Расчет термоупругих напряжений вблизи фронта кристаллизации для ленточных монокристаллов оксида галлия, выращиваемых из расплава

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

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

Поступило в Редакцию 28 апреля 2026 г.
В окончательной редакции 3 сентября 2026 г.
Принято к публикации 23 октября 2026 г.

Выполнены расчеты компонент тензора термоупругих напряжений у фронта кристаллизации в ленточных кристаллах оксида галлия, выращиваемых из расплава. Исследовано влияние изменения кристаллографической ориентации плоскости ленты на величину и распределение термоупругих напряжений вблизи фронта. Обнаружен эффект существенного изменения уровня напряжений (более двух раз). Расчеты выполнены для двух вариантов модельного теплового поля.

Ключевые слова: анизотропия свойств монокристалла, термоупругие напряжения, плоское напряженное состояние.

DOI: 10.61011/JTF.2026.12.64055.315-26

Введение

Оксид галлия (Ga_2O_3) — один из полупроводников четвертого поколения со сверхширокой запрещенной зоной, перспективный для развития силовой и оптоэлектроники. Он превосходит полупроводники третьего поколения по напряженности электрического поля пробоя, стойкости к высоким температурам и радиационной стойкости [1–4]. Одним из активно развивающихся методов получения кристаллов $\beta-Ga_2O_3$ является метод Степанова (EFG), позволяющий получать из расплава пластины заданного размера и ориентации [5–7]. Для оптимизации процесса роста необходимо исследование условий теплообмена кристалла с элементами тепловой зоны. При этом экспериментальные исследования тепловой зоны сильно ограничены как высокой температурой плавления оксида галлия, так и агрессивным химическим воздействием расплава на элементы тепловой зоны. В связи с этим для оптимизации тепловой зоны необходимы расчеты теплообменных процессов в ростовой камере, распределения температуры и термических напряжений в растущем кристалле. Для решения этой сложной комплексной задачи необходимо использовать методы численного моделирования. В работе [8] моделировалось тепловое поле в системе EFG для роста ленточных кристаллов $\beta-Ga_2O_3$. Проведены $2D$-расчеты формы мениска и $3D$-глобальное моделирование всей тепловой зоны. В [9] была создана глобальная $3D$ несимметричная численная модель для выращивания ленточных кристаллов $\beta-Ga_2O_3$. Учтена анизотропия теплопроводности в сочетании с тепловым излучением внутри кристалла. Эта модель использована для изучения влияния поглощения теплового излучения свободными носителями заряда на распределение температуры и форму границы кристаллизации. Показано, что поглощение теплового излучения внутри кристалла напрямую влияет на форму кристаллизационной границы и стабильность роста кристалла. В этих работах моделировалось, главным образом, тепловое поле, а возникающие термические напряжения в лентах не рассматривались. В работе [10] проведено исследование влияния анизотропии свойств на распределение термоупругих напряжений в тонких кристаллических пластинах оксида галлия. Компоненты тензора напряжений рассчитывались по приближенным формулам, полученным с помощью асимптотического интегрирования уравнений термоупругости с учетом прямолинейной анизотропии общего вида. Результаты расчетов справедливы для тонких длинных пластин и не позволяют исследовать области вблизи торцов пластины без дополнительных вычислений с привлечением погранслойных поправок (как сделано в [11]).

В [12] предложен алгоритм расчета касательных напряжений в системах скольжения кристаллов моноклинной сингонии и выполнены расчеты по этим приближенным формулам для лент оксида галлия, выращиваемых из расплава методом Степанова (EFG). Эти расчеты дали возможность сравнить работу различных систем скольжения. Однако они также проводились без учета напряжений в области фронта кристаллизации и, строго говоря, справедливы для средней части пластины. В работах [13,14] для цилиндрических кристаллов оксида галлия, выращиваемых методом Чохральского, выполнено численное моделирование процессов теплообмена и проведены расчеты термических напряжений. Напряжения рассчитывались во всем объеме кристалла по усредненному критерию фон Мизеса без анализа работы отдельных компонент тензора термоупругих напряжений.

