

На правах рукописи

КУЛИК Алексей Викторович

ГИДРОДИНАМИКА И ТЕПЛОМАССООБМЕН ПРИ
ВЫРАЩИВАНИИ ОБЪЕМНЫХ КРИСТАЛЛОВ КАРБИДА
КРЕМНИЯ

Специальность

01.02.05 — Механика жидкости, газа и плазмы

Автореферат
диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург 2004

Работа выполнена в Балтийском Государственном Техническом Университете "Военмех", Санкт-Петербург, Россия

Научный руководитель: кандидат технических наук,
с.н.с. Ю.М. Циркунов.

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
проф. Е.М. Смирнов,
доктор физико-математических наук,
с.н.с. Ю.Е. Горбачев.

Ведущая организация: Физико-технический институт
им. А.Ф. Иоффе РАН.

Зашита состоится "7" декабря 2004 года в 16⁰⁰ часов на заседании диссертационного совета Д 212.229.07 в ГОУ ВПО "Санкт-Петербургский государственный политехнический университет" (195251, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29, корп. 1, кафедра гидроаэродинамики).

С диссертацией можно ознакомиться в фундаментальной библиотеке ГОУ ВПО "Санкт-Петербургский государственный политехнический университет".

Автореферат разослан "4" ноября 2004 года.

Учёный секретарь диссертационного совета,
кандидат физико-математических наук,
доцент

Д.К. Зайцев

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы

Одним из наиболее перспективных широкозонных полупроводниковых материалов, используемых в производстве высокотемпературных и силовых электронных приборов, является карбид кремния (SiC). Это связано с тем, что в SiC сочетаются такие важные свойства, как высокое напряжение пробоя, высокая теплопроводность, а также химическая и радиационная стойкость. Основной технологией получения объемных кристаллов SiC является сублимационный рост. Это газофазный метод, идея которого заключается в сублимации исходного материала — порошка SiC, транспорте образующихся паров и последующей их конденсации на затравочном кристалле. Понимание физико-химических процессов, протекающих в ростовой камере в процессе сублимационного роста объемных кристаллов карбида кремния, исключительно важно для получения кристаллов SiC высокого качества и большого диаметра. Экспериментальное исследование данной технологии представляет собой чрезвычайно трудоемкую и дорогостоящую процедуру, так как ввиду крайне высоких температур, характерных для этого процесса (свыше 2200°C), какие-либо наблюдения или измерения практически невозможны. В связи с этим, весьма актуальной становится задача численного моделирования процесса роста. В настоящее время достаточно детальная математическая модель этого процесса, включающая в себя решение задач эволюции фронта растущего кристалла и массопереноса в порошковом источнике, находится в стадии активной разработки. Она является достаточно сложной и поддается только численному анализу. Последний позволяет существенно уточнить особенности ростового процесса и отчасти осуществить его оптимизацию при меньшем количестве физических экспериментов.

Цели работы

- 1) Разработка математической модели технологического процесса выращивания объемных кристаллов карбида кремния, описывающей слож-

ную структуру течения газовой смеси в ростовой камере с учетом многочисленных физико-химических явлений, а также сопряженный теплообмен во всей ростовой установке, включая ее индукционный нагрев.

2) Программная реализация метода решения задачи газодинамики и массопереноса в ростовой камере и теплообмена во всей ростовой установке.

3) Анализ течения и физико-химических процессов, протекающих в ростовой камере, выявление общих закономерностей и специфических черт таких процессов, а также факторов, существенно влияющих на процесс роста кристалла.

4) Параметрическое исследование сублимационного роста, направленное на изучение зависимости эффективности использования источника, скорости роста и формы кристалла от основных технологических параметров, таких как положение обмотки индуктора, мощность нагрева и давление в системе.

5) Выбор и программная реализация эффективных алгоритмов оптимизации, применимых для задач роста кристаллов из паровой фазы. Решение задач оптимального проектирования и оптимального управления с использованием разработанного аппарата для численного моделирования процесса сублимационного роста кристаллов SiC.

Основные положения, выносимые на защиту

1) Математическая модель технологического процесса сублимационного роста объемных кристаллов карбида кремния и алгоритм численного решения задачи о течении и тепломассопереносе в процессе сублимационного роста кристаллов.

2) Результаты исследования процесса сублимационного роста объемных кристаллов карбида кремния. Результаты параметрического исследования влияния положения обмотки индуктора, мощности нагрева и давления в системе на эффективность использования источника, скорость роста и форму кристалла.

3) Результаты решения задач оптимального проектирования и опти-

мального управления в применении к процессу роста объемных кристаллов из газовой фазы.

Научная новизна работы

1) Впервые сформулирована и апробирована двумерная модель процесса роста объемного кристалла SiC из паровой фазы, включающая в себя течение многокомпонентной газовой смеси в ростовой ячейке и в пористой химически реагирующей среде, сопряженный теплообмен, гетерогенные химические реакции. Модель позволяет исследовать эволюцию формы растущего кристалла и параметров порошковой засыпки источника.

2) В результате выполненного численного исследования детально проанализированы процессы тепломассообмена, сопровождающие сублимационный рост объемных кристаллов. Впервые проанализирована эволюция параметров порошковой засыпки в ходе длительного ростового процесса с учетом процессов сублимации и рекристаллизации гранул порошкового источника. Обнаружено, что неравномерное распределение температуры в объеме порошкового источника приводит к существенно неоднородной скорости испарения материала источника и, как следствие, к низкой эффективности его использования из-за рекристаллизации.

3) Исследовано влияние технологических параметров на процессы тепломассопереноса в ростовой установке и, как следствие, на рост кристалла и эволюцию параметров порошковой засыпки. Установлено, что наиболее эффективным способом управления формой растущего кристалла является изменение положения обмотки индуктора. При этом контроль скорости роста может осуществляться путем варьирования мощности нагрева и давления в системе, которые не оказывают существенного влияния на форму кристалла.

4) Впервые сформулирована и решена задача многопараметрической оптимизации применительно к процессу сублимационного роста кристаллов SiC, включая оптимизацию геометрии ростового тигля (задача оптимального проектирования) и оптимизацию режимов ростового процесса (задача оптимального управления).

