

Virtual-Reactor PVT-SiC edition Version 7.6

新機能のご案内

Virtual Reactor は気相からのバルク結晶およびエピ成長シミュレーションソフトウェアです。各種バルク結晶成長方法およ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、成長速度分布等を求めることができます。

主な新機能、及び改善点

1. バルク成長表面のポリタイプの予測機能追加

バルク成長表面のポリタイプの予測機能が追加されました。

2. Semi-closed chamber モデルへの名称変更

「Tightly Closed Chamber Model」から「Semi-closed chamber Model」に変更になりました。※一部仕様変更あり

3. 温度差を指定した境界温度の設定機能の追加

一定値を加算した温度条件を容易に設定できるようになりました。

4. DXF ファイルの作成

作成したモデルを DXF ファイル形式でエクスポートできるようになりました。

5. 形状作成ツール Copy Boundaries の改良

Copy Boundaries で等間隔で繰り返し並ぶパターンについて、繰り返し数指定による作成が可能になりました

6. 変数を使用した回転数の設定機能の改良

回転数に変数(V1~V5)を設定できるようになりました。

7. Process タブ、可視化処理におけるコメント機能の追加

Process タブ、可視化処理において計算条件などの識別用のコメントを追加できるようになりました。

1. バルク成長表面のポリタイプの予測機能追加

SiC バルク結晶の成長表面におけるポリタイプ(6H-SiC、4H-SiC、3C-SiC、15R-SiC)について、核形成 Gibbs 自由エネルギーが計算されるように機能改良されました。

Gibbs 自由エネルギーが低いポリタイプの核形成が起こりやすいと考えられるため、本機能より結晶成長中のポリタイプの変化について考慮することができます。また本機能は SiC 種結晶のポリタイプ、極性、ドーピングについても考慮することが可能です。

SiC Polytypes			
Parameters of the SiC Polytypes			
3C-SiC Lattice a, Å: 3.0827 h, Å: 2.517 Formation Enthalpy, kJ/mol $\Delta H^{\circ} - \Delta H^{\circ}_{4H}$: 2.6 Surface Energy $\sigma(111)$, J/m ² : 1.638 $\sigma(-1-1-1)$, J/m ² : 0.775 Doping by N $\Delta\sigma(111)$, J/m ² : 1.92 $\Delta\sigma(-1-1-1)$, J/m ² : 4.24 Doping by Al $\Delta\sigma(111)$, J/m ² : -0.41 $\Delta\sigma(-1-1-1)$, J/m ² : 2.01	4H-SiC Lattice a, Å: 3.073 h, Å: 2.51325 Formation Enthalpy, kJ/mol $\Delta H^{\circ} - \Delta H^{\circ}_{4H}$: 0 Surface Energy $\sigma(0001)$, J/m ² : 1.8 $\sigma(000-1)$, J/m ² : 0.75 Doping by N $\Delta\sigma(0001)$, J/m ² : 2.97 $\Delta\sigma(000-1)$, J/m ² : 2.32 Doping by Al $\Delta\sigma(0001)$, J/m ² : -1.5 $\Delta\sigma(000-1)$, J/m ² : 2.55	6H-SiC Lattice a, Å: 3.0806 h, Å: 2.51955 Formation Enthalpy, kJ/mol $\Delta H^{\circ} - \Delta H^{\circ}_{4H}$: 1.2 Surface Energy $\sigma(0001)$, J/m ² : 1.753 $\sigma(000-1)$, J/m ² : 0.76 Doping by N $\Delta\sigma(0001)$, J/m ² : 2.62 $\Delta\sigma(000-1)$, J/m ² : 3.02 Doping by Al $\Delta\sigma(0001)$, J/m ² : -1.15 $\Delta\sigma(000-1)$, J/m ² : 2.38	15R-SiC Lattice a, Å: 3.073 h, Å: 2.51 Formation Enthalpy, kJ/mol $\Delta H^{\circ} - \Delta H^{\circ}_{4H}$: 0.6 Surface Energy $\sigma(0001)$, J/m ² : 1.77 $\sigma(000-1)$, J/m ² : 0.756 Doping by N $\Delta\sigma(0001)$, J/m ² : 2.76 $\Delta\sigma(000-1)$, J/m ² : 2.74 Doping by Al $\Delta\sigma(0001)$, J/m ² : -1.29 $\Delta\sigma(000-1)$, J/m ² : 2.45
Diffusion Coefficient $D(T) = A \cdot \exp\left(-\frac{T_0}{T}\right)$ A, cm ² /s: 1900 T _a , K: 62600			
Growth Parameters Substrate Polytype: 4H-SiC Polarity: C-face (000-1) Doping: None			

