

化学反応を含む GaN 結晶成長流体シミュレーション手法の開発

Development of GaN Crystal Growth Simulation Method Including Chemical Reaction

名大工¹, 名大院工², 九大応力研³, 名大未来研⁴

榑原 聡真¹, 川上 賢人², 高村 昂², 洗平 昌晃⁴, 草場 彰³

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

Department of Eng., Nagoya Univ.¹, Grad. Sch. of Eng., Nagoya Univ.²

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

°S. Sakakibara¹, K. Kawakami², S. Komura², M. Araidai⁴, A. Kusaba³,

N. Okamoto², K. Yoshimatsu⁴, Y. Kangawa³, K. Kakimoto³, K. Shiraiishi⁴

E-mail: sakakibara.soma@g.mbox.nagoya-u.ac.jp

1. 研究背景

次世代パワー半導体としてワイドギャップ半導体である GaN が注目を集めている。GaN は Si に比べて約 3 倍のバンドギャップを有し、絶縁破壊電界や電子飽和速度でも優れた物性値を有している。しかし、高品質の GaN 結晶の製造には多くの課題が残っている。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。関口ら[1]によって MOVPE 法の原料ガスである $\text{Ga}(\text{CH}_3)_3$ が気相中で化学反応を繰り返し GaH になることが示された。さらに、炭素の取り込みについては分解反応によって生成された CH_4 による影響か、もしくはガスの流れが最適でないために分解反応が不十分であることが要因ではないかと考えられている。この問題については分解した化学種がどのように分布しているのかを知り、適切な結晶成長条件を満たすよう、結晶装置内の流れを制御することが必要である。それゆえ、本研究はこの化学反応プロセスを流体のシミュレーションに組み込み、化学種の分布状態を調べることを目指して研究を行う。

2. 計算方法

GaN 結晶成長シミュレーションは、MOVPE 法の GaN 結晶成長製造装置である横型リアクターを 2 次元の二平行板間の流れとしてモデル化し、縦の幅を 1cm、横の幅を 17cm とした。結晶成長表面を下端中央付近にし、基板温度を 1300K 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 1000K で流入させて計算を行った。計算手法として、空間離散化に 2 次精度中心差分、時間発展手法に 1 次精度陽的オイラー法を用いた。代表的な流速を約 1.0 m/s とし、速度の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。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[2]したものを用いた。原料ガスとして $\text{Ga}(\text{CH}_3)_3$ と NH_3 、キャリアガスとして H_2 と N_2 を用いた。 H_2, N_2 の比はモル分率で 1 : 99 とし、化学種の移流拡散方程式を用いて計算を行った。

3. 計算結果

まず簡単のため $\text{Ga}(\text{CH}_3)_3$ から $\text{Ga}(\text{CH}_3)_2$ に分解する反応だけを考慮して計算を行った。この計算において化学反応の生成速度に必要な反応速度定数は Ern らデータを参考にした[3]。Fig. 1 及び Fig. 2 にほぼ定常状態となった時の温度分布と $\text{Ga}(\text{CH}_3)_3$ のモル分率を示す。温度分布は 8cm ~ 10cm の高温部分の熱が熱伝導と対流によって下流上部の向きに移動している。モル分率は中央のノズルから流入させた $\text{Ga}(\text{CH}_3)_3$ が流入部から基板間に流れ出ると壁鉛直方向に拡散している。さらに、高温部分では $\text{Ga}(\text{CH}_3)_3$ から $\text{Ga}(\text{CH}_3)_2$ に変化する分解反応が起き、モル分率が低くなっていることが分かる。その他の反応の計算結果については当日に議論する。

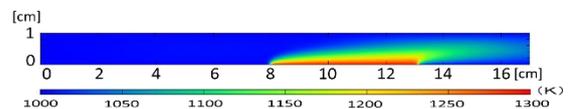


Fig. 1 Temperature in the steady state.

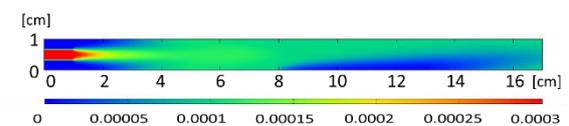


Fig. 2 $\text{Ga}(\text{CH}_3)_3$ mole fraction in the steady state

References

- [1] 関口 一樹 et al., Jpn. J. Appl. Phys. 57, 04FJ03 (2018).
- [2] P. A. McMurtry et al., AIAA J., 24, 962-970 (1986).
- [3] A. Ern et al., J. Comput. Phys., 126, 21-39 (1996).

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。