

자기장하에서 액막 초크랄스키 방법에 의한 단결정 성장에 관한 연구

김 무 근* · 서 정 세*

(2000년 10월 13일 접수, 2001년 10월 8일 심사완료)

A Study on the Liquid Encapsulant Czochralski(LEC) Crystal Growth with Magnetic Fields

Moo-Geun Kim and Jeong-Se Suh

Key Words: Liquid Encapsulant Czochralski(액막초크랄스키방법), Magnetic Field(자기장), Single Crystal Growth(단결정성장), Gallium Arsenide(갈륨 아스나이드)

Abstract

Numerical simulations are carried out for the liquid encapsulant Czochralski(LEC) by imposing a magnetic field. The use of a magnetic field to the crystal growth is to suppress melt convection and to improve the homogeneity of the crystal. In the present numerical investigation, we focus on the range of 0-0.3Tesla strength for the axial and cusped magnetic field and the effect of the magnetic field on the melt-crystal interface, flow field and temperature distribution which are the major factors to determine the quality of the single crystal are of particular interest. For both axial and cusped magnetic field, increase of the magnetic field strength causes a more convex interface to the crystal. In general, the flow is weakened by the application of magnetic field so that the shape of the melt-crystal interface and the transport phenomena are affected by the change of the flow and temperature field.

<hr style="border: none; border-top: 1px solid black; margin-bottom: 5px;"/> <p style="text-align: center;">기호설명</p> <hr style="border: none; border-top: 1px solid black; margin-top: 5px;"/> <table style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <tr> <td style="width: 30%;">B</td> <td style="width: 40%;">: 자속밀도</td> <td style="width: 30%;">[T]</td> </tr> <tr> <td>c_p</td> <td>: 비열</td> <td>[kJ/kg-K]</td> </tr> <tr> <td>F</td> <td>: 전자기력</td> <td></td> </tr> <tr> <td>h</td> <td>: 열전달계수</td> <td>[W/m²-K]</td> </tr> <tr> <td>J</td> <td>: 유도전류</td> <td></td> </tr> <tr> <td>k</td> <td>: 열전도도</td> <td>[W/m-K]</td> </tr> <tr> <td>Pr</td> <td>: Prandtl 수</td> <td></td> </tr> <tr> <td>q"</td> <td>: 열유속</td> <td>[kW/m²]</td> </tr> <tr> <td>R</td> <td>: 반경</td> <td>[m]</td> </tr> </table> <hr style="border: none; border-top: 1px solid black; margin-top: 5px;"/> <p>† 책임저자, 회원, 인제대학교 기계자동차공학부 E-mail : mechkmg@ijnc.inje.ac.kr TEL : (055)320-3184 FAX : (055)324-1723 * 회원, 경상대학교 수송기제공학부</p> <hr style="border: none; border-top: 1px solid black; margin-top: 5px;"/>	B	: 자속밀도	[T]	c _p	: 비열	[kJ/kg-K]	F	: 전자기력		h	: 열전달계수	[W/m ² -K]	J	: 유도전류		k	: 열전도도	[W/m-K]	Pr	: Prandtl 수		q"	: 열유속	[kW/m ²]	R	: 반경	[m]	<table style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <tr> <td style="width: 30%;">Ra</td> <td style="width: 40%;">: Rayleigh 수</td> <td style="width: 30%;"></td> </tr> <tr> <td>S</td> <td>: 스윙(Swirl)</td> <td></td> </tr> <tr> <td>T</td> <td>: 온도</td> <td>[K]</td> </tr> <tr> <td>u, v</td> <td>: 속도</td> <td>[m/s]</td> </tr> <tr> <td colspan="3" style="padding-top: 10px;">그리스문자</td> </tr> <tr> <td>α</td> <td>: 열확산계수</td> <td>[m²/s]</td> </tr> <tr> <td>β</td> <td>: 체적팽창계수</td> <td>[K⁻¹]</td> </tr> <tr> <td>ε</td> <td>: 방사율</td> <td></td> </tr> <tr> <td>ν</td> <td>: 점성계수</td> <td>[m²/s]</td> </tr> <tr> <td>ρ</td> <td>: 밀도</td> <td>[kg/m³]</td> </tr> <tr> <td>σ</td> <td>: Stefan-Boltzmann 상수</td> <td>[W/m²-K⁴]</td> </tr> <tr> <td>ω</td> <td>: 회전속도</td> <td>[rpm]</td> </tr> <tr> <td colspan="3" style="padding-top: 10px;">하첨자</td> </tr> <tr> <td>e</td> <td>: 액막</td> <td></td> </tr> <tr> <td>m</td> <td>: 용융액</td> <td></td> </tr> <tr> <td>s</td> <td>: 결정</td> <td></td> </tr> </table>	Ra	: Rayleigh 수		S	: 스윙(Swirl)		T	: 온도	[K]	u, v	: 속도	[m/s]	그리스문자			α	: 열확산계수	[m ² /s]	β	: 체적팽창계수	[K ⁻¹]	ε	: 방사율		ν	: 점성계수	[m ² /s]	ρ	: 밀도	[kg/m ³]	σ	: Stefan-Boltzmann 상수	[W/m ² -K ⁴]	ω	: 회전속도	[rpm]	하첨자			e	: 액막		m	: 용융액		s	: 결정	
B	: 자속밀도	[T]																																																																										
c _p	: 비열	[kJ/kg-K]																																																																										
F	: 전자기력																																																																											
h	: 열전달계수	[W/m ² -K]																																																																										
J	: 유도전류																																																																											
k	: 열전도도	[W/m-K]																																																																										
Pr	: Prandtl 수																																																																											
q"	: 열유속	[kW/m ²]																																																																										
R	: 반경	[m]																																																																										
Ra	: Rayleigh 수																																																																											
S	: 스윙(Swirl)																																																																											
T	: 온도	[K]																																																																										
u, v	: 속도	[m/s]																																																																										
그리스문자																																																																												
α	: 열확산계수	[m ² /s]																																																																										
β	: 체적팽창계수	[K ⁻¹]																																																																										
ε	: 방사율																																																																											
ν	: 점성계수	[m ² /s]																																																																										
ρ	: 밀도	[kg/m ³]																																																																										
σ	: Stefan-Boltzmann 상수	[W/m ² -K ⁴]																																																																										
ω	: 회전속도	[rpm]																																																																										
하첨자																																																																												
e	: 액막																																																																											
m	: 용융액																																																																											
s	: 결정																																																																											

