

## Virtual-Reactor PVT-SiC edition Version 8.3.0

### 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出来ます。

#### 主な新機能、及び改善点

1. 長時間成長（バルク成長）の結晶形状修正の改良
2. 原料パウダーの相状態の解析モデルの追加
3. 長時間成長（バルク成長）中の窒素濃度の変化の考慮
4. 成長した結晶により閉じられたガス領域の計算に関するオプションの追加
5. Powder Evolution の計算における内部タイムステップの導入
6. グラファイト表面における付着係数の導入
7. テックプロットファイル（plt）における Boundary marker の出力
8. VR GUI/ブロックリストにおける材料名の表示
9. テキストファイル読み込みによる材料物性（テーブル設定）の設定
10. 形態係数計算手法に関する仕様変更
11. RF 誘導加熱の計算における電圧での設定
12. RF 誘導加熱の計算におけるステップ毎に異なる周波数の設定
13. RF 誘導加熱の計算におけるステップ毎にコイル位置の移動の考慮
14. Inductor、Ambient ブロックのグループ化機能
15. Radiation Task における境界条件画面の表示の改善
16. Solver 画面の表示に関する変更
17. 規格化された Growth rate の出力機能の追加
18. 成長速度分布のスモーシングに関するオプションの追加
19. 不具合の修正

## 1. 長時間成長（バルク成長）の結晶形状修正の改良

長時間成長（バルク成長モード）において予測される結晶形状修正に関連する自動形状調整機能が改良されました。この自動調整機能の改良により形状修正が安定化しています。従来バージョンでは、長時間成長時の結晶界面形状変化の際に、以下のようなエラーが生じ、手動での界面形状の修正が必要となる場合があります。本バージョンでは、エラーの発生を抑制するようにアルゴリズムが改善されています。

従来バージョンまでに確認されたエラーメッセージ例1

Checking for new block formation ...

\*\*\*\*\* Warning! \*\*\*\*\*

!!! (Growth shifting postprocessing): Number of blocks is inconsistent!

(Block::Block) Block with zero area detected(Block45)!!!!

\*\*\*\*\*

A geometry defect has been detected.

Computation stopped.

従来バージョンまでに確認されたエラーメッセージ例2

Creating grid for the block "DepositBlock2" (11/47)...

\*\*\*\*\* Fatal Error! \*\*\*\*\*

(Block::BuildGrid): Generator Error: Inconsistent geometry.

Grid generation failed!

The probable reason is boundary intersection during the crystal growth.

また、寄生付着境界で自動作成された多結晶形状のメッシュ生成に関する不具合が修正されています。従来バージョンでは、作成された薄い多結晶ブロックに対して極端に小さいメッシュが作成されてしまう不具合がありました。本バージョンではこの不具合が修正されました。

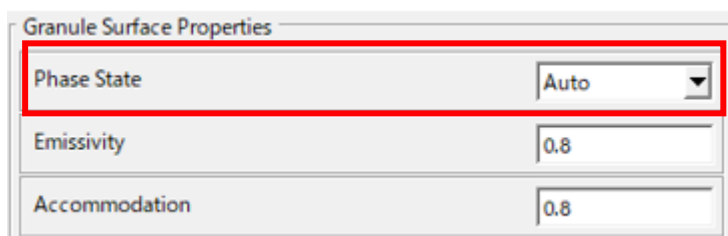
## 2. 原料パウダーの相状態の解析モデルの追加

長時間成長中の SiC 原料パウダーに関する新しいモデルが追加されました。

従来のバージョンでは、原料パウダーに対して SiC と C(炭素)が常に共存するモデル (SiC-C モデル) を採用していました。この従来モデルでは、黒鉛化を伴うパウダーの昇華を正しく表現することができませんが、再結晶化の計算精度が良くありませんでした。

新しく追加されたモデルは、再結晶化の計算にも対応できるように開発されています。

本モデルを考慮するには原料パウダーの物性設定において Phase State を Auto に設定して下さい (従来のモデルを利用する場合は SiC\_C を選択して下さい)



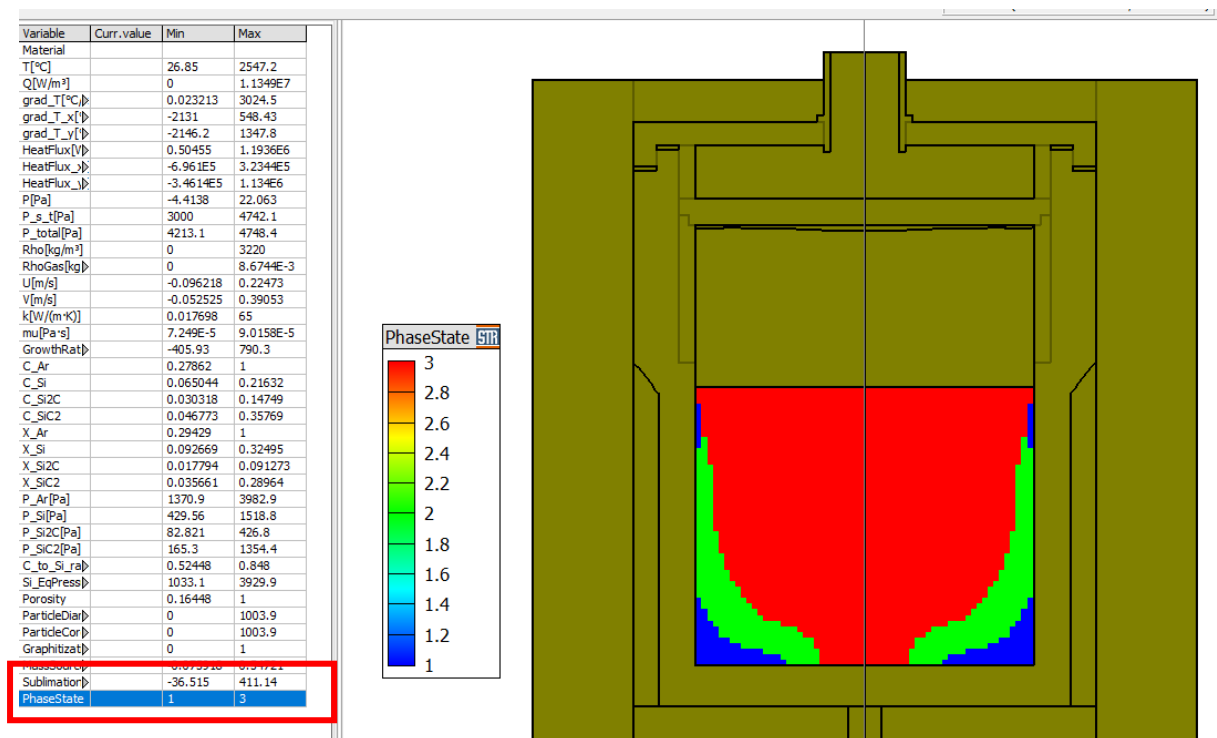
図：パウダー原料物性/Powder Properties 設定画面

この改良に伴い、パウダー粒子の相状態（SiC が完全に消化した黒鉛状態、炭素と SiC の共存状態、純粋な SiC）を予測することができます。

View2D による解析結果の可視化の際、PhaseState で原料パウダーの相状態を確認することができます。

(PhaseState=1：純粋カーボン(C)、PhaseState=2：SiC/C 共存状態、PhaseState=3：純粋 SiC)

