

01:05

Расчет термических напряжений в профилированных монокристаллах при учете температурной зависимости теплового расширения

© С.И. Бахолдин, Е.В. Галактионов, Э.А. Тропп

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

(Поступило в Редакцию 16 марта 2010 г.)

Получены приближенные выражения для компонент тензора напряжений в цилиндрических и ленточных кристаллах при учете температурной зависимости коэффициента теплового расширения монокристалла. С их помощью дана оценка влияния фактора нелинейности теплового расширения на уровень напряжений. Показано, что напряжения, возникающие за счет рассматриваемого фактора, в линейных температурных полях сопоставимы с критическими напряжениями образования дефектов.

Введение

Одной из основных причин образования дефектов при выращивании монокристаллов из расплава является пластическая деформация под действием термических напряжений [1]. При использовании таких распространенных методов выращивания монокристаллов, как метод Чохральского, бестигельная зонная плавка, способ Степанова, термические напряжения могут возникать вследствие несовместности температурных деформаций, возникающих в сложном температурном поле, существующем в кристалле в процессе роста и охлаждения от температуры плавления до комнатной температуры. Радикальным способом повышения качества кристаллов является снижение уровня термических напряжений до значений, меньших предела текучести.

Как известно, численные методы позволяют получать количественные результаты для конкретного вида температурного поля. В этой области выполнены обширные исследования (см., например, [2,3]). Но для качественного анализа и сопоставления роли различных факторов в формировании напряженного состояния растущего кристалла крайне желательно иметь хотя бы приближенные аналитические выражения для компонент тензора напряжений в кристаллах различной формы. Такие формулы могут быть получены путем асимптотического интегрирования уравнений термоупругости. В этом методе решение ищется в виде ряда по малому параметру. Для кристаллов, выращиваемых способом Степанова, практически всегда, а для метода Чохральского — в большинстве случаев в качестве такого параметра может быть выбрано отношение характерного размера поперечного размера к длине кристалла. Ранее этим методом были получены приближенные формулы для компонент тензора термоупругих напряжений в кристаллах цилиндрической и ленточной формы как в изотропном приближении [4], так и с учетом анизотропии теплофизических и упругих свойств кристалла [5].

Однако во всех этих работах монокристалл рассматривался как однородное тело с постоянными по всему объему теплофизическими и упругими свойствами. В то же время для широкого круга монокристаллов эти свойства изменяются с температурой значительно и часто нелинейно. Так, для практически важного монокристалла ниобата лития LiNbO_3 компоненты тензора коэффициентов теплового расширения изменяются от комнатной температуры до температур плавления в 3–4 раза [6]. Случай анизотропного нелинейного теплового расширения был рассмотрен только в работе [7] с точки зрения получения условий отсутствия напряжений для кристаллов тригональной сингонии в форме цилиндрических стержней, выращиваемых в осесимметричном температурном поле.

В настоящей работе метод асимптотического интегрирования применяется для расчета термоупругих напряжений в кристаллах, имеющих форму цилиндрических стержней и плоских лент, в изотропном приближении, но с учетом зависимости коэффициента теплового расширения от температуры.

Расчет напряжений в кристаллах цилиндрической формы

Температурная зависимость коэффициента теплового расширения может быть достаточно сложной, но для многих кристаллов она имеет относительно плавный характер и может быть хорошо аппроксимирована параболой. Поэтому предположим, что эта зависимость имеет вид

$$\alpha(T) = \alpha_0 + k_1 T + k_2 T^2, \quad (1)$$

где α — коэффициент теплового расширения, α_0 , k_1 , k_2 — постоянные коэффициенты, T — температура.

Итак, решается стационарная задача изотропной термоупругости в круговом цилиндре. Исходными соотношениями являются уравнение теплопроводности, уравнения равновесия и закон Гука с учетом деформации

теплового расширения. Граничные условия такие же, как в работе [4]. Вводим следующие масштабы для независимых переменных и искомых функций (черточками сверху отмечены размерные величины):

$$r = \bar{r}/R, \quad z = \bar{z}/L, \quad T = (\bar{T} - \bar{T}_0)/\bar{T}_0, \quad \alpha = \bar{\alpha}\bar{T}_0,$$

$$\sigma_i = \bar{\sigma}_i/E, \quad \tau_{rz} = \bar{\tau}_{rz}/E, \quad i = r, \theta, z. \quad (2)$$

Здесь r , θ и z — цилиндрические координаты; R , L — радиус и длина цилиндра; \bar{T}_0 — температура плавления; σ_i , τ_{rz} — компоненты тензора напряжений; E — модуль Юнга; ось z направлена по оси стержня и совпадает с направлением вытягивания, а начало координат находится в центре нижнего основания цилиндра.

