

## 초크랄스키 단결정 장치에서의 실리콘유동

이재희, 이원식

경일대학교 표면물리연구실, 경산, 712-701

## Silicon melt motion in a Czochralski crystal puller

Jae-Hee Lee and Weon-Sik Lee

Surface Physics Laboratory, Kyungil University, Kyungsan 712-701, Korea

요 약 초크랄스키법에서의 열전달은 도가니 내의 온도차, 실리콘 단결정과 도가니의 회전, 그리고 표면장력 때문에 일어나는 대류, 그리고 전도와 복사에 의해 일어난다. 본 연구는 잠열 처리를 위하여 고정 그리드를 사용한 유한차분법을 사용하여 초크랄스키법에 관한 수치해석법을 개발하였다. 계의 표면에서 일어나는 복사열전달은 표면요소의 view factors를 계산하여 처리하였다. 8" 실리콘 단결정을 성장시키는 실제 계의 유동은 난류임을 확인하고, 난류모델을 사용하여 계산하였다. 또, cusp 자기장의 영향을 수치해석적으로 계산하였다. Cusp 자기장은 자연대류와 단결정과 도가니의 회전에 의한 강제대류를 잘 제어함을 확인하였다. 자기장을 조절함으로써 실리콘 단결정 내의 산소농도를 제어할 수 있었다. 이 결과는 실리콘 단결정을 성장시키며 단결정 내의 산소량을 조절할 수 있음을 보여준다.

Abstract The heat in Czochralski method is transferred by all transport mechanisms such as convection, conduction and radiation and convection is caused by the temperature difference in the molten pool, the rotations of crystal or crucible and the difference of surface tension. This study develops the simulation model of Czochralski growth by using the finite difference method with fixed grids combined with new latent heat treatment model. The radiative heat transfer occurred in the surface of the system is treated by calculating the view factors among surface elements. The model shows that the flow is turbulent, therefore, turbulent modeling must be used to simulate the transport phenomena in the real system applied to 8" Si single crystal growth process. The effects of a cusp magnetic field imposed on the Czochralski silicon melt are studied by numerical analysis. The cusp

magnetic field reduces the natural and forced convection due to the rotation of crystal and crucible very effectively. It is shown that the oxygen concentration distribution on the melt/crystal interface is sensitively controlled by the change of the magnetic field intensity. This provides an interesting way to tune the desired O concentration in the crystal during the crystal growing.

## 1. 서 론

반도체는 크게 메모리 분야와 ASIC 분야로 나눌 수 있으며, 반도체 재료로는 실리콘과 화합물 반도체로 구분된다. 실제 반도체 시장은 실리콘을 기본소재로 하는 메모리 분야가 주류를 이루고 있다. 메모리 반도체의 고집적화, 저전력화, 소형화는 눈부시게 향상되어 왔으며 앞으로도 계속될 전망이다. 특히 저비용화를 위하여 단결정 실리콘은 점점 직경이 커지고 있으며 더욱 엄격한 품질이 요구되고 있다. 단결정 실리콘을 제작하는 방법은 쇼크랄스키방법, Floating zone방법, Bridgeman방법 등이 있으나 쇼크랄스키방법이 전체 단결정 실리콘 생산의 80% 이상을 차지하고 있다. 최근에는 대부분의 반도체 회사에서 8" 단결정 실리콘을 사용하는 추세이며 5~6년내에 12" 단결정 실리콘이 사용될 것으로 예상된다. 단결정 실리콘의 품질, 특히 불순물 농도와 산소농도의 제어가 메모리소자가 고집적화될수록 더욱 중요하다. 산소나 dopants 등은 실리콘 용융액의 유동과 결부되어 결정으로 전달되기 때문에 유동을 적절히 조절하면 축방향과 반경방향으로 산소와 dopants가 더 균일하고 적절한 농도로 조정될 수 있다. CZ 공정에서 유동을 지배하는 요인은 온도차에 의한 자연대류, 결정과 도가니의 회전에 의한 강제대류, 자유계면에서의 Marangoni 효과 그리고 자기장에 의한 Lorentz force 등이다. 불순물과 산소농도를 제어하기 위하여 도가니 내의 용

융된 실리콘에 자기장을 인가하는 방법을 사용하고 있는데, Lorentz force는 항상 유동의 반대 방향으로 작용하여 유동을 감소시키고 난류적 성격을 억제한다. 이와 같은 현상은 실리콘 용융액의 effective viscosity가 증가함에 해당하여, 이로 인해 요동을 줄이기 때문이다. 따라서 자기장의 크기를 조정하여 유동 형태를 바꾸어 산소나 dopants의 농도를 제어할 수 있다[1]. 가해지는 자기장의 방향에 따라 수평자기장, 수직자기장, Cusp 자기장이 있다. 최근에는 수평자기장과 수직자기장의 장점을 가진 Cusp 자기장이 많이 사용되고 있다. Horizontal의 경우는 자연대류를 억제해서 산소농도를 낮추나 thermal symmetry가 나빠지고[1-3], vertical 자기장은 높은 산소농도의 결과를 얻은 것으로 알려졌다[4,5]. 축대칭인 cusp 자기장은 유동이 균일해지고 자기장의 세기를 변화시키면 산소 농도를 조절할 수 있으므로[6,7] 최근 많이 사용하고 있다. Kakimoto등은 실험실 규모의 쇼크랄스키 단결정 실리콘 성장장치를 만들고 X선을 사용하여 용융상태의 실리콘유동을 직접 관찰하였으나, crucible의 직경이 3"이므로 8" 단결정을 만드는 22" crucible에 비하면 매우 작으므로 산업계에서 필요한 실리콘 유동을 정확하게 이해하기는 어렵다[8]. 그러므로 쇼크랄스키 단결정 실리콘 성장장치 내의 실리콘 유동을 수치 해석적인 방법으로 시도하고 있다.

본 연구에서는 유한차분법을 사용하여 실리콘을 연속적으로 성장시키면서 변화되는

용융된 실리콘의 온도분포 및 유동에 관하여 연구하였다. 또한, 자기장의 인가에 따른 실리콘 유동의 온도분포와 유동에 대하여 전산 모사하고자 한다. 수치 해석은 강제대류가 없는 자연대류, 결정 또는 도가니만 둘 때에 대해서 cusp 자기장의 영향에 따른 유동의 변화를 관찰하고 유동의 변화에 따라 산소 농도장의 변화를 계산하였다. 그리고 결정에서 반경 방향으로 산소 농도 변화를 용융실리콘의 유동과 연관하여 살펴보았다.

## 2. 지배방정식

### 2.1. 유동의 지배방정식

초크랄스키 성장장치는 기하학적으로 축대칭이므로 2차원 원통좌표계를 사용하였다. 연속방정식, 운동량방정식과 에너지방정식을 텐서형으로 나타내면 다음과 같다.

