

초크랄스키 실리콘 단결정에서 인상 속도의 거시적 변동이 OSF-링 형성에 미치는 영향

박봉모 · 서경호 · 김 건
LG실트론, 단결정기술팀

Effect of a Macroscopic Fluctuation in Pulling Rate on the Formation of OSF-ring in Cz-Si Single Crystal

Bong Mo Park, Gyeong Ho Seo and Gun Kim

LG Siltron Inc., 283, Imsoo-dong, Kumi, Kyungbuk 730-350, Korea

요 약

200mm Cz-Si 결정 성장 시 거시적 인상속도 변동을 인위적으로 도입하였을 때, 인상속도 변화와 OSF-링의 위치 변화를 비교하였다. 인상속도 변동 발생 시 OSF-링의 형성 거동은 성장계면 위치사이의 영역으로 정의되는 유효체적에서 가장 크게 영향을 받는다. 이러한 거시적 인상속도 변동의 효과를 정확히 이해하기 위해서는 유효체적에 대한 인상속도 변동의 누적 효과를 고려하여야 하며, 이를 위한 모델링의 개념을 제안하였다.

Abstract

In a 200mm Cz-Si crystal, a macroscopic fluctuation in pulling rate was intentionally introduced and then the variations of the pulling rate and the position of OSF-ring were compared each other. The formation behavior of OSF-ring in the effective volume, defined as the region between the growth interface position $-\alpha$ and the growth interface position $+\alpha$, is most affected by the pulling rate fluctuation. To understand the correct effect of a macroscopic pulling rate fluctuation, its cumulative effect in the effective volume should be considered. A new concept of modeling for it was proposed here.

1. 서 론

초크랄스키(Czochralski) 법으로 성장한 실리콘(Cz-Si) 단결정은 공공(vacancy)이 우세하거나 격자간-실리콘(self-interstitial)이 우세한 두 가지의 점결함 특성 영역을 나타내는 것으로 알려져 있다.¹⁻⁶⁾ 이 두 특성 영역의 경계는 i-v 경계로 불리며, 이러한 경계의 약간 한쪽 위치에 산화유기적층결함(Oxidation-induced Stacking Fault: OSF)-링(ring)이 형성되는 것으로 잘 알려져 있다.⁴⁾ OSF-링의 한쪽 영역에서는 COP(crystal originated particle)나 FPD(flow pattern defect) 등으로 표현되는 공공관련 성장결함

(grown-in defect)이 주로 생성된다. 이렇게 형성되는 공공관련 성장 결함은 초고집적회로(ULSI) 소자제조 공정 시 치명적 손상을 유발하는 것으로 알려져 있으므로, i-v 경계나 OSF-링을 결정 중심 방향으로 수축시킴으로써 공공관련 결함을 감소 시키려는 연구가 많이 이루어져 왔다.^{7,8)} Cz-Si 단결정 성장 시 성장계면에서의 성장속도(growth rate)를 V 라 하고 수직방향으로의 온도구배(temperature gradient)를 G 라 할 때, OSF-링의 위치는 V/G 값의 크기에 의존하는 것으로 알려져 있다.^{4,9)}

Cz-Si의 성장계면에서 성장속도를 결정하는 가장 중요한 요소는 인상속도(pulling rate)라 할 수 있다.

최근의 연구 결과에 의하면, 인상속도와 성장계면에서의 결정 성장속도 사이에는 시간지연(time-delayed) 현상이 있으며, 따라서 인상 속도의 미세 변동에 대하여서는 i-v 경계의 위치 변화가 크게 나타나지 않는 것으로 보고되었다.¹⁰⁾ 그러나, 비교적 큰 파형의 인상속도 변화가 도입될 경우 OSF-링이나 i-v 경계의 형성 위치는 영향을 받게 될 것으로 예상되지만, 이러한 변화의 상관 관계에 대해서는 아직 구체적으로 설명되지 못하고 있다. 거시적 인상속도 변동은 실제 결정 성장 공정 중 빙도는 낮다고 하더라도 그 발생 가능성이 존재하며, 이러한 변동 발생 시의 결정 품질관리뿐만 아니라 Cz-Si 결정의 결합 특성 거동의 이해와 이의 효과적 제어를 위해서는 거시적 인상속도 변동의 효과에 대한 정확한 이해가 필요하다.