図. メニューバー/Options/SiC Polytypes Parameters (タブ内のパラメータは任意設定が可能)

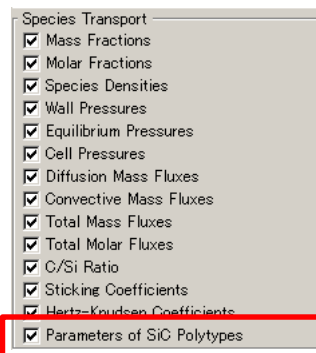
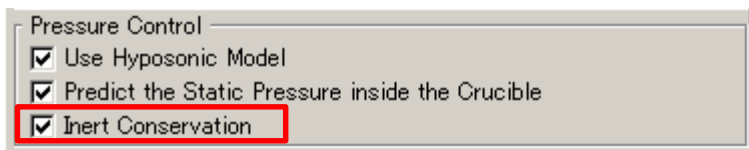


図. Output Variables/1D Visualization の出力項目

2. Semi-closed chamber モデルへの名称変更

Ver.7.5 で追加された「Tightly closed chamber model」の名称が「Semi-closed chamber model」に変更になりました。本モデルを適用することで Mass Transport Stage の計算中の制御ガスの質量を保ったまま計算を実施することが可能です。

前バージョンでは「Sealing Parameter」としてガスの初期組成を計算する温度、外圧を任意設定していましたが、本バージョンより Heat Transfer 計算で得られた温度と Process タブで設定した圧力値を使用してガスの初期組成を計算する仕様に変更されております。



本機能は、メニューバー/Options/Model parameters の「Pressure Control」の「Inert Conservation」にチェックをいれることで有効になります。（「Predict the Static Pressure inside the Crucible」にチェックを入れた場合に「Inert Conservation」へのチェックが可能となります。

3. 温度差を指定した境界温度の設定機能の追加

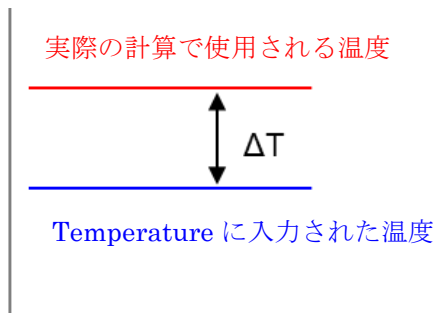
境界における温度条件の設定方法が追加されました。

通常境界における温度条件の設定からに変更を加える際に、「Increment Temperature」機能を使用することで、設定した温度条件に対する温度差(ΔT)を指定した計算が可能になります。(「Increment Temperature」機能を有効にした場合は、設定した温度条件に温度差(ΔT)が付加された境界温度での計算が実行されます。尚、 ΔT 値にマイナスの値を入力すると設定した温度条件から減算されます。)この機能は複雑な温度プロファイルを考慮した計算に対して、温度プロファイル形状を維持した別の計算を実施したい場合などに有効です。

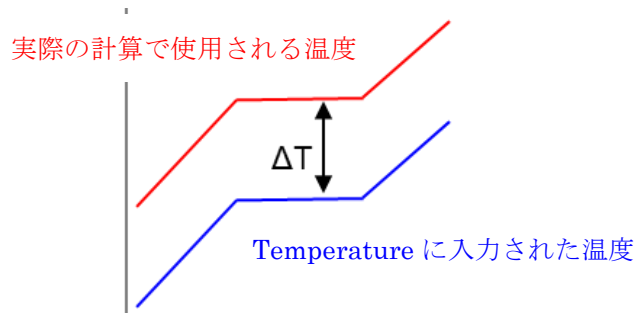
【Temperature : 「Constant」、「Piecewise Linear」、「Piecewise Constant」で条件指定した場合】

Boundary に設定した温度条件に対して、 ΔT で入力した値が加算された値が Boundary の境界温度条件となります。(ΔT 値がマイナス値の場合は減算)