연속방정식 :

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho U_i) = 0 \quad (2.1)$$

운동량방정식 :

$$\rho \left[ \frac{\partial U_i}{\partial t} + U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \right] = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \mu \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right] + S_v \quad (2.2)$$

에너지방정식 :

$$\rho C_p \left[ \frac{\partial T}{\partial t} + U_j \frac{\partial T}{\partial x_j} \right] = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \frac{\partial T}{\partial x_j} \right] + S_T \quad (2.3)$$

$\rho$ 는 밀도,  $\mu$ 는 점성,  $k$ 는 열전도도 그리고  $D$ 는 물질확산 계수를 나타낸다.  $S_v$ 는 중력 및 자기력 등의 효과가 포함되는 소스 (so-urce)항이며  $S_T$ 는 열원 혹은 열 방출을 나타내는 소스 항이다. 유속이 작은 층류 일 때는 변수 값들이 일정한 형식으로 변화하지만 유동이 커지게 되면 일정한 양식으로 변화하는 시간 평균값과 짧은 시간 주기를 갖는 요동이 존재하는 난류로 바뀌게 된다. 유속이 어느 정도 되어야 난류가 일어나게 되는가 하는 것은 일반적으로 Reynolds 수에 의해서 결정된다. Metais 등의 실험에 의하면 강제 대류와 자연대류가 복합되어 있는 계에서는 난류로 천이하는 한계 Rayleigh 수가  $10^5$  정도이다. 초크랄스키 성장계에서 직경 8인치인 실리콘 웨이퍼를 성장시키는 경우에 Rayleigh 수를 계산하면  $1 \times 10^6$ 이 얻어진다. 초크랄스키 성장계에서 용융상의 바닥 온도가 표면온도 보다 높기 때문에, 이 값은 난류천이 한계값 보다 약간 크다. 또한 실제 조업중에 표면온도를 측정된 결과도 짧은 주기의 온도 요동을 보여주고 있다[9]. 또한 직경이 7 cm 정도로 작은 도가니를 사용하여 Rayleigh 수가  $10^5$  정도 범위에 있는 Kakimoto등의 실험에서도 도가니 및 결정의 회전에 따라 온도 요동이 발생하고 있음을 보여주고 있다[10-12]. 따라서, 초크랄스키 성장계의 유동을 모사하기 위해서는 난류에 대한 고려를 할 수 있어야 한다. 본 연구는 많은 모델 중에서 Jones[13] 등이 제안한 k- $\epsilon$  모델을 채택하여 난류 유동을 모사 하였다. 이 모델에서는 난류 운동에너지(k, turbulent kinetic energy)와 와(渦) 에너지 소산률( $\epsilon$ , eddy energy dissipation rate)에 대한 지배 방정식으로부터 k와  $\epsilon$ 을 구하여 난류 점성을 구한다.

### 2.2. 일반 전달방정식

지배 방정식들은 모두 비슷한 모양을 가지고 있기 때문에 (2.4)식과 같은 하나의 일반화된 형식의 미분 방정식을 세울 수 있다.

일반 전달 방정식( $\phi$ ):

$$\rho \left[ \frac{\partial \phi}{\partial t} + v \frac{\partial \phi}{\partial r} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} \right] = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial r} \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right] + S_{\phi} \quad (2.4)$$

(2.4) 식에서 변수  $\phi$ 에 대한 전달 계수( $\Gamma_{\phi}$ )와 원천항( $S_{\phi}$ )은 Table 1과 같다.

췌크랄스키 성장노에서 발열체로부터 도가니 바닥과 외벽을 통하여 들어온 열량은 모두 복사에 의해서 빠져나간다. 복사에 의한 열 방출이 일어나는 곳은 도가니 윗면, 도가니 내벽, 용융상 표면, 결정 표면 그리고 결정 윗면 등이다. 이면들 중에서 결정 윗면과 도가니 윗면은 거의 외부 대기로 열 방출을 하지만 도가니 내벽과 용융상 표면 그리고

결정 표면 사이에는 복사열의 상호 작용이 있기 때문에 외부 대기를 포함한 네 면간의 열 교환을 계산해 주어야 한다. 계산에 사용한 그리드 계는 Patankar 등[14]이 사용한 스칼라 변수의 그리드와 속도 변수의 그리드가 서로 다른 위치에 존재하는 변위 그리드 계이다. 유체의 유동방정식에서 압력은 다른 변수와는 달리 지배방정식을 세울 수 없기 때문에 유동장을 해석하기 위해서 압력에 대한 처리가 필요하다. 본 계산은 Patankar 등[14]이 제안한 SIMPLE 연산법을 사용하였다.

### 2.3. 유동방정식에서 경계처리

#### 2.3.1. 벽 근처처리

벽에 평행한 속도 성분에 대해서 난류 벽 함수 모델을 사용한 결과 벽에서의 전단 응력은 아래와 같다.

Table 1  
The values of coefficients and sources of various variables

$\phi$	$\Gamma_{\phi}$	$S_{\phi}$
$u$	$\mu + \mu_t$	$\rho g - \frac{\partial P}{\partial x}$
$v$	$\mu + \mu_t$	$\mu_{\text{eff}} \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{v}{r} \right) + \rho \left( \frac{w^2}{r} \right) - \left( \frac{\partial P}{\partial r} \right)$
$w$	$\mu + \mu_t$	$\mu_{\text{eff}} \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{w}{r} \right) - \rho \left( \frac{vw}{r} \right)$
$T$	$\frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_t}{\sigma_T}$	Latent heat
$k$	$\frac{\mu_t}{\sigma_k}$	$G - C_D \rho \epsilon$
$\epsilon$	$\frac{\mu_t}{\sigma}$	$C_1 \frac{\epsilon}{k} G - C_2 \rho \frac{\epsilon^2}{k}$

$$y^+ > 11.63, a = -\frac{\rho x C_{\mu}^{0.25} k^{0.5} u}{\ln(Ey^+)} A_B, b=0$$

$$y^+ \leq 11.63, a = \frac{\mu}{A x} A_B, b=0$$

2.3.2. 표면처리

용융상 표면에서 온도차이가 생기면 표면 장력이 달라지게 되고 표면장력 차이가 생기면 표면에 평행한 방향으로 유동에 대한 구동력이 생기게 된다. 검사 체적 내에서 전단 응력과 표면장력 기울기의 관계에서 (2.5)식과 같이 쓸 수 있다[14].

$$\tau_b = -\mu \frac{\partial v}{\partial x} = \frac{\partial \sigma}{\partial y} \quad (2.5)$$

표면장력( $\sigma$ )은 온도 및 농도의 함수이지만 본 계산에서는 순물질의 결정 성장을 다루기 때문에 표면 장력을 온도만이 함수로 가정하여 (2.5)식과 같이 계산한다.

$$\tau_b = \left( \frac{\partial \sigma}{\partial T} \right) \left( \frac{\partial T}{\partial y} \right) \quad (2.6)$$

(2.6)식에서 알 수 있는 바와 같이 표면에서 작용하는 전단 응력은 경계 그리드의 값과 무관하기 때문에 계수들의 값은 아래와 같다.

$$a = 0$$

$$b = \left( \frac{\partial \sigma}{\partial T} \right) \left( \frac{\partial T}{\partial y} \right) A_B$$

2.3.3. 결정 부분처리

고상을 점성이 매우 큰 액상처럼 가정하고 계산을 진행하기 때문에 결정 옆면과 윗면에 대한 경계 조건을 주어야 한다. 이때는 경계 점에서 축방향 속도(=성장속도)와 회전 속도가 일정하다.