Достоверность полученных результатов

Проведение серии тестовых расчетов показало хорошее совпадение результатов, полученных с помощью программного пакета, разработанного в процессе выполнения данной работы, с опубликованными эталонными решениями и экспериментальными данными. Решение задач конвекции и массопереноса в реальных ростовых установках верифицировано с использованием экспериментальных данных, полученных в исследовательских и промышленных установках, по скорости роста и форме кристалла, областям графитизации и рекристаллизации в порошковом источнике.

Практическая ценность работы

- 1) Комплекс прикладных программ, разработанный при непосредственном и активном участии автора диссертации, позволяет оперативно выполнять методические расчеты, а также решать сопряженные задачи конвекции, теплообмена и роста объемных кристаллов в исследовательских и промышленных ростовых установках. Созданный комплекс программ может быть использован для выбора оптимальных условий проведения технологического процесса, а также при проектировании нового оборудования для выращивания объемных кристаллов.
- 2) Результаты, полученные автором диссертации, позволили выявить влияние технологических параметров на процессы испарения/осаждения в порошковой засыпке, на скорость роста и форму растущего кристалла.
- 3) Разработанная в диссертации модель и методика оптимизации может быть использована для решения задач оптимального проектирования конструкции других ростовых установок и оптимального управления процессом сублимационного роста кристаллов.

Личный вклад автора

Автором проведен анализ характерных времен и линейных масштабов газодинамических и физико-химических процессов при выращивании объемных кристаллов методом сублимации и получены оценки характерных значений параметров подобия. На основе этих оценок предложена и обоснована математическая модель процессов переноса в ростовой камере.

Разработан алгоритм сопряженного расчета течения и массопереноса в газовой фазе и пористой среде. Алгоритм реализован на языке C++ в рамках пакета программ "Виртуальный Реактор". Выполнено тестирование разработанного программного обеспечения.

Автором численно исследована эволюция формы растущего кристалла и параметров порошковой засыпки. Совместно с экспериментаторами выполнена верификация модели процесса сублимационного роста кристаллов SiC.

Автором выбраны, реализованы и адаптированы для задач роста кристаллов из газовой фазы эффективные методы оптимизации. Разработан "Оптимизационный Модуль" для пакета программ "Виртуальный Реактор".

Автором осуществлены все необходимые расчеты и проведен анализ полученных результатов.

Апробация работы

Основные результаты работы докладывались на российских и международных конференциях и семинарах: Европейской конференции по карбиду кремния и родственным материалам ECSCRM-98 (Монпелье, Франция, 1998), 11-ой Американской конференции по выращиванию кристаллов и эпитаксии ACCGE-11 (Таксон, США, 1999), 10-ой Европейской конференции по алмазам и родственным материалам Diamond-99 (Прага, Чехия, 1999), 3-ем Международном семинаре "Карбид кремния и родственные материалы" (Великий Новгород, Россия, 2000), Международной конференции MRS (Сан-Франциско, США, 2000), Международной конференции ICCG13-ICVGE11 (Киото, Япония, 2001), Четвертой международной конференции "Рост монокристаллов и тепломассоперенос" ICSC-01 (Обнинск, Россия, 2001), 4-ом Международном семинаре "Карбид кремния и родственные материалы" (Великий Новгород, Россия, 2002), X-ой Национальной Конференции по Росту Кристаллов НКРК-2002 (Москва, Россия, 2002), Европейской конференции по карбиду кремния и родственным материалам ECSCRM-2002 (Линчепинг, Швеция, 2002), Международной

конференции по полупроводниковым кристаллам ICSSC-2002 (Закопане, Польша, 2002), Пятой международной конференции "Рост монокристаллов и тепломассоперенос" ICSC-03 (Обнинск, Россия, 2003), Международной конференции по карбиду кремния и родственным материалам ICSCRM-2003 (Лион, Франция, 2003), 4-ом Международном симпозиуме по моделированию роста кристаллов IWMCG-4 (Фукуока, Япония, 2003), 5-ом Международном семинаре "Карбид кремния и родственные материалы" (Великий Новгород, Россия, 2004), семинарах ООО "Софт-Импакт" (2000), сектора численного моделирования ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН (2003) и кафедры плазмогазодинамики БГТУ "Военмех" (2003).

Публикации по теме диссертации

Основные результаты работы изложены в восемнадцати научных публикациях.

Структура и объём работы

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, списка литературы из 82 наименований и трех приложений. Работа изложена на 175 страницах машинописного текста и включает 6 таблиц и 72 рисунка.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обосновывается актуальность выбранной темы исследования, ее научное и практическое значение, сформулированы основные задачи работы.

Первая глава диссертации содержит обзор литературных данных по тематике работы. Рассматриваются основные свойства карбида кремния и методы получения объемных кристаллов SiC. Проведенный анализ литературы показывает, что наиболее перспективной технологией получения объемных кристаллов карбида кремния является метод сублимационного роста. Идея этой газофазной технологии заключается в сублимации исходного материала — порошка SiC, транспорте образующихся паров и последующей их конденсации на затравочном кристалле. Схема установки для

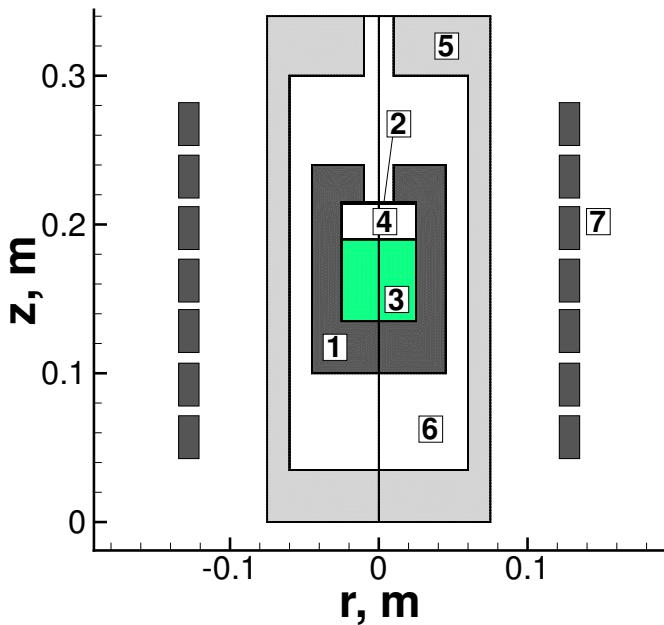


Рис. 1. Схема ростовой установки. 1 — графитовый тигель, 2 — затравочный кристалл, 3 — порошок SiC, 4 — газовый зазор ростовой камеры, 5 — графитовая изоляция, 6 — газовый зазор между тиглем и изоляцией, 7 — обмотка индуктора

сублимационного выращивания кристаллов SiC представлена на рис. 1. В первой главе также описывается история развития и современное положение вопроса о численном моделировании технологии сублимационного роста SiC и делается вывод о том, какие физические явления и механизмы переноса должны быть учтены в модели данной технологии.

