

陰的初期条件

諏澤 寛源†

反射層付Light-Emitting Diode (DBR-LED) 創始者†

1. はじめに

数値シミュレーションでは、通常、初期条件は陽的である。初期条件に不連続があると、数学上、定義できないパラメータが現れる。これを考慮せずプログラミングすると、誤差が発生する。そのことを踏まえなければ、結果を誤って解釈する。このような事例は各分野で起こっている。対策として陰的初期条件を提案する。この考えはheat and mass transferの分野で活用された¹⁾。この考えは、この分野を越えて広く活用されるべきである。本発表は、プログラミングとその結果の解釈という観点で議論する。

Step関数(図1)は各分野で活用される。モデル化に利用しやすい反面、不連続の取り扱いに注意を要する。これを例に取る。具体的事象は固溶体の溶液成長に注目する。溶液成長とは溶液から固体が出現する現象である。固液界面が平衡と近似できる場合を扱う。この場合、良質な材料を作成でき、バルクも作成可能である。固溶体とは、各成分が分子レベルで混合した固体である。組成は、条件により、さまざまな値をとる。固溶体は、高性能な各デバイス：太陽電池、検出器等に使用される。発表者は、1989年に、通常のLEDより出力の高いDBR-LEDを創始した²⁾。そのとき、厚膜の固溶体を使用したLEDは、さらに性能が高いことを確認した。

固溶体の溶液成長では、固相と液相の組成が異なり、成長条件を見つけるのが難しい。従来

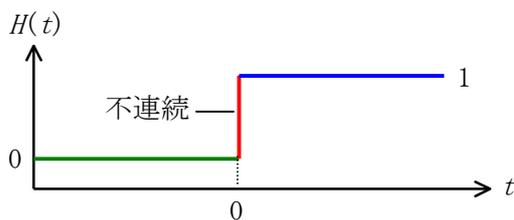


図1. Step関数 $H(t)$ 不連続で誤差が発生

方法では不可能な場合もある。ここに、数学的考察により、系統的にコンピュータを活用する。

本研究を進展させると、現在、量産技術が存在しない、高品質固溶体バルク成長実現の手がかりを提供できる。国際プロジェクトである宇宙での実験で、この成長が検討されている。その実験の有効性に影響する。

情報学は科学全体を対象にする。一方、半導体製造には、移動現象に注目する必要があるが、関連部署で、これを研究対象にしない場合が多い。改善すべきだが、逆に言えば、十分に検討されていないということは、そこに発展の可能性がある。そして、年間数十兆円の産業の基礎となり得る。科学全体を見渡し、情報学を活用し、特許化と共に breakthrough を起こすのは、成長戦略の柱となる。

2. 考察する初期現象

固溶体の溶液成長で、不連続が起こる現象を対象にする。成長するときは、溶液が過飽和になっている。飽和とは、溶質を溶かしていくとき、これ以上溶けない現象である。過飽和とは、それよりも余分に溶けている場合である。液相から固相になるとき、結晶の核などがなければ、平衡する温度よりある程度下回っても、固相は出現しないので、過飽和を実現できる。成長界面からの距離を z とする。溶液を $z > 0$ に配置する。 $z = 0$ には、溶液と固溶体が両方存在する。そこでの成分 i のモル分率を X_{ig}^l と X_i^s で表す。

今後、各パラメータのsuperscriptで、 l は液相を表し、 s は固相を表すことにする。 X_i は、成分 i のモル分率を表す。温度は一樣である。成長中は、温度一定とする。 X_{ig}^l と X_i^s は、平衡状態図上にある。一定とはかぎらない。 t は時間を表す。 $t = 0$ で成長を開始する。溶液は、成長前に過飽和にしておく。そのときのモル分率を $X_{i\infty}^l$ で表す。 $z > 0$ で $z = 0$ 近傍のモル分率は、時間変化がstep関数的である。 $t < 0$ で、 $X_{i\infty}^l$ の値をとり、 $t > 0$ で、 X_{ig}^l の値をとる。この状況を実現するため、温度を急降下する方法が採られる。このため、step-coolingと呼ば

Implicit initial condition

†Hiromoto Susawa

The Originator of Light-Emitting Diode
with Distributed Bragg Reflector (DBR-LED)

Seto, Aichi, Japan

Correspondence should be addressed to H. Susawa
(e-mail: automobile_21@yahoo.co.jp).