2.4. 수치해석

수치 해석은 Patankar의 SIMPLER algorithm을 이용하여 cylindrical coordinate에서 축대칭의 자오면 (r, z) 유동  $u_r, u_z$ 과 원주 방향  $u_\theta$ 을 정상 상태에서 풀었다[14]. 결정의 인장 속도가 1 mm/min 정도이기 때문에 충분히 정상 상태로 가정할 수 있으며 용융액의 중형비를 바꿈으로서 결정 성장을 모사할 수 있다. Matrix solver로는 Tridiagonal matrix algorithm을 사용하였고 power law scheme으로 convective term을 처리했다.

2.5. Cusp magnetic field 계산

실린더 좌표계에서 속도와 자기장 성분은 다음과 같다.

$$u = (u_z, u_r, u_\theta)$$

$$B = (B_z, B_r, B_\theta)$$

$$Su_z = \rho g - \frac{\partial P}{\partial z} - \sigma B_r (B_r u_z - B_z u_r)$$

$$Su_r = -\frac{\partial P}{\partial r} - \mu \frac{v}{r^2} + \rho \frac{w^2}{r} + \sigma B_r (B_r u_z - B_z u_r)$$

$$Su_\theta = -\mu \frac{u_\theta}{r^2} - \rho u_r \frac{u_\theta}{r} - \sigma \left( B_r \frac{\partial \Phi}{\partial z} - B_z \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right) + u_\theta (B_z^2 + B_r^2)$$

Maxwell 방정식  $\nabla^2 \Phi = \nabla \cdot (\vec{u} \times \vec{B})$ 에서 좌변은 다음과 같다.

$$\nabla^2 \Phi = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \theta^2} \right)$$

Vector identity에서 다음 식은 성립한다.

$$\vec{u} \times \vec{B} = \vec{a}_r(u_r B_\theta - u_\theta B_r) - \vec{a}_z(u_z B_\theta - u_\theta B_z) + \vec{a}_\theta(u_z B_r - u_r B_z)$$

Cusp 자기장의 경우  $B_\theta = 0$ ,  $\frac{\partial \Phi}{\partial \theta} = 0$ 이므로

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\vec{u} \times \vec{B}) &= -\frac{\partial(u_\theta B_r)}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r u_\theta B_z)}{\partial r} \\ &\quad + \frac{1}{r} \frac{\partial(u_z B_r - u_r B_z)}{\partial \theta} \\ &= -\frac{\partial(u_\theta B_r)}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r u_\theta B_z)}{\partial r} \\ &= -B_r \frac{\partial u_\theta}{\partial z} - u_\theta \frac{\partial B_r}{\partial z} + \frac{u_\theta B_z}{r} \\ &\quad + B_z \frac{\partial u_\theta}{\partial r} + u_\theta \frac{\partial B_z}{\partial r} = a \end{aligned}$$

라고 두면

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right) &= a \\ &= \frac{\Phi_{j,k+1} - 2\Phi_{j,k} + \Phi_{j,k-1}}{(\Delta z)^2} \\ &\quad + \frac{\Phi_{j+1,k} - 2\Phi_{j,k} + \Phi_{j-1,k}}{(\Delta r)^2} \\ &\quad + \frac{1}{r_j} \left( \frac{\Phi_{j+1,k} - \Phi_{j-1,k}}{2\Delta r} \right) \end{aligned}$$

에서 Cusp 자기장을 수치 해석적으로 계산할 수 있다.

Cusp 자기장은 Fig. 1과 같이 자유계면으로부터 같은 거리로 떨어져 있고 중심이 결정의 중심축에 있는 두개의 current loop ring에 서로 반대로 흐르는 전류를 걸었을 때 발생하는 자기장이다. 이 자기장은 Fig. 2에서 보듯이 축대칭이고 결정의 중심과 자유계면이 만나는 점에서는 자기장의 세기는 0이다. 또한 계면에 대칭이므로 자유계면에서는 계면에 수직 성분의 자기장은 없으며 도가니의 벽과 바닥에 수직한 자기장의 성분이 크다. Fig. 2(a), (b), (c)는 current loop

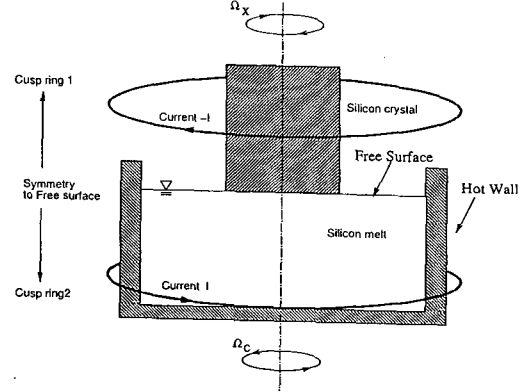


Fig. 1. A schematic diagram of CZ process with a cusp magnetic field.

ring에 흐르는 전류를 증가시킴에 따라 도가니 내부의 자기장이 증가되는 것을 잘 보여준다. Fig. 3(a), (b)는 current loop ring의 자유계면으로부터의 거리가 가까울수록 자기장이 증가하고, 멀어질수록 자기장이 감소함을 잘 보여준다. 자기장의 존재 때문에 발생하는 Lorentz force는 자기장이 유동 방향과 직각일 때 최대가 되므로, 도가니의 벽과 바닥 근처의 유동은 cusp 자기장 때문에 난류의 성분을 줄이고 벽 근처의 유동을 억제하여 벽면에서 유출된 산소의 전달을 조절할 수 있으리라 기대할 수 있다. 반면 결정 근처는 자기장의 세기가 0이고 자유계면에서는 자오면의 유동 성분과 평행하기 때문에 이 근처의 유동에 영향을 주지 않는다. 그러나 원주 방향의 유동 성분은 자기장에 어디에서나 항상 수직하므로 크게 감소된다. 모든 실제 용융상의 실리콘의 경우 magnetic Reynolds number( $Re_m$ )가 1보다 매우 작기 때문에(본 연구의 경우  $Re_m \approx 10^{-4}$ ) 자기장과 유동이 결부되어 생긴 유도전류에서 발생하는 유도 자기장은 크기가 매우 작으므로 무시할 수 있다[6]. 즉, 자기장은 유동에 Lorentz force로 영향을 주지만 유동은 유도 자기장 형성에 영향을 주지 않는 것으로 생각할 수 있다. 실