(例 1) constant

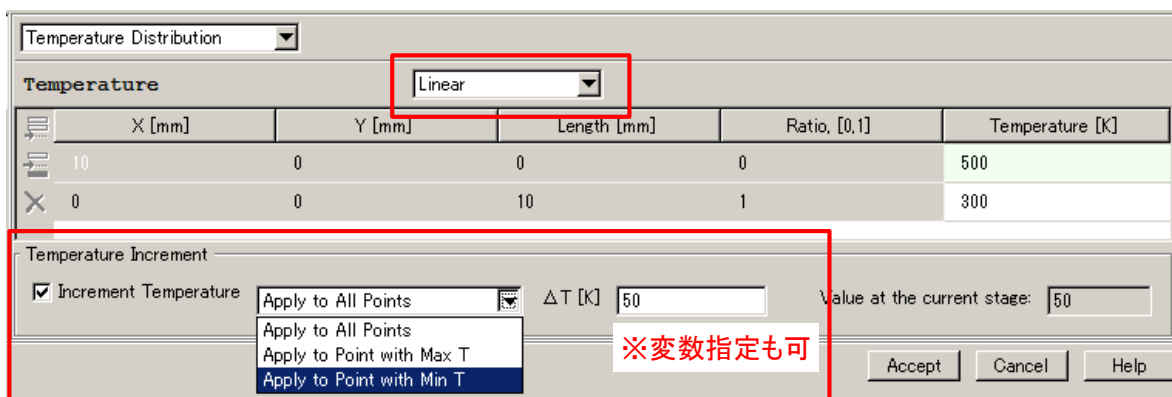


(例 2) Piecewise Linear

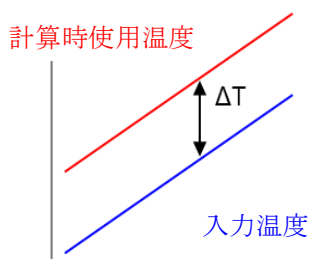


【Temperature : 「Linear」で条件指定した場合】

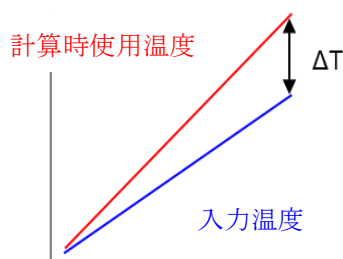
温度条件の設定で「Linear」を選択した場合は、設定条件全体、最大もしくは最小設定温度のみへの加算の三通りから選択できます。



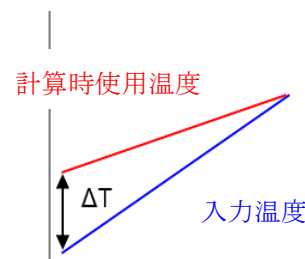
・Apply to All Points



・Apply to Point with Max T(※)



・Apply to Point with Min T(※)



※設定温度がどちらも同じ値の場合は Boundary の起点 (Max T 設定) もしくは終点 (Min T 設定) のいずれか片方に ΔT が加算されます。

「Increment Temperature」の ΔT には変数(V1~V5)も指定が可能です。たとえば長時間成長プロセス中の温度変化や温度条件の Parametric Study などを実施する場合などは、プロセスタブの「User Defined Parameters」の変数部分を利用することで、境界条件の温度設定が容易に実行できます。

(例) $T=300\sim 500[K]$ 、 $\Delta T=V1*100[K]$ (Apply to All Points)、 $V1=0, 1, 2$ と設定した場合

Temperature Distribution

Temperature: Linear

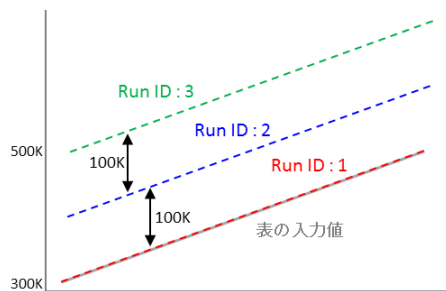
X [mm]	Y [mm]	Length [mm]	Ratio, [0,1]	Temperature [K]
10	0	0	0	300
0	0	10	1	500

Temperature Increment

Increment Temperature Apply to All Points $\Delta T [K]$ $V1*100$ Value at the current stage: 0

