AIN 結晶成長の昇華法におけるシード面近傍の物質流束解析

Analysis of Mass Flux near a Seed Face

in a Sublimation Method of AlN Crystal Growth

九大院工¹, 九大応力研² ^O間地 雄大¹, 中野 智², 柿本 浩一^{1,2}

Kyushu Univ.¹, RIAM, Kyushu Univ.², °Yudai Maji¹, Satoshi Nakano², Koichi Kakimoto^{1,2}

E-mail: maji@riam.kyushu-u.ac.jp

AIN は、バンドギャップが大きいことから、深紫外光源素子への利用が期待される[1]. しかし、報告された AIN の発光波長よりも、長い波長帯での発光も報告されており、不純物や欠陥によるキャリアの再結合が原因だと考えられている[2]. これらの不純物や欠陥の形成エネルギーは、雰囲気中の AI または N2 濃度に依存しており、シード面近傍の成長メカニズムを知ることは重要である.本発表では、AI と N2の輸送シミュレーションを行い、炉内圧力と温度を変化させたときの、物質流束解析の結果を報告する.

輸送シミュレーションでは、気相内で Al と N₂のみを考慮し、シード面とソース面でのフラックスは、ヘルツ - クヌーセンの式より計算した[3]. ここでは、一般的に用いられている Al と N が等量に結晶に流入するという、 いわゆるストイキオメトリの条件を用いず、Al と N の付着係数は、それぞれ 1 と報告値を用いた[4,5,6]. Al と N₂ の平衡分圧は、炉内圧力と平衡分圧の総和が等しいこと、質量作用の法則を満たすことを考慮し計算した.また、 フラックスを計算する際、計算条件として、クヌーセン層内で全圧一定、シード面に対して接線方向速度をゼロ と仮定し、繰り返し計算を行った.

シード温度 2268 K, 炉内温度勾配 2.31 K/mm, シード - ソース間距離 45 mm, シード直径 2 inch, 横軸にシード 半径, 縦軸に N に対する Al のフラックス比の, 圧力変化毎の計算結果を Fig.1 に示す. 炉内圧力 400 Torr のとき の, 炉内の Al と N₂の分圧分布を Fig.2 に示す. Fig.1 から, シード面全体にわたって, Al フラックスが N フラッ クスの 10 倍以上となっていることがわかる. これはシードからソースへの N₂の逆拡散が起きており, シード面 近傍の N フラックスが減少していることが原因であると考えられる. Fig.2 から, バルク気相では, N₂の分圧が Al に比べて優勢であり, N₂リッチであるとわかる. しかし, フラックスの比から, バルク気相とは対照的に, シ ード面近傍では Al リッチになっていることがわかった. 以上の結果から, 昇華法では, Al リッチで成長が進行し ていることが予想される.



Fig.1 Flux ratio of Al to N distributions along a seed face at different pressures.



Fig.2 Partial pressure distributions of Al (left) $and \; N_2 \; (right) \; in \; a \; furnace.$

[参考文献]

- [1] Y. Taniyasu, M. Kasu, T. Makimoto, Nature 441 (2006) 325.
- [2] B.E. Gaddy, Z. Bryan, I. Bryan, R. Kirste, J. Xie, R. Dalmau, B. Moody, Y. Kumagai, T. Nagashima, Y. Kubota, T. Kinoshita, A. Koukitu, Z. Sitar, R. Collazo, D.L. Irving, Applied Physics Letters 103 (2013) 161901.
- [3] B. Gao, S. Nakano, K. Kakimoto, Journal of Crystal Growth 338 (2012) 69.
- [4] S.Yu. Karpov, A.V. Kulik, A.S. Segal, M.S. Ramm, Yu.N. Makarov, Physica Status Solidi (a) 188 (2001) 763.
- [5] L. Liu, J.H. Edgar, Journal of the Electrochemical Society 149 (1) (2002) G12.
- [6] S.G. Mueller, R.T. Bondokov, K.E. Morgan, G.A. Slack, S.B. Schujman, J.Grandusky, J.A. Smart, L.J. Schowalter, Physica Status Solidi (a) 206 (2009) 1153.