

## Virtual-Reactor PVT-SiC edition Version 7.8

### 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. マルチブロック応力計算オプション

結晶以外の材料も含めた応力計算が可能になりました。

##### 2. SiC 原料パウダーの昇華速度に関するパラメータ調整機能

SiC パウダー粒子の昇華速度を調整することが可能になりました。

##### 3. Ta\_TaC 表面タイプの追加

成長プロセス初期 Ta 壁の炭化 (TaC) の表面反応を考慮出来るようになりました。

##### 4. その他不具合等の修正

## 1. マルチブロック応力計算オプション

Ver7.8 より、結晶領域 (“Crystal”) 以外の領域 (グラファイト坩堝、多結晶など) も含めた応力計算を行うことができます。(図 1)

このオプションでは、固体ブロック間 (結晶-坩堝、多結晶-坩堝、結晶-多結晶など) は、完全接着状態を仮定し、連続境界として扱われます。このオプションによって、接合している固体ブロックの応力状態が相互に影響し合うことを考慮した応力計算を行うことができます。設定方法の詳細は、別紙「ver7.8 機能紹介」資料をご参照下さい。

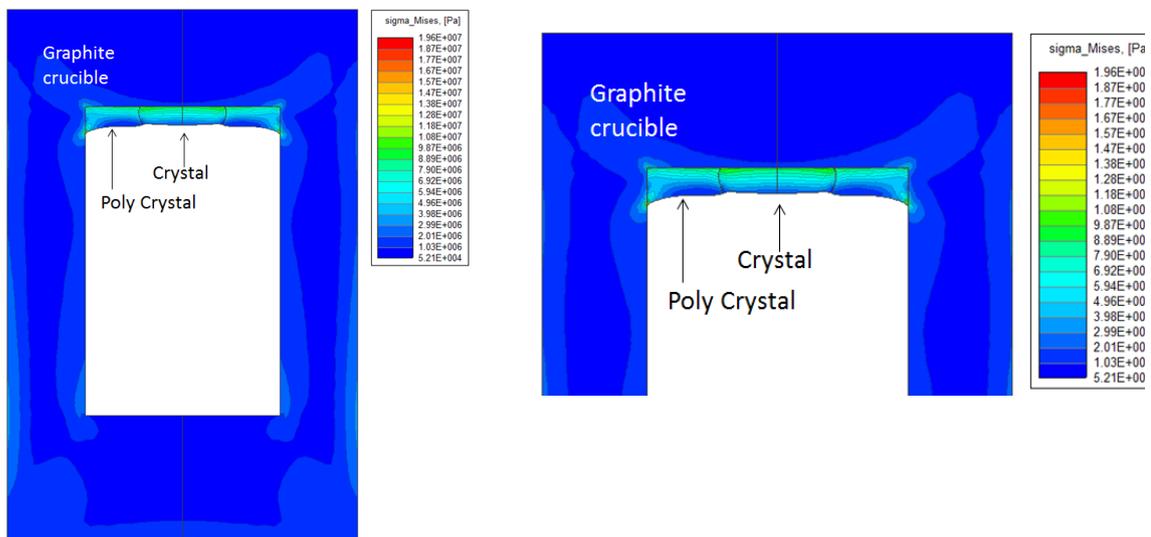


図 1. マルチブロック応力計算オプションを用いた計算結果 (坩堝、結晶内のミーゼス応力)

## 2. SiC 原料パウダーの昇華速度に関するパラメータ調節機能

Ver7.8 より、SiC 原料パウダーの昇華速度に関するパラメータを調整出来るようになりました。前バージョンまでは、パウダー粒子上の各化学種 (Si, SiC<sub>2</sub>, Si<sub>2</sub>C) のフラックスの計算 ( $F_i = \alpha\beta(P_i - P_i^*)$ ) では、化学種の過飽和度に掛かる付着係数 $\alpha=1$  を仮定していました。現バージョンより、この付着係数 $\alpha$ を定数またはアレニウス型のどちらかで調整することが出来ます。(図 2)

