

## 수평자기장 초크랄스키(HMCZ)에서 Si-melt의 흐름 패턴에 대한 3차원 전산모사 및 결정 품질에 미치는 영향

송도원, 정호섭, 오현정

LG실트론, 경상북도 구미시 3공단3로 132-11

### 3D simulation of Si-melt flow patterns and their effects on crystal quality in the horizontal magnetic Czochralski

Do Won Song, Ho Sub Jung, Hyun Jung Oh

LG Siltron, 132-11, 3gongdan 3-ro, Gumi-si, Gyeongsangbuk-do

#### 서론

Czochralski Silicon(CZ-Si) 단결정에 요구되는 주요품질은 전통적인 반도체 회로선폭 감소에 따른 결정결함 제어뿐만 아니라, 반도체 제조공정의 변화에 따른 wafer 면내 산소농도의 uniformity가 최근 강하게 요구되고 있다. 이는 CZ-Si 단결정 내부의 산소가 반도체 소자 제조공정에서 산소에 의한 Donor의 생성과 비저항의 변동에 영향을 미치기 때문이다. CZ-Si 단결정 성장법에서 석영도가니로부터 녹아 나온 산소는 Si-melt의 대류패턴을 따라 용액의 자유표면이나 결정성장 계면으로 이동하고 대부분이 자유표면에서 휘발한다. 따라서, 회전하면서 인상되는 결정성장 계면에 혼입되는 산소농도의 면내분포는 Si-melt의 대류패턴에 영향을 강하게 받는다[1]. 300mm CZ-Si 단결정성장에서 산소농도 제어를 위하여 수평자기장(horizontal magnetic Czochralski, HMCZ) 채용이 일반적이다. Si-melt의 대류패턴은 자기장의 세기, 용액의 깊이와 온도분포에 따라서 Rayleigh-Berand instability가 발생한다는 연구결과가 보고된 바 있다[2-4]. HMCZ에서 Si-melt의 대류패턴이 산소농도의 변동에 미치는 영향을 FEMAG[5]을 이용하여 전산모사하고, Si-melt의 instability가 pulling speed(PS)와 산소농도의 변동의 근본원인임을 확인하였다. 또한, 성장조건에 따른 전산모사 결과로부터 계산된 한계궤도(limit cycle)의 위치와 크기가 최소로 변동되도록 공정변수를 설계하고, 공정변수 변화에 따른 자연대류와 강제대류의 비( $Ra/Re_s^2$ )를 제어함으로써 PS 및 산소농도의 변동이 현저히 감소함을 실험적으로 확인하였다. 여기서,  $Ra$ 와  $Re_s$ 는 각각 Rayleigh와 seed rotational Reynolds Number이다.

#### 실험결과 및 토론

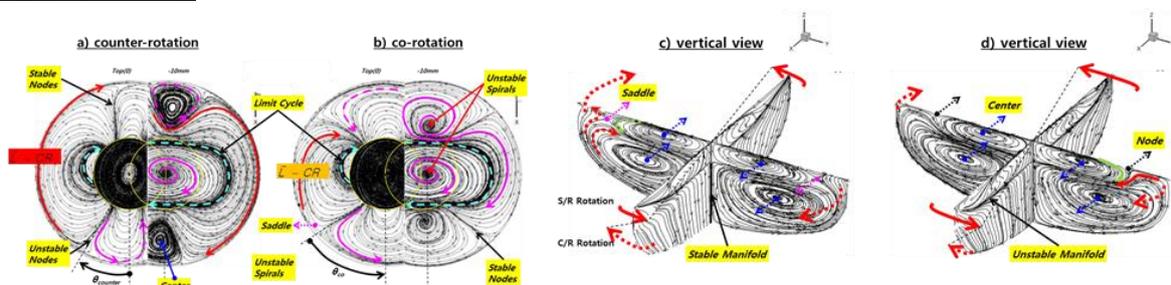


Fig. 1. 결정성장 중반에 Si-melt의 대류패턴 in HMCZ.