1. 서 론

초크랄스키 방법(이후부터 Cz 방법)은 반도체, 광학 응용분야에서 사용되는 단결정 성장에 가장 널리 사용되는 방법중 하나로서 이 과정동안 용융액 내에는 온도구배에 의한 자연대류 뿐만 아니라 결정분과 노의 회전에 의한 강제대류와 자유표면에서 온도구배에 의한 열모세대류 등과 같은 복잡한 유동이 존재한다. 용융액내의 유동은 결정-용융액 상경계면으로의 물질전달과 열전달 등에 영향을 미치며 결국 단결정 품질을 결정하는 상경계면 형상과 결정내 용질 분포에 영향을 미치므로 품질을 향상시키기 위하여 용융액 유동에 대한 이해는 필수적이다.

본 연구에서 사용한 GaAs는 디지털 대규모 집적(LSI) 회로 제조의 기본재료로서, 그 응용 범위가 광전자 소자 및 마이크로 웨이브 소자 등으로 확장되고 있다. GaAs를 성장시키기 위해서는 액막 초크랄스키 방법(이후부터 LEC 방법)을 사용하게 되는데 이 방법은 액막(B_2O_3)으로 용융액을 덮어 휘발성이 강한 As성분의 휘발을 막음으로써 첨가물의 조성이 균일한 단결정을 성장시키기 위한 것이다.

일반적으로 Cz 방법에 의한 실리콘 단결정 성장에 대한 연구 결과가 LEC 방법에 직접적으로 적용될 수 없음은 잘 알려진 사실이다.⁽¹⁾ 그 이유는 GaAs 결정이 실리콘 결정보다 낮은 열전도도를 가지고 있으므로 결정 내의 축 방향과 반지름 방향으로 큰 온도구배를 가지게 되고 열탄성응력을 증가시키는 역할을 한다는 점과 액막의 존재로 인하여 LEC 공정에서 온도장의 형상이 Cz 공정과는 다르게 형성된다는 점을 지적할 수 있다. 따라서 LEC 방법에 대한 연구는 Cz방법에 대한 연구와 별도로 지속적으로 진행되어 왔다.

Salcudean 등⁽²⁾은 GaAs에 대한 LEC 성장에서 용융액 대류가 갖는 진동특성에 의해 상경계면 하부에서 온도진동과 성장공정에 교란이 발생한다고 하였으며, Sabhpathy⁽³⁾는 LEC 방법으로 GaAs 단결정을 성장시킬 때 결정-용융액 상경계면의 형상을 평탄하다고 가정하고 용융액의 거동에 대하여 연구하였다. Givoli 등⁽⁴⁾은 FEM으로 LEC 방법에서 결정과 노의 회전효과를 고려한 용융액내의 유동을 계산하였으며, He 등⁽⁵⁾은 균일한 농도의 단결정을 성장시키기 위하여 용질을

하부에서 공급하는 기법에 관하여 연구하였다. Prasad 등⁽⁶⁾은 고압 LEC 방법에 의한 성장에서 유동모델을 이용하여 첨가물의 불균일한 분포와 결정내의 열응력을 예측하였으며 Fainberg 등⁽⁷⁾도 고압 분위기에서 LEC 방법으로 결정을 성장시키는 경우에 압력이 상경계면 곡률과 열응력에 중요한 영향을 미친다는 사실을 확인하였다.

LEC 방법을 사용하여 단결정을 성장시킬 때 용융액 내부에 발생하는 여러 가지 형태의 구동력들은 상호 작용하여 용융액 유동을 난류적 성격으로 만들며 또한 용질 농도분포도 미시적으로 불균일하게 만든다. 따라서 이러한 문제를 해결하기 위하여 전도성 유체의 유동에 자기장을 인가하는 방법이 사용되기도 한다. Terashima 등⁽⁸⁾은 자기력을 이용하여 용융액 유동을 진정시키고 제어할 수 있는 가능성을 최초로 시도하여 온도의 진동현상과 결정-용융액 상경계면에서의 속도의 진동현상이 감소한다는 사실을 확인하였다.

본 연구의 목적은 자기장을 인가한 LEC 방식으로 GaAs를 성장시킬 때 자기장의 형태와 세기에 따라 용융액의 온도장과 유동장 등이 어떠한 영향을 받는지 수치적으로 살펴보는 것으로 특히 결정 품질에 영향을 미치는 상경계면의 형상변화 등의 특성을 살펴보고자 한다.