본 연구에서는, 인상속도 변화와 OSF-링 형성 상관 관계의 구체적 이해를 위하여, 200mm CZ-Si 결정 성장 시 인상속도의 거시적 변화가 도입된 경우 OSF-링의 형성 거동을 비교 분석하였다. 이를 통하여 OSF-링 형성 거동을 보다 효과적으로 설명하기 위해서는 유효 체적(effective volume) 모델의 도입이 필요함을 제안하고자 한다.

2. 실험 방법

상용의 대형 Cz-Si 결정성장로를 이용하여 200 mm 직경의 Boron이 소량 첨가된 P-형 실리콘 단결정을 [100] 방향으로 성장시켰다.

OSF-ring 형성에 대한 인상속도 변동의 효과를 관찰하기 위하여, Fig. 1에 나타낸 바와 같이 비교적 큰 파형의 거시적 인상속도 변동을 인위적으로 도입하였다. 결정의 성장 축 방향을 따라 약 60 cm 부근에서 평균 인상속도 0.475 mm/min에 대하여 $\pm 35\%$ 수준의 진폭으로 인상 속도 변동을 도입하였다.

성장된 실리콘 단결정 봉에서 Fig. 1의 “A”로 표시된 영역에 해당되는 부분을 불록으로 절단한 후, 이를 다시 결정 성장 축 방향에 평행하도록 두께 1 mm의 수직 시편으로 절단하였다. 가공된 시편의 표면 손상 층을 제거하기 위하여 희석된 혼산액에 담가서 약 30분간 표면 층을 식각하였다.

결정 내에 형성되어 있는 OSF-링이나 i-v 경계의 위치를 관찰하기 위하여 일반적으로 X-선 Lang 토크

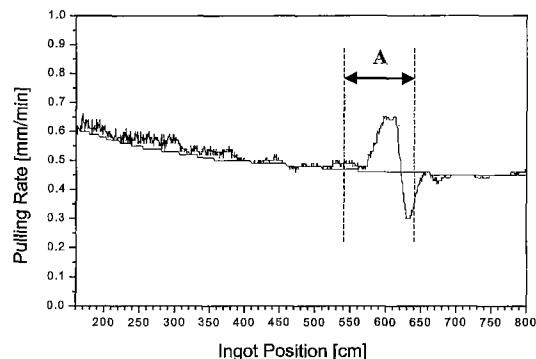


Fig. 1. Fluctuation pattern of crystal pulling rate along the crystal growth direction. A large fluctuation was intentionally introduced in the region “A”.

포그라피(topography)가 이용된다. 보다 선명한 관찰을 위해서는 산소석출을 증진시키는 열처리가 필요하며, 이를 위하여 위에서 가공된 수직 시편을 확산로(diffusion furnace)에 장착하고 800°C에서 4시간 그리고 1000°C에서 16시간 열처리 하였다. 석출 열처리된 시편을 12" Lang 토크포그라피기(MAC Science)에서 X-선 토크포그라프를 활용하여 분석하였다. 이미지 형성을 위하여 결정 시편을 투과 모드로 설치한 후 (004) 회절을 이용하였으며, 광원으로는 Mo K α_1 선을 사용하였고 발진기(generator)의 파워는 50 kV-300 mA로 하였다.

3. 결과 및 고찰

3-1. OSF-링 형성 거동

OSF-링 주변 영역에서는 산소석출 거동이 민감하게 변하므로, 산소석출을 증진시키는 800°C에서 4시간 그리고 1000°C에서 16시간의 2단계 열처리에 의하여 비교적 쉽게 OSF-링 위치를 관찰할 수 있다.

