

## 초크랄스키 공정에서 결정-용융액 계면의 모양에 대한 해석적 연구

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

### Analytical Studies on the Crystal-Melt Interface Shape in Czochralski Process

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

#### 서 론

실리콘 단결정 생산 공정인 초크랄스키 공정에서 결정-용융액의 계면은 완제품인 실리콘 웨이퍼의 품질에 큰 영향을 미치며, 계면에서의 열전달에 의해 그 계면의 모양이 결정되는 자유계면 문제로서 기술적, 공학적으로 중요한 문제라고 할 수 있다.

도가니의 용융액의 흐름이 계면의 모양에 미치는 영향은 Fig. 1에 정성적으로 나타나 있다. 결정의 순도와 불순물의 분포에 직접적인 영향을 주는 것으로 알려진 결정-용융액 계면의 모양은 당김속도(pulling rate), 회전속도(rotation rate), 결정반지름(crystal radius), 도가니의 크기(crucible size) 등과 같은 조업변수의 영향을 받음이 많은 실험적 관측과 수치적 분석에 의해 알려져 있다[1]. 그러나 초크랄스키 공정의 특성상 실제와 유사한 조건에서의 실험은 매우 힘들며, 수치적 해석 역시 원하는 실리콘 단결정 웨이퍼의 크기가 커짐에 따라 시스템의 Reynolds수가 증가하여 자기장을 가하여 유동장을 안정화시키는 등 시스템이 매우 복잡하여 대개의 경우 단순화된 실린더 좌표계에서 문제를 분석하는 한계를 가지고 있는데, 최근에 용융액 유동에 의한 계면모양의 변화를 알아내기 위해 finite element methods나, boundary-fitted coordinate에서의 finite difference methods를 이용한 수치적 전산모사가 활발히 연구되어지고 있다[2, 3].

본 연구에서는 일반적으로 시도되어지는 실험적, 수치적 접근이 아닌 해석적 방법을 통한 결정-용융액 계면의 모양을 계산하였는데, 결정부분에 대해서는 휘어진 계면의 모양에 대해 일반적 해를 구하기 위해서 domain perturbation methods를 이용하였고, 용융액부분에 대해서 biaxial flow 혹은 uniaxial flow로 주어진 system에서의 Reynolds수가 매우 크다는 가정하에서 boundary layer theory를 이용하였다. 이렇게 구한 해를 이용하여 결정-용융액 계면에서의 열전달식으로 부터 계면의 모양을 구할 수 있다.

이러한 해석적 연구방법은 실험적, 수치적 연구결과에 비해, 사용된 domain perturbation methods와 boundary layer theory의 제약성으로 인해 실제 조건과 다른 limiting case에 대한 분석만이 가능하다는 한계를 포함하고 있지만 이러한 한계가 간단한 수식처리만으로도 실험적, 수치적으로는 확인할 수 없는 상황을 묘사할 수 있다는데 있어서 장점으로 작용한다.

**이 론**

(1) 결정 영역

결정-용융액 계면의 모양이 평평한 평판에서  $\epsilon$ 만큼 ( $\epsilon \ll 1$ ) 변형된  $z = \epsilon h(r)$ 을 따른다고 가정하고 정상상태와 축대칭조건을 이용하여 Laplace형태의 지배방정식을 유도한 후,  $\theta = (T - T_{am}) / (T_m - T_{am})$ 으로 치환하고 길이와 속도에 대한 특성치로 각각  $l_c = a$ 와  $V_c = k_s(T_m - T_{am}) / (La)$ 를 선택하여 무차원하면 다음의 차원이 없는 지배방정식과 경계조건을 유도할 수 있다[4].

$$\nabla^2 \theta = 0$$

$$\text{at } r=0, \frac{\partial \theta}{\partial r} = 0; \quad \text{at } r=1, \frac{\partial \theta}{\partial r} = -N\theta, \quad N = h_s a / k_s$$

$$\text{at } z = \epsilon h(r), \theta = 0; \quad \text{at } z = l/a, \theta = 1$$

where  $h_s$  : heat conductivity in crystal region

$l, a$  : length and radius of crystal

이를 domain perturbation method를 이용하여 풀기위해  $\theta = \theta_0 + \epsilon \theta_1$ 으로 치환하여 Taylor series expansion하여  $\theta_0$ 와  $\theta_1$ 에 대한 two coupled problem을 만들고  $h(r)$ 에 계면의 모양을 가정한 함수  $h(r) = h_0 + h_m r^m$ 을 대입하면 다음과 같은 결정영역에서의 해를 구할 수 있다.

$$\theta = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2N}{(\lambda^2 + N^2)} \frac{J_0(\lambda_n r)}{J_0(\lambda_n)} \frac{\sinh(\lambda_n l/a - \lambda_n z)}{\sinh(\lambda_n l/a)} \left( 1 + \epsilon \frac{\lambda_n h_n}{\tanh(\lambda_n l/a)} \right)$$

$$\lambda_n J_1(\lambda_n) = N J_0(\lambda_n)$$

$$h_n = h_0 + h_m \left( \int_0^1 r^{m+1} J_0^2(\lambda_n r) dr \right) / \left( \int_0^1 r J_0^2(\lambda_n r) dr \right)$$

(2) 용융액 영역

계면의 모양의 변형된 정도가 매우 작아서 curvature term을 무시할 수 있다고 가정하면, boundary layer theory로부터 고체와 액체의 계면에서의 heat flux에 대한 curvilinear coordinate에서의 다음과 같은 식을 유도할 수 있다[5, 6].

