

Научная статья

УДК 681.5.01, 681.518

<https://doi.org/10.37493/2307-910X.2024.3.2>

Аналитическое решение уравнений Навье-Стокса для процессов тепломассопереноса в ходе роста монокристаллов карбида кремния

Виктор Иванович Алтухов¹, Александр Викторович Санкин², Владимир
Соломонович Саввин^{3*}, Александр Сергеевич Сигов⁴,
Дмитрий Валерьевич Семёнов⁵

^{1, 2} Северо-Кавказский федеральный университет, Пятигорский институт (филиал),
г. Пятигорск, Россия

³ Национальный исследовательский ядерный университет «Московский инженерно-физический институт»,
Институт атомной энергетики, г. Обнинск, Россия

⁴ МИРЭА - Российский технологический университет, г. Москва, Россия

⁵ Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, г. Москва, Россия

¹ altukhovv@mail.ru

² naukapgtu@yandex.ru

³ savvin-vs@yandex.ru

⁴ sigov@mirea.ru

⁵ dvs-2005@mail.ru

* Автор, ответственный за переписку: Владимир Соломонович Саввин, savvin-vs@yandex.ru

Аннотация. В научных исследованиях использована система уравнений Навье-Стокса, моделирующая процессы роста монокристаллов карбида кремния SiC. Карбид кремния (SiC), его твердые растворы (SiC-AlN) и структуры металл-полупроводник находят широкое применение при изготовлении диодов Шоттки, детекторов сигналов на сверхвысоких частотах, малоинерционных фотодетекторов модулированного света, полевых транзисторов. Карбид кремния и твердые растворы на его основе обладают уникальными свойствами: большой шириной запрещенной, высокой химической стойкостью, тепловой устойчивостью, высокими напряжениями электрического пробоя, механической прочностью, высокой теплопроводностью и другими важными электрическими и оптическими характеристиками. Монокристаллы карбида кремния являются незаменимыми материалами при изготовлении подложек диодов, буферных слоев, пленок и других элементов силовой электроники. Именно карбид кремния в ближайшей перспективе станет основным материалом силовой электроники нового поколения. Получены приближенные аналитические решения для распределения температуры и концентрации основных компонентов при стационарном случае. Суть приближения заключается в предположении стационарности режима роста кристалла на всем временном интервале процесса роста с учетом того, что короткая начальная стадия разогрева, и малый промежуток времени в конце роста кристалла приводит к зашлакованности объема шихты. Аналитическое решение, в отличие от трудоемких численных расчетов, позволяет проводить быструю оценку значений градиентов температур и концентраций компонент, скорости роста и других критических характеристик технологического процесса получения монокристаллов. Определены радиальные профили скорости роста на начальной и конечной стадиях выращивания. Полученные данные согласуются с результатами численных расчетов и могут быть использованы при анализе сублимационных процессов получения других тугоплавких соединений и управлении процессами роста монокристаллов SiC. Синтез монокристаллов SiC происходит при высоких температурах и поэтому нуждается в хорошо отлаженной системе автоматического регулирования и управления сложными

технологическими процессами сублимации и роста монокристаллов. Идет постоянный поиск и отрабатываются задачи моделирования сублимационных процессов тепло- и массопереноса в ячейке роста. Так в случаях синтеза возникают трудности с примесями и дефектами в образцах SiC. В статье получена система уравнений Навье-Стокса для диффузии компонентов смеси газов и найдено приближенное аналитическое решение, описывающее стационарную стадию процесса роста монокристаллов карбида кремния SiC. Получены распределения температур и концентраций компонентов смеси в ростовой камере. Определены радиальные профили скорости роста кристаллов на начальной и конечной стадиях роста. Оценка значений скорости роста кристалла согласуется с результатами численных расчетов других авторов и имеющимися экспериментальными данными. Найденные решения могут быть использованы при разработке систем автоматического регулирования и управления процессами роста совершенных монокристаллов SiC.

