

MOVPE 法の GaN 結晶成長 3 次元マルチフィジックスシミュレーション

Three-Dimensional Multiphysics Simulation with GaN Crystal Growth in MOVPE Method

名大院工¹, 名大未来研², 九大応力研³ ○川上 賢人¹, 高村 昂¹, 草場 彰³,
芳松 克則^{2,1}, 岡本 直也¹, 寒川 義裕^{3,2}, 柿本 浩一³, 白石 賢二^{2,1}

Graduate School of Engineering, Nagoya Univ.¹, IMaSS, Nagoya Univ.², RIAM, Kyushu Univ.³

○K. Kawakami¹, S. Komura¹, A. Kusaba³,

K. Yoshimatsu^{2,1}, N. Okamoto¹, Y. Kangawa^{3,2}, K. Kakimoto³, K. Shiraishi^{2,1}

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

1. 研究背景

GaN は発光材料として広く利用されているが、パワーデバイスの材料としても注目を浴びている。しかし、その実用化には製造段階において高品質化・低コスト化などの課題がある。GaN 製造の工業的に一般的な MOVPE 法では様々な研究がなされており、GaN 結晶成長の第一原理計算や熱力学解析、流体力学などの計算科学は結晶成長の最適な条件予測において重要な役割を果たしている[1]。本研究では、熱力学解析と流体力学をカップリングしたシミュレーション手法を開発し、結晶成長への流れの影響を調べるとともに、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行っている。そして、最近このシミュレーション手法コードの3次元化と並列化に成功した。

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 3 次元の系で計算を行った。縦、横、高さの比が 6:16:1 の装置を想定した。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]を参照すること。代表的な流速を 1 m/s としたため、音速に比べ非常に小さく、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。用いた化学種は GaH, NH₃, H₂, N₂, CH₄ であり、これらの化学種の混合ガスを流入させ、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、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用いた。さらに、結晶成長表面を計算領域底面の中央にし、基板中心温度を 1300 K とした。また、基板回転を考慮するために、結晶成長表面に境界条件で速度を与えた。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。その際、基板上における各化学種の分圧、温度を用いて GaN の成長反応の熱力学解析を行い、GaH 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

H₂ キャリアガスでの計算結果の例を Fig.1 及び Fig.2 に示す。結晶成長表面での GaN 結晶成長の駆動力及び GaH の平衡分圧を算出した。駆動力は流入方向から流出方向にかけて小さくなったともに、結晶成長表面の境界で大きくなるような盃型になった。これは表面外からの化学種の拡散により GaH 分圧が大きくなったためと考えられる。平衡分圧は各化学種の分圧以上に温度の影響が大きく温度が高い点において平衡分圧も大きくなった。

基板回転の影響や異なる表面構造に対する結果など詳細については、講演当日に議論する。

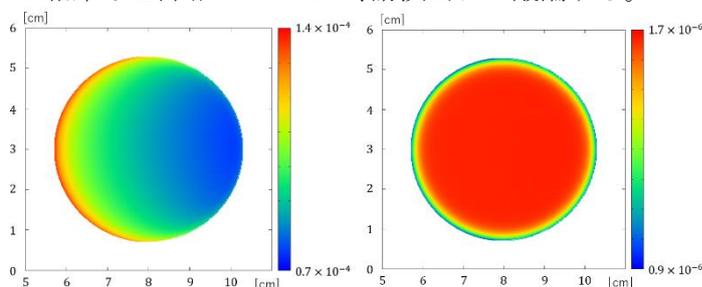


Fig.1: Driving force [atm].

Fig.2: Equilibrium partial pressure of GaH [atm].

Reference

- [1] A. Kusaba et al., Jpn. J. Appl. Phys. **56**, 070304, (2017).
- [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).

○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。