

캐스팅법에 의한 태양전지용 다결정 규소 박판의 제조(I) — 규소 캐스팅의 Thermal 모델링 —

문상진 · 소원욱 · 윤 풍

한국화학연구소 화학공학부
(1989년 5월 25일 접수, 1989년 8월 7일 채택)

The Casting Method for Producing Solar-Grade Polycrystalline Silicon Wafer(I) — Thermal Modeling of Silicon Casting —

Sang-Jin Moon, Won-Wook So, and Poong Yoon

Div. of Chem. Eng., Korea Research Institute of Chemical Technology, Dae-Jeon 302-343, Korea
(Received 25 May 1989; accepted 7 August 1989)

요 약

캐스팅법을 이용하여 고효율 태양전지용 다결정 규소 박판을 제조하였다. 이때 요구되는 규소 ingot의 결정 형태나 크기들이 캐스팅 장치의 geometry나 운전조건, 즉 도가니의 두께, 냉각기의 크기, 냉각속도나 도가니 벽면의 온도 분포들에 의해 어떠한 영향을 받는지가 적절한 수학적 모델링과 수치 모사에 의해 연구되었다. 도가니의 옆 벽면은 두꺼울수록, 밑면은 얇을수록 주상구조의 결정 성장에 유리한 것으로 예측되었다. 또한 캐스팅시 도가니 상부의 온도는 옆면보다 높게 유지해야 하며, 응고가 진행됨에 따라 온도 하강속도를 점차 낮추는 것이 바람직한 것으로 나타났다.

Abstract—Polycrystalline silicon wafers for high efficiency solar cells were produced using the casting method. Mathematical modeling and numerical computations were made to investigate the effects of geometric parameters and thermal parameters of the casting equipment, that is, the wall thickness of the crucible, the cooler diameter, the cooling rate, and wall temperatures of the crucible on the crystalline structure and size of the silicon ingot. The growth of polycrystalline with the columnar structure and large grain size was predicted to be favored by the following conditions of parameters; i) making the side wall of crucible as thick as possible and the bottom as thin as possible, ii) keeping the higher temperature profile in the top compared to the side wall of the crucible and lowering the cooling rate as the solidification proceeds.

1. 서 론

주요 대체 에너지원으로서의 태양전지의 사용은 최근 들어 상업적 태양광 발전의 수준에까지 이르고 있다. 그러나 이 에너지를 보다 경쟁력있는 것으로 발전시키기 위해서는 태양전지의 제조원가를 지속적으로 낮추

는 것이 요구되며, 이는 직접적으로 태양전지용 규소 박판의 제조비용을 낮추는 문제와 직결되어 있다. 종래의 Czochralski 인상법 등에 의한 단결정 규소 박판은 고효율에도 불구하고 낮은 생산성 및 생산기술의 난이성으로 인해 제조원가가 높아[1], 이를 대신하여 개발된 저가격 박판 제조법 중의 하나가 캐스팅법이다.

일반적으로 캐스팅법에서는 석영이나 흑연으로 제조된 도가니 속에 다결정 규소를 넣어 용융시킨 후, 설정된 방향으로 응고를 시켜나감으로써 결정 성장방향이 일정한 이른바 주상구조의 다결정 ingot를 얻고자 시도하고 있다. 보통 도가니의 옆면에 전기로를 설치하여 용융시킨 후 밀면을 통하여 열을 제거해줌으로써 도가니의 밀면 중심으로부터 위로, 방향성 응고를 진행시킨다. 따라서 실제의 열전달 방향은 이상적인 경우의 도가니 축방향으로 뿐만 아니라[2], 반경 방향으로도 진행됨으로써 제조된 ingot의 결정 특성은 응고시의 규소 고-액 계면의 모양과 그 계면에서의 온도구배 등에 의해 결정지워지게 된다. 이들은 도가니의 두께, 밀면 냉각기의 형태와 방식, 단열 특성과 같은 장치 자체의 geometric parameter와 냉각기나 전기로의 냉각, 가열속도, 온도변화와 같은 thermal parameter들에 의해 영향을 받을 것으로 생각되며, grain size가 크고 주상구조가 잘 발달된 ingot를 얻기 위해서는 장치 설계시부터 geometric parameter들이 잘 설정되어야 하며 또한 운전시 냉각속도 및 방식을 최적화하여야 한다고 생각된다.

본 연구에서는 다결정 태양전지의 효율에 영향을 미치는 규소 박판의 몇 가지 물성 중, 결정크기나 구조가 캐스팅시 도가니 내부의 열적 특성에 의해 어떠한 영향을 받게 되는지를 수학적 모델링을 통하여 미리 예측코자 시도하였다. 즉, 상기의 geometric/thermal parameter들의 변화에 따른 고-액 계면의 모양과 온도 구배들을 미리 살펴봄으로써 캐스팅 장치의 설계 및 운전 방법들의 기초 자료로 삼고자 하였다. 실제로 규소 캐스팅은 비정상 상태하에서의 운전으로 전기로에서의 공급 전류의 감소와 함께 연속적으로 고-액 계면의 위치가 변하게 된다. 그러나 본 연구에서는 정상상태하에서의 모델링을 시도하였는데 이는, geometric parameter들은 장치 설계시 미리 설정되어 운전조건과는 무관하게 고-액 계면에 영향을 미치고, 냉각속도 또한 아주 느려(0.5-2°C/min) 비정상 상태하에서의 해와 큰 차이를 보이지 않으며, 비정상 상태의 모델링에 비해 훨씬 짧은 시간안에 해를 구할 수 있기 때문이었다.

