

## Virtual-Reactor PVT SiC edition Version 7.3

### 新機能のご案内

Virtual-Reactor は、気相からのバルク結晶、及びエピ成長シミュレーションソフトウェアです。Virtual Reactor は各種バルク結晶成長方法、及び結晶種に対応しており、リアクター内の温度分布、対流パターン、各種成分濃度分布、結晶内熱応力分布、結晶形状変化、転位密度分布などを求めることが出来ます。

#### 主な新機能、及び改善点

##### 1) Unsteady Module における新機能

- 1-1) Alexander Haasen Model による冷却中の結晶内の転位と応力の解析  
\* Unsteady module は別途ライセンスが必要となります。

##### 2) Basic Module Solver における新機能、及び改良

- 2-1) 各成長時間における流入ガス流量指定機能
- 2-2) Thermal Gap における混合ガスの熱伝導率の考慮
- 2-3) 原料パウダーの空隙率の変化に伴う熱伝導率の変化の考慮
- 2-4) 原料パウダー中のガス流計算の収束性の安定化

##### 3) その他の新機能、及び改良

- 3-1) 不均一な計算格子（節点）の作成機能
- 3-2) 水平方向へのブロックの移動
- 3-3) 2次元残差分布の出力

## 1. Unsteady module における新機能

### 1-1. Alexander Haasen Model による冷却中の結晶内の転位と応力の解析

Ver7.3(Unsteady Module)より、冷却中の結晶内の応力解析で Alexander Haasen model(AH model)を考慮する事が出来ます。AH model を使用する事により、せん断応力、及び基底面転位の発生による結晶内の塑性変形を考慮した冷却中の応力解析を行う事が出来ます。冷却中の結晶内の残留応力や最終的な結晶内の転位密度に対する冷却レシピ（冷却速度）の影響を検討、最適化する事が可能です。\*Unsteady Module は、別途ライセンスが必要となります。

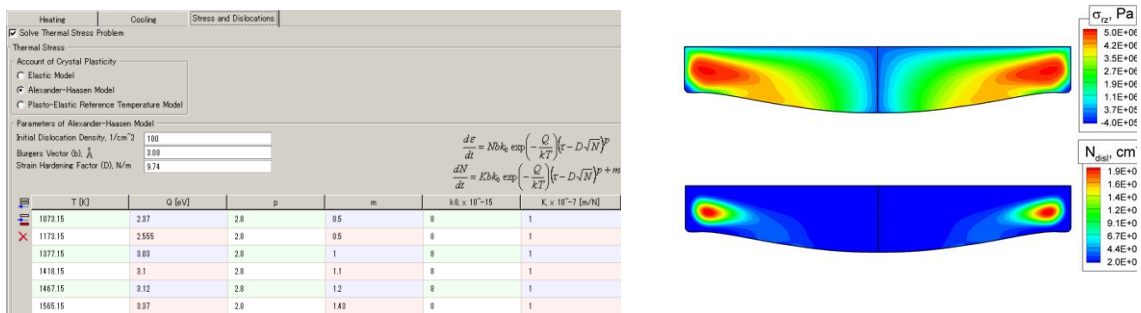


図 1. AH model パラメータ設定画面（左図）と計算結果（結晶内の残留応力と転位密度分布）（右図）

## 2. Basic module における新機能、及び改良

### 2-1. 各成長時間における流入ガス流量指定機能

Ver7.3 より、プロセス中の各成長時間における流入ガス条件（流量）を指定した計算を行う事が出来ます。例えば、成長時間 0 時間のアルゴンガス流量を 1000sccm、成長時間 1 時間のアルゴンガス流量を 2000sccm の様に成長時間毎の流入ガス流量を変更する事が出来ます。

Boundary condition/Inlet で、各流入ガスに対して変数(V1,V2,V3,...)を定義します。Process タブ/各成長時間の設定で、ガス流量の変数 V1,V2..に対して流量を指定して下さい。