Вторая глава содержит описание математической модели сублимационного роста SiC. Для выбора адекватной модели течения и массопереноса в ростовой камере оцениваются величины чисел подобия, характерных для данной задачи. Исходя из проведенных оценок, решение задачи о тепломассопереносе в газовой области ростовой камеры осуществляется с помощью уравнений Навье-Стокса для ламинарного существенно дозвукового течения многокомпонентной газовой смеси. Коэффициенты молекулярного переноса для чистых газов и коэффициенты диффузии в бинарной смеси вычисляются по формулам, являющимся результатом решения уравнения Больцмана методом Энскога-Чепмена. Для расчета коэффициентов вязкости и теплопроводности смеси используются аппроксимации Уилки и Мэйсона-Саксены, соответственно, а эффективные коэффициенты диффузии вычисляются по формуле Уилки. Течение и тепломассоперенос в пористой среде порошковой засыпки рассчитывается в рамках модели

Дарси-Бринкмана-Форхаймера. Коэффициент проницаемости и инерционный коэффициент вычисляются по формулам Эргуна. В качестве модели структуры пористой среды используется модель перекрывающихся сфер. Модель сопряженного теплообмена во всей ростовой установке учитывает перенос тепла механизмами теплопроводности, конвекции и радиации. Для расчета источников джоулева тепловыделения решаются уравнения Максвелла. Для моделирования длительного процесса применяется квазистационарный подход. При этом модель способна предсказывать эволюцию в течение процесса формы растущего кристалла и свойств порошковой засыпки.

Характерной особенностью настоящей модели являются специфические граничные условия, задаваемые на непроницаемых границах, на которых протекают гетерогенные химические реакции. Для решения задачи о химическом взаимодействии поверхности и газовой смеси применяется квазитермодинамический подход. При этом учитывается наличие стефановского потока, возникающего вследствие процессов испарения/конденсации, и его влияние на общее течение в ростовой камере.

Третья глава посвящена описанию численного метода решения задачи о гидродинамике и тепломассообмене в ростовой установке. Задача решается в многоблочной геометрии с использованием неструктурированных сеток. Для дискретизации определяющих уравнений используется метод конечных объемов. Расчет поля течения осуществляется с помощью метода SIMPLEC. При этом, сеточные узлы для хранения значений давления и компонент скоростей совпадают, т.е. применяется так называемая совмещенная сетка. В третьей главе содержится также описание результатов решения тестовых задач и исследование сеточной сходимости для различных схем аппроксимации конвективных слагаемых. В качестве тестовых выбраны: задача о естественной тепловой конвекции в квадратной каверне и задача о естественной тепловой конвекции в каверне, частично заполненной пористой средой. Сравнение результатов тестовых расчетов с опубликованными данными показывает хорошее совпадение с эталонными

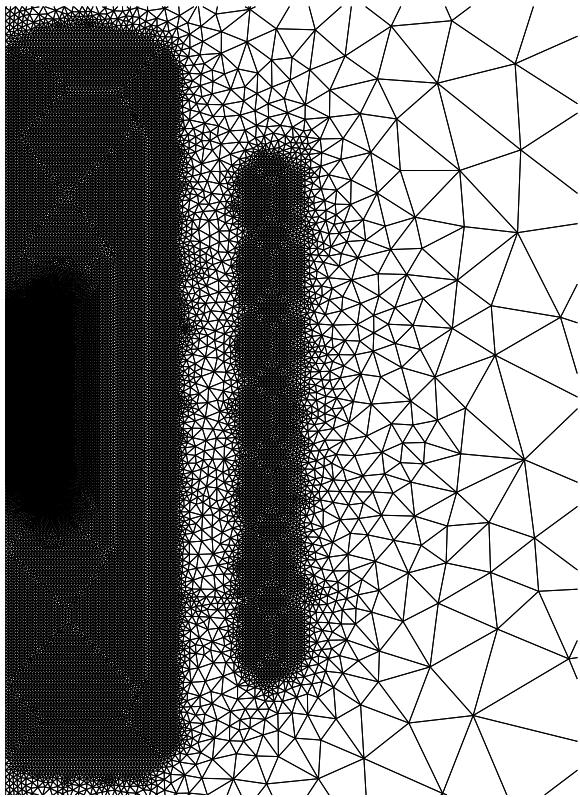


Рис. 2. Фрагмент расчетной сетки для области, включающей в себя тепловой узел, обмотку индуктора и окружающее пространство

решениями и результатами экспериментов.

Четвертая глава содержит результаты численного исследования процесса сублимационного роста объемных кристаллов карбида кремния. В **разделе 4.1** содержится описание расчетной области и методических расчетов, направленных на изучение сеточной сходимости. На рис. 2 представлен фрагмент расчетной сетки, использовавшейся для проведения вычислений.