2. 해 석

2.1 해석모델

Fig. 1은 커스프 자기장이 걸린 LEC 결정성장 시스템의 형태를 나타내고 있다. LEC 공정의 조업은 As고체, Ga고체, B_2O_3 고체를 노의 바닥부터 차례로 놓은 후 가열기에 의해 노 안의 물질들을 녹이는 과정으로 시작된다. GaAs 혼합액상 위를 B_2O_3 액체가 덮으면 위로부터 축에 매달린 결정의 시드(seed)가 혼합 액상까지 들어간 다음 천천히 들어 올려진다. GaAs결정은 네킹(necking)과 솔더링(shouldering) 과정을 거쳐 일정 반지름으로 성장하게 된다. 근본적으로 이 공정은 일괄공정으로서, 용액의 높이는 성장이 진행됨에 따라 감소하게 되며, 액상이 거의 소진되면 인출속도를 증가시켜서 공정을 마치는 비정상 과정이지만 본 연구에서는 준정상상태로 가정한다.

LEC 공정은 결정, 용융액, 노, 가열기 등으로

이루어져 있지만, 편의상 계산 영역은 용융액영역, 결정영역, 액막영역으로 나누어 계산한다.

수치해석을 단순화시키기 위하여 GaAs 용융액과 B₂O₃ 액막은 비압축성 뉴우튼유체로서 축대칭 층류유동으로 가정하며 온도변화에 따른 밀도변화는 Boussinesq 근사를 따르고 기타 물성치는 일정하다는 가정을 도입하였다. 액막 자유표면은 단지 주변대기와 복사열교환하고, 액막의 투과율을 1로 가정하여 액막-용융액경계면도 주변대기와 복사열교환한다고 가정하였다. 또한 결정분극경과 인출속도는 일정하며 액막의 자유표면은 평평하다고 가정하였다. 이와 같은 가정과 함께 Table 1에 나타난 물성치와 운전조건으로 수치계산을 수행하였다.

2.2 지배방정식

해석모델이 축대칭이므로 원통형 좌표계를 이용하여 지배방정식을 다음과 같이 축대칭 2차원 일반 보존식 형태로 표시할 수 있다.

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r \rho u \phi - r \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(r \rho v \phi - r \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) = r S c(r, z) \quad (1)$$

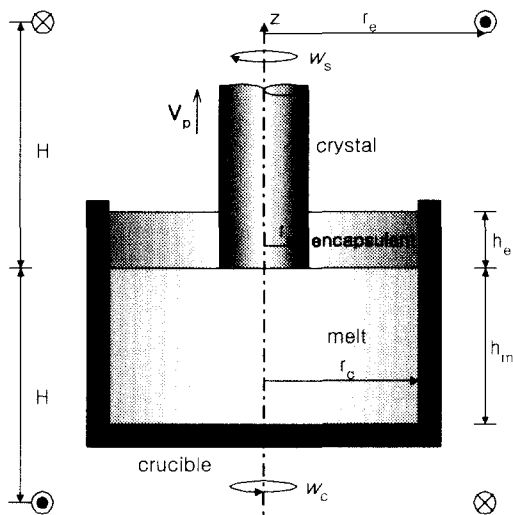


Fig. 1 Schematic of the liquid encapsulant Czochralski system

여기서 ϕ 는 일반 종속변수이고 Γ 는 대류확산 계수, $Sc(r, z)$ 는 생성항이며 각 항에 대한 설명은 Table 2에 나타나 있다.

변수 (r, z) 는 원통 좌표계에서 각각 반경방향, 축방향 좌표이고 (u, v) 는 각 좌표에 대응하는 속도 성분이다. S 는 방위각 속도 성분(ω)과 반경의 곱으로 정의되며 지배방정식을 보존형태로 표시하기 위하여 새로운 변수로서 도입하였다.

무차원수인 Grashof수는 $Gr = g \beta T_{ref} R^3 / \nu^3$ 으로, Prandtl수는 $Pr = \nu / \alpha_m$ 으로, 자기장과 관련된 무차원수는 $N = \sigma_c R B^2 \omega / \rho_m V_{ref}$ 으로 정의한다.

Table 1 Properties and geometry of LEC system

용융액 열전도도, k_m	17.8 W/mK
밀도, ρ_m	5710 kg/m ³
비열, C_{pm}	0.434 kJ/kgK
체적 팽창계수, β_m	$1.87 \times 10^{-4} / ^\circ\text{C}$
점성계수, ν_m	$4.88 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$
결정봉 열전도도, k_s	7.0 W/mK
밀도, ρ_s	5200 kg/m ³
비열, C_{ps}	0.420 kJ/kgK
B ₂ O ₃ 열전도도, k_e	1.85 W/mK
밀도, ρ_e	1500 kg/m ³
비열, C_{pe}	1.83 kJ/kgK
체적 팽창계수, β_e	$5.0 \times 10^{-5} / ^\circ\text{C}$
점성계수, ν_e	$2.39 \times 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s}$
방사율, ϵ	0.75
용융온도, T_f	1511 K
결정봉 반지름, r_s	0.0375 m
노 반지름, r_c	0.075 m
용융액 높이, h_m	0.05 m
액막 높이, h_e	0.02 m
결정봉 높이, h_s	0.1 m
결정봉 회전속도, ω_s	1 rpm
노 회전속도, ω_c	-2 rpm
외기 온도, T_∞	1261 K
결정성장 속도, V_p	13 mm/h

Table 2 Arrangement for ϕ , Γ and $Sc(r,z)$

ϕ	ρ	Γ	$Sc(r,z)$
u	1	1	$\frac{S^2}{r^3} - \frac{u}{r^2} + NF_r - \frac{\partial P}{\partial r}$
v	1	1	$GrT_m + NF_z - r \frac{\partial P}{\partial z}$
S	1	1	$-\frac{2}{r} \frac{\partial S}{\partial r} + rNF_\theta$
T_m	1	$\frac{1}{Pr}$	0

결정봉 영역에서의 에너지 방정식은 다음과 같이 표시할 수 있다.