Из приведенного обзора видно, что для случая выращивания тонких ленточных кристаллов оксида галлия задача исследования термических напряжений в области у фронта кристаллизации при нелинейном температурном поле не была решена. Опыт выращивания других высокотемпературных прозрачных кристаллов показывает, что формирование дефектной структуры происходит главным образом в самой горячей области растущего кристалла, т. е. у фронта кристаллизации.

В настоящей работе выполнены расчеты компонент тензора термоупругих напряжений у фронта кристаллизации. Рассмотрена стационарная несвязанная задача термоупругости в тонкой прямоугольной пластине с учетом анизотропии упругих свойств и линейного расширения. Для решения этой задачи использован метод конечных элементов.

1. Постановка задачи

Рассмотрим кристаллическую пластину длины L прямоугольного сечения, $2b$ — ширина пластины, $2h$ — ее толщина ($h \ll b < L$). Величина $\delta = h/b$ — малый параметр задачи. Работаем в декартовой системе координат $(\overline{x}_1, \overline{x}_2, \overline{x}_3)$. Ось $\overline{x}_1$ ортогональна плоскости пластины, оси $\overline{x}_2$ и $\overline{x}_3$ лежат в срединной плоскости, причем ось $\overline{x}_3$ совпадает с направлением роста. Вводим следующие масштабы для независимых переменных и искомых функций (черточками сверху отмечены размерные величины):

$$\overline{x}_1 = hx_1, \quad \overline{x}_j = bx_j, \quad \overline{u}_j = \overline{\alpha}_0 \overline{T}_0 b u_j, \quad j = 2, 3,$$

$$T = (\overline{T} - \overline{T}_0)/\overline{T}_0;$$

$$\overline{\alpha}_{ij} = \overline{\alpha}_0 \alpha_{ij}, \quad \overline{\sigma}_{ij} = \overline{\alpha}_0 \overline{T}_0 \overline{C}_0 \sigma_{ij},$$

$$\overline{\varepsilon}_{ij} = \overline{\alpha}_0 \overline{T}_0 \varepsilon_{ij}, \quad i, j = 2, 3;$$

$$\overline{\alpha}_0 = \frac{1}{3}\sum_{i=1}^{3} \overline{\alpha}_{ii}, \quad \overline{s}_{kl} = s_{kl}/\overline{C}_0, \quad k, l = 1, \ldots, 6;$$

$$\begin{aligned}\overline{C}_0 =& 5/[\overline{s}_{11} + \overline{s}_{22} + \overline{s}_{33} + \frac{2}{3}(\overline{s}_{23} + \overline{s}_{13} + \overline{s}_{12}) \\ &+ \frac{1}{3}(\overline{s}_{44} + \overline{s}_{55} + \overline{s}_{66})],\end{aligned}$$

где $\overline{u}_i$ — перемещения по осям $(i = 1, 2, 3)$; $\overline{\alpha}_{ij} = \overline{\alpha}_{ji}$ $(i, j = 1, 2, 3)$, $\overline{s}_{kl} = \overline{s}_{lk}$ $(k, l = 1, \ldots, 6)$ — коэффициенты теплового расширения и упругой податливости материала; $\overline{\alpha}_0$ и $(\overline{C}_0)^{-1}$ — инварианты тензоров коэффициентов теплового расширения и упругой податливости; $\overline{\varepsilon}_{ij}, \overline{\sigma}_{ij} (i, j = 1, 2, 3)$ — компоненты тензоров деформаций и напряжений; $\overline{T}_0$ — температура плавления. Предположим дополнительно, что температура изменяется только по длине пластины.

Решение трехмерной несвязанной стационарной задачи термоупругости для тонкой анизотропной пластины при наличии прямолинейной анизотропии общего вида с помощью метода асимптотического интегрирования сводится к решению последовательности квазидвумерных задач [15]. В нулевом приближении основного итерационного процесса ($\delta = 0$) получаем задачу плоского напряженного состояния, включающую в себя:

уравнения равновесия $\frac{\partial \sigma_{22}}{\partial x_2} + \frac{\partial \sigma_{23}}{\partial x_3} = 0$, $\frac{\partial \sigma_{23}}{\partial x_2} + \frac{\partial \sigma_{33}}{\partial x_3} = 0$,