Раздел 4.2 посвящен изучению начальной стадии ростового процесса. Решение уравнений Максвелла в области, включающей в себя тепловой узел реактора, обмотку индуктора и окружающее пространство, позволяет найти распределение источников джоулема тепловыделения в ростовой системе, которые необходимы для расчета теплового поля. Распределение температуры в тепловом узле реактора в начальный момент времени показано на рис. 3. Расчеты показывают, что тепловое поле в реакторе характеризуется сильной неоднородностью. Эта неоднородность распределения температуры приводит к тому, что материал порошкового источни-

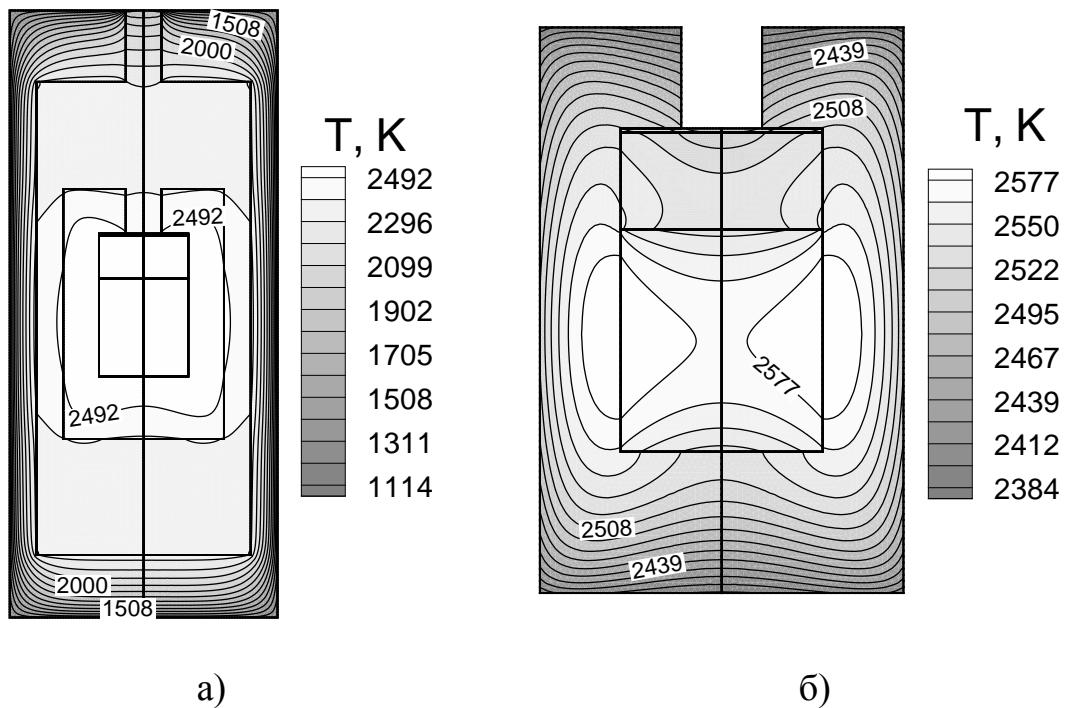


Рис. 3. (а) Распределение температуры в ростовой системе. (б) Распределение температуры в тигле и ростовой камере

ка также испаряется очень неоднородно, что приводит к возникновению областей испарения и конденсации пара на поверхностях гранул. Распределение областей испарения материала порошка и конденсации пара на гранулах представлено на рис. 4, а. Зоны, в которых интенсивно протекают гетерогенные химические реакции, сопровождающиеся процессами испарения/конденсации, узкие и занимают сравнительно малую долю объема порошковой засыпки. Значительная часть объема, располагающаяся в центре засыпки, находится в состоянии равновесия; химические реакции между паром и поверхностью гранул там практически не протекают.

Схема течения, реализующегося в ростовой камере, представлена на рис. 4, б. Серый прямоугольник на этом рисунке соответствует порошковой засыпке. Течение имеет вынужденно-конвективный характер, определяемый процессами испарения/конденсации. На этом рисунке хорошо видно, что все линии тока начинаются у стенки тигля, в зоне, где наблюдается сублимация гранул SiC порошка (область линии DF на рис. 4, а).

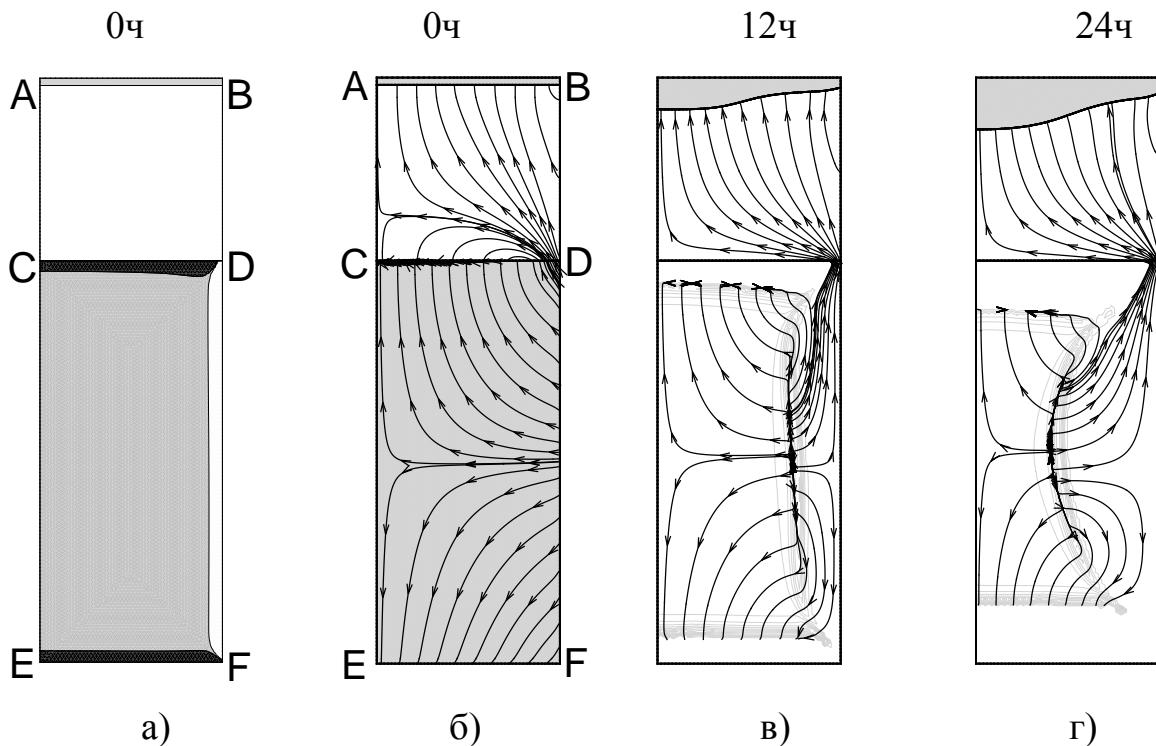


Рис. 4. (а) Расположение областей испарения материала порошка (белый цвет) и конденсации пара на гранулы (черный цвет). (б)–(г) Картина течения в ростовой камере в начальный момент времени и через 12 ч и 24 ч после начала процесса

