해 자세히 언급하기로 하겠다.

2.2 해석 방법

계산은 크게 세 개의 영역 즉, 고상영역인 용재봉과 결정봉 그리고 액상영역인 용융영역으로 나누어져 이루어졌다. 그러나, 용재봉과 결정봉에 대해서는 2차원적 전도열전달이 주로 이루어지겠지만 용융영역으로부터 충분히 떨어진 용재봉 및 결정봉의 끝단 부위에서는 길이방향으로 거의 1차원적인 열전달(반경방향으로 균일한 온도분포)이 이루어질 것으로 예상된다. 따라서 계산량을 줄이기 위해 용재봉과 결정봉에 대해 각각 1차원과 2차원적으로 계산할 수 있는 부분을 분리하여 처리하였으며, 여러번의 계산상 시행착오를 거친 결과 본 연구에서 취급하고 있는 작은 반경 즉, $R=3\text{mm}$ 인 경우에는 용재봉과 결정봉을 각각 $40R$ 의 길이 내에서 2차원적으로 처리하고, 그 외의 바깥 부분에 대해서는 1차원적으로 처리하는 것이 충분하다는 것을 알았으며, 2차원적으로 처리하는 길이를 달리한다고 해도 봉 내의 온도변화가 거의 없음을 확인하였다. 한편, 본 연구에서는 용재봉과 결정봉에서 1차원적으로 처리할 바깥부분의 길이를 각각 2차원적으로 처리되는 봉길이의 20배(즉, $800R$)로 설정하여 계산하였다. 1차원적 열전달방정식은

$$\rho_s V_s C_p \frac{dT}{dz} - \frac{d}{dz} \left(k \frac{dT}{dz} \right)$$

$$= -\frac{2}{R} [h_T (T - T_a) + \varepsilon \sigma (T^4 - T_a^4)] \quad (10)$$

용재봉과 결정봉 각각에서 1차원과 2차원 열전달 방정식이 접합부($z=0$, $z=z_c$)에서 열플럭스와 온도가 일치하도록 접합되며, 이것에 따라 접합부 온도 T_c 를 결정하여야 한다. 즉,

$$\int_0^R -k \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=0 \text{ or } z=z_c} \cdot 2\pi r dr \\ = -k \frac{dT}{dz} \Big|_{z=0 \text{ or } z=z_c} \cdot \pi R^2 \quad (11)$$

이다. 계산과정에서 위의 식 (11)을 만족시키기 위해 계산의 반복이 불가피하다. 먼저 임의의 접합부 온도 T_c 에서 식 (9)의 조건을 이용해 용재봉 및 결정봉의 안쪽영역 즉, 2차원 열전도방식으로부터 온도를 구한 후 식 (11)의 왼쪽 부분을 계산하여 오른쪽값을 구하고, 이를 이용하여 1차원 열전달방정식 (10)으로부터 바깥쪽 영역의 온도를 구한다. 이렇게 구한 바깥쪽 영역으로부터 접합면의 온도를 새로운 접합부 온도 T_c 로 취한다. 이와 같은 과정을 접합부의 온도가 수렴할 때까지 반복하여 계산한다. 이때 식 (10)을 구하는 과정에서 바깥쪽 영역의 끝단($z=z_{o1}$ 또는 z_{o2})은 용융영역으로부터 충분히 떨어져 있어 이미 길이방향으로 온도의 변화가 거의 없을 것으로 예상되며, 따라서 경계조건으로 $dT/dz=0$ 을 취하였다.

한편, 2차원 열전달방정식이 적용되는 영역의 계산격자계는 고상영역과 액상영역에 대해 각각 ξ 방향으로 43개, η 방향으로 41개의 격자점들로 불균일하게 구성하였으며, 격자계를 다소 달리하여도 계산결과에 크게 영향을 미치지 못함을 확인하였다. 각 격자점들은 다음의 식을 통해 실제영역에 일대일로 사상된다.

$$r = R\xi \quad (0 \leq \xi \leq 1) \\ z = \begin{cases} z_{iL} \eta & (0 \leq \eta < 1) \\ z_{iL} + (\eta - 1)(z_{iH} - z_{iL}) & (1 \leq \eta < 2) \\ z_{iH} + (\eta - 2)(z_c - z_{iH}) & (2 \leq \eta \leq 3) \end{cases} \quad (12)$$

이때 속도 및 온도의 변화가 심한 상경계면과 용기벽면 근처에는 격자점들을 좀더 조밀하게 배치하였다. 속도장에서 곡률항은 국소고정좌표계⁽²¹⁾를 도입하여 처리하였으며, 속도와 압력은 SIMPLER 알고리즘 방식⁽¹⁷⁾으로 서로 보정하였다. 계산은 먼저 임의로 액상영역이 $1.2R$ 의 길이로 형성되었다고 가정하고 시작하였으며, 이는 여러번의 계산과

정에서 결과에 전혀 영향을 미치지 못함을 확인하였다. 또한, 상경계의 이동증분은 수렴성을 고려하여 적절히 조절하였으며, 열플럭스 균형식 (5)이 최대 0.01% 내에서 만족하였을 때 상경계면의 위치를 확정하였다.

