

РОЗРОБКА МЕТОДУ ВИЗНАЧЕННЯ ТЕРМОПРУЖНИХ НАПРУГ У ПЛАСТИНАХ GaAs

А. П. Оксанич, М. Г. Когдась, В. В. Драгобецький, В. В. Бахмат

Кременчуцький національний університет імені Михайла Остроградського

ORCID: 0000-0002-1400-6177; 0000-0001-7208-2680; 0000-0001-9637-3079; 0000-0002-6851-0838

Проведено дослідження температурного поля розплаву при вирощуванні монокристалів GaAs з-під шару рідкого флюсу. Термопластичні напруження вимірювали на пластинах, вирізаних з верхньої, середньої та нижньої частини злитка нелегованого GaAs. Методом кінцевих елементів розраховані температурні профілі і внутрішні термопластичні напруження. Запропоновано механізм теоретичних і експериментальних досліджень, що дозволяють прогнозувати термопластичні напруження в процесі вирощування злиwkів. Для вимірювання внутрішніх (термопластичних) напружень в роботі використаний метод фотопружності в інфрачервоному поляризованому світлі. Для аналізу та математичних розрахунків стаціонарного диференціального рівняння в часткових похідних і рівнянь термопружності відповідно, використовують метод кінцевих елементів, розрахунки проводились в програмах THERMIX і INCA. Були розраховані температурні профілі і внутрішні термопластичні напруження. Визначено осьовий градієнт температури. Експериментально отримані значення ліній ізонапруг по площині пластин GaAs, вирізаних з різних частин злитка.

Ключові слова: арсенід галію, температура, поле, напруження, злиток, розплав.

АКТУАЛЬНІСТЬ РОБОТИ. Монокристали арсеніду галію широко використовуються для виготовлення багатьох електронних приладів, наприклад, таких як дифузійні електролюмінісцентні діоди, лазери і інтегральні схеми. Деякі автори [1, 2] вважають, що дислокації росту можуть значно скоротити термін служби або погіршити робочі характеристики напівпровідникових приладів. Тому однією з головних проблем, з якою доводиться стикатися виробникам кристалів є скорочення щільності дислокацій у злитках GaAs. Великою проблемою є також розуміння процесів виникнення, поширення і розмноження дислокацій. Таким чином, необхідно продовжувати вивчати ці процеси, щоб мати можливість синтезувати монокристали з низьким рівнем дислокацій.

При вирощуванні кристала з розплаву, розподіл температури, створює термічну напругу в зростаючому зливку. Результатом цієї напруги є поширення і розмноження дислокацій. Отже, в обох випадках виявляється, що термічні напруження це головний фактор, який впливає на розподіл дислокацій у кристалі, навіть якщо їх виникнення важко пов'язати з напруженнями.

Деякі автори вже підраховали розподіл температури і термічної напруги в кристалах GaAs, вирощених за методом ЛЕС. У роботі [3] автор вивчив ці явища на поперечному перерізі круглого злитка, розглядаючи дванадцять {111}, {110} систем ковзання і застосовуючи граничні умови відносно коефіцієнта теплопередачі і зовнішньої температури. Припускаючи критичний показник для наведеного дотичного напруження, він зробив висновок, що його розрахунки напруг добре узгоджуються з розподілом дислокацій виявлених хімічним травленням або рентгенівської топографією в тонкому шарі кристала GaAs. У роботі [4] представлені розрахунки для поздовжнього поперечного перерізу, з огляду на різний зовнішній розподіл температури по висоті. Мета цієї статті – викласти результати наших власних розрахунків і вимірювань для злиwkів, вирощених за методом ЛЕС.

МАТЕРІАЛ І РЕЗУЛЬТАТИ ДОСЛІДЖЕННЯ.

Аналіз розподілу температури в кристалах вимагає рішення диференціального рівняння для теплопровідності [5–6].