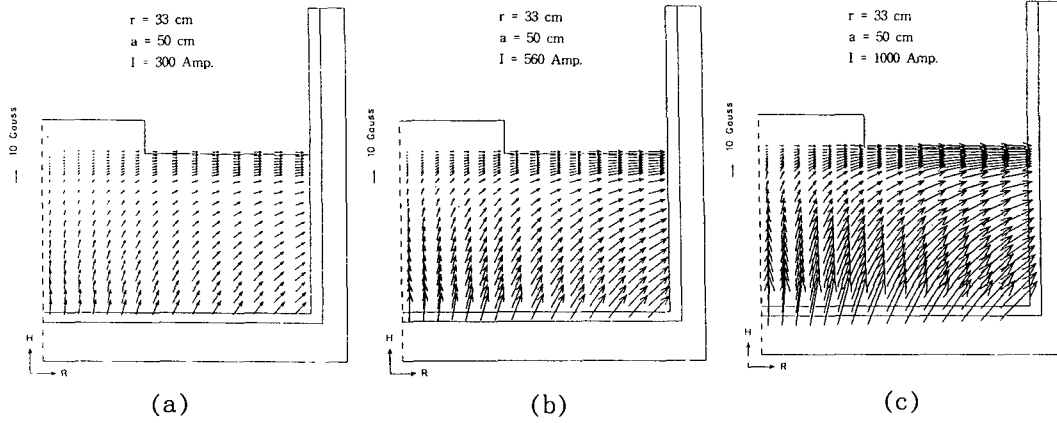


Fig. 2. Vector plot of cusp magnetic field (a)  $I=300$ , (b)  $I=560$ , and (c)  $I=1000$  Amperes.

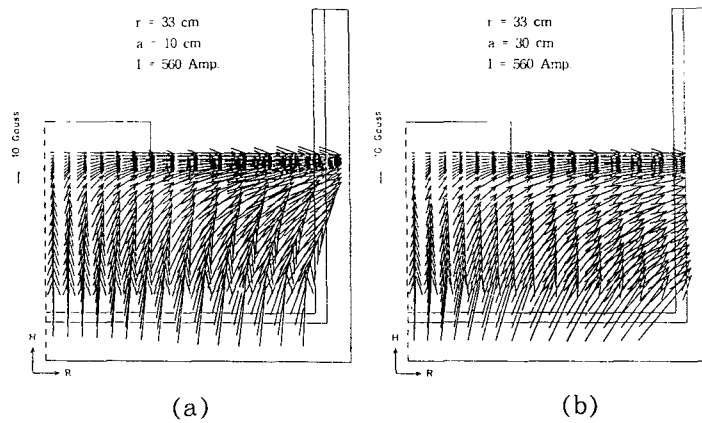


Fig. 3. Vector plot of cusp magnetic field (a)  $a=10$  cm and (b)  $a=30$  cm.

리론은 자성체가 아니므로 유전율  $\mu_0$ 는 진공 중에서 측정한 값을 사용하였다[7].

### 3. 결과 및 고찰

계산에 사용한 물성값은 [1-15,16]를 참조하였다. 실리콘 성장시 도가니는 외부가 흑연으로 되어 있고 실리콘과 접촉하는 부분은 석영이기 때문에 이들에 대한 물성값도 고려하였다.

Fig. 4(a)는 도가니와 결정회전이 각각  $W_s$

$=W_s=0$  rpm일 때 자오면 유동(meridional flow)과 온도장이다. 실리콘 용융액의 Prandtl 수가 0.01로 대류 보다는 전도에 의해 열이 전달되는 것을 알 수 있다. 온도장에 의해 도가니 벽에서 데워진 용융액은 밀도가 낮아져 상승하여 자유계면을 지나 결정 밑에서 식어진다. 결정 밑에서 식어진 용융액은 대칭축을 따라 내려온다. 이 자오면 유동은 온도 차이로 인한 부력과 표면장력에 의해 발생하며, 대개 Fig. 4(a)와 같이 unicellular이다. 보는 바와 같이 양벽에서 가열되면, 용융 흐름은 벽 위로 이동하여 자유표면을 따

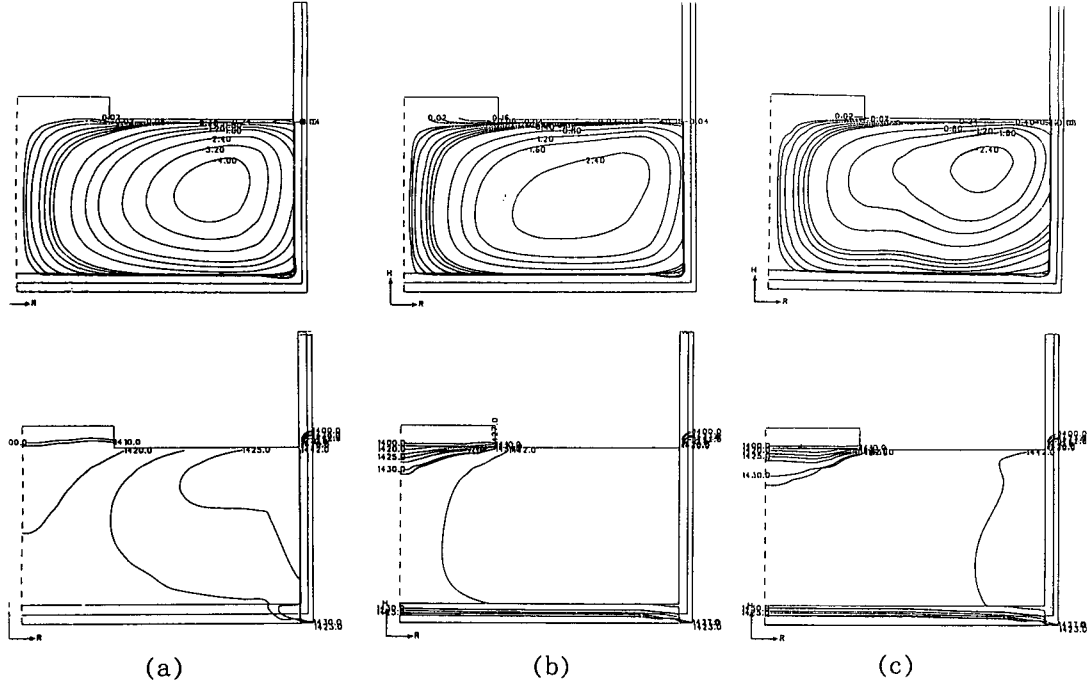


Fig. 4. Flow and temperature field profiles for  $W_c=W_s=0\text{rpm}$  with (a) 0 T, (b) 0.01 T, and (c) 0.05 T

라서 결정을 향하여 움직인다. 이 영역에서 반경방향 속도는 3 cm/s으로 빠른 편이다. 자유표면과 결정의 온도가 낮으므로 용융 유동은 결정 밑에 중심 column으로 내려가서 도가니 밑바닥을 따라서 양벽을 향하여 흐른다. Unicellular 유동은 Langlois와 Lee와 P. Sabhathy, M.E. Salcadian의 수치 계산과 잘 일치하는 유동임을 확인하였다[17,18]. 결정계면은 flat하다고 했으므로 온도는 Fig. 4(a)에서와 같이 실리콘 용융온도인 1410°C이다. Fig. 4(a)에서와 같이 열대류 흐름 때문에 용융상에서 등온선이 벽쪽 가까이에서 크게 꺾이고 있으며, 결정과 벽사이의 온도 차이는 약 24°C이다. Fig. 4(b)와 Fig. 4(c)는 자기장이 0.01 및 0.05 tesla일 때의 자연대류의 유동과 온도장이다. 자기장에 의하여 유동의 운동방향과 반대방향으로 힘이 작용하게 됨으로 자기장이 커질수록 자오면 유동

