Доклады Академии наук СССР
1971. Том 200, № 2

ТЕХНИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

Н. А. АВДОНИН, С. С. ВАХРАМЕЕВ, М. Г. МИЛЬВИДСКИЙ, В. Б. ОСВЕНСКИЙ,
член-корреспондент АН СССР Б. А. САХАРОВ, В. А. СМИРНОВ, Ю. Ф. ЩЕЛКИН

ВЛИЯНИЕ ПОЛЕЙ ТЕМПЕРАТУР И ТЕРМИЧЕСКИХ НАПРЯЖЕНИЙ НА ФОРМИРОВАНИЕ ДИСЛОКАЦИОННОЙ СТРУКТУРЫ В МОНОКРИСТАЛЛАХ АРСЕНИДА ГАЛЛИЯ ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ ПО МЕТОДУ ЧОХРАЛЬСКОГО

Дислокации в монокристаллах, выращиваемых из расплава, образуются, в основном, под действием термических напряжений, возникающих при охлаждении слитка в процессе его роста. Если эти напряжения превосходят критическое сдвиговое напряжение материала при соответствующей температуре, они вызывают пластическую деформацию, которая частично или полностью снимает термические напряжения. Следовательно, распределение плотности дислокаций в кристалле должно определяться полем термических напряжений в температурной области пластичности материала.

Однако до настоящего времени анализ условий формирования дислокационной структуры монокристаллов, выращиваемых из расплава, сводился по существу к установлению эмпирической связи плотности дислокаций с величиной температурных градиентов в области фронта кристаллизации. При этом определяющая роль приписывалась либо радиальным ([1]), либо осевым ([2–4]) составляющим температурного градиента. Вопрос об объемном напряженном состоянии в кристалле в этих работах не рассматривался вследствие больших математических трудностей его решения.

В настоящей работе использован новый подход к решению задачи, принципиальная схема которого состоит в том, что с учетом граничных условий, полученных из эксперимента, на ЭВМ производят расчет поля температур, после чего рассчитывают поле термоупругих напряжений. Полученное таким образом объемное распределение сдвиговых термоупругих напряжений сравнивают с соответствующими значениями напряжений текучести для арсенида галлия, определенными из независимых экспериментов. Такой подход позволяет произвести анализ условий образования дислокаций в процессе выращивания кристаллов.

Монокристаллы арсенида галлия выращивались из-под слоя расплавленного борного ангидрида в направлении [111]. Распределение температур в кристалле фиксировали вольфрам-рениевыми термопарами диаметром 0,2 мм, спаи которых размещали в кварцевых капиллярах, закрепленных на штоке установки ([5, 6]). Термо-э.д.с. термопар фиксировали автоматическим потенциометром со шкалой ± 125 мв; основной сигнал термопары компенсировали прецизионным подавителем.

На ЭВМ Минск-22 рассчитывали температурное поле кристалла путем численного решения уравнения нестационарной теплопроводности. За граничные условия принималось экспериментальное распределение температур на боковой и верхней торцевой поверхностях слитков; принималось, что фронт кристаллизации имеет форму параболоида вращения ([7]) и находится при постоянной температуре. По определенному из экспериментов значению удельного теплового потока на фронте кристаллизации со стороны расплава рассчитывались тепловые потоки на поверхности в точке соприкосновения кристалла и расплава, после чего определяли высоту подъема столба расплава и форму фронта кристаллизации ([8, 9]).

Поле напряжений в слитке определяли в рамках несвязной квазистатической теории термоупругости ([10]). Полагаем кристалл упруго-изотропным цилиндрическим телом с плоской границей фазового перехода, боко-

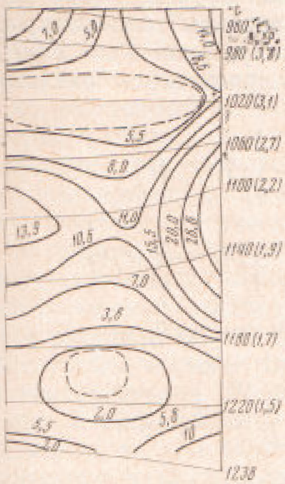


Рис. 1. Изотермы и топография касательных напряжений в монокристалле арсенида галлия. Числа на кривых обозначают величины $\tau \cdot 10^2$ кГ/мм², соответствующие линиям постоянного напряжения. Пунктиром выделены области, в которых действующие напряжения τ_3 меньше приведенного напряжения текучести. Числа в скобках по оси ординат соответствуют приведенным критическим напряжениям $\times 10^2$