Якщо J – вектор теплового потоку, то тепло dQ , яке переміщується по поверхні ds в обсязі dt в плинні часу dt , буде:

$$dQ = J \cdot ds dt = \text{div} J d\tau dt. \quad (1)$$

Можна вважати внутрішнє тепловиділення по Q за одиницю часу в одиниці об'єму. За цих умов, якщо K , ρ і c – це теплопровідність, щільність і питоме тепло твердої речовини відповідно, то рівняння збереження енергії буде:

$$\text{div} J d\tau dt - Q d\tau dt = -\rho c d\tau dT, \quad (2)$$

де T – температура. Більш того, якщо припустити, що теплопровідність K однакова в усій речовині, то рівняння (2) приймає такий вигляд:

$$\frac{K}{\rho c} \nabla^2 T + \frac{Q}{\rho c} = \frac{\partial T}{\partial t}. \quad (3)$$

У нашому випадку, Q – це функція від швидкості витягування v в напрямку z :

$$Q = -v \rho c \frac{\partial T}{\partial z}. \quad (4)$$

Використовуючи рівняння (3) і (4), отримуємо загальне диференціальне рівняння для температури:

$$\frac{K}{\rho c} \nabla^2 T = \frac{\partial T}{\partial t} + v \frac{\partial T}{\partial z}. \quad (5)$$

Якщо швидкість витягування коливається в рамках 1–4 см/год, тоді час $v \frac{\partial T}{\partial z}$ незначно. Більш того, встановлено [5], що для циліндричної конфігурації можуть використовуватися рівняння, які не залежать від часу, які означають, що $\frac{\partial T}{\partial t} = 0$. Таким чином, у циліндричній системі координат (r, θ, z) стаціонарне диференціальне рівняння в часткових похідних набуває такого вигляду:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{R} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = 0, \quad (6)$$

де R – радіус злитка.

Для вирішення стаціонарного диференціального рівняння у часткових похідних, необхідно визначити два види граничних умов:

(i) Розподіл температури по висоті T_s може бути заданий для поверхні кристала. Для вирішення осесиметричної проблеми граничні умови будуть:

$$T = T_s = f(r, z). \quad (7)$$

(ii) На інших поверхнях злитка тепло переміщується по закону охолодження Ньютона. У циліндричній конфігурації граничні умови, в загальному, можуть виражатися так:

$$\partial T / \partial r + h(T - T_a)_{r=R} = 0, \quad (8)$$

де T_a – температура навколишнього середовища, а h – узагальнений коефіцієнт теплопередачі, включаючи конвекцію і радіацію.

Як можна бачити з рівнянь (6) – (8), для вирішення цієї проблеми необхідні знання наступних параметрів:

- конфігураційних параметрів кристала;
- задану температуру поверхні T_s , не враховуючи конвекційну і радіаційну теплопередачу;
- розподіл температури навколишнього середовища по висоті T_a у зовнішньому середовищі, де враховується конвекційна теплопередача;
- узагальнений коефіцієнт теплопередачі h як функція температури і атмосфери (газ або B_2O_3).

Рівняння (6) аналітично можна вирішити, якщо припустити, що:

- у кристала циліндрична форма;
- температура навколишнього середовища має постійне значення.

Як програма THERMIX, так і програма INCA [7] для вирішення стаціонарного диференціального рівняння в часткових похідних (6) і рівнянь термопружності відповідно, використовують метод кінцевих елементів. У принципі, цей метод вимагає поділу конфігурації проблеми на безліч малих елементів з об'ємом $\delta\Omega$ і поверхнею δS . Тоді проблема термопружності вирішується за принципом можливих переміщень. У цьому випадку для кожного допустимого можливого переміщення пружна енергія мінімальна. Якщо W_i – це енергія деформації, W_e – сила зовнішньої енергії, u – переміщення, F – об'ємні сили, Γ – поверхневі сили, прикладені до зовнішньої поверхні конфігурації S_e , σ – тензор напруги, ϵ – тензор деформацій, Ω – обсяг твердої речовини, то:

$$W_i = \frac{1}{2} \iiint_{\Omega} \sigma \cdot \epsilon d\Omega, \quad (9)$$

$$W_e = \iiint_{\Omega} F u d\Omega + \iint_{S_e} \Gamma u dS, \quad (10)$$

$$\delta W_i = \delta W_e. \quad (11)$$

При вирішенні цих рівнянь для кожного малого елемента можна обчислити енергію всього твердого тіла, якщо припустити, що вона дорівнює сумі енергій кожного елемента.