уравнения, связывающие деформации и перемещения:

$$\varepsilon_{22} = \frac{\partial u_2}{\partial x_2}, \quad \varepsilon_{33} = \frac{\partial u_3}{\partial x_3}, \quad \varepsilon_{23} = \frac{\partial u_2}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_2},$$

закон Гука с учетом деформации теплового расширения при наличии прямолинейной анизотропии общего вида тепловых и упругих свойств материала

$$\begin{aligned}\sigma_{22} =& b_{22}\varepsilon_{22} + b_{23}\varepsilon_{33} + b_{24}\varepsilon_{23} \\ &-(b_{22}\alpha_{22} + b_{23}\alpha_{33} + b_{24}\alpha_{23})T(x_3), \\ \sigma_{33} =& b_{23}\varepsilon_{22} + b_{33}\varepsilon_{33} + b_{34}\varepsilon_{23} \\ &-(b_{23}\alpha_{22} + b_{33}\alpha_{33} + b_{34}\alpha_{23})T(x_3), \\ \sigma_{23} =& b_{24}\varepsilon_{22} + b_{34}\varepsilon_{33} + b_{44}\varepsilon_{23} \\ &-(b_{24}\alpha_{22} + b_{34}\alpha_{33} + b_{44}\alpha_{23})T(x_3),\end{aligned}$$

где $\begin{pmatrix} b_{22} & b_{23} & b_{24} \\ b_{23} & b_{33} & b_{34} \\ b_{24} & b_{34} & b_{44} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_{22} & s_{23} & s_{24} \\ s_{23} & s_{33} & s_{34} \\ s_{24} & s_{34} & s_{44} \end{pmatrix}^{-1}$.

Боковая поверхность и торцы пластины свободны от усилий, т. е. граничные условия имеют следующий вид: $\sigma_{22} = \sigma_{23} = 0$ при $x_2 = \pm 1$, $x_3 \in [0, L/b]$, $\sigma_{33} = \sigma_{23} = 0$ при $x_3 = 0, L/b$, $x_2 \in [-1, +1]$.

Расчеты проводились для лент оксида галлия толщиной 2 mm, шириной 20 mm, длиной 100 и 70 mm с ориентацией основной плоскости (100) и направлением вытягивания [010]. Такая ориентация часто применяется на практике при выращивании ленточных кристаллов. Коэффициенты теплового расширения и упругой жесткости $\beta{-}Ga_2O_3$ измеренные для стандартной системы координат (ось $\overline{x}_3$ совпадает с кристаллографическим направлением [001], а ось $\overline{x}_1$ с [100]) взяты из работы [13].

Картина полей термоупругих напряжений сильно зависит от вида температурного поля. Рассчитаны напряжения для двух вариантов распределения температуры вдоль направления выращивания ленты.

2. Расчеты термоупругих напряжений в области фронта кристаллизации при экспоненциальном изменении температуры

При выращивании высокотемпературных прозрачных кристаллов часто реализуется резкое экспоненциальное падение температуры в области фронта кристаллизации и далее — более плавное снижение, близкое к линейному [16]. Для оксида галлия температура выращиваемого