尚、インストールフォルダ/Examples/BulkGrowth/4\_PowderSource\_Auto にサンプルがございます。



図：View2D による PhaseState の可視化

### 3. 長時間成長（バルク成長）中の窒素濃度の変化の考慮

SiC 結晶への窒素ドーピングモデルにおいて、坩堝内で考慮される長時間成長中の窒素 (N2) 濃度の定義が改良されました。

従来のバージョンでは、混合ガス中の アルゴン (Ar) と N2 の比率は、ガス材料の作成部分「Species List」の質量分率で定義されていました。

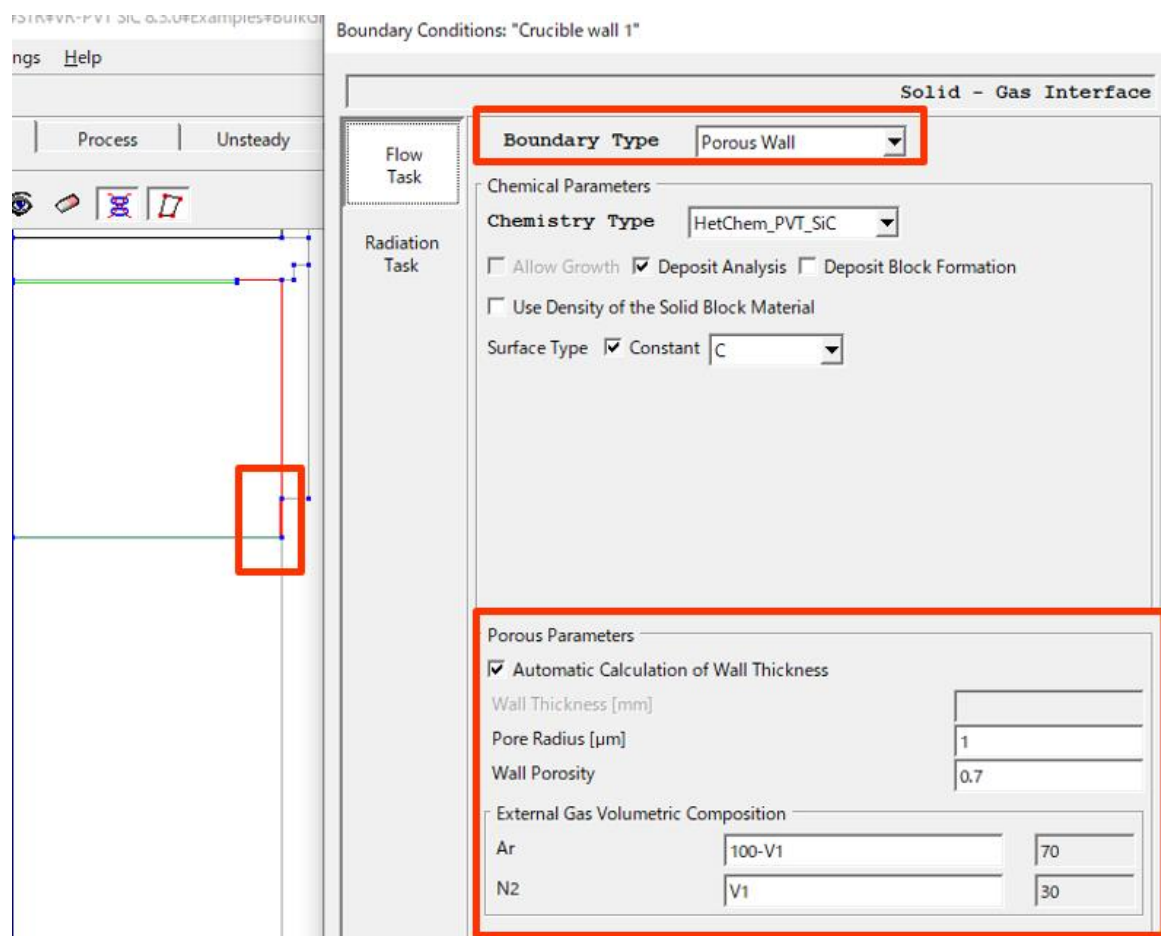
本バージョンより、混合ガス中のアルゴンと窒素の比率は Porous Wall 境界の境界条件で定義します。尚、モル分率の値を、一定の数値として、またはユーザー定義変数 (V1、V2、...V10) として割り当てることができます。

この改良により、長時間成長中の各時間ステップでこれら値（窒素濃度）を指定することにより、成長中の窒素濃度の変化を考慮することができます。

尚、インストールフォルダ/Examples/BulkGrowth/6\_NitrogenDoping にサンプルがあります。

本機能を考慮するには、ガス/坩堝境界の一部を“Porous Wall”と定義し、Pore Radius( $\mu\text{m}$ )と Wall Porosity を設定して下さい。(Porous Wall を設定する境界は坩堝全面に設定する必要はありません。一部の限定された境界に設定するのみで十分です)

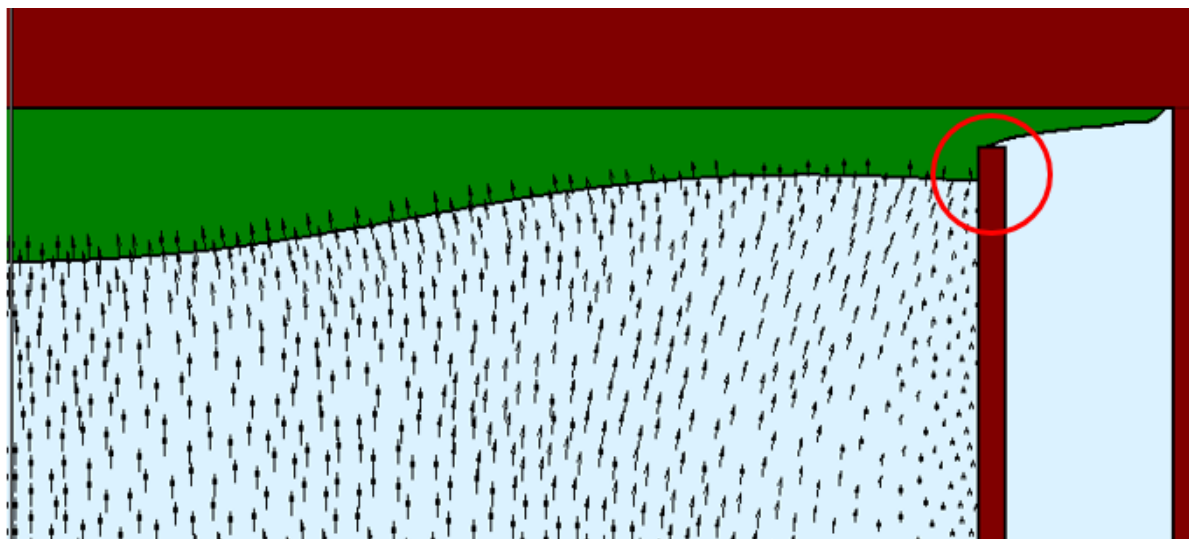
External Gas Volumetric Composition 部分でアルゴン(Ar)と窒素( $\text{N}_2$ )の比率(%)を指定します。長時間成長にて各ステップで比率を変更する場合は、ユーザー定義変数(V1 など)を指定し Process タブで各ステップのユーザー定義変数に値を入力して下さい。