Fig. 2는 Fig. 1의 “A” 부분의 결정을 수직으로 절단하여 2단계 열처리 후 X-선 토크포그라피 촬영한 사진이다. 여기에서 인상속도 변동에 따른 OSF-링과 i-v 경계의 위치 변화를 매우 선명하게 관찰 할 수 있다. 보다 직접적인 비교를 위하여 성장 단결정 봉의 위치에 인상속도 변화 곡선을 Fig. 2에 같이 투영하여 나타내었다. 여기서 관찰되는 특이한 점은 인상속도 변화 곡선과 OSF-링이나 i-v 경계의 위치 변화 곡선이 서로 관련성은 있지만 정확히 일치하지는 않는다는 점이다.

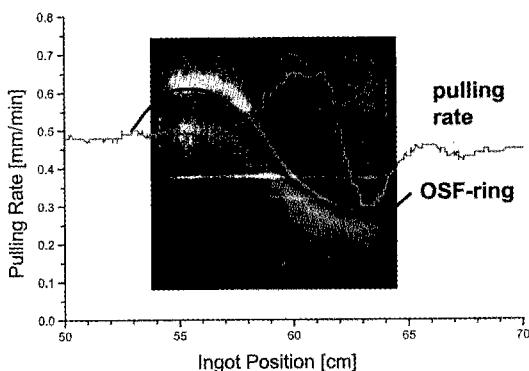


Fig. 2. Comparison between the OSF-ring position and the pulling rate variation. The pulling rate variation was matched on the x-ray topograph of a vertical sample of the crystal block in the region "A" of Fig. 1.

3-2. OSF-링 위치의 계산

일반적으로 OSF-링의 위치는 주로 V/G 값의 크기에 의존하는 것으로 알려져 있다.^{4,9)} 따라서 OSF-링이 형성되는 V/G 값을 ξ_{OSF} 라면, 성장 단결정 봉의 각 위치에 대한 이들의 관계식은 식(1)과 같이 표현될 수 있다.

$$\frac{V}{G(r_{OSF})} = \xi_{OSF} \quad (1)$$

여기서 성장속도는 결정 반경 방향을 따라 동일하며, 결정 인상속도와 거의 유사한 값을 갖는 것으로 근사될 수 있으며, 온도구배는 결정 반경에 대한 함수로 표현할 수 있다. 또한 전산 모사에 의하여 주어진 성장 조건에 대한 열적 환경을 계산한 값으로부터의 근사 함수를 얻을 수 있으므로, 결과적으로 OSF-링의 위치를 계산할 수 있게 된다.¹⁰⁾

최근의 연구 결과에 의하면, 실제 결정 성장속도와 인상속도 사이에는 상당한 시간 지연효과가 있으므로 위의 식(1)은 식(2)와 같이 변형되어야 하며, 이러한 효과에 의하여 인상속도의 미세하거나 진폭이 크지 않은 변동은 OSF-링 및 i-v 경계의 형성 위치에 큰 영향을 미치지 않는 것으로 보고되었다.¹⁰⁾

$$\frac{v_0 + \delta \sin\left(\frac{2\pi}{\tau}t\right) e^{-\frac{4\theta}{\tau}}}{G(r_{OSF})} = \xi_{OSF} \quad (2)$$

평균인상속도(v_0)에 대하여 진폭이 δ 이고 주기가 τ

인 사인(sine) 파동의 형태로 변동이 도입되었을 때, 시간에 따른 인상속도의 변화에서 지연시간을 θ 라 하면 $e^{-4\theta/\tau}$ 만큼의 시간 지연 효과가 반영된 것을 나타내고 있다. 이러한 관계식은 미세한 인상속도 변동의 경우 큰 영향을 미치지 못하므로 OSF-링이나 i-v 경계의 형성 거동은 주로 인상속도의 평균 궤적에 의존하는 측면을 잘 보여주고 있다. 그러나 이러한 개념만으로는 앞 절에서 관찰된 인상속도 변화와 OSF-링 위치 변화 간의 불일치성을 설명하기 어렵다.