3. 계산결과 및 토의

본 연구의 계산결과는 결정봉 반경 $R=3\text{mm}$ 에서 길이 3mm, 두께 0.51mm인 원통가열기의 온도를 상부 325°C 하부 321°C 사이에 선형적으로 분포시키고, 대기온도를 $T_a=30^\circ\text{C}$ 로 한 경우에 대해 주로 제시하였다. 본 연구의 주된 목적은 결정봉의 회전효과를 알아보는 것이며, 부가적으로 결정봉 회전시 인출속도가 결정성장면의 형상에 미치는 영향을 파악하는 것이다. 이를 위해, 본 연구의 수치적 방법에 의한 계산결과에 대해 검증이 이루어지고, 결정봉을 100, 150 그리고 200rpm으로 회전한 경우의 결정성장면의 변화, 용융영역내의 유동장과 온도장의 변화를 알아보며, 인출속도를 5배, 10배로 증가시킨 경우에 결정성장면의 변화 등을 알아보고자 한다.

먼저, 본 연구에서 채택하고 있는 수치적 해석방법에 대한 검증을 위해, 수정된 결정성장법에서 결정봉이 회전하지 않은 채 인출만 되는 경우를 제시한 Lan과 Kou⁽¹⁵⁾의 연구결과들 중에서 대표적인 경우 즉, $V_i=-1.4\times 10^{-6}\text{m/s}$, $T_a=25^\circ\text{C}$ 의 결과를 본 연구의 결과와 비교하여 Fig. 2에 나타내었다. 그림에서 실선은 본 연구의 결과를, 점선은 Lan과 Kou⁽¹⁵⁾의 결과를 각각 나타낸다. 본 연구의 결과가 원통가열기의 상부와 하부에 위치한 용재봉면과 결정성장면에서 기존의 결과⁽¹⁵⁾와 서로 잘 일치하고 있다. 특히, 용재봉면의 경우에는 매우 잘 일치하는 것으로 나타나고 있으며, 결정성장면에서도 원통가열기 근처에서 거의 일치하고 있다. 그러나 결정성장면의 중심축 근처와 자유표면 근처에서 적지만 다소 차이가 나고 있으며, 이는 계산상 격자계의 분포 차이, 수렴성 정도의 차이 등에서 비롯된 것으로 여겨진다. 이러한 두 결과에 대해 엄밀한 정확도 측면에서 Lan과 Kou⁽¹⁵⁾ 역시 계산결과를 실험결과와 비교하여 제시하고 있지 않아 서로를 비교하여 판단하기가 매우 어렵다. 이러한 미소한 차이에도 불구하고 상경계면의 형상이 전체적으로 일치하고 있으며, 이로부터 본 연구의 수치적

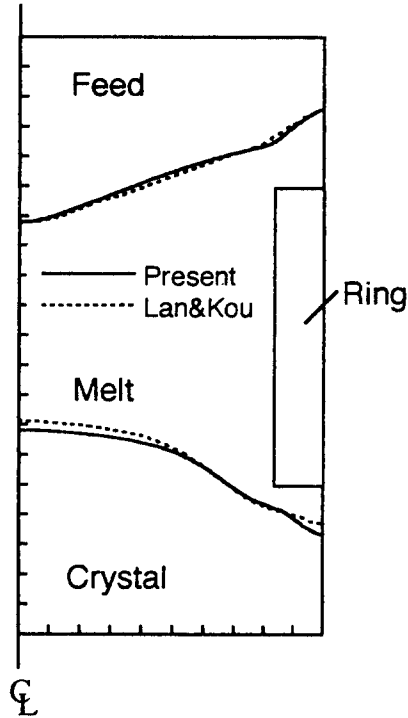


Fig. 2 The shapes of the interface for no-rotational crystal growth in $R=3\times 10^{-3}\text{m}$, $T_a=25^\circ\text{C}$, $V_i=-1.4\times 10^{-6}\text{m/s}$. Numerical results from ref. (16) (dotted lines) and from this study (solid lines).

해석방법으로 매우 합리적인 연구결과를 결정봉이 회전하는 경우에 대해 얻을 수 있을 것으로 기대된다.