図：坩堝内 Porous Wall 境界条件における窒素濃度設定画面

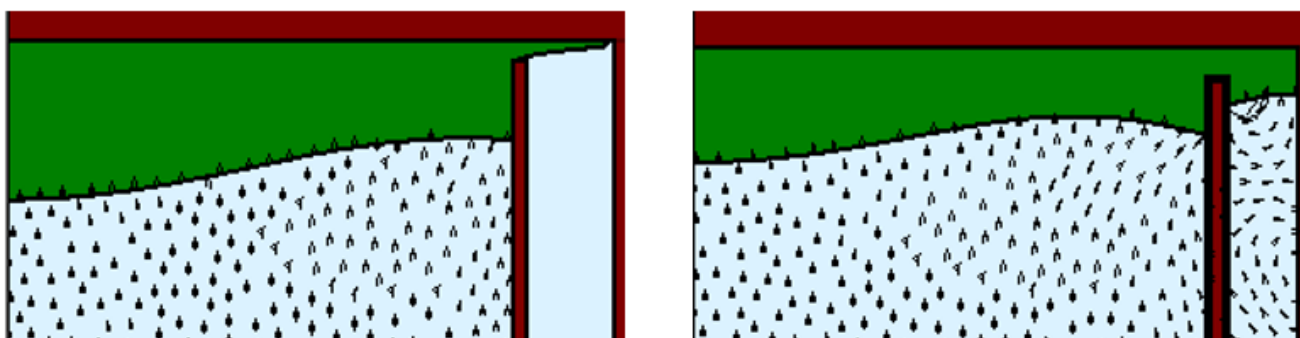
#### 4. 成長した結晶により閉じられたガス領域の計算に関するオプションの追加

長時間成長（バルク成長）の計算において、成長した結晶が坩堝などの壁に到達した場合、結晶と壁に囲まれたガス領域ができることがあります。その場合、従来のバージョンでは自動的にその閉じられたガス領域の物質輸送（流れ、拡散）の計算がオフになっていました。



図：成長した結晶が坩堝等の壁に到達した計算モデル

本バージョンからは、結晶が接触する固体壁表面に Gas-Gap を想定することでオプションとしては閉じられたガス領域の物質輸送計算の有無を選択することができます。



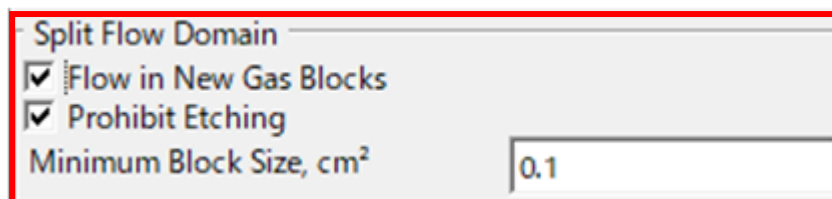
図：長時間成長の結果（左：従来手法、右：本オプションの考慮）

尚、インストールフォルダ/Examples/BulkGrowth/5\_GapCrystalCrucible にサンプルがございます。

本機能の操作方法を記します。

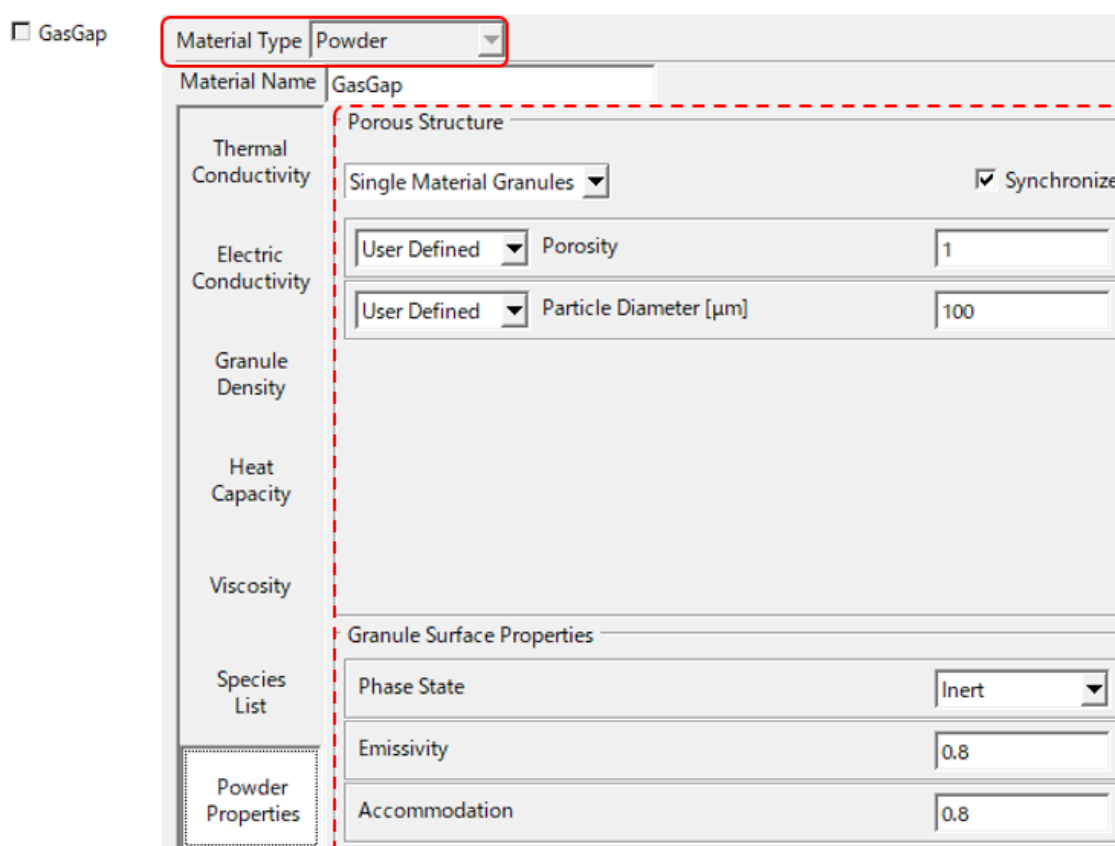
① 本機能を考慮するための設定をします。

Model/Advance/Split Flow Domain の Flow in New Gas Blocks をチェックすることで本機能が有効化されます。また、閉じられた領域の結晶成長面のエッチングの有無も選択することができます(Model/Advance/Split Flow Domain/Prohibit Etching)。