Далее часть газовой смеси, образовавшейся в результате испарения гранул, просачивается через пористую среду засыпки, поступает в газовый зазор, пересекает его и, в конечном итоге, осаждается на затравочном кристалле. Значительная часть газа, испарившегося в "горячей" области засыпки, течет вниз к донной части ростовой камеры, где этот газ осаждается на поверхностях гранул. Аналогичным образом дело обстоит и с верхней зоной осаждения — существенная доля пара, просачивающегося через пористую среду порошка вверх по направлению к затравочному кристаллу, не достигает газового зазора, оседая в приповерхностном слое засыпки. Также, отчетливо видно, что некоторое количество пара, попавшего в газовый зазор, "разворачивается", возвращается в засыпку и также оседает в приповерхностном слое. Факт осаждения материала на гранулах порошковой засыпки подтверждается экспериментальными наблюдениями. Так,

например, в работе [P.J. Wellmann et al., J. Crystal Growth 216 (2000) p. 263] отмечается формирование "плотного диска" на поверхности засыпки, вызванное конденсацией паров в ее приповерхностной области.

Раздел 4.3 посвящен изучению развития ростового процесса во времени. На рис. 5 показано изменение во времени распределения пористости по объему порошковой засыпки. Белый цвет на этом рисунке показывает высокую пористость, т.е. области испарившегося материала, а черный цвет — низкую пористость и, соответственно, зоны плотного материала. Из рисунка видно, что процессы сублимации ($S^m > 0$) и рекристаллизации ($S^m < 0$) гранул порошка приводят с течением времени к образованию протяженных областей полностью испарившегося материала и уплотненного вследствие осаждения паров материала. Зона сублимировавшего порошка располагается в периферийной части источника у внутренней стени графитового тигля, а плотный материал образует структуры, по форме напоминающие диски, в верхней и нижней частях источника. При этом, в центральной части порошковой засыпки, которая находится в условиях, близких к равновесию, существует зона, в которой в течение всего ростового процесса не происходит существенного изменения пористости.

Изменение пористости материала порошковой засыпки должно приводить к перераспределению в объеме засыпки интенсивности протекания гетерогенных химических реакций на поверхностях гранул и, следовательно, процессов сублимации/рекристаллизации. На рис. 5 представлено распределение по объему засыпки источников массы S^m в различные моменты времени. Хорошо видно, что процессы полного испарения гранул и уплотнения порошка приводят к смещению областей интенсивного протекания процессов испарения/конденсации на периферию испарившегося и уплотненного материала, соответственно.

Изменение параметров порошковой засыпки существенным образом влияет на картину течения в ростовой камере. На рис. 4, в, г показана структура течения через 12 часов и через 24 часа после начала процесса. На этих рисунках серыми линиями в объеме порошковой засыпки показа-

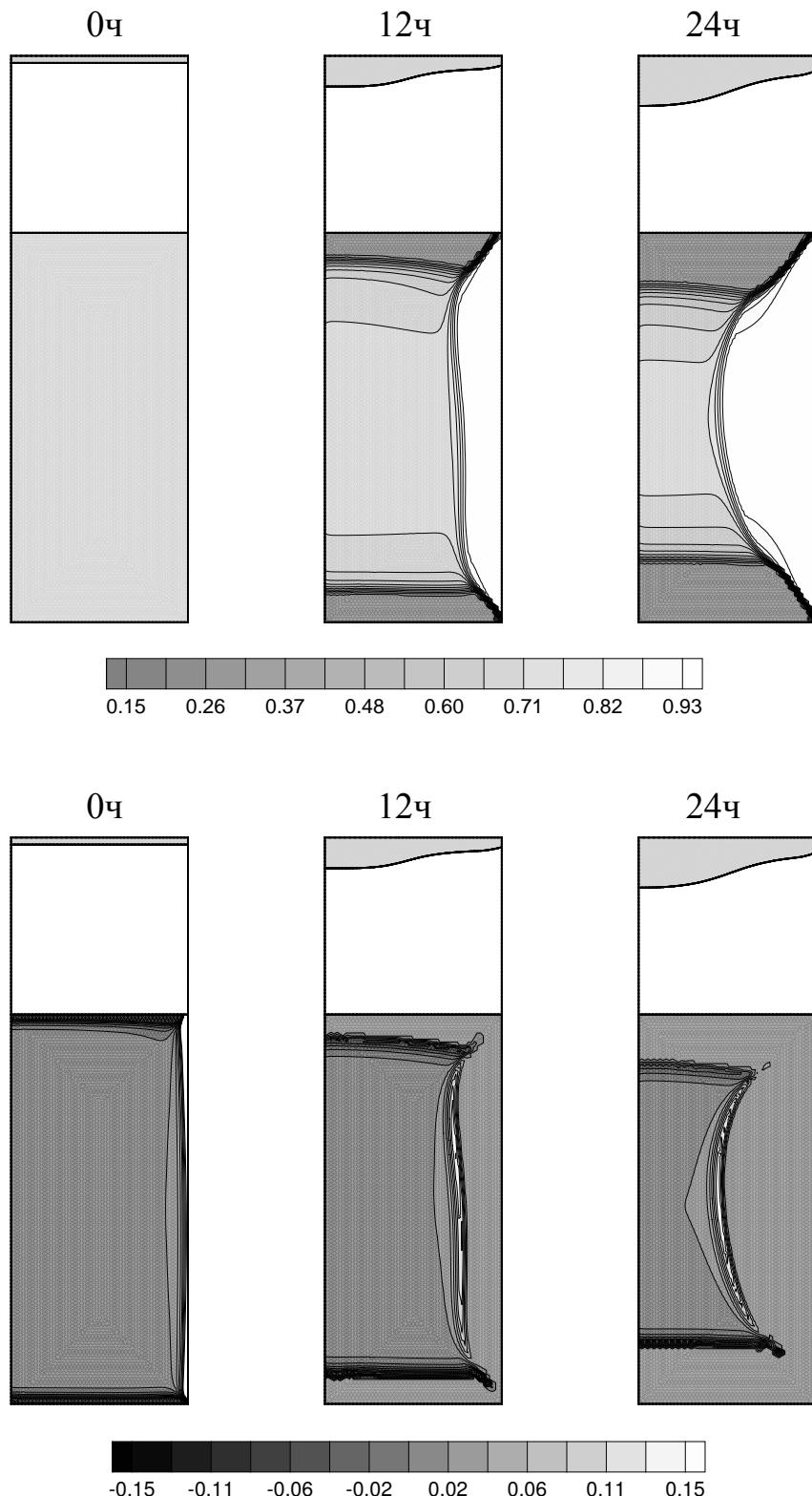


Рис. 5. Изменение во времени пористости порошковой засыпки (вверху) и источников массы за счет процессов испарения/конденсации S^m , кг/(м³·с) (внизу). Начальная пористость равна 0,7