В предположении достаточно малого теплообмена на боковой поверхности кристалла (критерий Био много меньше единицы) и отсутствия источников тепла внутри кристалла выражение для распределения температуры будет иметь следующий вид:

$$T(r, z) = \hat{T}_0(z) + \left[\hat{T}_2(z) + \frac{1}{8} (1 - 2r^2) \frac{d^2 \hat{T}_0}{dz^2} \right] \varepsilon^2 + O(\varepsilon^4), \quad (3)$$

где ε — геометрический параметр, равный отношению радиуса кристалла к его длине (малый параметр задачи); $\hat{T}_0(z)$ и $\hat{T}_2(z)$ — нулевое и второе приближение в разложении в ряд средней по сечению кристалла температуры. Слагаемые с нечетными степенями ε в изотропном приближении отсутствуют, $\hat{T}_2(z)$ в конечные выражения не войдет, а в качестве $\hat{T}_0(z)$ на практике используются как результаты численных расчетов, так и экспериментальные распределения температуры, определяемые, например, методом вращивания термопар.

Приближенные выражения для компонент тензора напряжений, полученные с помощью алгоритма [4], но с учетом (1), можно представить в форме

$$\sigma_r(r, z) = \frac{(1 - r^2)\varepsilon^2}{16(1 - \nu)} \left[\frac{2\nu}{1 + \nu} \frac{d^2}{dz^2} (\alpha(T)T)_0 - C(z) \right] + O(\varepsilon^4),$$

$$\sigma_\theta(r, z) = \frac{(1 - 3r^2)\varepsilon^2}{16(1 - \nu)} \left[\frac{2\nu}{1 + \nu} \frac{d^2}{dz^2} (\alpha(T)T)_0 - C(z) \right] + O(\varepsilon^4),$$

$$\sigma_z(r, z) = \frac{(1 - 2r^2)\varepsilon^2}{8(1 - \nu)} \left[\frac{2}{1 + \nu} \frac{d^2}{dz^2} (\alpha(T)T)_0 - C(z) \right] + O(\varepsilon^4),$$

$$\tau_{rz}(r, z) = \frac{r(r^2 - 1)\varepsilon^3}{16(1 - \nu)} \left[\frac{2}{1 + \nu} \frac{d^3}{dz^3} (\alpha(T)T)_0 - \frac{d}{dz} C(z) \right] + O(\varepsilon^5), \quad (4)$$

где

$$(\alpha(T)T)_0 = [\alpha_0 + k_1 T_0(z) + k_2 T_0^2(z)] T_0(z),$$

$$C(z) = [\alpha_0 + 2k_1 T_0(z) + 3k_2 T_0^2(z)] \frac{d^2 T_0(z)}{dz^2},$$

ν — коэффициент Пуассона. При отсутствии температурной зависимости α от T (при $k_1 = k_2 = 0$, $\alpha = \alpha_0$) эти соотношения переходят в полученные ранее формулы [4]:

$$\sigma_r(r, z) = -\alpha \frac{(1 - r^2)\varepsilon^2}{16(1 + \nu)} \frac{d^2 \hat{T}_0}{dz^2} + O(\varepsilon^4),$$

$$\sigma_\theta(r, z) = -\alpha \frac{(1 - 3r^2)\varepsilon^2}{16(1 + \nu)} \frac{d^2 \hat{T}_0}{dz^2} + O(\varepsilon^4),$$

$$\sigma_z(r, z) = \alpha \frac{(1 - 2r^2)\varepsilon^2}{8(1 + \nu)} \frac{d^2 \hat{T}_0}{dz^2} + O(\varepsilon^4),$$

$$\tau_{rz}(r, z) = \alpha \frac{r(r^2 - 1)\varepsilon^3}{16(1 + \nu)} \frac{d^3 \hat{T}_0}{dz^3} + O(\varepsilon^5). \quad (5)$$