의 속도인 자연대류의 세기가 감소하며 그 결과가 Fig. 4(b)와 Fig. 4(c)가 잘 보여준다. 또한 대류열전달이 감소하므로 전도가 큰 역할을 하며 용융실리콘내의 온도차이가 증가하게 된다. 즉, 자기장이 유동의 운동을 감소시키고 대류열전달을 감소시키며, 전도 열전달을 증가시킨다. 자기장은 유동과 반대방향으로 Lorentz force를 발생시키므로 자연대류로 생긴 자오면 유동을 억제하여 속도가 감소되는 것을 볼 수 있다. Cusp 자기장은 도가니 벽과 바닥의 유동과 수직하고 자속 밀도가 높기 때문에 도가니 벽과 바닥에서 자오면 유동 속도가 매우 줄어들었다. 또한 유선을 보더라도 유동량이 감소하였다. 자기장은 유동량을 감소시키며 셀의 형태에도 영향을 주고 있다. 자기장을 증가시키에 따라 셀의 중심이 결정 밑으로 이동한다. 셀의 중심이 결정 쪽으로 이동하는 것은 cusp



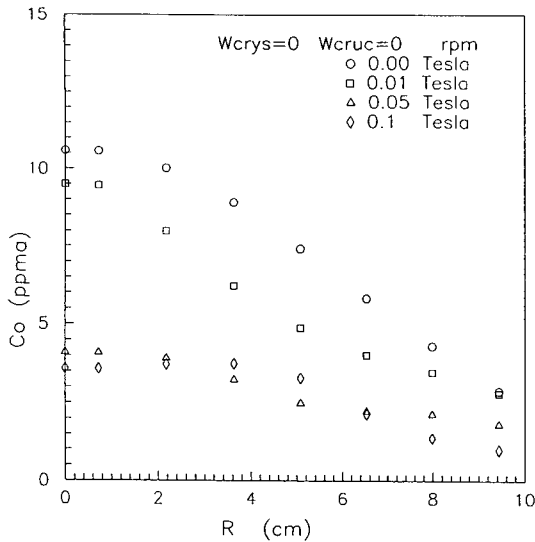


Fig. 5. Oxygen concentration profiles with increasing magnetic field intensity when  $W_c = W_s = 0$  rpm.

자기장의 특성 때문에 생기는 것이다. Cusp 자기장은 결정의 중심에서는 자속밀도가 0이고 자유계면과 대칭축에서는 자오면 유동과 평행하기 때문에 유동에 아무런 영향을 주지 못한다. 그러므로 셀의 중심은 자기장의 영향이 적은 결정 밑으로 움직이게 된다. 온도장은 Pr 수가 0.01로 적기 때문에 지배적으로 전도에 의해 열전달되는 형태를 보이지만, 자기장을 걸게 되면 다소 차이가 보인다. 자기장을 걸기 전에는 자오면의 유동에서 도가니 벽과 바닥 그리고 자유계면에서 크기 때문에 유동을 따라 온도장이 휘어져 있는 것을 볼 수 있다.

Fig. 5는 단결정반경대 결정내의 산소농도를 나타낸 것이다. 자기장이 없는 산소농도장은 유선과 유사하게 나타나 산소는 유동장에 의해 지배됨을 알 수 있다. 산소의 Schmidt 수가 6으로 산소의 전달은 확산 보다는 대류에 의해 이루어진다. 도가니 벽과 바닥에서 자오면 유동의 속도가 빨라 도가니에서 나온 산소가 그대로 유동을 따라 움직인다. 자유

계면에서 모든 산소가 날아가기 때문에 산소가 자유계면 밑을 지나는 유동을 따라가던 산소가 확산에 의해 자유계면쪽으로 전달된다. 그러나 자유계면 밑의 자오면 유동이 빨라 많은 산소가 빠져나가지 못하고 높은 산소농도가 그대로 결정 밑으로 들어오기 때문에 높은 산소농도가 보인다. 단결정의 중심 부분에 10 ppm 정도의 농도를 가지며, 가장자리로 갈수록 산소농도가 4 ppm까지 낮아진다. 자기장을 걸게 되면 자유계면 부근의 유동이 감소하여 많은 산소가 확산에 의해 자유계면을 통해 대기로 전달되는 시간이 길게 된다. 도가니 벽과 바닥에서 유동이 억제되므로 확산으로 용융액으로 전달되는 산소는 비교적 빠른 유동을 따라 전달된다. 대부분의 자오면 유동이 자유계면을 지나는데, 그 속도가 감소하여 많은 산소가 대기로 빠져나갈 시간이 있으므로 농도는 더 낮아지게 된다. 이와 같은 결과로 반경방향으로의 결정에서의 산소농도는 Fig. 5와 같이 나타난다.

Fig. 6은 도가니와 결정 회전이 각각  $W_c = 0$  rpm,  $W_s = 5, 10, 15$  rpm일 때 자오면 유동장과 온도장이다. 결정 회전에 의한 강제대류와 자연 대류가 있을 때의 경우이다. 결정 회전속도가 작을 때는 자오면 유동은 Fig. 4와 같이 비슷한 유동이므로 cell의 변화에는 별 영향이 없었다. 그러나 결정 회전속도가 증가할수록 결정아래 부분에서 강제대류가 증가하고 용융액 내의 온도가 더욱 일정해짐이 관찰되었다. Fig. 6은 온도장은 유동에 의한 큰 영향이 없으므로 결정이 회전할 때의 온도장은 전도에 의해 지배적으로 전달되는 분포 형태를 보인다. 결정 회전에 의한 원주방향의 속도를 보면 Fig. 6(c)와 같이 원주방향의 속도가 도가니 바닥과 자유계면까지 나타나고 있다. 이와 같은 회전 속도는 원심력을 만들게 된다. 결정 밑에서 용융액을 도가니 벽쪽으로 밀게 되는데 이것은 도