Вхідні фізичні параметри наведені в таблиці 1.

Таблиця 1 – Вхідні фізичні параметри GaAs нелегований з питомим опором $\rho=10^8$ Ом · см.

Орієнтація	D, мм	L, мм	ℓ , мм	$T_{пл}$, К	Теплопровідність, Вт·м ⁻¹ ·К ⁻¹	α°	g, мм	d, мм	Тепловий коефіцієнт α , К ⁻¹
(111)	50	100	50	1511	7,74	60	10	4	10×10^{-5}

Використовуючи ці дані, комп'ютерна програма обчислює складові тензора напружень σ_r , σ_z , σ_θ , σ_{rz} . Мітки, що супроводжують лінії ізонапруги, представляють напруги фон Миса σ_{vm} , виражені як:

$$\sigma_{vm} = \left[\frac{1}{2} (\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_1 - \sigma_3)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 \right]^{1/2}, \quad (12)$$

де σ_1 , σ_2 , σ_3 – це три складові напруги на принциповій основі, досягнуті діагоналізуванням тензора напружень:

$$\begin{pmatrix} \sigma_r & 0 & \sigma_{rz} \\ 0 & \sigma_\theta & 0 \\ \sigma_{rz} & 0 & \sigma_z \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 \end{pmatrix} \quad (13)$$

У даній роботі проведено дослідження температурного поля розплаву при вирощуванні монокристалів GaAs з-під шару рідкого флюсу. Для чисельного аналізу процесів теплопереносу в розплаві

необхідно експериментально зафіксувати граничні умови у вигляді розподілу температур на внутрішній стінці тигля і поблизу поверхні розплаву під шаром флюсу. Для цієї мети використовували алундовані мікротермопари діаметром 100 мкм, спаї яких вварювали в кварцові чохла, які, у свою чергу, приварювали до внутрішньої стінки кварцового тигля. За допомогою спеціального координатного пристрою здійснювали переміщення термопари як уздовж поверхні розплаву (на глибині 2 мм від поверхні), так і в подкристалійній області розплаву на будь-якій стадії процесу вирощування кристала.

Для вимірювання внутрішніх (термопластичних) напружень у роботі використаний метод фотопружності в інфрачервоному поляризованому світлі.

Метод фотопружності заснований на ефекті зміни швидкості світла в напруженому тілі. Він дозволяє досліджувати і вимірювати внутрішні напруги, які відіграють важливу роль у виробництві напівпровідникових матеріалів і приладів. Це завдання досить

просто вирішується для напівпровідникових матеріалів, прозорих у близькій інфрачервоній області спектра, де можуть бути використані електронно-оптичні перетворювачі і ІК відікони, що перетворюють інфрачервоне випромінювання у видиме.

Метод фотопружності дозволяє без руйнування об'єкта дослідження простежити за розвитком дефектів в обсязі матеріалу в процесі виробництва найважливіших типів напівпровідникових приладів. У поєднанні з методами травлення і рентгенівської топографії він дає можливість отримати інформацію про механізми генерації дефектів.

Інтегральну картину термопластичних напруг отримували за допомогою установки «Полярон» [8], а точковий вимір з побудовою лінії ізонапруг отримували на установці «Полярон-2» [9, 10].

Термопластичні напруги вимірювали на пластинках, вирізаних з верхньої, середньої та нижньої частини злитка нелегованого GaAs (см⁻³) товщиною 1 мм з питомим опором 10⁸ Ом·см, діаметром 50 мм, орієнтації (111).