Сопоставив (4) и (5), можно отметить следующее. Для однородного тела первые члены разложений для нормальных компонент тензора напряжений линейно зависят от второй производной температуры \hat{T}_0 по координате z , а первый член разложения для касательной компоненты — от третьей производной. Учет зависимости коэффициента теплового расширения от температуры приводит к появлению в этих членах нелинейной зависимости от самой температуры \hat{T}_0 , а также от ее первой и второй производной по z . Но при этом изменяются только численные значения напряжений, а характер их распределения в сечении кристалла не меняется. Следует отметить, что приведенные выше формулы (4), так же как и формулы, приведенные в [4,5], справедливы во всем объеме кристалла за исключением приторцевых областей размером порядка его диаметра.

Сделаем оценку уровня возможных напряжений, вызванных температурной зависимостью коэффициента теплового расширения. Для того чтобы выявить влияние этого фактора в чистом виде, предположим, что при выращивании цилиндрического кристалла созданы условия, обеспечивающие линейность распределения температуры по оси стержня

$$\hat{T}_0(z) = az + b, \quad \frac{d^2 \hat{T}_0(z)}{dz^2} = 0. \quad (6)$$

Напомним, что при постоянном коэффициенте расширения такое температурное поле не вызывает напряжений в кристалле, что хорошо видно из формул (5). При учете температурной зависимости (1) формулы (4) дают сле-

дующие выражения для компонент тензора напряжений:

$$\begin{aligned}\sigma_r(r, z) &= \frac{\nu(1-r^2)\varepsilon^2}{4(1-\nu^2)} [k_1 + 3k_2(az+b)]a^2 + O(\varepsilon^4), \\ \sigma_\theta(r, z) &= \frac{\nu(1-3r^2)\varepsilon^2}{4(1-\nu^2)} [k_1 + 3k_2(az+b)]a^2 + O(\varepsilon^4), \\ \sigma_z(r, z) &= \frac{(1-2r^2)\varepsilon^2}{2(1-\nu^2)} [k_1 + 3k_2(az+b)]a^2 + O(\varepsilon^4), \\ \tau_{rz}(r, z) &= \tau_{rz}(r) = \frac{3r(r^2-1)\varepsilon^3}{4(1-\nu^2)} k_2 a^3 + O(\varepsilon^5).\end{aligned}\quad (7)$$

Из полученных формул видно, что при параболическом виде зависимости $\alpha(T)$ нормальные компоненты тензора σ_r , σ_θ , σ_z оказываются линейными функциями осевой координаты, а касательная компонента τ_{rz} от z не зависит. Если $\alpha(T)$ описывается линейной функцией ($k_2 = 0$), то нормальные компоненты не будут зависеть от z , а касательная компонента будет нулевой, тогда как при отсутствии зависимости коэффициента теплового расширения от температуры все компоненты тензора термоупругих напряжений, как и следовало ожидать, будут нулевыми.

В качестве примера рассмотрим случай выращивания способом Степанова монокристалла сапфира в форме цилиндра диаметром 10 mm. Типичная высота тепловой зоны составляет $L \approx 10$ см. На фронте кристаллизации температура равна температуре плавления 2050°C, а на выходе из экранов кристалл обычно имеет температуру около 1000°C. Будем полагать, что в тепловой зоне реализовано линейное распределение температуры. Коэффициенты в выражении (6) с учетом нормировки составят: $a = -0.512$, $b = 0$, а геометрический параметр $\varepsilon = R/L = 0.05$.

В интервале температур 200–1300°C температурные зависимости $\alpha_\perp(T)$ и $\alpha_\parallel(T)$ для лейкосапфира [8] хорошо аппроксимируются параболами. Значения этих двух компонент различаются незначительно и для расчета в изотропном приближении примем $\alpha(T) = \alpha_\perp(T)$. При экстраполяции в область более высоких температур были получены следующие значения коэффициентов: $\alpha_0 = 5.58 \cdot 10^{-6}$, $k_1 = 3.35 \cdot 10^{-9}$ и $k_2 = -8.26 \cdot 10^{-13}$. Усреднив упругие постоянные лейкосапфира [9] по Фогту [10], получим $E = 4.34 \cdot 10^5$ MPa, $\nu = 0.27$.

