PVT 공정에서의 희박기체 유동 CFD 모사

송현섭, 임예훈, 한상필
㈜LG 화학 기술연구원 공정기술센타

CFD Simulation of Rarefied Gas Flows in Physical Vapor Transport (PVT)

Hyun-Seob Song, Ye Hoon Im, and Sang Phil Han
Process Technology Research & Development
LG Chem / Research Park

서론

Physical Vapor Transport (PVT)는 시료의 기화, 대류 및 확산, 증착 과정을 통해 기체로부터 고체 결정을 성장시키는 방법이다. 일반적인 장치 구성은, 수평 또는 수직 관의 길이 방향을 따라 온도 구배를 형성시킴으로써 고온부에서는 시료의 기화가, 저온부에서는 증착을 통한 고체의 재석출이 일어나도록 꾸며져 있다. PVT 관은 closed 또는 open ampoule 을 사용하는데, 후자의 경우 비활성 운반기체의 관내 유입을 통해 시료의 축방향 이동을 용이하게 하고, 불순물과의 분리를 증진시켜 결정의 물성을 향상시키는 등 여러 가지 장점이 있다. 단일 관 내에서 기화와 증착이 동시에 일어나게 하기 위해 부여된 비등온 조건은 종종 자연 대류를 야기하여 결정 성장의 안정성을 크게 저해하기 때문에 [1,2], 이런 문제점을 해결하기 위해 마이크로 중력(microgravity) 시스템을 이용한 자연 대류 억제 방법이 많은 연구자들에 의해 시도되고 있고[1], 회전 관을 이용하여 중력의 작용 방향을 분산시키고자 하는 연구도 보고된 바 있으나[2], 현장 적용을 위해서는 아직 해결해야 할 과제들이 많이 남아 있는 상태다.

기체의 유동 패턴은 고체 결정의 물성과 깊은 상관 관계를 지니고 있으므로, 수치모사를 통한 PVT 공정의 기체 유동 해석은 매우 중요한 연구 과제다. 본 논문에서는 3 차원 Computational Fluid Dynamics(CFD) 모사를 통해 진공 PVT 공정에서의 희박 기체 (rarefied gas) 거동을 살펴보았다. Knudsen 수(Kn) 분석에 근거하여 Navier-Stokes 식에 slip & jump boundary conditions(SJBCs)를 부여하였고, 상용 CFD 모사 프로그램인 FLUENT 6 를 사용하여 주어진 식의 해를 구했다. 진공 조건에서는 Rayleigh 수(Ra) 또는 Grashof 수(Gr)가 작아져 자연대류가 억제되는 효과가 있는 반면, 기체의 희박도(degree of rarefaction)를 증가시켜 상압 조건과는 다른 독특한 거동을 보여 공정 해석을 어렵게 만든다. 공정 조건 변화에 따른 자연 및 강제 대류의 상대적 세기를 살펴보고 결과적으로 얻어지는 관 내 유동 패턴 및 온도 분포를 이론적으로 분석하여, 저압 운전이 갖는 여러 가지 장점들을 정리하였다.

모델

그림 1 은 PVT 방법을 이용한 결정 성장 장치의 간략화된 공정도다. 시료는 가장 온도가 높은 source zone 에 놓이며 증발된 후, 관 입구에서 들어온 운반 기체에 의해 길이 방향으로 이동을 하는 과정에서 불순물과 분리되어 관 벽에 증착된다. 진공 PVT 공정을 모사하기 위해서는 희박기체 특성에 맞는 적절한 모델의 선정이 중요하다. 기체의 희박도에 따라 연속체 또는 분자 모델을 선택해야 하며, 적용되는 경계조건 또한 달라지게 된다. 기체의 희박도는 기체의 평균 자유 이동거리(mean free path)와 공정의 특성 거리의 비로 정의되는 Kn 의 크기에 의해 판단할 수 있다. 본 연구에서 대상으로 하고 있는 PVT 공정의 경우 Kn 값이 0.1 근처이며, 이는 Navier-Stokes 식에 SJBCs 을 적용시킬 수 있는 영역이다[3]. Thermal creep 을 무시했을 때 1 차 SJBCs 은 다음과 같다.

$$\mathbf{v}-\mathbf{v}_w = \frac{2-\sigma_v}{\sigma_v}\lambda\left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial n}\right) \tag{1}$$

$$T-T_w = \frac{2-\sigma_T}{\sigma_T}\left[\frac{2\gamma}{(\gamma+1)}\right]\frac{\lambda}{Pr}\left(\frac{\partial T}{\partial n}\right) \tag{2}$$

여기서 λ = mean free path, σ_V = tangential-momentum-accommodation coefficient, σ_T = thermal accommodation coefficient, γ = specific heat ratio, Pr = Prandtl number, 하첨자 w 는 관 벽을 의미한다. 기화된 시료가 내부 기체의 유동에 미치는 영향은 작다고 가정하여 시료의 증발 및 확산, 증착 현상은 수치모사에 고려되지 않았다.