図：閉じられたガス領域に関するオプション設定画面

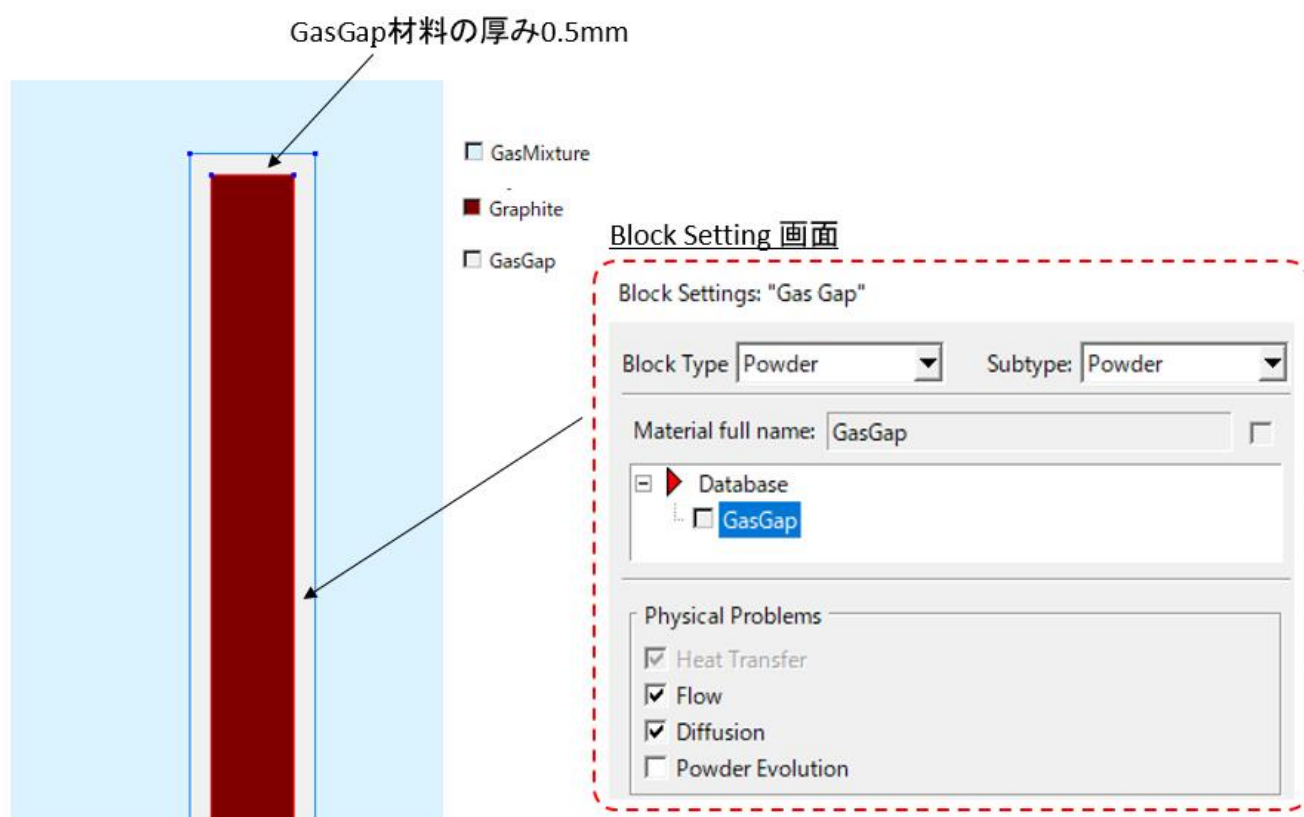
② Gas-Gap 材料を Powder 材料として作成します。



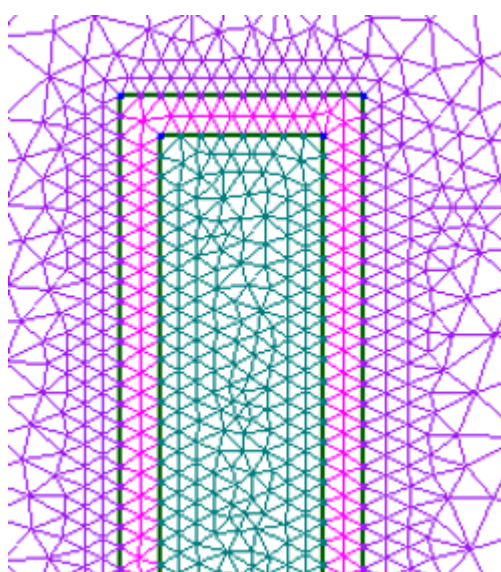
図：Gas-Gap 材料の作成画面



③ 固体材料表面に Gas-Gap 材料を作成しておきます。



図：Gas-Gap 材料の材料配置と Block Settings 画面



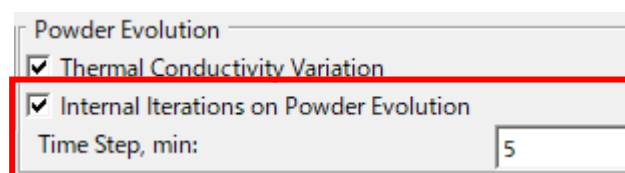
図：Gas-Gap 材料のメッシュ分割図

## 5. Powder Evolution の計算における内部タイムステップの導入

原料 SiC パウダーの時間変化(Powder Evolution)の計算において、長時間成長のタイムステップとは別に Powder Evolution 用の内部タイムステップを導入できるオプションが追加されました。

従来バージョンでは長時間成長用のタイムステップ(30 分～60 分)に合わせて Powder Evolution の計算が行われていましたが、パウダー特性の変化(原料の昇華、再結晶化)に対してタイムステップが粗く、物質収支が悪い場合があります。

Model/Advance/Powder Evolution の Internal Iterations on Powder Evolution をチェックすることで本機能が有効化されます。Time Step, min 部分では長尺成長のタイムステップより短いタイムステップ (例:5 分)を入力してください。



図：Powder Evolution の内部タイムステップ設定画面

通常 of 長時間成長のタイムステップ(30～60 分)を使用し、本オプションを考慮した場合、内部タイムステップの計算分、計算時間が長くなります。

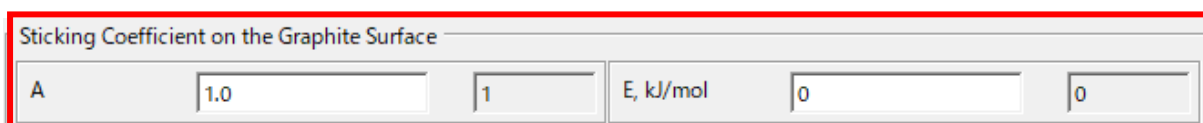
ただし、従来バージョンで長時間成長用のタイムステップに短いタイムステップ(例：5 分)を使用するのに比べて、タイムステップ毎のメッシュ作成、形態係数の計算、熱計算を実施する時間が省略できます。

尚、インストールフォルダ/Examples/BulkGrowth/3\_PowderSource\_SiCC\_IntIterations にサンプルがございます。

## 6. グラファイト表面における付着係数の導入

初期表面タイプがグラファイト(C)の表面反応において、付着係数が考慮できるように機能追加されました (Model/Advance/Surface Kinetics /Sticking Coefficient on the Graphite Surface)。

こちらで設定できる数値は考慮される化学種(Si、Si<sub>2</sub>C、SiC<sub>2</sub>)共通した値となります。  
また、こちらのオプションはユーザー定義変数 V1、V2、...V10 の関数に対応しているため、実験値との合わせ込みを目的としたパラメトリックスタディにも対応しております。



Sticking Coefficient on the Graphite Surface			
A	1.0	<input type="checkbox"/>	E, kJ/mol
		<input type="checkbox"/>	0

図：グラファイトの付着係数設定画面

## 7. テックプロットファイル (plt) における Boundary marker の出力

各境界の一次元出力データのテックプロットファイル (Results/1D/TimeSteps/モデル名\_1D.plt) に各境界のタイプが明記されるようになりました。

従来のバージョンでは、境界名 (または ID) のみの表記されていましたが、境界のタイプ (\*\*\_Deposit\_interface, \*\*\_External\_Boundary など) も表記されるようになりました。