Ключевые слова: уравнения Навье-Стокса, скорость роста монокристалла карбида кремния, распределения температур и концентраций

Для цитирования: Алтухов В. И., Санкин А. В., Саввин В. С., Сигов А. С., Семёнов Д. В. Аналитическое решение уравнений Навье-Стокса для процессов тепло-массопереноса в ходе роста монокристаллов карбида кремния // Современная наука и инновации. 2024. № 3. С. 19-25. <https://doi.org/10.37493/2307-910X.2024.3.2>

Research article

Analytical solution of the navier-stokes equations for heat and mass transfer processes during the growth of silicon carbide single crystals

Victor I. Altukhov¹, Alexander V. Sankin², Vladimir S. Savvin^{3*}, Alexander S. Sigov⁴, Dmitry V. Semenov⁵

^{1,2} North-Caucasus Federal University, Pyatigorsk Institute (branch), Pyatigorsk, Russia

³ National Nuclear Research University "Moscow Institute of Engineering and Physics", Institute of Atomic Energy, Obninsk, Russia

⁴ MIREA - Russian University of Technology, Moscow, Russia

⁵ Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russia

¹ altukhovv@mail.ru

² naukapgту@yandex.ru

³ savvin-vs@yandex.ru

⁴ sigov@mirea.ru

⁵ dvs-2005@mail.ru

* **Corresponding author:** Vladimir S. Savvin, savvin-vs@yandex.ru

Abstract. A system of Navier-Stokes equations for the diffusion of gas mixture components is obtained and an approximate analytical solution describing the stationary stage of the silicon carbide single crystal growth process is found. Temperature distributions and concentrations of the mixture components in the growth chamber are obtained. The radial profiles of the crystal growth rate at the initial and final stages of growth are determined. The estimation of the crystal growth rate is consistent with the results of numerical calculations by other authors and the available experimental data. The solutions found can be used in the development of systems for automatic regulation and control of the growth processes of perfect SiC single crystals.

Keywords: Navier-Stokes equations, silicon carbide single crystal growth rate, temperature and concentration distributions

For citation: Altukhov VI, Sankin AV, Savvin VS, Sigov AS, Semenov DV. Analytical solution of the Navier-Stokes equations for heat and mass transfer processes during the growth of silicon carbide single crystals. Modern Science and Innovations. 2024;(3):19-25. <https://doi.org/10.37493/2307-910X.2024.3.2>

Introduction. The conditions of the gas mixture flow are the same in all sections of the pipe. At the initial stage of sublimation, the convection velocity v is small and, neglecting the dependence $T(r)$ at this stage according to (1) for a steady gas flow ($\partial T / \partial t = 0$), we obtain:

$$\frac{d}{dz} \left(\chi \frac{dT}{dz} - vT \right) = -\frac{v}{2c_p} (v'_{mn} + v'_{nm})^2. \quad (1)$$

At low speeds ($v \rightarrow 0$) in the first approximation from (1) we have:

$$\begin{aligned} \frac{dT}{dz} &= \text{const}, \\ T(z) &= T_0 - \frac{\delta T}{H} z, \quad T(H) \equiv T_c, \quad \delta T = T_0 - T_c. \end{aligned} \quad (2)$$

In the next approximation, we will take into account the radial temperature distribution. According to (9), we seek the temperature distribution $T(z, r)$ in the form

$$T(z, r) = T(z) + f(r). \quad (3)$$

Small changes in temperature due to internal friction of the mixture components can be neglected [2, 12], and then, according to equation (1), for the function $f(r)$ we obtain:

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{df}{dr} \right) = \frac{v(r)}{\chi} \frac{dT}{dz} = -\frac{2\langle v \rangle \delta T}{\chi H} \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right], \quad (4)$$

where used **Ошибка! Источник ссылки не найден.** and (2).

A solution (4) that has no singularities at $r = 0$ and satisfying the condition $f(r = R) = 0$, has the form:

$$f(r) = \frac{\langle v \rangle R^2 \delta T}{2\chi H} \left[\frac{3}{4} - \left(\frac{r}{R} \right)^2 + \frac{1}{4} \left(\frac{r}{R} \right)^4 \right]. \quad (5)$$

Temperature distribution in the chamber according to the equations (2), (3) and (5) qualitatively shown in Fig. 2.



Figure 2 – Schematic representation of isotherms in the growth chamber. $T_1 > \dots > T_5$.

