

Virtual-Reactor PVT-SiC edition Version 8.1.6

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. 窒素ガスによる窒素ドーピングの計算機能の追加

SiC への窒素ドーピングモデルが追加されました。

2. 境界条件 Porous Wall model の改良

坩堝内壁/ガスの境界条件モデル“Porous Wall”が改良されました。

3. 応力の計算結果出力に関する改良

応力の計算結果で、固体境界の応力値をプロットできるように改良されました。

4. 結晶多型の予測モデルの改良

結晶多型の予測モデルが改良されました。

5. 貫通転位計算の出力に関する改良

Threading Dislocation モジュールを使用した貫通転位の計算結果を View2D で可視化処理できるように改良されました。

6. 長時間成長 (Long term growth) における結晶形状自動作成の安定化

結晶形状の自動作成プロセスが改良され、結晶形状作成の安定性が向上しました。

7. 考慮できる変数の数の増加

考慮できる変数(User-Defined Parameters)の数が 10 個までに増加しました。

1. 窒素ガスによる窒素ドーピングの計算機能の追加

SiC 結晶への窒素ドーピングモデルが追加されました。坩堝内に、窒素またはアルゴン・窒素混合ガスを考慮することにより、窒素ガスの輸送及び結晶への取り込みが計算されます。計算結果として、成長界面で取り込まれた窒素濃度をプロットすることができます。

詳細は、VR-PVT_SiC_ver8.1.6_機能紹介の資料をご参照ください。

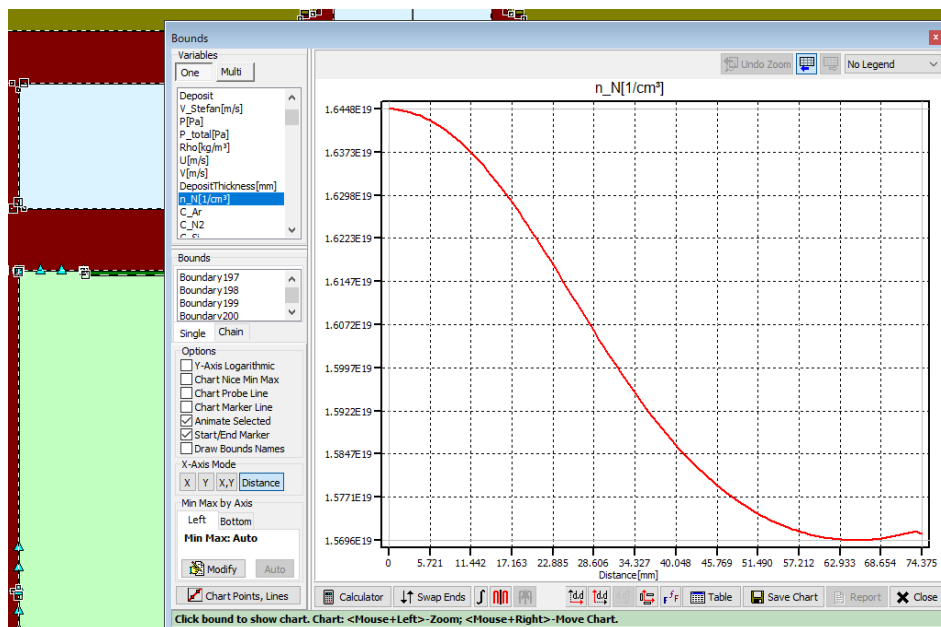


図 1.View2D における結晶界面上の窒素濃度プロット

2. 境界条件 Porous Wall model の改良

坩堝内壁/ガスの境界条件モデルである“Porous Wall”が改良されました。アルゴン単体のガスに加えて、アルゴン・窒素混合ガスも考慮することができます。

また、Porous Wall の境界条件を使用した際の計算の収束性が改善されています。低い Inertial Factor でも安定して収束速度を上げることができます。

3. 応力の計算結果出力に関する改良

応力計算を考慮している固体ブロック境界上の応力値を View2D でプロットすることができるように改良されました。View2D/Bounds オプションで、固体境界を選択してプロットしたい応力を選択してください。

