

27aA04

THM 法による化合物半導体結晶成長における固液界面形状制御に関する数値解析 Numerical simulation of solid/liquid interface shape control during the compound semiconductor crystal growth by the THM

静大・工 大久保俊介・西野 伸作・岡野 泰則

Department of Materials Science & Chemical Engineering, Shizuoka University,
Shunsuke OHKUBO, Shinsaku NISHINO, Yasunori OKANO

Abstract. Numerical simulation is conducted to study the control of solid/liquid interface shape during the compound semiconductor crystal growth by the Traveling Heater Method (THM). The ACRT is found to be useful for the control of convection and solid/liquid interface shape.

1. Introduction

Traveling Heater Method (THM 法)は溶液成長法の一つであり、化合物半導体及びそれらの混晶の厚膜やバルク単結晶の作製に適した方法である。結晶育成中、溶液中には温度差及び濃度差に基づく自然対流が発生し、溶液内温度や濃度、固液界面形状に影響を及ぼす。特に、固液界面形状は、結晶の品質を大きく左右する。そこで本研究では、THM 法により化合物半導体結晶を育成する際の固液界面形状の制御を目的とし、るつぼに回転を加えることによる対流制御の可能性について、数値解析を用い検討した。特に今回は、ACRT (Accelerated Crucible Rotation Technique)に着目し、溶液内対流や固液界面形状に及ぼするつぼ回転周期や振幅の影響について検討した。

2. Numerical simulation [1]

本解析では Ga 溶液から GaSb 結晶を育成する場合を想定した。るつぼに沿った温度は、実際の実験で測定した温度分布を用いた。溶液は、非圧縮性 Newton 流体とし、Boussinesq 近似を適用した。また、対流は 2 次元軸対称とし、層流とした。支配方程式は、連続式、Navier-Stokes 式、拡散方程式、エネルギー方程式を用いた。これらの式を、無次元化し、境界固定法 (BFC) を用いて座標変換し、有限差分法 (FDM) により離散化し、SOR 法にて数値解析を行った。固液界面を決定するために熱収支式と物質収支式を固液相図を用いて連立して解析した。るつぼ材としては SiO_2 を想定した。

3. Result and discussion

るつぼに 5rpm の定常回転を加えて 100 分経過したものを初期値とし、ACRT により非定常回転を加えながらさらに 50 分解析をした。最大回転数は、 ± 3 , ± 5 , ± 7 [rpm] と設定し、周期は 100 [sec] とした。Figure 1 は、 $Gr_r = 10^3 \cdot Gr_c = -10^4$ で計算した時の結果である。ACRT により溶液内の対流が強まり、二つの渦が発生しているのが分かる。また、上下の固液界面の凸度の向きが変化している。これは、るつぼ壁付近の対流が中心軸付近に比べて強くなっているためである。Figure 2 に固液界面形状に及ぼす ACRT の最大回転数の影響を示す。ACRT を用いることにより固液界面が滑らかになっているのが分かる。また、ACRT でも、最大回転数が大きい (± 7 rpm) とその効果が大きく、小さい (± 3 rpm) と固液界面の変化はあまり顕著ではない。また、周期を 50 から 200 [sec] に変化させ同様な計算を行ったが、その影響は顕著ではなかった。以上より、ACRT によって溶液内の対流を制御することができ、その結果、高品質な結晶を作製するのに最適な固液界面形状を得ることができることが示唆された。

[1] 西野伸作、大久保俊介、岡野泰則；化学工学シンポジウムシリーズ 72, p. 152-161 (2000).

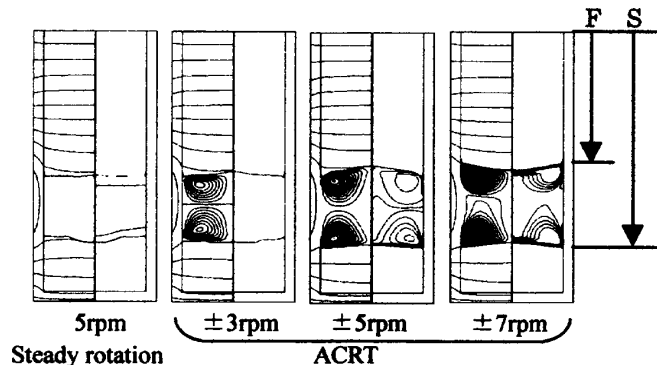


Figure 1 The effect of ACRT on the flow and concentration fields in the solution (150min). Left half: Isothermal & stream lines, Right half: Iso-concentration

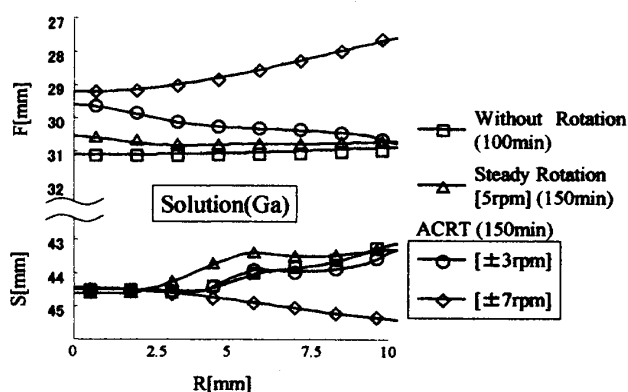


Figure 2 Effect of maximum rotation rate of ACRT on solid/liquid interface shape