

## 638 化合物半導体融液内振動現象における対流の影響

### Natural and Marangoni convections effect on the oscillatory phenomenon in the compound semiconductor melt

○鈴木貴弘(静大院) 梅村鎮基(静大院) 正 岡野泰則(静大工)

Department of Materials Science & Chemical Engineering, Shizuoka University,  
Johoku 3-5-1, Hamamatu 432-8561

#### 【Introduction】

化合物半導体バルク単結晶は、レーザー・ダイオード等の電子デバイス材料として用いられている。結晶作製時には様々な融液内対流が存在しており、この融液内対流により生じる非定常現象が結晶内の成長縞等、作製結晶の品質に悪影響を及ぼすことが知られている。従って、高品質単結晶を作製するには融液内で生じる現象を解明し、制御することが重要となる。本研究ではこの非定常現象を地上、宇宙実験[1]を模擬しての解析を行った。特に本解析では化合物半導体融液内における、自然対流とマランゴニ対流の共存効果により発生する非定常現象について着目した。

#### 【Numerical Method】

解析モデル図(GaSb/InSb/GaSb サンドイッチ構造試料[1])を Fig.1 に示す。解析は二次元矩形とし、対称軸より半分のみを解析対象とした。解析基礎式は以下に示す連続式(1)、Navier-Stokes 式(2)、エネルギー方程式(3),(4)、拡散方程式(5)である。これらの式を無次元化し、境界固定法による座標変換を行った後、有限差分法により離散化し、SOR 法を用いて陰的に解析した。物性値には、結晶に GaSb、溶液に InSb を用いた。固液界面は InSb-GaSb 擬似二元相図により濃度、熱のバランス式を用いて決定した。坩堝(石英)の外側における温度条件は、対称軸上に最高温度  $T_H$ [K]、端に最低温度  $T_C$ [K]とし、一定温度勾配  $1.23 \times 10^3$ [K/m]を維持したまま  $1.0$ [K/min]で温度上昇させ、解析の初期値は熱伝導のみより決定した温度分布を用いた。また、自由界面は溶液-るつば間に存在するとした。なお、本研究で使用する無次元数の定義を(6)に示す。無次元数の添え字 T は温度差、C は濃度差(GaSb 濃度)によることを示す。