3-3. 유효 체적(effective volume) 모델의 제안

Fig. 3은 성장된 단결정 봉의 위치에 따라 실제로 측정된 OSF-링의 위치와 위의 식(2)에 의하여 계산된 OSF-링의 위치를 나타낸 것이다. 거시적 인상속도 변동이 도입되기 전에는 계산과 실제의 OSF-링 위치가 비교적 잘 일치 힘을 알 수 있다. 그러나, 거시적 인상속도 변동이 도입된 영역에서는 상당히 다른 거동을 보임이 확인된다. 식(2)에서 인상속도 변동의 효과가 충분히 전달되지 못하는 지연효과를 고려하였다 하더라도, OSF-링의 위치 변화는 단순하게 인상속도 변화에 직접적으로 의존하는 것으로 표현되어 있다. 따라서 이에 의한 계산 결과는 인상속도 변동과 동일한 변화를 나타낼 수 밖에 없으며, 결과적으로 실제 관찰되는 OSF-링의 위치와는 현격한 차이를 나타내고 있다.

Fig. 3에 나타낸 것처럼, 거시적 인상속도 변동이 도입되었을 때, 실제 측정된 OSF-링의 위치 변화와

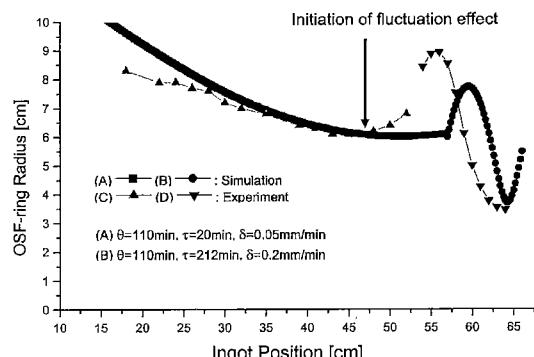


Fig. 3. Comparison between the simulated and the measured OSF-ring positions of the crystal in Fig. 1. The simulation of the OSF-ring position was based on the model of the equation (2).

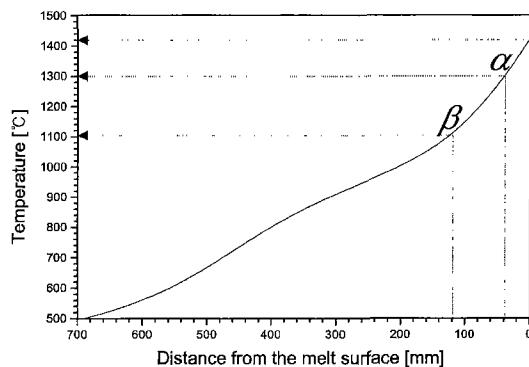


Fig. 4. The computer simulated axial temperature profile at crystal center in the grown crystal. The α is the initiation point of the fluctuation effect and the β is the starting point of the region affected effectively by the pulling rate fluctuation.

식(2)의 모델로 계산된 OSF-링의 위치변화를 비교해 보면, 특이할만한 점은 측정된 변화의 형태가 계산된 것에 비하여 단순하게 특정한 방향으로 변위되는 것이 아니라 양방향으로 늘어지는 형태를 나타내고 있다는 것이다. Fig. 2에서도 비교할 수 있듯이, 인상속도가 크게 변하기 시작하는 성장계면의 위치에서부터 OSF-링의 위치도 변하기 시작하는 것이 아니라 이보다 훨씬 이전의 영역에서 이미 OSF-링 위치가 변하기 시작하고 있음을 잘 보여 준다. 뿐만 아니라, 인상속도 변동 효과가 제거된 이후에도 OSF-링의 위치 변화는 여전히 영향을 받고 있음도 알 수 있다. 이러한 결과를 효과적으로 설명하기 위해서는 새로운 개념의 도입이 필요하다.