3.1 결정봉이 회전 및 회전하지 않는 경우의 비교

Fig. 3은 결정봉이 회전하지 않은 채 단순히 인출만 되는 경우에 대해 용융영역내의 온도장 및 유동장을 나타내었다. 그림에서 좌측은 $0.1(T_R - T_f)$ 간격의 등온선을, 우측은 유동장을 각각 나타내며, 용융영역 좌우측 표면의 블록은 원통가열기를 나타낸다. 그림의 상측부에는 용재봉이, 하측부에는 결정봉이 위치하며, 따라서 상부 경계면은 용재봉/용융영역의 고액 상경계를, 하부 경계면은 결정봉/용융영역의 고액 상경계를 각각 나타낸다. 특히, 좌측의 상단과 하단은 용재봉과 결정봉내의 온도분포를 나타낸 것이며, 전도 열전달에 의한 일반적인 원봉내의 온도분포와 같음을 확인할 수 있

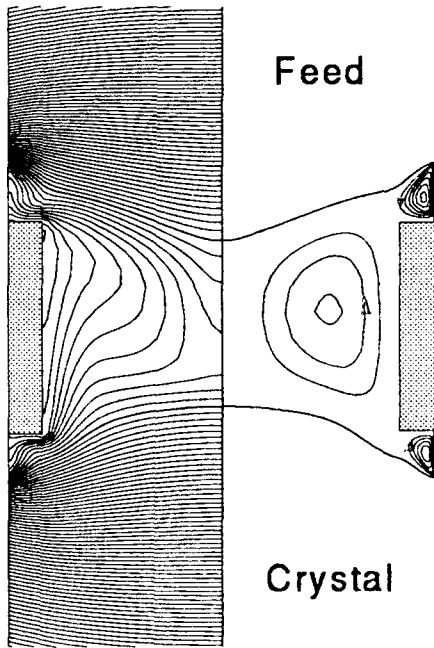


Fig. 3 Contour plots for isotherms (left) and stream lines (right) for no-rotational crystal growth in $R=3 \times 10^{-3}\text{m}$, $T_a=30^\circ\text{C}$, $V_i=-1.4 \times 10^{-6}\text{m/s}$.

다. 본 그림의 표기법은 이후에 제시되는 그림에서도 특별한 언급이 없으면 그대로 적용된다. 먼저 유동장의 형태를 살펴보면, 용융영역내부에 커다란 주유동셀이 형성되어 있으며, 원통가열기 상하에 각각 작은 유동셀이 형성되어 있다. 따라서, 가열기 내부쪽으로는 고액 상경계면은 주로 중심부에 위치한 주유동셀의 영향을 받을 것이며, 가열기쪽으로는 고액 상경계면은 상하에 형성된 작은 유동셀의 영향을 받을 것이다. 가열기 내부의 주유동셀은 원통가열기에 의한 자연대류에서 비롯된 것이다. 반면, 원통가열기의 상하부에 서로 다른 방향으로 강하게 형성된 유동셀은 대기와 접하는 액상의 경계면에서 길이방향 온도변화에 따른 표면장력의 변화로 인해 발생하는 열모세관력으로부터 비롯된 것이다. 가열기 상하부의 유동셀을 자세히 살펴보면 상부의 유동셀이 훨씬 잘 발달되어 있다. 이것은 하부의 유동셀이 가열기를 위쪽으로 하고 상경계를 아래쪽으로 하는 열적으로 안정화된 위치에서 형성됨으로써 다만 열모세관력에 의존하는 반면, 상부 유동셀은 열모세관력뿐만 아니라 가열기를 아래쪽으로 두어 열적으로 불안정한 위치에서

형성되면서 유동이 더욱 활성화되는 데 기인하는 것이다. 온도장의 분포를 보면 고액 상경계면과 가까운 거리에 위치한 원통가열기 상하부에서 온도의 변화가 심하게 변하며, 특히 대기에 접하고 있는 자유표면에서 온도가 가열기로부터 고액 상경계면으로 길이방향을 따라 변하고 있음을 알 수 있다. 이러한 자유표면에서의 온도형태는 표면장력에 의한 열모세관 유동을 일으키는 요인이 되는 것이다. 고액상경계면의 형상을 보면 전반적으로 상하층부 모두에서 중심축으로 갈수록 중심부로 접근하고 있으며, 그 정도가 하층 상경계면에 비해 상층 상경계면에서 크다. 이는 내부에 형성된 자연대류의 방향이 중심축 근처에서 상부로부터 하부로 이루어짐으로 해서, 상부에서는 가열기의 열이 상경계면으로 전달되는 것을 유동이 방해하고 있는 반면, 하부에서는 상경계면으로의 열전달을 유동이 돕고 있는 데서 비롯된 것이며, 이러한 현상을 온도장의 분포에서도 확인할 수 있다. 결정봉의 성장에 결정적 영향을 미치는 하층부 상경계면을 보면, 비록 상층부보다 곡률이 적다 할지라도 중심부쪽이 올라간 비교적 큰 곡률형태를 보이고 있으며, 이것은 균일한 결정봉 성장에 좋지 않은 영향을 미칠 것임은 분명하다. 이를 극복하기 위한 방안의 하나로 결정봉이 회전하는 경우를 알아보도록 하자.

