초크랄스키 공정에서 결정-용융액 계면의 형태에 관한 수치해석적 연구

오 현정, 정 자훈, 강 인석
포항공과대학교 화학공학과 및 지능자동화 연구센터

Numerical Studies on the Shape of Crystal-Melt Interface in Czochralski Process

Hyun Jung Oh, Ja Hun Jeong, In Seok Kang
Dept. of Chem. Eng. and Automation Res. Center, POSTECH

Introduction

초크랄스키(CZ)공정에 있어서 결정-용융액 계면의 형태는 결정의 품질에 직접적으로 관계되는 중요한 요소이다. 즉, 결정-용융액 경계면의 형태는 결정의 열이력(thermal history)뿐만 아니라 결함(defect)의 형성에도 영향을 주게된다. 그러므로 경계면이 휘어지게되면 하나의 웨이퍼에서 반경방향으로 응고시간이 달라지게 되므로 반경방향으로의 균일성에 문제가 생긴다[1]. 이러한 중요성 때문에 결정-경계면의 형태에 관한 수치해석적인 연구가 매우 많이 이루어고 있다.

Kobayashi와 Arizumi는 결정영역에 대해서는 열전달방정식을 풀고, 용융액지역에 대해서는 유체의 유동을 고려하여 경계면의 형태에관한 연구를 시작하였다[2]. 앞의 연구에서는 결정의 회전이 빨라질수록 경계면의 형태는 용융액쪽으로 오목해지는 것을 알 수있었다. 또한 그들은 도가니의 회전속도가 커질수록 결정회전에 의해 생긴 오목한 경계면이 평평해진다는 결론을 얻었다[3]. 최근 Derby와 Brown[4-7]은 용융액-기체 경계면의 형태가 결정-용융액 경계면에 미치는 영향에 관해 연구하였다. 그외에도 많은 수치해석적인 연구가 진행되어왔으나 조업조건이 바뀜에따라 유발되는 유동의 변화가 결정-용융액 경계면에 어떤 영향을 미치는 지에 관한 연구는 아직도 충분하지 못한 상태이다. 특히 자기장이나 도가니형태와 경계면의 형태와의 관계에대한 연구는 발표된 바가 없다. 이미 본 연구진에의해 자기장과 도가니형태가 용융액의 유동에 무시할 수 없는 영향을 미친다는 것은 발표된 바가 있으므로, 경계면의 형태에도 중요한 영향을 미칠 것이라는 것을 예상 할 수 있다.

본 연구에서는 결정의 반지름은 일정하다고 가정하였으며 용융액-기체 경계면은 평평하다고 하였고 준정상상태(quasi-steady-state)가정을 사용하였고 CZ공정과 같이 복잡한 공정을 효과적으로 해석하기위해 수치적으로 얻은 orthogonal curvilinear coordinate system을 이용하였다.

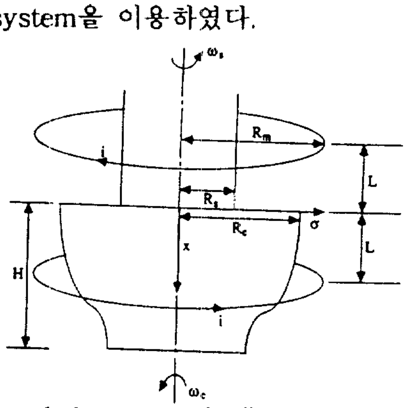

Fig. 1. A schematic of the magnetic field applied Czochralski process.

Governing Equations and Boundary Conditions

본 연구에서 고려한 cusp형태의 자기장이 가해진 CZ 공정의 개략도는 Fig.1과 같다. 원통형과 원통형이 아닌 도가니에대해 용융액 지역에서는 온도분포와 유동을, 결정지역에서 온도분포를 바탕으로 용융액-결정 경계면의 형태를 결정하였다. 또한 정해진 계면형태하에서 산소농도분포를 구하였다. 각 상에 적용한 지배방정식과 경계조건은 다음과 같다.

1. Melt Region

용융액지역의 무차원 지배방정식은 아래와 같다.

