

Расчет термоупругих напряжений в ленточных кристаллах оксида галлия, выращиваемых из расплава методом Степанова в различных кристаллографических ориентациях

© В.М. Крымов, Е.В. Галактионов, С.И. Бахолдин

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
194021 Санкт-Петербург, Россия
e-mail: V.Krymov@mail.ioffe.ru

Поступило в Редакцию 1 мая 2024 г.

В окончательной редакции 22 мая 2024 г.

Принято к публикации 30 октября 2024 г.

Проведено исследование влияния анизотропии на распределение термоупругих напряжений в тонких кристаллических пластинах оксида галлия. Приведены приближенные формулы для компонент тензора напряжений, полученные с помощью асимптотического интегрирования уравнений термоупругости с учетом прямолинейной анизотропии общего вида. Проведено сравнение величин напряжений для двух направлений выращивания. Показано, что выбор ориентации направления выращивания позволил управлять величиной и распределением термоупругих напряжений, возникающих в кристаллах оксида галлия при их выращивании из расплава.

Ключевые слова: термоупругие напряжения, асимптотический метод, анизотропия тепловых и упругих свойств.

DOI: 10.61011/JTF.2024.12.59232.343-24

Введение

Оксид галлия ($\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$) представляет собой сверхширокозонный материал ($> 4.4\text{ eV}$) с высоким порогом пробоя ($> 8\text{ MV/cm}$). Он активно исследуется как перспективный силовой полупроводник нового поколения [1,2]. Объемные монокристаллы оксида галлия в форме цилиндров выращивают из расплава различными методами. Наибольшее число исследований и публикаций приходится на метод Чохральского, в котором кристалл вытягивается из расплава, находящегося в иридиевом тигле. Несмотря на целый ряд технологических трудностей, к настоящему времени выращены кристаллы в форме цилиндров диаметром до 50 mm [3]. Однако для большинства применений требуются кристаллы в виде пластин. Поэтому необходима резка выращенных слитков с последующей шлифовкой и финишной полировкой пластин. Привлекательной стала идея выращивания кристаллов заданного профиля, в частности, пластин заданного размера. Единственным методом, позволяющим выращивать кристаллы в форме пластин, является метод Степанова (EFG). В этом методе кристалл выращивается из расплава, находящегося в тигле, в который помещается формообразующее устройство. В простейшем случае это пластина с капиллярными каналами, через которые расплав поднимается к верхним краям пластины, которые и задают форму и размеры кристалла [4,5]. Этот метод был удачно использован для получения кристаллов оксида галлия ($\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$). В отличие от метода Чохральского здесь тигель можно накрыть крышкой, что позволяет снизить разложение и испарение расплава. Благодаря этому, а также возможности

роста пластины с более высокой скоростью, получают кристаллы хорошего качества. Именно этим методом в настоящее время производят подложки размером до 6 дюймов (Tamura corp, Novel Crystal Technology Inc.) [6].

Впервые рост пластины $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ шириной 2 дюйма продемонстрировал Shimamura [7]. Качественные монокристаллические двухдюймовые пластины были выращены Hideo Aida [8]. В работе Akito Kuramata методом EFG выращены кристаллы размерами до 4 дюймов [9]. В работе Huili Tang по оптимизированной технологии EFG выращены крупноразмерные монокристаллы $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ без субзеренных границ и трещин [10]. Yuzhe Bu изучал образование двойников в кристаллах $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ и выращивал кристаллы с ориентацией (100) методом EFG [11]. В работе Chengcheng Lea проведено численное моделирование теплового поля в зоне роста кристаллов оксида галлия с целью нахождения оптимальных условий выращивания [12]. Woon-Hyeon Jeong исследовал влияние активного посленагревателя на рост монокристаллов оксида галлия методом EFG [13].

Однако, несмотря все усилия по совершенствованию процесса роста, многие вопросы еще остаются без ответа. Например, экспериментально найдено, что лучшим кристаллографическим направлением выращивания объемных кристаллов оксида галлия является направление [010]. Кристаллы в форме пластин выращивают в том же направлении, а плоскость пластины у разных авторов варьируется от (201) до (100).