この改良により、境界を特定しやすくなります。

表記させる場合は、Output Variables/"Add Type to Boundary Names"にチェックを入れてください。

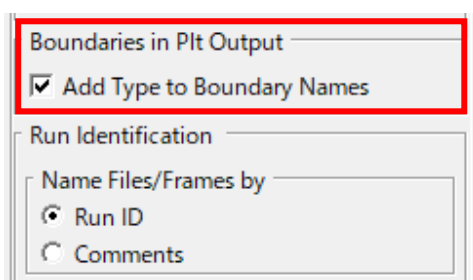


図 : "Add Type to Boundary Names"オプションの設定画面

## 8. VR GUI/ブロックリストにおける材料名の表示

GUI/ブロックリストの各ブロック ID の隣に対応する材料名が表示されるようになりました。従来のバージョンでは、ブロックタイプ (Solid, Gas など) が表示されていました。

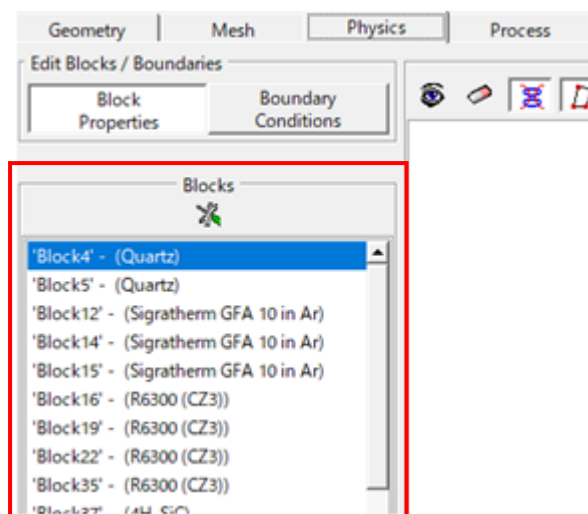
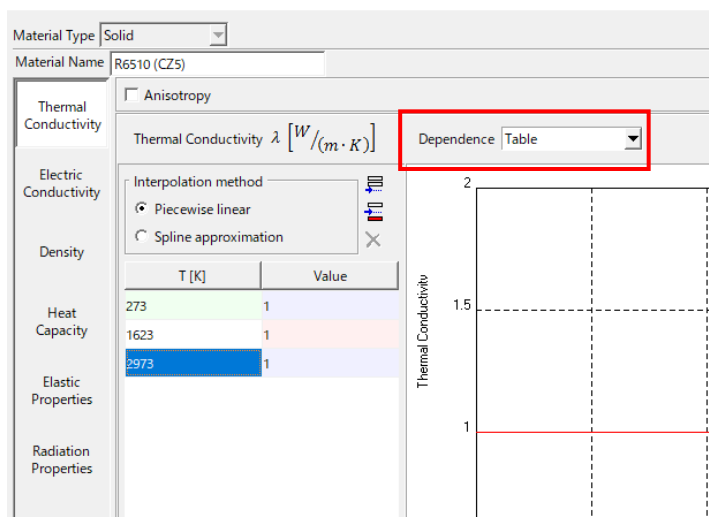


図 : ブロックリストにおける各ブロックの材料名の表記

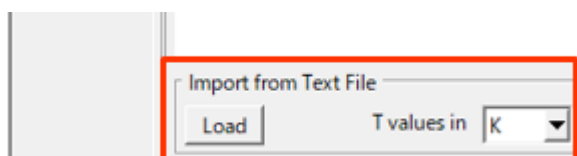
## 9. テキストファイル読み込みによる材料物性（テーブル設定）の設定

材料物性の設定でテキストファイルからデータを読み込むオプションが追加されました。材料物性の設定画面において Dependence で Table を選択してください。



図：材料物性の設定画面

Load ボタンを押してください（温度依存性における温度の単位(K or °C)を指定）

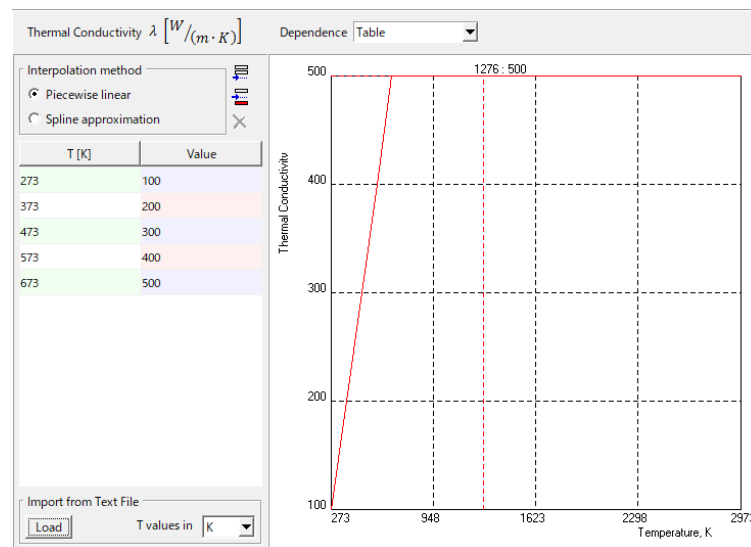


図：材料物性 Table タイプでの設定画面

事前に作成するテキストデータは以下のように左側に温度、右側に材料物性値として作成します。（ファイルのトップの行に変数名の表記は必要ありません）。テキストデータのファイル拡張子は\*\*\*.dat または\*\*\*.plt として下さい。

```
273 100
373 200
473 300
573 400
673 500
```

図：テキストデータのフォーマット

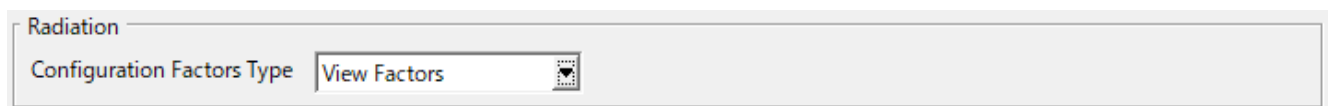


図：テキストデータが読み込まれた物性値

## 10. 形態係数計算手法に関する仕様変更

本バージョンより、VR GUI /Menu bar /Model /Advanced の輻射輸送計算に使用される形態係数の計算手法の設定部分の Computation Method で常に「Projection」が使用されるよう仕様変更されました。この仕様変更に伴い Computation Method の設定が GUI から削除されました。

