

<논 문>

복사열전달을 고려한 Cusp 자기장이 있는 초크랄스키 단결정 성장 공정의 유동에 관한 연구

김태호* · 이유섭* · 전중환**

(1995년 2월 21일 접수)

A Numerical Simulation of Radiative Heat Transfer coupled with Czochralski Flow in Cusp Magnetic Field

Tae-Ho Kim, You-Seop Lee, Chung-Hwan Chun

Key Words : Czochralski Single Crystal Growth (초크랄스키 단결정 성장), Radiative Heat Transfer (복사열 전달), Oxygen Concentration(산소농도), Thermal Boundary Condition(열경계 조건)

Abstract

The characteristics of flow and oxygen concentration are numerically studied in Czochralski 8" silicon crystal growing process considering radiative heat transfer. The analysis of net radiative heat flux on all relevant surfaces shows growing crystal affects the heater power. Furthermore, the variation of the radiative heat flux along the crystal surface in the growing direction is confirmed and should be a cause of thermal stress and defect of the crystal. The calculated distributions of temperature and heat flux along the wall boundaries including melt/crystal interface, free surface and crucible wall indicate that the frequently used assumption of the thermal boundary conditions of insulated crucible bottom and constant temperature at crucible side wall is not suitable to meet the real physical boundary conditions. It is necessary, therefore, to calculate radiative heat transfer simultaneously with the melt flow in order to simulate the real CZ crystal growth. If only natural convection is considered, the oxygen concentration on the melt/crystal interface decreases and becomes uniform by the application of a cusp magnetic field. The heater power needed also increases with increasing the magnetic field. For the case of counter rotation of the crystal and crucible, the magnetic field suppresses azimuthal flow produced by the crucible rotation, which results in the higher oxygen concentration near the interface.

1. 서 론

웨이퍼의 기초 재료인 실리콘 단결정은 초크랄스키(Czochralski, CZ) 방법에 의해 주로 제조되며,

*포항공과대학교 대학원 기계공학과

**회원, 포항공과대학교 기계공학과

대구경 고품질의 실리콘 단결정을 만들기 위해 자기장을 걸어 주는 방법(magnetic field applied Czochralski, MCZ)이 생산 현장에서 적용되고 있다. 단결정의 품질을 결정하는 불순물과 실리카 도가니에서 용융액으로 녹아 들어가는 산소는 실리콘 용융액의 유동과 결부되어 결정으로 전달되기 때문에, 유동을 제어함으로써 이들의 농도를 조절할 수

있다. 또한 결정 결함은 응고 계면의 유동 조건과 온도 조건이나 결정이 성장하는 동안 주위 열환경 변화로 생기는 열응력에 큰 영향을 받기 때문에, 정확한 유동과 결정의 온도 분포를 알아야 결정 결함을 제어할 수 있다.⁽¹⁾

용융 상태의 실리콘은 니크롬과 같은 정도의 전기 전도체이기 때문에, 자기장을 가함으로써 실리콘 용융액의 대류를 억제하여 산소나 불순물 농도를 제어할 수 있다. 이와 같은 효과를 얻기 위해 수직 또는 수평한 형태의 자기장을 사용하는데, 수평 형태의 자기장은 자연 대류를 억제해서 결정 밑에서 산소 농도를 낮추나 열 대칭성이 나빠지고,⁽²⁾ 수직 형태의 자기장은 높은 산소 농도의 결과를 얻은 것으로 알려졌다.⁽³⁾ 이에 반해 축대칭인 cusp 자기장 아래에서 Hicks, T. W. et. al.⁽⁴⁾은 중형비 변화에 따른 산소 농도 변화를 계산하였고, Hirata, H.와 Hoshikawa, K.⁽⁵⁾는 실험과 수치 해석을 통해 cusp 자기장의 영향을 밝혔다. 또한 Sabhapathy, P. et. al.⁽⁶⁾은 축방향 자기장에 비해 cusp 자기장이 결정에서의 산소 농도를 더 낮추는 것을 밝혔다. 본 수치 해석에서도 반경방향으로 균일하고 또 낮은 산소농도를 얻는 데 효과적인 cusp 자기장의 영향을 밝히는데 집중하였다.

그러나 위 연구들은 도가니 벽면과 결정 벽에 일정한 온도 또는 열 플럭스 경계 조건의 결정과 용융액의 평탄한 경계를 가정하고 자기장의 영향, 결정과 도가니 회전에 의한 강제 대류의 영향과 중형비 변화의 영향을 분석하였는데, 이것은 유동의 기본적인 특성을 이해할 수는 있지만 실제 상황을 정확히 묘사하는데는 한계가 있다. 가열기(heater)에서 발생한 열이 복사를 통해서 전달되는 CZ 공정에서 대류 유동을 해석하기 위해서는 CZ 시스템의 복잡한 형상을 모두 고려한 복사열 전달 기구를 해석해야 한다. 본 연구에서는 표면 사이의 형상 계수(view factor)에 기초하여, 표면의 방사율을 같이 고려한 에너지 흡수 계수를 이용한 방법(Gebhart method)을 이용하여 복사열을 계산하였다.⁽⁷⁾ 그러므로 온도장을 계산함에 있어서 가열기 출력(heater power)만 주게 되면 다른 경계 조건 필요 없이 결정, 용융액, 도가니 그리고 가열기 등에서의 온도 분포를 계산할 수 있다.

이와 같은 연구는 Atherton, L. J. et. al.⁽⁸⁾이 열 쉴드(thermal shield)를 고려하지 않고 3" 결정 성장 공정을 묘사하기 시작했으며, 최근에는 Kinney, T.

A. et. al.⁽⁹⁾이 3.3" 결정 성장 공정 전체 형상을 묘사하여 실제 공정과 비교한 바 있다. 그러나 아직까지 실제 현장에서 생산하고 있는 8" 결정 생산 공정에 대한 연구는 없었으며, 결정이 성장하는 동안 가열기 출력이 변화하는 원인에 대한 분석이 없었다. 또한 복사를 고려하지 않고 계산할 때 사용되는 온도 경계 조건이 어느 정도 타당한 근거로 적용되는가에 대한 고찰이 필요하다.

2. 지배 방정식과 경계 조건

2.1 지배 방정식

수치 해석은 Patankar의 SIMPLER 알고리즘⁽¹⁰⁾을 이용하여 원통 좌표계에서 축대칭의 자오면(r, z) 유동 u_r , u_z 와 원주 방향 u_θ 를 풀었다.

전체 유동을 층류라고 가정하였고, 결정과 자유 계면 사이의 메니스커스(meniscus)는 없는 것으로 보았다. Boussinesq 가정을 이용하여 밀도 차가 온도에 선형적이라고 가정하였다.

차원 변수로 유동과 온도장을 계산하였으나 다음과 같은 무차원수를 정의할 수 있다.

$$Re = \frac{\rho U_c L_c}{\mu} \quad (1)$$

$$Gr = \frac{g\beta\Delta T L_c^3}{\nu^2} \quad (2)$$

$$Mg = \frac{\partial\gamma}{\partial T} L_c \Delta T / a\mu \quad (3)$$

$$Bo = g\rho\beta L_c^2 / (\partial\gamma/\partial T) \quad (4)$$

$$N = \frac{\sigma B_c^2 L_c}{\rho U_c} \quad (5)$$

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha} \quad (6)$$

$$Sc = \frac{\nu}{D_o} \quad (7)$$

$$Re_m = \mu_0 \sigma U_c L_c \quad (8)$$

특성 길이(L_c)는 결정의 반지름으로 선택했고 특성 속도(U_c)는 결정의 회전에 의한 원주 방향 속도로 삼았다. 각 경우에 있어서 결정 응고 온도와 용융액의 최고 온도 차이로 온도차(ΔT)를 정의하였다. 위에서 g 는 중력 가속도, B_c 는 자속 밀도, a 는 열 확산계수, $\partial\gamma/\partial T$ 는 표면장력의 온도 계수를 나타낸다. 그리고 Re 는 Reynolds number, Gr 은 Grashof number, Mg 는 Marangoni number, N 은 magnetic interaction number, Pr 은 Prandtl

Table 1 The material properies of silicon melt.

Density	ρ	2500kg/m ³
Kinematic viscosity		$\nu 3, 0 \times 10^{-7} \text{m}^2/\text{sec}$
Volumetric expansion coefficient	β	$1.41 \times 10^{-5}/K$
Thermal conductivity	k	67J/(msecK)
Electric conductivity	σ	$1.2 \times 10^6 \text{ } \Omega/\text{m}$
Magnetic permeability	μ_o	$4\pi \times 10^{-7} \text{henry/m}$
Oxygen diffusion coefficient	D_o	$5 \times 10^{-8} \text{m}^2/\text{sec}$
Oxygen segregation coefficient	k_o	1
Latent heat of fusion	ΔH	1.8KJ kg ⁻¹

number, Sc 는 Schmidt number 그리고 Re_m 은 magnetic Reynolds number를 나타낸다.

Mg 수는 표면장력구배에 의한 유동의 영향을 나타내는데, 표면장력으로 인한 유동과 부력 유동의 세기의 상대적 비는 dynamic Bond number Bo 로 표현된다. 여기서 Bo 수는 계의 특성 길이 L_c 의 제곱에 비례하는데, 8인치의 대구경 단결정 성장공정의 유동처럼 큰 체적의 유동에서는 아주 큰 값을 가지기 때문에 표면장력구배에 의한 열모세 대류는 대류 부력유동에 비해 큰 영향을 미치지 않는다. 따라서 본 수치해석에서는 $\partial\gamma/\partial T$ 의 값을 0으로, 즉 표면장력 구배로 인한 유동은 무시하였다.

