

## Моделирование тепло- и массопереноса в процессе роста монокристаллов карбида кремния

© Б.А. Кириллов, А.С. Бакин, С.Н. Солнышкин\*, Ю.М. Таиров

Кафедра микроэлектроники;

\*Кафедра высшей математики

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет,  
197376 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 7 октября 1996 г. Принята к печати 25 октября 1996 г.)

В последнее время резко возрос интерес к карбиду кремния как полупроводнику, пригодному для изготовления приборов, работающих в экстремальных условиях. Основная задача в настоящее время состоит в массовом получении монокристаллов карбида кремния с низкой концентрацией дефектов и высокой однородностью свойств по сечению. Данная работа посвящена численному моделированию процессов тепло- и массопереноса при выращивании монокристаллов SiC сублимационным методом. Полученные результаты позволяют проследить влияние условий роста на распределение температуры и основных компонентов в паровой фазе, а также радиальный профиль скорости роста монокристалла для различных стадий процесса выращивания.

### Введение

Карбид кремния является уникальным по своим свойствам полупроводниковым материалом. На его основе возможно изготовление приборов, работающих при высоких температурах, а также мощных и радиационно стойких приборов. Основная задача в настоящее время состоит в массовом получении монокристаллов карбида кремния с низкой концентрацией дефектов и высокой однородностью свойств по сечению.

Основные усилия исследователей были направлены на изучение процессов, протекающих в реакторе во время роста кристаллов [1–3]. Тем не менее эти процессы еще недостаточно изучены вследствие невозможности применения современного исследовательского оборудования из-за очень высоких рабочих температур в зоне роста. Поэтому в последнее время были предприняты попытки математического моделирования процессов тепло- и массообмена с учетом протекающих в ростовой ячейке химических реакций с помощью современной вычислительной техники [4].

Установки, используемые в различных лабораториях для выращивания монокристаллов SiC, отличаются по конфигурации реакторов и ростовых ячеек, а также по условиям роста. Настоящая работа посвящена численному моделированию процессов тепло- и массопереноса в реакторе в условиях, используемых для выращивания монокристаллов SiC в Лаборатории широкозонных полупроводников Электротехнического университета Санкт-Петербурга (СПбГЭТУ). Цель работы — выявление закономерностей этих процессов на различных стадиях технологического цикла выращивания кристаллов SiC с помощью построения математической модели этих процессов и проведения вычислительного эксперимента.

### Постановка задачи

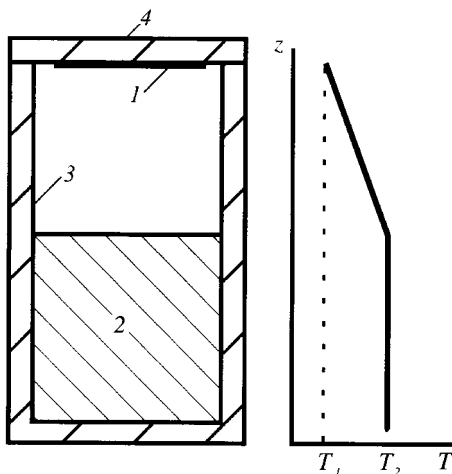
Среди основных и наиболее важных аспектов изучения закономерностей процессов тепло- и массообмена при выращивании монокристаллов SiC можно выделить следующие:

— определение распределения температуры в ростовой ячейке с целью оптимизации условий роста монокристаллов SiC для снижения плотности дефектов и изучение влияния конвекции газовой смеси на распределение основных газовых компонентов, ответственных за кристаллизацию, и, как следствие, на скорость роста и форму фронта роста слитка SiC;

— определение влияния изменения условий кристаллизации SiC в течение технологического цикла. Изменение условий кристаллизации карбида кремния обусловлено процессами графитизации и спекания исходной засыпки;

— учет вклада химических реакций, протекающих у графитовой стенки реактора и приводящих к образованию газовых компонентов, которые участвуют в осаждении карбида кремния.