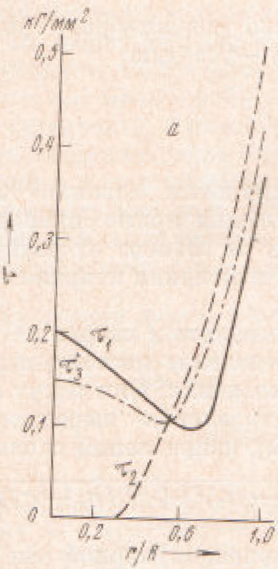
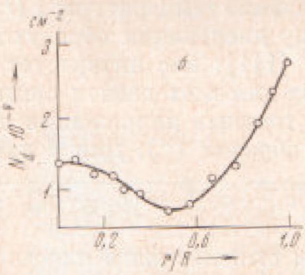


Рис. 2. Распределение касательных напряжений τ_1, τ_2, τ_3 (*а*) и плотности дислокаций (*б*) в поперечном сечении монокристалла арсенида галлия



вая и торцевые поверхности которого находятся в свободном состоянии. Установившаяся температура в слитке считается заданной осесимметричной функцией $T(r, z)$. В этом случае уравнения термоупругости в перемещениях имеют вид ([11])

$$\Delta U - \frac{U}{r^2} + \frac{1}{1-2\mu} \cdot \frac{\partial e}{\partial r} = \frac{2(1+\mu)}{1-2\mu} \alpha \frac{\partial T}{\partial r},$$

$$\Delta W + \frac{1}{1-2\mu} \frac{\partial e}{\partial z} = \frac{2(1+\mu)}{1-2\mu} \alpha \frac{\partial T}{\partial z}, \tag{1}$$

при граничных условиях

$$\sigma_r = \sigma_{rz} = 0 \text{ при } r = R; \ \sigma_z = \sigma_{rz} = 0 \text{ при } z = 0 \text{ и } z' = l. \tag{2}$$

Здесь U и W — радиальное и осевое перемещения соответственно; $\Delta = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ — оператор Лапласа в цилиндрической системе координат; $\varepsilon = \partial V / \partial r + \partial W / \partial z + U / r$ — полное объемное расширение.

Задачу (1), (2) можно легко решить для случая только радиального теплоотвода, т. е. пренебрегая осевым изменением температуры. При задании произвольной нормированной температуры $\overline{T}_r = T(r) / \Delta T$, где ΔT — радиальный перепад температуры, напряжения в слитке радиуса R имеют следующий вид:

$$\sigma_r = \Delta T\beta\left(\frac{1}{2}\overline{T}_{\text{ср}} - \frac{1}{r^2}\int_0^r r\overline{T}(r)\,dr\right),$$

$$\sigma_\theta = \Delta T\beta\left(\frac{1}{2}\overline{T}_{\text{ср}} + \frac{1}{r^2}\int_0^r \overline{T}(r)\,dr - \overline{T}(r)\right), \tag{3}$$

$$\sigma_z = \Delta T\beta\left(\overline{T}_{\text{ср}} - \overline{T}(r)\right), \quad \sigma_{rz} \equiv 0,$$

где

$$\beta = 2G\frac{1+\mu}{1-\mu}\alpha, \quad \overline{T}_{\text{ср}} = \frac{2}{R^2}\int_0^R r\overline{T}(r)\,dr,$$

G — модуль сдвига, α — коэффициент термического расширения, μ — коэффициент Пуассона.

Отметим, что полученное решение точно удовлетворяет граничным условиям на поверхности слитка, а на торцах — условию

$$\int_0^R r\sigma_z(r)\,dr = 0. \tag{4}$$

Это условие удовлетворяется в любом радиальном сечении слитка $z = \text{const}$. Решение показывает, что напряжения прямо пропорциональны радиальному перепаду температуры ΔT и не зависят от радиуса слитка. Поэтому достаточно исследовать характер изменения напряжений при том или ином профиле температуры $T(r)$.