위의 무차원수들에 사용한 그 밖의 실리콘 용융액의 물성의 정의와 그 값들은 Table 1에 나타내었다.

실리콘 용융액 안에서 산소의 Sc 수는 6.0이고 실리콘 용융액의 Pr 수는 0.01이다. 결정과 도가니가 반대 방향으로 회전하는 경우의 Re_m 은 0.0257이고(3절 참고), 자기장에 의한 로렌츠의 힘과 회전 관성력의 비인 N 은 0~0.703 (자기장의 세기 = 0.05 Tesla) 범위이다.

용융액내의 유동이 없는 경우의 전도 에너지식은 다음과 같다.

$$k\nabla^2 T = 0 \quad (9)$$

용융액내의 유동 및 에너지식은 다음과 같다.

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0 \quad (10)$$

$$\rho(\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \vec{v} - \rho \beta \vec{g} (T - T_m) + \vec{j} \times \vec{B} \quad (11)$$

$$\rho c_p (\vec{v} \cdot \nabla) T = k \nabla^2 T \quad (12)$$

전하 보존 법칙을 이용해서 전기장(electric field)을 구한다.

$$\nabla \cdot \vec{j} = 0 \quad (13)$$

위의 MCZ 유동 방정식 식 (11)에서 $\vec{j} \times \vec{B}$ 가 로렌츠의 힘을 나타내는데, 이 힘은 자기장과 수직으로 만나는 유동의 반대 방향으로 작용한다.

2.2 경계 조건

Ar 가스와 접하는 용융액과 고체 표면에서의 온도 경계 조건은 정미 복사열 플럭스인 식 (21)을 각 표면 A_i 의 수직 방향(\vec{n}_i)의 온도 구배로 식 (14)와 같이 처리하였다. 그리고 Fig. 1과 같이 CZ 전체 시스템을 막고 있는 챔버(chamber) 표면과 지지대 바닥의 온도는 473K로 일정한 것으로 가정하였다.⁽⁹⁾

$$k_i \vec{n}_i \cdot \nabla T = q_i \quad (14)$$

용융액과 결정의 상경계는 응고 온도인 1683 K의 격자 지점을 기준으로 결정과 용융액의 상변화를 식 (15)와 같이 동점성 계수 ν 의 변화로 나타내었다.

$$\nu = \begin{cases} \nu & \text{if } T > 1685 \\ 10^{(-T+1685)} \cdot \nu & \text{if } 1683 \leq T \leq 1685 \\ 10^{10} \cdot \nu & \text{if } T < 1683 \end{cases} \quad (15)$$

산소는 도가니(SiO₂)에서 용융액으로 녹아들어 오는데, 도가니 벽에서의 산소 농도는 온도의 함수로 알려져 있다. 그러므로 도가니 벽과 바닥의 온도를 알게 되면 도가니와 용융액과 접하는 부분에

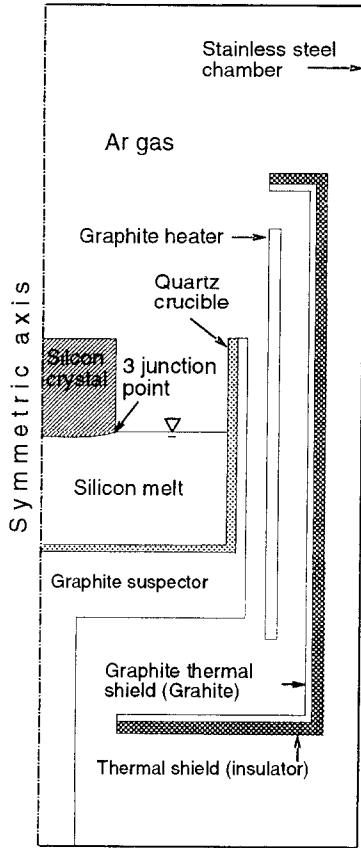


Fig. 1 A schematic diagram for Czochralski silicon crystal growth system

3. Cusp 자기장

Cusp 자기장은 자유 계면으로부터 같은 거리로 떨어져 있고 중심이 대칭축에 있는 두 개의 환형의 도선에 서로 반대 방향으로 전류를 흘렸을 때 발생하는 자기장이다. 이 자기장의 형상은 축대칭이며 결정의 중심과 자유 계면이 만나는 점에서는 자기장의 세기는 0이다. 또한 계면에 대칭이므로 자유 계면에서는 계면에 수직인 성분의 자기장은 없으나, 도가니 벽과 바닥에 수직인 자기장의 성분은 크다.

로렌츠 힘의 영향은 자기장이 유동 방향과 직각일 때 최대가 되므로, 도가니의 벽과 바닥 근처의 유동과 수직인 성분이 큰 cusp 자기장은 유동의 난류적 특성을 줄이고 벽 근처의 유동을 억제하여 벽면에서 유출된 산소의 농도 분포를 조절할 수 있다. 반면 결정 근처는 자기장의 세기가 0에 가깝고, 자유 계면과 중심축에서는 자오면의 유동 성분과 평행하기 때문에 유동에 큰 영향을 주지 않는다. 그러나 원주 방향의 유동 성분은 자기장에 항상 수직하므로 크게 감소하게 된다.

모든 실제 실리콘 MCZ 공정의 magnetic Reynolds number (Re_m)가 1보다 매우 작기 때문에 ($Re_m \approx 10^{-2}$) 유도 전류에서 발생하는 유도 자기장은 무시하였다. 즉 Maxwell equation을 풀 필요 없이 유동에 무관하게 외부에서 걸어 준 자기장만이 작용한다.⁽⁴⁾ 그리고 실리콘은 자성체가 아니므로 유전율(μ_0)은 진공중에서 측정한 값을 사용하였다.⁽⁵⁾

서의 산소 농도는 식 (16)과 같은 온도의 함수로 주어진다.⁽⁶⁾

$$C_o = 1.14 \times 10^5 \exp(-2.0 \times 10^4 / T) \quad (16)$$

식 (16)은 1720 K일 때의 산소 농도(C_o)가 1.016×10^{18} atoms/cm³이므로 그 값이 대표하는 것은 3.5×10^{18} atoms/cm³이다.

$$k_s \vec{n}_s \nabla T_s - k_m \vec{n}_m \nabla T_m = \rho v_{\text{growth}} \Delta H \quad (17)$$

잠열은 용융 상태의 실리콘이 결정으로 상변화하면서 발생하는 열인데, 결정과 용융액의 경계 표면에서 일어나는 현상으로 식 (17)에 따라 상경계에 있는 격자계에서 체적 열원으로 처리했다. 잠열은 결정과 도가니가 반대 방향으로 회전하는 경우에만 고려했으며, 결정 성장 속도(v_{growth})는 항상 일정하다고 가정하였으며 6.5 cm/hour ⁽⁹⁾로 이때 발생하는 잠열은 2.49 W 이다.

4. 복사열 계산 방법

4.1 형상 계수 계산 방법

복사는 표면의 온도와 표면의 특성인 방사율 그리고 표면간의 형상 계수에 의해 결정된다. 회색 확산체(gray diffuse) 표면이라는 가정과 복사 계산의 방법상 방사율을 수정하기 힘들기 때문에 방사율은 주어진 표면의 물질에 따라 일정한 것으로 보았다. 그러므로 복사열을 지배하는 것은 표면의 온도, 표면의 방사율과 형상 계수가 된다.

형상 계수는 표면들 간의 기하학적인 비율이기 때문에 복사열을 계산하고자 하는 계의 형상에 의해서만 결정된다. Fig. 1과 같이 CZ 계가 복잡한

형상을 가지고 있기 때문에 기존에 알려진 공식을 이용하기 힘들므로 다음과 같은 알고리즘을 이용하여 형상 계수를 계산하였다.

1) 격자계, 자오면 표면의 개수(N_{surf} -챔버, 지대, 도가니 외벽, 도가니 내벽, 자유 계면, 결정, 쉴드 표면, 히터 표면에 있는 격자계의 개수), 회전 방향으로 나눌 간격 개수(N_θ) 를 정한다.

2) 표면($N_{surf} \times N_\theta$)의 위치(x, y, z), normal vector를 계산한다.

3) 형상 계수를 계산할 두 표면(A_i, A_j)의 normal vector \bar{n}_i, \bar{n}_j 와 두 표면을 잇는 직선 \bar{l} 과의 내적으로 두 표면이 마주 볼 수 있는지 확인한다.

4) 두 표면이 마주 볼 수 있을 때는 두 표면 사이에 다른 표면(A_k)이 가리고 있는지를 평면 A_k 와 직선 \bar{l} 의 교점 위치를 계산하여 확인한다.

