

640 VGF 法を用いた化合物半導体及び酸化物結晶成長時の 融液内対流制御に関する数値解析

Numerical study on the control of melt convection during crystal growth of the compound semiconductor and oxide by the VGF method

○近藤宏樹(静大院)・酒井奨(静大院)・正岡野泰則(静大工)

Hiroki Kondo, Susumu Sakai, Yasunori Okano

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

【Introduction】 垂直温度勾配凝固(VGF)法を用いた結晶成長において、高品質な結晶を作製するには融液内の温度、対流及び固液界面形状の制御が重要となる。しかし VGF 法はるつぼ内で結晶成長を行うため、成長のその場観察を行うのは困難であり、最適な成長条件を見つけるには多数の実験による試行錯誤が必要となりコスト的にも多くの損失が伴う。そこで数値解析により最適な成長条件を予測することは非常に有効となる。本解析では化合物半導体である InP 及び、酸化物である LiNbO₃(以下 LN)の物性を用いて最適な成長条件を模索するために、融液内対流及び固液界面形状に及ぼするつぼ蓋並びにるつぼ回転の影響について解析した。

【Numerical method】 Fig.1(a)に InP、(b)に LN の解析モデル図を示した。尚 LN に関してはるつぼ形状を変化させた解析も行った。

解析基礎式を以下に示す。

Energy equation

$$\frac{\partial T}{\partial t} + U \frac{\partial T}{\partial R} + W \frac{\partial T}{\partial Z} = \left[\frac{1}{R} \left(\frac{\partial T}{\partial R} + R \frac{\partial^2 T}{\partial R^2} \right) + \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} \right] \quad (1)$$

Navier - Stokes equation (R - Z)

$$\frac{\partial \Omega}{\partial \tau} + U \frac{\partial \Omega}{\partial R} + W \frac{\partial \Omega}{\partial Z} - \frac{V^2}{R} \frac{\partial}{\partial Z} = Pr \left\{ \frac{\partial}{\partial R} \left[\frac{\partial}{\partial R} (R\Omega) \right] + \frac{\partial^2 \Omega}{\partial Z^2} \right\} - Gr \cdot Pr^2 \frac{\partial T}{\partial R} \quad (2)$$

Navier - Stokes equation (θ)

$$\frac{\partial V}{\partial \tau} + U \frac{\partial V}{\partial R} + W \frac{\partial V}{\partial Z} + \frac{UV}{R} = Pr \left\{ \frac{\partial}{\partial R} \left[\frac{\partial}{\partial R} (RV) \right] + \frac{\partial V^2}{\partial Z^2} \right\} \quad (3)$$

$$\left(\Omega = \frac{\omega W^2}{\alpha} \quad U = \frac{1}{R} \frac{\partial \Psi}{\partial Z} \quad W = -\frac{1}{R} \frac{\partial \Psi}{\partial R} \right)$$

これらの解析基礎式を、境界固定(BFC)法用いて座標変換を施し、有限差分(FDM)法により離散化し、SOR 法により解析を行った。尚、物性は InP の解析において融液及び結晶部分には InP、封止剤には B₂O₃、るつぼには PBN、るつぼホルダーにはカーボンを用いた [1]。又、封止剤部分は完全透明体と考え、空間部分には Gebhart factor を用いて反射する輻射熱を考慮した。るつぼホルダー側面の縦方向温度勾配は 1.5K/mm とし、InP の融点を 1335K とした。

LN の解析においては融液及び結晶部分には LN、るつぼには白金を用い、るつぼ側面の縦方向温度勾配は 1.0K/mm とし、LN の融点を 1586K とした。

【Results and Discussion】

1) InP の解析

るつぼに蓋が無い時とある時の解析結果を Fig.2(a)と(b)に示した。又、蓋を付けて 5rpm の定常回転を加えた解析

を Fig.2(c)に示した。(a)と(b)を比較すると蓋を考慮したことにより、るつぼ内に熱がこもり融液内の温度が均一になるため、対流が弱くなっていることが分かる。又、(c)より蓋を付けた状態であるつぼに 5rpm の回転を加えると更に対流が弱くなっていることが分かる。これは、るつぼ回転により自然対流が抑制されたためと考えられる。Fig.3 にこの時の固液界面位置及び形状を示した。蓋が無い時とある時とを比較すると、蓋がある時は無い時と比べて固液界面の位置が下がっていることが分かる。これは蓋により上部に逃げる熱が反射され、るつぼ内にこもるためと考えられる。又、るつぼを回転させると固液界面形状がより平坦になっていることが分かる。これはるつぼ回転により自然対流が弱められ、下向きの流れが弱くなったためと考えられる。Fig.4 に蓋が無い時とある時の中心軸での結晶成長速度(温度降下速度: 3.0K/hr)を示した。Fig.4 より蓋がある時は結晶の成長速度が遅くなることが解析された。これは熱がるつぼ内にこもるため、蓋が無いときと比べてるつぼ内の温度が下がりにくくなるためと考えられる。