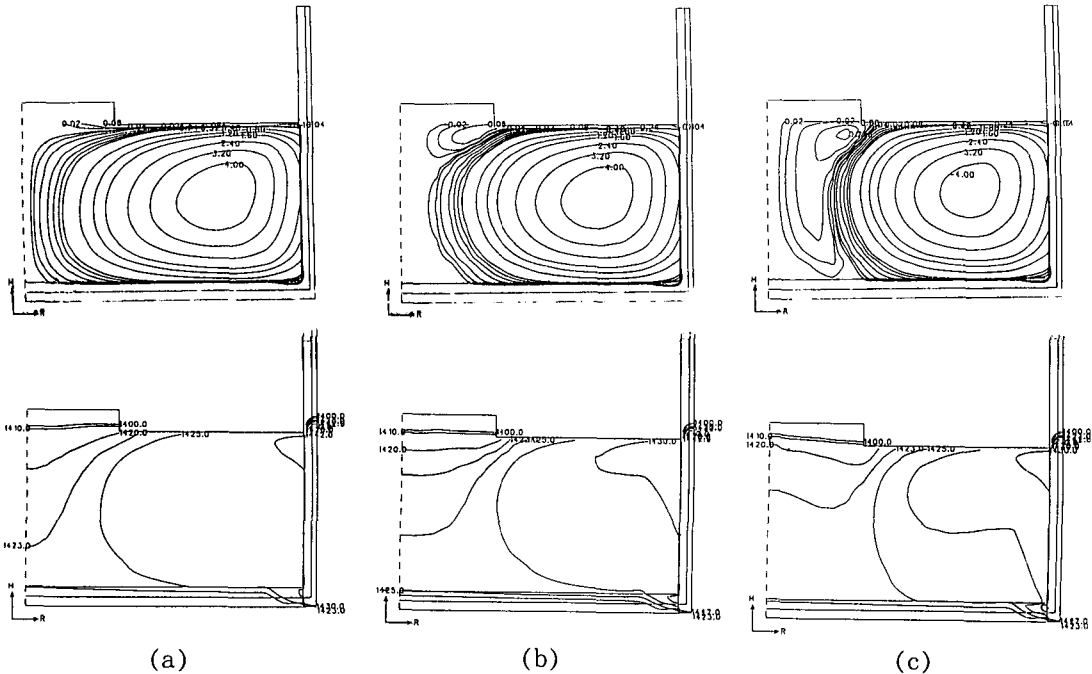


Fig. 6. Flow and temperature field profiles for  $W_c=0$  rpm, (a)  $W_s=5$  rpm (b)  $W_s=10$  rpm and (c)  $W_s=15$  rpm.

가니만 회전할 때와 같은 원인으로 생기는 것이다. 용융액 내의 원주방향의 속도로 생긴 압력장이 결정 부근의 경계층에서 원심력이 증가하여 밖으로 밀리는 유동을 만들게 되는 것이다. 도가니만 회전하는 경우와 다른 것은 원주방향이 전체 용융액에 미치지 못하고 결정 밑에서만 존재하고 도가니 회전에 비해 원심력이 크지 않기 때문에 등압력선이 수평하게 나타난다. 결정에서 멀어질수록 약해지는 원주방향 속도로 원심력이 감소하여 자연대류의 모습이 나타난다(Fig. 6 (c)). 도가니 벽과 바닥 쪽에서 온도차로 생기는 자연대류의 셀을 볼 수 있고 그 위는 결정 회전으로 생긴 셀이 있다. Fig. 7은 Fig. 6과 같은 유동일 때의 산소농도를 계산한 결과이다. 산소장은 대칭축 근처에서 결정으로 올라오는 유동의 영향으로 높은 농도의 산소가 결정 중심으로 전달된다. 결정의 끝에서는 자유계면을 지나 다소 농도가 낮아

진 용융액이 가기 때문에 결정의 반경 방향으로 균일하지 못한 산소농도 분포를 보인다. 자기장은 도가니 근처의 유동을 억제하여 확산에 의해 산소용융액 속으로 전달되다가 자연대류의 유동을 따라 자유계면을 지나 결정으로 전달된다.

Fig. 8은 결정이 회전할 때 cusp 자기장을 걸고 산소농도를 계산한 결과이다. 결정이 회전할 때 cusp 자기장을 걸면 모든 원주방향의 속도와 자기장이 수직하므로 원주방향의 속도를 줄여 결정 근처에서만 원주방향 속도가 존재하게 된다. 원주방향 속도가 감소하여 원심력이 영향을 미치는 부분이 감소하여 자연대류의 영향 범위가 넓게 퍼지는 것을 볼 수 있다. 원주방향의 속도가 자기장에 의해 결정 쪽으로 붙게 됨에 따라 결정 회전이 미치는 부분이 감소하고 자연대류의 셀의 범위가 넓어지게 되는 것이다. 그리고 자기장은 자오면의 유동까지 억제하므로 원

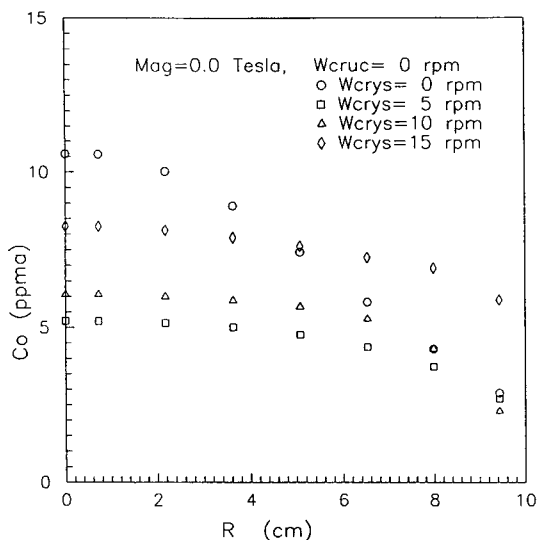


Fig. 7. Oxygen concentration profiles with increasing Si crystal rotation when  $W_c=0$  rpm.

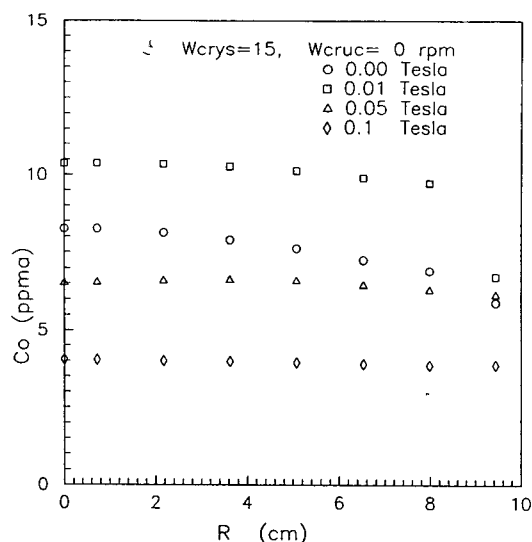


Fig. 8. Oxygen concentration profiles with increasing magnetic field intensity when  $W_c=0$  rpm and  $W_s=15$  rpm.