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(-\frac{r}{Pr} \frac{\alpha_s}{\alpha_m} \frac{\partial T_s}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(rV_p \cdot T_s - \frac{r}{Pr} \frac{\alpha_s}{\alpha_m} \frac{\partial T_s}{\partial z} \right) = 0 \quad (2)$$

여기서 α_m , α_s 는 각각 용융액과 결정봉의 열확산계수이며 V_p 는 결정봉의 인출속도이다.

2.3 자기장 생성

현재 사용되고 있는 자기장방식은 축방향, 횡방향 및 커스프 자기장 등 3가지인데 여기서는 2차원 해석이 가능한 축방향과 커스프 자기장에 관해서만 다루도록 한다. 커스프 자기장은 용융액표면으로부터 동일한 거리만큼 떨어진 곳에서 결정봉과 동심원인 코일에 전류를 서로 반대방향으로 흘림으로써 형성되며 축방향 자기장은 결정봉과 동심으로 설치된 단일 솔레노이드에 의해 만들어진다. 일반적으로 전도체인 액에 자기장을 가하면 액상내에 유도전류가 발생하게 되며 자기장과 상호작용을 일으켜 다음과 같은 전자기력이 발생한다.

$$\vec{F} = \vec{j} \times \vec{B} \quad (3)$$

여기서 \vec{j} 는 유도전류이고 \vec{B} 는 자속밀도로서 본 연구에서는 0-0.3T범위의 자기장을 다룬다. 전자기력의 각 성분은 다음과 같다.

$$F_r = \sigma_e B_z (vB_r - uB_z) \quad (4)$$

$$F_\theta = -\frac{1}{r} \left(B_r \frac{\partial \Psi_J}{\partial r} + B_z \frac{\partial \Psi_J}{\partial z} \right) \quad (5)$$

$$F_z = \sigma_e B_r (uB_z - vB_r) \quad (6)$$

여기서 σ_e 는 전기전도도이고 B_r , B_z 는 각각 r, z방향의 자속밀도성분이며 Ψ_J 는 전기유선 함수로서 $\nabla \cdot \vec{j} = 0$ 을 만족시키도록 다음과 같이 정의된다.

$$J_r = \frac{1}{r} \frac{\partial \Psi_J}{\partial z}, \quad J_z = -\frac{1}{r} \frac{\partial \Psi_J}{\partial r} \quad (7)$$

전기유선함수 Ψ_J 는 다음 식으로부터 결정된다.

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \Psi_J}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \Psi_J}{\partial z} \right) \\ & = \sigma_e r \left\{ B_r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{S}{r^2} \right) + B_z \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{S}{r^2} \right) \right\} \quad (8) \end{aligned}$$

노와 액막을 전기절연체로 가정하여 노의 벽과 바닥 및 액막과의 경계면에서 전류유선함수 값을 0으로 취하고 상경계면에서는 연속조건을 사용하여 용융액과 결정봉에서 전기유선함수를 구하였다.

2.4 경계조건

1) 노 바닥

$$u = v = 0, \quad w = r\omega_c, \quad \frac{\partial T_m}{\partial z} = 0, \quad \Psi_J = 0$$

2) 노 벽

$$u = v = 0, \quad w = r_c \omega_c, \quad k_m \frac{\partial T_m}{\partial r} = q'', \quad \Psi_J = 0$$

3) 노 중심

$$u = w = 0, \quad \frac{\partial v}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial T_m}{\partial r} = 0, \quad \Psi_J = 0$$

4) 액막 자유표면

$$v = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial z} = \frac{\partial w}{\partial z} = 0,$$

$$-k_e \frac{\partial T_e}{\partial z} = \sigma_e \epsilon_e (T_e^4 - T_\infty^4)$$

5) 액막-용융액 경계

$$v=0, \quad \Psi_J=0,$$

$$-k_m \frac{\partial T_m}{\partial z} + k_e \frac{\partial T_e}{\partial z} = \alpha_e \sigma \epsilon_m (T_m^4 - T_\infty^4)$$

6) 액막-결정봉 경계

$$u=v=0, \quad w=r_s \omega_s,$$

$$-k_s \frac{\partial T_s}{\partial r} + k_e \frac{\partial T_e}{\partial r} = \alpha_e \sigma \epsilon_s (T_s^4 - T_\infty^4)$$

7) 액막 측벽

$$u=v=0, \quad w=r_c \omega_c, \quad k_e \frac{\partial T_e}{\partial r} = q'', \quad \Psi_J=0$$

8) 용융액-결정봉 경계

$$u=v=0, \quad w=r \omega_s, \quad T_m = T_s = T_f$$

9) 결정봉 중심

$$\frac{\partial T_s}{\partial r} = 0, \quad v=V_p, \quad \Psi_J=0$$

10) 결정봉 표면

$$-k_s \frac{\partial T_s}{\partial r} = \sigma \epsilon_s (T_s^4 - T_\infty^4), \quad \Psi_J=0$$

11) 결정봉 상부

$$T_s = T_\infty, \quad \Psi_J=0$$

3. 수치적 방법

수치해석시 용융액 영역과 결정봉 영역을 각각 55×43 , 8×41 로 또한 액막영역을 28×21 격자계로 분할하였으며 전체 계산영역중 전단층이 존재할 것으로 예상되는 윗면, 옆면 그리고 아랫면에는 조밀한 격자를 배치한 비균일격자를 사용하였다. 일반적으로 불규칙한 형태의 상경계면을 고려하여 경계고차좌표계를 도입하고 지배방정식을 좌표변환시킨 후 유동장과 온도장의 경계조건을 적용하고 SIMPLER 알고리즘과 BASIS 행렬해법을 이용하여 유한 체적법으로 수립된 해를 구하였다.