На рис. 1 представлены результаты расчетов по формулам (7) для точек на оси стержня ($r = 0$), где $\sigma_r = \sigma_\theta$, $\tau_{rz} = 0$. Линейный ход распределения нормальных компонент тензора соответствует аппроксимации $\alpha(T)$ параболой. Возрастание напряжений по длине кристалла связано с тем, что при низких температурах значение α изменяется быстрее. Графики не доведены до торцов кристалла, поскольку, как уже отмечалось, в этих областях приближенные формулы для напряжений не работают. На этом же рисунке штриховой линией показано критическое напряжение сдвига для системы легкого скольжения сапфира (экстраполяция данных [11]

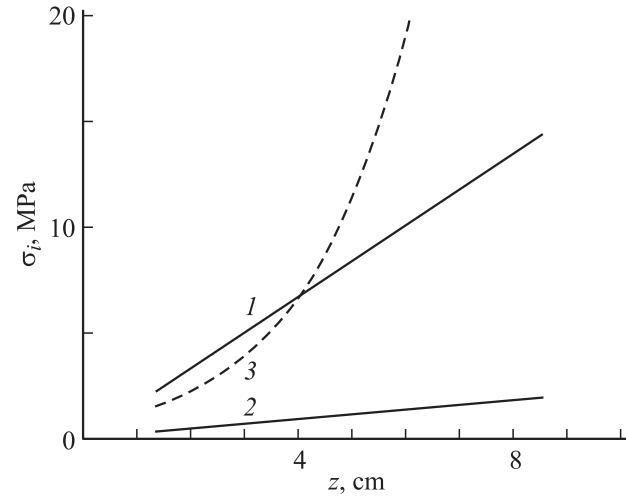


Рис. 1. Осевое распределение компонент тензора термоупругих напряжений, возникающих в линейном температурном поле, при учете температурной зависимости коэффициента теплового расширения для стержня лейкосапфира диаметром 10 mm. Значения компонент σ_z и $\sigma_r = \sigma_\theta$ на оси стержня ($r = 0$) — кривые 1 и 2 соответственно; критические напряжения сдвига в базисной системе легкого скольжения — 3.

для базисной системы скольжения в область температур 1800–2000°C). Видно, что значения компоненты σ_z превосходят критические в существенной части кристалла.

В качестве второго примера рассмотрим случай выращивания стержня германия тех же размеров. По данным [12], типичная высота тепловой зоны $L = 8$ см, а температура на выходе из экранов около 600°C. Учитывая, что температура плавления германия составляет 936°C, получаем коэффициенты линейного распределения в безразмерном виде $a = -0.466$, $b = 0$, а геометрический параметр $\varepsilon = 0.05$. Для германия при температуре выше 600°C зависимость $\alpha(T)$ практически линейна [13]. Аппроксимация в этом случае дает $\alpha_0 = 5.843 \cdot 10^{-6}$, $k_1 = 3.714 \cdot 10^{-9}$ и $k_2 = 0$. Необходимые для расчета значения модуля Юнга и коэффициента Пуассона были получены путем усреднения по Фогту [10] упругих постоянных германия [14]. В соответствии с (7) при $k_2 = 0$ компоненты тензора напряжений не будут зависеть от координаты z (исключая, как всегда, небольшие области вблизи торцов).

На рис. 2, *a* приведены результаты расчета радиальной зависимости компонент. Пластическая деформация в монокристалле германия происходит путем скольжения по плоскостям типа {111} в направлениях типа ⟨110⟩. Для оценки возможной интенсивности обычно используются среднеквадратичные значения касательных напряжений, усредненные по всем действующим системам скольжения этого типа. В работе [5] приведены формулы для расчета таких напряжений в цилиндрических стержнях различной кристаллографической ориентации. На рис. 2, *b* представлено радиальное распределение среднеквадратичных напряжений для ориентации на-

