レイリー数の違い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 Rayleigh number

産総研¹, 東北大多元研², ◯増田 善雄¹, 富田 大輔², 横山 千昭²

AIST¹, IMRAM Tohoku Univ.², ◯Yoshio Masuda¹, Daisuke Tomida², 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物性値のアモノサーマル炉の熱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、単純化のため原料と結晶は無視した。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。アンモニアの物性値は温度 T_{av} と圧力から VMGSim を用い、状態方程式には APR for Natural Gas を用いて計算した。熱流体解析には SCRYU/Tetra を用いた。

結果と考察 : 圧力と温度の違いによる純アンモニアのレイリー数を

Fig.2 に示す。この図から温度によるレイリー数の変化は 150MPa の場合がもっとも大きい。しかしどの場合でもレイリー数のオーダーには変化がなくおよそ $1.0 \sim 3.0 \times 10^{10}$ の範囲にあることがわかる。このことからこの温度圧力範囲では温度圧力による物性値変化による自然対流熱伝達の変化はあまり大きくないことが予想される。実際に Fig.1 の系での計算を行ったが殆どの場合大きな傾向の違いはみられなかった。しかしバッフル板の開口率が 10% と小さい時には流れの方向が変わる場合があり、その場合は温度及び流れの状態が大きく変化する。Fig.3 に $T_{av}=300^\circ\text{C}$ 、圧力が 200 と 250MPa の場合のバッフル板付近の温度分布を示す。通常バッフル板中心の開口部から上昇する流れが 250MPa の場合に逆方向になっており、そのために温度分布もそれに従って変化している。

引用文献 : 1) Y. Masuda, et al.: JJAP. 52 (2013) 08JA05.

2) Y. Masuda, et al.: J. Therm. Sci. Tech. 3 (2008) 540.

Fig.1 Physical model of autoclave

Fig.2 Variation in Rayleigh numbers of NH_3 with temperature when the pressure is 150, 200 and 250MPa.

Fig.3 Temperature fields near the baffle when $T_{av}=350^\circ\text{C}$.