최종 상경계면 위치는 초기에 임의로 가정한 상경계 위치로부터 반복계산을 통해 구하였다. 계산을 효과적으로 수행하기 위하여 상경계에서 열유속이 연속적이라는 사실에 기초하여 상경계

위치에 대한 수정 방정식을 도입하고 상경계 위치를 보정해 나간다.⁽⁹⁾ 이 위치가 최종해가 아니면 각각 상에서 얻어진 온도장은 다음 식을 만족하지 않는다.

$$\rho V_p L - k_s \frac{\partial T_s}{\partial z} = -k_m \frac{\partial T_m}{\partial z} \quad (9)$$

여기서 L 은 상변화물질의 잠열이며 반복 계산 후 상경계를 통과하는 열유속의 연속조건이 주어진 오차범위 내로 만족되면 최종해로 단정하고 계산을 중지하게 된다. 수렴조건으로는 상경계면에서 열유속 차이와 연속방정식, 운동량방정식, 에너지방정식의 절대 잔류량, 상대 잔류량의 값이 10^{-4} 미만일 때 수렴된 것으로 판단하였다.

4. 결과 및 토의

4.1 수치결과의 비교

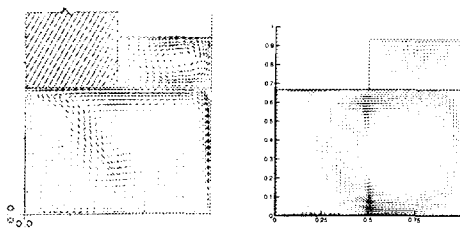
Fig. 2는 자기장이 없는 상태에서 상경계면 형상을 평탄하다고 가정하여 구한 유동장, 온도장의 결과를 Sabhapathy⁽³⁾의 결과와 비교한 그림이다. Fig. 2(a)는 자오면상의 유동장을 나타낸 것으로 주유동이 단일 셀로 이루어져 있으며 액막내의 유동도 하나의 셀형태로 나타나고 있지만 용융액 속도에 비하여 약 1/200정도의 아주 미약한 유동이 발생하고 있다. 이것은 GaAs 용융액과 B_2O_3 용융액의 점성계수의 차이에 의한 것으로 액막내부 유동은 거의 무시할 정도로 미약하다. Fig. 2(b)는 온도장을 나타내고 있으며 노측벽의 자연대류에 의한 온도장 형태와 결정봉 하부의 온도 성층화 등이 정성적으로 잘 일치하고 있음을 알 수 있다. Fig. 2(c)는 방위각 속도를 나타내고 있으며, 최대 방위각 속도위치 및 속도 분포면에서 잘 일치하고 있다.

Fig. 3은 0.05 T크기의 축방향 자기장이 걸린 상태에서 상경계면 형상을 평탄하다고 가정하여 Sabhapathy⁽¹⁰⁾가 구한 유동장, 온도장 결과와 상경계면을 고려하여 계산한 본 논문의 결과를 비교한 그림이다. 축방향 자기장이 걸린 상태에서도 온도장, 유동장이 정성적으로 일치하고 있으며 온도장은 Sabhapathy의 경우처럼 일정한 온도조건을 준 경우이다.

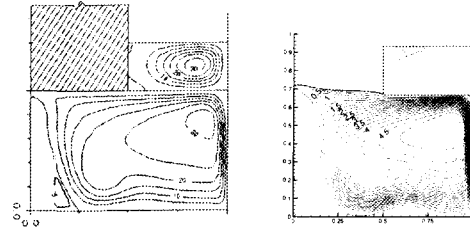
4.2 상경계면 형상

Fig. 4와 5는 자기장 형태와 자기장 세기에 따른 상경계면 형상을 보여주고 있다. Fig. 4에서 축방향 자기장이 인가된 경우에 결정-용융액 경계면 형상을 살펴보면 자기장 세기가 증가할수록 경계면 형상이 결정분쪽으로 불룩하여지는 경향이 있음을 알 수 있다. 일반적으로 인출속도를 일정하게 유지하는 경우에 상경계면의 형상이 변화하는 것은 용고잠열의 변화때문이 아니고 용융액의 유동형태가 변화함으로써 열전달이 변화되

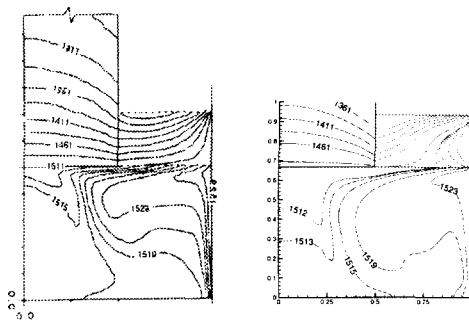
었음을 의미한다. 즉 자기장의 세기를 증가시키면 용융액 내부의 전체적인 유동이 감소되고 이로 인하여 대류에 의한 열전달보다 전도에 의한 열전달 형태가 지배적이 되면서 노벽에 가해진 열이 결정분과 자유표면으로 전달되는 양상이 바뀌어진다. 동일한 자기장 세기에서 커스프 자기장 경우가 축방향 자기장 경우에 비하여 상경계면의 형상이 결정분을 향하여 더 오목한 형태를 보이고 있음은 이와 같은 유동 변화에 기인한다.