れる。実験的に、一定の組成が得られる傾向があることが観測されている。組成を一定に保つのは、デバイス作成の基本である。組成一定のバルク結晶の価値は高い。現在まで、量産技術は存在しない。

成長開始直後、モル分率は step 関数的に分布する。 $z = 0$ で X_{ig}^1 の値をとり、 $z > 0$ では、

X_{io}^1 の値をとる。 $z = 0$ の勾配は無限大となり、数学上、定義できない。Diffusion-limited model は、現実を良く表すことが知られている。そこで、このモデルを対象にする。このモデルでは、その勾配が必要である。数値シミュレーションを行うとき、この状況をなんとか計算して、その後のモル分率を求める。特に注意を払わなければ、差分近似で次のようにプログラミングするだろう。

$$\left. \frac{\partial X_i^1}{\partial z} \right|_{z=0, t=0} = \frac{X_{io}^1 - X_{ig}^1}{\Delta z} \quad (1)$$

はたして、これでいいのだろうか。

3. 問題点

初期の平衡状態図は実験誤差が大きく、式(1)に関連する誤差は実験誤差の範囲内だったと考えられる。平衡状態図には、時間の概念がない。しかし、現実の世界は時間が有限である。一方、速度を論じる移動現象では境界層が重要である。境界層とは、バルクの領域と、なんらかの界面の間で、モル分率などが徐々に変化する領域である。すなわち、バルク領域と界面の値は、必ずずれる。平衡状態図からの延長では、これを見落とす場合がある。

そのことを踏まえて、改めて、式(1)を考察する。この式から、境界層の厚さは、どの成分でも同じであると解釈される。しかし、異なる場合、理論的なずれが生じる。拡散が大きいと境界層厚さは大きくなる。蒸気圧の高い物質の拡散は大きいはずである。すなわち、境界層厚さは各成分で異なる。この考察により、この式は、diffusion-limited の条件を表していない。計算結果はその点を踏まえて解釈すべきである。

4. 解決策 - 陰的初期条件の提案 -

$t > 0$ のとき、問題となっているパラメータには、全領域で、適切な値や手続きなどが割り当てられているとする。時間をさかのぼり、 $t = 0$ 直前まで近づける。その極限でもって、初期における問題のパラメータを計算する。こ

の操作では、初期状態を求める前に $t > 0$ の状況を必要とする。すなわち、初期条件は陰的である。 $t = 0$ の状況は定義しない。その代わりに $t \rightarrow +0$ を採用する。

4.1 具体例

本発表の例では、問題となっているパラメータは X_i^1 の勾配である。提案した方法により成長開始時の勾配をプログラミングする場合、候補として次式がある。 D_i : 成分 i の拡散定数。

$$\left. \frac{\partial X_i^1}{\partial z} \right|_{z=0, t \rightarrow +0} = \frac{X_{io}^1 - X_{ig}^1}{\sqrt{\pi D_i \Delta t}} \quad (2)$$

5. 考察

提案した方法は、未来が過去を決めるので、日常の感覚から離れ始めるが、 $t \rightarrow +0$ の極限でも $t > 0$ で成立する支配方程式は有効なので、式(2)は、意図したモデルを表現する。

さらに議論を発展させると、step-coolingは、理論的にも、組成が一定になることが示される¹⁾。式(2)は、境界層が $\sqrt{\pi D_i t}$ に比例することを示す。これが、組成一定のメカニズムである。これは未だ実現していない高品質固溶体バルク成長実現の手がかりである。そして、従来のバルク成長方法は固溶体には適さないことがわかる。装置を最初から設計し直すことも有り得る。

6. 結論

不連続的に変化する初期現象に対し、特に注意を払わずプログラミングすると、そのプログラムは意図した状況を表現せず(理論誤差)、誤って解釈する可能性を示した。

解決策として、陰的初期条件を提案した。この条件は、意図した現実世界を表す。

溶液成長に応用した。導出された式の解釈により、未解決の製造方法の手がかりを発見した。

参考文献

- 1) Susawa, H.: An Improvement of Diffusion-Limited Model with Implicit Initial Condition and The Physical Mechanism Based on Thermal Engineering to Fabricate Light Emitting Diodes from Liquid Solution, Proceedings of 4th International Forum on Heat Transfer, IFHT2016-1881 (2016).
- 2) 諏澤寛源, 廣谷真澄, 加藤俊宏: GaAs 基板上の反射層付面発光 LED, 第 50 回応用物理学会学術講演会, 28p-ZB-10 (1989 秋).