

データ同化を用いた AlN 成長シミュレーションの高精度化

Improved simulation of AlN growth by using data assimilation

理研,

定 昌史, 糸数 雄吏, 桑葉 俊輔, 平山 秀樹

RIKEN

M. Jo, Y. Itokazu, S. Kuwaba and H. Hirayama

E-mail: masafumi.jo@riken.jp

MOCVD 結晶成長のシミュレーションは反応炉内部の情報にアクセスするための非常に重要なツールである。しかしながら、シミュレーションと実験の結果は半定量的な一致にとどまることが多く、定量性に基づいた理解の観点からはより一層の精度向上が求められる。今回、AlN の MOCVD 成長に対しデータ同化を行いシミュレーションの高精度化を行ったので報告する。

シミュレーションは STR 社の Virtual Reactor Nitride Edition を用いて行い、対応する条件で MOCVD による実際の成長を行った。成長条件は横型フロー炉で、1350 °C、30 kPa、TMA 流量 230 sccm、NH₃ 流量 300 sccm である。対象パラメータは AlN 膜厚とし、基板の回転を止めた状態で膜厚の面内分布を比較した (図 1)。測定した膜厚は上流から下流にかけて 5.2-4.0 μm と単調に減少した。シミュレーション結果 (点線) もほぼ同様の傾向を示している。誤差は 4 % と非常に良い結果が得られているが、面内分布等にまだ改善の余地がみられる。このシミュレーション結果をもとに、ヒーター出力および原料ガス流量に対して、アンサンブルカルマンフィルタに基づいたデータ同化を行った (実線)。誤差は 0.5 % 以内に抑えられ、面内分布も非常によく再現できた。

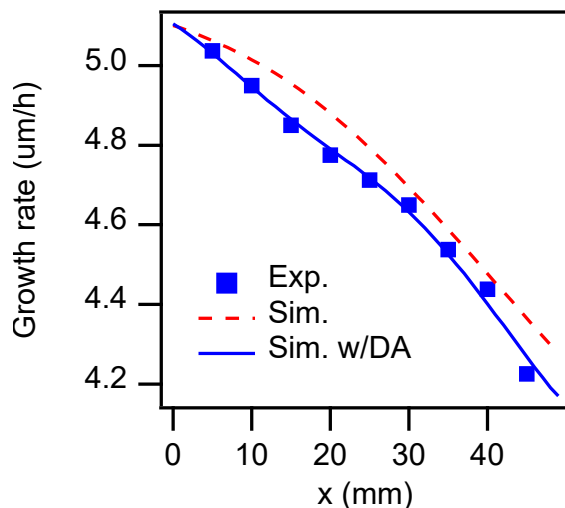


Fig. 1 Growth rates of AlN plotted as a function of the position on a substrate. Calculated growth rate with careful modeling is relatively in good agreement with the experimental one, but there is still discrepancy between the simulation and experiment. After performing DA, the simulated growth rate is nearly identical to the experimental one.