Хорошо известно, что термоупругие напряжения, возникающие в выращиваемых кристаллах вследствие нелинейности температурных полей, во многом определяют степень их структурного совершенства. Они могут

приводить к пластической деформации, связанной с образованием и движением дислокаций, формированию малоугловых границ, блочной, а, возможно, и двойниковой структуры. Установлено также, что анизотропия теплофизических и упругих свойств существенно влияет на величину и распределение напряжений, что открывает возможность управления степенью их структурного совершенства за счет выбора кристаллографической ориентации кристаллов [14,15].

Однако для кристаллов оксида галлия детального изучения влияния кристаллографической ориентации, а также анизотропии свойств на рост, термоупругие напряжения и качество кристаллов не проводилось. В работе [16] показано, что для цилиндрических кристаллов оксида галлия ориентация роста существенно влияет на распределение термоупругих напряжений из-за сильной анизотропии тепловых и упругих свойств.

В настоящей работе исследовано влияние анизотропии тепловых и упругих свойств оксида галлия на величину и распределение термических напряжений в кристаллах ленточной формы, выращиваемых из расплава методом Степанова (EFG). Для проведения расчетов были использованы приближенные асимптотические формулы, описывающие поля напряжений в тонких узких пластинах. Эти формулы получены с помощью асимптотического интегрирования уравнений термоупругости при наличии прямолинейной анизотропии общего вида [17].

1. Приближенные формулы для термоупругих напряжений

Коэффициенты теплопроводности, теплового расширения и упругой жесткости оксида галлия, измеренные для стандартной системы координат (ось $\bar{x}_3$ совпадает с кристаллографическим направлением [001], а ось $\bar{x}_1$ — с [100]), взяты из работы [18]. Приводим только коэффициенты теплопроводности, так как коэффициенты теплового расширения и упругой жесткости были приведены в работе [16]. Итак, коэффициенты теплопроводности оксида галлия, экстраполированные до температуры 2000 К (размерность $\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$): $\lambda_{11} = 1.23$, $\lambda_{12} = \lambda_{21} = 0$, $\lambda_{13} = \lambda_{31} = 0.38$, $\lambda_{22} = 2.11$, $\lambda_{23} = \lambda_{32} = 0$, $\lambda_{33} = 1.63$. Размерные величины обозначим чертой сверху.

Рассмотрим прямую кристаллическую пластину длины l прямоугольного сечения $\Omega = [-b, b] \times [-h, h]$ ($2b$ — ширина пластины, $2h$ — ее толщина). Работаем в декартовой системе координат $(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_3)$. Ось $\bar{x}_1$ ортогональна плоскости пластины, оси $\bar{x}_2$ и $\bar{x}_3$ лежат в срединной плоскости, причем ось $\bar{x}_3$ совпадает с направлением роста. Переходим к безразмерным координатам следующим образом: $\bar{x}_1 = h x_1$, $\bar{x}_2 = b x_2$, $\bar{x}_3 = l x_3$. К безразмерным коэффициентам теплопроводности, теплового расширения и упругой податливости переходим с помощью нормировки на инвари-

анты: $\bar{\lambda}_{00} = 1.657 \text{ (Wm}^{-1}\text{K}^{-1})$; $\bar{\alpha}_{00} = 7.17 \cdot 10^{-6} \text{ (K}^{-1})$; $\bar{s}_{00} = 0.051 \cdot 10^{-10} \text{ (m}^2\text{/N)}$. В предположении малости параметров $\delta = h/b$, $\varepsilon = b/l$ и слабого теплообмена на гранях $x_1 = \pm 1$ строим решение стационарной задачи термоупругости. С помощью метода асимптотического интегрирования уравнений термоупругости [19] получаем с точностью до членов порядка δ^0, ε^2 формулы для температуры и компонент тензора термоупругих напряжений в кристаллической пластине:

$$\bar{T}|_{\delta=0} = \left\{ T_0(x_3) + \left[T_1(x_3) + \mu x_2 \frac{dT_0(x_3)}{dx_3} \right] \varepsilon + \left[T_2(x_3) + \mu x_2 \frac{dT_1(x_3)}{dx_3} + \frac{1}{2} \mu^2 \left(x_2^2 - \frac{1}{3} \right) \times \frac{d^2 T_0(x_3)}{dx_3^2} \right] \varepsilon^2 \right\} \bar{T}_{00},$$

$$\bar{\sigma}_{33}(x_2, x_3)|_{\delta=0} = -\frac{1}{6} H(3x_2^2 - 1) \bar{\Delta} \frac{d^2 T_0(x_3)}{dx_3^2} \varepsilon^2,$$

$$\bar{\sigma}_{23}(x_2, x_3)|_{\delta=0} = \frac{1}{6} H(x_2^2 - 1) x_2 \bar{\Delta} \frac{d^3 T_0(x_3)}{dx_3^3} \varepsilon^3,$$

$$\bar{\sigma}_{22}(x_2, x_3)|_{\delta=0} = -\frac{1}{24} H(x_2^2 - 1)^2 \bar{\Delta} \frac{d^4 T_0(x_3)}{dx_3^4} \varepsilon^4,$$