Як було сказано вище, злиток нелегованого GaAs з орієнтацією (111) діаметром D = 50 мм і довжиною L = 100 мм був вирощений по LEC методу. Геометричні і фізичні параметри злитка показані на рис. 1.

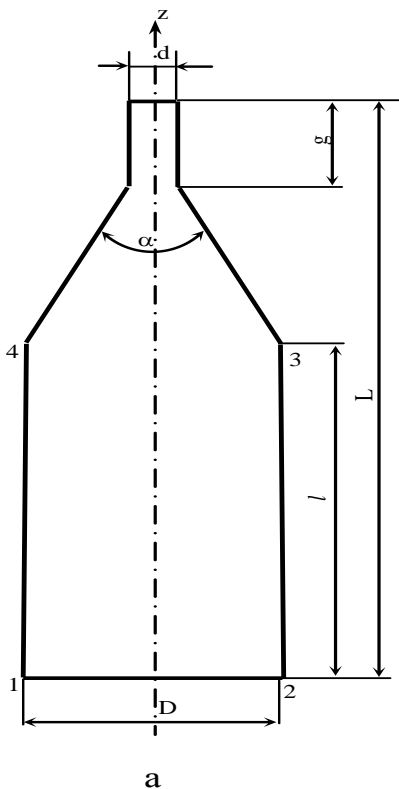


Рисунок 1 – Геометричні параметри вирощеного кристала GaAs

На рис. 2, а і 2, б представлені відповідно розрахований розподіл температури і розрахований розподіл внутрішніх термопластичних напруг у зливку. На рис. 3, а представлено осьовий розподіл температури, а на рис. 3, б – осьовий градієнт температури.

З рис. 2, б видно, що максимальна термопласти-

чна напруга досягається поблизу кордону розділу В2О3 – аргон на поверхні злитка. Як видно з рис. 3, а і 3, б, розподіл зовнішньої температури по висоті слабо впливає на осьовий градієнт температури.

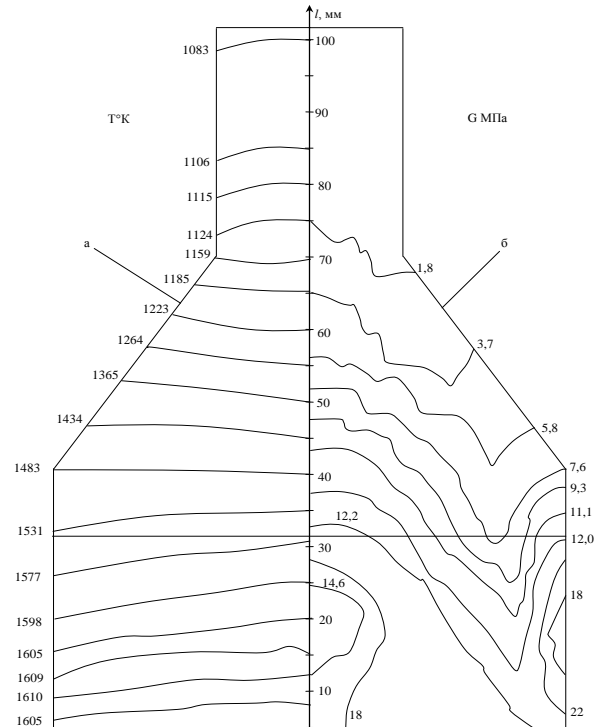


Рисунок 2 – Розподіл температури (а) і внутрішньої напруги (б) по довжині кристала