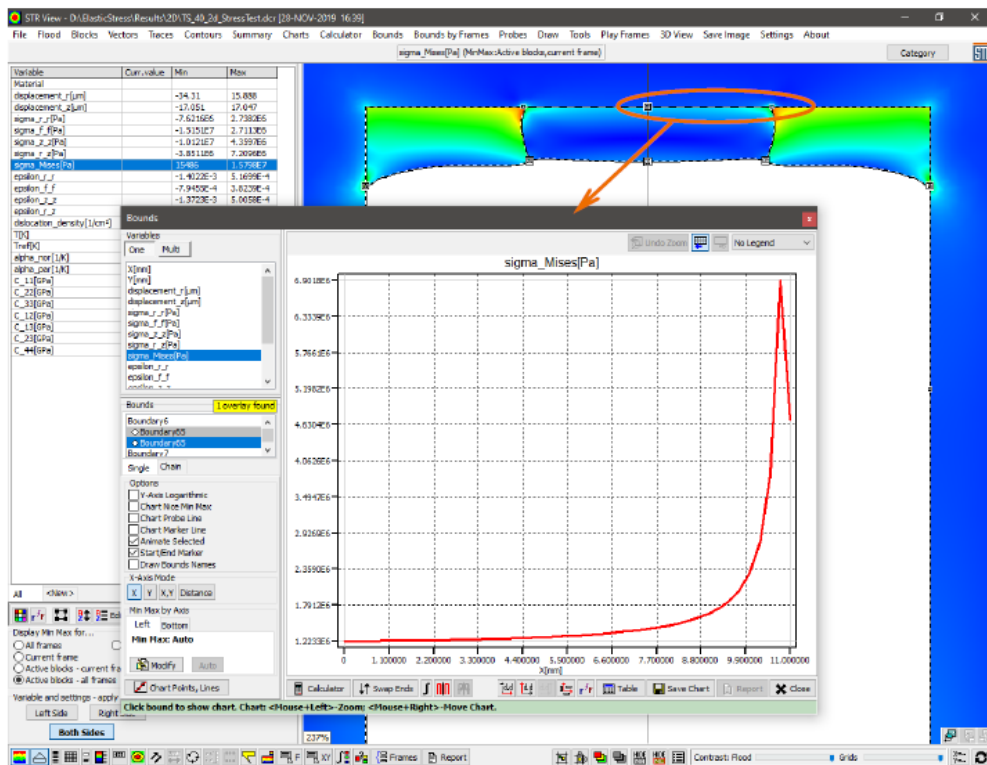



図 2.View2D における結晶/坩堝境界の応力値プロット

4. 結晶多型の予測モデルの改良

結晶多型 4H, 6H, 15R-SiC に関して、基板結晶の多型、面方位、ドーピング濃度に依存した解析を行うことができるように改良されました。

Model Parameters/SiC Growth Parameters で基板の多型、面方位、ドーピング濃度を設定してください。窒素ドーピング濃度に関しては、ユーザーが濃度を指定するか、または窒素ドーピング計算の結果を反映することができます。



SiC Growth Parameters

Substrate Polytype 4H-SiC Polarity C-face (0001-) Doping N

User-Defined n, 1/cm3 1e20

Calculated

図 3. Model Parameters/SiC Growth Parameters 結晶多型予測計算に関する設定

5. 貫通転位計算の結果可視化の改良

Threading Dislocation モジュールを使用した貫通転位の計算結果を View2D で可視化処理できるように改良されました。計算終了後、ワーキングフォルダー/Results/2D に TD_*.dcr ファイルが出力されます。これらを、View2D で読み込み可視化処理を行います。

- ・ View2D/Summary: 各結晶断面位置での貫通転位の平均値がプロットされます。
- ・ View 2D/3DView: 結晶内の貫通転位濃度分布の疑似三次元表示が可能です。

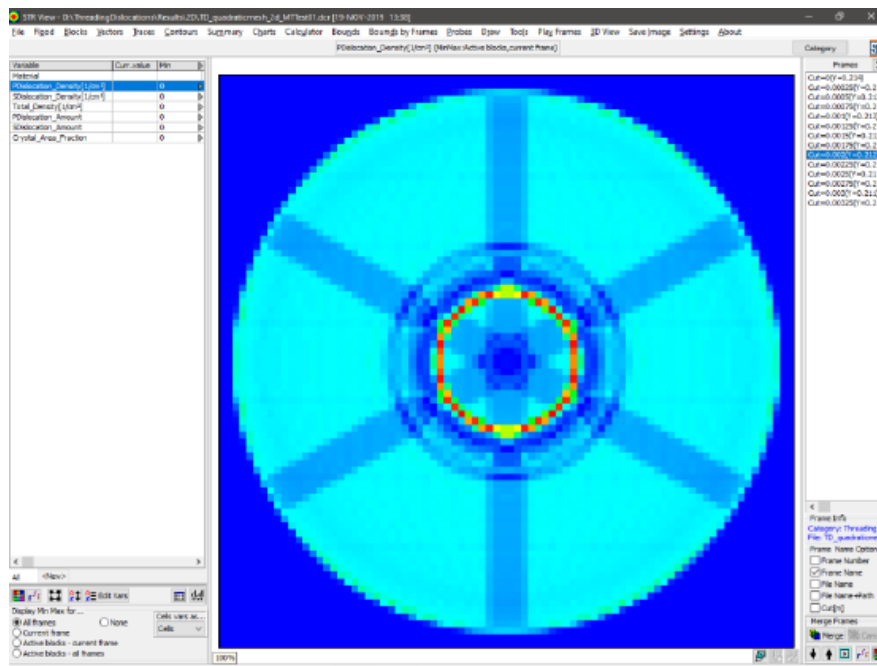


図 4. ある結晶断面における刃状転位濃度分布 (View2D)