CZ-Si 성장법에서 성장계면의 위치를 고정하고 열적인 대칭성을 확보하기 위해서 도가니와 성장되는 결정은 회전하며 인상되므로, Si-melt의 대류패턴은 유체 표면에 disk를 올려놓고 회전하는 rotating disk와 같다

[6]. HMCZ에서 Si-melt의 대류패턴은 Lorentz힘에 의하여 매우 복잡한 형태를 띄게 된다[2-3]. FEMAG를 이용하여 해석한 3차원 Si-melt의 대류패턴을 Fig. 1에 나타내었다. a)와 b)의 좌측은 용액의 표면흐름이고 우측은 표면 아래 10mm에서의 흐름패턴이다. c)와 d)는 자기장 방향에 따른 vertical 단면이다. 표면흐름 패턴이 Lorentz힘의 영향으로 bulk의 흐름패턴보다 빠르고, seed rotation cell(SRC)과 crucible rotation cell(CRC)의 영향으로 limit cycle, center, spiral, node 및 saddle point 등이 혼재하는 매우 복잡한 패턴을 보인다. c)와 d)의 vertical 단면에서 자기장방향(x-방향)으로 좌우가 분리된 CRC 안에 SRC가 위치하고, CRC와 SRC는 Lorentz힘의 영향으로 CW 방향으로 회전함을 알 수 있다. 단, 자기장에 수직인 단면에서 saddle과 node가 각각 counter와 co-rotation 일 때 나타났다.

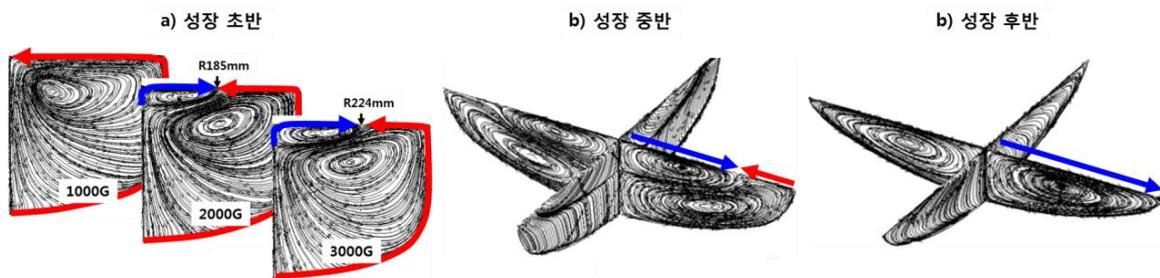


Fig. 2. Si-melt의 깊이변화에 따른 대류패턴의 변화 in HMCZ.

결정성장이 진행됨(Si-melt의 깊이가 감소함)에 따른 Si-melt의 흐름패턴을 Fig. 2에 나타내었다. Si-melt의 깊이가 감소함에 따라 CRC dominated에서 mixed 및 SRC dominated 패턴 순으로 변화하며, 자기장 세기 (magnet intensity, MI)가 증가할수록 SRC의 크기가 커짐을 알 수 있다.

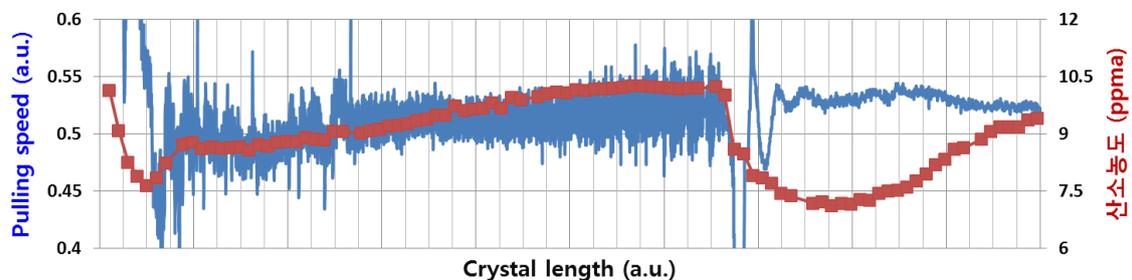


Fig. 3. 수평자기장에서 Si-melt의 깊이변화에 따른 pulling speed와 산소농도 변동.