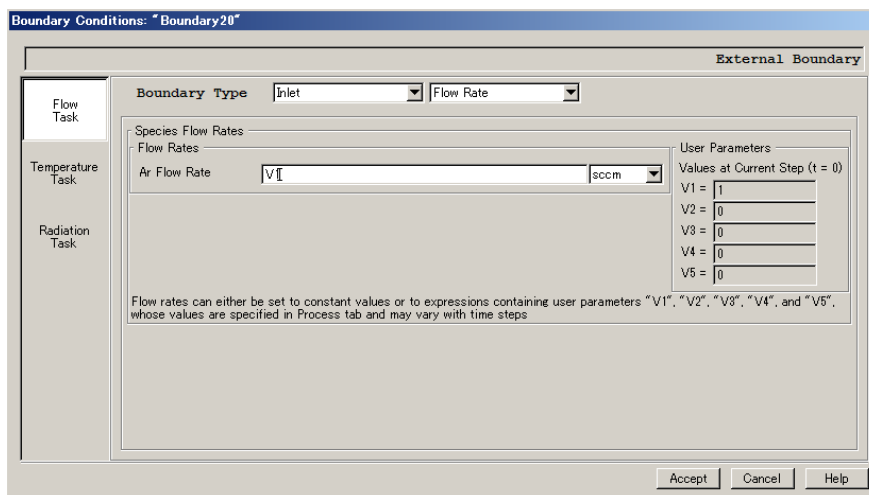


図 2. Inlet 境界条件設定における流量変数(V1)の設定画面

## 2-2. Thermal Gap における混合ガスの熱伝導率の考慮

Ver7.3 より、Thermal Gap において混合ガスの熱伝導率を考慮する事が出来ます。従来のバージョンの Thermal Gap では、隙間のガス領域の熱伝導率としてアルゴンの熱伝導率が自動的に考慮されました。現バージョンからは、ユーザー指定の混合ガス（例：ある比率の Si, SiC2, Si2C, Ar 混合ガス）の熱伝導率を考慮する事が可能です。

事前に有る割合の混合ガス材料を Database タブにて作成しておいて下さい。次に、Thermal Gap 境界条件において、上記で作成した混合ガスを選択して下さい。

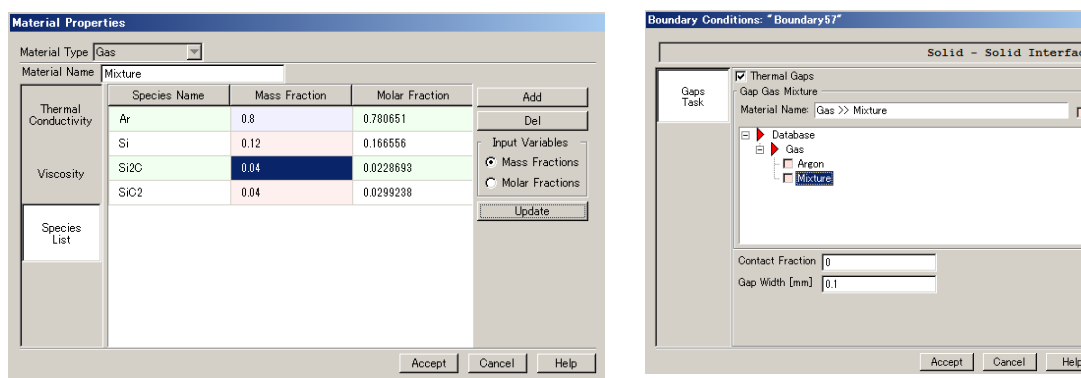


図 3. 混合ガス設定画面（左図）、Thermal Gap 設定画面（右図）

### 2-3. 原料パウダーの空隙率の変化に伴う熱伝導率の変化の考慮

Ver7.3 より、成長中の原料パウダーの空隙率の変化に伴って原料パウダーの熱伝導率の変化が考慮されます。従来のバージョンでは、初期に設定した空隙率が熱伝導率に使用されてきました。