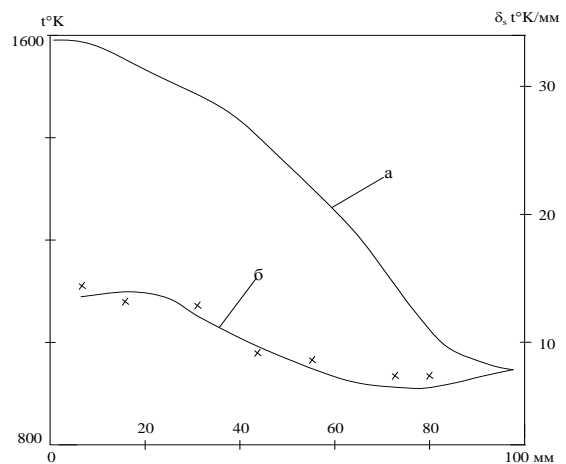
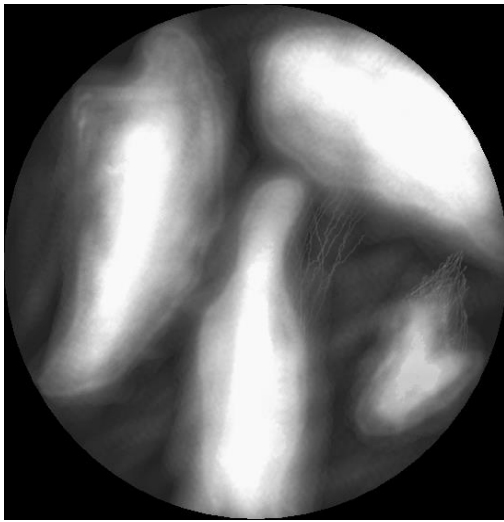
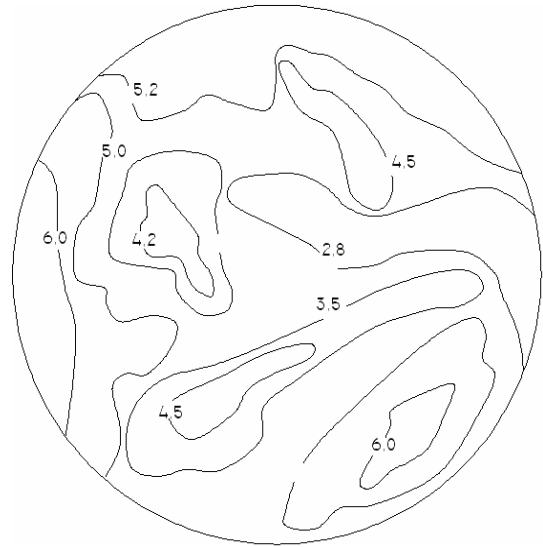


Рисунок 3 – Осьова температура (а) і осьовий градієнт (б) в кристалі

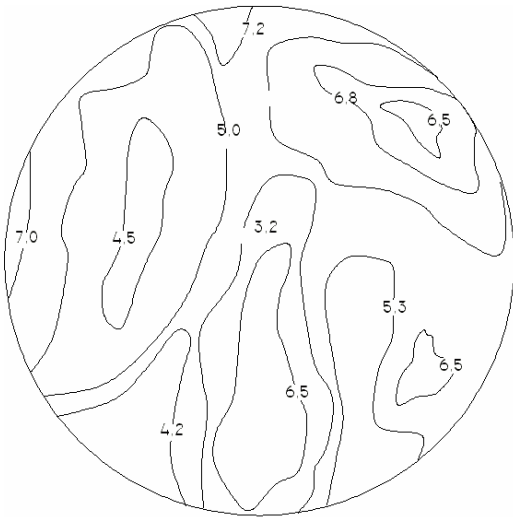
На рис. 4 представлені виміри внутрішньої напруги в пластинках вирощеного злитка GaAs. Як видно з рисунку, найбільші внутрішні напруги знаходяться у верхній частині злитка (рис. 4, а, б). У деяких місцях на краях пластини лінії ізонапруг досягають 7,2 МПа. Ізокліни на рис. 4, а мають (як і лінії ізонапруг на рис. 4, б) явно виражену симетрію (хрест). У середній частині злитка (рис. 4, в, г) внутрішня напруга зменшуються до 6,0, зберігаючи при цьому хрестоподібну симетрію.



