

物性値変化を考慮したアモノサーマル法による GaN バルク単結晶育成時の熱流体解析

Numerical simulation of ammonothermal GaN bulk single crystal process with
considering different physical properties

産総研¹, 東北大多元研², [○]増田 善雄¹, 金久保 光央¹, 冨田 大輔², 横山 千昭²
AIST¹, IMRAM Tohoku Univ.², [○]Yoshio Masuda¹, Mitsuhiro Kanakubo¹, Daisuke Tomida²
and Chiaki Yokoyama²

E-mail: y-masuda@aist.go.jp

はじめに : GaN バルク単結晶を効率よく育成する方法として超臨界アンモニアを用いるアモノサーマル法がある。本研究ではアモノサーマル法でよく使われる温度圧力におけるアンモニアの分解を考慮した物性値において結晶育成炉の熱流体解析を行ったので報告する。

数値解析 : 計算に用いたモデルを Fig.1 に示す。計算は軸対称モデルを用い、オートクレーブの内側に超臨界アンモニアが、半分の高さのところにバッフル板があり、バッフル板よりやや上に結晶があるものとした。対流の方向を制御するため低温の部分をバッフル板の下 2cm にまで伸ばした。オートクレーブはインコネル、バッフル板は白金の物性値を用いた。アンモニアの分解割合と物性値は VMGSim を用い、状態方程式には NGL-PR を用いた。このモデルでは平衡状態までアンモニアが分離している場合でも安定して計算できる。熱流体解析には SCRYU/Tetra を用いた。

結果と考察 : 150MPa425°Cにおいて平衡状態ではアンモニアの約 22%が分解している。この時のレイリー数は約 1.1×10^{11} 純アンモニアでは 6.1×10^{10} であり 2 倍程度違う。バッフル板の開口率が 15%で結晶半径が 10mm の場合のバッフル板より上の部分の温度分布を Fig.2 に示す。純アンモニアの場合はバッフル板中心からの上昇流が結晶の下部に衝突するが強い逆流が発生せずスムーズな流れになっている。ところが分解を考慮した場合は結晶下部に衝突した

流れが強い逆流を生じたその流れと反対の反時計回り方向の強い自然対流が結晶の側面付近で発生していることもわかる。このような対流は分解を考慮した場合の体膨張率が 2 倍位大きいためにみられる現象であると予測される。

謝辞 : 本研究は物質・デバイス領域共同研究拠点における産総研と東北大多元研との共同研究による成果である。

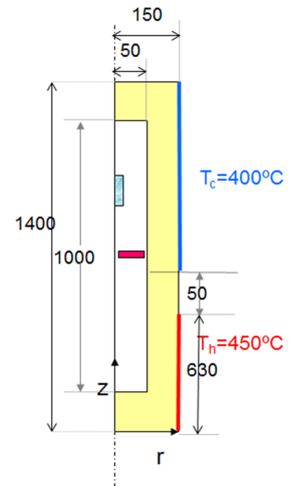


Fig.1 Physical model of autoclave

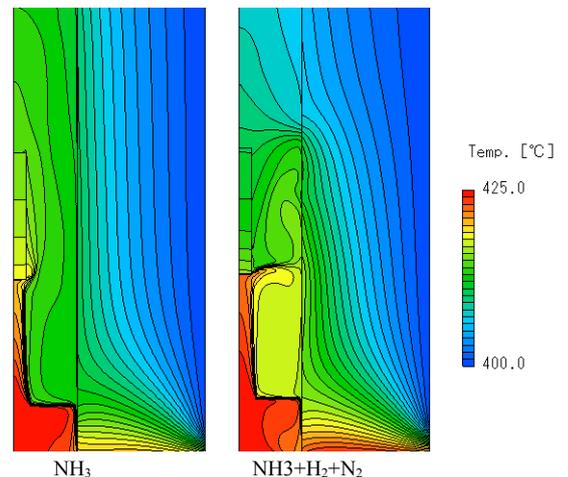


Fig.2 Temperature fields near the baffle