2) LN の解析

Fig.5 にるつぼの形状を変えたとき、及びそれぞれのるつぼに 5rpm の回転を加えた時の解析結果を示した。Fig.5 より、いずれのるつぼ形状においても、るつぼ回転により対流が弱くなっており InP の解析と同様に自然対流が抑制されたと考えられる。Fig.6 にこの時の固液界面位置及び形状を示した。るつぼ形状による比較を行うと Conventional るつぼの時は Flat bottom るつぼと比べて固液界面位置が上がっている事が分かる。これは Conventional るつぼの方が、Flat bottom るつぼに比べ、結晶部分の体積が少ないため、その分の熱容量に差が出来るためと考えられる。次にこれらのるつぼに 5rpm の回転を加えると、Flat bottom るつぼの時はるつぼ回転により形状が平坦に近づくという InP と同様な結果が得られたが Conventional るつぼの時は回転を加えても固液界面形状は変化しなかった。Fig.7 にそれぞれのるつぼ形状での結晶の成長速度(温度降下速度: 1.5K/hr)を示した。両者を比較すると 100 分までは成長速度に差が見られたが、それ以降はあまり差が見られなかった。

【Conclusions】 VGF 法による結晶育成の数値解析を行い、以下の事を明らかにした。

- るつぼ蓋を用いると、るつぼ内に熱がこもり融液内の縦方向温度勾配が緩やかになるため融液内対流が弱まり、結晶の成長速度が遅くなる。
- るつぼ回転により自然対流が抑制され融液内対流が弱まる。又、固液界面形状が平坦に近づく。
- るつぼ形状を Flat bottom から Conventional に変化させると固液界面位置が上昇する。
- Flat bottom と Conventional るつぼにおいて結晶の成長速度には余り差が見られない。

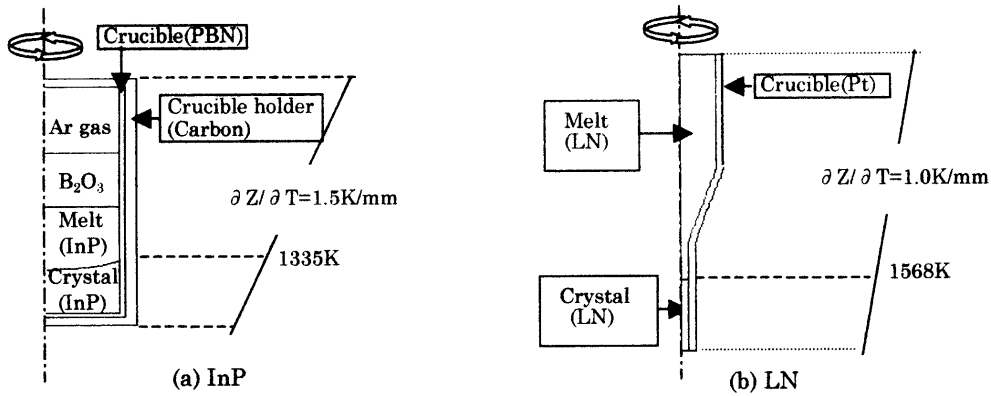


Fig.1 Configuration for analysis

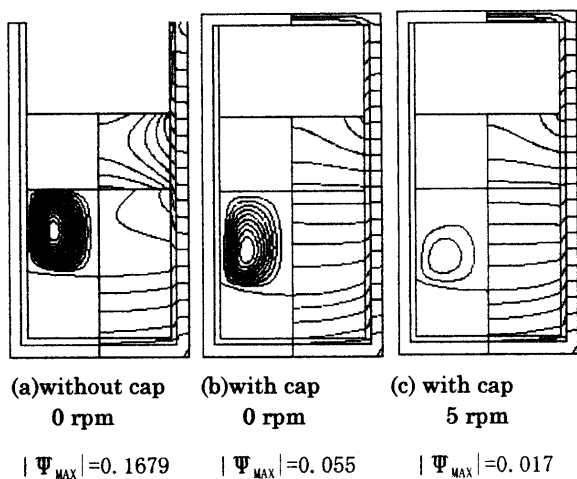


Fig.2 Effect of carbon cap and crucible rotation on melt flow(left-half) and temperature fields (right-half) in the InP growth