5) 두 표면 사이에 제3의 다른 표면이 막고 있지 않으면 두 표면은 서로 볼 수 있는 위치에 있으므로 형상 계수를 식 (18)에 따라 계산한다.⁽¹¹⁾

$$F_{ij} = \frac{1}{A_i} \int_{A_i} \int_{A_j} \frac{\cos \theta_i \cos \theta_j}{\pi R^2} dA_j dA_i \quad (18)$$

4.2 에너지 흡수 방법-Gebhart method

형상 계수는 계의 형상에만 의존하는 것으로 A_i 표면에서 출사된 복사 에너지가 A_j 표면에 도달하는 복사 에너지의 비율이다.⁽⁷⁾⁽¹¹⁾ 그러므로 형상 계수는 A_j 표면이 도달한 복사 에너지를 얼마나 흡수, 반사 또는 투과할 것인지에 대해서는 어떤 정보도 포함되어 있지 않다. 반면 표면의 흡수율(ϵ), 반사율(η), 투과율($\tau=0$)의 정보가 포함되어 있는 에너지 흡수 비율(Energy absorption factor, Gebhart factor= W_{ij})을 이용하면 각 표면의 온도

분포만으로 복사 에너지를 식 (21)에 따라 계산할 수 있는데, W_{ij} 는 A_i 표면에서 출사된 복사 에너지가 A_j 표면에 도달하여 흡수된 에너지의 비율을 나타낸다.⁽¹¹⁾⁽⁸⁾

$$\sum_i^{N_{surf}} (F_{ki} \eta_i - \delta_{ki}) W_{ij} + F_{kj} \epsilon_j = 0 \quad (19)$$

$$CW = B, W = C^{-1}B \quad (20)$$

$$q_i = A_i \epsilon_i \sigma_o T_i^4 - \sum_{j=1}^{N_{surf}} A_j \epsilon_j W_{ji} T_j^4 \quad (21)$$

where

$$\eta_i = 1 - \epsilon_i \quad (22)$$

$$C_{ki} = F_{ki} \eta_i - \delta_{ki} \quad (23)$$

$$B_{kj} = -F_{kj} \epsilon_j \quad (24)$$

여기서 δ_{ij} 는 Kronecker delta 함수를, A_i 는 표면 i 의 면적을, σ_o 는 Stefan Boltzmann 상수를 나타내며 그 값은 $5.67 \times 10^{-8} W/m^2 \cdot K^4$ 이다.

Gebhart factor를 계산하기 위해서는 식 (20)에 나타나는 $N_{surf} \times N_{surf}$ 행렬 C_{ij} 의 역행렬을 한번만 계산하면 된다. 식 (21)과 같이 표면 온도를 알면 그 온도장에 해당하는 복사 열전달률을 구할 수 있다. 그리고 결정, 용융액과 Ar 가스가 만나는 곳인 정점(junction point)의 온도를 용융 온도인 1683K로 조정하기 위해서 가열기 출력을 조절했다. 또한 수치해는 반복 계산이 수렴하고 주어진 가열기 출력과 가열기 표면의 복사 열전달률 오차가 0.5% 이내이고, 열 쉴드에서 정미 복사열 전달률(열 소멸이나 생성이 없으므로 0이어야 한다)에 대한 오차가 0.5% 이내일 때 수렴하였다고 판단하였다. 그리고 앞에서 언급했듯이 온도장이 수렴하고 열평형상태의 수치 해석 해를 구했다고 하더라도 주어진 결정 지름과 V_{growth} 가 일정한 조건에서

Table 2 Material properties of surfaces.

	Emissivity ϵ	Conductivity $k, W/(mK)$	Density $\rho, kg/m^3$
Chamber	0.5	-	-
Graphite	0.65	40	-
Insulator	1	0.4	-
Crucible	0.25	6	-
Silicon melt	0.05	67	2500
Silicon crystal	0.55	22	2300

정점에서의 온도가 1683K가 안된다면 해로서 의미가 없다. 그러므로 정점의 온도가 1683K 이상 1684K미만이 될 때 정확히 수렴된 해로 취급했다. 수치 해석에 사용된 Fig. 1의 실리콘 결정과 용융액, 도가니, 가열기 그리고 단열재 등의 열전도도와 표면 방사율 등의 기타 물성치는 Table 2와 같다.⁽⁹⁾

5. 결과 및 토의

5.1 용융액의 대류 없이 전도와 복사만 고려한 경우

용융액내에서 유동 없이 전도와 복사만으로 열전달이 일어난다고 우선 가정하고, 8° 결정을 성장시킬 때 결정의 높이가 0.01 m에서 0.89 m까지 증가하고 용융액의 중형비가 0.8에서 0.3까지 감소할 때 가열기 출력에 어떤 영향을 주는지 살펴보았다. 결정 성장 속도가 자오면 유동에 비해 3.19×10^{-4} 정도로 작기 때문에 다른 중형비로 천이할 때 연속적으로 준 정상상태(quasi-steady state)가 유지된다고 가정하였다. 가열기 위치는 용융액의 자유 계면 높이에 가열기의 중심이 오도록 조정하였다.

5.1.1 가열기 위치와 열 쉴드 형상의 영향

Fig. 2(a), (d) 는 중형비가 각각 0.8, 0.7로 초

기에 결정이 성장하기 시작할 때의 온도 분포이다. Fig. 2(a)는 중형비 0.8로 결정이 생기기 시작한 것으로 가열기 출력은 149.3kW 인데, 가열기 윗부분이 낮은 온도의 챔버(chamber) 표면과 마주하고 있어서 복사 열전달률이 높아서 가열기의 아래부분에서 최고 온도가 나타난다.

139.2kW의 가열기 출력이 필요한 중형비 0.7에 비해 중형비 0.8에서 큰 가열기 출력이 필요한 것은 가열기 위치와 챔버로 전달되는 복사열을 막지 못하는 열 쉴드 형상 때문이다. 이를 개선하기 위해서 먼저 가열기를 Fig. 2(b)와 같이 도가니 바닥 근처로 내렸다. 이때의 필요 가열기 출력은 Table 3과 같이 148.7kW로 가열기 위치를 조정하지 않은 149.3kW와는 큰 차이가 없다.

이번에는 가열기 중심 위치를 용융액의 중간 높이로 조정하고 챔버로 전달되는 복사열을 막기 위해 열 쉴드 윗부분을 Fig. 2(c)와 같이 결정 쪽으로 더 넓혔다. 가열기 위치만 바꾼 Fig. 2(b)에 비해 도가니 벽 근처에서 높은 온도를 가지는 용융액 부분이 넓게 분포해서 결정과 적은 온도차에서도 충분한 열이 결정과 자유 계면으로 전달된다. 이때의 도가니 용융액 최고 온도가 1863K로 가열기 중심이 자유 계면에 있을 때의 경우 보다 높다. 그러나 넓어진 가열기 위쪽에 있는 열 쉴드의 영향으로 가열기에서 바로 챔버로 전달되던 복사열이 감소하

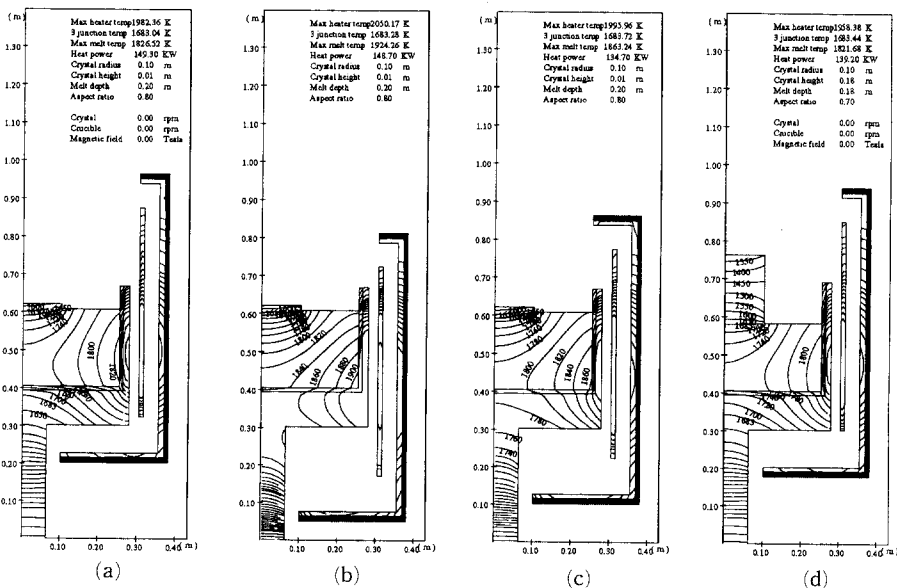


Fig. 2 Radiation and conduction only (a) aspect ratio=0.8^a, (b) aspect ratio=0.8^b, (c) aspect ratio=0.8^c, (d) aspect ratio=0.7

Table 3 Variation of heater power, melt and heater maximum temperature for various aspect ratio, 0, 8^a normal heater position, 0, 8^b only heater position down, 0, 8^c heater position down and thermal shield shape changed.

Aspect ratio	Heater power (kW)	Melt max. temperature (K), (T-T _m)	Heater max. temperature (K)
0, 8 ^a	149.3	1826, 52 (143, 52)	1982, 36
0, 8 ^b	148.7	1924, 26 (241, 26)	2050, 17
0, 8 ^c	134.7	1863, 24 (180, 24)	1995, 96
0, 7	139.2	1821, 68 (138, 68)	1958, 38
0, 6	140.9	1812, 00 (129, 00)	1943, 31
0, 5	141.7	1819, 71 (136, 71)	1953, 64
0, 4	142.7	1830, 94 (147, 94)	1963, 07
0, 3	145.2	1841, 17 (158, 17)	1978, 95

여 열의 손실을 줄일 수 있기 때문에 가열기 출력은 134,7kW로 매우 낮아졌다. 그러므로 가열기 출력을 낮추기 위해서는 가열기 위치를 적절히 움직이면서 열 실드와 도가니 외벽에서의 복사열 관계를 파악하는 것이 필요하다.