2. 수학적 모델링

수학적 모델링을 위해 다음 Fig.1과 같이 장치를 간략화하였다. 원통형대로 제작된 도가니의 내면은 Si_3N_4 와 같은 얇은 다공성의 보호막으로 칠해져 있어 도

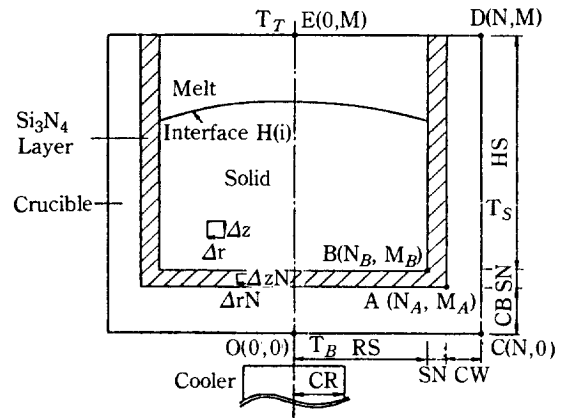


Fig. 1. Schematic diagram for the crucible and ingot.

가니와 ingot의 보호 및 분리를 용이하게 해준다. 도가니는 원통형 전기로에 둘러 쌓여 있어 전기로의 공급 전류에 따라 벽면온도, T_s 를 일정하게 유지한다고 생각한다. 또한 도가니의 윗면은 단열재로 쌓여 있어 온도 T_T 를 유지하며, 밀면은 냉각기의 직경, 도가니와의 거리, 냉각수 양 등의 변화에 의해 온도 T_B 를 유지한다고 생각한다. 따라서 이들 온도는 축방향이나 반경방향의 위치에 따라 일정한 분포를 유지할 것으로 생각된다. 원통형이기 때문에 중심의 수직축을 따라 대칭으로 생각하여 그림과 같이 한 단면의 반쪽면에 대하여 모델링을 시도하였다. 이때 도입된 기본 가정은 다음과 같다.

- i) 정상상태
- ii) Ingot 및 도가니, Si_3N_4 층 내부에서의 열전달은 전도에 의해서만 이루어진다(규소 액상 내에서의 대류 배제).
- iii) Ingot 고-액 계면[H(i)]의 온도는 규소의 용융온도($T_m=1420^\circ\text{C}$)와 동일하다.
- iv) Ingot, Si_3N_4 층, 도가니 사이의 계면은 연속적인 온도분포를 유지한다(계면에서의 불연속성 배제).
- v) Ingot 고상, 액상, 도가니, Si_3N_4 의 각 상은 주어진 온도변화 범위(최고 $1300-1500^\circ\text{C}$ 사이)에서 일정한 열전도도 값을 유지한다.
- vi) 축방향으로 대칭이다.

수치모사에 이용된 Fig.1의 각 dimension의 범위 및 물성치값들은 다음 Table 1과 같다.

단면 각 위치에서의 온도분포를 보기 위해 전체 단면을 수개의 grid point로 나누었다. 컴퓨터의 run time

Table 1. Dimensions and physical properties of the system

	Notation	Range or Value
Side wall thickness of the crucible(mm)	CW	4-24
Bottom wall thickness of the crucible(mm)	CB	5-25
Si ₃ N ₄ layer (mm)	SN	0.3-1.5
Cooler radius(mm)	CR	3-37
Height of silicon ingot(mm)	HS	30
Radius of silicon ingot(mm)	RS	28
Thermal conductivity (cal/mm·sec·°k)		
Silicon solid	k _s	0.008
Silicon liquid	k _r	0.016
Graphite crucible	k _{cr}	0.005
Si ₃ N ₄ layer	k _N	0.001

과 각 층의 두께를 고려하여 grid의 크기를 변화시킬 수 있도록 하였다. Ingot와 도가니의 축방향(z 방향) grid를 Δz, 반경방향(r 방향)grid를 Δr, Si₃N₄ 층의 축방향 grid는 ΔzN, 반경방향 grid는 ΔrN으로 크기를 정하면 그림에서 각 주요 point의 좌표는 다음과 같이 설정된다.

$$\begin{aligned} MA &= CB/\Delta z & NB &= RS/\Delta r \\ MB &= MA + B/\Delta zN & NA &= NB + B/\Delta rN \\ M &= MB + HS/\Delta z & N &= NA + CW/\Delta r \end{aligned}$$

열수지 방정식에 의하여 다음과 같이 지배 방정식과 경계조건을 설정할 수 있다.

지배방정식 :

$$\left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r}\right) + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = 0 \quad (1)$$

중심축 경계조건 :

$$\frac{dT}{dr} = 0 \quad \text{for } r=0, 0 \leq z \leq (HS + SN + CB) \quad (2)$$

두상의 계면에서의 경계조건 :

$$k_s \frac{dT}{dz} = k_{cr} \frac{dT}{dz} \quad \text{for } z=CB, 0 \leq r \leq (RS + SN) \quad (3)$$

$$k_{st} \frac{dT}{dz} = k_s \frac{dT}{dz} \quad \text{for } z=(CB+SN), 0 \leq r \leq RS \quad (4)$$

$$k_{st} = k_s \quad \text{for } H(i) > (CB+SN)$$

$$k_{st} = k_L \quad \text{for } H(i) \leq (CB+SN)$$

$$k_s \frac{dT}{dr} = k_{cr} \frac{dT}{dr} \quad \text{for } r=(RS+SN),$$

$$CB \leq z \leq (CB+SN+HS) \quad (5)$$

$$k_s \frac{dT}{dr} = k_{st} \frac{dT}{dr} \quad \text{for } r=RS,$$

$$(CB+SN) \leq z \leq (CB+SN+HS) \quad (6)$$

$$k_{st} = k_s \quad \text{for } z \leq H(NB)$$

$$k_{st} = k_L \quad \text{for } z > H(NB)$$

고-액 계면조건 ($T=T_m$) :

$$k_s \frac{dT}{dz} \Big|_s = k_L \frac{dT}{dz} \Big|_L \quad \text{for } z=H(r), 0 \leq r \leq RS \quad (7)$$