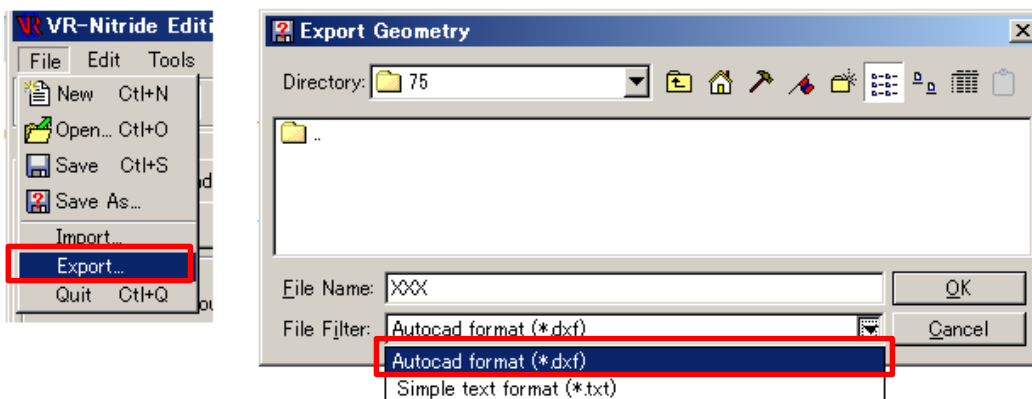
Run ID	Pressure [Pa]	Shift [mm]	Fitting (On/Off)	V1
0	50000	-	Off	0
1	50000	-	Off	1
2	50000	-	Off	2

各 Run ID での Boundary の温度条件プロファイル



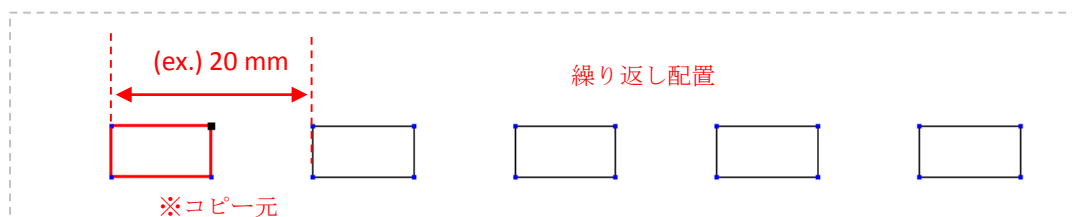
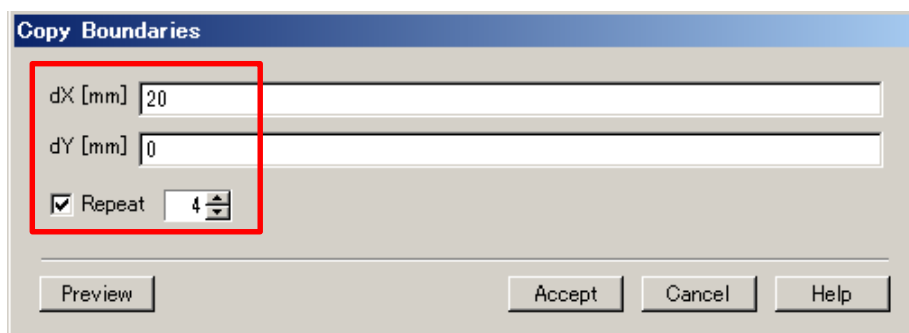
4. DXF ファイルへのエクスポート機能の追加

作成した project ファイルをこれまでの TXT ファイルだけでなく、DXF ファイルとして出力できるようになりました。メニューバー /File /Export より DXF ファイルを作成することができます。



5. Copy Boundaries (配列)

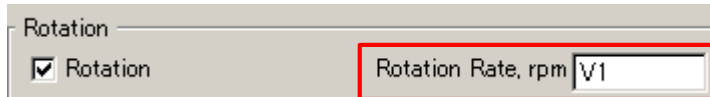
等間隔で繰り返し並ぶパターンについて、繰り返し数指定による作成が可能になりました。