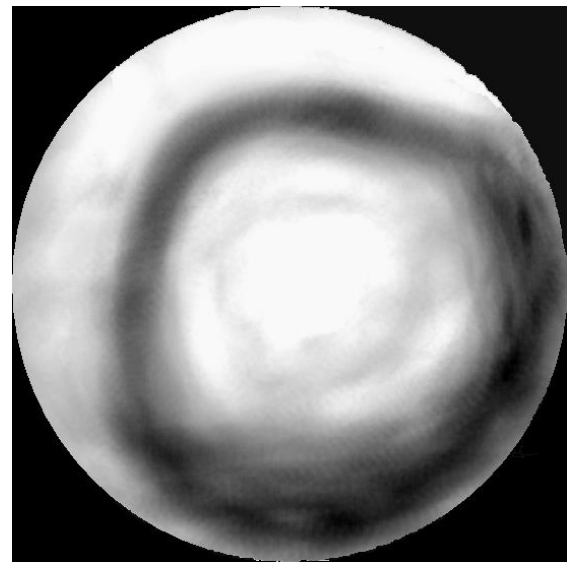
а



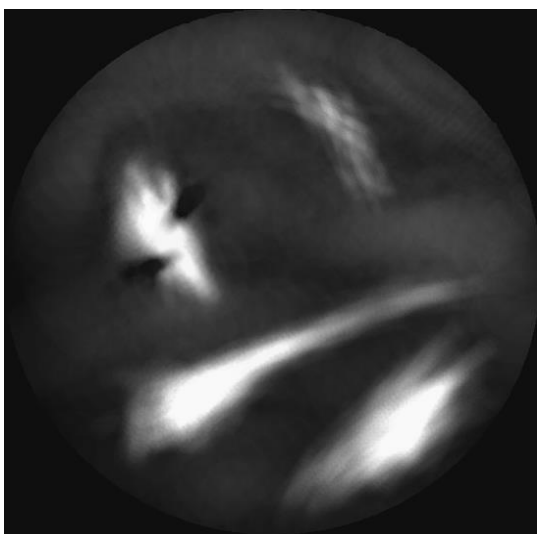
г



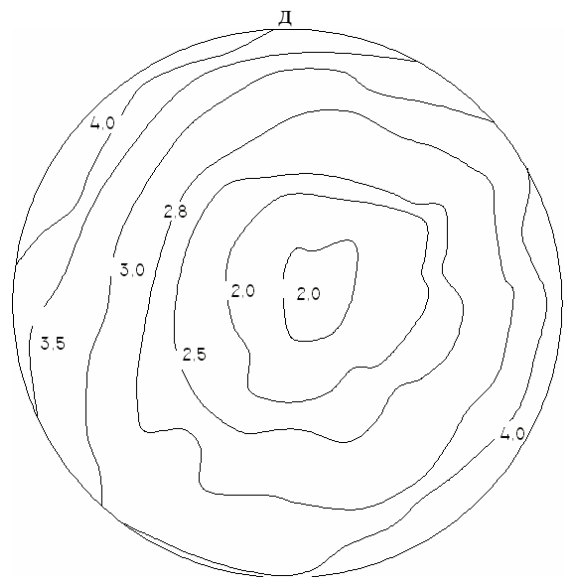
б



д



в



е

Рисунок 4 – Внутрішня напруга у верхній частині злитка (а, б), середньої (в, г) і нижньої (д, е), виміряні методом фотопружності, телевізійним методом (а, в, д) і лазерним скануванням (б, г, е)

І нарешті, в нижній частині злитка (рис. 4, д, е) лінії ізонапруг утворюють кругову симетрію і внутрішні напруги на краю пластини зменшуються до 4,0 МПа.

ВИСНОВКИ. У роботі представлені дослідження температурного поля розплаву при вирощуванні напівізольюючих монокристалів GaAs ЛЕС методом. Експериментально зафіксовані граничні умови для вирішення стаціонарного диференціального рівняння в часткових похідних. Показано розподіл температури навколишнього середовища по висоті кристала.

За допомогою комп'ютерних програм, заснованих на методі кінцевих елементів, розраховані температурні профілі і внутрішні термопластичні напруги. Визначено осьовий градієнт температури.