3. 수치해석적 해

2nd Order Finite Difference Approximation을 적용하여 식 (1)의 해를 수치해석적인 방법에 의하여 구하였다[3]. 따라서 식 (1)은

$$\begin{aligned} & \left(\frac{T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j}}{(\Delta r)^2} + \frac{1}{i(\Delta r)} \cdot \frac{T_{i+1,j} - T_{i-1,j}}{2(\Delta r)} \right) \\ & + \left(\frac{T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1}}{(\Delta z)^2} \right) = 0 \\ \therefore T_{i,j} &= \frac{(1 + \frac{1}{2i})T_{i+1,j} + (1 - \frac{1}{2i})T_{i-1,j} + \gamma(T_{i,j+1} + T_{i,j-1})}{2(1 + \gamma)} \end{aligned} \quad (8)$$

[여기서 $\gamma = (\Delta r/\Delta z)^2$]

식 (2)는

$$\frac{dT}{dr} \Big|_{o,j} = 0$$

Taylor's expansion으로부터[4]

$$T_{1,j} = T_{o,j} + \left(\frac{\partial T}{\partial r}\right) \Big|_{o,j} (\Delta r) + \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2}\right) \Big|_{o,j} \frac{(\Delta r)^2}{2}$$

$$\therefore \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2}\right) \Big|_{o,j} = \frac{2}{(\Delta r)^2} [T_{1,j} - T_{o,j}]$$

식 (1)과 함께

$$\frac{2}{(\Delta r)^2} (T_{1,j} - T_{o,j}) + \frac{1}{(\Delta z)^2} [T_{o,j+1} - 2T_{o,j} + T_{o,j-1}] = 0$$

$$\therefore T_{o,j} = (\gamma \cdot T_{o,j+1} + \gamma T_{o,j-1} + 2T_{1,j}) / 2(1 + \gamma) \quad (9)$$

식 (3)은

$$k_s \frac{T_{i,j+1} - T_{i,j}}{\Delta zN} = k_{cr} \frac{T_{i,j} - T_{i,j-1}}{\Delta z}$$

$$\therefore T_{i,j} = \frac{(k_s/\Delta zN)T_{i,j+1} + (k_{cr}/\Delta z)T_{i,j-1}}{(k_s/\Delta zN + k_{cr}/\Delta z)} \quad (10)$$

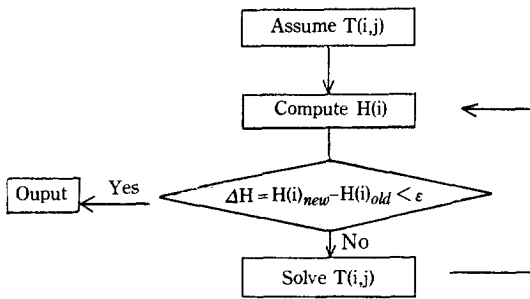


Fig. 2. Flow diagram for numerical computation of temperature profile.

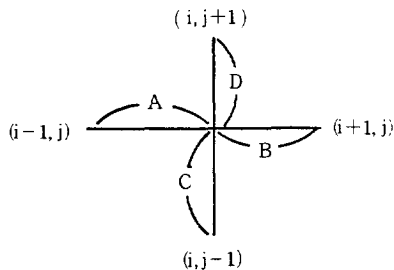
식 (4)-(6)도 식 (10)과 각각 동등한 형태로 나타낼 수 있다. 식 (7)의 고-액 계면은 반경방향의 grid를 무수히 잘게 나누었을 때 축방향 grid point 사이에서 보다 정확히 T_m 이 되는 point를 찾기 위한 것으로 그 위치는 다음과 같이 구해진다.

$$k_s \frac{dT}{dz} \Big|_s = k_L \frac{dT}{dz} \Big|_L$$

$$\therefore k_s \frac{T_m - T_{i,j}}{X_j} = k_L \frac{T_{i,j+1} - T_m}{(\Delta z - X_j)}$$

$$X_j = \frac{k_s (T_m - T_{i,j}) \Delta z}{k_L (T_{i,j+1} - T_m) + k_s (T_m - T_{i,j})} \quad (11)$$

모서리에 위치하는 point A, B는 주변 grid point의 평균으로부터 구해졌다.



$$T_{i,j} = \frac{(AT_{i+1,j} + BT_{i-1,j})}{(A+B)} \frac{(C+D)}{(A+B) + (C+D)} + \frac{(DT_{i,j-1} + CT_{i,j+1})}{(C+D)} \frac{(A+B)}{(A+B) + (C+D)} \quad (12)$$

다음 Fig.2는 도가니 위, 아래, 옆면의 온도분포가

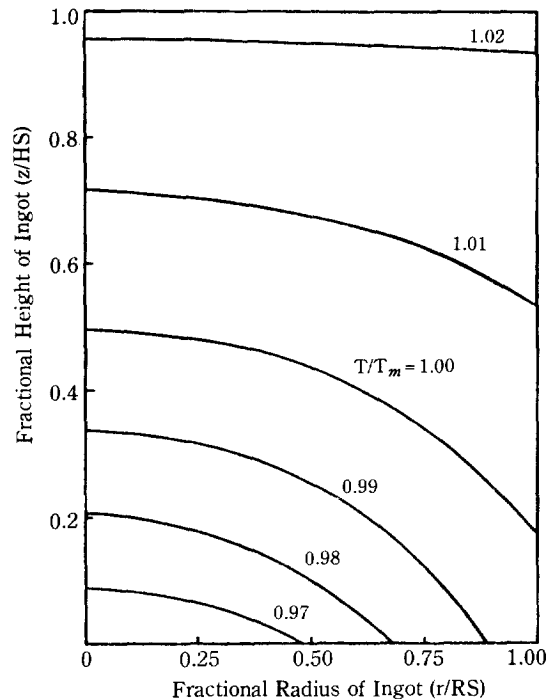


Fig. 3. Isotherms within the region of ingot.