심력에 의해 밀려 나오는 유동과 자연대류의 유동까지 줄이게 된다. 자속 밀도를 증가시키면 자기장의 영향이 적은 결정 밑으로 유동의 중심 셀이 움직이는 것을 볼 수 있다. 매우 높은 자기장 하에서는 도가니에서 자오면의 유동이 거의 없기 때문에 유출된 산소가 대부분 확산에 의해 전달되는 형태를 보인다. 결정의 회전으로 생기는 유동의 영향을 받는 산소농도장은 결정 강제대류를 따라 전달된다. 도가니 바닥에서 결정의 중심으로 올라가는 산소농도선은 결정의 강제대류가 도가니 바닥까지 닿아 생긴 것이다. 자기장이 없을 때는 결정 중심은 도가니 바닥에서 올라오는 용융액에 의해 전달되는 산소로 농도가 높고 결정 끝쪽은 자유계면을 지나서 오는 것이므로 농도가 중심보다는 낮게 된다. 이 영향으로 결정의 중심에서 상대적으로 높은 산소농도를 보여 반경방향으로 불균일한 산소농도가 나타난다. 실리콘용융의 유동을 층류로 간주할 때와 난류로 간주할 때의 결과는 온도 분포와 유동에서 차이가 남

을 알 수 있다. 그러나 용융상 내의 온도 차이는 거의 같은 값을 갖는다. 이러한 결과는 난류 모델에 의해서 난류 영향이 유효 전도도로 바뀌고 열 전도도로 바뀌면서 열 전도도를 크게 해주는 대신에 유동은 가상의 점성이 생겨나기 때문에 줄어든다. 따라서 난류일 때가 층류일 때보다 대류에 의한 열전달은 감소하고 전도에 의한 열전달이 증가한다. 결국 두 가지 효과가 상호 작용을 하여 용융상 전체를 비교할 때 속도분포는 온도분포보다 더 큰 차이가 난다. 층류로 가정해서 유동을 계산하면 최대 속도가 5 cm/s 정도 얻어지고, 평균속도는 2.5~2.6 cm/s 정도 된다. 이에 비해서 난류 모델을 사용한 계산은 최대 속도가 2 cm/s 정도이고 평균속도는 1 cm/s 정도 얻어진다. 도가니의 크기가 커질 수록 난류가 되는 경향은 더 커지므로 실제 8" 실리콘 잉곳을 성장시키는 도가니에 대한 계산에서는 반드시 난류 모델이 포함되어 있는 모사 프로그램이 사용되어야 함을 알 수 있다. 도가니 크기가 용융상의 유동과

온도 분포에 어떤 영향을 미치는가 고찰해 보자. 도가니가 작아지면서 원주방향 및 반경방향 유속이 작아져서, 대류에 의한 열전달 효과가 감소한다. 도가니가 커지면 Rayleigh 수가 커져서 자연대류의 효과가 커지게 되고 따라서 대류에 의한 열전달이 점차 중요한 전달 기구가 된다. 그리고 작은 도가니에 대한 온도 분포는 대류의 영향보다 전도의 영향이 더 큰 유동 양상을 나타냄을 알 수 있다.

Fig. 9는 결정은 회전하지 않고, 도가니의 회전수가 5, 10, 15 rpm일 때의 유동장과 온도장이다. 도가니 벽 근처에서는 도가니와 같이 강체 회전을 하고 있다. 결정이 회전하지 않고 있으므로 결정 부근에서는 회전 방향의 속도는 급속히 줄어들기 때문에 도가니 바닥과 반대 경우의 경계층이 생긴다. 도가니 바닥에서는 용융액보다 회전방향 속도가

빠르므로 압력장보다 큰 원심력이 생겨 도가니 벽 쪽으로 움직이는 유동이 나타나고 결정에서는 반대로 원심력이 주위 보다 작기 때문에 압력에 의해 결정 중심으로 들어오는 유동이 생긴다. 온도장은 역시 자연대류 때와 같은 형태로 열이 지배적으로 전도에 의해 전달되는 형태를 보이고 있다. 도가니 벽 근처의 자오면 유동은 압력장의 영향이 크기 때문에 원주방향의 강체 운동이 지배적이고 자오면 유동은 매우 약하다. 그러나 결정 중심 쪽은 회전 속도가 작아서 원심력이 작기 때문에 자오면의 유동이 비교적 활발히 나타난다. 이때 자기장을 걸면 cusp 자기장이 원주방향의 속도에 모두 수직하기 때문에 원주방향의 속도가 용융액으로 전달되는 것을 막게 된다. 원주방향의 속도가 적게 되면 원심력이 적어지고 자연대류의 유동이 다시 나타난다. 즉, 자연대류만 있을 때와 비 도가

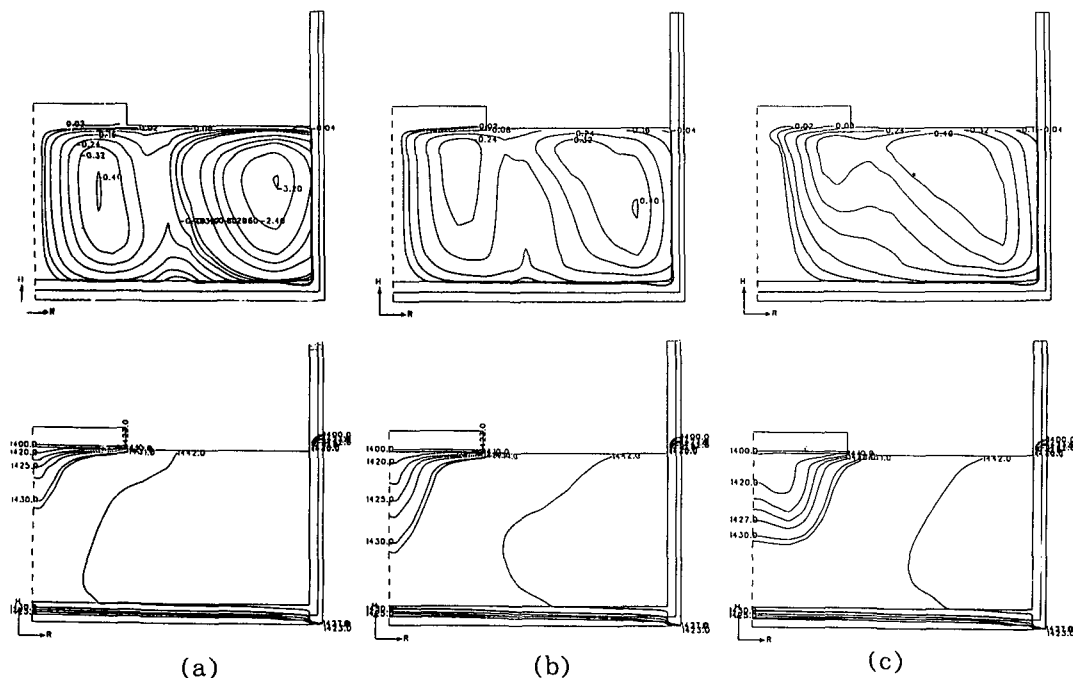


Fig. 9. Flow and temperature field profiles for  $W_s=0$  rpm, (a)  $W_c=5$  rpm (b)  $W_c=10$  rpm and (c)  $W_c=15$  rpm.

니의 회전이 어느 정도 자오면의 유동에 영향을 주고 있는 것을 알 수 있다. 자기장을 증가시키면 원주방향 속도의 영향이 거의 없게 되어 자연대류만 있는 경우와 같게 된다.