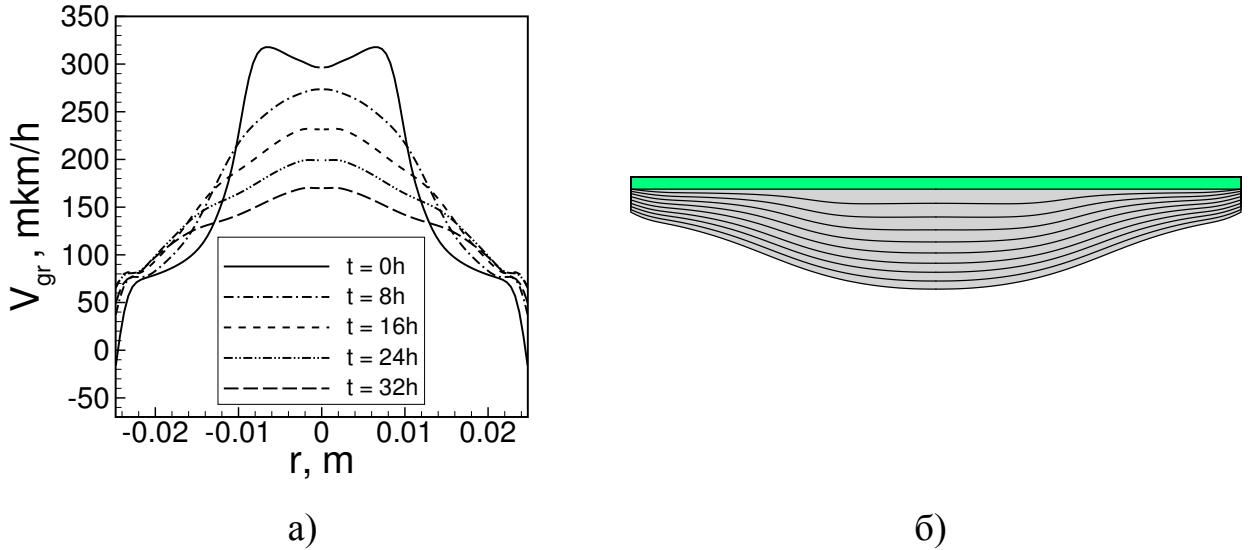


Рис. 6. (а) Распределение скорости роста V_{gr} [мкм/ч] по радиусу растущего кристалла в различные моменты времени в течение ростового процесса. (б) Эволюция формы кристалла в течение ростового процесса. Прямоугольник в верхней части рисунка — затравочный кристалл. Профили построены с шагом в 4 часа. Общее время роста — 36 часов

ны области сублимации и рекристаллизации гранул (см. рис. 5). Хорошо видно, что линии тока исходят из областей интенсивного испарения материала засыпки, а заканчиваются они или на поверхности растущего кристалла или в областях осаждения внутри самой порошковой засыпки.

На рис. 6, *a* представлено распределение скорости роста V_{gr} по радиусу кристалла в различные моменты времени. Видно, что в течение процесса величина скорости роста уменьшается, а ее распределение становится более равномерным. Такое поведение также подтверждается экспериментальными наблюдениями (см., например, [M. Selder et al., J. Crystal Growth 211 (2000) p. 333]). Изменение в течение процесса профиля скорости роста по поверхности кристалла приводит к сложному характеру изменения формы кристалла в ходе его роста. Необходимо отметить, что видоизменение формы кристалла в свою очередь приводит к изменению распределения температуры в системе и, следовательно, влияет на все физико-химические процессы, протекающие в ростовой камере. Эволюция формы кристалла в

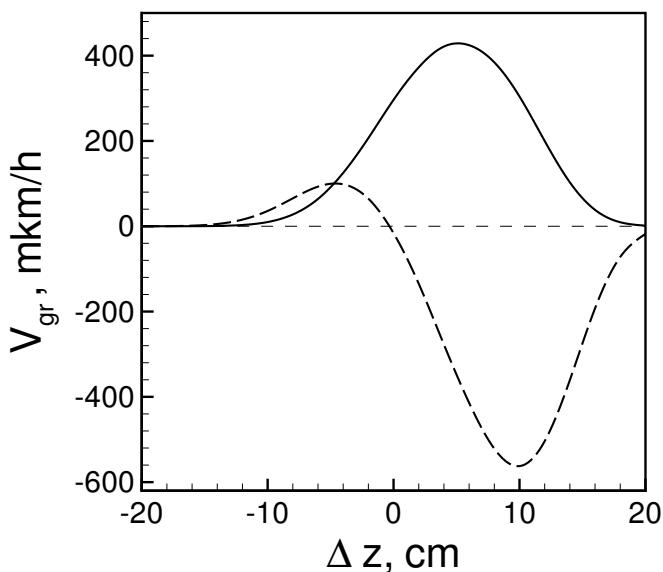


Рис. 7. Зависимость скорости роста V_{gr} [мкм/ч] в центре кристалла (сплошная линия) и на его периферии (пунктирная линия) в начальный момент времени от смещения обмотки индуктора Δz

течение ростового процесса представлена на рис. 6, б.

В разделе 4.4 анализируется влияние технологических параметров на процессы тепломассообмена в ростовой установке и, как следствие, на рост кристалла и эволюцию порошковой засыпки. В качестве параметров выбраны мощность нагрева, положение обмотки индуктора и давление в системе.

Обнаружено, что изменение положения обмотки индуктора приводит к изменению как скорости роста кристалла, так и его формы. На рис. 7 представлена зависимость скорости роста в начальный момент времени в центре кристалла и на его периферии от смещения обмотки индуктора. Данный график показывает, что при перемещении обмотки происходит изменение величины скорости роста и ее распределения по поверхности кристалла. Кроме того, смещение обмотки индуктора существенным образом влияет на характер процессов сублимации/рекристаллизации материала порошковой засыпки. Установлено, что мощность нагрева и давление в системе существенно влияют на величину скорости роста, но практически не изменяют форму кристалла.