где

$$H = \frac{1}{s_{33}} [\alpha_{22} + \mu(\alpha_{33}\mu - 2\alpha_{23})], \quad \mu = \frac{\lambda_{12}\lambda_{13} - \lambda_{11}\lambda_{23}}{\lambda_{11}\lambda_{22} - \lambda_{12}^2}.$$

Здесь $T_0(x_3)$, $T_1(x_3)$, $T_2(x_3)$ — первые члены разложения средней по сечению безразмерной температуры по степеням малого параметра ε ; $d^2 T_0/dx_3^2$ — безразмерная вторая производная температуры вдоль направления выращивания пластины; $\bar{T}_{00}$ — температура плавления оксида галлия (2080 К). Температуру нормируем на температуру плавления ($\bar{T} = T/\bar{T}_{00}$). В формулах для компонент тензора термоупругих напряжений $\bar{\Delta} = \bar{\alpha}_{00} \bar{T}_{00} / \bar{s}_{00}$ — нормирующий множитель, обеспечивающий переход от безразмерных к размерным компонентам тензора термоупругих напряжений.

2. Результаты расчета термоупругих напряжений

Проведены расчеты для случая выращивания кристалла β -GaO₃ в форме прямоугольной пластины длиной 0.1 м, шириной 0.02 м и толщиной 0.002 м. Поскольку экспериментальных данных о температурном поле выращиваемого кристалла нет, для расчетов мы использовали модельное распределение температуры вдоль оси выращивания с постоянной кривизной $d^2 \bar{T}_0/dx_3^2 = -5 \cdot 10^4 \text{ K/m}^2$. Были рассмотрены две кристаллографические ориентации выращивания пластины. Первая: направление роста по [010], нормаль к широкой стороне по [100], а затем поворот вокруг оси роста

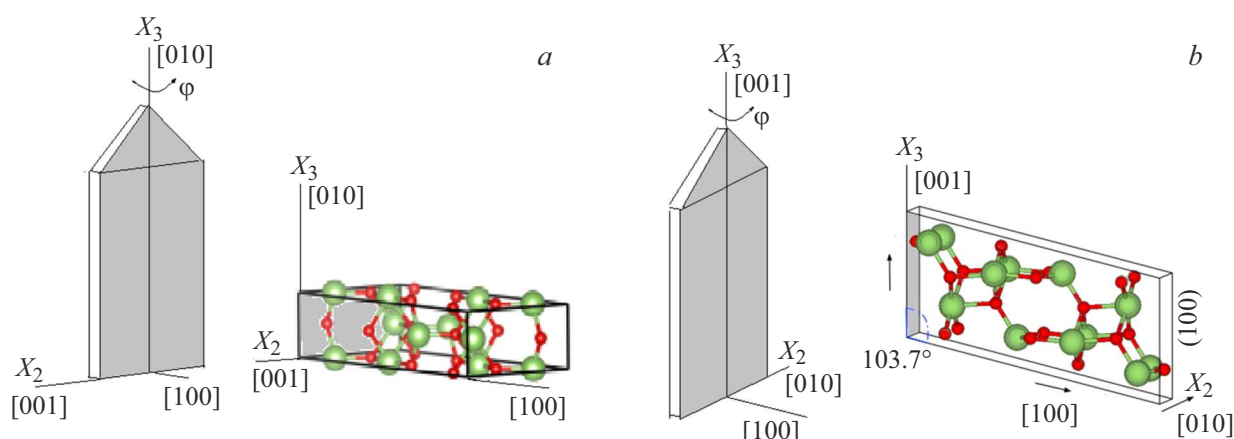


Рис. 1. Схемы двух кристаллографических ориентаций выращиваемой пластины: в направлении $[010]$ (а) и в направлении $[001]$ (б). Справа от них показаны соответствующие элементарные ячейки $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$.