Fig. 4는 결정봉을 150rpm으로 회전시키는 경우의 유동장 및 온도장을 나타낸 것이다. 결정봉을 회전시키지 않은 경우인 **Fig. 3**과 비교하여 보았을 때 결정성장면의 형상이 상당히 다르다는 것을 알 수 있다. 즉, 중심축 근처에서 결정성장면이 위로 올라간 **Fig. 3**의 경우와는 달리 오히려 아래로 내려온 반대방향의 곡률을 가지고 있을뿐만 아니라 곡률도 비교적 완만한 형태를 보이고 있다. 이러한 결정성장면의 형태는 **Fig. 3**의 경우에 비해 상당히 개선된 결과이다. 결정성장면의 형태를 바꾸게 된 요인들을 분석하기 위해 먼저 유동장을 보면, 중심부에 형성된 주유동셀이 상당히 다른 양상을 보이고 있다. 즉, 주유동셀의 중심이 결정봉의 회전으로 인해 하부 바깥 부위로 밀려 위치하고 있으며, 강도가 상대적으로 향상되었다. 주유동셀의 강화는 **Fig. 3**에서 언급한 바 있듯이 가열기로부터 중심축 근처의 결정성장면으로 열전달을 촉진시키는 결과를 가져오게 되며, 이곳의 결정성장면을 아래로 밀어내게 된다. 이러한 현상을 온도장에서도 확인할 수 있다. 즉, **Fig. 3**의 경우에 비해 결정성장면 근

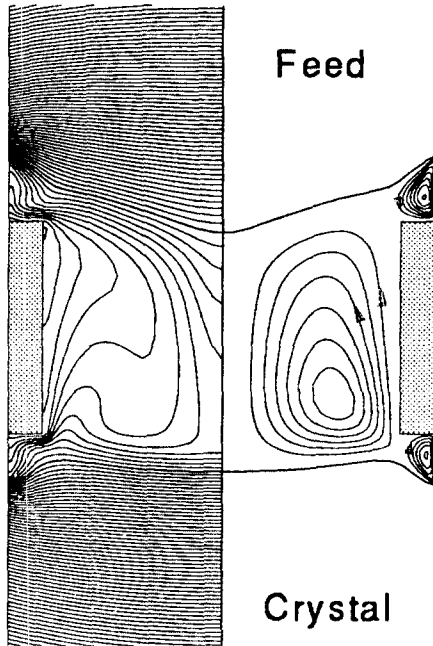


Fig. 4 Contour plots for isotherms (left) and stream lines (right) for rotational crystal growth with $\omega_L=150\text{rpm}$ in $R=3\times 10^{-3}\text{m}$, $T_a=30^\circ\text{C}$, $V_i=-1.4\times 10^{-6}\text{m/s}$.

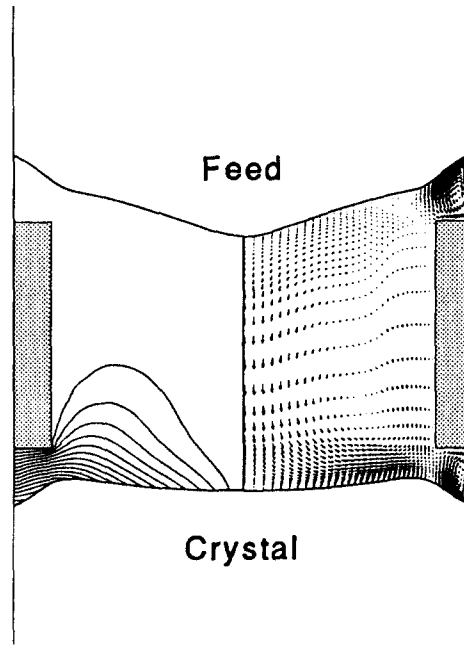


Fig. 5 Contour plots for iso-azimuthal velocity lines (left) and velocity distributions (right) for rotational crystal growth with $\omega_L=150\text{rpm}$ in $R=3\times 10^{-3}\text{m}$, $T_a=30^\circ\text{C}$, $V_i=-1.4\times 10^{-6}\text{m/s}$.