Пятая глава посвящена решению задачи об оптимизации процесса сублимационного роста кристаллов SiC с помощью разработанного аппарата для численного моделирования этой технологии. В главе рассматрива-

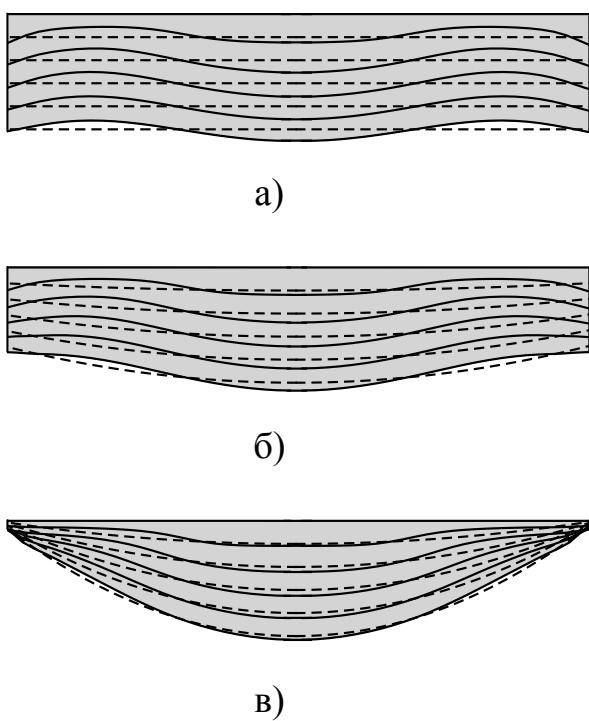


Рис. 8. Формы кристалла, полученные в результате решения задачи оптимального управления процессом. Сплошные линии — расчетные профили кристалла, пунктирные линии — требуемые профили. Профили построены с шагом в 4 часа. а) Плоский фронт кристаллизации. б) Слегка выпуклый фронт кристаллизации. в) Сильно выпуклый фронт кристаллизации.

ется общая формулировка задачи оптимизации (**Раздел 5.1**), анализируются существующие методы численной оптимизации и выбираются наиболее эффективные методы (**Раздел 5.2**). В **разделе 5.3** формулируется и решается задача оптимального проектирования реактора для роста кристаллов SiC. В этой задаче осуществляется оптимизация теплового поля в ростовой системе путем изменения геометрии ростового тигля. В **разделе 5.4** рассматривается задача оптимального управления процессом роста объемных кристаллов SiC. Целью решения задачи является достижение роста кристалла заданной формы. Параметрами управления являются мощность нагрева и положение обмотки индуктора. Были решены три задачи: обеспечение плоского фронта кристаллизации в течении всего процесса, обеспечение слегка выпуклого фронта и сильно выпуклого фронта. В каждой из них задается требуемая скорость роста кристалла и его форма. На рис. 8 представлена эволюция профиля кристалла во времени, полученная в результате расчетов, в сравнении с требуемыми профилями в те же моменты. Полученные результаты демонстрируют высокую гибкость разработанного подхода и возможность его применения для эффективного управления реальными ростовыми процессами.

ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ

1) Разработана математическая модель и численный алгоритм для исследования процесса сублимационного роста объемных кристаллов карбида кремния. Модель включает в себя уравнения существенно дозвукового течения многокомпонентной газовой смеси в газовой области ростовой камеры и в пористой среде порошковой засыпки, уравнения сопряженного теплообмена с учетом переноса тепла механизмами теплопроводности, конвекции и радиации и уравнения Максвелла для расчета источников джоулева тепловыделения. Для моделирования длительного ростового процесса используется квазистационарный подход. Установлено, что модель адекватно описывает процесс сублимационного роста объемных кристаллов карбида кремния.

2) Обнаружено, что в течение ростового процесса скорость роста кристалла уменьшается, а ее распределение по поверхности кристалла становится более равномерным. Показано, что заметно неравномерное распределение температуры в объеме порошкового источника приводит к тому, что материал источника испаряется очень неоднородно, что приводит к низкой эффективности использования источника ($< 10\%$) из-за его рекристаллизации.

3) Установлено, что наиболее эффективным способом управления формой растущего кристалла является изменение положения обмотки индуктора. При этом контроль скорости роста может осуществляться путем варьирования мощности нагрева и давления в системе, которые не оказывают существенного влияния на форму кристалла.

4) Впервые поставлена и решена задача оптимизации сублимационного роста объемных кристаллов карбида кремния на основе развитой численной модели процесса. Для решения задачи использовались методы численной оптимизации. Найдены: наилучшая геометрия ростового тигля с точки зрения желательного распределения температуры в ростовой камере (задача оптимального проектирования) и законы изменения во времени положения и мощности индуктора, обеспечивающие получение кристал-

лов формы близкой к заданной (задача оптимального управления).

Основные результаты диссертации опубликованы в работах:

- [1] M.S. Ramm, E.N. Mokhov, S.E. Demina, M.G. Ramm, S.Yu. Karpov, A.D. Roenkov, Yu.A. Vodakov, A.S. Segal, A.N. Vorob'ev, A.V. Kulik, Yu.N. Makarov. Optimization of sublimation growth of SiC bulk crystals using modeling, Materials Sci. Engineering B 61–62 (1999), pp. 107–112.
- [2] S.Yu. Karpov, A.V. Kulik, I.A. Zhmakin, Yu.N. Makarov, E.N. Mokhov, M.G. Ramm, M.S. Ramm, A.D. Roenkov, Yu.A. Vodakov. Analysis of sublimation growth of bulk SiC crystals in tantalum container, Journal of Crystal Growth 211 (2000), pp. 347–351.
- [3] I.A. Zhmakin, A.V. Kulik, S.Yu. Karpov, S.E. Demina, M.S. Ramm, Yu.N. Makarov. Evolution of thermoelastic strain and dislocation density during sublimation growth of silicon carbide, Diamond and Related Materials 9 (2000), pp. 446–451.
- [4] M.S. Ramm, A.V. Kulik, I.A. Zhmakin, S.Yu. Karpov, O.V. Bord, S.E. Demina, Yu.N. Makarov. Modeling of PVT growth of bulk SiC crystals: general trends and 2" to 4" reactor scaling, Mat. Res. Soc. Proc. 616 (2000), pp. 227–233.
- [5] А.В. Кулик, О.В. Борд, С.Е. Демина, М.С. Рамм, С.Ю. Карпов, Ю.Н. Макаров. Роль депозитов в сублимационном росте объемных кристаллов карбида кремния, В сб. Карбид кремния и родственные материалы: Сборник докладов III Международного семинара / Составитель В.Е. Удальцов; НовГУ им. Ярослава Мудрого. — Великий Новгород, 2000 г., с. 44–52.
- [6] M.V. Bogdanov, A.O. Galyukov, S.Yu. Karpov, A.V. Kulik, S.K. Kochuguev, D.Kh. Ofengeim, A.V. Tsirulnikov, M.S. Ramm, A.I. Zhmakin, Yu.N. Makarov. Virtual reactor as a new tool for modeling and optimization of SiC bulk crystal growth, Journal of Crystal Growth 225 (2001), pp. 307–311.
- [7] M.V. Bogdanov, A.O. Galyukov, S.Yu. Karpov, A.V. Kulik, S.K. Kochuguev, D.Kh. Ofengeim, A.V. Tsirulnikov, I.A. Zhmakin, A.E. Komissarov, O.V. Bord, M.S. Ramm, A.I. Zhmakin, Yu.N. Makarov. Virtual reactor: a new tool for SiC bulk crystal growth study and optimization, Mat.

Sci. Forum, 353-356 (2001), pp. 57–60.

[8] A.V. Kulik, S.E. Demina, S.K. Kochuguev, D.Kh. Ofengeim, S.Yu. Karpov, A.N. Vorob'ev, M.V. Bogdanov, M.S. Ramm, A.I. Zhmakin, A.A. Alonso, S.G. Gurevich, Yu.N. Makarov. Inverse-computation design of a SiC bulk crystal growth system, Mat. Res. Soc. Proc. 640 (2001), pp. H1.6.1–H1.6.6.

[9] A.V. Kulik, M.V. Bogdanov, D.Kh. Ofengeim, S.K. Kochuguev, S.E. Demina, S.Yu. Karpov, A.I. Zhmakin, M.S. Ramm, Yu.N. Makarov. Modeling and optimization of SiC bulk crystal growth by sublimation technique, Рост монокристаллов и тепломассоперенос / Труды четвертой международной конференции. Обнинск: ГНЦ РФ ФЭИ, 2001, с. 698–705.

[10] M.V. Bogdanov, S.K. Kochuguev, A.V. Kulik, D.Kh. Ofengeim, A.V. Tsiryulnikov, I.A. Zhmakin, M.S. Ramm, A.I. Zhmakin, Yu.N. Makarov. SiC bulk crystal sublimation growth in Virtual Reactor, Abstracts of IV international seminar on silicon carbide and related materials, Novgorod the Great, Russia (2002), p. 20.

[11] А.В. Кулик, М.В. Богданов, А.И. Жмакин, С.Ю. Карпов, Д.Х. Офенгейм, М.С. Рамм и Ю.Н. Макаров. Роль процессов массопереноса в пористом источнике при сублимационном росте объемных кристаллов, Тезисы докладов: "Х-ая Национальная конференция по росту кристаллов (НКРК-2002) Москва, 24-29 ноября 2002г.", М., ИК РАН (2002), с. 387.

[12] М.В. Богданов, С.К. Кочугуев, А.В. Кулик, Д.Х. Офенгейм, М.С. Рамм, Е.О. Яворская и А.И. Жмакин. Численное моделирование эволюции фронта объемного кристалла при сублимационном росте SiC, Тезисы докладов: "Х-ая Национальная конференция по росту кристаллов (НКРК-2002) Москва, 24-29 ноября 2002г.", М., ИК РАН (2002), с. 390.

[13] M.V. Bogdanov, S.E. Demina, S.Yu. Karpov, A.V. Kulik, M.S. Ramm, Yu.N. Makarov, Advances in modeling of wide-bandgap bulk crystal growth, Cryst. Res. Technol. 38, No. 3-5 (2003), pp. 237–249.

[14] M.V. Bogdanov, S.E. Demina, S.Yu. Karpov, A.V. Kulik, D.Kh. Ofengeim, M.S. Ramm, E.N. Mokhov, A.D. Roenkov, Yu.A. Vodakov, Yu.A. Maka-

rov, H. Helava. Modeling Analysis of Free-Spreading Sublimation Growth of SiC Crystals, Mat. Res. Soc. Proc. 742 (2003), pp. 23-28.

[15] E.N. Mokhov, I.S. Barash, A.D. Roenkov, Yu.A. Vodakov, M.G. Ramm, S.Yu Karpov, M.S. Ramm, M.V. Bogdanov, S.E. Demina, A.V. Kulik, Yu.N. Makarov, H. Helava. Sublimation growth of faceted free-spreading SiC bulk crystals, Abstracts of V international seminar on silicon carbide and related materials, Novgorod the Great, Russia (2004), p. 9.

[16] M.V. Bogdanov, D.S. Kalinin, S.Yu. Karpov, S.K. Kochuguev, A.V. Kulik, I.D. Matukov, D.Kh. Ofengeim, M.S. Ramm, Yu.N. Makarov. Modeling of sublimation growth of bulk wide bandgap semiconductor crystals in Virtual Reactor, Abstracts of V international seminar on silicon carbide and related materials, Novgorod the Great, Russia (2004), p. 13.

[17] P.J. Wellmann, Z. Herro, S.A. Sakwe, P. Masri, M. Bogdanov, S. Karpov, A. Kulik, M. Ramm, Yu. Makarov. Analysis of graphitization during physical vapor transport growth of silicon carbide, Mat. Sci. Forum, 457-460 (2004), pp. 55–58.

[18] A.V. Kulik, M.V. Bogdanov, S.Yu. Karpov, M.S. Ramm, Yu.N. Makarov, Theoretical analysis of the mass transport in the powder charge in long-term bulk SiC growth, Mat. Sci. Forum, 457-460 (2004), pp. 67–70.