この改良によって、より精度よく成長中の原料パウダーの熱伝導率を推算する事が可能です。

このモデルを有効にする場合は、Model Parameters/Powder Evolution/"Thermal Conductivity Variation"にチェックを入れて下さい。

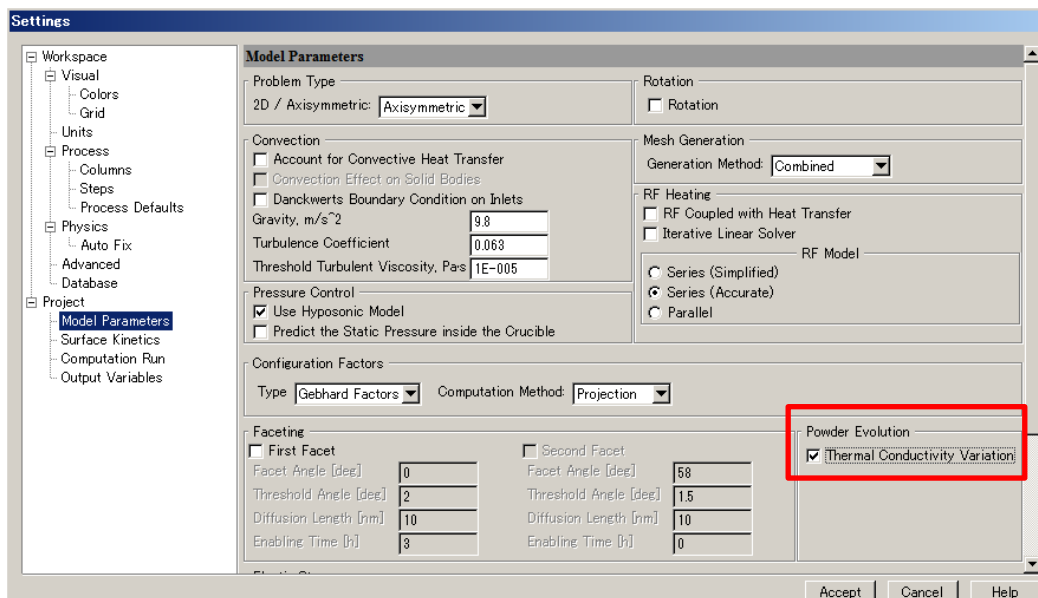


図 4. 空隙率の熱伝導率に対する影響を考慮する場合の設定画面

### 2-4. 原料パウダー中のガス流計算の収束性の安定化

Ver7.3 より、原料パウダー内の流れ（物質輸送）計算の収束性が改善されました。特に、二次結晶化した領域（空隙率の小さい領域）付近での流計算の安定性が改善されています。

### 3. その他の新機能、及び改良

#### 3-1. 不均一な計算格子（節点）の作成機能

Ver7.3 より、計算格子（メッシュ）作成において不均一な計算格子（節点）を作成する事が出来ます。従来では、境界（エッジ）に対して均一な幅で節点（ノード点）を作成していましたが、現バージョンよりノード点を片側に寄せたり、両側に寄せたりすることが出来ます。