また、設定部分の名称が「Configuration Factors」から「Radiation」に変更されました。

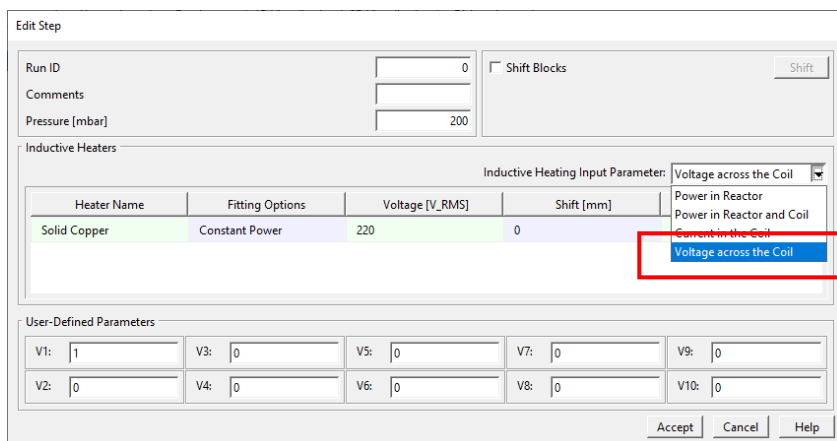


図：形態係数の設定画面

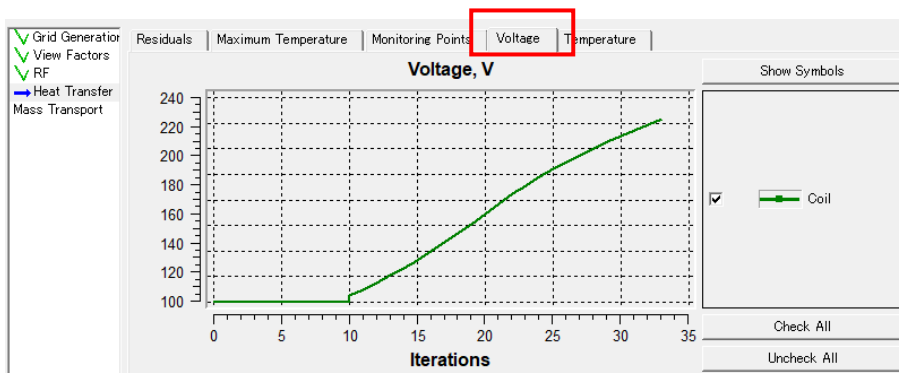
## 11. RF 誘導加熱の計算における電圧での設定

本バージョンより、RF 誘導加熱の計算において電圧（交流電圧の二重平均平方根）で設定ができるようになりました。

Process タブの各ステップ設定画面/Inductive Heating Input Parameter で、「Voltage across the Coil」を選択して下さい。計算実行中の Solver 画面にて電圧値がモニターされます。計算終了後、View2D/Report にて最終的に得られた電圧が表示されます。



図：RF コイルの設定画面



図：電圧設定の場合の Solver 画面

Report (Frame)

Maximum Temperature = 2102.55 °C  
 Temperature at Monitoring Point (0;250) = 2011.32 °C  
 Temperature at Monitoring Point (0;290) = 2017.69 °C  
**Voltage in heater "288.402": 288.402 [V]**  
 Power in heater "Coil": 10562.1 [W]  
 Current in heater "Coil": 708.762 [A\_RMS]  
 Average Growth Rate, um/h: 84.39  
 Growth Rate Relative Standard Deviation: 16.26 %

図：View2D/Report 出力画面

## 12. RF 誘導加熱の計算におけるステップ毎に異なる周波数の設定

本バージョンより、RF 誘導加熱の計算において、タイムステップ毎に異なる周波数を設定できるようになりました。

Edit Time Step

Time [h]

Comments

Pressure [Pa]

☐ Shift Blocks

Inductive Heaters

Inductive Heating Input Parameter:
Power in Reactor

Heater Name	Fitting Options	Power [W]	Shift [mm]	Frequency, Hz
Coil	Fit by Power	22660.4	0	10000

Edit Time Step

Time [h]

Comments

Pressure [Pa]

☐ Shift Blocks

Inductive Heaters

Inductive Heating Input Parameter:
Power in Reactor

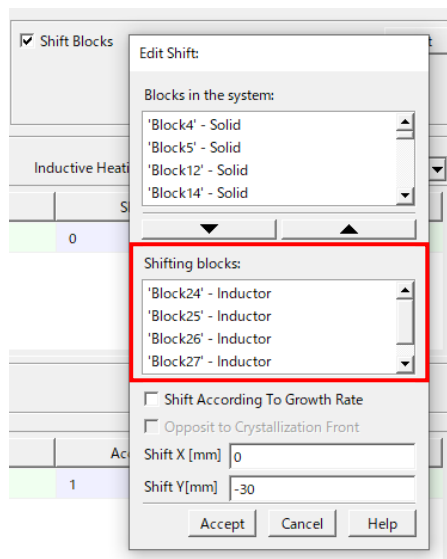
Heater Name	Fitting Options	Power [W]	Shift [mm]	Frequency, Hz
Coil	Fit by Power	22754.1	0	20000

図：タイムステップ毎の RF コイル設定画面



### 13. RF 誘導加熱の計算におけるステップ毎にコイル位置の移動の考慮

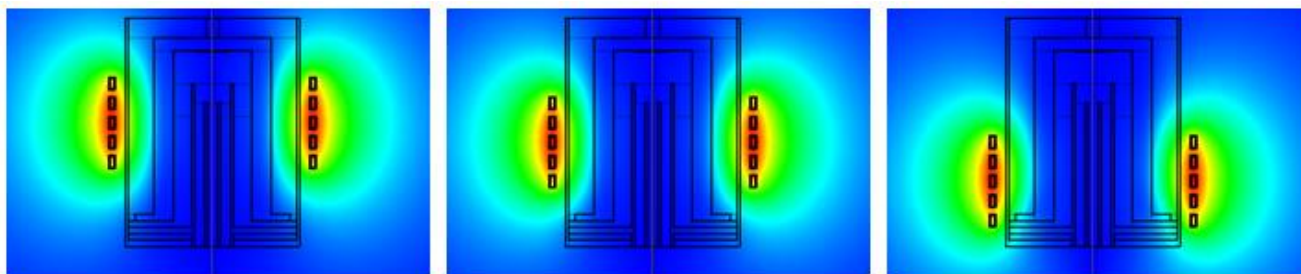
本バージョンより、各タイプステップの「Shift Block」の設定において、「Inductor」タイプのブロックを考慮することができるようになりました。これにより、RF コイルを移動させたケーススタディーを行うことができます。



図：Process タブ/Shift Blocks 設定画面

Physics	Process	Unsteady	Database	1D Visualization
Run ID	Pressure [Pa]	Shift [mm]	Fitting (On/Off)	Power [W]
0	26664.47368	-	On	Fit
1	26664.47368	-30	On	Fit
2	26664.47368	-60	On	Fit