Рассмотрим конвекцию многокомпонентной газовой смеси в двумерной цилиндрической полости радиусом  $R$  (рис. 1). Ростовая полость наполнена инертным газом (аргоном) под давлением  $P_{Ar}$ . Источником паров является измельченный порошок из SiC (2), засыпанный в графитовый стакан 3 так, что расстояние от поверхности засыпки до затравки 1 равно  $H$ . Сверху стакан закрывается крышкой 4 с закрепленной на ней затравкой. Графитовый стакан помещается в печь резисторного нагрева так, что засыпка находится в области более высокой температуры, чем температура крышки с затравкой  $T_1$ . Задаваемый таким образом градиент температуры создает условия для выращивания монокристаллов SiC в процессе сублимации засыпки, последующего переноса



**Рис. 1.** Схематическое изображение реактора для выращивания монокристаллов SiC и распределение осевого градиента температур.

реагентов к затравке и их осаждения. В описанной системе, когда градиент температуры направлен вниз, возможно возникновение свободной конвекции, стремящейся перемешать газовые компоненты так, чтобы установилась постоянная температура.

Поскольку газ в реакторе прозрачен для теплового излучения графитовых стенок, перенос излучения можно не рассматривать. Таким образом, будем искать распределение температуры за счет механизмов теплопроводности и конвекции. Массоперенос будем рассматривать с учетом диффузии и конвекции.

Конвективное движение многокомпонентной газовой смеси в реакторе с цилиндрической симметрией будем описывать системой уравнений Навье–Стокса совместно с уравнениями переноса каждого компонента. В переменных  $\Psi - \omega$ , где  $\Psi$  — функция тока, а  $\omega$  — вихрь, исходная система имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(rv_r T) + \frac{\partial}{\partial z}(v_z T) &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r\chi(T) \frac{\partial T}{\partial r} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \chi(T) \frac{\partial T}{\partial z} \right], \\ \frac{\partial c^{(i)}}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(v_r c^{(i)}) + \frac{\partial}{\partial z}(v_z c^{(i)}) &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r\varphi^{(i)}(T) \frac{\partial c^{(i)}}{\partial r} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \varphi^{(i)}(T) \frac{\partial c^{(i)}}{\partial z} \right], \\ \frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r}(v_r \omega) + \frac{\partial}{\partial z}(v_z \omega) &= \frac{\partial}{\partial r} \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} [rv(T)\omega] \right\} \\ &+ \frac{\partial^2}{\partial z^2} [v(T)\omega] - G \frac{\partial T}{\partial r} - \sum_{i=1}^N G^{(i)} \frac{\partial c^{(i)}}{\partial r}, \\ \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} &= -\omega, \quad i = 1, \dots, N-1, \quad (1) \end{aligned}$$

где

$$v_r = -\frac{1}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial z}, \quad v_z = \frac{1}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial r}, \quad \omega = \frac{\partial v_r}{\partial z} - \frac{\partial v_z}{\partial r},$$

$$G = \beta_T g, \quad G^{(i)} = \beta_c^{(i)} g,$$

$V = (v_r, v_z)$  — скорость течения,  $T$  — температура,  $c^{(i)}$  — мольная концентрация  $i$ -го компонента,  $\nu(T)$  — коэффициента кинематической вязкости,  $\chi(T)$  — коэффициент температуропроводности,  $\varphi^{(i)}$  — коэффициент диффузии  $i$ -го компонента в смеси;  $\beta_T$  — коэффициент температурного расширения вещества,  $\beta_c^{(i)}$  — коэффициент концентрационного расширения  $i$ -го компонента,  $g$  — ускорение свободного падения.