Fig. 10은 자기장 없이 도가니만 회전할 때 결정내의 산소농도를 계산한 결과이다. 자기장 없이 도가니만 돌게 되면 도가니 바닥에서 결정으로 올라오는 유동을 따라 산소농도선이 나타나고 도가니 벽 근처에서는 자오면 유동이 적기 때문에 확산과 대류의 영향을 비슷하게 받으며 자유계면 쪽으로 전달되고 있다. 결정 밑의 반경방향 산소농도를 보면 자기장이 없으면 도가니 바닥에서 바로 올라오는 유동 때문에 높은 산소농도가 나타난다. 자기장을 걸게 되면 자연대류의 영향이 뚜렷하게 나타나므로 자연대류의 산소농도와 같은 분포형태가 나타난다. 자기장은 도가니 벽과 바닥의 유동을 줄여 균일하고 낮은 산소농도를 나타낸다. 도가니 바닥과 벽에서 유출된 산소는 자연대류를 따라 전달

되다가 자유계면 밑에서 결정회전으로 생긴 유동에 포함되어 결정으로 전달된다. 산소농도는 도가니 벽과 바닥에서 생긴 유동이 자유계면을 지나는 범위와 속도에 의해 결정된다. 자속밀도를 증가시키면 결정 회전으로 생긴 유동도 억제하여 자유계면에서는 자연대류의 유동이 차지하는 부분이 나타난다. 그리고 도가니 벽과 바닥에서의 유동은 더욱 억제되어 유동을 따라 전달되는 산소는 도가니 벽과 바닥에서 확산으로 퍼져 산소농도가 낮아진 후 자연대류를 따라 결정으로 전달된다. 그리고 자연대류가 자유계면을 지나는 부분이 확대되어 많은 산소가 자유계면을 통해 대기로 날아가게 되어 더욱 낮아진 산소가 결정으로 전달된다. 자속 밀도를 더욱 증가하면 자오면 유동은 자기장에 의해 더욱 억제되고 자유계면에서는 자연대류가 차지하는 부분이 증가하여 더 많은 산소가 대기로 날아가게되어 전체적인 산소농도가 낮아지게 된다. 그러나 대칭축 근처에서는 cusp 자기장의 특징으로 결정 강제대류의 영향이 도가니 바닥 근처까지 닿게 된다. 이 유동의 영향으로 도가니 바닥에서 유출된 산소가 바로 결정으로 포함되어 다소 높은 산소농도를 보여 반경방향으로 불균일한 산소농도를 보인다.

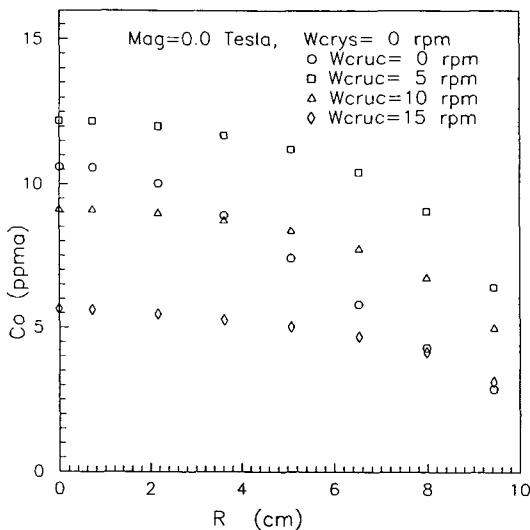


Fig. 10. Oxygen concentration profiles with increasing crucible rotation when  $W_s=0$  rpm.

#### 4. 결 론

복사현상을 고려한 CZ단결정 성장공정의 열전달 현상을 모사할 수 있는 프로그램을 개발하였다. Cusp 자기장을 수치해석적으로 계산하였다. MCZ 공정의 유동의 특징을 파악하기 위해 자연대류만 있을 때, 결정 또는 도가니만 회전하는 경우의 수치해석을 통해 CZ 공정의 기본적인 유동에 대해 고찰하였다. 실리콘 단결정내의 산소농도를 계산하였다. 자기장은 원주방향의 속도를 억제하여 도가니의 회전으로 생기는 셀 대신 자연대류

의 셀을 만들며 자속 밀도를 증가시키면 그 셀도 역시 억제된다. 반면 결정회전에 의한 강제대류는 cusp 자기장의 영향을 상대적으로 적게 받는다.

MCZ 공정에서 cusp 자기장은 자오면에서 도가니의 벽과 바닥에서의 대류를 억제하여 산소가 유동을 따라 결정으로 전달되는 것을 막고 자속밀도가 증가하면서 셀의 중심이 결정밀도로 이동하기 때문에 자유계면을 지나 는 유동이 증가하여 결정으로 전달되는 산소 농도를 낮추고 결정의 반경방향으로 농도가 균일하게 할 수 있다.

Cusp 자기장이 실리콘 용융액의 자연대류와 단결정과 도가니의 회전에 의한 강제대류를 잘 제어하고 있음을 수치해석적으로 확인하였다. 자기장을 조절함으로써 실리콘 단결정내의 산소농도를 제어할 수 있었다. 이 결과는 실제 8" 실리콘 단결정 조업과정에서 실리콘을 성장시키며 단결정내의 산소농도 분포를 조절할 수 있음을 보여준다.

#### 감사의 글

본 연구는 일부 1996년도 경일대학교 교내학술연구비 지원에 의해 수행되었으며 이에 감사드립니다.

#### 참 고 문 헌

- [ 1 ] R.W. Series, et al., J. Crystal Growth 113 (1991) 305.
- [ 2 ] S.K. Oliver et al., J. Crystal Growth 96 (1989) 915.
- [ 3 ] S.J. Kobayashi, Crystal Growth 69 (1987) 69.
- [ 4 ] M. Milhe et al., J. Crystal Growth 82 (1987) 318.
- [ 5 ] S.J. Kobayashi, Crystal Growth 85 (1987) 69.
- [ 6 ] T.W. Hicks, et al., J. Crystal Growth 94 (1989) 213.
- [ 7 ] H. Hirata, et al., J. Crystal Growth 125 (1992) 181.
- [ 8 ] K. Kakimoto, et al., J. Crystal Growth 126 (1993) 435.
- [ 9 ] S. Kobayashi, et al., J. Crystal Growth 109 (1991) 149.
- [ 10 ] K. Kakimoto, et al., J. Crystal Growth 88 (1988) 365.
- [ 11 ] K. Kakimoto, et al., J. Crystal Growth 94 (1989) 412.
- [ 12 ] K. Kakimoto, et al., J. Crystal Growth 102 (1990) 16.
- [ 13 ] W.P. Jones, et al., Int. J. Heat Mass Transfer 15 (1972) 301.
- [ 14 ] S.V. Patankar, Numerical Heat Transfer and Fluid Flow (McGraw-Hill, New York, 1980).
- [ 15 ] 조한식, J. Korean Association of Crystal Growth 1 (1991) 117.
- [ 16 ] B.E. Launder, et al., Lectures in Mathematical Models of Turbulence (Academic Press, London, 1972).
- [ 17 ] W. E. Langlois, et al., IBM J. Res. Develop 27 (1983) 281.
- [ 18 ] P. Sabhapathy, et al., J. Crystal Growth 113 (1991) 164.