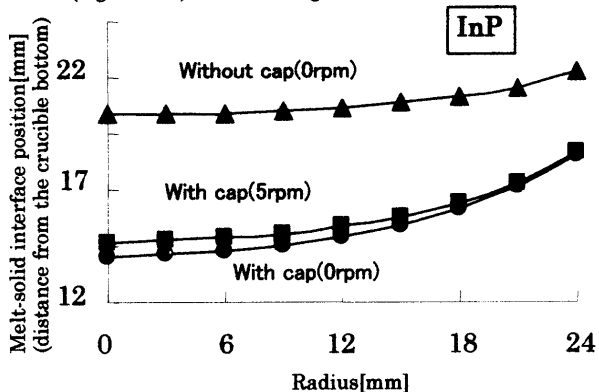


Fig.3 Effects of cap and crucible rotation on melt-crystal interface shape

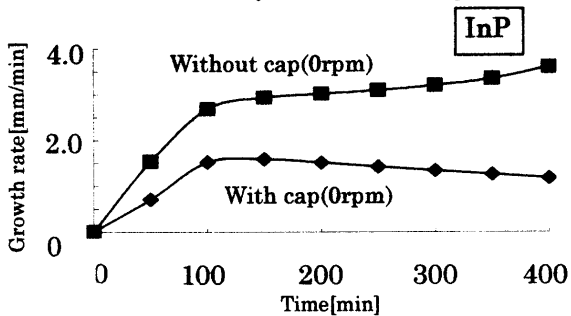


Fig.4 Effect of cap on growth rate along center axis

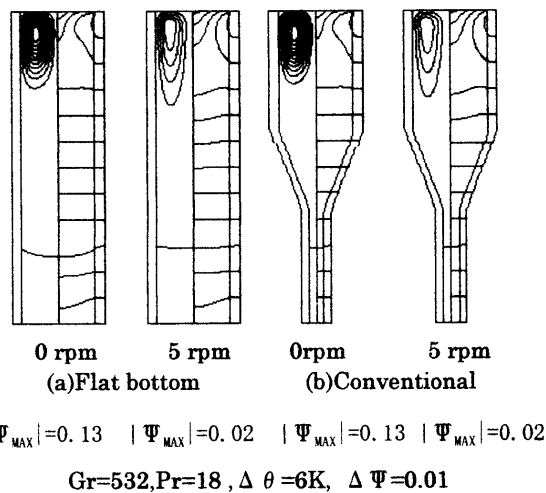


Fig.5 Effect of crucible shape and crucible rotation on melt flow(left-half) and temperature fields (right-half) in the LN growth

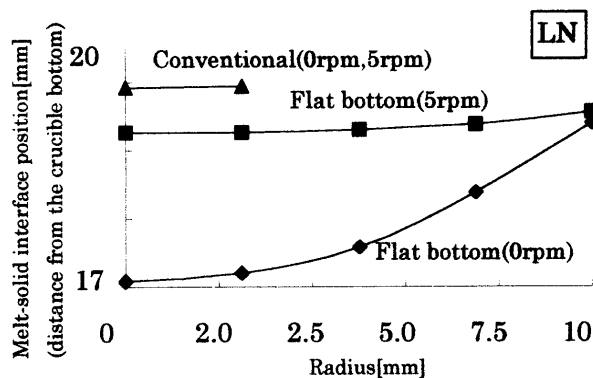


Fig.6 Effects of crucible shape and crucible rotation on melt-crystal interface shape

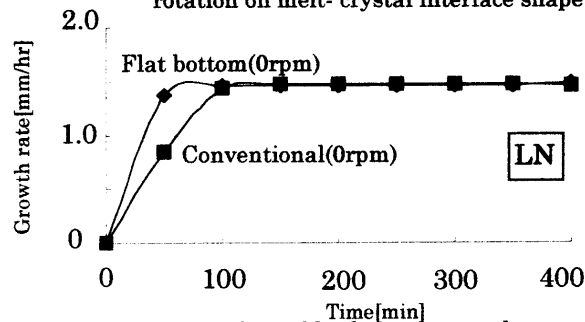


Fig.7 Effect of crucible shape on growth rate along center axis

1) Y.Okano et al., Int.J. Numerical Methods for Heat&Fluid Flow, 8 (1998) 956-968.