Расчетная область для системы уравнений (1) покрывает половину (от оси до боковой стенки) осевого сечения ростовой ячейки. Для этой области рассматривается внутренняя краевая задача, решение которой должно удовлетворять граничным условиям:

$$1) \text{ на твердых стенках: } \Psi|_b = \frac{\partial \Psi}{\partial n} \Big|_b = \text{const},$$

$T|_b = T(\xi)$ ,  $\varphi^{(i)}(T) \frac{\partial c^{(i)}}{\partial n} \Big|_b = q^{(i)}(\xi)$ , где  $\xi$  — текущая координата;

$$2) \text{ на оси симметрии: } \Psi|_{r=0} = 0, \omega|_{r=0} = 0, \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0, \frac{\partial^2 c^{(i)}}{\partial r^2} \Big|_{r=0} = 0.$$

Граничные условия для вихря  $\omega$  на твердых стенках определяются в конечно-разностном виде (см. формулы (3)).

## Методика численного решения и обсуждения результатов

Для численного решения системы (1) используется постоянный шаг по времени  $\tau$ , а расчетная область покрывается равномерной по  $z$  и  $r$  сеткой:

$$\Omega_h = \{z_i, 0 \leq i \leq \dim Z; r_j, 0 \leq j \leq \dim R\},$$

для которой  $h_i = z_{i+1} - z_i$  — постоянный шаг по  $z$ ;  $h_j = r_{j+1} - r_j$  — постоянный шаг по  $r$ ;  $\dim Z + 1$  — количество точек на образующей боковой стенки реактора;  $\dim R + 1$  — количество точек по  $r$  на основании реактора. Все переменные считаются определенными в узлах сетки. Исходная система уравнений (1) аппроксимируется на сетке  $\Omega_h$  продольно-поперечной схемой в операторном виде:

$$\begin{aligned} \frac{\hat{T} - T}{\tau/2} &= L_r \left[ \frac{1}{r}, r\chi(T), 1 \right] \bar{T} - k_r \left( \frac{1}{r}, rv_r \right) \bar{T} \\ &+ L_z [1, \chi(T), 1] T - k_z (1, v_z) T, \\ \frac{\hat{T} - \bar{T}}{\tau/2} &= L_r \left[ \frac{1}{r}, r\chi(T), 1 \right] \bar{T} - k_r \left( \frac{1}{r}, rv_r \right) \bar{T} \\ &+ L_z [1, \chi(T), 1] \hat{T} - k_z (1, v_z) \hat{T}, \end{aligned}$$