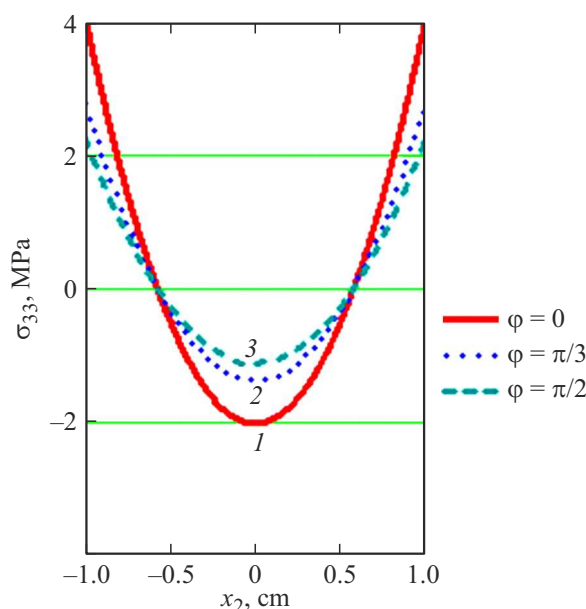


Рис. 2. Распределение напряжения σ_{33} по ширине пластины при выращивании в направлении $[010]$. Кривая 1 — исходное положение $\varphi = 0$, кривая 2 — поворот вокруг $[010]$ на угол $\varphi = \pi/3$, кривая 3 — поворот на $\varphi = \pi/2$.

(рис. 1, а). Эта ориентация чаще всего используется на практике при выращивании кристаллов $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$. Вторая ориентация — стандартная установка с направлением выращивания $[001]$ (рис. 1, б). Анализ полученных формул для компонентов тензора термоупругих напряжений показывает, что максимальные значения напряжений — у компоненты σ_{33} . Следует заметить, что вышеприведенные формулы напряжений справедливы в средней части ленты. В областях торцов действуют и компоненты σ_{23} , σ_{22} , величины которых могут быть сопоставимы с σ_{33} . На рис. 2 показано распределение компоненты σ_{33} по ширине ленты. В соответствии с формулой, приведен-

ной выше, σ_{33} изменяется по ширине ленты по параболе. На рис. 3 показаны результаты расчетов компоненты σ_{33} при повороте кристаллографической ориентации на угол φ вокруг направления выращивания $[010]$ (кривая 1) и вокруг $[001]$ (кривая 2). Максимальные значения напряжения σ_{33} зафиксированы для направления $[010]$ при нормали к плоскости, направленной по $[100]$, а минимальные — при нормали к плоскости, направленной по $[001]$. Поэтому с точки зрения минимума термоупругих напряжений эту ориентацию можно рекомендовать для выращивания.

Несколько неожиданным оказался меньший уровень напряжений при выращивании в направлении $[001]$ для аналогичного характера угловой зависимости. Это пока не подтверждается в эксперименте. Возможно, на рост и образование дефектной структуры влияют и другие факторы. Проведенные расчеты показывают сильное влияние (до 50%) анизотропии свойств ленточного

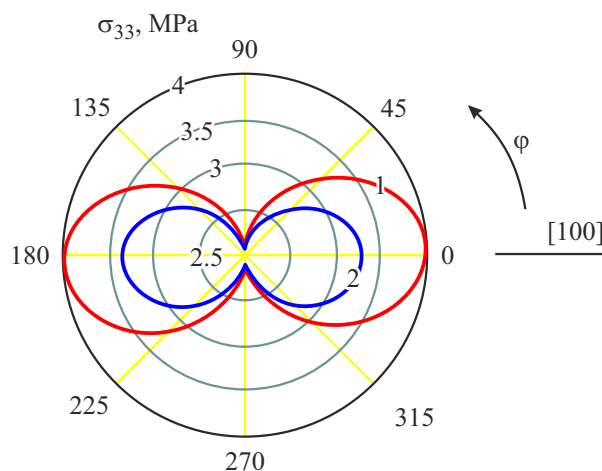


Рис. 3. Зависимость напряжения σ_{33} от угла поворота φ в полярных координатах для двух случаев выращивания пластины: в направлении $[010]$ — кривая 1 и в направлении $[001]$ — кривая 2.

