

## 縦型結晶成長装置における GaN MOVPE シミュレーション

Simulation of a GaN MOVPE Process in a Vertical Crystal Growth Apparatus

名大工<sup>1</sup>, 名大院工<sup>2</sup>, 九大応力研<sup>3</sup>, 名大未来研<sup>4</sup>, ニューフレアテクノロジー<sup>5</sup>, 東工大未来研<sup>6</sup>

富澤 巧<sup>1</sup>, 川上 賢人<sup>2</sup>, 櫻井 照夫<sup>2</sup>, 草場 彰<sup>3</sup>, 岡本 直也<sup>2</sup>, 芳松 克則<sup>4</sup>,  
醍醐 佳明<sup>5</sup>, 水島 一郎<sup>5,6</sup>, 依田 孝<sup>5,6</sup>, 寒川 義裕<sup>3</sup>, 柿本 浩一<sup>3</sup>, 白石 賢二<sup>4</sup>

Department of Eng., Nagoya Univ.<sup>1</sup>, Grad. Sch. of Eng., Nagoya Univ.<sup>2</sup>, RIAM, Kyushu Univ.<sup>3</sup>,  
IMaSS, Nagoya Univ.<sup>4</sup>, NuFlare Technology, Inc.<sup>5</sup>, FIRST, Tokyo Institute of Technology<sup>6</sup>

T. Tomizawa<sup>1</sup>, K. Kawakami<sup>2</sup>, T. Sakurai<sup>2</sup>, A. Kusaba<sup>3</sup>, N. Okamoto<sup>2</sup>, K. Yoshimatsu<sup>4</sup>,  
Y. Daigo<sup>5</sup>, I. Mizushima<sup>5,6</sup>, T. Yoda<sup>5,6</sup>, Y. Kangawa<sup>3</sup>, K. Kakimoto<sup>3</sup>, K. Shiraishi<sup>4</sup>

E-mail: [tomizawa.takumi@a.mbox.nagoya-u.ac.jp](mailto:tomizawa.takumi@a.mbox.nagoya-u.ac.jp)

### 1. 研究背景

次世代パワーデバイスのスイッチング素子材料として注目を集める GaN はバンドギャップ、熱伝導率、絶縁破壊電界、電子飽和度等で従来の Si よりも優れた特性を持っている。しかし高品質かつ大口径の GaN 結晶の製造には多くの課題が残っている。現在、工業的に一般的な MOVPE 法において GaN 結晶の品質を向上させるための研究がなされている。そこで本研究では第一原理計算や熱力学解析、数値流体計算をカップリング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に実現できるように、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 法の縦型装置を簡略化した軸対称を仮定したシステムで計算を行った。 $r$ 軸を動径方向、 $z$ 軸を中心軸方向とした。代表的な流速を約  $1.0 \times 10^{-1}$  m/s とし、縦横比 1:1 の装置を想定した。速度の境界条件として水平方向は粘着条件と軸対称条件、鉛直方向は流入・流出条件と粘着条件とした。代表的な流速が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[1]したものを用いた。用いた化学種は Ga, NH<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub> であり、化学種の移流拡散方程式を用いて計算を行った。数値計算において、時間離散化には 1 次精度陰的オイラー法、空間離散化には 2 次精度中心差分を用いた。計算の数値的な振動を抑えるために計算格子にはスタガード格子を用いた。また結晶成長表面は Fig1 中の赤線部で、基板温度を 1300 K とした。流入口は 1 層で、それぞれ異なる割合で各化学種を 1000 K で流入させた。

結晶成長表面において、表面反応から導かれる質量分率の境界条件を用いて、流体力学と熱

力学のカップリングを行った。Ga の平衡分圧を計算し、GaN の結晶成長の駆動力を求めた。

### 3. 計算結果

結晶成長装置内の流速分布について計算した結果を Fig.1 に示した。 $r = 0.0$  が中心軸であり、 $r = 1.0$  が装置の壁である。 $z = 1.0$  において原料ガスを流入させ、 $z = 0.0$  ( $0.5 \leq r \leq 1.0$ ) で排出させた。

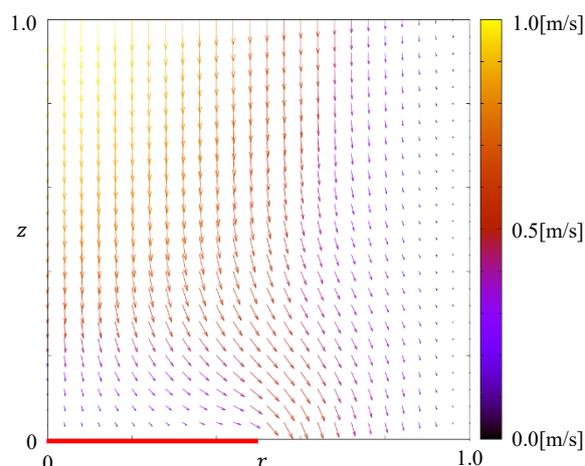


Fig.1 A numerical result of gas velocity

結晶成長装置内の流速分布のほかに温度分布、各化学種の分圧を求めた。計算結果の詳細については講演当日に議論する。

### References

[1]. P. A. McMurtry et al., AIAA JOURNAL, 24(6), 962-970 (1986).

### 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。