5.1.2 중형비 변화에 따른 가열기 출력의 변화

Fig. 3은 중형비가 0.6, 0.5, 0.4, 0.3일 때의 온

도 분포를 나타낸다. 결정이 자라면서 가열기 위치가 변화하여 챔버로 전달되는 복사열이 감소하며, 최고 온도 위치가 가열기 중심으로 옮겨져 가열기 윗부분의 온도 구배가 감소한다. 용융액내의 최고 온도와 결정과의 온도차 및 가열기에서의 최고 온도는 Table 3과 같다. 대부분 가열기 출력에 비례하여 용융액내의 최고 온도, 가열기의 온도가 변하고 있다.

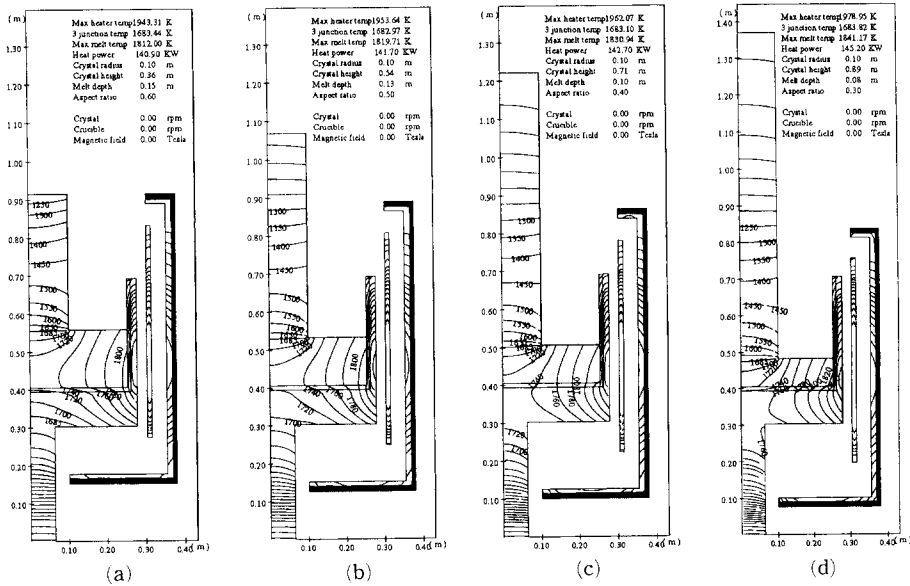


Fig. 3 Radiation and conduction only (a) aspect ratio=0.6, (b) aspect ratio=0.5, (c) aspect ratio=0.4 (d) aspect ratio=0.3

Fig. 4는 결정이 자라면서 가열기 출력 변화를 보여준다. 결정이 자라기 시작하면 가열기 출력이 최대가 되었다가 결정이 어느 정도 성장한 종횡비 0.7 에서는 출력이 급격히 준다. 그 후는 결정이 성장하는 것에 비례하여 출력이 조금씩 증가한다. 이와 같이 결정 성장에 따라 가열기 출력 변화의 원인을 찾기 위해 도가니 내벽(quartz crucible), 외벽(graphite sustainer), 결정 표면, 자유 표면, 열 쉴드, 지지대(column)와 지지대 밑(column bottom) 등에서 발생한 정미 복사 열전달률(net radiative heat transfer rate)을 살펴보면 Fig. 5와 같다.

Fig. 5에서 열 쉴드의 정미 복사열 전달율이 모두 0에 가까운데, 이것은 수치 해가 수렴 조건에 충실하게 계산되었다는 것을 보여준다. Fig. 5에서 도가니내, 외벽에서만 결정 높이에 따라 다소 큰 차이가 있음을 알 수 있다. 그러므로 가열기 출력을 결정하는 것이 도가니의 표면이라고 할 수 있다. Fig. 6은 도가니 내벽에서 자유 표면 높이를 0 으로 놓고 도가니 내벽 끝까지의 열 플럭스를 각

격자계가 포함된 표면에서 그린 것이다. 용융액의 종횡비가 감소하면서 열 플럭스가 쿨 뿐만 아니라 도가니 내벽의 길이가 증가하여 전체 열전달률도 증가하게 된다. 도가니 내벽으로 전달되는 열은 가열기로부터 전달되기 때문에 가열기 출력에 영향을 준다.

그러나 종횡비가 0.8로 도가니 내벽의 높이가 낮은 경우는 이와 같이 설명할 수 없다. Fig. 2(a)의 가열기가 도가니 위쪽으로 많이 올라와 있어서 챔버 윗부분으로의 복사열 전달률이 크기 때문에 결정 높이가 0.01m인 종횡비 0.8의 경우는 가열기 출력은 가열기의 위치에 의해서 결정된다. 이와 같은 결과는 챔버 표면의 복사열 플럭스 분포로도 확인할 수 있다. Fig. 7은 챔버 윗부분부터 열 벽, 아래 표면의 순서로 챔버 표면에서의 정미 복사열 플럭스의 분포를 그린 것이다. 0.0에서 0.43m까지가 챔버 윗부분인데, 종횡비가 감소함에 따라 플럭스가 감소한다. 그러나 모든 종횡비에서 챔버 윗부분에 많은 영향을 줄 결정과 자유 계면에서 나오는 복사 열전달률은 Table 3에 나타나듯이 비슷하지

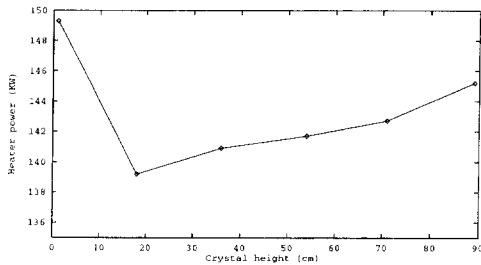


Fig. 4 Variation of heater power with crystal height under normal heater position control

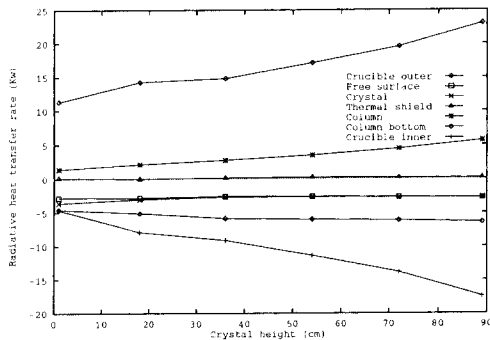


Fig. 5 Net radiative heat transfer rate on each surface. Crucible inner and outer surface, free surface and crystal and etc

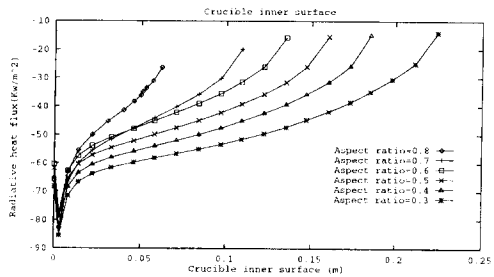


Fig. 6 Net radiative heat flux on crucible inner surface above melt free surface

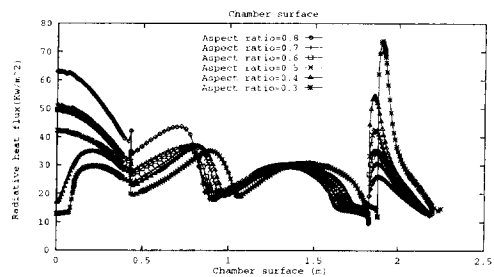


Fig. 7 Net radiative heat flux on chamber surface in the direction of chamber top, chamber wall, chamber bottom

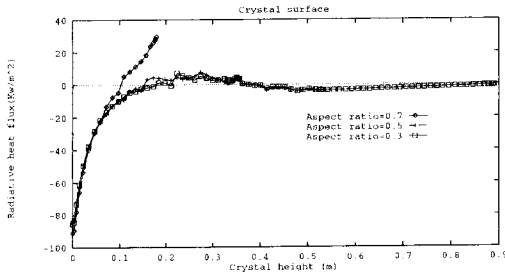


Fig. 8 Net radiative heat flux on the crystal surface along the direction of crystal growth.

만 챔버 윗표면에서의 열전달률이 다른 것은 가열기 위치 변화로 가열기에서 받는 직접적인 복사열 전달률이 다르기 때문이다.

5.1.3 결정 표면에서의 열 플럭스 변화

Fig. 3(c)의 결정 표면의 온도 분포는 결정 높이에 따라 열전달 방향이 바뀌는 것을 보여준다. 이를 확인하기 위해 결정 표면에서 복사 열 플럭스의 분포를 결정의 높이에 따라 종횡비 0.7, 0.5, 0.3에 대해서 Fig. 8에 나타내었다. 결정 표면의 열 플럭스 방향이 도가니 내부, 도가니 밖과 열 쉴드 사이 그리고 열 쉴드 위쪽 세 범위에서 열 플럭스 방향이 다르다. 결정이 연속 성장하면서 생기는 결정 표면의 열 플럭스 변화는 결정을 열평형 상태에서 벗어나게 만든다. 이 결과로 결정 내부에 열용

력이 생기고 결정 결함이 발생한다.