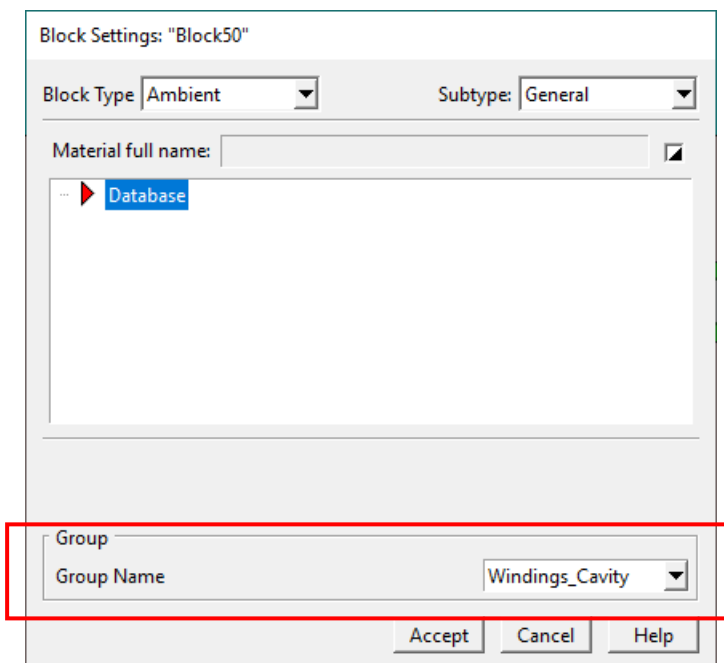
図：Process タブ/各タイムステップのブロック移動距離のリスト画面



図：Inductor の移動を考慮した各ケースのベクトルポテンシャル分布

## 14. Inductor、Ambient ブロックのグループ化機能

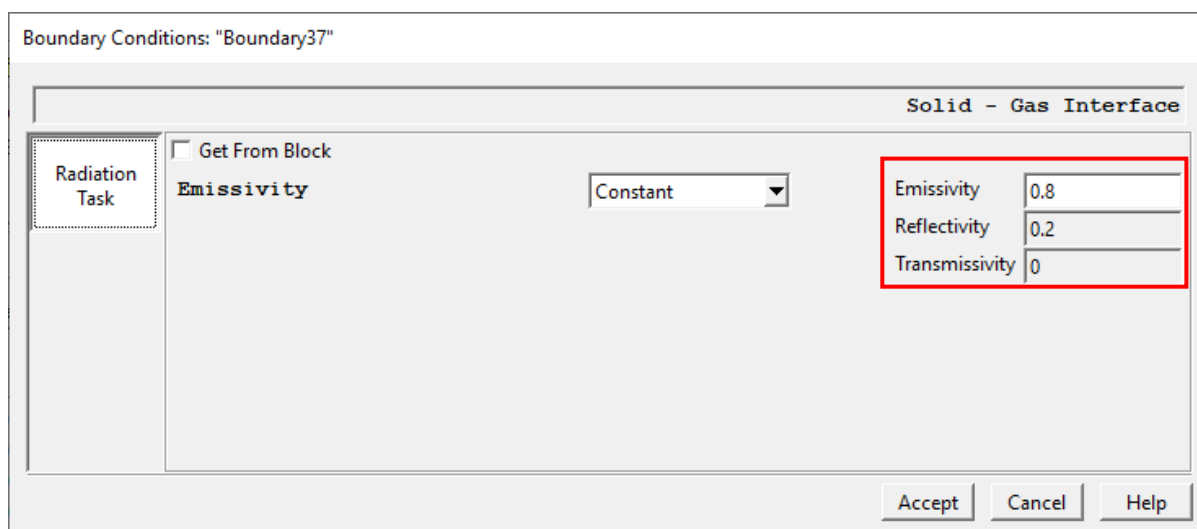
本バージョンより、Inductor タイプ、及び Ambient ブロックをグループ化できるようになりました。



図： Ambient ブロックの Block Settings 画面

## 15. Radiation Task における境界条件画面の表示の改善

本バージョンにて、境界条件設定の「Radiation Task」において、「Reflectivity」(反射率)、及び「Transmissivity」(透過率)が表示されるように変更されました。



図： 固体/ガス境界の境界条件設定画面

## 16. Solver 画面の表示に関する変更

本バージョンより、Solver 画面のログ部分の座標が「mm 単位」で表示されるように変更され、単位も表示されるようになりました。従来バージョンでは「m 単位」で表示されており、単位の表示はありませんでした。

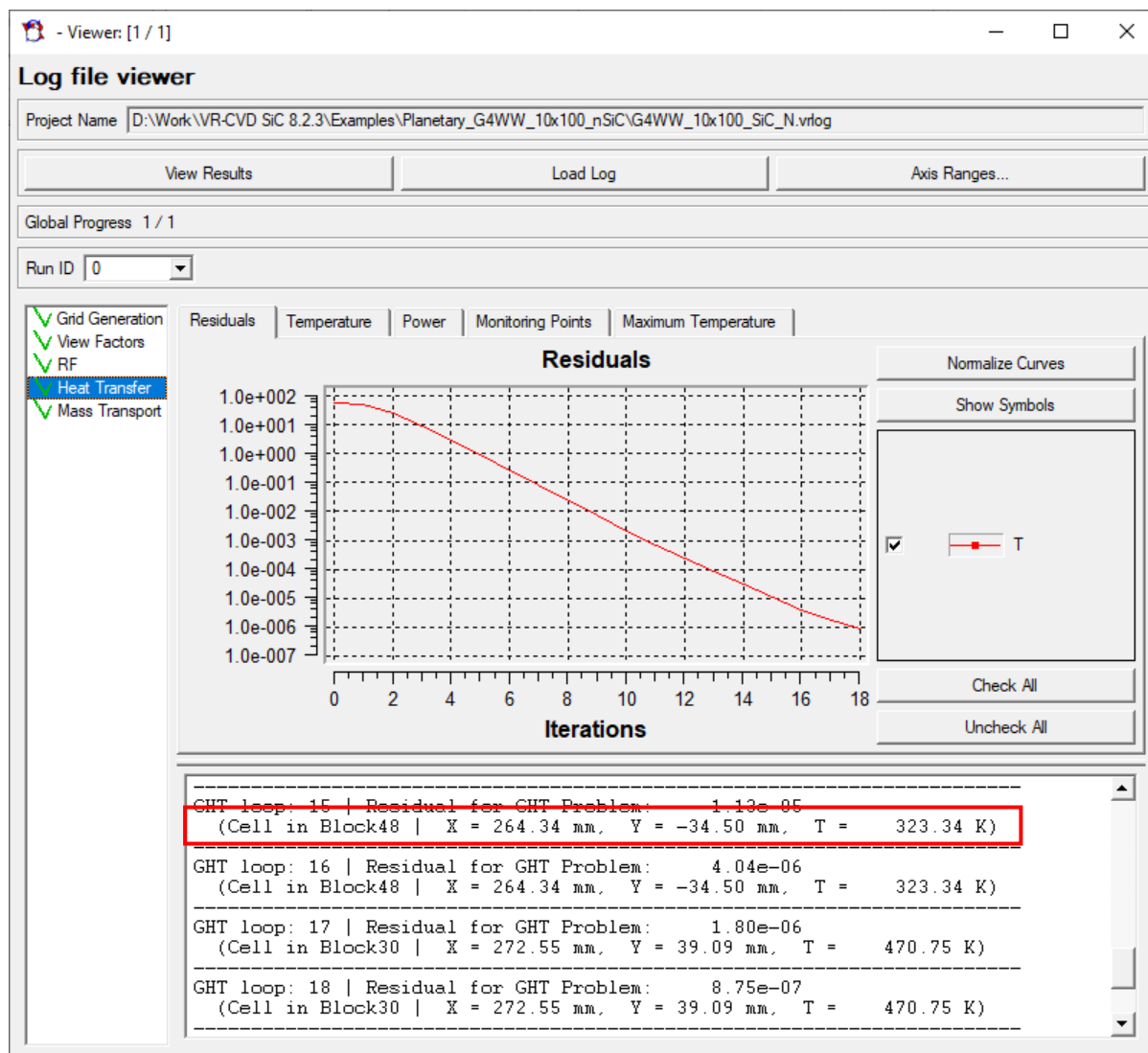


図 : Solver 画面

## 17. 規格化された Growth rate の出力機能の追加

本バージョンより、View2D の Bounds 機能で「Normalized Growth Rate」の物理量が追加されました。これは、基板中心位置で規格化された値となります。

また、View2D の Bounds 境界リストにおいて基板に相当する境界が一番上に出力されるようになりました。

「Normalized Growth Rate」、境界リストにおいて基板相当の境界を一番上に出力させるには、境界条件設定において「Substrate is Rotated」を有効にする必要があります。