$T_S = T_T = 1450^\circ\text{C}$, $T_B = 1150^\circ\text{C}$, $CW = 8$, $CB = 15$, $SN = 0.3$, $CR = 7$, $HS = 30$, $RS = 28$ (mm)

주어질 때 내면의 온도분포와 계면의 위치를 결정하기 위한 algorithm을 보여준다. 얻어진 온도분포로부터 계면의 위치 $H(i)$ 를 계산하여 계면의 위치가 주어진 오차값 이하로 수렴할 때의 값을 그 해라 하였다.

식 (8)-(12)에서 $T(i, j)$ 는 각기 implicit form으로 주어지므로 Gauss-Seidal iteration method에 의해 구하였다[5].

4. 결과 및 고찰

다음 Fig.3은 주어진 한 경계 조건하에서의 ingot 내부의 온도분포를 보여주고 있다. 이때 도가니 윗면과 옆면의 온도(각각 T_T , T_S)는 위치에 관계없이 주어진 온도로 일정하게 유지된다고 가정하였다. 도가니 밑면은 중앙으로부터 냉각기의 반경(CR)에 해당하는 간극은 일정온도 T_B 로 유지되며 나머지는 벽면에 이르기까지 T_B 에서 T_S 까지 연속적으로 변한다고 생각하였다(이하에서도 Fig.10과 같이 특별한 언급이 없는 경우를 제외하고는 모두 동일하게 가정하였다). Isotherm의 형태는 ingot 밑면의 중앙을 중심으로 약간 불룩한

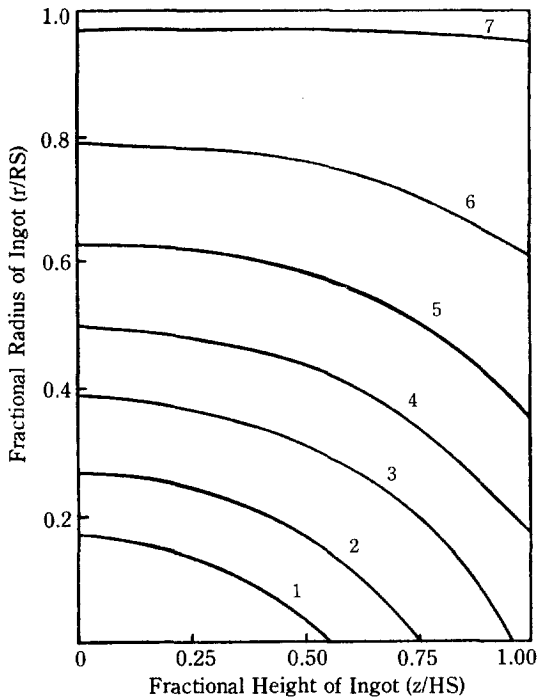


Fig. 4. Variation of interface position with lowering the temperature.

	T_T/T_S (°C)	T_B (°C)
1	1480	1180
2	1470	1170
3	1460	1160
4	1450	1150
4	1450	1150
5	1440	1140
6	1430	1130
7	1421	1121

형태를 보여주며 위로 갈수록 그 정도는 서서히 감소함을 나타내고 있다. 또한 $T/T_m=1.0$ 인 고-액 계면(interface)을 경계로, 위의 액상 규소는 아랫쪽의 고상에 비해 넓은 폭의 isotherm을 보여주는 데 이는 액상의 열전도도 값이 고상에 비해 두배 이상 큰 데 기인하는 것으로 생각된다.

Fig. 4는 전기로의 공급전력이 감소함에 따라 도가니 각 벽면의 온도가 일정하게 하강한다고 가정했을 경우, 계면의 변화추이를 보여주고 있다. 축방향의 방향성 응고에 의한 주상구조의 효과적인 발달을 위해서는 계면의 형태가 단순하고 평평한 것이 바람직하며, 또한 계면에서의 온도구배는 클수록 유리하다고 알려져 있다. 따라서 방향성 응고를 결정짓는 요소로서 계면의 굴곡율(curvature)과 그 계면에서의 온도구배(temperature gradient) 두 가지 요소를 고려하였다. 계면의 굴

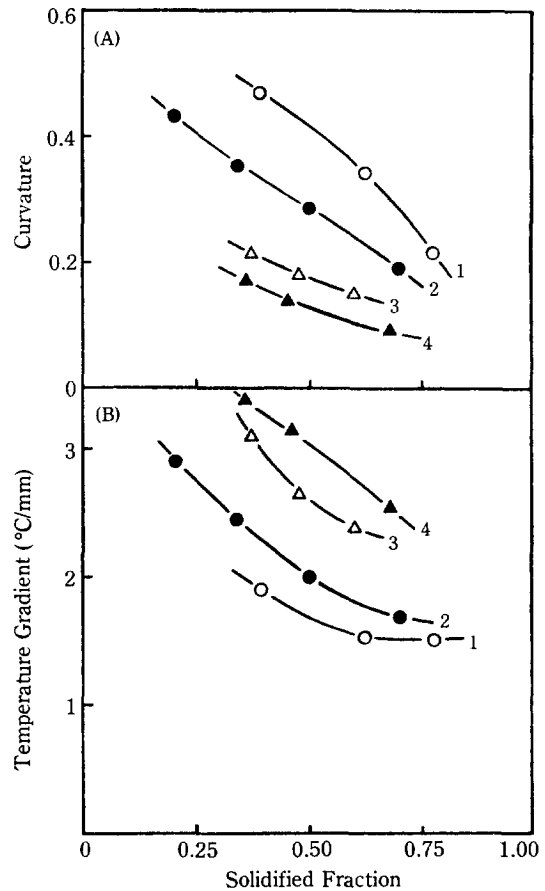


Fig. 5. Effect of crucible wall thickness (CW) on (A) the curvature of interface and (B) the maximum temperature gradient at the interface.