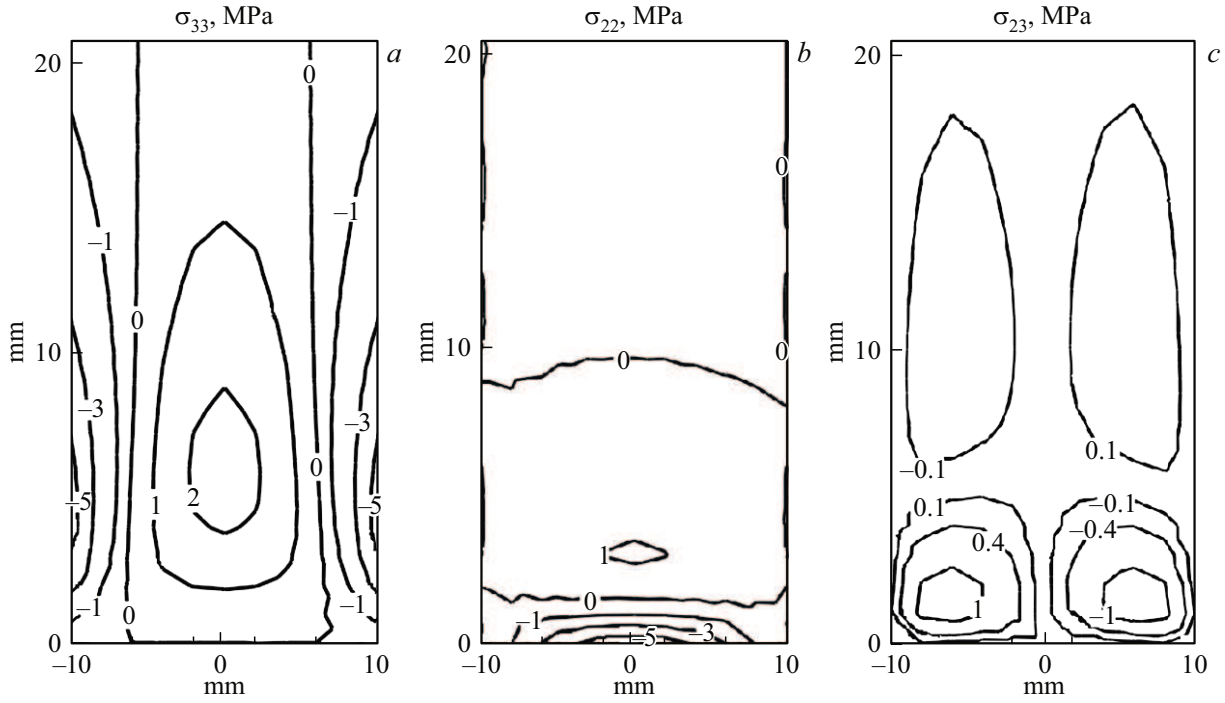


Рис. 1. Эпюры компонент тензора термоупругих напряжений в ленте при экспоненциальном распределении температуры: *a* — σ_{33}, *b* — σ_{22}, *c* — σ_{23}.

из расплава кристалла также определяется главным образом тепловым излучением [9]. Увеличение поглощения излучения приводит к росту осевого градиента температуры и возможному экспоненциальному падению температуры у фронта кристаллизации. Вследствие этого, в работе использовалось аналитическое выражение для температуры, аналогичное приведенному в работе по расчету термоупругих напряжений в кристаллах сапфира [17]:

$$\overline{T}(\overline{x}_3) = \overline{T}_{pl} - D_{line}\,\frac{\overline{x}_3}{L} - D_{\exp}\,\frac{1-\exp(-\overline{x}_3/L_{\exp})}{1-\exp(-L/L_{\exp})},$$

где $\overline{T}_{pl} = 2080\,\mathrm{K}$ — температура плавления β–Ga_2O_3, $D_{line} = 80\,\mathrm{K}$, $D_{\exp} = 50\,\mathrm{K}$ — перепады температуры за счет линейной и экспоненциальной частей, L — длина ленты ($L = 100\,\mathrm{mm}$), $L_{\exp}$ — постоянная экспоненты ($L_{\exp} = 15\,\mathrm{mm}$).

Результаты расчета компонент тензора напряжений приведены на рис. 1. Кривизна экспоненциального температурного поля максимальна на нижнем торце ленты, что соответствует максимальным значениям напряжений. В силу граничных условий на фронте кристаллизации отлична от нуля только компонента σ_{22}, и она принимает здесь максимальные значения (до $-6\,\mathrm{MPa}$). Далее ее значения спадают до нуля, и на расстоянии 2 mm от фронта по длине они меняют знак. Максимальные значения компоненты σ_{33} находятся выше фронта на 5 mm. Эта компонента имеет характерное параболическое распределение по ширине с отрицательными значениями (до $-5\,\mathrm{MPa}$) на краях и положительными в центре ($2\,\mathrm{MPa}$). Касательная компонента σ_{23} меняет знак как по ширине, так и по высоте, и примерно на порядок меньше по величине, чем нормальные компоненты.