처에서 평평한 등온선이 형성되어 있다. 그러나, 원통가열기 상하에 형성된 유동셀에는 거의 변화가 없으며, 결정봉의 회전이 이들 유동셀에 큰 영향을 주지 못하는 것으로 생각된다. 결정봉 회전으로 인한 유동장의 변화를 보다 명확히 알아보기 위해, Fig. 5에 속도장(오른쪽)과 등방위속도(w)의 분포(왼쪽)를 나타내었다. 속도장에서 결정봉의 회전으로부터 비롯된 원심력에 의해 반경방향 속도변화가 결정성장면 중심부 근처에서 뚜렷이 증가하여 나타나고 있음을 확인할 수 있다. 이는 중심부 결정성장면에서 자연대류에 의한 주유동셀의 회전방향과 원심력의 방향이 바깥방향으로 일치함으로써 비롯된 것이다. 그러나, 원통가열기 밑에 형성된 유동셀이 결정봉의 회전영향을 거의 받지 않고 있는 것은 열모세관력에 의한 유동셀의 방향과 원심력의 방향이 서로 달라 상쇄됨으로써 주로 열모세관력에 의해 형성된 우세한 유동셀을 원심력이 극복하지 못한 데 기인하고 있음을 속도장에서 알 수 있다. 등방위속도 분포에서도 고정된 원통가열기로 인해 결정봉의 회전효과가 원통가열기 밑의 유동셀에서는 상대적으로 크게 영향을 미치지 못하고 있음을

확인할 수 있다. 그러나, 주유동셀이 가열기 밑을 파고들면서 가열기 하부에 형성된 유동셀을 다소 활성화시키고 있음을 속도장에서 알 수 있으며, 결정봉이 회전하지 않는 경우에 비해 하부 유동셀의 영역이 좀더 넓어졌다. 한편, 등방위속도 분포를 통해 결정봉의 회전효과가 상부의 용재봉면에 거의 영향을 미치지 못하고 있음을 알 수 있다. 이는 결정봉 회전이 상부 상경계면의 형태변화에 거의 영향을 미치지 못함을 의미하며, Fig. 3과 Fig. 4의 상부 상경계면 형태의 비교를 통해 이를 확인할 수 있다.

3.2 결정봉 회전속도의 영향

결정봉의 회전이 결정성장면의 형태에 상당히 큰 영향을 보이고 있음을 150rpm으로 회전하는 경우를 나타내는 Fig. 4를 통해 이미 확인한 바 있다. 그러면 회전속도가 결정성장면의 형태에 미치는 영향을 알아보기 위해, 먼저 100rpm으로 결정봉의 회전속도가 줄어든 경우를 Fig. 6에 나타내었다. 유동장을 보면 결정봉 회전속도가 150rpm에 비해 줄어든 만큼 원심력이 줄어들어 주유동셀의 중심이

바깥 하부로 치우치는 현상이 비교적 적게 나타나고 있으며, 강도가 약화되었다. 이는 중심부 결정성장면의 형상에 영향을 주는 주유동셀의 역할, 즉 가열기의 열을 상부에서 하부로 전달시키는 정도가 줄어드는 것을 의미하며, 따라서 150rpm에 비해 중심축 근처의 결정성장면이 전반적으로 위로 올라가면서 평평한 결정면을 이루고 있다. 그러나, 가열기 하부의 유동셀에서는 변화가 거의 없으며, 주유동셀의 최외곽에 의해 150rpm에 비해 서로가 거의 영향을 주지 못하고 있다. 이러한 유동장에 부합하여 중심부 결정성장면 근처의 등온선이 비교적 평평하게 형성되어 있으며, 이는 결정면 성장에 상당히 좋은 영향을 줄 것으로 기대된다.

한편, 결정봉이 150rpm보다 빠르게 회전하는 200rpm의 경우를 Fig. 7에 나타내었다. 지금까지 앞에서 유동장에 대해 논의한 현상들이 Fig. 7에서 더욱 뚜렷하게 나타나고 있다. 즉, 원심력의 영향을 받는 주유동셀의 발달이 두드러지게 나타나고 있으며, 주유동셀이 가열기 밑을 파고들어 여기에 형성되어 있는 작은 유동셀을 압박하면서 더욱 활발하게 상호작용을 하고 있다. 주유동셀의 발달은

전술한 바와 같이 중심부 결정봉면을 아래로 밀어내는 것을 의미하며, 150rpm에 비해 중심부 상경계면이 아래로 처져 있다. 결국 이러한 일련의 결과로부터 결정봉의 회전속도가 증가할수록 상경계면의 처짐이 커질 것으로 예상된다. 따라서, 지나친 상경계면의 처짐이 오히려 결정성장면 형상을 더욱 불규칙하게 할 수 있으며, 양질의 결정성장면 형성을 위해 결정봉의 회전속도를 적절히 조절하는 것이 필요하다는 것을 알 수 있다.

