

Numerical simulation optimization for solution growth of silicon carbide

Young-Gon Kim*, Su-Hun Choi*, Chae-Yung Lee*, Jeung-Min Choi*, Mi-Seon Park*, Yeon-Suk Jang*, Seong-Min Jeong**, Myung-Hyun Lee**, Younghee Kim**, Won-Seon Seo** and Won-Jae Lee***†

*Department of Advanced Materials Engineering, Dong-Eui University, Busan 47340, Korea

**Energy and Environmental Division, Korea Institute of Ceramic Engineering and Technology, Jinju 52851, Korea

(Received April 21, 2017)

(Revised May 18, 2017)

(Accepted June 7, 2017)

Abstract In this study, numerical simulation was performed to focus on optimized process condition for obtaining a long-term growth and high quality SiC crystal. It could be optimized by considering the change of fluid and a carbon flow in the Si melt added with 40% Cr. The Crystal Growth Simulator (CGSim™, STR Group Ltd.) was used as a numerical simulation. It was confirmed that many parameters such as temperature, rotation speed of seed crystal and crucible, and seed position during the crystal growth step had a strong influence on the speed and direction of solution flow for uniform temperature gradient and stable crystal growth. The optimized process condition for the solution growth of SiC crystal was successfully exhibited by adjusting various process parameters in the numerical simulation, which would be helpful for real crystal growth.

Key words Solution growth, Silicon carbide, CGSim, Carbon flow, Solution flow, Numerical simulation

SiC 용액 성장을 위한 수치 시뮬레이션의 최적화

김영곤*, 최수훈*, 이채영*, 최정민*, 박미선*, 장연숙*, 정성민**, 이명현**, 김영희**, 서원선**, 이원재***†

*동의대학교 신소재공학과, 부산, 47340

**한국세라믹기술원, 진주, 52851

(2017년 4월 21일 접수)

(2017년 5월 18일 심사완료)

(2017년 6월 7일 게재확정)

요약 본 연구는 SiC 용액 성장에서 Cr 40%가 첨가된 Si melt 내부의 용액과 탄소흐름의 변화를 수치적으로 분석하여 장시간 성장과 고품질의 SiC 단결정을 얻기 위한 최적공정 조건의 실계를 목적으로 진행하였다. 수치 시뮬레이션으로는 crystal growth simulator (CGSim™, STR Group Ltd.)가 사용되었다. 결과적으로, 성장온도, 종자정축과 도가니축의 회전속도 및 성장 시 종자정의 위치에 따라 melt내부의 용액 흐름과 탄소흐름의 속도 및 방향이 변화함으로써 더 균일한 온도구배를 형성하여 안정적인 성장이 이루어지는 조건을 확인하였다. 그러므로, 성장조건들을 조절함으로써 시뮬레이션 상에서 실험 조건의 최적화가 가능하였고 향후 실제 실험에서도 많은 도움이 될 것으로 예상된다.

1. 서론

탄화규소(SiC)는 우수한 물리적 특성으로 인한 고전압, 고주파수, 고온동작이 요구되는 파워소자 제조에 있어서 상당히 유망한 와이드 밴드갭(wide band gap) 반도체 물질 중 하나이다. 오늘날, 상업적인 SiC 웨이퍼는 대부분이 대구경화와 높은 성장률을 가진 물리적 기상 수송

법(PVT: Physical Vapor Transport)에 의해 생산되고 있다[1, 2]. 그동안의 오랜 시간과 많은 연구로 인하여 파워소자 구동에 있어서 악영향을 미치는 SiC 웨이퍼 내부의 적층결함이나 마이크로파이프(MPs) 등의 대부분의 결함이 많이 감소하였다. 그러나 여전히 threading screw dislocations(TSDs)와 같은 전위들이 SiC 웨이퍼에 많이 존재하고 있다[3]. 따라서, 많은 연구자들이 고품질의 SiC 웨이퍼를 얻기 위하여 열평형에 근접한 분위기에서 성장 공정이 이루어지는 용액 성장법으로 활발한 연구를 진행하고 있다[4]. 하지만 용액 성장법에서는 도가니와

†Corresponding author

E-mail: leewj@deu.ac.kr

용액계면에서의 다결정 형성과 시간이 지남에 따라 성장 계면에서의 과포화도 변화에 의해 장시간 성장에 어려움이 있다[5].