결과 및 토의

PVT 관 내 기체 유동은 비등온 조건에 의한 자연 대류와 운반기체 유입에 의한 강제대류의 중첩된 결과로 나타난다. 운반기체의 유입을 차단하여 강제 대류를 제거할 경우, 관 내 기체는 자연 대류에 의해 convection roll 이 형성된다. 이러한 convection roll 은 그러나, 운반기체가 유입됨에 따라 세력이 약해지며, 자연 대류와 강제 대류의 상대적인 힘의 크기에 따라 와류 형태로 살아남을 수도 있고, 아예 사라질 수도 있다. 관 내 와류의 형성은 결정 성장 및 생성물의 순도에 영향을 미칠 수 있으므로[1,2], PVT 공정 조건에 변화에 따른 와류의 형성 여부를 미리 예측하는 것이 필요하다. 강제 대류와 자연 대류의 상대적 크기는 Gr 와 Reynolds 수(Re) 제곱의 비로 가늠할 수 있는데, 이는 Boussinesq 가정을 도입한 무차원 Navier-Stokes 식에서 부력 항 앞에 붙는 계수다.

그림 2 에 출구 압력 변화에 따른 관 내 유동 패턴 및 온도 분포를 나타냈다. 압력이 낮은 경우 (즉, 고진공의 경우) 기체 유동은 관 벽과 나란한 유선을 형성하지만(그림 2(a)), 압력이 커짐에 따라 점차로 와류가 생성되기 시작하며(그림 2(b)), 결국 이로 인해 온도 분포마저 교란된다(그림 2(c)). 고진공 운전은 유입 기체의 양을 감소시켜 강제 대류를 약화시키나, 압력 강하에 의한 자연 대류의 억제 효과가 더욱 커서 결과적으로 와류를 사라지게 하는 장점이 있음을 알 수 있다. 이상의 결과는 진공도가 클수록 Gr/Re^2 값이 커진다는 분석 결과로부터도 예측이 가능하다.

그림 3 은 관 지름의 크기 변화에 따른 유동 패턴 및 온도 분포다. 세 경우 모두 유입 기체의 관 내 선속도는 같으나, 관 지름이 클수록 자연 대류에 의한 기체 속도가 증가하게 되어 와류의 생성에 유리하게 된다. 하지만 그림 3 과 같은 고진공 조건에서는 기체의 밀도가 매우 낮아 와류에 의한 온도장의 교란은 발견되지 않으며, 이는 저압 운전이 갖는 또 하나의 장점이 될 수 있다.

결론

진공 PVT 방법을 통한 결정 성장 공정의 기체 유동 패턴을 해석했다. 미끄러짐 경계 조건을 적용하여 희박기체의 특성을 모델에 적절히 반영했으며, FLUENT 를 이용한 CFD 모사를 통해 자연 대류로 인한 기체 유동의 3 차원 구조적 특성을 살펴보았다. 자연 대류와 혼합 대류의 상대적 크기를 이론적으로 분석함으로써 공정 조건에 따른 와류 형성 여부를 예측할 수 있었다. 저압 조건일수록, 또한 관의 지름이 작을수록 와류의 형성이 억제된다는 결과와 함께, 고진공이 걸린 저밀도 조건에서는 유동장이 온도장을 교란시킬 수 없다는 흥미로운 사실을 함께 관찰하였다.

참고문헌

1. Mackowski, D.W., Rao, V.R., Walker, D.G., and Knight, R.W., “Numerical Investigation of the Effects of Thermal Creep in Physical Vapor Transport”, *J. Crystal Growth*, **179**, 297 (1997)
2. Fujiwara, S., Watanabe, Y., Namikawa, Y., Keishi, T., Matsumoto, K., and Kotani, T., “Numerical Simulation on Dumping of Convection by Rotating a Horizontal Cylinder during Crystal Growth from Vapor”, *J. Crystal Growth*, **192**, 328 (1998)
3. Gad-el-Hak, M., “Flow Physics in MEMS”, *Mec. Ind.*, **2**, 313 (2001)