3.3 결정봉 인출속도의 영향

지금까지 결정봉의 인출속도가 $V_i = -1.4 \times 10^{-6}$ m/s로 일정한 경우에 대해 결정봉의 회전이 미치는 영향들을 알아보았다. 이번에는 결정봉의 생산성에 직결되는 인출속도의 영향을 알아보기 위해, 결정봉이 일정한 속도 100rpm으로 회전하고 있을 때 결정봉의 인출속도를 5배 ($V_i = -7.0 \times 10^{-6}$ m/s), 10배 ($V_i = -14.0 \times 10^{-6}$ m/s)로 증가시킨 경우에 대해 상경계면의 변화를 Fig. 8에 나타내었다. 그림에서 $V_i = -1.4 \times 10^{-6}$ m/s로 한 실선의 경우에 대해 인출속도를 5배, 10배로 증가시킨 경우를 각

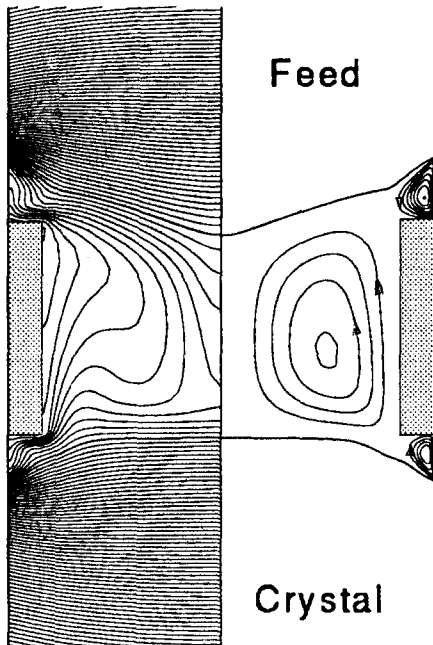


Fig. 6 Contour plots for isotherms (left) and stream lines (right) for rotational crystal growth with $\omega_L = 100$ rpm in $R = 3 \times 10^{-3}$ m, $T_a = 30^\circ\text{C}$, $V_i = -1.4 \times 10^{-6}$ m/s.

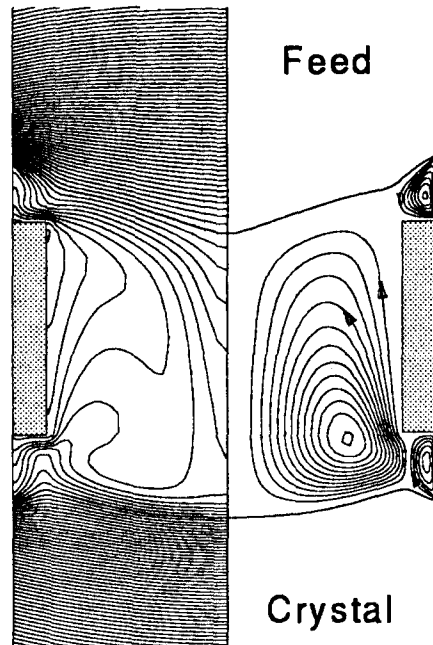


Fig. 7 Contour plots for isotherms (left) and stream lines (right) for rotational crystal growth with $\omega_L = 200$ rpm in $R = 3 \times 10^{-3}$ m, $T_a = 30^\circ\text{C}$, $V_i = -1.4 \times 10^{-6}$ m/s.

각 채선과 점선으로 나타내었다. 먼저, 결정성장면(가열기 아래부분)을 보면 인출속도가 증가할수록 가열기 아래로 더욱 밀려 내려가서 형성되고 있으며, 결정성장면의 형상이 상당히 다르다. 즉, 인출속도가 느릴 때는 결정성장면이 중심축 근처에서 평평하고 자유표면으로 갈수록 아래로 처지는 형태를 보이는 반면, 인출속도가 빨라질수록 중심축 근처에서 오히려 아래로 더욱 처지는 경향을 보이고 있다. 그리고, 자유표면과 중심축 근처의 결정성장면의 처짐 정도를 비교하여 보면 인출속도가 클수록 서로의 차이가 적어지는 결과를 보이고 있다. 한편, 인출속도가 증가할수록 결정성장면이 전체적으로 아래로 처지면서 가열기 아래의 자유표면이 증가하고 있으며, 이는 자유표면의 불안정성을 높일 수도 있다. 이러한 면에서 지나친 인출속도의 증가는 바람직하지 않을 수도 있다. 또한 용재봉면의 변화를 보면 인출속도가 증가할수록 결정성장면의 거동과는 달리 전체적으로 중심축 부근에서 처지고 자유표면에서 올라가는 경향이 더욱 뚜렷하게 나타나고 있다. 용재봉면의 처짐 정도는 인출속도

가 증가할수록 중심부에서 크게 나타나고 있으며, 가열기 바로 위에서는 가열기로 인해 처지는 정도가 상대적으로 적게 나타나고 있다. 인출속도의 증가에 따른 가열기 위에서의 용재봉면의 처짐이 자유표면의 감소를 가져오게 되어, 자유표면이 다소 안정화될 수 있을 것이다. 그러나, 인출속도가 증가할수록 가열기 상하의 자유표면이 전체적으로 증가하여, 결과적으로 자유표면의 불안정성이 증가하게 된다.