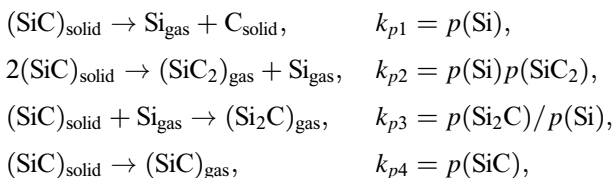
$$\begin{aligned} \frac{\bar{c}^{(i)} - c^{(i)}}{\tau/2} &= L_r \left[ \frac{1}{r}, r\varphi^{(i)}(T), 1 \right] \bar{c}^{(i)} - k_r \left( \frac{1}{r}, rv_r \right) \bar{c}^{(i)} \\ &\quad + L_z [1, r\varphi^{(i)}, 1] c^{(i)} - k_z (1, v_z) c^{(i)}, \\ \frac{\hat{c}^{(i)} - \bar{c}^{(i)}}{\tau/2} &= L_r \left[ \frac{1}{r}, r\varphi^{(i)}(T), 1 \right] \hat{c}^{(i)} - k_r \left( \frac{1}{r}, rv_r \right) \hat{c}^{(i)} \\ &\quad + L_z [1, r\varphi^{(i)}, 1] \hat{c}^{(i)} - k_z (1, v_z) \hat{c}^{(i)}, \\ \frac{\bar{\omega} - \omega}{\tau/2} &= L_r \left[ 1, \frac{1}{r}, r\nu(T) \right] \bar{\omega} - k_r (1, v_r) \bar{\omega} \\ &\quad + L_z [1, 1, \nu(T)] \omega - k_z (1, v_z) \omega - G_T - \sum_{i=1}^N G_c^{(i)}, \\ \frac{\hat{\omega} - \bar{\omega}}{\tau/2} &= L_r \left[ 1, \frac{1}{r}, r\nu(T) \right] \hat{\omega} - k_r (1, v_r) \hat{\omega} \\ &\quad + L_z [1, 1, \nu(T)] \hat{\omega} - k_z (1, v_z) \hat{\omega} - G_T - \sum_{i=1}^N G_c^{(i)}, \\ \frac{\bar{\Psi} - \Psi^s}{\tau/2} &= L_r \left( 1, \frac{1}{r}, 1 \right) \bar{\Psi} + L_z \left( \frac{1}{r}, 1, 1 \right) \Psi^s + \hat{\omega} r, \\ \frac{\Psi^{s+1} - \bar{\Psi}}{\tau/2} &= L_r \left( 1, \frac{1}{r}, 1 \right) \bar{\Psi} + L_z \left( \frac{1}{r}, 1, 1 \right) \Psi^{s+1} + \hat{\omega} r. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь  $T$ ,  $c^{(i)}$ ,  $\omega$  — температура, концентрация  $i$ -го компонента и вихрь на слое  $n$ ;  $\bar{T}$ ,  $\bar{c}^{(i)}$ ,  $\bar{\omega}$  — то же на слое  $n+1/2$ ;  $\hat{T}$ ,  $\hat{c}^{(i)}$ ,  $\hat{\omega}$  — то же на слое  $n+1$ ;  $s$  — номер итерации  $\Psi$ ;  $L_r$ ,  $L_z$ ,  $k_r$ ,  $k_z$  — операторы:

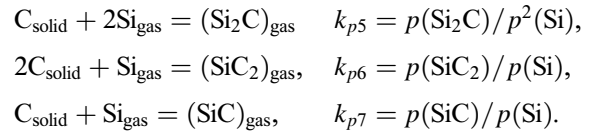
$$L_x(a, b, d)u = a \frac{\partial}{\partial x} \left[ b \frac{\partial}{\partial x} (du) \right], \quad k_x(a, b)u = a \frac{\partial}{\partial x} (bu).$$

Граничные условия по температуре задавались фиксированными по внутренним стенкам графитового стакана и по поверхности засыпки (см. рис. 1). Особенности конструкции тигля в реальной установке для выращивания монокристаллов SiC учитывались с помощью задания различных граничных условий по температуре. Кроме того, при моделировании процессов тепло- и массопереноса в газовом объеме на различных стадиях роста, когда растущий кристалл заполняет часть исходного объема ячейки роста, решалось уравнение Фурье для определения температуры фронта роста.

При задании граничных условий по концентрациям основных компонентов в газовой смеси учитывались температурные зависимости парциальных давлений этих компонентов. Диссоциации поликристаллической засыпки и осаждение монокристалла карбида кремния описывается реакциями [5];



где  $k_{pi}$  — константа равновесия  $i$ -й реакции;  $p(j)$  — парциальное давление  $j$ -го компонента. Граничные условия для концентраций учитывают также химические реакции, протекающие на боковой стенке графитового стакана и приводящие к дополнительному образованию углеродосодержащих компонентов  $\text{SiC}_2$ ,  $\text{Si}_2\text{C}$  и  $\text{SiC}$  [1]:



В литературе встречаются различные данные по температурным зависимостям парциальных давлений указанных газовых компонентов [6,7], поэтому расчеты проводились для всех известных данных. Кроме этого учитывалось изменение условий роста в течение технологического цикла выращивания монокристалла SiC в результате уменьшения газового объема в ростовой ячейке, а также графитизация поликристаллической засыпки.