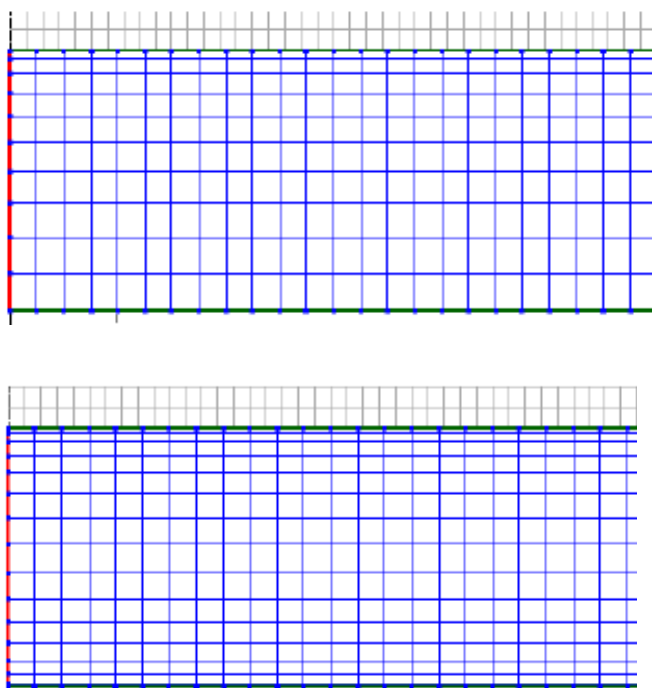


図 5. 上部にノード点を寄せた場合の計算格子（上図）、上下に寄せた場合の計算格子（下図）

#### 3-2. 水平方向へのブロックの移動

Ver7.3 より、水平方向（x 軸方向）へブロックを移動させる事が出来ます。従来のバージョンでは、垂直方向（y 軸方向）のみ対応していましたが、現バージョンより水平方向へも移動させる事が出来ます。

これは、通常の高時間成長の計算ではなく、装置部材の径を変えた場合の影響を検討する場合（ケーススタディー）に有効です。

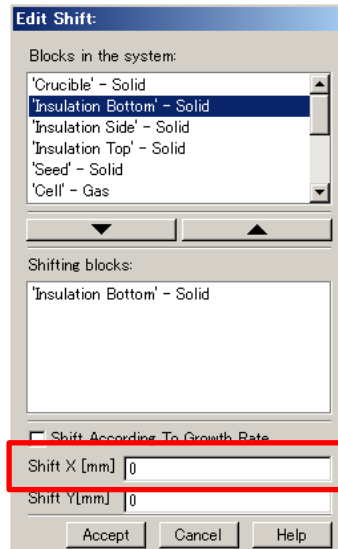


図 6. Process/Shift Blocks/"Edit Shift"での水平方向の移動距離設定画面

### 3-3. 2次元残差分布の出力

Ver7.3 より、温度・流速・化学種の残差の二次元分布を出力可視化する事が出来ます。可視化する事によって、収束性の悪い領域を明確にすることが出来、その部分のメッシュの修正等に役立ちます。

出力させる場合は、計算実行の前に VR メニューバー/Options/Output Variables/2D Visualization/"Residuals"にチェックを入れて下さい。

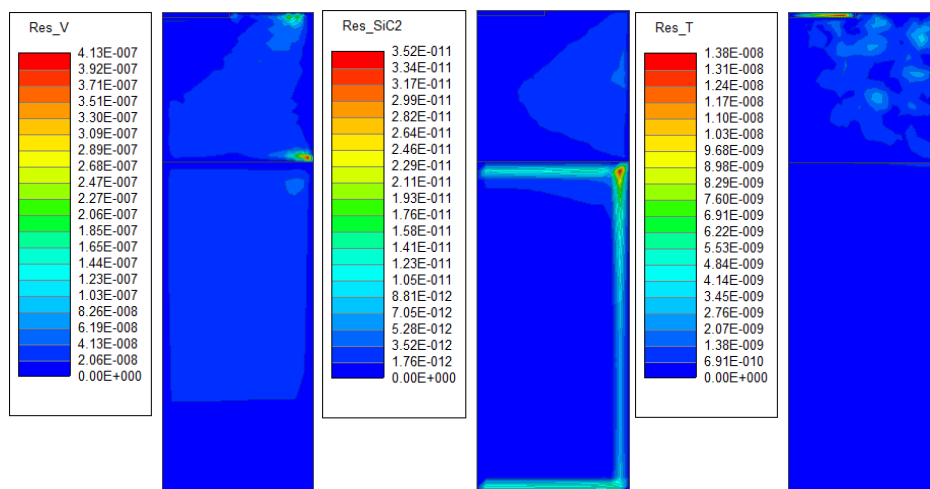


図 7. 成長層内の流速（左図）、化学種（中図）、温度（右図）の残差分布