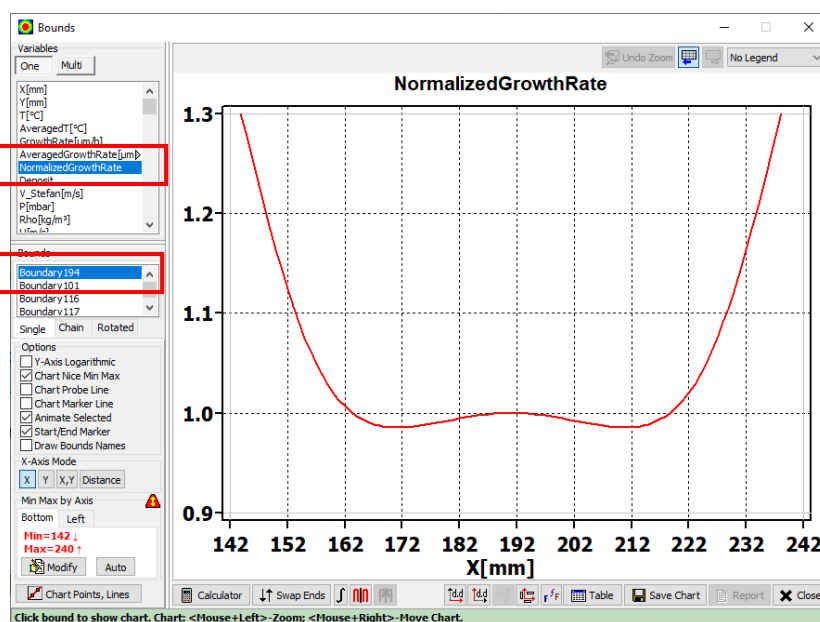


図 : View2D/Bounds 画面

## 18. 成長速度分布のスレーシングに関するオプションの追加

成長速度分布のスレーシング処理に関するオプションが追加されました。従来のバージョンでは、計算結果が出力される際に、成長速度分布がスレーシングされる処理が自動的に行われていました。本バージョンでは、このスレーシング処理の有無をユーザーが選択することができます。スレーシング処理を行わない場合は、Model/Advanced/“Smooth the Growth Rate Profile”のチェックを外してください。

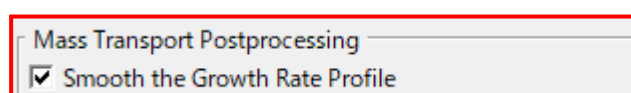


図 : “Smooth the Growth Rate Profile”オプションの設定画面

## 19. 不具合の修正

本バージョンでは以下に示すような報告された不具合が修正されております。

### ① View2D における LQ\_heat、RQ\_heat の出力に関する不具合の修正

本バージョンにて、熱伝導による熱流束(LQ\_heat、RQ\_heat)に関する View2D の Bounds への出力の不具合が修正されました。

従来バージョンでは、View2D の Bounds で出力されている熱伝導による熱流束「LQ\_heat」、及び「RQ\_heat」の値が逆に出力される不具合がありました(built-in 1D visualization の「LQ\_heat」、及び「RQ\_heat」の出力に不具合はありません)。本バージョンではこの不具合が修正され、View2D の Bounds への出力が正しいものとなっています。

### ② 異方性材料の設定に関する不具合の修正

本バージョンにて材料の熱伝導率に異方性材料を考慮した際の不具合が修正されました。

従来バージョンでは材料の熱伝導率に異方性を考慮し、且つ長時間成長、もしくはパラメトリックスタディを実施した場合に、二つ目のタイムステップ以降の計算で密度と比熱に VR 内蔵のデフォルトの値が使用されてしまう不具合がありました。また VRP ファイルに保存される密度や比熱の値もデフォルトの値に書き換えられてしまう不具合がありました。本バージョンではこの不具合が修正されております。

### ③ 非定常計算で熱応力を計算実施の際のエラーメッセージの出力

本バージョンにて、Unsteady Module における非定常計算中に計算が突然フリーズする現象において、エラーメッセージが出力されるようになりました。

従来バージョンでは、Unsteady Module における非定常計算で熱応力の計算を実施している際、計算の途中にエラーメッセージの出力なくフリーズ状態となる不具合がありました。本バージョンでは、計算中に計算が止まった原因となるエラーメッセージを出力して Abnormal Termination を示し、ジョブを終了するように変更されました。

### ④ 非定常計算での温度モニターグラフに関する不具合の修正

本バージョンにて、Unsteady module を使用した View2D の Summary での加熱、成長、冷却プロセスの一連の温度モニターのグラフ表示に関する不具合が修正されています。

従来バージョンでは、View2D/Summary にて成長プロセスの温度モニタリングの結果のみグラフ表示されていました。本バージョンでは、全てのプロセスの温度モニタリング結果がグラフ表示されます。

### ⑤Multi Block stress solver の境界条件に関する不具合の修正

本バージョンにて、Multi-Block solver を使用した熱応力計算の境界条件に関する不具合が修正されました。

Multi-Block solver を使用した熱応力計算(結晶と結晶以外の固体との相互作用を考慮した熱応力計算)の場合、熱応力計算に関する境界条件「Rigid」は固体/固体の内部境界にのみ設定することができます。固体/固体境界に「Rigid」を設定した計算モデルにて、どちらか一方の固体材料のブロックを削除し、「Rigid」を設定した内部境界が外部境界となった場合、「Free」設定に自動的に置き換わることが想定されています。

従来バージョンでは、内部境界が外部境界に変更された場合に、「Free」設定に置き換わず、応力の計算が正しく計算されない不具合がありました。本バージョンでは「Free」設定に置き換わるように修正されました。

### ⑥温度境界条件設定においてテキストデータ読み込みに関する不具合の修正

本バージョンにて、温度の境界条件設定においてテキストデータで設定を読み込んだ際の不具合が修正されました。

従来バージョンでは、温度の境界条件設定において「Piecewise Linear」を選択した際、インポートするテキストファイル内の終点座標と作図した計算モデルの終点座標が合っていない場合に、テキストファイル内の終点の温度が作図した計算モデルの終点位置に設定される不具合がありました。本バージョンでは読み込んだテキストファイル内の終点座標と作図した計算モデルの終点座標が合っていない場合においても、作図した計算モデルの終点座標位置の温度を自動的に補間し設定されるように修正されています。

### ⑦温度境界条件設定における表示に関する不具合の修正

本バージョンにて、温度の境界条件設定において「Linear」、または「Piecewise Linear」を使用した際のグラフ表示の不具合が修正されました。

従来バージョンでは、境界条件の温度設定において「Linear」、または「Piecewise Linear」を使用する際、X 座標にマイナス値が含まれている場合、グラフ表示が正しく線形に表示されない不具合がありました。本バージョンでは正しくグラフ表示されるよう修正されました。

### ⑧View2D における材料物性値の単位表示の修正

本バージョンにて、View2D における材料物性値の単位の表示が修正されました。

従来バージョンでは、View2D の Variable リストにおいて熱伝導率(k)、比熱(Cp)、粘性係数(mu)の単位が表示されていませんでした。

### ⑨ 内部輻射モデルの設定に関する不具合の修正

本バージョンにて、planar モデルを使用する際の内部輻射モデルに関する設定の不具合が修正されました。

内部輻射モデル(Two-Band model)は二次元軸対称モデルのみで考慮できる輻射モデルです。従来バージョンでは、材料物性の Radiation Properties で Semi-Transparent を選択した際、内部輻射モデルがサポートされていない Planar モデルを選択していた場合でも Block Settings 画面の Radiation に自動的にチェックが入り、輻射モデルの選択画面(Advanced)の輻射モデルで Two-Band View Factors が自動的に選択される不具合がありました。本バージョンでは Planar モデルを選択している場合、Radiation Properties で誤って Semi-Transparent を選択した場合でも、Block Settings 画面や Advanced の設定が変更されないように修正されました。