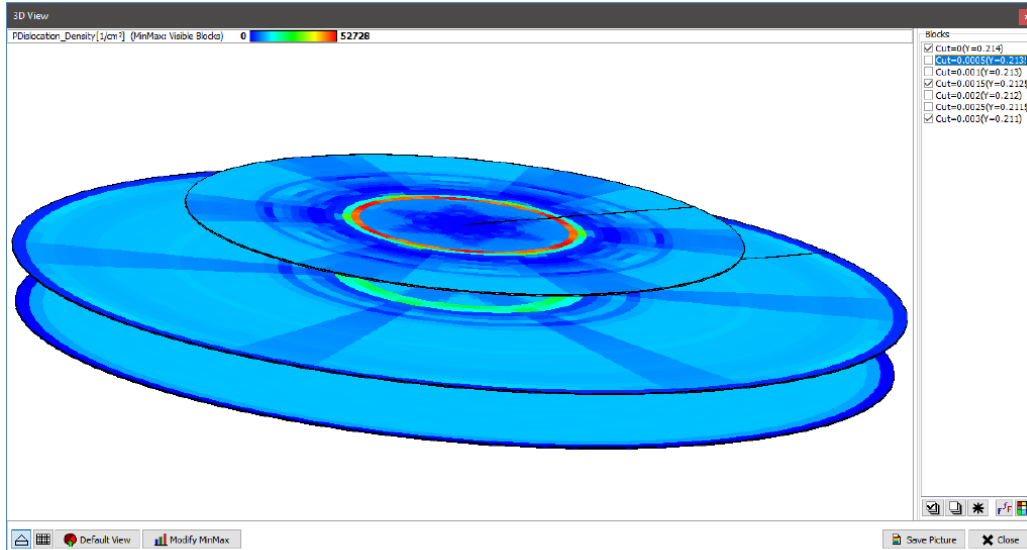


図 5. 結晶内の貫通転位濃度分布の疑似三次元表示 (View2D/3D View)

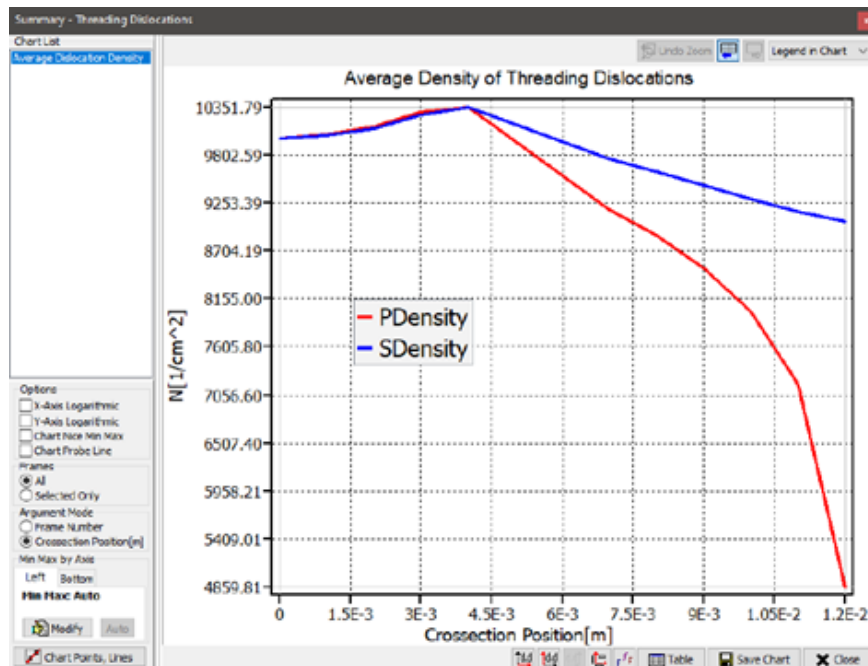


図 6. 各結晶断面位置での貫通転位の平均値プロット (View2D/Summary)

7. 考慮できる変数の数の増加

ガス流入条件などに使用可能な変数(User-Defined Parameters)の数がこれまでの 5 個から 10 個に増加されました。

V1:	V2:	V3:	V4:	V5:	V6:	V7:	V8:	V9:	V10:
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0

図 7. User-Defined Parameters の設定画面