5.2 자연 대류만 있는 경우

5.2.1 자연 대류의 영향

Ar 가스와 접하는 모든 표면에서 온도 경계 조건을 복사 열 플럭스를 적용하고, 용융액내의 유동과 온도장 그리고 가열기, 도가니 등의 고체 부분에서 온도장을 계산하였다. Fig. 9는 종횡비 0.7에 대한 계산결과이다. 용융액내의 최고 온도는 1715 K로 결정 응고 온도와 온도 차이는 32K 정도이고, 이때의 가열기 출력은 121.0kW이다. 이 값은 유동이 없다고 가정하고 계산한 Table 3의 가열기 출력 139.2 kW과 비교할 때 아주 작은 값이다.

실리콘 용융액의 Pr 수가 0.01로 작아 전도의 영향이 크나 대류의 경우는 자연 대류의 영향 역시 크기 때문에 ($Gr=4.913 \times 10^7, \Delta T=32K$) Fig. 9(b)에서와 같이 유동이 온도장에 큰 영향을 주고 있다.

도가니 벽에서 유출되는 산소는 도가니 벽의 온도 함수로 경계 조건이 식 (16)으로 주어졌는데, 무차원 산소 농도의 최고 값은 0.995이다. 산소의 Sc 수가 6.0이므로 산소의 전달은 주로 대류에 의해 이루어진다. 도가니에서 유출된 산소는 자연 대류를 따라 자유 계면을 지나 결정으로 전달되는데, 자유 계면 부근 속도가 빠르기 때문에 주위 Ar 가

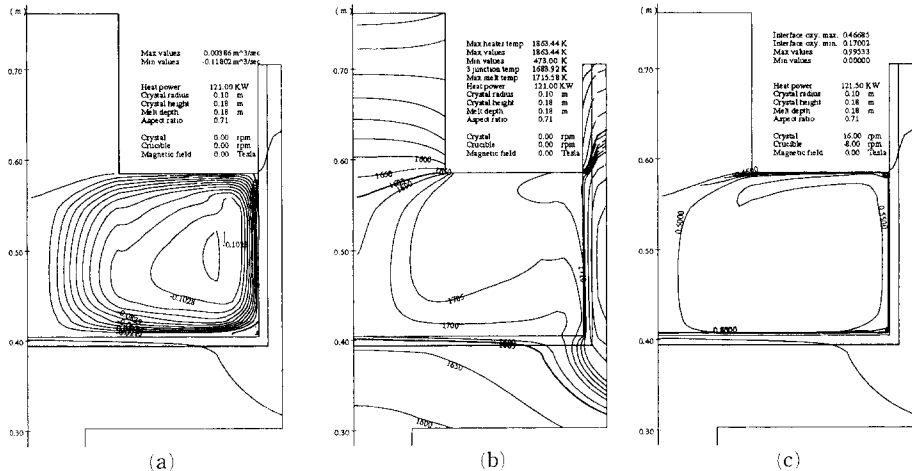


Fig. 9 Aspect ratio=0.7, Natural convection only, heater power=121.0 kW, B=0.0 Tesla. (a) streamlines on the meridional plane, (b) isotherms, (c) contoured map of the oxygen concentration (dimensionless)

Table 4 Aspect ratio = 0.7, the effect of cusp magnetic field on natural convection-heater power, maximum temperature of the melt, maximum velocity of melt, maximum oxygen concentration in the melt, net radiative heat transfer rate on the free surface, crystal surface, heat transfer rate on the wall and bottom of the crucible.

Magnetic flux (Tesla)	0, 0	0.02	0.05
Heater power (kW)	121.0	123.5	124.5
Max. T. in the melt (K)	1713.00	1724.03	1734.89
Max. velocity (m/sec)	0.0202	0.0166	0.00944
Max. oxygen concentration	0.995	1.047	1.126
Crucible wall (kW)	8.355	8.236	7.969
Free surface (kW)	-2.768	-2.816	-2.848
Crystal (kW)	-3.632	-3.526	-3.522
Crucible bottom (kW)	-1.825	-1.614	-1.489

스로 산소의 물질전달이 적다. 그래서 자유 계면 부근의 용융액에는 대칭축 방향으로 산소 농도차가 생긴다. 이 자유 계면 근처를 지나는 용융액의 산소 농도의 불균일한 분포가 그대로 결정과 용융액의 경계 쪽으로 전달된다. 이 결과로 Fig. 14(a)와 같이 응고 계면에서 산소 농도의 반경 방향으로의 변화가 생긴다. 대칭축에서 산소농도가 높게 나오는 것은 Fig. 9(a)에서 알 수 있듯이 이 부분의 유속이 결정 가장자리 부근 보다 느려져 확산으로 인한 산소의 물질전달이 증대되기 때문이다.

5.2.2 Cusp 자기장이 있는 자연 대류의 영향

자연 대류가 있는 유동에 cusp 자기장을 적용하여 그 변화를 살펴보고 Table 4에 나타내었다. 자기장은 유동의 반대 방향으로 로렌츠의 힘을 작용하게하므로 자기장의 세기가 증가할수록 Fig. 10(a)와 같이 자오면 유동 속도 즉 대류의 세기가 감소하게 된다.

또한 Table 4에 나타나듯이 대류 열전달이 감소하는 반면 전도의 영향이 상대적으로 증가하게 되어 용융액 내의 온도 차이가 커지고 가열기의 출력

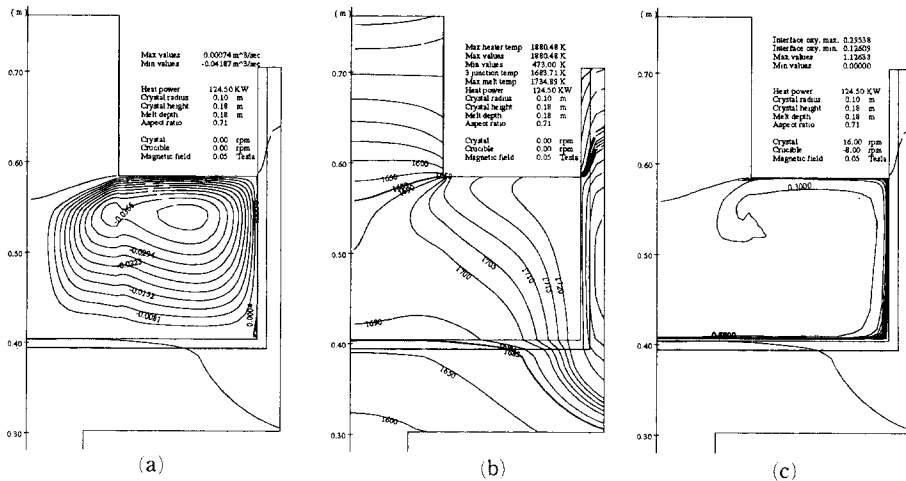


Fig. 10 Aspect ratio=0.7, Natural convection only, heater power = 124.5 kW, B = 0.05 Tesla, (a) streamlines, (b) isotherms, (c) oxygen concentration

이 증가하게 된다. 이러한 대류 열전달 감소의 영향으로 인해 도가니 벽에서 용융액으로의 열전달률이 감소하고, 따라서 도가니 바닥에서 용융액으로의 열전달률 역시 감소하여 Table 4와 같이 나타난다. 대류가 억제됨에 따라 도가니 내벽의 최고 온도가 증가하여 용융액으로 녹아들어 오는 산소의 양이 증가하게 되어 Table 4, Fig. 10(c)와 같이 나타난다. Fig. 10(c)의 산소 농도 선은 도가니 벽과 바닥에서 유출되는 산소가 유동을 따라 전달되지만 자기장의 세기가 증가할수록 도가니 바닥과 벽에서의 속도가 감소해서 대류에 의한 물질전달에 비해 확산에 의한 물질전달이 증가하는 것을 보여 준다.

자기장의 세기를 증가함에 따라 응고계면의 산소 농도는 점차 낮아지고 반경방향으로 보다 균일해지는 것을 Fig. 14(a)에서 알 수 있다. 이것은 자기장의 영향으로 자유 계면의 유동 속도가 감소하여 산소가 Ar 가스로 전달될 수 있는 시간이 증가하여 농도가 낮아지고 확산의 영향이 증가하여 농도차가 줄어들기 때문이다.

5.3 결정과 도가니가 반대 방향으로 회전하는 경우

5.3.1 결정과 도가니가 반대 방향으로 회전할 때 — 잠열을 고려하지 않은 경우
8" 결정 성장 공정을 해석하기 위해 결정과 도가

니를 각각 16rpm, -8rpm으로 회전시켰을 경우에 대해서 수치 해석하였다. 현재까지는 응고 계면에서 고체와 액체의 엔탈피 차이인 잠열을 0으로 가정하였다.