4. 결 론

본 연구에서는 수정된 부유떠결정성장법에서 결정봉을 회전시켰을 때 용융영역내 형성되는 유동장 및 열전달 특성, 결정성장면의 형상변화 등을 파악하고자 이를 수치적으로 해석하였다. 수치해석은 용재봉, 용융영역, 결정봉으로 나누어 지배방정식을 적용하였으며, 특히 결정성장면과 용재봉면의 위치가 반복계산을 통해 동시에 결정되었다. 본 연구에서 취한 수치적 해석방법의 검증에서 계산결과가 기존의 연구결과⁽¹⁵⁾와의 매우 잘 일치하였다. 연구결과는 주로 결정봉이 회전하지 않는 경우와 회전하는 경우에 대해 서로 비교되었으며, 결정봉이 회전하는 경우에 회전속도의 변화가 결정성장면에 미치는 영향, 일정한 회전속도에서 결정봉의 인출속도가 미치는 영향 등에 관해 제시되었다. 결정봉이 회전하지 않는 경우에는 중심부에 형성된 주유동셀이 자연대류에 의해 형성됨으로 해서 결정성장면이 중심부에서 곡률이 심한 즉, 위로 올라간 형태로 나타났으나, 결정봉을 회전하였을 때는 주유동셀이 결정성장면에서 발생한 원심력에 의해 강하게 발달하면서 가열기의 열을 결정성장면으로 전달하는 것을 촉진시켜 중심부의 결정성장면을 아래로 후퇴시키면서 중심부에서 완만한 곡률, 즉 보다 평평한 결정성장면을 형성하였다. 결국 결정봉의 회전이 균일한 결정성장을 위한 훨씬 개선된 결과를 가져왔다. 결정봉의 회전속도를 변화시키면서 결정성장면의 형태를 파악한 결과, 회전속도를 증가시킬수록 중심부의 결정성장면이 아래로 처지는 경향이 더욱 뚜렷하게 나타났으며, 이는 지나친 결정봉의 회전이 균일한 결정성장을 해칠 수도 있음을 의미한다. 결정봉 회전에 따른 유동장의 변화를 보면, 회전속도가 빠를수록 주유동셀이 강도가 커져 원통가열기 아래로 파고들면서 열모세관력에 의

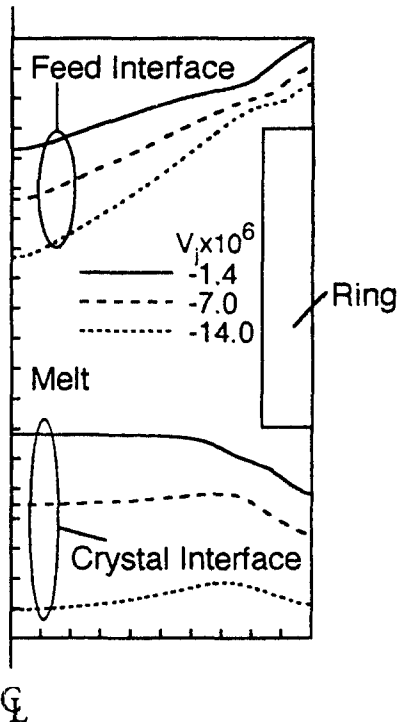


Fig. 8 The shapes of the interface at various pulling velocities for rotational crystal growth with $\omega_L=100\text{rpm}$ in $R=3 \times 10^{-3}\text{m}$, $T_a=25^\circ\text{C}$.

해 형성된 작은 유동셀을 압박하면서 셀의 강도를 강화시켰으나, 결정봉의 회전이 열모세관 유동셀에는 직접적으로 큰 영향을 미치지지는 못하였다. 결정봉의 회전으로 발생한 방위각방향 속도의 확산이 고정된 가열기와 용재봉으로 인해 용융영역내에 잘 이루어지지 않았으며, 결정봉의 회전효과가 용재봉면의 형상에 거의 영향을 미치지 못하였다. 한편, 결정봉의 인출속도가 증가할수록 결정성장면이 전체적으로 아래로 내려가고, 중심축 부근의 결정성장면이 상대적으로 아래로 많이 처짐으로써 자유표면 근처의 결정성장면과 차이가 줄어들었으며, 용재봉면에서는 중심축 근처의 처짐이 상대적으로 크게 나타났다. 또한, 인출속도가 증가할수록 자유표면의 면적은 가열기 상부에서 줄어든 반면, 가열기 하부에서는 크게 늘어나 전체적으로 커졌다.