Fig. 3은 Fig. 2의 전산모사 조건(MI 3000G)에서 CZ-Si 단결정을 성장하고 crystal length 변화에 따른 PS와 FT-IR로 측정된 산소농도의 변동을 나타낸 것이다. 성장초반과 후반에 나타난 PS 및 산소농도의 변동패턴은 상술한 바와 같이 Si-melt의 대류패턴의 변동과 관련이 있을 것이다. 다양한 결정성장 조건에서 PS와 산소농도의 변동을 비교한 결과, 수평자기장의 세기 및 crystal의 회전에 따라서 PS와 산소농도의 변동이 상관관계가 있었다. 특히, 산소농도의 wafer 면내 uniformity를 확보하기 위해서는 Si-melt의 표면에 더 높은 자기장을 인가하고, limit cycle의 형태( $\epsilon$ ),  $Ha$ 와  $Re_s$ 의 변화를 최소화해야 한다. MI의 중심위치에 따른 PS변동과 산소농도 변동의 관계를 Fig. 4에 나타내었다. 여기서,  $\epsilon$ 와  $Ha$ 는 각각 limit cycle의 이심률과 Hartmann Number이다.

Fig. 3의 후반처럼 CRC가 소멸되며 나타나는 Si-melt의 대류패턴의 변화를 제어하기 위하여  $\epsilon$ ,  $Ha$ 와  $Re_s$ 의 변화를 최소화한 조건에 대한 전산모사 결과를 Fig. 5에 나타냈다.

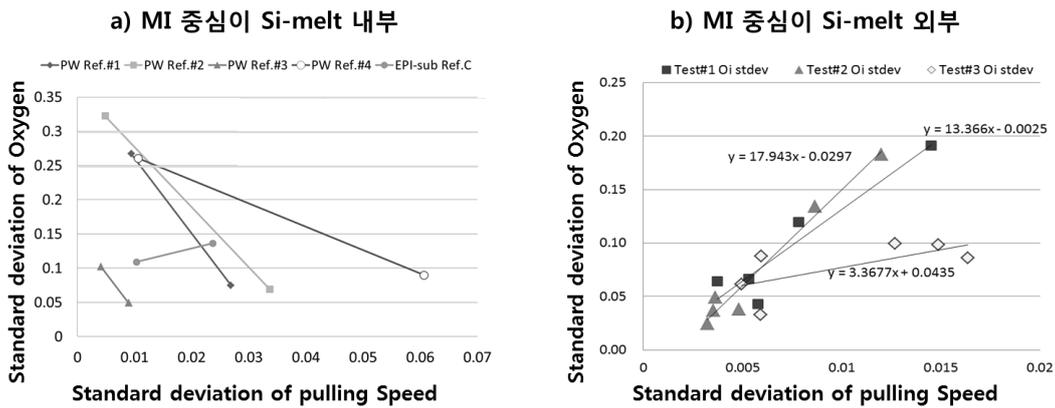


Fig. 4. MI 중심의 위치변화에 따른 PS변동과 산소농도 변동의 상관관계 비교.

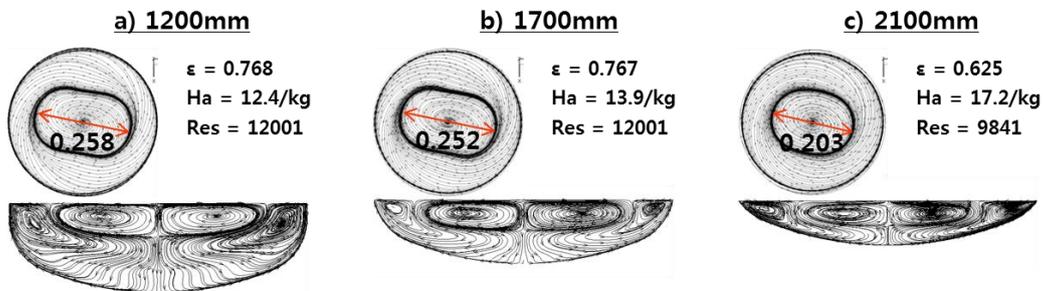


Fig. 5. 전산모사 결과를 이용한 limit cycle의 이심률, Ha, Re<sub>s</sub>와 Si-melt의 대류패턴.