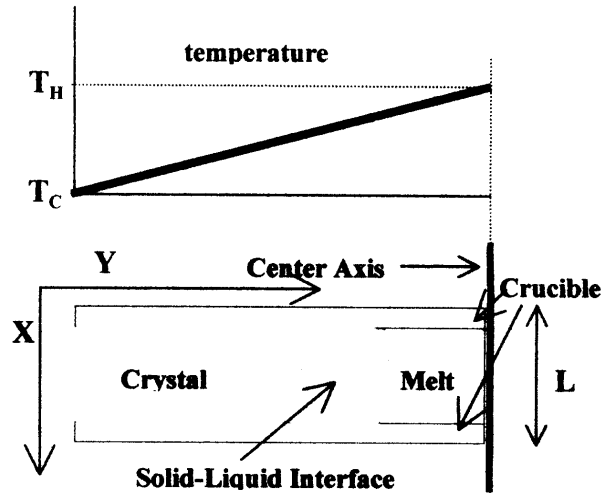


Fig.1 Configuration for the Analysis

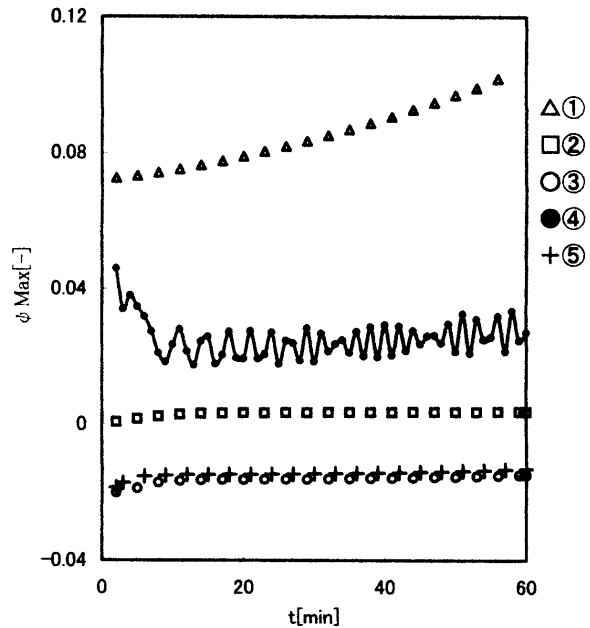


Fig.2 Time dependency of  $\phi$

Table 1 Grashof and Marangoni numbers in Fig.2

	$Gr_C$	$Gr_T$	$Ma_T$	$Ma_C$
①	0	0	$1 \times 10^3$	0
②	0	0	0	$1 \times 10^3$
③	$1 \times 10^6$	0	0	0
④	$1 \times 10^6$	0	$1 \times 10^3$	0
⑤	$1 \times 10^6$	$1 \times 10^4$	0	0

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla P + \mu \nabla^2 \vec{v} - g\beta_T \Delta T_l - g\beta_C \Delta C_l \quad (2)$$

$$\text{Liquid} \quad \frac{\partial T_l}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) T_l = \alpha \nabla^2 T_l \quad (3)$$

$$\text{Solid} \quad \frac{\partial T_s}{\partial t} = \alpha \nabla^2 T_s \quad (4)$$

$$\frac{\partial C_l}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) C_l = D \nabla^2 C_l \quad (5)$$

$$\left. \begin{aligned} Gr_T &= \frac{g\beta_T \Delta T L^3}{\nu^2}, Gr_C = \frac{g\beta_C \Delta C L^3}{\nu^2}, \\ Ma_T &= \frac{(\partial \sigma / \partial T) \Delta T L}{\mu \nu}, Ma_C = \frac{(\partial \sigma / \partial C) \Delta C L}{\mu \nu} \end{aligned} \right\} (6)$$

**[Results and Discussion]**

Fig.2 にマランゴニ対流のみ(①,②)、自然対流のみ(③)、マランゴニ対流と自然対流が共存する場合(④)、温度差と濃度差による自然対流が共存する場合(⑤)における最大流関数( $\phi$  Max)の経時変化を示す。なお、Table 1 に解析に用いたグラスホッフ数(Gr)、マランゴニ数(Ma)を示す。Fig.2 よりマランゴニ対流(①,②)あるいは自然対流(③,⑤)のみの場合には、このモデルにおいて、今回示したパラメータでは振動が起らないことが分かる。一方、マランゴニ対流と自然対流(④)が共存するときは振動が生じることが分かる。また、Fig.3 に両対流が共存する場合(④)の最大流関数( $\phi$  Max)の経時変化を詳しく見たグラフを示す。このグラフより、この両対流が存在する場合において周期的な振動(周期 23[sec],振幅  $1.3 \times 10^{-2}$ [-])が発生している事が判る。これは自然対流のみ、マランゴニ対流のみの場合には発生していないため、マランゴニ対流と自然対流の相互効果によって起こった振動であると考えることが出来る。Fig.4 に各パラメータにおける20[min]の時の流れ図(左半分)と温度分布図(右半分)を示す。自然対流とマランゴニ対流が共存する場合(④)の流れ図において流れ方向の異なる2つの対流が生じていることが判る。下部にある流れは、InSb 溶液に GaSb 結晶が溶けることによって生じる、濃度差による自然対流( $Gr_c=1 \times 10^6$ )であり、結晶に沿って上昇し、中心軸に沿って下降する。一方、上部にある流れは、GaSb 結晶と InSb 溶液の温度差によって起こるマランゴニ対流( $Ma_T=1 \times 10^3$ )であり、自由界面に沿って中心軸から結晶方向に流れ、自然対流とは逆向きの流れである。この2つの流れが互いに逆向きであるという事と、マランゴニ対流は自由界面付近に流れを引き起こすのに対し、自然対流は融液全体に流れを引き起こすといった流れの形態の違いが振動発生の一因であると考えられる。次に、この振動が発生した場合(④)と濃度差及び温度差自然対流が共存する場合(⑤)における濃度の経時変化をFig.5に示す。プロットした点は GaSb 結晶付近のろつぽに近い位置をとった。このグラフからわかる通り、流れに振動が生じない場合(⑤)では直線的に濃度が増加するのに対し、振動が発生した場合(④)ではゆらぎながら増加した。このことから、結晶作製時に流れの振動が生じる場合は濃度分布に影響を及ぼし、成長縞を発生させる原因となることが予想される。

**[Conclusion]**

- 温度差マランゴニ対流と濃度差自然対流が共存する場合の解析(④)では両対流の相互効果による振動が発生した。この振動が成長縞を引き起こし、結晶成長に悪影響を与えると考えられる。
- 流れの振動現象は2つの対流の存在のみに起因するのではなく、各対流の向き、形態に大きく関係しているということがわかった。

**[Reference]**

[1]Y.Hayakawa, Y.Okano et al., J.Crystal Growth, 213,40 2000).