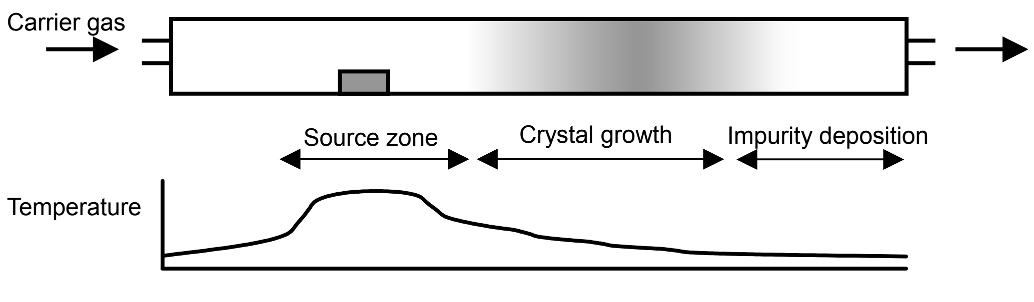

Figure 1: Crystal growth process using PVT

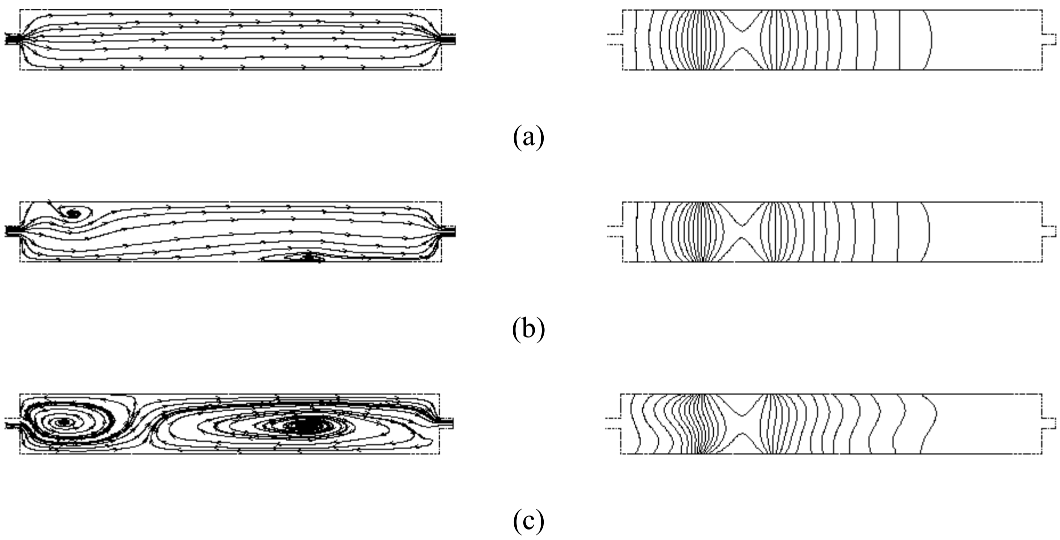

Figure 2: Streamlines (left) and temperature contours (right): dimensionless tube radius =1, dimensionless pressure at outlet = (a) 0.0247, (b) 1.00, and (c) 48.4

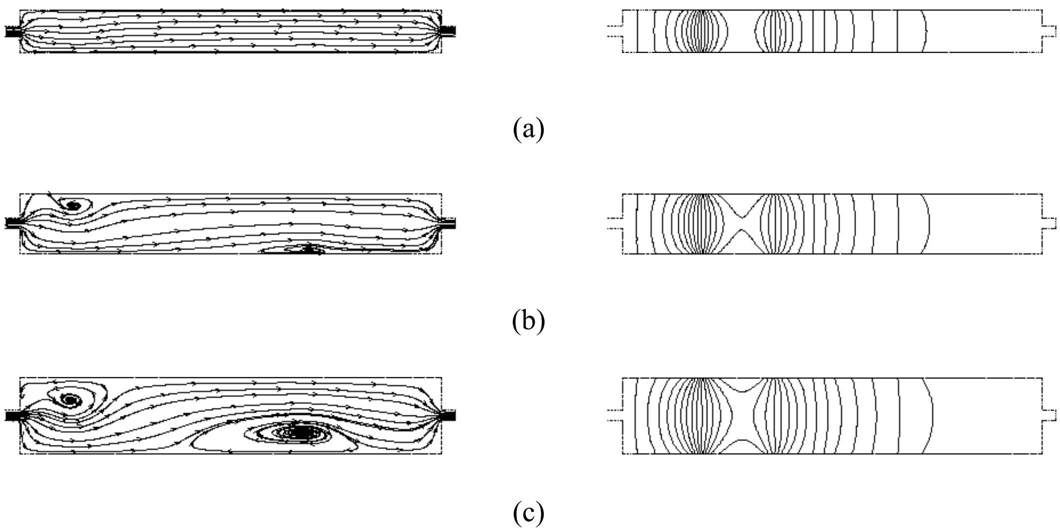

Figure 3: Streamlines (left) and temperature contours (right): dimensionless pressure at outlet = 1, dimensionless tube radius = (a) 0.714, (b) 1.00, and (c) 1.286