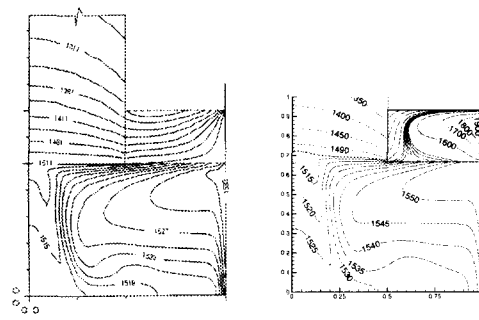
(a) Vector flow field



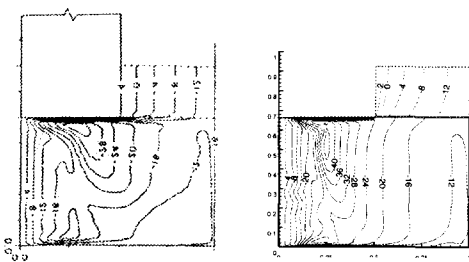
(a) Streamlines



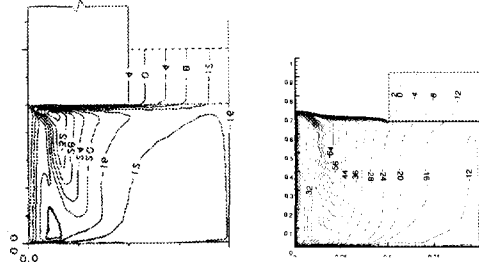
(b) Isotherms



(b) Isotherms



(c) Azimuthal velocity



(c) Azimuthal velocity

Fig. 2 Comparison of temperature and flow fields between our result(right) and Sabhapathy's one(left) without magnetic field

Fig. 3 Comparison of temperature and flow fields between our result(right) and Sabhapathy's one(left) with magnetic field of 0.05T

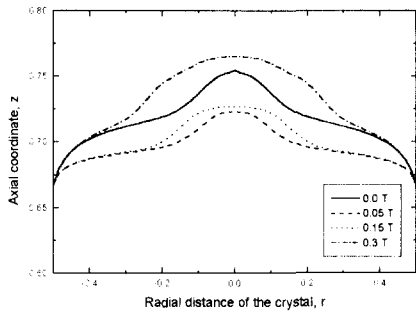


Fig. 4 Evolution of the melt-crystal interface shape by imposing axial magnetic field

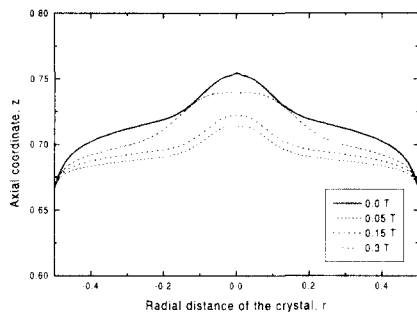
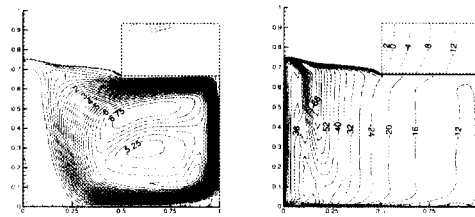


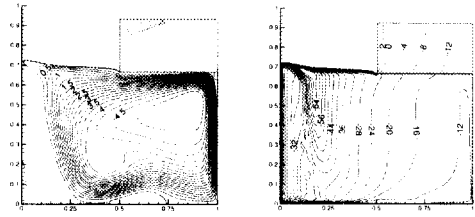
Fig. 5 Evolution of the melt-crystal interface shape by imposing cusp magnetic field

4.3 용융액 유동장

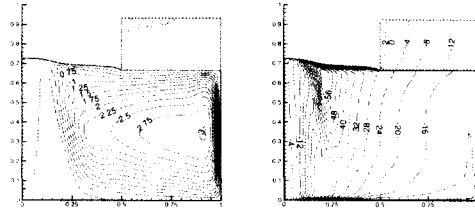
Fig. 6은 축방향 자기장을 인가한 경우에 자기장 세기에 따라 용융액내의 자오면상 유동과 방위각 속도형태를 나타낸다. 그림에 나타난 것과 같이 자기장 세기가 증가할수록 유선함수 최대값이 감소하면서 유동이 감소되는 것을 알 수 있다. 결정봉 하부에는 아주 약한 셀이 존재하지만 자기장이 증가하면서 용융액 중심부에서 자오면상의 유동은 거의 존재하지 않게 되고 단지 방위각 방향의 속도 성분만이 존재하여 테일러기둥을 형성하여 고체처럼 회전하게 된다. 또한 그림으로부터 주유동셀의 경계와 최대 방위각 속도성분이 나타나는 지점이 거의 일치함을 알 수 있다. 액막내의 자오면상 유동은 거의 무시할 만한 강도를 나타내는데 이것은 용융액에 비하여 훨씬 작은 점성에 기인하며, 방위각 속도는 거의 수직 형태로 Couette유동과 유사하다.