Таким образом, проведенные расчеты показывают, что максимальные напряжения дает компонента σ_{22} в узкой зоне у фронта кристаллизации. В этой области кристалл находится при предплавильной температуре, для которой возможна пластическая деформация под действием термоупругих напряжений с образованием дефектов структуры. В процессе дальнейшего роста эти участки с дефектной структурой попадают в поле действия двух других компонент (σ_{33} и σ_{23}). Однако это воздействие происходит при более низкой температуре. Детально разобрать этот процесс пока не представляется возможным, так как нет данных о пластических свойствах кристаллов оксида галлия при высоких температурах.

3. Расчеты термоупругих напряжений в лентах оксида галлия при выращивании в тепловой зоне с активным экраном

В тепловых зонах для выращивания кристаллов оксида галлия как в форме круглых слитков, так и в форме лент часто применяют так называемый активный экран. Он представляет собой тонкостенный цилиндр, который нагревается полностью или частично электромагнитным полем индуктора, так же как и сам тигель с расплавом. Активный экран дает дополнительный подогрев выра-

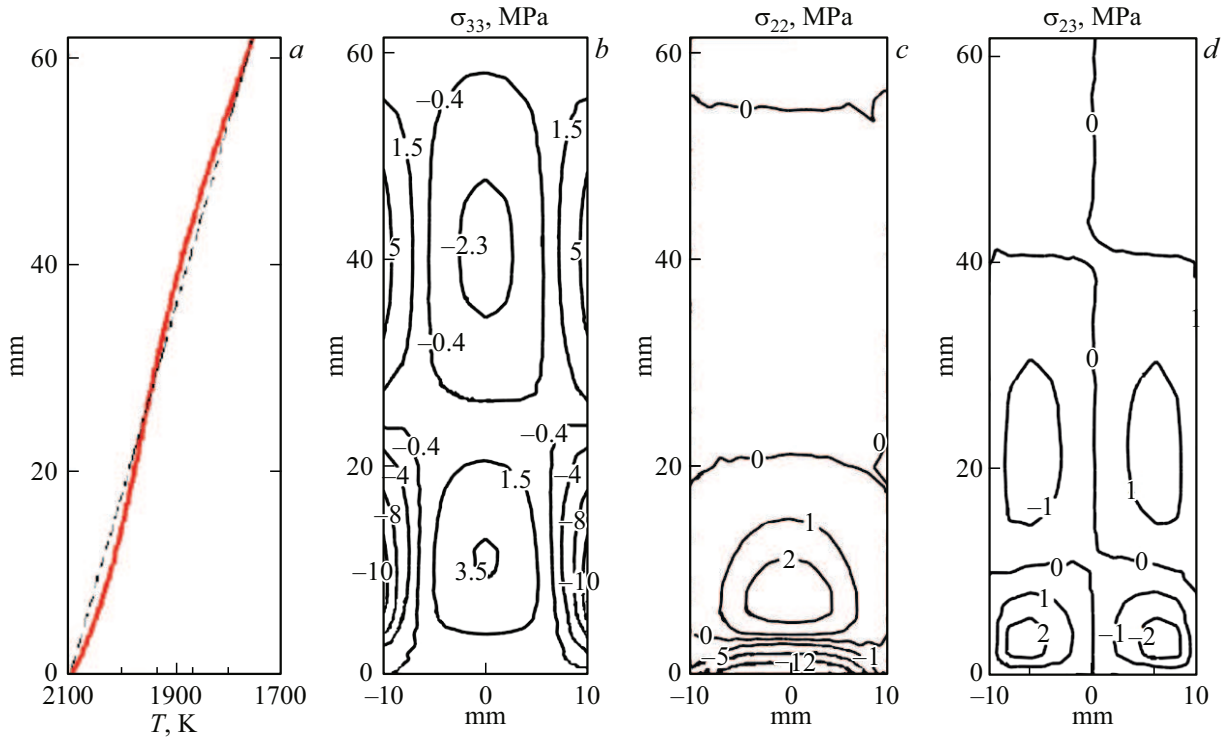


Рис. 2. Температурное распределение (a) и эпюры термоупругих напряжений в ленте оксида галлия при полиномиальном распределении температуры: b — σ_{33}, c — σ_{22}, d — σ_{23}.