한편, Fig. 3의 초반처럼 SRC가 생성되면서 나타나는 Si-melt의 대류패턴의 변동도 제어되어야 한다. 반지름 R인 rotating disk의 바닥이 flat하다고 가정하면, pumping 되는 유량(Q)는 회전속도(seed rotation, Ω)와 R의 세제곱에 비례하고, Q의 공급에 비례하여 운동량이 전달된다[6]. 따라서, SRC의 생성에 따른 Si-melt의 대류패턴 변동은 상술한 MI와 Ω에 의하여 제어해야 한다. 특히, 결정의 직경을 증가시키는 shoulder 공정에서 일정한 직경으로 유지하는 body 공정의 초반까지 운영되는 MI와 Ω 및 성장된 결정의 R에 따라서 산소농도가 변동된다. 액체의 강제대류와 자연대류에 대한 해석은 각각  $Re_s(=\Omega L^2/\nu)$ 와  $Ra(=\beta g \rho C_p \Delta T L^3/\nu k)$ 를 이용하는 것이 일반적이다. 여기서 Ω, ν, β, g, ρ, C<sub>p</sub>, ΔT, L 및 k는 각각 회전속도, 동점도, 열팽창계수, 중력가속도, 밀도, 정압열용량, 온도차이, 길이 및 열전도도이다. SRC의 생성에 따른 Si-melt의 대류패턴 변동은 rotating disk에 의한 강제대류가 강해지면서 형성되는 saddle point와 관련이 있으며 Ra/Re<sub>s</sub><sup>2</sup>의 비를 통해 부력과 관성력의 크기 즉, 자연대류와 강제대류의 운동량을 상대적으로 비교함으로써 해석이 가능할 것이다.

CZ-Si melt에서 ΔT를 T<sub>max</sub>-T<sub>i</sub>로 특성길이를 hydraulic diameter(=4HD<sup>2</sup>/(d<sup>2</sup>+D<sup>2</sup>+4DH))로 정의하고 MI 변화에 따른 Si-melt의 각 지점에서 Ra/Re<sub>s</sub><sup>2</sup>를 비교하여 Fig. 6에 나타내었다. 여기서 T<sub>i</sub>, H, d와 D는 각각 특정지점의 온도, Si-melt 깊이, 결정 및 도가니의 직경이다. 1 ~ 4 지점은 CRC의 자연대류에 의하여 지배를 받고 5 ~ 8 지점은 성장되는 성장되는 결정의 rotational pumping에 의한 강제대류에 의하여 지배를 받음을 알 수 있다. MI가 1000G 일 때는 Ra/Re<sub>s</sub><sup>2</sup>의 값이 음수가 되는데, 이는 SRC가 존재하지 않음을 의미하는 것으로 약 자기장에서는 강한 자연대류 특성에 의하여 Si-melt 대류가 지배받는다. 특히, 자기장이 증가할수록 각 지점에서의 Ra/Re<sub>s</sub><sup>2</sup>의 변화가 감소하므로, 산소농도의 wafer 면내 uniformity를 제어하기 위해서는 강자기장에서 더 유리할 것이다.