Distribution of the concentration of the mixture components in the chamber. In the steady-state convection mode, the distribution of the mixture components $C(r)$ is described by an equation that has the form **Ошибка! Источник ссылки не найден.:**

$$\nabla \nabla C = D(\Delta C + k) \quad (6)$$

where the designation is introduced

$$k \equiv n \frac{k_T}{T} \Delta T + n \frac{k_P}{P} \Delta P. \quad (7)$$

To solve it, (6) it is necessary to estimate k . The values of k_T and k_P are small, and the gradients ∇T and ∇P are almost constant and, in the first approximation, ΔT and ΔP are close to zero. Then, in the first approximation, at low velocities ($v \rightarrow 0$) from (6) we have:

$$\frac{d^2}{dz^2} C(z) = 0, \quad C(z) = C_0 + Ez. \quad (8)$$

We will seek the distribution of the concentration of a certain component over the volume of the chamber in the form

$$C(z, r) = C(z) + \varphi(r) \quad (9)$$

In this case, taking (6) into account **Ошибка! Источник ссылки не найден.**, we obtain the equation

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{d\varphi}{dr} \right) = \frac{2\langle v \rangle}{D} \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right] E. \quad (10)$$

Solution (17) that has no singularities at $r = 0$ and under the condition $\varphi(r = R) = 0$, we obtain in the form:

$$\varphi(r) = \frac{\langle v \rangle E R^2}{2D} \left[\frac{3}{4} - \left(\frac{r}{R} \right)^2 + \frac{1}{4} \left(\frac{r}{R} \right)^4 \right]. \quad (11)$$

Thus:

$$C(z, r) = C_0 + Ez + \varphi(r). \quad (12)$$

The obtained distribution curves of the gas mixture components are shown in Fig. 3.

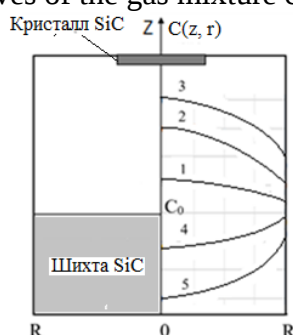


Figure 3 – Distribution of the molar concentration of the i -th component of the gas mixture. 1, 2, 3 – for $E > 0$ and 4, 5 $E < 0$, for the initial and final stages of SiC growth, respectively, according to the formula (11).

Estimation of the growth rate of SiC single crystal. According to (12) the limiting growth process is the mass transfer of carbon-containing components, and the growth rate of a single crystal is equal to

$$u = M \frac{J_C}{\rho}, \quad J_C = \sum_i D_i \frac{dC_i}{dz}, \quad i = (\text{SiC}, \text{Si}_2\text{C}, \text{SiC}_2), \quad (13)$$

where M and ρ is the molar mass and density of the SiC crystal, and J_C is the modulus of the density of the total flow of gas components SiC , Si_2C , SiC_2 , determined by Fick's law.

Now we can estimate the growth rate of the crystal by (11)– (13). For the maximum concentration gradient, according to [2], we have $dC/dz = E = 3 \times 10^{-6} \text{ mol/cm}^4$, diffusion coefficient $D_i = 0.75 \times 10^{-5} \text{ mm}^2/\text{hour}$ [3, 5]. Since for SiC we have $M = 40 \text{ g/mol}$, $\rho = 3 \text{ g/cm}^3$, we get $J_C = 2.25 \times 10^{-5} \text{ mol/(mm}^2 \cdot \text{hour)}$ and $u = 0.3 \text{ mm/hour}$. The obtained value of the crystal growth rate agrees with the calculations of the authors [2] and experimental data [5].

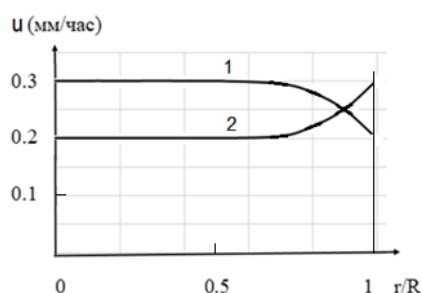


Figure 4 – Growth rate of a SiC single crystal as a function of r/R . At the initial stage 1 – at $E > 0$ and the final stage 2 – at $E < 0$.

Behavior of u from r according to the formulas (11)– (13) and in accordance with Fig. 3, shown in Fig. 4.