щенной части кристалла. При этом возможна ситуация, когда на кривой осевого температурного распределения появляется точка перегиба. Такое распределение температуры можно описать полиномом четвертой степени:

$$\overline{T}(\overline{x}_3) = \overline{T}_{pl} - 9.1\overline{x}_3 + 2.67 \times 10^{-1}\overline{x}_3^2 - 5.4 \times 10^{-3}\overline{x}_3^3 + 3.367 \times 10^{-5}\overline{x}_3^4.$$

Коэффициенты полинома подобраны таким образом, что эта кривая близка к кривой, приведенной в работе [9, рис. 7] и полученной в результате расчетов по трехмерной глобальной модели теплообмена с учетом анизотропии теплопроводности и теплового излучения для пластины длиной 70 mm.

На рис. 2 приведены температурное распределение по оси ленты и эпюры компонент термоупругих напряжений для этого случая. Видно, что до длины 25 mm идет быстрое снижение температуры (положительная вторая производная температуры по длине), затем температура падает более медленно, и знак второй производной меняется. В соответствии с таким полем температуры на эпюрах нормальных компонент напряжений можно видеть нулевую область в точке перегиба температурной кривой и смену знаков напряжений. Характер распределения компонент тензора термоупругих напряжений такой же, как и в рассмотренном выше случае. Уровень напряжений вблизи фронта кристаллизации несколько меньше за счет более плавного снижения температуры. В средней части ленты вид эпюр хорошо согласуется с расчетами по приближенным асимптотическим формулам. Таким образом, анализ компонент тензора термоупругих напряжений в температурном поле, близком к реальному, показывает, что наиболее высокие значения напряжений соответствуют нормальной компоненте σ_{22} у фронта кристаллизации.

4. Расчеты термоупругих напряжений для различных вариантов кристаллографической ориентации ленты

На рис. 3 показано, как влияет поворот ориентации плоскости ленты вокруг направления роста [010] на величину и распределение термоупругих напряжений. На полярной диаграмме по радиусу отложены максимальные значения компонент: σ_{22} — на фронте кристаллизации в точке ($\overline{x}_2, \overline{x}_3 = 0$), σ_{33} — на боковой стороне ленты при $\overline{x}_2, \overline{x}_3 = 10$ mm, σ_{23} — в точке ($\overline{x}_2 = 9$ mm, $\overline{x}_3 = 2$ mm). Из графика видно, что зависимость всех трех компонент тензора термоупругих напряжений от угла поворота примерно одинакова, а по величине напряжения изменяются значительно (до 2.5 раз). Максимальные значения соответствуют исходной ориентации, а минимальные напряжения — повороту на 90°.

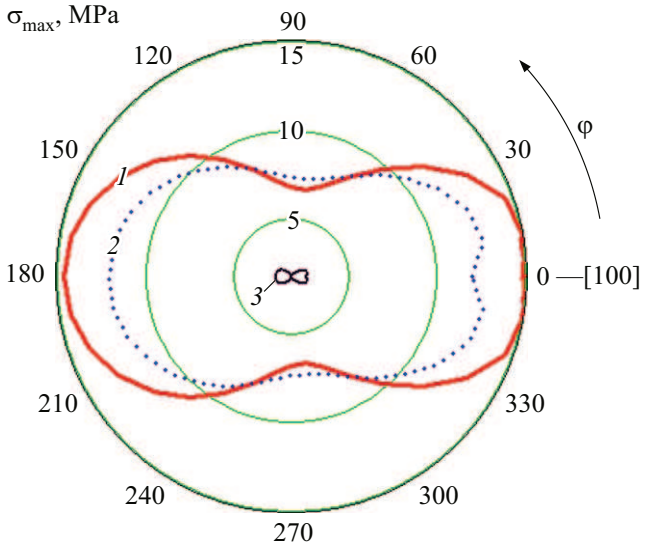


Рис. 3. Зависимость компонент тензора термоупругих напряжений в лентах оксида галлия от угла φ поворота ориентации плоскости ленты вокруг направления роста [010]: *1* — σ_{22}, *2* — σ_{33}, *3* — σ_{23}.