본 연구는 수치 시뮬레이션을 이용하여 melt 내부의 용액과 탄소흐름을 분석함으로써 실제 용액성장에서 장시간 성장과 고품질의 SiC를 얻기 위한 최적의 공정 조건을 설계하는 목적으로 진행하였다.

2. 시뮬레이션 모델

Fig. 1에서와 같이 crystal growth simulator (CGSim™)로 진행된 시뮬레이션은 Cr 40%가 첨가된 Si melt는 흑연 도가니 내부에 담겨있으며 또한 흑연 단열재로 싸여있는 구조로 종자정(seed crystal)은 용액 상단부의 흑연축에 부착되었고, 성장 메커니즘으로는 종자정(낮은

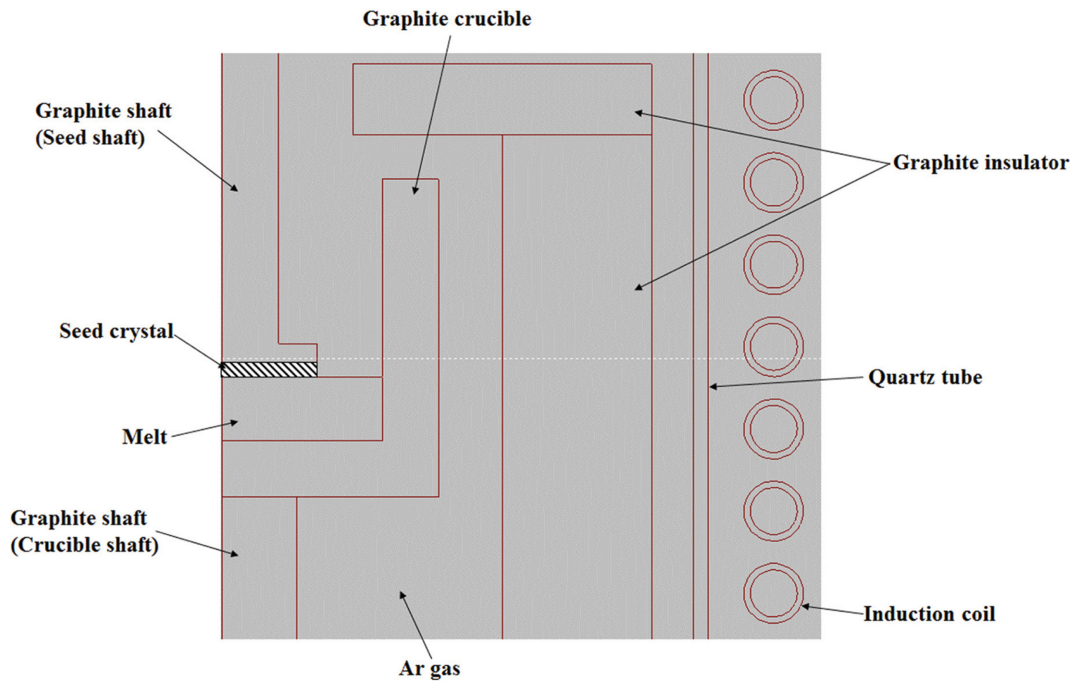


Fig. 1. Schematic diagram of growth cell for numerical simulation.

