

УДК 621.315.592

И.А. Жмакин, (4 курс, каф. КИ), М.С. Рамм, к. ф.-м. н.

НЕКОТОРЫЕ ВОПРОСЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ВНУТРЕННЕГО СОСТОЯНИЯ РАСТУЩИХ ОБЪЕМНЫХ КРИСТАЛЛОВ

При выращивании объемных кристаллов весьма важно иметь адекватное представление об эволюции их параметров в процессе роста, ибо от этого зависят свойства получаемого в результате образца.

К таким параметрам относится, в первую очередь, форма кристалла и граничные условия, температурное поле. Вследствие неоднородности последнего, возникают упругие напряжения. В свою очередь, достаточно высокие напряжения могут повлечь возникновение или размножение различных дефектов кристаллической решетки. Большое же количество дефектов может влиять на внутренние поля достаточно сильно, чтобы это требовало учета. В частности, в случае присутствия в кристалле значительного количества дислокаций, может возникать пластическая деформация, а также значительные изменения его внутренней структуры, в результате чего свойства могут значительно отличаться от предполагаемых.

Мы производили расчет анизотропных термоупругих напряжений по заданному температурному полю в осесимметричном кристалле карбида кремния методами конечных объемов [1] и конечных элементов. Сравнивалась эффективность этих методов для данных задач.

Далее, по рассчитанным для некоторых моментов роста полям, моделировалась пластическая деформация за счет дислокаций. Для расчета динамики дислокаций использовалась широко применяемая в подобных случаях модель Александра-Хаазена-Сумино [2-6].

К сожалению, экспериментальные данные [7], доступ к которым удалось получить, не дают возможности получить с хорошей точностью константы этой модели для исследуемого нами карбида кремния традиционными способами. По причине заметных отличий его свойств от свойств материалов, активно исследовавшихся ранее, возникает вопрос о возможной необходимости корректировки модели. На данный момент были сделаны иллюстративные расчеты с константами для других материалов [8-9].

В дальнейшем планируется предпринять попытку замены общепринятой чисто эмпирической модели некоторым теоретически обоснованным подходом. Наиболее вероятным путем решения представляется развитие классического подхода к описанию динамики дислокаций, основанному на теории упругости.

ЛИТЕРАТУРА:

1. J. Fainberg, H.-J. Leister, *Comp. Methods Appl. Mech. Engr.* 137 (1996) 167-174.
2. I. Yonenaga, K. Sumino, *phys. stat. sol. (a)* 50, 685 (1978)
3. M. Suezawa, K. Sumino, I. Yonenaga, *phys. stat. sol. (a)* 51, 217 (1979)
4. J. Včlkl, G. Müller, *J. Cryst. Growth* 97 (1989) 136-145
5. D. Maroudas, R. A. Brown, *J. Cryst. Growth* 108 (1991) 399-415
6. C.T. Tsai, *J. Cryst. Growth* 113 (1991) 499-507
7. A.V. Samant, W.L. Zhou, P. Pirouz, *phys. stat. sol. (a)* 166, 155 (1998)
8. S.Yu. Karpov, et al, *J. Cryst. Growth* 211 (2000) 347-351.
9. I.A. Zhmakin, et al, *Diamond and Rel. Mat.* 9 (2000) 446-451.