CB = 15, SN = 0.3, CR = 7(mm) CW; 1:4, 2:8, 3:16, 4:24(mm)

곡율은 도가니 중앙과 벽면에서의 계면의 높이차를 ingot의 반경으로 나눈 값으로 정의하였는데, 0에 가까울수록 평평한 형태를 띄게 됨을 알 수 있다. 굴곡율이 너무 큰 경우, 과도한 thermal stress가 형성되거나 주상구조의 발달에 바람직하지 못하지만, 어느 정도의 굴곡율은 grain의 성장에 긍정적인 영향을 미친다고 알려져 있다[6]. Ingot 내의 온도 분포가 아주 복잡한 경우, 국부적으로 음의 굴곡율이 형성될 수 있는데, 이는 grain의 크기를 미세하게 하고 주상구조의 형성을 불리하게 함으로 가능한 한 피해야 한다. 계면에서의 온도구배는 대체로 ingot 중앙에서 최대값을 나타내어 도가니 벽면쪽으로 갈수록 감소함을 보여준다(여기서는 ingot 중앙에서의 계면 온도구배를 비교값으

로 선택하였다). 온도구배는 너무 커서 과도한 thermal stress가 형성되지 않을 정도이면 큰 것이 나은데, 너무 낮은 온도구배는 interface breakdown 현상을 유발시킨다고 알려져 있다[7]. Fig. 4에서는 응고가 진행됨에 따라 굴곡율이 감소함을 보여주고 있는데, ingot의 아랫부분 보다는 상부쪽에서 더 나은 구조가 형성될 것임을 예견할 수 있다.

4-1. Geometric Parameter

본 규소 캐스팅에 있어서는 도가니 벽면과 밀면의 두께, Si_3N_4 층의 두께, 그리고 냉각기의 반경 등 4가지 요소가 geometric parameter로서 고려되었다.

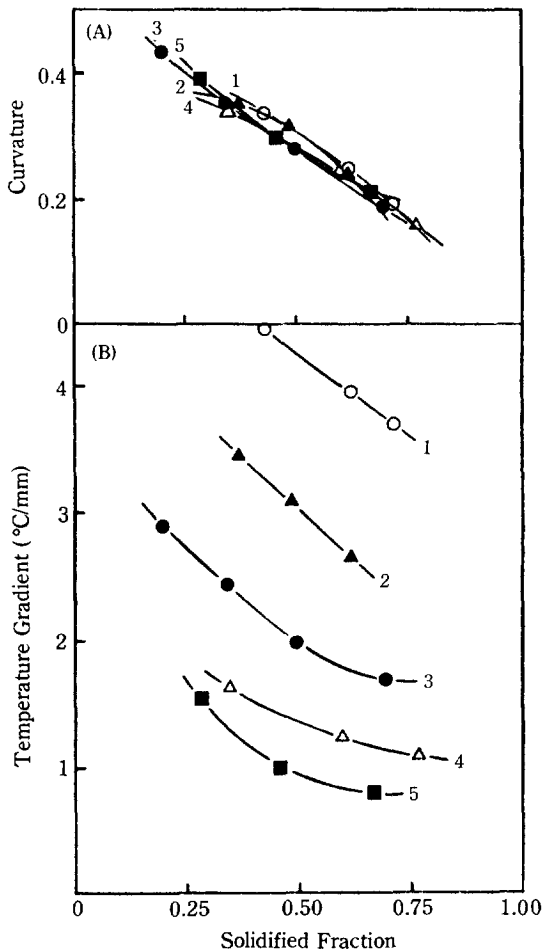


Fig. 6. Effect of crucible bottom thickness(CB) on(A) the curvature of interface and(B) the maximum temperature gradient at the interface. CW=8, SN=0.3, CR=7(mm), CB; 1:5, 2:10, 3:15, 4:20, 5:25(mm)

Fig. 5는 도가니 벽면의 두께 변화에 따른 효과를 보여주고 있는데, 두꺼울수록 낮은 굴곡율과 큰 온도구배를 나타내어 바람직함을 보여주고 있다. 그러나 벽면이 너무 두꺼우면 초기 용융시 높은 온도까지 온도를 올려야 하기 때문에 전력비를 고려하여 최적의 두께를 선택해야 할 것으로 생각된다.

Fig. 6은 도가니 밀면의 두께변화에 따른 효과인데, 얇을수록 큰 온도구배를 보여주어 유리함을 알 수 있다. 그러나 굴곡율면에서는 별 차이를 나타내지 않아 도가니 두께에 비해 그 영향이 크지 않음을 알 수 있다. Fig. 7은 ingot의 제조 후 도가니와의 분리를 위해 도가니 내면에 칠해지는 Si_3N_4 층의 두께효과를 보여주고 있다. 전체적인 영향은 그리 크지 않으며, 실제 운전시 두세번의 반복사용으로 점차 얇아져도 계면의 발달에는 그리 큰 영향을 미치지 않음을 예견할 수 있다. 두께가 얇아짐에 따라 굴곡율은 약하게 저하되나 온도구배는 오히려 나아진다. 참고로 본 simulation

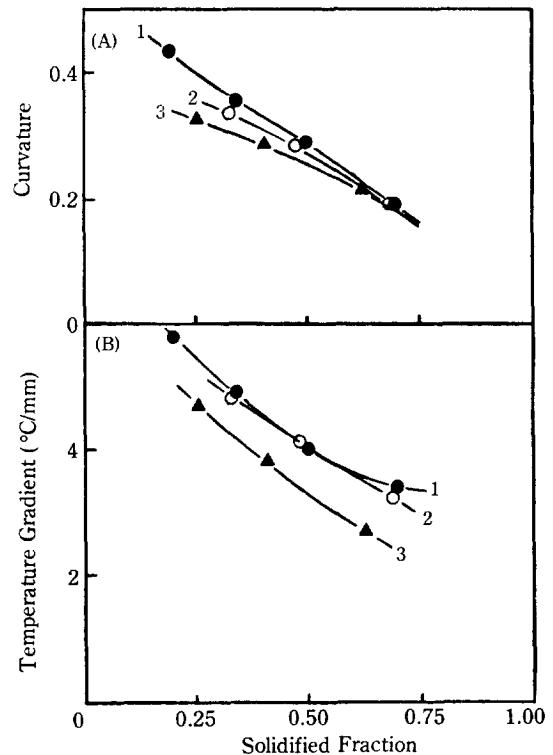


Fig. 7. Effect of Si_3N_4 layer thickness(SN) on(A) the curvature of interface and(B) the maximum temperature gradient at the interface. CB=15, CW=8, CR=7 (mm), SN; 1:0.3, 2:0.6, 3:1.5(mm)