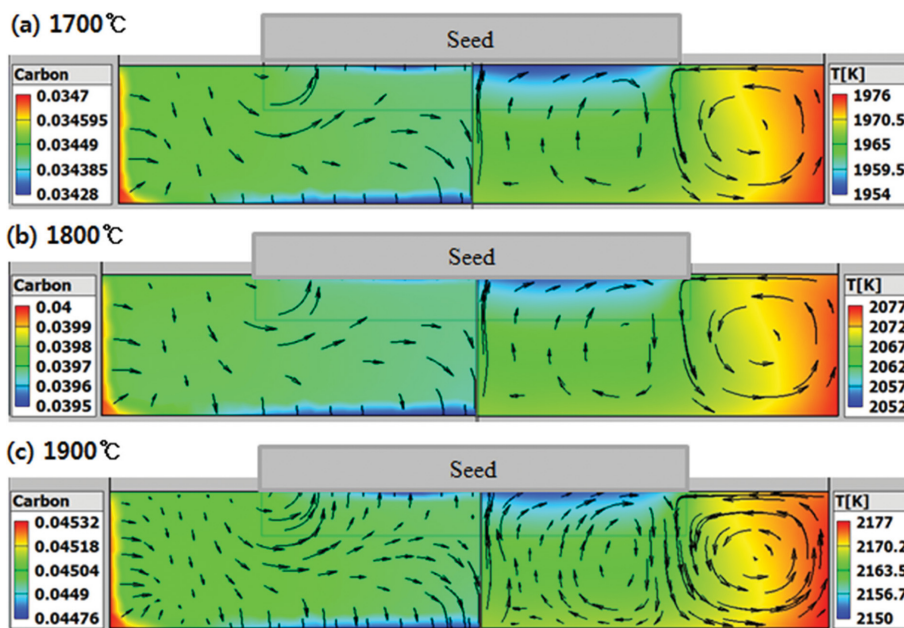


Fig. 2. Carbon diffusion flux and distribution of carbon concentration (left side) and temperature gradient (right side) at different temperature in the silicon melt; Average growth rates: 0.176 mm/h at 1700°C, 0.213 mm/h at 1800°C, 0.278 mm/h at 1900°C.

온도)과 흑연 도가니(높은 온도) 사이의 온도구배로 인하여 흑연 도가니에서 용해된 탄소가 종자정으로 이동하게 된다. 계속해서 종자정에 모인 탄소가 Si melt와 반응을 함으로써 SiC 결정성장이 이루어지게 된다.

용액내부의 흐름에 대해 시뮬레이션을 진행하였다. 전체적인 유체흐름은 온도에 무관하게 종자정 중앙 근처에서는 모두 시계방향(도가니바닥으로부터 종자정 방향)으로, 종자정 가장자리에서는 반시계방향(종자정 방향으로부터 도가니바닥 방향)으로 이동하는 것을 알 수 있었다. 탄소의 흐름 또한 온도와 무관하게 도가니 벽에서 종자정과 도가니 바닥으로 이동하는 것을 확인하였다. 이러한 원인으로서는 유도가열에 의한 도가니 발열과 용액 내부에 작용하는 Lorentz forces의 영향에 의한 것이라고 판단된다[6]. 성장률과 탄소농도의 경우에는 성장 온도에 비례하여 증가하는 것을 확인할 수 있었다. 이는 온도가