кристалла оксида галлия и ориентации направления выращивания на уровень термоупругих напряжений.

Заключение

Проведено сравнение величин напряжений для двух направлений выращивания. Показано, что учет анизотропии упругих свойств и теплового расширения, а также выбор ориентации направления выращивания ленточных кристаллов оксида галлия относительно кристаллографических осей позволяют управлять величиной и распределением термоупругих напряжений, возникающих в них в процессе выращивания, а значит, и степенью их структурного совершенства.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] S.J. Pearton, J. Yang, P.H. Cary IV, F. Ren, J. Kim, M.J. Tadjer, M.A. Mastro. Appl. Phys. Rev., **5**, 011301 (2018). DOI: 10.1063/1.5006941
- [2] S.I. Stepanov, V.I. Nikolaev, V.E. Bougrov, A.E. Romanov. Rev. Adv. Mater. Sci., **44**, 63 (2016).
- [3] J.D. Blevins, K. Stevens, A. Lindsey, G. Foundos, L. Sande. IEEE TSM, **32** (4), 466 (2019). DOI: 10.1109/TSM.2019.2944526
- [4] A.V. Stepanov. Tech. Phys., **29**, 382 (1959).
- [5] H.E. LaBelle, A.I. Mlavsky. Mater. Res. Bull., **6**, 571 (1971).
- [6] M.A. Mastro, A. Kuramata, J. Calkins, J. Kim, F. Ren, S. Pearton. ECS J. Solid State Sci. Technol., **6**, 356 (2017). DOI: 10.1149/2.0031707jss
- [7] K. Shimamura, E.G. Villora, K. Matsumura, K. Aoki, M. Nakamura, S. Takekawa, N. Ichinose, K. Kitamura. Nihon Kessho Seicho Gakkaishi, **33**, 147 (2006).
- [8] H. Aida, K. Nishiguchi, H. Takeda, N. Aota, K. Sunakawa, Y. Yaguchi. Jpn. J. Appl. Phys., **47** (11), 8506 (2008). DOI: 10.1143/JJAP.47.8506
- [9] A. Kuramata, K. Koshi, S. Watanabe, Y. Yamaoka, T. Masui, S. Yamakoshi. Jpn. J. Appl. Phys., **55**, 1202A2 (2016). DOI: 10.7567/JJAP.55.1202A2
- [10] H. Tang, N. He, H. Zhang, B. Liu, Z. Zhu, M. Xu, L. Chen, J. Liu, X. Ouyang, J. Xu. Cryst. Eng. Comm., **22**, 924 (2020). DOI: 10.1039/C9CE01294J
- [11] Y. Bu, J. Wei, Q. Sai, H. Qi. Cryst. Eng. Comm., **25**, 3556 (2023). DOI: 10.1039/d3ce00249g
- [12] C. Le, Z. Li, W. Mu, Z. Jia, L. Liu. J. Crystal Growth, **83**, 506 (2019). DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2018.10.029
- [13] W. Jeong, S. Choi, S. Lim, Y. Shin, S. Bae, J. Kang, W. Lee, S. Kwon, S. Jeong. Crystals, **13**, 1591 (2023). DOI: 10.3390/cryst13111591
- [14] P.I. Antonov, S.I. Bakholdin, E.V. Galaktionov, E.A. Tropp, S.P. Nikanorov. J. Crystal Growth, **52** (1), 404 (1981).
- [15] П.И. Антонов, С.И. Бахолдин, И.Ю. Вандакуров, Е.В. Галактионов, Э.А. Тропп. Изв. АН СССР, сер физич., **47** (2), 286 (1983).
- [16] С.И. Бахолдин, Е.В. Галактионов, В.М. Крымов. ЖТФ, **93** (12), 1708 (2023). DOI: 10.61011/JTF.2023.12.56800.f249-23
- [17] П.И. Антонов, С.И. Бахолдин, Е.В. Галактионов, Э.А. Тропп. Изв. АН СССР, сер физич., **44** (2), 255 (1980).
- [18] W. Miller, K. Böttcher, Z. Galazka, J. Schreuer. Crystals, **7** (1), 26 (2017). DOI: 10.3390/cryst7010026
- [19] И.Е. Зино, Э.А. Тропп. Асимптотические методы в задачах теории теплопроводности и термоупругости (ЛГУ, Л., 1978)