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

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \nabla \boldsymbol{u} = -\nabla p + \frac{1}{Re} \nabla^2 \boldsymbol{u} - \frac{Gr}{Re^2}(T - T_o)\, \boldsymbol{e}_x + N(\boldsymbol{J} \times \boldsymbol{B})$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \nabla T = \frac{1}{Pe} \nabla^2 T$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \nabla C = \frac{1}{Pe, c} \nabla^2 C$$

유동에관한 경계조건은 고체-용융액표면은 no-slip조건, 용융액-기체면에는 no shear stress조건을 적용하였고, 열전달방정식에서는 자유계면에는 Stephan -Boltzman law를 적용하였으며 물질전달방정식에서는 도가니 벽면에 Arrhenius relation을 사용하였다.

2. Crystal Region

결정지역에서는 $T_S = (\hat{T}_S - T_m)/T_m$ 으로 정의했을 때 열전달 방정식은 다음과 같다.

$$\frac{\partial T_S}{\partial t} = \sigma\ \boldsymbol{e}_3 \cdot \nabla T_S + \frac{1}{P_s} \nabla^2 T_S$$

축대칭문제에 있어서는 $\boldsymbol{e}_3$방향으로 온도구배가 없기 때문에 아래와 같이 간단해진다.

$$\frac{\partial T_S}{\partial t} = \frac{1}{P_s} \nabla^2 T_S$$

결정의 윗부분에는 단열조건을 경계면에는 녹는점 온도 $T_S = 0$, 결정 옆면에는 복사조건을 사용하였다.

3. Crystal-Melt Interface

결정-용융액 경계면의 형태를 결정하기위해서는 경계면의 이동을 서술하는 또 하나의 방정식이 필요한데 이것은 경계면의 에너지수지식으로 부터 유도된다. $v_{c,growth} = k_S T c / L l_c$, $t_{c,growth} = L l_c^2 / k_S T_c$ 를 이용하여 무차원하면 아래와같은 관계식을 구할 수있다.

$$v_x + V = \left[\frac{\partial T_S}{\partial n} - \left(\frac{k_L}{k_S}\right) \frac{\partial T_L}{\partial n} \right] n_x$$

여기서 n_x는 법선벡터의 x-성분이며 k_L, k_S 는 용융액과 결정의 열전도도, V는 결정을 당기는 인장속도이다.

Numerical Method

앞에서 말한 것처럼 결정-용융액경계면의 형태를 수치해의 일부로 구하기위해 초기 경계면의 형태를 평평하다고 가정하고 fictitious time-dependent problem의 해를 구했는데 이때 다음단계의 경계면의 형태는 지배방정식과 경계면의 matching조건에의해 얻어진다. 이러한 방법으로 수치해를 구하기위해서는 좌표계가 매우 중요한 역할을 한다.

본 연구에서 사용한 직교좌표계 구성법의 특징은 우선 반복계산없이 해를 구한다는 것과 좌표점의 간격을 조정하는데있어서 자유도를 3번까지 확장시켰으며 다음의 조절함수를 도입하여 좀더 자유롭게 하였다[8].

$$q(v)=3\left(\frac{v}{v^*}\right)^2-2\left(\frac{v}{v^*}\right)^3$$

Numerical Results and Discussion

앞에서 언급했듯이 본 연구에서는 여러가지 조업변수들이 결정-용융액 경계면의 형태에 어떤 영향을 미치는지에 관심이 있다. 특히 결정의 회전, 도가니의 회전, 도가니 벽면의 온도, 도가니 형태, 자기장의 세기등과 결정-용융액 경계면 형태와의 관계를 고찰하였다. 본 수치해석에서 사용한 변수값은 다음과 같다.

$$Re=5.e2,\ Gr=9.18e6,\ Pr=0.015,\ Sc=10$$

(1)결정의 회전속도가 빨라질수록 결정-용융액 경계면의 형태는 용융액쪽으로 오목해졌는데 이것은 경계면 근처의 유동중에 biaxial성분이 커짐에 기인하기 때문이다.

(2)도가니의 회전속도가 빨라질수록 결정-용융액 경계면의 형태는 용융액쪽으로 볼록해지는 것을 알 수 있었는데 이것은 경계면 근처의 유동중에 uniaxial성분이 커졌기 때문이다.

(3)도가니 벽면의 온도가 높아질수록 경계면은 용융액쪽으로 볼록해지는 것을 알 수 있었다.

(4)Cusp형태의 자기장은 경계면의 형태에는 별 영향을 주지 못했는데, 이것은 Cusp형태의 자기장의 특성상 경계면 근처의 유동에는 영향을 주지 못하기 때문이다.