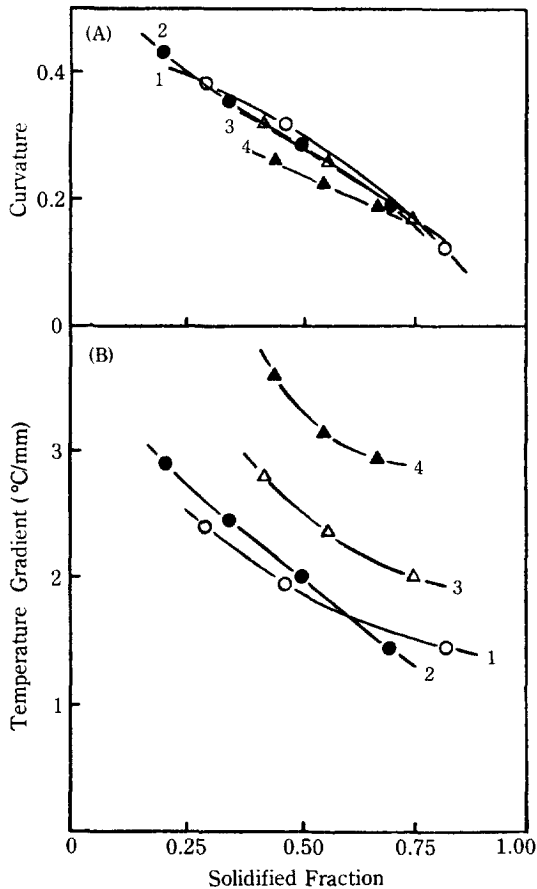


Fig. 8. Effect of cooler radius(CR) on(A) the curvature and (B) the maximum temperature gradient at the interface.
 CB=15, CW=8, SN=0.3(mm), CR; 1:3, 2:7, 3:14, 4:37(mm)

에 사용한 Si_3N_4 층의 열전도도 값은 도가니의 그것에 비해 0.2배 정도의 값이었다.

Fig.8에서는 냉각을 위해 도가니 아래에 설치된 냉각기의 반경을 키움으로써 도가니 밑면에서의 반경방향 온도구배를 제거해 나가도 계면의 굴곡율은 썩 나이지 않음을 볼 수 있다. 그러나 그 계면에서의 온도구배는 점차 증가함을 알 수 있다.

4-2. Thermal Parameter

방향성 응고의 운전계획을 잡는 데 있어 우선 고려해야 할 것은 도가니내의 규소를 완전히 용융시키기 위해 최대를 올려야 할 온도값이다. 장치의 구조상 도가니 밑면 중심에서의 온도가 제일 낮으므로 ingot 밑면 중심에서의 온도가 규소 용융점(1420°C) 이상 올라가

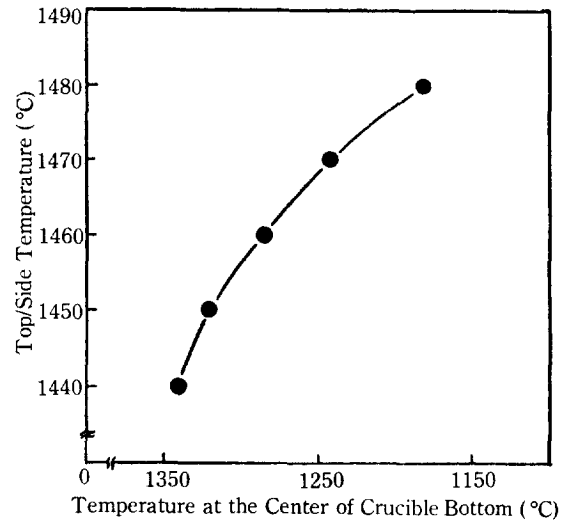


Fig. 9. Variation of bottom temperature for complete melting of silicon with top and side wall temperatures of the crucible.
 CB=15, CW=8, SN=0.3 (mm)

도록 도가니 벽면의 온도들이 설정되어야 할 것이다. 다음 Fig.9는 한 예로서 주어진 장치의 구조적인 조건 하에서 도가니 윗면과 옆면의 온도를 동일하게 설정하였을 때 유지해줘야 할 최소 도가니 밑면의 온도값을 보여준다. 도가니 위/옆면의 최대 유지 온도를 낮게 잡을수록 밑면과의 온도차이는 적어져야 함을 보여주고 있다. 본 도가니 조건의 경우, 위/옆면의 온도가 1480°C 이면 밑면은 1180°C 까지 유지해줘도 완전 용융이 가능하다($\Delta T=300^\circ\text{C}$), 위/옆면의 온도를 1440°C 까지만 높일려면 밑면은 1340°C 까지 유지해줘야 함을 볼 수 있다($\Delta T=100^\circ\text{C}$). 최대 온도를 낮게 유지하면 운전 비용면에서는 유리할 것이나 밑면과의 온도차이를 줄여야 하므로 운전폭이 좁아질 뿐더러 ingot 내 온도 구배가 낮게 형성되어 결정의 성장에는 불리할 것으로 생각된다.