Граничные условия для вихря вычисляются на каждом временном слое. На твердых стенках они получаются при реализации условий прилипания, которые означают равенство нулю всех компонентов скорости в произвольной системе координат, т.е. равны нулю любые частные производные функции тока на твердой стенке с произвольным углом наклона. Таким образом, для  $\omega$  на твердых стенках имеем

$$\begin{aligned} \omega_{i, \text{dim } R} &= \frac{\Psi_{i, \text{dim } R-2} + 7\Psi_{i, \text{dim } R} - 8\Psi_{i, \text{dim } R-1}}{2r_j h_j^2}, \\ \omega_{0j} &= \frac{\Psi_{2,j} + 7\Psi_{0,j} - 8\Psi_{1,j}}{2r_j h_j^2}, \\ \omega_{\text{dim } Z, j} &= \frac{\Psi_{\text{dim } Z-2, j} + 7\Psi_{\text{dim } Z, j} - 8\Psi_{\text{dim } Z-1, j}}{2r_j h_j^2}. \end{aligned} \quad (3)$$

Система (2) решается последовательными прогонами. Алгоритм решения подобной математической задачи подробно описан в работе [8].

Скорость роста монокристалла SiC определялась на основе допущения о том, что лимитирующей стадией процесса роста является массоперенос углеродосодержащих компонентов [9]:

$$V_{\text{growth}} = M_{\text{SiC}} j_C / \rho_{\text{SiC}}, \quad (4)$$

где  $M_{\text{SiC}}$  — молярная масса карбида кремния;  $\rho_{\text{SiC}}$  — плотность монокристаллического SiC. Суммарный поток газовых компонентов, содержащих углерод, описывается первым законом Фика:

$$j_C = - \left( \varphi_{\text{Si}_2\text{C}-\text{Ar}} \frac{dc_{\text{Si}_2\text{C}}}{dz} + 2\varphi_{\text{SiC}_2-\text{Ar}} \frac{dc_{\text{SiC}_2}}{dz} + \varphi_{\text{SiC}-\text{Ar}} \frac{dc_{\text{SiC}}}{dz} \right). \quad (5)$$

В соотношении (5)  $\varphi_{i-\text{Ar}}$  — бинарный коэффициент диффузии  $i$ -го компонента в аргоне (считаем  $p(\text{Ar}) \gg p(\text{Si})$ ,

Мольная концентрация  $C$  на изоконцентрационных линиях 1–4 и шаг  $\Delta C$  между соседними изоконцентрационными линиями на рис. 3, а–с

Стадия роста	Номер изоконцентрационной линии	Si (рис. 3, а)		Si <sub>2</sub> C (рис. 3, б)		SiC <sub>2</sub> (рис. 3, с)	
		$C$	$\Delta C$	$C$	$\Delta C$	$C$	$\Delta C$
I	1	$2.5 \cdot 10^{-7}$	$2.4 \cdot 10^{-7}$	$6.0 \cdot 10^{-8}$	$5.8 \cdot 10^{-8}$	$8.9 \cdot 10^{-10}$	$8.0 \cdot 10^{-11}$
	2	$2.6 \cdot 10^{-6}$		$6.4 \cdot 10^{-7}$		$8.8 \cdot 10^{-11}$	
II	3	$6.0 \cdot 10^{-9}$	$5.0 \cdot 10^{-10}$	$1.1 \cdot 10^{-9}$	$1.1 \cdot 10^{-10}$	$1.8 \cdot 10^{-9}$	$2.4 \cdot 10^{-10}$
	4	$1.1 \cdot 10^{-8}$		$2.2 \cdot 10^{-9}$		$4.3 \cdot 10^{-9}$	

Примечание. Стадии роста: I — начальная, II — промежуточная; единицы измерения величин  $C$  и  $\Delta C$ : моль/см<sup>3</sup>.