3. 결과 및 고찰

3.1. 성장 온도의 영향

우선 Fig. 2와 같이 온도 1700, 1800, 1900°C일 때

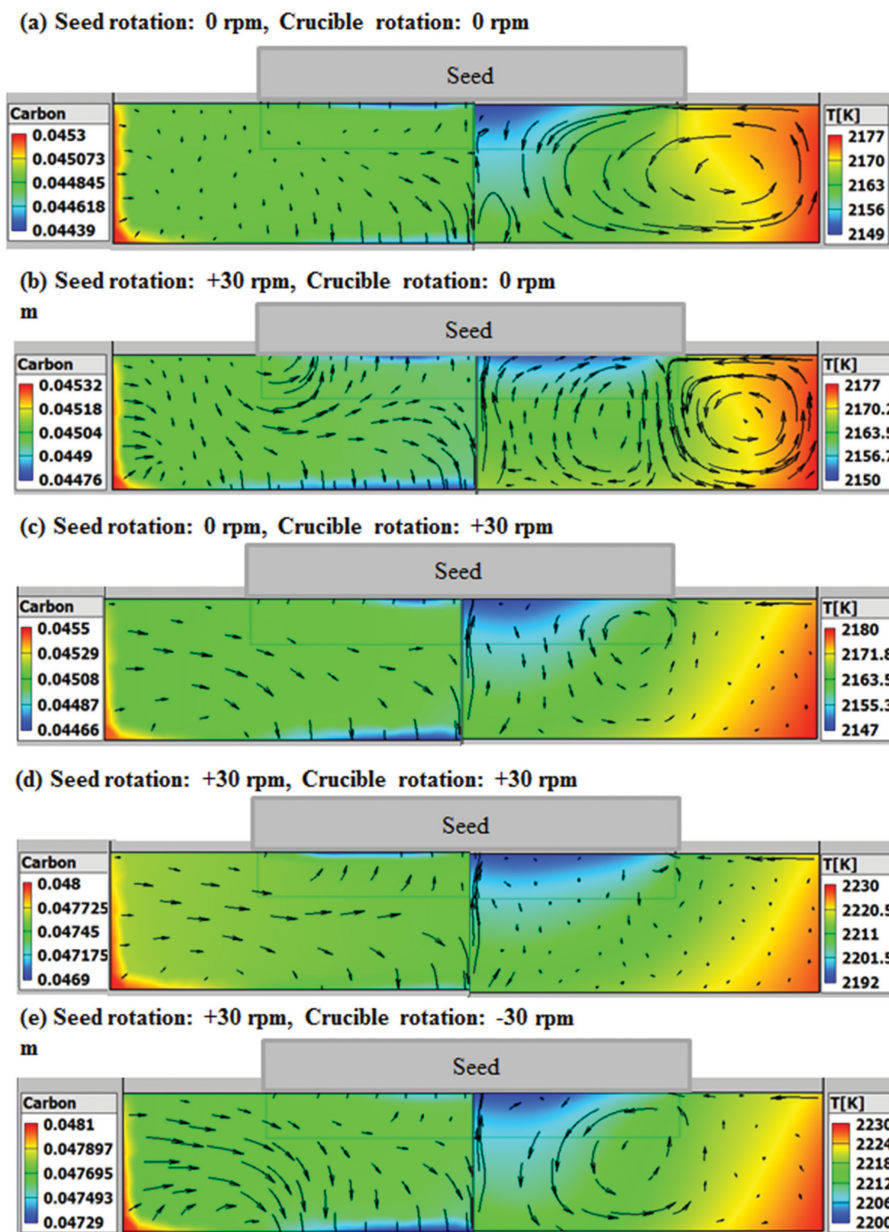


Fig. 3. Carbon diffusion flux (left side) and fluid flow (right side) at various rotation speed in the solution (Positive mark is clockwise, negative mark is counter-clockwise); Average growth rate: (a) 0.276 mm/h, (b) 0.278 mm/h, (c) 0.279 mm/h, (d) 0.336 mm/h, and (e) 0.355 mm/h.

높아짐에 따라 Si melt 내부의 탄소 용해도가 증가하게 되고 따라서 더 많은 탄소농도가 종자점으로 이동할 수 있게 되므로 성장률이 증가한다고 예상된다.

3.2. 강제 대류의 영향

용융 상태의 Si melt 내부에서 강제 대류(forced convection)에 의한 영향을 알아보기 위하여 종자점이 부착되어 있는 상부 흑연축과 흑연 도가니와 연결되어 있는 하부 흑연축을 회전시켰다. 1900°C 성장온도로 각각 상부 종자정축을 0, 30 rpm과 하부 도가니축을 0, 30, -30 rpm으로 변화를 주어 회전시켰다.

종자정축과 도가니축을 모두 회전시키지 않은 경우 (Fig. 3(a))에서는 강제 대류가 형성되지 않고 유도가열에 의한 전자기대류와 부력만이 존재하게 되므로 이로 인하여 도가니 벽에서부터 용액 내부로 향하는 용액 흐름이 지배적으로 형성되게 된다. 따라서 도가니 벽으로부터 거리가 멀리 떨어져있는 종자정 중앙영역이 가장자리 영역보다 상대적으로 낮은 온도로 유지되기 때문에 결정성장이 불룩하게 형성될 것으로 예상된다.

종자정축만 30 rpm으로 회전시키는 경우(Fig. 3(b))에는 종자정 근처에서 강제 대류가 형성되게 된다. 그로 인해 용액 중앙 영역에서는 도가니 바닥으로부터 종자정 방향으로 상승하는 대류가 형성되게 되고 종자정 가장자리 부분에서는 마란고니 대류(Marangoni convection)가 만들어지게 되어 결정 성장이 전반적으로 편평하게 이루

어질 것으로 예상된다[7]. 탄소농도 또한 회전시키지 않는 경우보다 종자정 방향으로의 이동이 많아지게 되어 성장률이 상승하는 것을 확인하였다.