ただし、調整の事例や物理的な根拠等をご用意しておりませんので、必用に応じてユーザー様側でご検討、調整していただくことになります。

設定方法の詳細は、別紙「ver7.8 機能紹介」資料をご参照下さい。

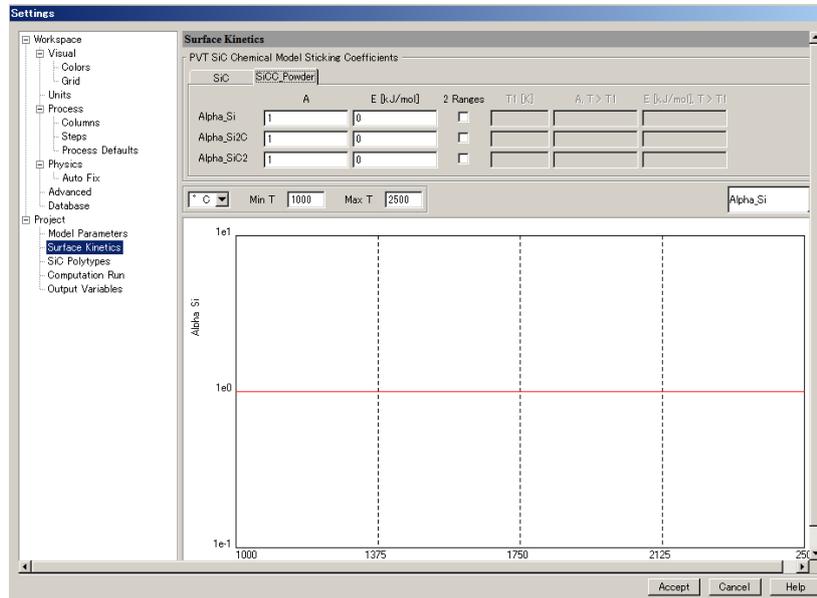


図 2. SiC パウダー原料の昇華速度に関するパラメータ調整画面

### 3. Ta\_TaC 表面タイプの追加

Ver7.8 より、初期 Ta 壁の炭化 (TaC への変換) の表面反応を考慮出来るようになりました。この表面タイプは、成長プロセスのごく初期における Ta 坩堝壁 (純正 Ta 材) の TaC への変換、及びその坩堝内部 C/Si 比などへの影響の基礎研究に適しています。

Long Term Growth (結晶形状変化) や成長中の定常計算には適していません。

Long term growth や成長中のある段階の定常計算を行う場合は、表面タイプ "TaC\_Catalytic" をご利用下さい。この表面タイプでは、TaC 表面上での触媒反応 ( $3Si + SiC_2 = 2Si_2C$ ) が考慮されます。設定方法の詳細は、別紙「ver7.8 機能紹介」資料をご参照下さい。

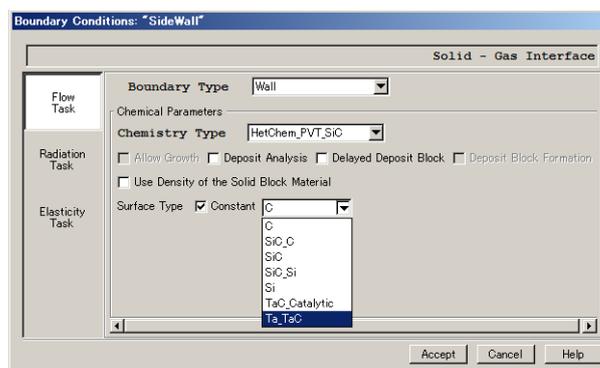


図 3. Ta\_TaC 表面タイプ設定画面 (坩堝内壁表面反応の設定)

#### 4. その他不具合等の修正

- ガス/ガス境界に inlet を設定した場合に発生した流量<->流速変換誤差の修正
- 250 以上のブロックが存在する場合のメッシュファイルの読み込み/書き込みの問題に修正
- Two-band 輻射モデルを使用した場合の、リスタート計算に関する問題の修正
- Residual プロッターを閉じるときの確認画面の廃止（閉じるかどうかの確認の省略）