$$n \cdot \nabla \theta_l = \frac{(T_{\infty} - T_m)}{(T_m - T_{am})} \left( \frac{RePr}{\Pi} \right)^{0.5} u_e(x) / \left( \int_{x_0}^x u_e(x) dx \right)^{0.5}$$

$$Re = \frac{(Ea)a}{\nu}, \quad Pr = \frac{\nu}{\alpha_l}$$

where  $x_0$  : starting point of thermal boundary layer

$T_{\infty}$  : outside temperature of boundary layer

그러므로 용융액 유동의 두가지 전형적인 형태인 biaxial flow와 uniaxial flow에 대해 각각  $u_e(x)=x$ 와  $u_e(x)=1-x$ 를 대입하면 이 두가지 유동에 대한 계면에서 heat flux의 무차원 형태인  $\mathbf{n} \cdot \nabla \theta_l$ 을 구할 수 있다.

(3) 결정-용융액 계면에서의 조건

잠열(latent heat)  $L$ 을 포함하는 계면에서의 energy balance로부터 계면의 모양을 결정지어주는 식을 구할 수 있다.

$$L \mathbf{n} \cdot (\mathbf{v} - V \mathbf{e}_z) = k_s \mathbf{n} \cdot \nabla T_s - k_l \mathbf{n} \cdot \nabla T_l$$

where  $\mathbf{n}$  : normal direction outgoing from crystal  
in interface

또한 정상상태일때의 당기는 속도  $V$ 는 결정반지름 방향과는 무관한 값이므로 결정반지름  $a$ 를 대입한 값을 사용한다. 고체영역에서와 같은 방법으로 무차원하면 다음과 같은 계면의 이동속도와 정상상태로 유지시키기 위한 결정을 당기는 속도가 주어진다.

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{v} = \mathbf{n} \cdot \nabla \theta_s - \frac{k_s}{k_l} \mathbf{n} \cdot \nabla \theta_l + (\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_z) V$$

$$V = (-\mathbf{n} \cdot \nabla \theta_s + \frac{k_s}{k_l} \mathbf{n} \cdot \nabla \theta_l) / (\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_z), \text{ at } r=1$$

그러므로 결정영역과 용융액영역에서 각각 구한 해로부터 계면의 이동속도  $\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}$ 와 결정을 당기는 속도  $V$ 를 구할 수 있고 정상상태에서의 계면의 모양을 예측할 수 있다.

## 결론

본 연구에서 수행한 해석적 방법으로부터 용융액의 유동이 biaxial인 경우는 위로 볼록한 계면모양을 이루고, 유동이 uniaxial인 경우는 uniaxial flow가 강해짐에 따라 biaxial인 경우에 비해 위로 덜 볼록해지다가 아래로 볼록한 계면모양을 이룸을 알 수 있었다(Fig. 2). 이는 앞에서 언급된 실험적 관측과 수치적 전산모사의 결과와 일치한다.

또한 초크랄스키 공정에서 용융액의 유동은 결정의 회전이 빨라질수록 biaxial 형태에 가까워지며, 도가니의 회전이 빨라지거나 자연대류의 효과가 커질수록 uniaxial 형태에 가까워지므로 이러한 조업조건의 변화가 결정-용융액 계면의 모양에 미치는 영향을 알 수 있었다.

## 참고 문헌

1. Fumio Shimura, "Semiconductor Silicon Crystal Technology", 140 (1989).
2. J.J. Derby, R.A. Brown, *J.Crystal Growth* 74, 165 (1986).
3. H.J. Oh, "Numerical Studies on Magnetic Field Applied Czochralski Process", 162, Ph.D. dissertation, POSTECH (1994).

4. H.S. Carslaw, J. C. Jaeger, "Conduction of Heat and Solid", 201 (1959).
5. Hermann Schlichting, "Boundary-Layer Theory", (1968).
6. G.K. Batchelor, "An Introduction to Fluid Dynamics", (1967).

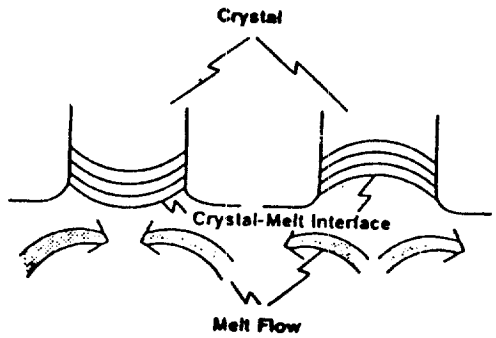


Fig. 1. Schematic of the melt flow effect on the crystal-melt interface shape.

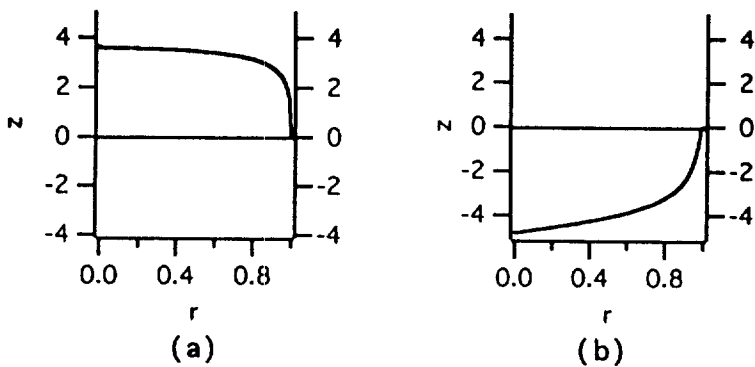


Fig. 2. Prediction for the crystal-melt interface shapes under (a) biaxial flow and (b) uniaxial flow.