도가니 축만 30 rpm으로 회전시킨 경우(Fig. 3(c))에는 용액 내에서 종자 정으로부터 도가니 바닥으로 하강하는 흐름이 형성되며, 종자정 가장자리 부근에서는 아래로 향하는 와류가 형성되는 것을 알 수 있다. 탄소농도의 경우에는 도가니 바닥으로 향하는 흐름이 많아지는 것을 확인하였고, 이로 인해 실제 실험에서는 성장 중에 도가니 바닥에서 다결정이 형성될 것으로 판단되어 장시간 성장을 진행할 경우 공정에 매우 악영향을 미칠 것으로 예상된다.

종자정축과 도가니축을 30 rpm으로 동시에, 서로 같은 방향(Fig. 3(d))과 반대 방향(Fig. 3(e))으로 회전시킨 경우, Fig. 3(d)에서는 도가니 바닥에서부터 종자정 부근으로 전체적으로 일정하게 상승하는 용액흐름이 형성되고 탄소농도 역시 대부분이 종자정 방향으로 이동하는 반면에, Fig. 3(e)에서는 용액내의 종자정 가장자리 부분에서 와류가 형성되며 탄소농도의 경우는 대부분이 도가니 바닥으로 이동하는 것을 확인할 수 있었다. 전체적인 성장률은 Fig. 3(e)의 경우가 가장 높게 계산되었지만 실제 성장될 잉곳의 모양이나 결정성을 고려해보았을 때 Fig. 3(d)의 경우가 가장 적합한 결과라고 판단된다.

3.3. 종자정 위치의 영향

결정성장 시 종자정의 위치에 따라 용액내부의 흐름과

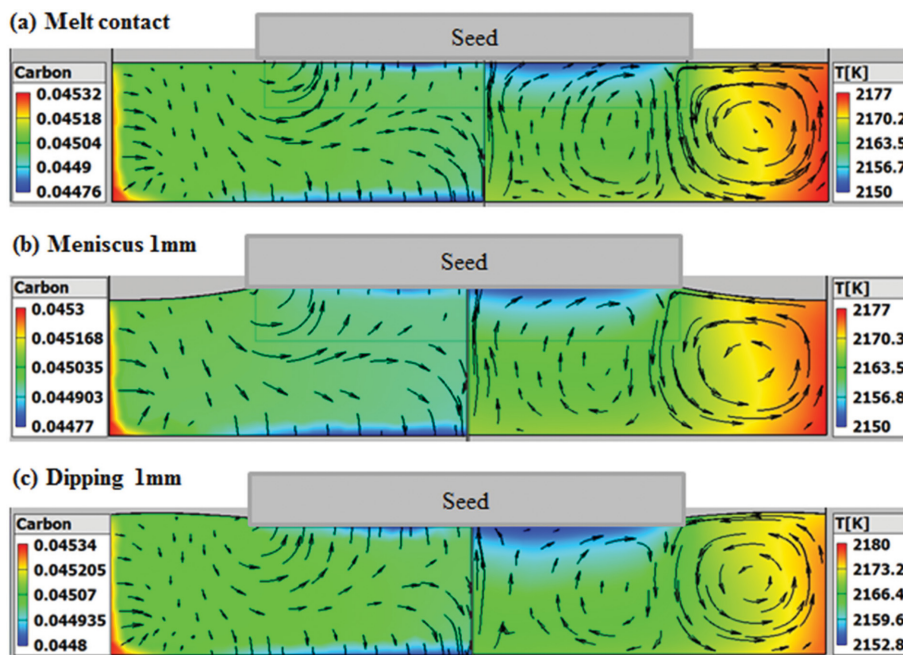


Fig. 4. Carbon diffusion flux and distribution of carbon concentration (left side) and temperature gradient (right side) with different seed position. (a) Seed contacts on melt surface, (b) seed contacts with the meniscus of 1mm and (c) seed is dipped in the melt. Average growth rate: (a) 0.278 mm/h, (b) 0.278 mm/h, and (c) 0.301 mm/h.