도가니의 회전에 의해 도가니 벽 근처의 용융액에는 강제 운동과 유사한 원주 방향 속도 분포가 생긴다. 도가니 벽 근처에서 회전속도에 의해 생긴 원심력과 균형을 이루는 자유 계면에서 도가니 바닥으로 도가니 벽에 평행하게 나타나는 등압력장에 의해 도가니 벽과 바닥 근처의 자오면에서는 자오면 유동이 억제된다. (Fig. 11(a))

도가니 벽 근처에서는 자오면 속도가 매우 작기 때문에, 전도에 의해 용융액으로 열전달이 일어나는 온도장이 Fig. 11(b)에 나타난다. 여기에서 상 경계면의 형상이 오목하게 나타나는 데 이는 결정 회전의 영향으로 결정 밑에서 대칭축에서 도가니 벽 쪽으로 향하는 유동 때문이다. 그 영향으로 오목한 형상의 등온선이 형성된다. 자연대류만 있을 경우는 반대로 도가니 벽 쪽에서 대칭축으로 향하는 유동에 의해 볼록한 형상의 응고계면이 형성된다. (Fig. 9(b))

도가니 벽에서 용융액으로의 일차적인 열전달은 전도의 영향이 지배적이므로 자연 대류에 비해 응고 계면과 도가니 벽과의 온도차가 Table 5에 나타나듯이 42.53K로 증가한다. 그러나 자유 계면과 결정 부근에서는 자오면 유동이 크기 때문에 자오면 유동의 영향을 받아 등온선이 결정 쪽으로 휘어

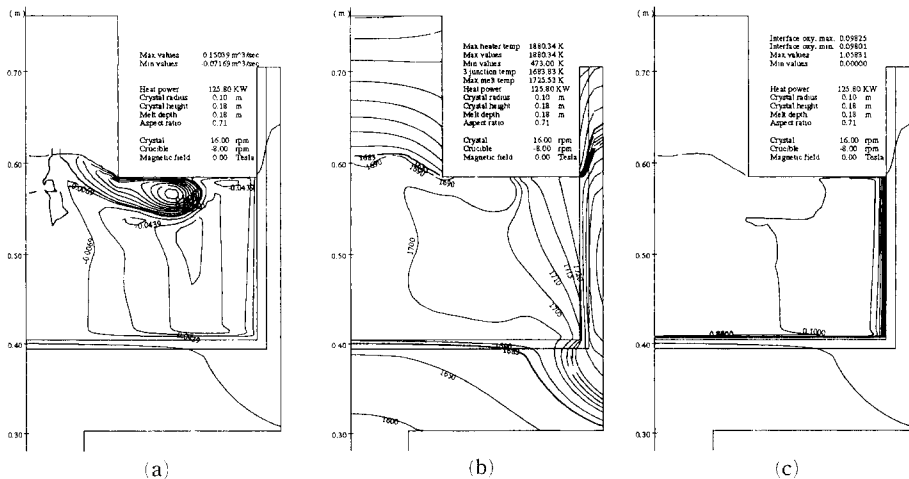


Fig. 11 Aspect ratio=0.7, counter rotation without latent heat, heater power = 125.8 kW, B=0.0 Tesla, (a) streamlines on the meridional plane, (b) isotherms, (c) oxygen concentration

Table 5 Aspect ratio = 0.7, the effect of latent heat and cusp magnetic field on the counter rotation case-same as Table 4.

Latent heat	no	yes	yes	yes
Magnetic field (Tesla)	0.00	0.00	0.02	0.05
Heater power (kW)	125.8	124.5	126.2	128.6
Max. T. in the melt (K)	1725.53	1724.72	1727.47	1733.00
Max. velocity (m/sec)	0.05658	0.05607	0.04887	0.05217
Max. oxygen concentration	1.05831	1.0525	1.07311	1.12553
Crucible wall (kW)	9.037	8.882	9.461	9.070
Free surface (kW)	-2.699	-2.690	-2.516	-2.448
Crystal (kW)	-4.480	-4.494	-5.363	-5.033
Crucible bottom (kW)	-1.281	-1.306	-1.464	-1.633

져 있다.

Fig. 11(c)는 등산소 농도선이다. 도가니 벽의 온도가 증가함에 따라 자연 대류만 있을 경우에 비해 용융액의 최고 산소 농도가 0.995에서 1.058로 증가하였다. 그러나 응고 계면에서의 산소 농도는 0.0983 정도로 매우 낮고 균일하다. 산소가 유출되는 도가니 바닥과 벽 근처의 자오면 유동이 매우 약해서 산소는 대류에 의해 전달되지 못하고, 도가니 벽을 따라 자유 계면으로 전달되거나 확산으로 결정으로 전달된다. 결정으로 전달되는 산소는 대부분이 확산에 의해 전달되며, 결정 회전으로 생긴

유동의 영향 범위 안에 들어가는 산소는 이 유동을 따라 결정으로 전달된다.

5.3.2 결정과 도가니가 반대 방향으로 회전할 때 — 잠열을 고려한 경우

응고 계면에서 상변화가 일어나면서 생기는 잠열을 고려하였다. Fig. 12는 잠열을 고려했을 때의 결과이고 Table 5에서는 잠열을 고려한 경우와 고려하지 않은 경우를 비교하였다.

결정 성장 속도가 0.065m/hour일 때 발생하는 잠열은 2.49W이다. 이 잠열은 결정에서 복사열로

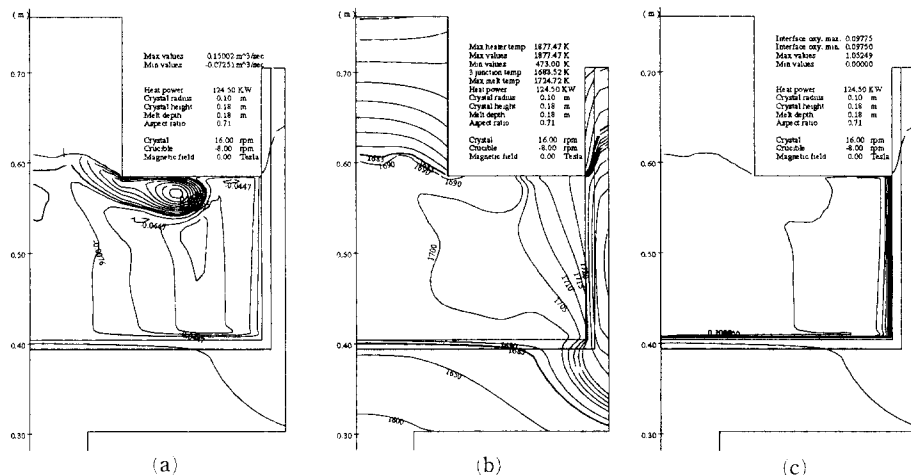


Fig. 12 Aspect ratio = 0.7, counter rotation with latent heat. heater power = 124.5 kW, B = 0.0 Tesla, (a) streamlines, (b) isotherms, (c) oxygen concentration

나가는 열인 4.94kW에 비하면 매우 작은 것이다. 그러나 용고 계면에 잠열이 발생하기 때문에 가열기 출력에는 적지 않은 영향을 주어 1.3kW 정도 줄이게 된다. 잠열을 고려하면 가열기 출력이 줄어들고 용융액내의 최고 온도가 감소하여, 용융액의 최고 산소 농도 역시 다소 줄어들지만 Figs. 11, 12, Table 5에서 보듯이 자오면 유동이나 산소 농도 분포에는 큰 차이가 없다. 또한 Fig. 12(c)는 결정 밑의 산소 농도 역시 잠열이 없는 경우와 마찬가지로 낮고 균일하다는 것을 보여준다. 결정 성장 속도가 자오면 유동에 비해 33.19×10^{-4} 의 크기이기 때문에 결정 성장 과정을 모사하기 위해 비정상 상태의 해를 구할 필요 없이 주어진 중형비에 대한 정상 상태의 해를 구하는 것이 합리적이다.

5.3.3 결정과 도가니가 반대 방향으로 회전할 때 — cusp 자기장의 영향

0.02, 0.05 Tesla의 cusp 자기장을 결정과 도가니가 반대 방향으로 회전하고 있는 경우에 적용하여 수치 해석하였다. 자기장의 영향을 나타내는 무차원수 N은 각각 0.113과 0.703이다.

0.02 Tesla의 자기장 (N=0.113)을 적용한 Fig. 13과 자기장이 없는 Fig. 12를 비교하면 cusp 자기장이 도가니 회전의 속도를 매우 효과적으로 억제하여 결정 회전의 영향이 커진 것을 알 수 있다. 그러나 cusp 자기장은 자유 계면과 중심축에서 영향이 적으므로 결정 회전 속도는 자유 계면에

여전히 분포하여 결정에서 도가니 벽으로 향하는 유동을 만든다. 그래서 결정 회전의 유동 셀이 도가니 벽까지 닿게 되어 자오면 유동은 Fig. 13(a)와 같다.

Table 5는 자기장이 증가함에 따라 가열기 출력이 증가하고 용융액내의 최고 온도도 따라서 증가하는 것을 보여준다. 반면 도가니 내벽의 열전달률은 0.02 Tesla일 때 최고가 된다. 이 원인은 도가니 벽에서 열전달 형태가 자유 계면 근처에서는 대류로, 도가니 바닥 근처에서는 비교적 큰 온도 구배에 의한 전도로 열전달되기 때문이다.

용융액의 최고 온도가 자기장의 세기에 따라 증가하여 용융액내의 최고 산소 농도 역시 Table 5와 같이 증가한다. 도가니 바닥에서 자오면 유동이 억제되어 확산에 의해 산소가 용융액 속으로 전달된다. 그러나 자유 계면 근처의 도가니 벽에서 유출된 산소는 결정 회전에 의해 도가니 벽과 닿는 유동을 따라 결정으로 높은 농도의 산소가 그대로 Fig. 13(c)와 같이 전달된다. 그리고 자연 대류와 마찬가지로 결정 끝에서는 자유 계면의 영향으로 산소 농도가 낮아진다.