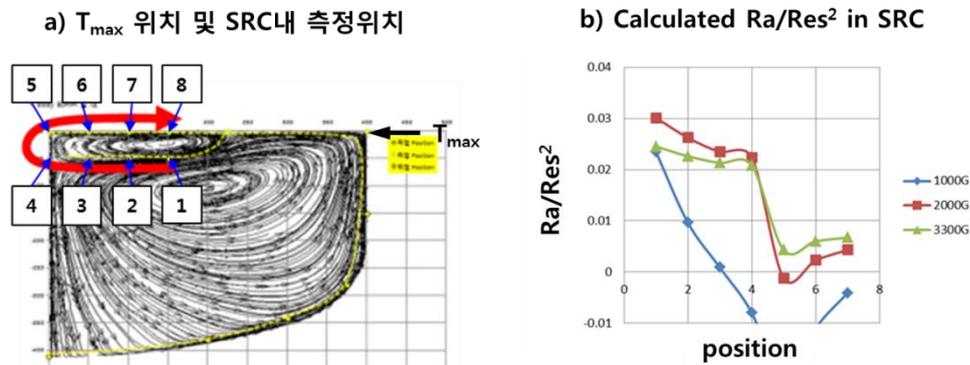


Fig. 6. 자기장 세기 변화에 따른  $Ra/Re_s^2$ 의 크기 비교 in SRC.

Limit cycle의 위치와 크기를 일정하게 유지하면서 자연대류와 강제대류의 비( $Ra/Re_s^2$ )를 이용하여 Si-melt의 instability를 제어한 CZ-Si 단결정으로 제작한 wafer의 면내 산소농도 측정값을 Fig. 7에 나타내었다. 특히, body 초반에는 MI의 중심이 Si-melt 외부에서 이동할 때, 산소농도의 uniformity가 더 우수하였다.

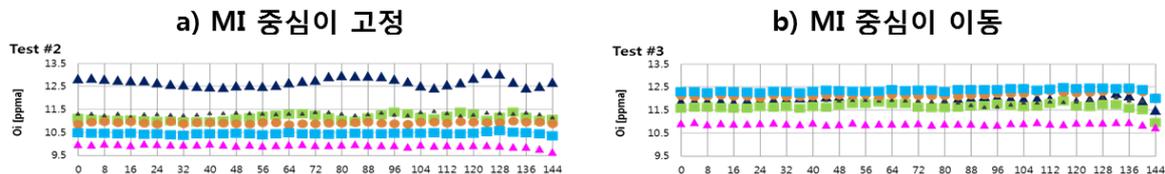


Fig. 7. MI 중심위치에 따른 wafer 면내 산소농도 분포.

## 결론

Czochralski Si-단결정 성장에서 Si-melt 흐름패턴의 변화는 pulling speed와 oxygen 등의 품질변동을 유발하여 단결정 yield와 device 성능에 영향을 미친다. HMCZ에서 Si-melt 흐름패턴은 crucible rotation cell dominated pattern에서 mixed pattern 및 seed rotation cell dominated pattern 순으로 변화함을 전산모사로 확인하였다. 결정 성장조건에 따라 계산한 Rayleigh Number( $Ra$ )와 seed rotational Reynolds Number( $Res$ )의 비를 이용하여 Si-melt flow pattern의 instability를 확인하였다. HMCZ 자기장의 분포와 자연대류와 강제대류의 비( $Ra/Res^2$ )를 이용하여 설계된 조업조건에서 pulling speed와 oxygen fluctuation을 현저히 감소함을 실험적으로 확인하였다.

## Reference

1. Do Won Song, et. al., "Oxygen content increasing mechanism in Czochralski (CZ) silicon crystals doped with heavy antimony under a double-typed heat shield", Journal of Crystal Growth, 325(1), 27-31, (2011).
2. Xi Chen, et. al., "Large eddy simulation of industrial Czochralski Si crystal growth under transverse magnetic field", Journal of Crystal Growth, 389(1), 60-67(2014).
3. Jyh-Chen Chen, et. al., "Three-dimensional numerical simulation of flow, thermal and oxygen distributions for a Czochralski silicon growth with in a transverse magnetic field", Journal of Crystal Growth, 401, 813-819(2014).
4. I. Grants and G. Gerbeth, "Rayleigh-Benard instability of Czochralski configuration in a transverse magnetic field", Journal of Crystal Growth, 358, 43-50(2012).
5. [www.femagsoft.com](http://www.femagsoft.com).
6. H. Schlichting and K. Gersten, "Boundary Layer Theory", 8th Edition (2000).