후 기

본 연구는 1995년도 한국학술진흥재단의 공모과제의 연구비에 의하여 연구되었으며, 이에 감사드립니다.

참고문헌

- (1) Keller, W. and Muhlbauer, A., 1981, *Floating Zone Silicon*, Dekker, New York.
- (2) Kobayashi, N., 1984, *J. Crystal Growth*, Vol. 66, pp. 63.
- (3) Harriott, G. M. and Brown, R. A., 1984, *J. Crystal Growth*, Vol. 69, pp. 589.
- (4) Fowlis, W. W. and Roberts, G. O., 1986, "Confinement of Thermocapillary Floating Zone Flow by Uniform Rotation," *J. Crystal Growth*, Vol. 74, pp. 301~320.
- (5) Murthy, J. Y., 1987, "A Numerical Simulation of Flow, Heat and Mass Transfer in a Floating Zone at High Rotational Reynolds Numbers," *J. Crystal Growth*, Vol. 83, pp. 23~34.
- (6) Kobayashi, S., 1986, "Effects of an External Magnetic Field on Solute Distribution in Czochralski Grown Crystals—a Theoretical Analysis," *J. Crystal Growth*, Vol. 75, pp. 301~308.
- (7) Schwabe, D. and Metzger, J., 1989, "Coupling and Separation of Buoyant and Thermocapillary convection," *J. Crystal Growth*, Vol. 97, pp. 23~33.
- (8) Kozhoukharova, Z. and Slavchev, S., 1986, "Computer Simulation of the Thermocapillary Convection in a Non-Cylindrical Floating Zone," *J. Crystal Growth*, Vol. 74, pp. 236~246.
- (9) Duranceau, J. L. and Brown, R. A., 1986, "Thermal-Capillary Analysis of Small-Scale Floating Zones : Steady-State Calculations," *J. Crystal Growth*, Vol. 75, pp. 367~389.
- (10) Young, G. W. and Chait, A., 1989, "Steady-State Thermal-Solutal Diffusion in a Float Zone," *J. Crystal Growth*, Vol. 96, pp. 65~95.
- (11) Young, G. W. and Chait, A., 1990, "Surface Tension Driven Heat, Mass, and Momentum Transport in a Two-Dimensional Float-Zone," *J. Crystal Growth*, Vol. 106, pp. 445~466.
- (12) Lan, C. W. and Kou, S., 1991, "Effects of Rotation on Heat Transfer, Fluid Flow and Interfaces in Normal Gravity Floating-Zone Crystal Growth," *J. Crystal Growth*, Vol. 114, pp. 517~535.
- (13) Muller, G. and Rupp, R., 1991, "The Role of Marangoni Convection in the Growth of GaAs Crystals by the Floating Zone Technique under Microgravity," *Crystal Properties and Preparation*, Vol. 35, pp. 138~154.
- (14) Brice, J. C., 1986, *Crystal Growth Process*, Blackie Son Limited, Bishopbriggs, Glasgow G64 2NZ.
- (15) Lan, C. W. and Kou, S., 1992, "Heat Transfer and Fluid Flow in Floating-Zone Crystal Growth with a Mostly Covered Melt Surface," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 35, pp. 433~442.
- (16) Kou, S., 1989, Unpublished Research, Univ. of Wisconsin, Madison.
- (17) Patankar, S. V., 1980, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Hemisphere, Washington, DC.
- (18) Langlois, W. E., 1981, "Conservative Differencing Procedure for Rotationally Symmetric Flow with Swirl," *Comput. Meth. Engng.*, Vol. 25, pp. 315~333.
- (19) Kim, C. -J. and Ro, S. T., 1995, "On the

- Selection of Prognostic Equations for the Rotating Motion in Simulating Czochralski Flow," *Numer. Heat Transfer*, Vol. 28B, pp. 385~399.
- (20) 서정세, 노승탁, 1995, 수평원관내 얼음의 접촉응해과정, 대한기계학회논문집, 제19권, 제10호, pp. 2595~2606.
- (21) Karki, K. C. and Patankar, S. V., 1988, "Calculation Procedure for Viscous Incompressible Flows in Complex Geometries," *Numer. Heat Transfer*, Vol. 14, pp. 295~307.