$p(\text{Si}_2\text{C}), p(\text{SiC}_2), p(\text{SiC})$ );  $dc^{(i)}/dz$  — градиент концентрации  $i$ -го компонента у поверхности роста. Коэффициенты диффузии  $\varphi_{i-\text{Ar}}$  рассчитывались на основе данных [10], градиенты концентраций получаются в результате решения уравнений конвективного и диффузионного массопереноса системы (1) для каждого компонента.

Для квазизамкнутых систем, в которых возможно возникновение свободной конвекции, для описания гидродинамики вводят безразмерные критерии подобия [11]:

а) критерий Прандтля:  $Pr = \nu/\chi = \nu\rho c_p/\kappa$ ,

б) критерий Рэлея:  $Ra = g\beta_T\delta TH^3/\nu\chi = g\beta_T\delta \times TH^3\rho c_p/\nu\kappa$ , где  $\nu$  — кинематическая вязкость,  $\chi$  — температуропроводность,  $\rho$  — плотность,  $c_p$  — удельная теплоемкость,  $\kappa$  — теплопроводность и  $\beta_T$  — коэффициент температурного расширения аргона;  $g$  — ускорение свободного падения;  $\delta T$  и  $H$  — характерные перепад температур и размер ячейки роста соответственно. Значения указанных констант и параметров для аргона получены экстраполяцией данных [12] в область высоких температур, а также оценкой на основе термодинамических законов.

Моделирование процессов тепло- и массопереноса проводилось для различных условий выращивания кристаллов SiC: давление аргона  $P_{\text{Ar}} = 10^{-3} \div 1$  атм, температура роста  $T = 2400 \div 2700$  К, осевой градиент температуры  $\text{grad}T = 20 \div 30$  К/см. Размеры расчетной области, покрываемой сеткой  $\Omega_h$ , составляют  $R = 1.5 \div 2$  см,  $H = 1 \div 3$  см. Проведенные вычислительные эксперименты показали, что для указанных условий роста и конфигурации реактора, используемого в реальной установке, влияние конвекции на тепло- и массообмен незначительно. Заметным это влияние становится при  $P_{\text{Ar}} \geq 1.5$  атм.

На рис. 2–4 и в таблице приведены примеры результатов расчетов на начальной и промежуточной стадиях роста для ростовой ячейки радиусом  $R = 1.5$  см и исходном расстоянии от поверхности засыпки до затравки  $H = 3$  см при давлении аргона  $P_{\text{Ar}} = 0.5$  атм. Число Рэлея составляет  $Ra = 92$  и  $Ra = 8$  для начальной и промежуточной стадий роста соответственно, число Прандтля в процессе роста изменяется незначительно и составляет  $Pr = 0.93$ .

Изменение распределения температуры в процессе роста показано на рис. 2. Высокая теплопроводность монокристаллического карбида кремния обуславливает незначительное отличие температуры фронта роста кристалла от температуры графитовых стенок реактора. Это приводит к увеличению осевого градиента температуры в газовой среде ячейки.

Как известно, изменение условий роста проявляется, в частности, в графитизации поликристаллической засыпки. Это вызывает перераспределение газовых компонентов в процессе роста (см. рис. 3). Можно отметить, что при этом осевая компонента градиента концентраций SiC<sub>2</sub> изначально направлена вверх (см. рис. 3, с, слева и таблицу) в отличие от Si и Si<sub>2</sub>C. Следовательно, на профиль скорости роста  $V_{\text{growth}}$  (рис. 4, кривая 1) и, в конечном счете, на форму фронта роста кристалла основное влияние будет оказывать распределение Si<sub>2</sub>C. В процессе роста направление потока SiC<sub>2</sub> меняется на обратное (градиент направлен вниз — см. рис. 3, с, справа и таблицу), при этом вклад этого компонента оказывается значительным, и профиль скорости роста (форма фронта роста) становится выпуклым (рис. 4, кривая 2). Экспериментальные результаты подтверждают такое изменение формы фронта роста.

