

# 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 Yu 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  $(\bar{2}01)$  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  $\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ ):  $\bar{\lambda}_{11} = 1.23$ ,  $\bar{\lambda}_{12} = \bar{\lambda}_{21} = 0$ ,  $\bar{\lambda}_{13} = \bar{\lambda}_{31} = 0.38$ ,  $\bar{\lambda}_{22} = 2.11$ ,  $\bar{\lambda}_{23} = \bar{\lambda}_{32} = 0$ ,  $\bar{\lambda}_{33} = 1.63$ . 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  $\delta^0, \varepsilon^2$  формулы для температуры и компонент тензора термоупругих напряжений в кристаллической пластине:

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

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

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

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

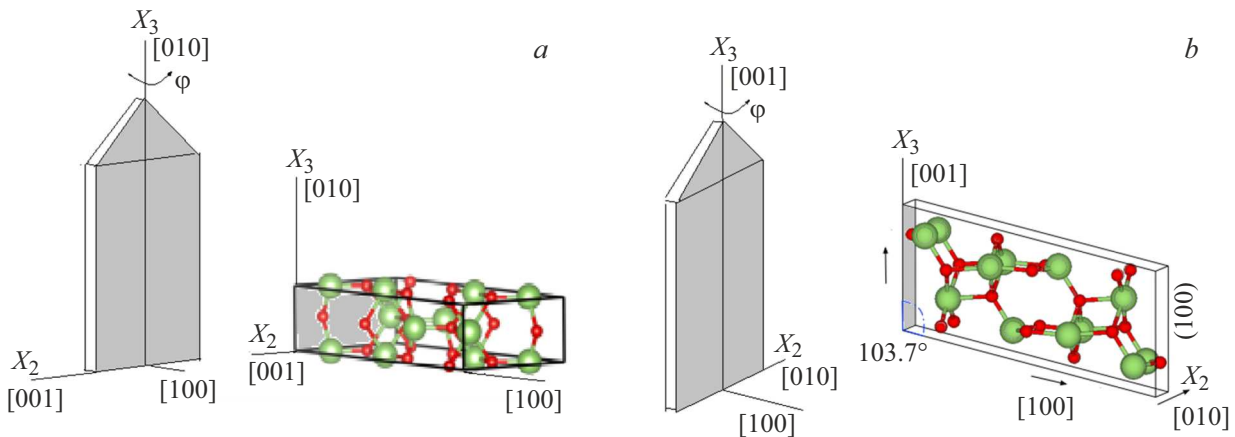
где

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

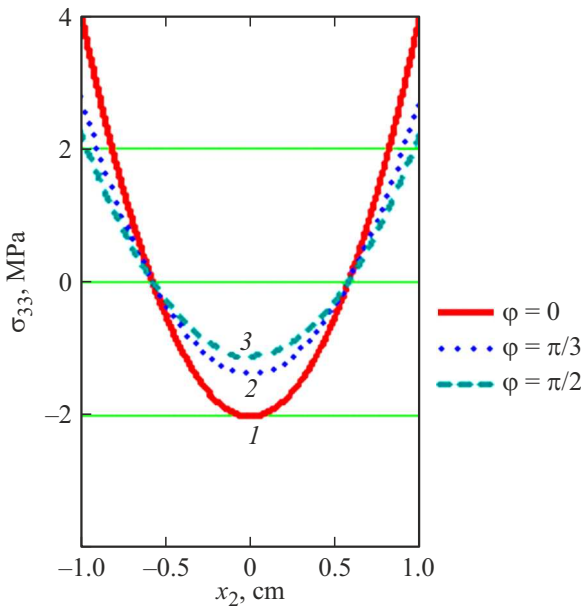
Здесь  $T_0(x_3), T_1(x_3), T_2(x_3)$  — первые члены разложения средней по сечению безразмерной температуры по степеням малого параметра  $\varepsilon$ ;  $d^2 T_0/dx_3^2$  — безразмерная вторая производная температуры вдоль направления выращивания пластины;  $\bar{T}_{00}$  — температура плавления 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  $\beta\text{-GaO}_3$  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  $d^2 \bar{T}_0/d\bar{x}_3^2 = -5 \cdot 10^4 \text{K/m}^2$ . 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] (a) и в направлении [001] (b). Справа от них показаны соответствующие элементарные ячейки  $\beta$ -Ga $_2$ O $_3$ .

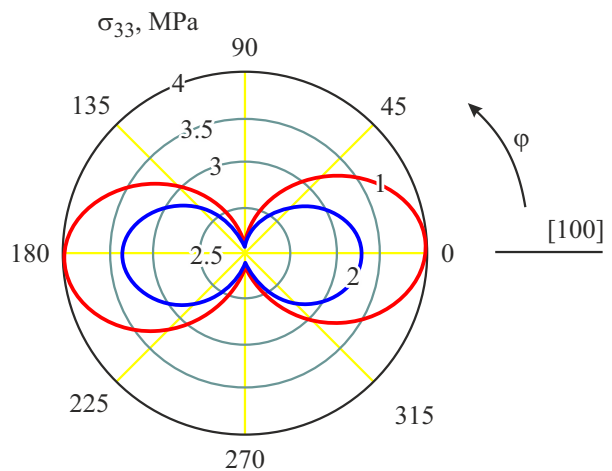


**Рис. 2.** Распределение напряжения  $\sigma_{33}$  по ширине пластины при выращивании в направлении [010]. Кривая 1 — исходное положение  $\varphi = 0$ , кривая 2 — поворот вокруг [010] на угол  $\varphi = \pi/3$ , кривая 3 — поворот на  $\varphi = \pi/2$ .

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

ной выше,  $\sigma_{33}$  изменяется по ширине ленты по параболе. На рис. 3 показаны результаты расчетов компоненты  $\sigma_{33}$  при повороте кристаллографической ориентации на угол  $\varphi$  вокруг направления выращивания [010] (кривая 1) и вокруг [001] (кривая 2). Максимальные значения напряжения  $\sigma_{33}$  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  $\sigma_{33}$  от угла поворота  $\varphi$  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)