Fig.10은 규소 캐스팅시, 도가니 윗면과 옆면의 온도를 어떤 scheme으로 유지해줘야 할지를 보여주고 있다. 그림의 case 1부터 case 4까지는 도가니 각면의 온도가 위치에 따른 변화없이 주어진 값으로 일정하게 유지된다고 가정하고 얻은 분포이다. 옆면에 비해 윗면의 온도가 높을수록 유리하며 또한 그 차이가 클수록 더 나아짐을 볼 수 있다(case $2 < 1 < 3 < 4$). Case 5에서 case 7까지는 윗면과 밑면의 온도를 주어진 값으로 고정하고 옆면의 온도가 위치에 따라 변할 때의 효과를 비교한 것이다. Case 5는 옆면 맨 위에서 주어진

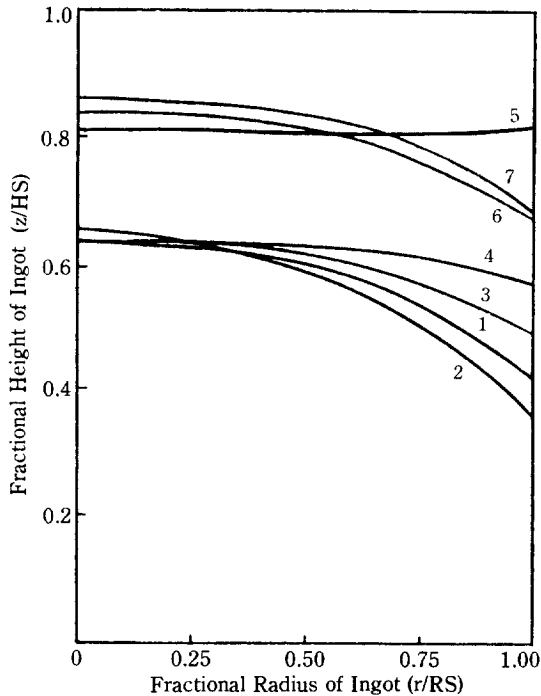


Fig. 10. Effect of top and side temperatures on the interface shape.

$T_B = 1150^\circ\text{C}$, $CB = 15$, $CW = 8$, $SN = 0.3$,
 $HS = 30$, $RS = 28$ (mm)

Case	$T_T(^{\circ}\text{C})$	$T_S(^{\circ}\text{C})$	Curvature	Max. temp. grad. ($^{\circ}\text{C}/\text{min}$)
1	1450	1450	0.227	1.6
2	1440	1460	0.309	1.3
3	1460	1440	0.148	1.8
4	1470	1430	0.061	2.0
5	1450	1450	-0.017	2.7
6	1430	1450	0.181	1.2
7	1430	1450	0.183	1.3

값으로 최대를 보이며 아래로 감에 따라 밀면 온도까지 선형적으로 감소함을 가정하고 얻은 분포이며, case 6은 맨 아래가 최대, case 7은 옆면 중앙이 최대라고 가정하고 얻은 분포이다. 역시 왼쪽을 높게 유지함이 유리함을 볼 수 있다(case $6 < 7 < 5$). 이같은 결과들은 방향성 응고의 특성상 굴곡율면에서는 예견되는 바이나, 그 온도구배 면에서도 일치되는 경향을 보이는 것은 특기할만 하다.

Fig. 11은 도가니 윗면과 옆면의 온도를 동일하게 유지하면서 초기 용융온도(1470°C)부터 일정하게 냉각시켜 나갈 때의 효과를 보여주고 있다. Case 1은 도가니

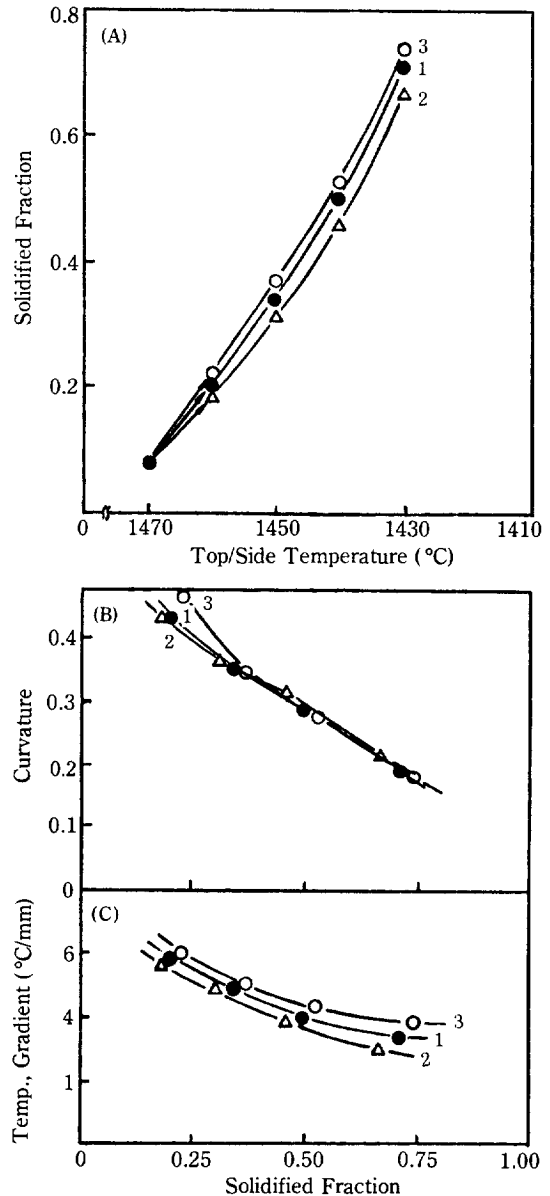


Fig. 11. Effect of cooling rate on (A) the solidified fraction, (B) the curvature of interface, and (C) the maximum temperature gradient at the interface.