Експериментально отримані значення ліній ізонапруг по площині пластин GaAs, вирізаних з різних частин злитка.

У результаті проведених досліджень можна зробити висновок, що в роботі запропоновано механізм теоретичних і експериментальних досліджень, що дозволяє прогнозувати термопластичні напруги в процесі вирощування злиwkів GaAs і, в кінцевому рахунку, розробити процедуру зниження щільності дислокацій в злитках GaAs.

ЛІТЕРАТУРА

1. Diep, N.Q., Liu, C.W., Wu, S.K. Screw-Dislocation-Driven Growth Mode in Two Dimensional GaSe on GaAs(001) Substrates Grown by Molecular Beam Epitaxy. *Scientific Reports*. 2019. v.9, P.17781.
2. Chih-Wei H., Deminskyi P., Martinovic I. Direct epitaxial nanometer-thin InN of high structural quality on 4H-SiC by atomic layer deposition. *Appl. Phys. Lett.* 2020. v. 117. P. 093101

3. Dreyer W., Duderstadt F., Eichler S., Jurisch M. Stress analysis and bending tests for GaAs wafers. *Microelectronics Reliability*. 2006. v. 46, is. 5–6. P. 822–835

4. Wang S., Pirouz P. Mechanical properties of undoped GaAs. Part I: Yield stress measurements. *Acta Materialia*. 2007. v. 55, is. 16. P. 5500-5514.

5. Оксанич А. П., Когдась М. Г. Экспериментальное вычисление фотоупругих постоянных арсенида галлия. *Вісник КрНУ імені Михайла Остроградського*. 2013. Вип. 3 (80). С. 31–34.

6. Когдась М. Г. Исследование зависимости внутренних напряжений в арсениде галлия от кристаллографических направлений и технологических процессов. *Вісник КрНУ імені Михайла Остроградського*. 2014. Вип. 3 (86). С. 172–177.

7. Притчин С. Э, Артамонов В. В. Математическое моделирование влияния остаточных напряжений на механические свойства подложек арсенида галлия. *Вісник КрНУ імені Михайла Остроградського*. 2013. Вип. 4. С. 31–36

8. Притчин С. Э. Усовершенствование математической модели влияния кристаллографических направлений подложек арсенида галлия на плотность дислокаций. *Вісник КрНУ імені Михайла Остроградського*. 2013. Вип. 5. С. 27–32

9. Oksanych A. P, Pritchich S. E, Terban V. A. Improvement of a method for measuring residual stresses in the gallium arsenide substrate. *Automatic control systems and automation devices*. 2012. v. 161. P. 222–228.

10. Притчин С. Э. Разработка методики измерения остаточных напряжений в подложках арсенида галлия *Вісник КрНУ імені Михайла Остроградського*. 2014. Вип 2 (85). С. 21–25.