Поскольку дислокации образуются в результате сдвига по плоскостям скольжения $\{111\}$; нас интересует распределение касательных напряжений в слитке для всех девяти систем скольжения. Они могут быть выражены через главные напряжения для направления выращивания $\langle 111\rangle$ следующим образом ([13]). Для 6 наклонных направлений скольжения:

$$\tau_1 = \sqrt{{}^1/_{36}[(\sigma_z - \sigma_r)^2 + (\sigma_z - \sigma_\theta)^2 + (\sigma_r - \sigma_\theta)^2 + {}^2/_3(\sigma_z - \sigma_\theta)(\sigma_z - \sigma_r)}; \tag{5}$$

для 3 систем скольжения в плоскости, перпендикулярной оси роста:

$$\tau_2 = \sqrt{{}^1/_9(\sigma_r - \sigma_\theta)^2}; \tag{6}$$

среднее для всех 9 систем скольжения

$$\tau_3 = \sqrt{{}^2/_3\tau_1^2 + {}^1/_3\tau_2^2}. \tag{7}$$

В нашем случае касательные напряжения, вызванные температурным полем $T(r)$, могут быть вычислены по формуле

$$\tau_i = A_i\sqrt{(\overline{T}_{\text{ср}} - T(r))^2 - B_i\left(\frac{1}{2}\overline{T}_{\text{ср}} - \frac{1}{r^2}\int_0^r rT(r)\cdot dr\right) \times \left(\frac{1}{2}\overline{T}_{\text{ср}} + \frac{1}{r}\int_0^r rT(r)\,dr - T(r)\right)}, \tag{8}$$

где $i = 1, 2, 3$; $A_1 = \sqrt{1/18}\,\beta$, $A_2 = \sqrt{1/9}\,\beta$, $A_3 = \sqrt{2/27}\,\beta$, $B_1 = 8/3$, $B_2 = 4$, $B_3 = 10/3$.

На рис. 1 представлен результат расчета по этой методике касательных термоупругих напряжений в плоскостях скольжения монокристалла арсенида галлия. Температурные поля представлены в виде изотерм. В кристалле наблюдается двукратная смена знака кривизны изотерм по его длине, что свидетельствует об изменении направления радиального потока на расстоянии нескольких миллиметров от фронта кристаллизации. На рис. 1 приведены также линии равных напряжений, характеризующие объемное распределение термоупругих напряжений τ_3 в слитке в процессе выращивания. Сравнение распределения действующих напряжений с величинами критических сдвиговых дало возможность выделить в объеме растущего кристалла температурные области, в которых действующие касательные напряжения не превышают напряжений текучести. При этом использовалась экстраполяция температурной зависимости предела текучести арсенида галлия ([13]) в область температур, близких к $T_{кр}$.

Действующие термические напряжения практически по всей исследованной температурной области превосходят напряжения текучести.

На рис. 2 представлены сравнительные данные по радиальному распределению τ_1, τ_2, τ_3 и плотности дислокаций в поперечном сечении, характеризующемся максимальными сдвиговыми напряжениями. Наблюдается согласие в распределении касательных напряжений τ_3 и плотности дислокаций по сечению кристалла.

Хотя на существование корреляции между распределением напряжений и плотности дислокаций указывалось и ранее ([12], [14]), особенность полученных в настоящей работе результатов заключается в том, что они позволяют установить, в какой температурной области, на каком расстоянии от фронта кристаллизации происходит наиболее интенсивное образование дислокаций в процессе роста. Это позволит определить оптимальное температурное поле для получения монокристаллов с заданной дислокационной структурой, если решить задачу термоупругости в общем виде с учетом как радиального, так и осевого изменения температур.

Государственный научно-исследовательский
и проектный институт
редкометаллической промышленности
Москва

Поступило
30 IV 1971

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] E. Billig, Proc. Roy. Soc. A, 235, 57 (1956). [2] В. Л. Инденбом, Кристаллография, 2, 594 (1957). [3] В. Л. Инденбом, Там же, 9, 74 (1964). [4] С. В. Цивинский, Физ. мет. и металловед., 25, 1013 (1968). [5] I. C. Brice, P. A. Whiffin, Solid-State Electronics, 7 (1964). [6] Г. Е. Веревочкин, В. А. Смирнов, Тр. Московск. инст. инженеров транспорта, в. 189, 133 (1965). [7] W. R. Wilcox, R. Z. Duty, J. Heat Transfer, 88C, 45 (1966). [8] Ю. Ф. Щёлкин, Физика и химия обработки материалов, № 3 (1971). [9] Ю. Ф. Щёлкин, Там же, № 4 (1971). [10] Б. Боли, Дж. Уэйнер, Теория температурных напряжений, М., 1964, стр. 43. [11] Э. Мелан, Г. Паркус, Термоупругие напряжения, вызываемые стационарными температурными полями, М., 1958. [12] В. Л. Инденбом, В. И. Никитенко, Напряжения и дислокации в полупроводниках, М., 1962, стр. 8, 34. [13] М. Г. Мильвидский, В. Б. Освенский, О. Г. Столяров, Неорганические материалы, 1, 1898 (1965). [14] P. Penning, Phil. Res. Reports, 13, 79 (1958).