한편 자기장이 더욱 세지면(B=0.05 Tesla) 결정 끝에서 최고 자오면 속도가 Table 5에 나타나듯이 크기 때문에 자유 계면에 있는 낮은 산소 농도를 가진 용융액이 결정 쪽으로 다가오는 것을 막게 된다. 그래서 0.02 Tesla와 같이 결정 끝에서 산소 농도가 급격히 낮아지는 현상이 없어져 결

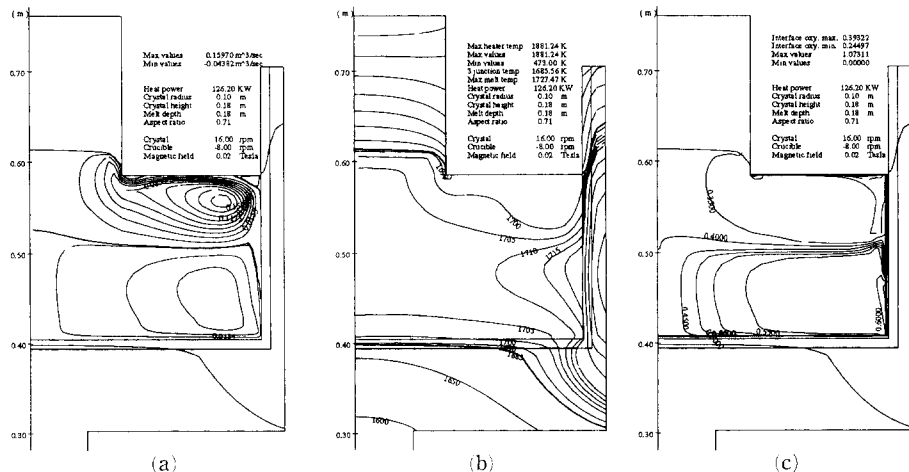


Fig. 13 Aspect ratio = 0.7, counter rotation with latent heat, heater power = 126.2 kW, B = 0.02 Tesla, (a) streamlines, (b) isotherms, (c) oxygen concentration

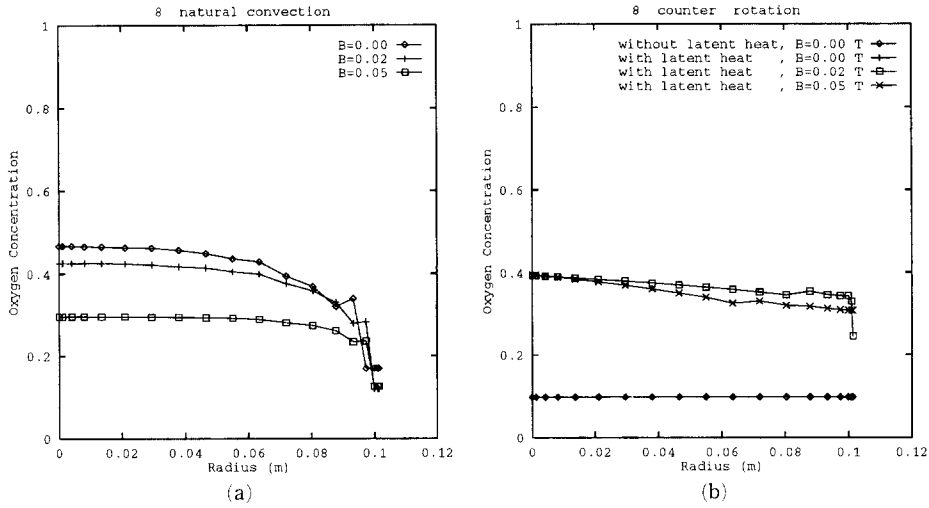


Fig. 14 Distribution of oxygen concentration along the melt and crystal interface for the case of (a) natural convection only, (b) counter rotation

정 반경 방향으로 산소 농도가 Fig. 14(b)와 같이 비교적 균일해졌다.

6. 경계 조건에 관한 고찰

Fig. 15는 결정과 도가니가 반대 방향으로 회전

할 때의 도가니 벽, 바닥과 자유 계면에서의 열 플럭스 분포를 나타낸다. 도가니 벽에서 8.88 kW의 열이 용융액으로 전달되어 도가니 바닥으로 1.31 kW, 자유 표면으로 2.69 kW 그리고 결정 표면으로 4.49 kW가 빠져나간다. 이와 같은 결과는 다른 경계조건 없이 주어진 가열기 출력으로부터 복사

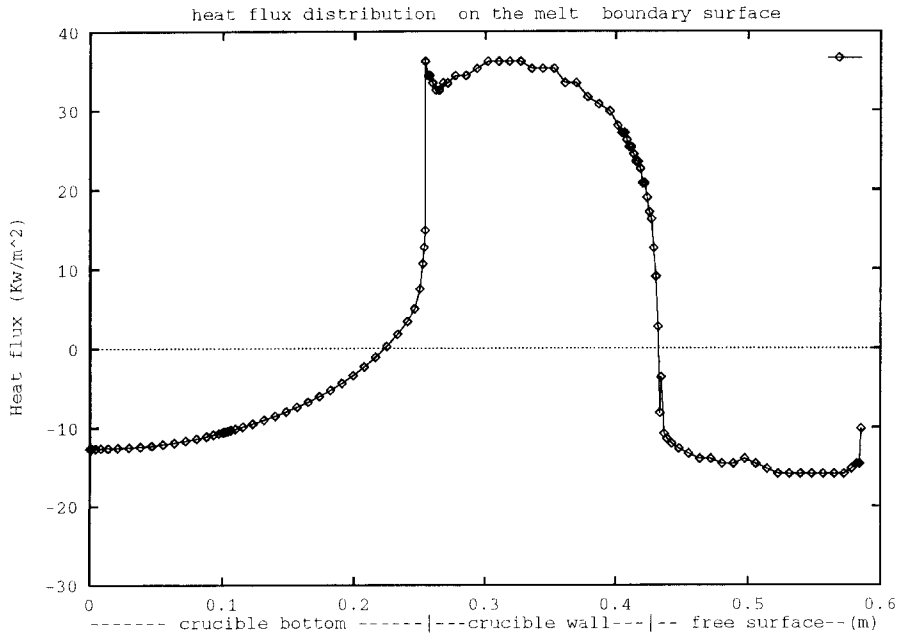


Fig. 15 Heat flux distribution along boundaries: counter rotation without latent heat, aspect ratio=0.7.

열전달을 해석하여 얻은 결과로 경계면들의 열플럭스 분포를 살펴보면 일반적으로 복사를 고려하지 않은 수치 해석에서 경계 조건으로 쓰이는 도가니 바닥의 단열 조건과 도가니 내벽에서 일정한 열 플럭스 분포와는 차이가 있다. 본 계산을 통해 실제 공정에서도 도가니 밑바닥인 graphite sustainer (Fig. 1)으로 꽤 많은 열 손실이 있음을 예상할 수 있다.

Fig. 16은 경계면에서의 온도 분포를 나타내는데, 결정과 도가니가 반대 방향으로 회전할 때 도가니 바닥에서는 가열기 가까이 있는 곳의 온도가 증가하는 것을 제외하면 비교적 일정한 온도 분포를 보인다. 그러나 도가니 벽과 자유 계면에서는 온도차가 크다. 이와 같이 복사를 고려하여 구한 경계면에서의 온도 분포는 복사를 고려하지 않고 적용했던 변하지 않는 온도 경계 조건과는 큰 차이를 보여주고 있다.

비교를 위해 일정한 도가니 벽 온도와 도가니 바닥에서 단열 경계 조건을 사용하여 8" 결정 성장 공정을 계산하여 Fig. 17에 나타내었다. 공정 조건은 자기장 없이 결정과 도가니가 16rpm과 -8rpm으로 반대 방향으로 회전하며 응고 계면은 평탄한 것으로 가정하였다. 이때 사용된 결정과 도가니 벽

의 온도 차이는 잠열 없이 복사를 고려한 8" 결정 성장 공정을 계산하여 얻은 결과인 42K로 가정하였다.

복사를 고려하여 계산한 Fig. 11과 비교하면 온도장에서부터 큰 차이가 있다. 8" 결정임에도 불구하고 온도장(Fig. 17(b))은 여전히 전도에 의해 열전달이 일어나는 온도 분포를 나타낸다. 그리고 Table 6에 나타났듯이 도가니 벽에서 용융액으로 전달되는 열은 1.87 kW에 불과하다. Fig. 17(a)에서 자오면 유동이 결정 아래쪽에만 나타나는 반면, 도가니 회전의 영향이 용융액 내부로 깊이 전달되어 도가니 벽 쪽에서는 거의 완전한 강제 회전 운동을 함을 알 수 있다. 그리고 결정 회전에 의한 유동 셀의 크기가 도가니 회전에 의해 생긴 유동 셀에 비해 작아진 것을 알 수 있다. 또한 자오면 최고 속도에서도 약 40%의 차이가 Table 6에 나타난다. 이와 같은 유동 변화 때문에 용융액내의 산소 농도 분포에도 많은 차이가 생긴다. 산소 농도의 균일함에는 차이가 없지만, 절대값은 0.0975와 0.656으로 큰 차이가 있는 것이 Table 6에 보인다. 따라서 보다 정확하게 공정을 모사하기 위해서는 전체 CZ 시스템의 복사열의 분포 해석이 필수적임을 알 수 있다.