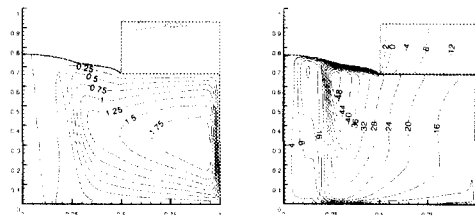
(a) 0.0 T



(b) 0.05 T



(c) 0.15 T



(d) 0.3 T

Fig. 6 Streamlines(left) and azimuthal velocity (right) for the various strengths of axial magnetic fields

용융액 내의 최대 방위각 속도 위치는 결정봉 하부 근처로서 각운동량 보존에 따라 노벽 근처의 유체가 자오면상 유동에 의하여 결정봉 하부로 유입되면서 노벽 근처의 유체보다 빠른 방위각속도를 나타낸다. 그림에서 보듯이 결정봉 하

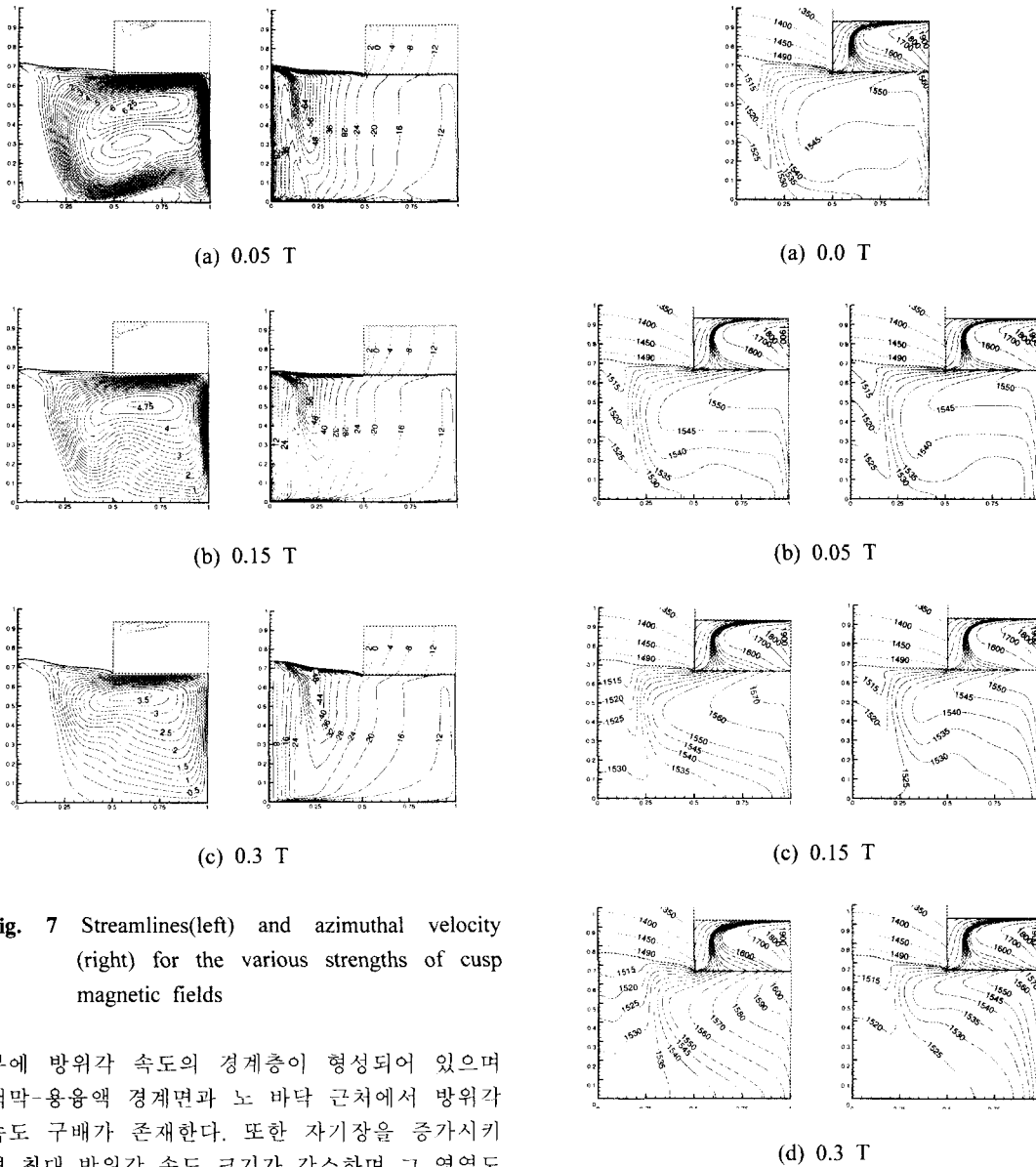


Fig. 7 Streamlines(left) and azimuthal velocity (right) for the various strengths of cusp magnetic fields

부에 방위각 속도의 경계층이 형성되어 있으며 액막-용융액 경계면과 노 바닥 근처에서 방위각 속도 구배가 존재한다. 또한 자기장을 증가시키면 최대 방위각 속도 크기가 감소하며 그 영역도 축소되는 것을 알 수 있다. Fig. 7은 커스프 자기장을 적용한 경우의 유동장을 나타내고 있다. 축방향 자기장 경우와 마찬가지로 전반적인 유동강도는 약화되지만 용융액-결정봉 상경계면에서 반경방향 속도성분은 크게 감소하지 않고 있음을 볼 수 있다. 이것은 경계면 근처에서 자기장 성분과 반경방향 속도성분이 평행하므로 유동이 자기장에 의한 힘을 받지 않기 때문이다. 결국 액막-용융액 경계면 근처의 유체가 결정봉 하부로