성장양상을 알아보기 위한 시뮬레이션을 진행하였다. 종자정의 위치는 각각 용액표면과 접촉한 경우, 표면으로부터 1 mm 떨어진 경우(meniscus formation)와 용액 내부로 1 mm 담근 경우(dipping) 총 세가지 경우로 진행하였다. 종자정 위치가 낮아질수록(Fig. 4(b → a → c)) 용액의 중앙부분이 상승하는 흐름과 도가니 벽면 부근에서의 하강하는 흐름의 교차부분이 도가니 벽면 방향으로 이동하는 것을 확인할 수 있었다. 이러한 영향으로 인해 종자정 부근에서의 온도 구배가 작아지는 것을 알 수 있었고, 또한 안정적으로 성장이 진행될 것이라고 예상할 수 있다. 탄소농도는 세 경우 모두 거의 같은 양이었으나, 탄소 흐름에서도 종자정 위치가 낮아질수록 도가니 바닥으로 향하는 흐름이 점점 감소하고 종자정 근처로 이동하는 양이 많아지는 것을 볼 수 있었고 이로 인해 평균 성장률이 상당히 증가하는 것을 확인하였다.

4. 결 론

본 연구에서는 수치적 시뮬레이션을 이용하여 실제 SiC 용액 성장에 있어서 여러 변수들이 용액내부의 탄소 용해도와 유체흐름 등에 어떠한 영향을 미치는가에 대해 알아보았다. 성장 온도가 높아짐에 따라 도가니 벽에서의 탄소 용해도가 증가함으로써 Si 용액 내부에 더 많은 탄소가 함유하게 되어 성장률이 상당히 증가하는 것을 확인하였다. 종자정축과 도가니축을 회전시킬 때는 회전시키지 않았을 때보다 용액 내부에 더 많은 대류를 일으키게 하고 이로 인해 전체적인 온도 구배를 더 균일하게 형성시켜 주며 탄소농도의 흐름과 용액 흐름이 향상되었다. 공정 시 종자정을 용액 내부로 담궈서 성장시킴으로써 종자정 부근에서의 성장 분위기가 더 안정적으로 이루어지는 것을 확인하였다. 이로써 위의 시뮬레이션 결

과를 바탕으로 향후에 진행될 실제 SiC 용액성장에서 큰 도움이 될 것이라 기대된다.

감사의 글

이 논문은 2016학년도 동의대학교 연구년 지원 및 산업통상자원부 전략적 핵심소재 개발사업(과제번호; 10062272)에 의해 이루어졌습니다.

References

- [1] I.D. Matukov, D.S. Kalinin, M.V. Bogdanov, S.Yu. Karpov and D.Kh. Ofengeim, "Modeling of facet formation in SiC bulk crystal growth", *J. Crystal Growth* 266 (2004) 313.
- [2] Yu.M. Tairov and V.F. Tsvetkov, "General principles of growing large-size single crystals of various silicon carbide polytypes", *J. Crystal Growth* 52 (1981) 146.
- [3] Y. Chen, "Studies of the distribution of elementary threading screw dislocations in 4H silicon carbide wafer", *Mater. Sci. Forum* 600-603 (2009) 301.
- [4] K. Kamei, K. Kusunoki, N. Yashiro, N. Okada and K. Moriguchi, "Crystallinity evaluation of 4H-SiC single crystal grown by solution growth technique using Si-Ti-C solution", *Mater. Sci. Forum* 717-720 (2012) 45.
- [5] K. Kusunoki, K. Kamei, N. Okada, K. Moriguchi and H. Kaido, "Top-seeded solution growth of 3 inch diameter 4H-SiC bulk crystal using metal solvents", *Mater. Sci. Forum* 778-780 (2014) 79.
- [6] F. Mercier and S.-I. Nishizawa, "Solution growth of SiC from silicon melts: influence of the alternative magnetic field on fluid dynamics", *J. Crystal Growth* 318 (2011) 385.
- [7] K. Fujii, "Influences of solution flow and lateral temperature distribution on surface morphology in solution growth of SiC", *Mater. Sci. Forum* 821-823 (2015) 35.