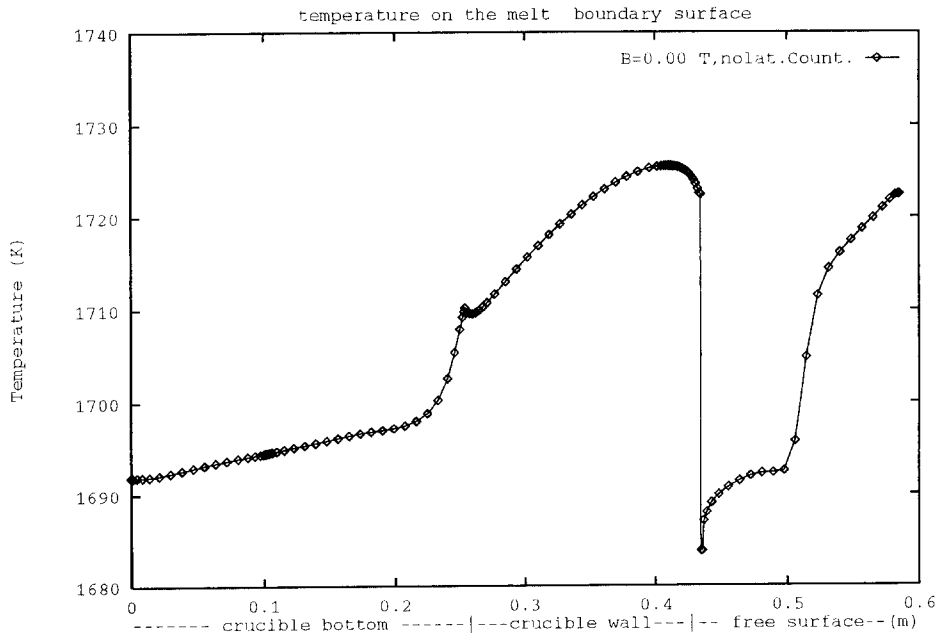


Fig. 16 Temperature distribution along boundaries : counter rotation without latent heat, aspect ratio=0.7, counter rotation.

Table 6 Aspect ratio = 0.7, the effects of thermal boundary condition and solidification front shape on maximum velocity, oxygen concentration front, the ratio of maximum/minimum streamfunction value and heat transfer rate from crucible wall.

	with radiative heat flux B.C	without radiative heat flux B.C
Max. velocity (m/sec)	0.0561	0.0325
Max. oxygen on solidification front	0.09775	0.6566
Min. oxygen on solidification front	0.09750	0.6562
Max. streamfunction/Min. streamfunction	2.07	0.934
Heat transfer rate from crucible wall	9.037	1.87

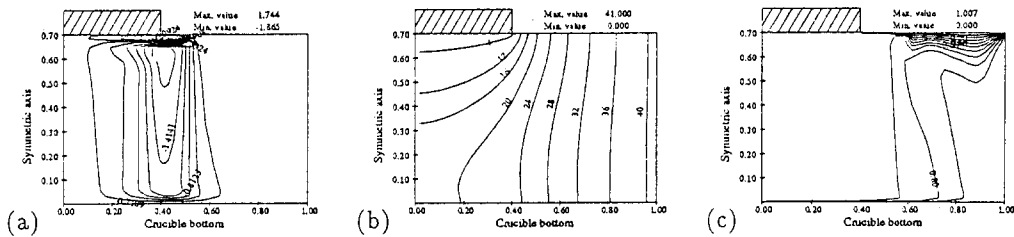


Fig. 17 Counter rotation : aspect ratio = 0.7, 8" diameter crystal, $Gr = 6.29 \times 10^7$, $Re = 57000$, $N = 0, 0$, $B = 0, 0$ Tesla, (a) streamlines, (b) isotherms, (c) oxygen concentration

7. 결론

먼저 용융액내에 대류 유동이 없다고 가정한 상태에서 구한 계산에서 결정 성장 초기에는 도가니와 열 쉴드에 의해 챔버로 방출되는 복사열의 영향으로 많은 가열기 출력이 필요하였으나, 결정이 성장하면서 이 챔버로의 복사열 손실을 막아 가열기 출력이 감소하였다. 계속되는 결정 성장은 도가니 내벽의 노출을 가져와 다시 가열기 출력이 조금씩 증가하였다. 따라서 가열기 출력을 줄이기 위해서는 가열기 위치와 열 쉴드의 형상을 최적으로 조정하여야 함을 알 수 있다. 결정 표면에서는 도가니 내벽 높기와 열 쉴드 윗부분 높이에서 주위의 형상과 표면 온도 차이로 정미 열 플럭스의 방향이 변하였으며, 이러한 결정 표면에서의 열 플럭스 변화는 결정이 완전히 식은 후에도 결정 구조나 물리적 특성에 많은 영향을 주어서 결정 결함이 생기는 한 원인이 된다.

자연 대류를 고려한 계산에서는 대류가 없을 때는 용융액내의 온도차가 139.2 K이던 것이 자연

대류의 영향으로 온도차가 32 K로 감소하여 가열기 출력이 감소했다. 또한 cusp 자기장이 있을 때는 자오면의 유동이 억제되어 대류 열전달이 감소하므로 상대적으로 다시 전도의 영향이 증가하여 용융액내의 온도차가 증가하고 그에 따라 필요 가열기 출력도 증가하였다. 자연 대류가 있을 때 유동장의 영향으로 결정에서 반경 방향으로의 산소 농도의 변화가 있다. 그러나 cusp 자기장은 자유계면의 유동 속도를 줄여 결정으로 전달되는 산소 농도를 줄이고 결정에서의 산소 농도를 반경방향으로 균일하게 한다.

결정과 도가니를 반대 방향으로 회전시켰을 때는 도가니 벽 근처의 유동이 억제되어 용융액으로 열전달이 전도에 의해 일어나게 되어 자연 대류에 비해 다소 많은 가열기 출력이 필요하다. 그리고 도가니 벽 근처의 자오면 유동이 억제되어 산소는 확산으로 결정 쪽으로 전달되어 결정에서 낮고 균일한 분포를 보인다. 자기장은 도가니 회전에 의한 유동을 억제하고 결정 회전에 의한 유동에는 영향을 적게 주기 때문에 결정 부근에서 자유계면을 따라 도가니까지 닿는 유동이 생긴다. 이 유동을

따라 산소가 바로 결정으로 전달되어 자기장이 없을 때에 비해 높은 산소 농도를 나타냈다. 용융액이 결정으로 상변화를 하는 응고 계면에서의 잠열은 결정으로 전달되는 열량에 비해 매우 작으나 응고 온도 조절에 영향을 미쳐 가열기 출력의 감소를 가져왔으나 유동장, 온도장, 산소 농도 분포에는 별 영향이 없었다. 전체 CZ 시스템의 복사 열전달을 고려했을 경우 도가니 바닥과 자유표면으로 많은 열 손실이 있음을 확인하였다. 이로부터 도가니 벽에서 일정한 온도, 도가니 바닥에서 단열 경계 조건이 CZ 공정의 실제 조건과는 다름을 알 수 있다. 따라서 정확하게 CZ 단결정 성장 공정을 모사하기 위해서는 대류와 결합된 복사열전달을 해석하는 것이 필수적이다.

참고문헌

- (1) Bornside, D. E., Kinney T. A. and Brown, R. A., 1991, "Minimization of Thermoelastic Stresses in Czochralski Grown Silicon : Application of the Integrated System Model," *J. Crystal Growth* 108, p. 779.
- (2) Series, R. W. and Hurle, D. T. J., 1991, "The use of Magnetic Fields in Semiconductor Crystal Growth," *J. Crystal Growth* 113, p. 305.
- (3) Milhečić, M. and Wingerath, K., 1987, "Three Dimensional Simulations of the Czochralski Bulk flow in a Stationary Transverse Field and in a Vertical Magnetic Field : Effects on the Asymmetry of the Flow and Temperature Distribution in the Si Melt," *J. Crystal Growth* 82, p. 318.
- (4) Hicks, T. W., Organ, A. E. and Riley, N., 1989, "Oxygen Transport in Magnetic Czochralski Growth of Silicon with a Non-uniform Magnetic Field," *J. Crystal Growth* 94, p. 213.
- (5) Hiroshi Hirata and Keigo Hoshikawa, 1992, "Three-Dimensional Numerical Analyses of the Effects of a cusp Magnetic Field on the Flows. Oxygen Transport and Heat Transfer in a Czochralski Silicon Melt." *J. Crystal Growth* 125, p. 181.
- (6) Sabhapathy, P. and Salcudean, M. E., 1991, "Numerical Study of Czochralski Growth of Silicon in an Axisymmetric Magnetic Field." *J. Crystal Growth* 113, p. 164.
- (7) Gebhart, B., 1989, *Heat Transfer*. McGraw-Hill. New York, p. 133.
- (8) Atherton, L. J., Derby, J. J. and Brown, R. A., 1987, "Radiative Heat Exchange in Czochralski Crystal Growth." *J. Crystal Growth* 84, p. 57.
- (9) Kinney, T. A., Bornside, D. E., Brown, R. A., and Kim, K. M., 1993, "Quantitative Assessment of an Integrated Hydrodynamic Thermal-Capillary Model for Large-Diameter Czochralski Growth of Silicon : Comparison of Predicted Temperature Field with Experiment." *J. Crystal Growth* 126, p. 413.
- (10) Patankar, S. V., 1980, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, McGraw-Hill.
- (11) Incropera, F. P., DeWitt, D. P., 1990, *Introduction to Heat Transfer*, John Willey & Sons Inc.