

GaN MOVPE における結晶成長マルチフィジックス流動シミュレーション

Multiphysics Simulation of Flow with Crystal Growth in GaN MOVPE

名大工¹, 名大院工², 名大未来研³, 九大応力研⁴ °川上 賢人¹, 山本 芳裕²,

芳松 克則^{3,2}, 岡本 直也², 寒川 義裕^{4,3}, 柿本 浩一⁴, 白石 賢二^{3,2}

Nagoya Univ.¹, Graduate School of Engineering, Nagoya Univ.²,

IMaSS, Nagoya Univ.³, RIAM, Kyushu Univ.⁴

°K. Kawakami¹, Y. Yamamoto²,

K. Yoshimatsu^{3,2}, N. Okamoto², Y. Kangawa^{4,3}, K. Kakimoto⁴, K. Shiraishi^{3,2}

E-mail: kawakami@fluid.cse.nagoya-u.ac.jp

1. 研究背景

GaN は現在光デバイス材料として、広く利用されているが、次世代パワー半導体としての利用価値もある。しかし、高品質で大きな GaN 結晶の製造には課題が多く残っている。現在、工業的に一般的な Metal-Organic Vapor-Phase Epitaxy (MOVPE)法において GaN のより良い結晶成長条件を求めるための研究がなされている。その研究の 1 つには、熱力学的な解析と第一原理計算を用いて GaN の結晶の面方位依存性を予測する手法がある[1]。そこで本研究では熱力学解析と流体力学を融合したマルチフィジックスシミュレーション手法を開発し、最適な結晶成長条件を基板表面上で実現できるように、結晶成長装置内の流れを制御することを目指して研究を進めている。

2. 計算方法

GaN 結晶成長シミュレーションは、MOVPE 法の装置を簡略化した 2 次元のシステムで計算を行った。本研究で用いた流体力学の支配方程式、境界条件等は参考文献[2]に従って決定した。代表的な流速は音速に比べ非常に小さいため、数値流体シミュレーションでは圧縮性ナビエ・ストークス方程式を低マッハ数近似[3]したものを用いた。化学種は Ga, NH₃, H₂, N₂ とし、化学種保存式を用いて計算を行った。計算において、空間離散化には 2 次精度中心差分、時間離散化には 1 次精度陽的オイラー法を使用した。さらに、数値的な振動を抑えるために格子はスタガード格子とした。代表的な流速は約 1.0×10^{-1} m/s であり、格子点数は 200×100 、境界条件として水平方向は流入・流出条件、鉛直方向は粘着条件とした。また、結晶成長表面を下端中央にし、基板温度を 1300 K とした。流入口を 3 層に分け、それぞれ異なった割合で各化学種を 1000 K で流入させた。(上段: N₂ のみ、中段: Ga, H₂, N₂、下段: NH₃, N₂)

結晶成長表面において各化学種の分圧、温度等を用いて GaN の平衡反応から導かれる熱力

学解析を行い、GaN の結晶成長の駆動力を求めるため、Ga の平衡分圧を算出した。

3. 計算結果

シミュレーション結果の一例を Fig.1 に示す。Ga ガスが流れに追従しながら拡散をしていく様子を確認できた。また、十分時間が経った後は流れが定常流であった。

結晶成長表面で GaN 結晶成長の平衡分圧を算出した。各化学種の分圧は拡散の程度により時間的に変動するため平衡分圧も分圧に従い変化することが確認された。また流れと同様に、全圧で規格化した Ga の平衡分圧も 1.4×10^{-8} atm の一定値に近づいていることが分かった。

計算の詳細は講演当日に議論する。

Reference

- [1] Y. Kangawa et al., Materials, 6(8) 3309-3360 (2013)
- [2] K. K. Kuo, Principles of Combustion, 2nd edition, John Wiley & Sons, Inc., US (2005).
- [3] P. A. McMurtry et al., AIAA JOURNAL, 24(6), 962-970 (1986).

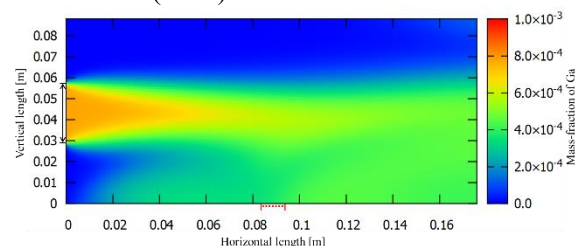


Fig.1 An example of the numerical result. Red shows the high mass-fraction of Ga, while blue does the low one. A red dotted line around 0.09 m horizontal length shows the substrate. A range of a black arrow shows the inflow entrance of Ga.

○謝辞

本研究は「省エネルギー社会の実現に資する次世代半導体研究開発」(文部科学省)からの委託を受けたプロジェクトの一環として行われた。