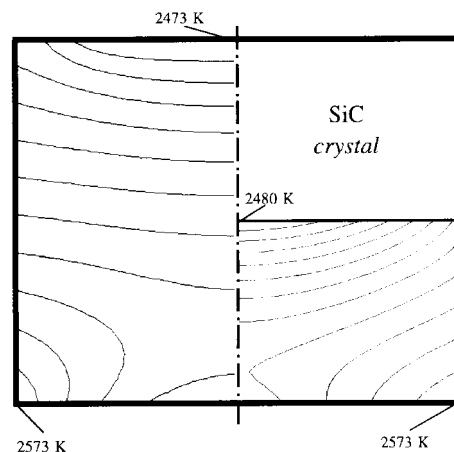
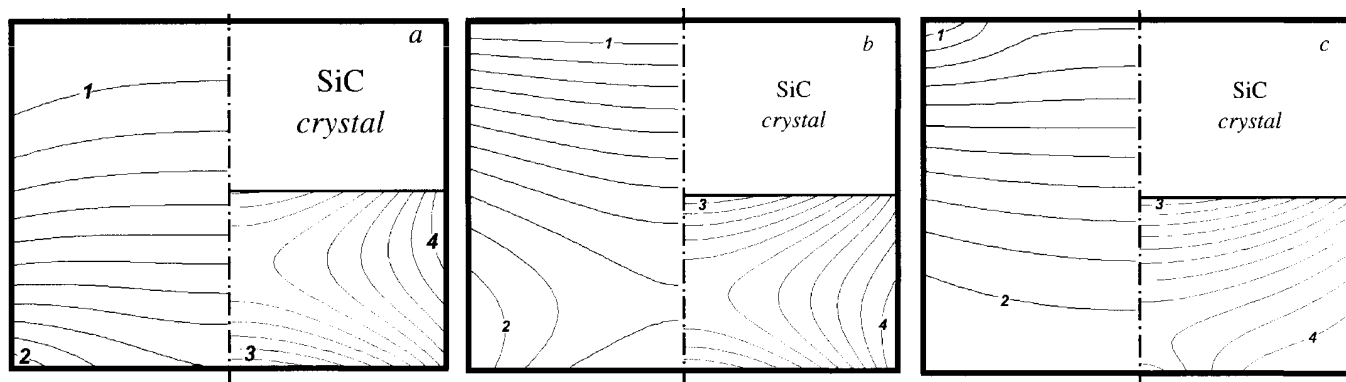
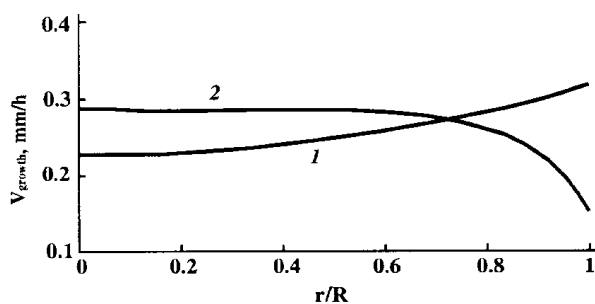


Рис. 2. Распределение температуры в газовом объеме ячейки роста на начальной (слева) и промежуточной (справа) стадиях роста. Шаг между изотермами 8.3 К.



**Рис. 3.** Распределение основных газовых компонентов в ростовой ячейке на начальной (слева) и промежуточной (справа) стадиях роста. В таблице приведены значения молярных концентраций  $C$  для каждого компонента на обеих стадиях роста, а также шаг между изоконцентрационными линиями  $\Delta C$ .



**Рис. 4.** Радиальный профиль скорости роста  $V_{\text{growth}}$  монокристалла SiC на начальной (1) и промежуточной (2) стадиях роста.