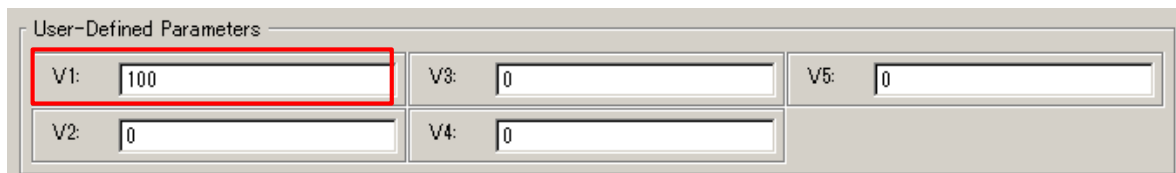
6. 変数を使用した回転数の設定機能の改良

回転数に変数(V1~V5)を設定できるようになりました。

・メニューバー/Options/Model parameters : Rotation



・プロセスタブ// Edit Step : User -Defined Parameters



回転数に変数を設定した場合、プロセスタブで設定する各 Step において、「User Defined Parameters」の変数部分を利用することで、回転数の Parametric Study を容易に実行できます。

7. Process タブ、可視化処理におけるコメント機能の追加

Process タブ、可視化処理において計算条件などの識別用のコメントを追加できるようになりました。このコメントによりパラメトリックスタディ時の各計算条件の識別等にご利用いただけます。

・Process タブ// Create Steps : User -Comments

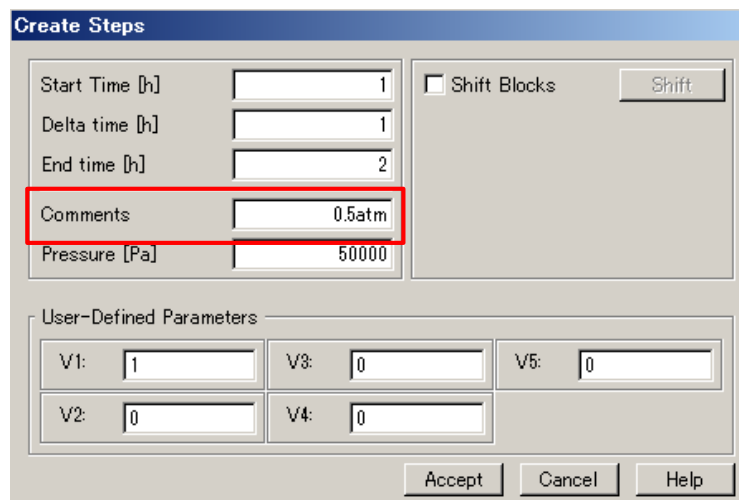


図. コメント挿入の画面

・メニューバー/Options/Process Visualization -□Comments

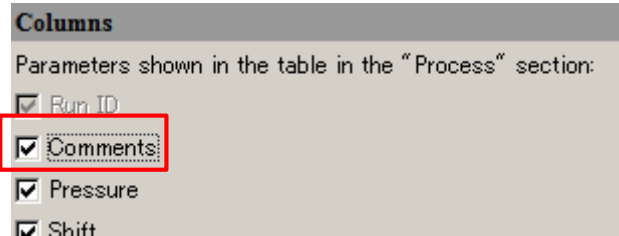


図. Process タブへの出力項目選択の画面

・メニューバー/Options/Output Variables –Run Identification

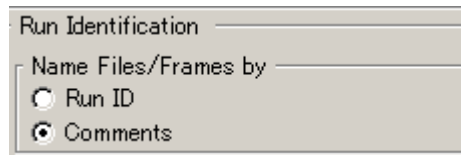


図. 可視化処理での識別方法の選択(Run ID or Comments)の画面

Process タブでのコメントの表示

Run ID	Comments	Pressure [Pa]	Shift [mm]	Fitting (On/Off)	V1
1	1atm	100000	-	Off	15
2	0.5atm	50000	-	Off	15
3	10slm for N2	100000	-	Off	15

図. Process タブ画面

可視化処理の計算切り替え (Comment 表示の場合)

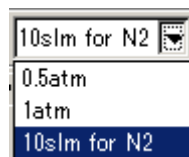


図. 1D, 2D Visualization での計算切り替え部分 (Comments 表示の場合)

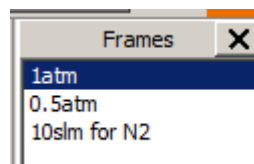


図. View 2D での計算(Frames)切替部分 (Comments 表示の場合)