Case 1: $\Delta T = 300^\circ\text{C}$

Case 2: $\Delta T = 300 \rightarrow 260^\circ\text{C}$

Case 3: $\Delta T = 300 \rightarrow 340^\circ\text{C}$

밀면의 온도를 위/옆면 보다 일정한 값($\Delta T = 300^\circ\text{C}$)만 큼 낮게 유지하면서 냉각할 때이고, case 2는 냉각수량 등의 감소에 의해 점차 그 온도차이를 감소시켜 나갈 때이며($\Delta T = 300 \rightarrow 260^\circ\text{C}$), case 3은 거꾸로 그 온

도차이를 증대시켜가며 냉각할 때의 변화를 보여주고 있다($\Delta T=300 \rightarrow 340^\circ\text{C}$). 그림 (A)에서 냉각속도가 증대됨에 따라 같은 도가니 온도에서 응고율이 증대되는 것은 예견되는 바이나(case 2 $<1<3$), 전체적으로 볼 때 응고개시부터 끝까지 일정속도로 도가니 벽면의 온도를 낮추는 것은 바람직하지 못함을 보여준다. 즉, 응고 초기에 비해 말기에 이룰수록 단위온도 감소당 응고율이 크게 증가함으로 보여주며(case 2: $0.011/^\circ\text{C} \rightarrow 0.021/^\circ\text{C}$), 일정한 속도로 응고를 진행시키기 위해서는 점차 벽면온도 하강속도를 감소시켜야 함을 나타낸다. 다른 한 방법으로서 도가니 위/옆면의 온도는 일정하게 감소시키면서 냉각기의 냉각속도를 감소시키는 방법(case 2)을 고려할 수 있는 데, 그림 (A)에서 보는 바와 같이 응고율의 감소는 가져오나, 계면 굴곡율(그림 B)에는 별 영향을 미치지 못하며, 온도구배(그림 C)면에서는 오히려 부정적인 영향을 미침을 보여준다.

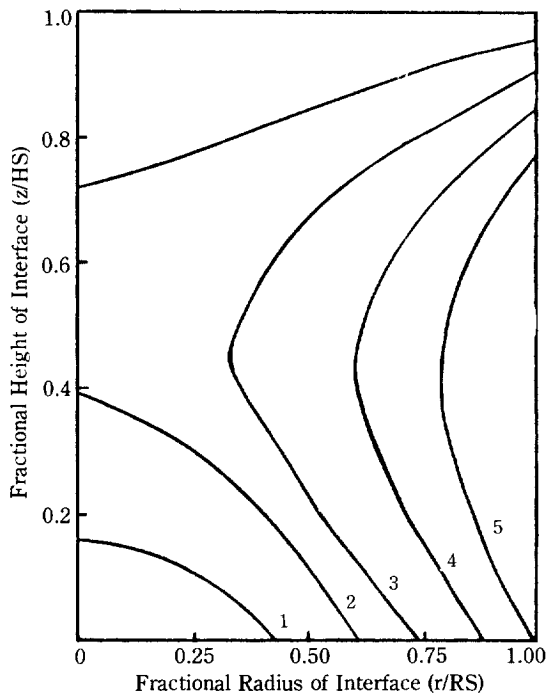


Fig. 12. Variation of interface with the top super-cooling.

CB = 15, CW = 8, SN = 0.3, HS = 30, RS = 28(mm)

	$T_T(^{\circ}\text{C})$	$T_S(^{\circ}\text{C})$	$T_B(^{\circ}\text{C})$
1	1420	1495	1345
2	1415	1490	1340
3	1410	1485	1335
4	1405	1480	1330
5	1400	1475	1325

따라서 캐스팅시 바람직한 운전방향은 응고가 진행됨에 따라 벽면온도의 하강속도는 점차 줄여나가되 냉각기의 냉각속도는 같은 비율 이상으로 늘려가는 것이라고 생각된다.

Fig. 12는 Fig. 10과 11의 운전계획과 관련하여 도가니 상부의 온도가 옆면의 온도보다 낮을 경우, 즉 방향성 응고의 기본 scheme에 위배되게 도가니 하부와 상부에서 동시에 응고가 진행될 때의 계면의 진행과정을 보여준다. 이런 조건은 실제 운전시 상부 단열의 미비, 전기로 설치의 미숙 등으로 발생할 수가 있는 데, 응고시 규소의 부피 팽창에 기인하는 상부돌출현상과 심한 경우 도가니의 균열 등을 유발시키게 된다. 또한 생성된 ingot도 전반적으로 주상구조와는 거리가 멀게 된다.

5. 결 론

이상으로부터 얻어진 결론을 요약하면 다음과 같다.

1. 도가니의 옆면은 두꺼울수록, 밑면은 얇을수록 결정의 성장에 유리하다.
2. 냉각기의 반경은 클수록 유리하며, Si_3N_4 층의 두께는 큰 영향을 미치지 못한다.
3. 운전은 도가니 상부의 온도를 옆면보다 가능한 한 높게 유지하는 것이 바람직하며, 최소한 옆면의 온도 이상으로 유지해야 한다.
4. 응고가 진행됨에 따라 온도 하강속도를 점차 낮추는 것이 바람직하다.

REFERENCES

1. 浜川圭弘: 化學工學, 49(8), 616(1985).
2. Scafe, E., Parretta, A., Di Rose, L., Adoncccchi, V., Margadonna, D., and Paraggio, V.: Proc. 7th E.C. Photovoltaic Solar Energy Conf., 966 (1985).
3. Ames, W.F.: "Numerical Methods for Partial Differential Equations", 2nd ed., Academic Press, New York, (1977).
4. Carnahan, B., Luther, H.A., and Wilkes, J.O.: "Applied Numerical Methods", John Wiley, New York, (1969).
5. Finlayson, B.A.: "Nonlinear Analysis in Chemical Engineering", McGraw-Hill, New York, (1980).
6. Brice, J.C.: "The Growth of Crystals from the Melt", North-Holland, Amsterdam, (1965).
7. Rajendran, S. and Wilcox, W.R.: J. Crystal Growth, 69, 62 (1984).