Fig. 4는 Cz-Si 결정 성장 시 용액(melt) 표면(또는 성장계면)으로부터의 거리에 따른 결정내 온도분포를 나타낸 것으로, 이는 본 연구에서 적용된 결정 성장 조건에 대하여 STHAMAS¹¹⁾ 프로그램을 이용하여 전산모사된 것이다. Fig. 2 및 Fig. 3과 같이 비교하여 보면, 거시적 인상속도 변동이 도입될 때 최초로 OSF-링의 형성 거동이 영향을 받기 시작하는 것은 성장계면으로부터 약 10 cm 부근의 위치이며 (Fig. 4의 β 점), 이때의 온도는 1100°C 정도인 것으로 판단된다. 이는 OSF를 형성하는 격자간 실리콘 이 1100°C 이상의 고온에서 확산 속도가 빠르다는 사실과 관련되는 것으로 이해된다. 그러나, 인상속도 변동이 보다 확실하게 영향을 미치기 시작하는 영역

은 성장계면으로부터 약 2~3 cm 부근의 위치이며 (Fig. 4의 α 점), 이때의 온도는 1250~1300°C 정도인 것으로 판단된다.

Cz-Si 결정 성장 시 OSF-링이나 i-v 경계의 형성은 (i) 성장계면 부근에서의 점결합 생성 및 확산 거동^{4,9)} (ii) 성장 결정의 냉각 과정에서의 열이력(thermal history)에 관련한 점결합 응축 및 확산 거동⁶⁾ 등에 영향을 받는다고 할 수 있다. 식(1)과 식(2)의 모델의 경우 성장계면 부근에서의 점결합 생성 및 확산 거동을 주로 고려한 결과로 생각할 수 있다. 이러한 결과로, 거시적 변동이 도입되었을 때 OSF-링이나 i-v 경계의 위치에 대한 측정값과 계산 값이 상당히 다르게 나타나는 것으로 이해된다. 따라서, 성장 결정의 냉각 과정에서의 열이력(thermal history)과 관련한 점결합 응축 및 확산 거동을 충분히 고려하여야 하며, 이를 위해서는 인상속도 변동이 점결합 거동에 영향을 미치는 유효체적이라 개념의 도입이 바람직하다. 성장계면에서 도입된 점결합이 냉각 과정 중 확산되는 것은 결정 성장 축 상에서 볼 때 양 방향으로 모두 가능하므로, 인상속도 변동이 발생된 위치에서 $\pm\alpha$ 내의 영역에서는 점결합 거동이 크게 영향을 받게 된다. 성장 계면에서 인상속도가 거시적으로 변동되기 시작할 때, Fig. 4에 나타낸 α 점부터 성장 계면 사이의 영역에서는 점결합 거동 변화에 의한 OSF-링이나 i-v 경계의 위치가 치명적인 영향을 받으며, 이 효과는 α 만큼 추가 성장이 이루어지는 동안에도 지속적으로 영향을 미치는 것으로 보인다. 따라서, 인상속도 변동 발생 시 이로 인한 OSF-링의 형성 거동은 성장계면 $\pm\alpha$ 내의 영역에서 가장 크게 영향을 받으므로, 이 영역을 인상속도 변동 효과에 대한 유효체적으로 정의할 수 있다. 결론적으로, 거시적 인상속도 변동의 효과를 정확히 판단하기 위해서는 성장계면 $\pm\alpha$ 의 크기를 갖는 유효체적에 대한 누적 효과를 고려해야 한다고 할 수 있다. 즉, 한 지점에서의 점결합 거동을 이해하기 위해서는 그 지점의 순간적 인상속도 변동이 아니라 유효체적 내에서의 인상속도 변동의 누적된 효과를 고려해야 된다는 것이다. 어떤 한 지점에서의 결정 인상속도(v)에 대한 유효체적 내의 인상속도 변동효과의 합의 비율을 누적효과율(λ)이라 할 수 있다. 앞에서 설명된 효과 전달의 시간 지연에 의하여 원래의 인상속도에

대하여 감소된 효과로 나타나는 비율을 시간지연율(η)로 간단하게 표기한다면, 결정 성장 시 어떤 한 지점에서의 접결합 거동을 결정하는 인자는 식(1)에서 성장속도(V) 대신 $\eta\lambda v$ 로 표현되는 유효성장속도가 고려되어야 한다. 따라서, 인상속도 변동에 따른 OSF-링의 형성 거동을 나타내는 모델은 식(3)과 같이 변형되어 표현될 수 있다.

$$\frac{\eta\lambda v}{G(r_{OSF})} = \xi_{OSF} \quad (3)$$

여기서, η 와 λ 는 각각 $0 < \eta < 1$ 과 $\lambda > 1$ 의 값을 갖는 것으로 이해될 수 있으며, 이들은 결정의 성장 조건과 열이력 등에 따라 결정되는 인자로 고려되어야 한다.