Fig. 8 Isotherms for the various strengths of axial(left) and cusp(right) magnetic field

침투하게 되므로 결정봉의 온도 분포 및 상경계면 형태에서 축방향 자기장과 다른 형태를 나타내게 된다. 액막내의 유동은 축방향 자기장 경우와 마찬가지로 자오면상 유동은 극히 미약하며 방위각 속도는 거의 축에 평행한 속도분포를 나타내므로 Couette유동과 유사하다. 용융액 내의

방위각 속도분포도 축방향 경우와 마찬가지로 결정봉 하부에 전단층이 형성되어 있으며 최대 방위각 속도가 존재하고 있다.

4.4 용융액의 온도장

Fig. 8은 자기장 형태와 크기에 따라 용융액내부의 온도분포를 보여주고 있다. 0.05T크기의 커스프 자기장의 경우에 온도장은 자기장을 사용하지 않은 경우와 큰 차이가 없으나 자기장 크기를 더욱 증가시키면 자연대류에 의한 온도장의 왜곡이 줄어들면서 결정봉 하부와 노벽쪽으로 온도가 성층화되어 가는 것을 알 수 있다. 즉 자기장 세기가 증가하면서 유동감소로 대류에 의한 열전달이 감소되면서 노벽근처의 최고 온도가 함께 증가함을 알 수 있다. 축방향 자기장 경우는 유동장에서 살펴본것과 동일한 자기장 세기에서 커스프 자기장 경우에 비하여 유동이 더욱 약화되므로 결정봉 하부 및 노의 측벽에서 성층화가 잘 이루어져 있음을 알 수 있다. 또한 용융액 내부의 최대온도를 비교하여 보아도 자기장이 증가함에 따라 축방향의 경우가 커스프 경우에 비하여 더 높게 나타나고 있다.

5. 결 론

액막 초크랄스키 결정성장법에 의한 GaAs 단결정 성장과정동안 자기장 형태 및 강도에 따른 용융액과 액막 및 결정봉내의 온도장과 유동장 및 상경계면 형상을 수치적으로 살펴보았다.

자기장 세기가 증가할수록 상경계면 형상이 결정봉쪽으로 불룩하여지는 경향이 있으며, 자기장 세기를 0.3T까지 변화시킨 결과 커스프 자기장에 비해 축방향 자기장을 적용한 경우에 자오면상의 유동강도가 현저히 감소되었음을 알 수 있었다. 그 결과 온도장의 성층화로 인하여 열전달 양상이 대류에서 전도로 바뀌어지고 있으며 용융액내의 방위각 속도는 자기장에 의하여 큰 영향을 받고 있지 아니하였다.

후 기

본 연구는 1997년도 학술진흥재단의 자유공모 과제 연구지원에 의하여 연구되었으며 이에 감사드립니다.

참고문헌

- (1) Mülle, G., Hirt, G. and Hofmann, D., 1992, "Current Issues in the Bulk Growth of s.i. III-V Materials," *7th Conf. On Semi-insulating Materials*, Mexico, Chapter 3, pp. 73~84.
- (2) Salcudean, M. E. and Sabhpathy, P., 1989, "Numerical Study of Free and Forced Convection in the LEC Growth of GaAs," *J. Crystal Growth*, Vol. 94, pp. 522~526.
- (3) Sabhpathy, P. and Salcudean, M. E., 1989, "Numerical Analysis of Heat Transfer in LEC Growth of GaAs," *J. Crystal Growth*, Vol. 97, pp. 125~135.
- (4) Givoli, D., Flaherty, J. E. and Shephard, M. S., 1997, "Analysis of InP LEC Melt Flows Using a Parallel Adaptive Finite Element Scheme," *J. Crystal Growth*, Vol. 180, pp. 510~516.
- (5) He, J. and Kou, S., 2000, "LEC Growth of In-doped GaAs with Bottom Solid Feeding," *J. Crystal Growth*, Vol. 216, pp. 21~25.
- (6) Prasad, V., Zou, Y. F., Wang, G. X., Zhang, H. and Bliss, D. F., 1997, "Macro-Segregation Dynamics of Interface and Stresses in High Pressure LEC Grown Crystals," *J. Crystal Growth*, Vol. 180, pp. 524~533.
- (7) Fainberg, J., Leister, H. J. and Müller, G., 1997, "Numerical Simulation of the LEC- Growth of GaAs Crystals with Account of High-Pressure Gas Convection," *J. Crystal Growth*, Vol. 180, pp. 517~523.
- (8) Terashima, K. and Fukuda, T., 1983, "A New Magnetic-Field Applied Pulling Apparatus for LEC GaAs Single Crystal Growth," *J. Crystal Growth*, Vol. 63, pp. 423~425.
- (9) Kim, C. J. and Kaviany, M., 1992, "A Fully Implicit Method for Diffusion-Controlled Solidification of Binary Alloys," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 35, pp. 1143~1154.
- (10) Sabhpathy, P. and Salcudean, M. E., 1990, "Numerical Study of Flow and Heat Transfer in LEC Growth of GaAs with an Axial Magnetic Field," *J. Crystal Growth*, Vol. 104, pp. 371~388.