(5)도가니 형태는 경계면 형태에 중요한 영향을 주었는데, Fig. 2와 Fig. 3은 경계면 형태의 변화가 일정한 error범위 안으로 수렴할 때까지 반복계산해서 얻은 (a)Grid System과 (b)Stream line, Isothermal line이다. 그림에서 볼 수 있듯이 Fig. 3 형태의 경우가 원통형의 경우보다 평평한 경계면을 가지는 것을 볼 수 있었다.

References

1. F. Shimura, Semiconductor Silicon Crystal Technology, Academic Press, New York (1989).
2. N. Kobayashi and T. Arizumi, Japan. *J. Appl. Phys.* **8**, 361-367 (1970).
3. N. Kobayashi and T. Arizumi, Japan. *J. Appl. Phys.* **9**, 1255-1259 (1970).
4. J.J. Derby, R.A. Brown, F.T. Geyling, A.S. Jordan, and G.A. Nikolakop -oulou, *J. Electrochem. Soc.* **132**, 470-482 (1975).

5. J.J. Derby, R.A. Brown, *J. Crystal Growth* 74, 605-624 (1980).
6. J.J. Derby, R.A. Brown, *J. Crystal Growth* 75, 227-240 (1986).
7. J.J. Derby, R.A. Brown, *J. Crystal Growth* 83, 137-151 (1987).
8. H.J. Oh and I.S. Kang, *J. Comput. Phys.* 112, 138-148 (1994).

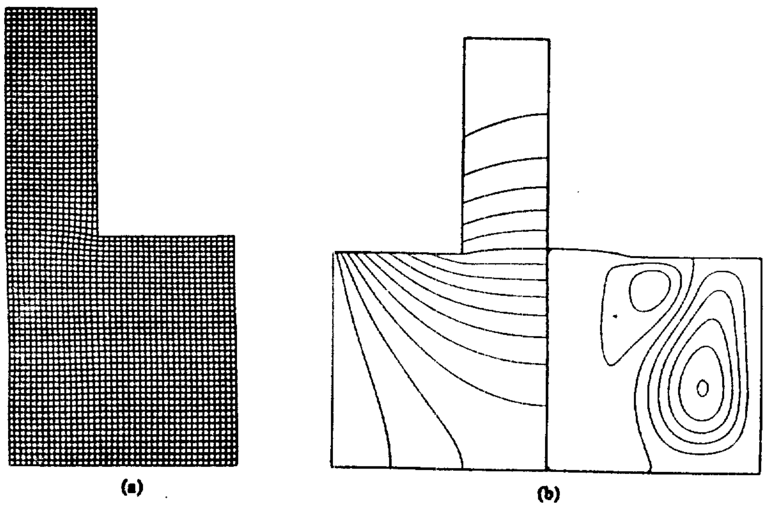

Fig. 2. Result for the case of cylindrical crucible geometry when $Re=500$, $Gr=9.18e6$, $Pr=0.015$, $N=0$, $\omega_r=0$, $T_{wall}=0.1$

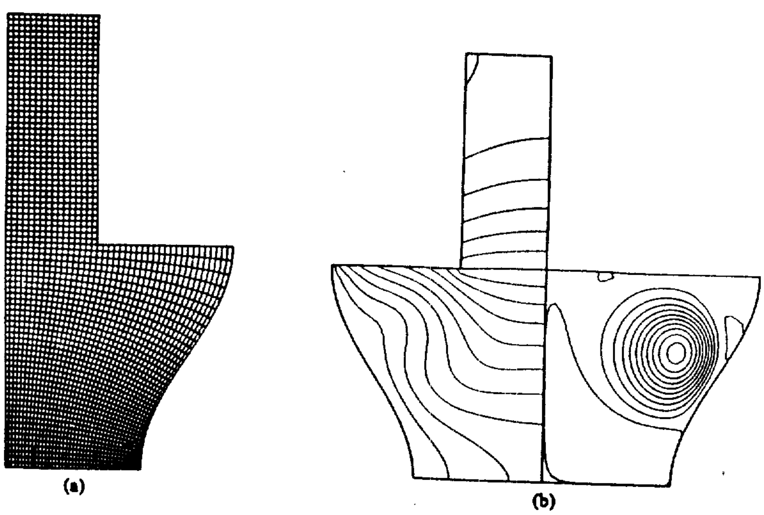

Fig. 3. Result for the case of non-cylindrical crucible geometry when $Re=500$, $Gr=9.18e6$, $Pr=0.015$, $N=0$, $\omega_r=0$, $T_{wall}=0.1$