Conclusion. An analytical model of the growth processes of perfect silicon carbide single crystals has been developed. Approximate analytical expressions for the temperature distributions ((2), (3), (5)) and component concentrations ((11), (12)) of the gas mixture in the growth cell have been found. The corresponding solutions of the Navier-Stokes equations, in contrast to labor-intensive numerical calculations, allow one to immediately estimate the temperature gradients and gradients of the gas mixture components and the growth rates of SiC single crystals at the initial and final growth stages. A numerical estimate of the growth rate of perfect SiC single crystals of about 0.3 mm/hour has been obtained, which agrees with calculations by other authors and experimental data.

Modeling of growth processes was carried out under the following conditions for growing SiC crystals: argon pressure $P_{Ar} = 0.10$ atm., batch temperature $T_0 = 2700$ K and seed temperature $T_c = 2400$ K, axial temperature gradient $dT/dz = 30$ K/cm. To estimate the speed, the analytically obtained expressions $T(z, r)$, $C(z, r)$ and The corresponding curves are shown in Figures 2 and 3.

The change in temperature distribution during the growth process leads to a nonlinear dependence of the axial temperature distribution with a parabolic approximation (Fig. 2). The high thermal conductivity of single-crystal silicon carbide causes minor deviations of the crystal growth front temperature from the temperature of the reactor graphite walls. In addition, these deviations can be controlled by changing the design of the growth chamber and using a special controller.

The results obtained in the work are in qualitative agreement with the results of numerical calculations [2] and can be used in the analysis of sublimation processes for obtaining, regulating and controlling the growth modes of perfect SiC single crystals.

ЛИТЕРАТУРА

1. Российская газета - Федеральный выпуск: № 57 (7223).
2. Кириллов Б. А., Бакин А. С., Солнышкин С. Н., Таиров Ю. М. Моделирование тепло- и массопереноса в процессе роста монокристаллов карбида кремния // Физика и техника полупроводников. 1997. Т. 31. № 7. С. 794.
3. Алтухов В. И., Санкин А. В. Модели и расчеты особенностей свойств материалов, их структур, элементов силовой электроники (От SiC, SiC-AlN, GaN и до алмаза). Пятигорск: РИА-КМВ, 2021. 654 с.
4. Санкин А. В., Алтухов В. И., Казаров Б. А., Касьяненко И. С., Осмоловский Л. М. Устройство для получения совершенных монокристаллов карбида кремния с дополнительными регулируемыми контурами индукционного нагрева. Патент на полезную модель №173041.
5. Алтухов В. И., Санкин А. В., Дадашев Р. Х., Сигов А. С., Каргин Н. И., Кардашова Г. Д. Технологии получения широкозонных материалов, гетероструктур, диодов на основе карбида кремния и расчет их характеристик. Грозный: ГУП «Книжное издательство». 2019. 102 с.
6. Byrappa K., Ohachi T. Crystal Growth Technology. Norwich, New York: William Andrew Inc., Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag, 2003. 590 p.
7. Сафаралиев Г. К. Твердые растворы на основе карбида кремния. М.: Физматлит, 2011. 295 с.
8. Шевчук И. В. Автомодельное решение уравнений Навье-Стокса и энергии для вращающихся течений между конусом и диском // Теплофизика высоких температур. 2004. Т. 42. № 1. С. 105.

9. Коробов А. Е., Головастов С. В. Численное исследование влияния эжектора на эффективность соплового насадка детонационного двигателя // Теплофизика высоких температур. 2015. Т. 53. № 1. С. 105.
10. Минюшкин Д. Н., Крюков И. А. Расчет прогрева и уноса теплозащитного материала в осесимметричной постановке // Теплофизика высоких температур. 2020. Т. 58. № 2. С. 244.
11. Тукмаков А. Л., Ахунов А. А. Эволюция состава и изменение характера колебаний коагулирующей газовой взвеси в волновом поле акустического резонатора // Теплофизика высоких температур. 2022. Т. 60. № 6. С. 873.
12. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Гидродинамика (Теоретическая физика. Т. VI). М.: Физматлит, 2015. 728 с.