DEVELOPMENT OF A METHOD FOR DETERMINATION OF THERMOELASTIC STRESSES IN GAAS PLATES

A. Oksanich, M. Kogdas, V. Dragobetsky, V. Bakhmat

Kremenchuk Mykhailo Ostrohradskyi National University

ORCID: 0000-0002-1400-6177; 0000-0001-7208-2680; 0000-0001-9637-3079; 0000-0002-6851-0838

Purpose. A study of the temperature field of the melt during the cultivation of GaAs single crystals from under a layer of liquid flux. Thermoplastic stresses were measured on plates cut from the upper, middle and lower part of the ingot of undoped GaAs. **Methodology.** Finite element method is used to calculate temperature profiles and internal thermoplastic stresses. The mechanism of theoretical and experimental researches which allow to predict thermoplastic stresses in the course of cultivation of ingots is offered. For the analysis and mathematical calculations of the stationary differential equation in partial derivatives and the equations of thermoelasticity, respectively, use the finite element method, the calculations were performed in the programs THERMIX and INCA. Temperature profiles and internal thermoplastic stresses were calculated. Thermoplastic stresses were measured on plates cut from the upper, middle and lower part of the ingot of undoped GaAs (cm^{-3}) with a thickness of 1 mm with a resistivity of 10^8 Ohm x cm, diameter 50 mm, orientation (111). The axial temperature gradient is determined. Experimentally obtained values of ison voltage lines along the plane of GaAs plates cut from different parts of the ingot. To measure the internal (thermoplastic) stresses in the work used the method of photoelastic-guests in infrared polarized light. The integrated picture of thermoplastic stresses was obtained using the "Polaron" installation, and the point measurement with the construction of the iso-voltage line was obtained on the "Polaron-2" installation. **Originality.** As a result of the research it can be concluded that the mechanism of theoretical and experimental researches is offered in the work, which allows to predict thermoplastic stresses in the process of growing GaAs ingots and, finally, to develop a procedure for reducing dislocation density in GaAs ingots. **The practical value.** the proposed method will improve

the technology of growing ingots of gallium arsenide with a more homogeneous technology, which will be a good indicator for the future creation of gas sensors from this material.

Key words: gallium arsenide, temperature, field, stress, ingot, melt.

REFERENCES

1. Diep, N.Q., Liu, C.W., Wu, S.K. (2019), Screw-Dislocation-Driven Growth Mode in Two Dimensional GaSe on GaAs(001) Substrates Grown by Molecular Beam Epitaxy. *Scientific Reports*. 2019. v.9, P.17781.
2. Chih-Wei, H., Deminskyi, P., Martinovic, I. (2020), Direct epitaxial nanometer-thin InN of high structural quality on 4H-SiC by atomic layer deposition. *Appl. Phys. Lett.* 2020. v. 117. P. 093101
3. Dreyer, W., Duderstadt, F., Eichler, S., Jurisch, M. (2006), Stress analysis and bending tests for GaAs wafers. *Microelectronics Reliability*. v. 46, is. 5–6. P. 822–835
4. Wang, S., Pirouz, P. (2007), Mechanical properties of undoped GaAs. Part I: Yield stress measurements. *Acta Materialia*. v. 55, is. 16. P. 5500–5514.
5. Oksanych, A. P., Kohdas, M. H. (2013), Eksperymentalne vychyslenye fotoupruhykh postoiannykh ar-senyda hallyia. *Visnyk KrNU imeni Mykhaila Ostrohrad'skoho*. Vyp.3 (80). C. 31–34.
6. Kohdas, M. H. (2014), Yssledovanye zavysymosti vnutrennykh napriazheniy v arsenyde hallyia ot krysl-tallohrayficheskyykh napravleniy y tekhnolohycheskyykh protsessov. *Visnyk KrNU imeni Mykhaila Ostrohrad'skoho*. Vyp. 3 (86). C. 172–177
7. Pritchyn, S. E., Artamonov, V. V. (2013), Mate-maticheskoye modelirovaniye vliyaniya ostatochnyykh napryazheniy na mekhanicheskiye svoystva podlozhek arsenida galliya. *Visnik KrNU imeni Mikhayla Ostrograd'skogo*. 2013. Vip. 4. C. 31–36
8. Pritchyn, S. E. (2013), Uovershenstvovaniye matematicheskoy modeli vliyaniya kristal-lograficheskikh napravleniy podlozhek arsenida galliya na plotnost' dislokatsiy. *Visnik KrNU imeni Mikhayla Ostrograd'skogo*. 2013. Vip. 5. C. 27–36
9. Oksanych, A. P., Pritchyn, S. E., Terban, V. A. (2012), Improvement of a method for measuring residual stresses in the gallium arsenide substrate. *Automatic control systems and automation devices*. 2012. v. 161. P. 222–228.
10. Pritchyn, S. E. (2014), Razrabotka metodiki izmereniya ostatochnyykh napryazheniy v podlozhkakh arsenida galliya. *Visnik KrNU imeni Mikhayla Ostrograd'skogo*. 2014. Vip 2 (85). P. 21–25.

Стаття надійшла 17.08.2021