Заключение

Проведенные расчеты полей термоупругих напряжений в области фронта кристаллизации показали, что наиболее высокие значения напряжений дает нормальная компонента σ_{22}. Величины термоупругих напряжений в лентах оксида галлия при выращивании в направлении [010] сильно зависят от кристаллографической ориентации плоскости ленты. Расчеты могут быть использованы для анализа процесса пластической деформации в системах скольжения и образования дислокационной структуры во время роста.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] K. Sasaki. Appl. Phys. Express, **17** (9), 090101 (2024). DOI: 10.35848/1882-0786/ad6b73
[2] S.J. Pearton, J. Yang, P.H. Cary, F. Ren, J. Kim, M.J. Tadjer, M.A. Mastro. Appl. Phys. Rev., **5**, 011301 (2018). DOI: 10.1063/1.5006941
[3] S.I. Stepanov, V.I. Nikolaev, V.E. Bougov, A.E. Romanov. Rev. Adv. Mater. Sci., **44**, 63 (2016).
[4] Y. Wang, M. Zhu, Y. Liu. China Foundry, Special Rev., **21** (1), 491 (2024). DOI: 10.1007/s41230-024-4131-5
[5] W. Mu, Z. Jia, Y. Yin, Q. Hu, Y. Li, B. Wu, J. Zhang, X. Tao. JALCOM, **714**, 453 (2017). DOI: 10.1016/j.jallcom.2017.04.185
[6] W. Mu, Z. Jia, Y. Yin, B. Fu, Jin Zhang, Jian Zhang, X. Tao. Cryst. Eng. Comm., **21** (17), 2762 (2019). DOI: 10.1039/c8ce02189a
[7] Y.J. Shin, S.M. Lim, W.H. Jeong, S.H. Cho, M.H. Choi, W.J. Lee, S.M. Jeong, S.Y. Bae. Jpn. J. Appl. Phys., **62**, SF1022 (2023). DOI: 10.35848/1347-4065/acc7ac
[8] C. Le, Z. Li, W. Mu, Z. Jia, L. Liu. J. Crystal Growth, **506**, 83 (2019). DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2018.10.029
[9] J. Wang, Z. Li, C. Qi, L. Liu. J. Vac. Sci. Technol., A **43**, 013202 (2025). DOI: 10.1116/6.0004170
[10] В.М. Крымов, Е.В. Галактионов, С.И. Бахолдин. ЖТФ, **94** (12), 1957 (2024). DOI: 10.61011/JTF.2024.12.59232.343-24 [V.M. Krymov, E.V. Galaktionov, S.I. Bakholdin. Tech. Phys., **69** (12), 1809 (2024). DOI: 10.61011/TP.2024.12.60390.343-24]
[11] С.И. Бахолдин, Е.В. Галактионов, Э.А. Тропп. ЖТФ, **84** (8), 1 (2014). [S.I. Bakholdin, E.V. Galaktionov, E.A. Tropp. Tech. Phys., **59** (8), 1105 (2014).]
[12] В.М. Крымов, Е.В. Галактионов, С.И. Бахолдин, С.В. Шапенков. ЖТФ, **95** (12), 2272 (2025). DOI: 10.61011/JTF.2025.12.61771.222-25 [V.M. Krymov, E.V. Galaktionov, S.I. Bakholdin, S.V. Shapenkov. Tech. Phys., **70** (12), 2140 (2025). DOI: 10.61011/TP.2025.12.62373.222-25]
[13] W. Miller, K. Böttcher, Z. Galazka, J. Schreuer. Crystals, **7** (1), 26 (2017). DOI: 10.3390/cryst7010026
[14] D. Wu, N. Xia, K. Ma, J. Wang, C. Li, Z. Jin, H. Zhang, D. Yang. Crystals, **12** (12), 1715 (2022). DOI: 10.3390/cryst12121715
[15] И.Е. Зино, Э.А. Тропп. *Асимптотические методы в задачах теории теплопроводности и термоупругости* (Изд-во ЛГУ, Л., 1978)
[16] V.M. Krymov, V.N. Kurlov, F. Theodore, J. Delepine. J. Crystal Growth, **198**–**199** (1), 210 (1999). DOI: 10.1016/S0022-0248(98)01129-4
[17] С.И. Бахолдин, Е.В. Галактионов, В.М. Крымов. Изв. АН, сер. физ., **63** (9), 1816 (1999).