REFERENCES

1. Rossiyskaya Gazeta - Federal Issue: No. 57 (7223). (In Russ.).
2. Kirillov BA, Bakin AS, Solnyshkin SN, Tairov YuM. Heat and mass transfer simulation during silicon carbide single-crystal growth. Physics and engineering of semiconductors = Physics and technology of semiconductors. 1997;31(7):794. (In Russ.).
3. Altukhov VI, Sankin AV. Models and calculations of the properties of materials, their structures, elements of power electronics (from SiC, SiC-AlN, GaN to diamond). Pyatigorsk: RIA-KMV; 2021. 654 p. (In Russ.).
4. Sankin AV, Altukhov VI, Kazarov BA, Kas'yanenko IS, Osmolovskii LM. Device for obtaining perfect silicon carbide monocrystals with additional control circuits of induction heating. Patent for utility model No. 173041. (In Russ.).
5. Altukhov VI, Sankin AV, Dadashev RKh, Sigov AS, Kargin NI, Kardashova GD. Technologies for obtaining wide-bandgap materials, heterostructures, diodes based on silicon carbide and calculation of their characteristics. Grozny: State Unitary Enterprise "Knizhnoe izdatel'stvo"; 2019. 102 p. (In Russ.).
6. Byrappa K, Ohachi T. Crystal Growth Technology. Norwich, New York: William Andrew Inc., Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag; 2003. 590 p.
7. Safaraliev GK. Solid solutions based on silicon carbide. Moscow: Fizmatlit; 2011. 295 p. (In Russ.).
8. Shevchuk IV. Self-similar solution of the Navier-Stokes and energy equations for rotating flows between a cone and a disk. High Temperature Journal (english translation of Teplofizika Vysokikh Temperatur). 2004;42(1):105. (In Russ.).
9. Korobov AE, Golovastov SV. Numerical study of the effect of ejector on the efficiency of detonation engine nozzle. High Temperature Journal (english translation of Teplofizika Vysokikh Temperatur). 2015;53(1):105. (In Russ.).
10. Minyushkin DN, Kryukov IA. Calculation of heating and removal of heat-protective material in an axisymmetric setting. High Temperature Journal (english translation of Teplofizika Vysokikh Temperatur). 2020;58(2):244. (In Russ.).
11. Tukmakov AL, Akhunov AA. Evolution of the composition and change in the nature of oscillations of a coagulating gas suspension in the wave field of an acoustic resonator. High Temperature Journal (english translation of Teplofizika Vysokikh Temperatur). 2022;60(6):873. (In Russ.).
12. Landau LD, Lifshits EM. Hydrodynamics (Theoretical Physics. Vol. VI). Moscow: Fizmatlit; 2015. 728 p. (In Russ.).

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Виктор Иванович Алтухов – доктор физико-математических наук, профессор, Северо-Кавказский федеральный университет, altukhovv@mail.ru

Александр Викторович Санкин – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры систем управления и информационных технологий, Пятигорский институт (филиал), Северо-Кавказский федеральный университет, naukapgtu@yandex.ru

Владимир Соломонович Саввин – доктор физико-математических наук, профессор Национальный исследовательский ядерный университет «Московский инженерно-физический институт», Институт атомной энергетики, savvin-vs@yandex.ru

Александр Сергеевич Сигов – доктор физико-математических наук, профессор, МИРЭА – Российский технологический университет, sigov@mirea.ru

Дмитрий Валерьевич Семёнов – кандидат физико-математических наук, доцент, Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана, dvs-2005@mail.ru

Вклад авторов: все авторы внесли равный вклад в подготовку публикации.

Конфликт интересов: авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Статья поступила в редакцию: 02.07.2024;
одобрена после рецензирования: 09.09.2024;
принята к публикации: 14.10.2024.

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Viktor I. Altukhov – PhD, Professor, North-Caucasus Federal University, altukhovv@mail.ru

Alexander V. Sankin – PhD, Associate Professor of the Department of Management Systems and Information Technologies, Pyatigorsk Institute (branch), North-Caucasus Federal University, naukapgtu@yandex.ru

Vladimir S. Savvin – PhD, Professor, National Research Nuclear University "Moscow Institute of Engineering and Physics", Institute of Atomic Energy, savvin-vs@yandex.ru

Alexander S. Sigov – PhD, Professor, MIREA - Russian University of Technology, sigov@mirea.ru

Dmitry V. Semenov – Cand. Sci. (Techn.), Associate Professor, Bauman Moscow State Technical University, dvs-2005@mail.ru

Contribution of the authors: the authors contributed equally to this article.

Conflict of interest: the authors declare no conflicts of interests.

The article was submitted: 02.07.2024;
approved after reviewing: 09.09.2024;
accepted for publication: 14.10.2024.