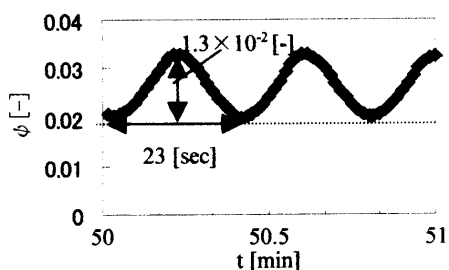


Fig.3 Time dependency of  $\phi$   
(④ $Gr_c=10^6$ ,  $Ma_T=10^3$ )

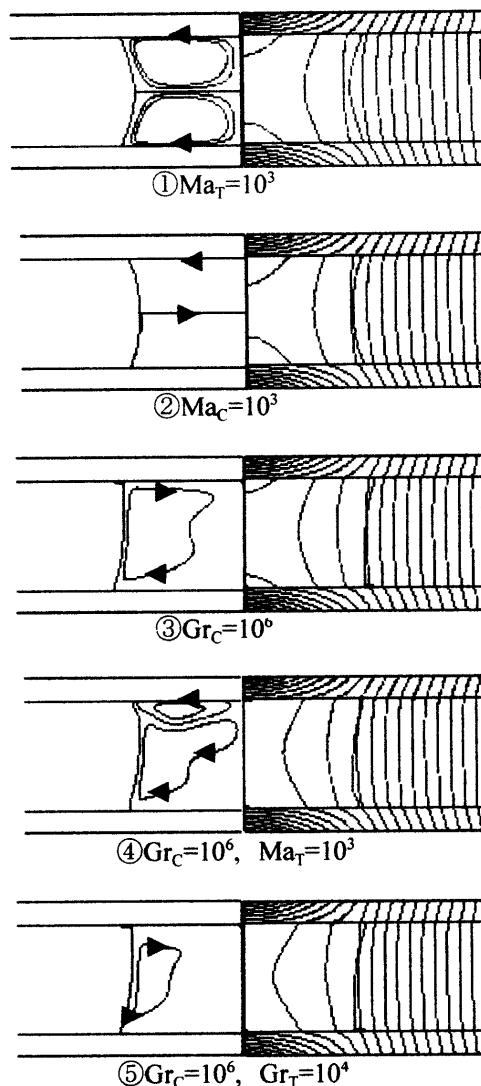


Fig.4 Coexistence effect of natural and Marangoni convections on  $\phi$  (left half) and temperature field (right half)  
( $\Delta \phi=0.01$ [-];  $\Delta T=1.2$ [K];20[min])

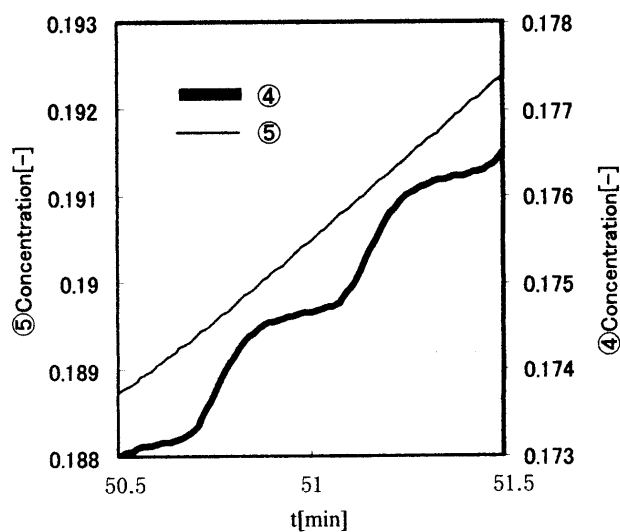


Fig.5 Time dependency of Concentration  
(④ $Gr_c=10^6$ ,  $Ma_T=10^3$  & ⑤ $Gr_T=10^4$ ,  $Gr_c=10^6$ .)