4. 결 론

Cz-Si 단결정 성장 시 거시적 인상속도 변동이 OSF-링 형성 거동에 미치는 영향에 대하여 고찰하였다. 200 mm Cz-Si 결정 성장 시 큰 진폭과 파장을 갖는 인상속도 변동을 인위적으로 도입한 후 OSF-링 형성 거동을 분석하고, 이를 바탕으로 효과적 설명이 가능한 새로운 모델의 개념을 제안하였다.

인상속도 변화 곡선과 OSF-링의 위치 변화 곡선이 서로 관련성은 있지만 정확히 일치하지는 않는다는 점이 관찰 되었으며, 이는 기존의 단순한 V/G 모델만으로는 설명되기 어렵다. 이러한 이유는 성장 결정의 냉각 과정에서의 열이력과 관련한 접결합 응축 및 확산 거동을 충분히 고려하지 못한 것에 기인하는 것으로 해석된다.

본 연구에서는 인상속도 변동 발생 시 OSF-링의 형성 거동은 성장계면의 영역으로 정의되는 유효체적에서 가장 크게 영향을 받는 것이 관찰되었다. 이러한 거시적 인상속도 변동의 효과를 정확히 이해하기 위해서는 유효체적에 대한 인상속도 변동의 누적 효과를 고려하여야 하며, 이를 위한 모델링의 새로운 개념을 제안하였다.

참고문헌

- 1) Sadamitsu, S., Umeno, S., Koike, Y., Hourai, M., Sumita, S. and Shimatsu, T., *Jpn. J. Appl. Phy.*, **32**, 3675 (1993).
- 2) Kato, M., Yoshida, T., Ikeda, Y. and Kitakawara, Y., *Jpn. J. Appl. Phy.*, **35**, 5597 (1996).
- 3) Nishimura, M., Yoshino, S., Motorura, H., Shimura, S., Mchedidze, T. and Hikone, T., *J. Electrochem. Soc.*, **143**, L243 (1996).
- 4) Voronkov, V. V., Falster, R. and Holzer, J. C., in *Crystalline Defects and Contamination: Their Impact and Control in Device Manufacturing II*, Kolbesen, B. O., Stallhofer, P., Claeys, C. and Tardiff, F., Editors, **PV 97-22**, p. 3, The Electrochemical Society Proceedings Series, Pennington, NJ (1997).
- 5) Dornberger, E. and W. von Ammon, *J. Electrochem. Soc.*, **143**, 1648 (1996).
- 6) Park, B. M., in *Silicon Materials Science and Technology: Semiconductor Silicon 1998*, Huff, H. R., Gosele, U. and Tsuya, H., Editors, **PV 98-1**, p. 515, The Electrochemical Society Proceedings Series, Pennington, NJ (1998).
- 7) Hourai, H., Nishikawa, H., Tanaka, T., Umeno, S., Asayama, E., Nomachi, T. and Kelly, G., in *Silicon Materials Science and Technology: Semiconductor Silicon 1998*, Huff, H. R., Gosele, U. and Tsuya, H., Editors, **PV 98-1**, p. 453, The Electrochemical Society Proceedings Series, Pennington, NJ (1998).
- 8) Park, J. G., Lee, G. S., Park, J. M., Chon, S. M. and Chung, H. K., in *The SEMI Symposium Focused on Silicon Wafers*, p. E-1, SEMI Silicon Wafer Symposium, SEMI (1998).
- 9) Voronkov, V. V., *J. Cryst. Growth*, **59**, 625 (1982).
- 10) Park, B. M., Seo, G. H. and Kim, G., *J. Cryst. Growth*, **203**, 67 (1999).
- 11) Fainberg, J., Leister, H.-J. and Mueller, G., *Microelectronic Engineering*, **1** (1999) 135.