Изменение распределение компонентов в газовой фазе приводит к изменению условий испарения–конденсации, изменению равновесных концентраций и к различию собственных точечных дефектов (вследствие различия в отклонениях от стехиометрического состава), расположенных по длине и по радиусу кристалла, а также к возникновению механических напряжений в кристаллической решетке. Эти процессы на практике усугубляются флуктуациями технологических условий. К сожалению, в настоящее время отсутствуют результаты исследований получаемых монокристаллов SiC по распределению собственных точечных дефектов и корреляция их с условиями роста.

Несмотря на указанные выше упрощения, используемые в расчетах, полученные результаты удовлетворительно совпадают с экспериментальными. В настоящее время на основе этих результатов проводятся расчеты для усложненной конфигурации ростовой ячейки, а также моделирование механических напряжений в объеме кристалла.

## Список литературы

- [1] Yu.M. Tairov, V.F. Tsvetkov. *J. Cryst. Growth*, **52**, 146 (1981).
- [2] Yu.M. Tairov, V.F. Tsvetkov. In: *Crystal Growth and Characterization of Polytype Structures*, ed. by P. Krish-

na (Oxford–N.Y.–Toronto–Sydney–Paris–Frankfurt, Pergamon Press, 1983) v. 7. p. 111.

- [3] Yu.M. Tairov, V.F. Tsvetkov. In: *Growth and Defect Structures* (в сер.: *Crystals. Growth, Properties, and Applications*) ed. by H.C. Freyhardt (Berlin–Heidelberg–N.Y.–Tokio, Springer Verlag, 1984). v. 10. p. 1.
- [4] D. Hofmann, M. Heinze, A. Winnacker, F. Durst, L. Kadinski et al. *J. Cryst. Growth*, **146**, 214 (1995).
- [5] Ф. Райхель, Ю.М. Таиров, М.Г. Траваджян, В.Ф. Цветков. Изв. АН СССР. Неорг. матер., **16**, 1011 (1980).
- [6] J. Drowart, G. De Maria. *Silicon Carbide — a High Temperature Semiconductor* (N.Y., Pergamon Press, 1960) p. 16.
- [7] Ю.М. Таиров, В.Ф. Цветков. Изв. АН СССР. Неорг. матер., **13**, 1606 (1976).
- [8] Б.П. Герасимов, А.В. Лесуновский, В.В. Митин, Т.А. Борисова, Д.Я. Ровенский. В. сб.: *Численные методы*, под ред. А.А. Самарского (М., Наука, 1989) с. 112.
- [9] Ю.М. Таиров, В.А. Таранец, В.Ф. Цветков. Изв. АН СССР. Неорг. матер., **15**, 9 (1979).
- [10] S.K. Lilov, Yu.M. Tairov, V.F. Tsvetkov. *J. Cryst. Growth*, **46**, 269 (1979).
- [11] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Теоретическая физика. Гидродинамика* (М., Наука, 1988) т. VI.
- [12] *Gas Encyclopaedia* (Elsevier, 1976).

Редактор Т.А. Полянская

## Heat and mass transfer simulation during silicon carbide single-crystal growth

B.A. Kirillov, A.S. Bakin, S.N. Solnyshin\*, Yu.M. Tairov.

Microelectronics Dept.,

\*Higher Mathematics Dept.

St.-Petersburg State Electrotechnical University

197376 St.-Petersburg, Russia

**Abstract** Silicon carbide currently attracts a growing interest as a semiconductor material for devices operating in severe environments. At present the main problem is a large scale production of silicon carbide single-crystals with low defect concentration and high homogeneity of properties. Numerical simulation of heat and mass transfer during silicon carbide single-crystals growth by sublimation method is described in this paper. The results obtained show the influence of the growth conditions on thermal field and main components distribution in vapour phase as well as radial growth rate profile for different stages of the growth process.

Fax: (812) 234-31-64 (A.S. Bakin)

E-mail: root@me.etu.spb.ru (A.S. Bakin)