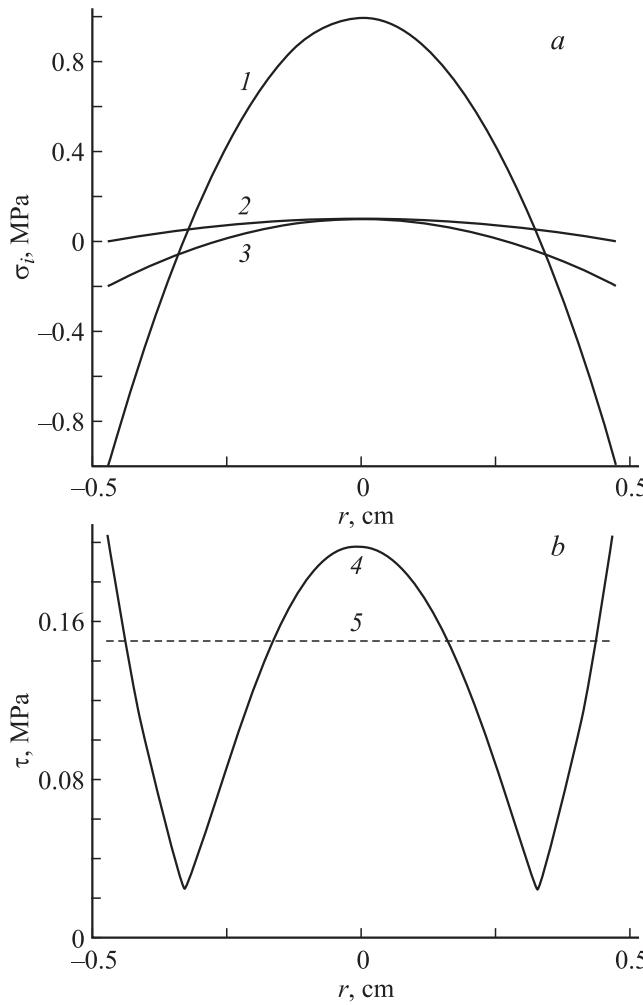


Рис. 2. Радиальное распределение напряжений, возникающих в линейном температурном поле, при учете температурной зависимости коэффициента теплового расширения для стержня германия диаметром 10 mm. *a* — компоненты тензора σ_z , σ_r , σ_θ , — кривые 1, 2, 3 соответственно; *b* — среднеквадратичные значения касательных напряжений — кривая 4; критические напряжения сдвига — 5.

правления вытягивания [111] в сопоставлении с критическим напряжением сдвига для этой системы скольжения при предплавильных температурах [15]. Из рисунка видно, что и в линейном температурном поле напряжения, вызванные только зависимостью $\alpha(T)$, могут превышать критические значения.

Представляет также интерес выполнить оценку влияния рассматриваемого фактора на напряжения, возникающие при выращивании цилиндрических кристаллов методом Чохральского. Из большого объема литературных данных были использованы результаты работ [16, 17], в которых проводилось моделирование теплопереноса и расчет термоупругих напряжений для случая выращивания монокристаллов кремния диаметром 15 см. По данным [16], градиент температуры в растущем кристалле может достигать 50 К/см. Предполагая линейность распределения температуры и выполнив расчет, аналогичный описанному выше для кристалла гер-

мания, получим максимальное значение компоненты $\sigma_z \approx 5$ MPa, в то время как критические напряжения в кремнии при предплавильных температурах лежат в пределах 1–10 MPa [17].

Расчет напряжений в кристаллах ленточной формы

Рассмотрим случай длинной, узкой и тонкой ленты. Предполагаем, что толщина ленты много меньше ее ширины, а ширина, в свою очередь, много меньше длины. Напряжения будем рассчитывать в декартовой системе координат выбранной следующим образом. Ось z , как и в случае стержня, совпадает с направлением вытягивания, а начало отсчета находится в центре нижнего основания. Ось x перпендикулярна широкой стороне, а ось y направлена по ширине ленты. Вводим следующие масштабы для независимых переменных и искомых величин (чертежками, как и ранее, отмечены размерные величины):

$$y = \frac{\bar{y}}{B}, \quad z = \frac{\bar{z}}{L}, \quad \sigma_i = \frac{\bar{\sigma}_i}{E}, \quad \tau_{yz} = \frac{\bar{\tau}_{yz}}{E}, \quad i = y, z. \quad (8)$$

Здесь L и $2B$ — длина и ширина ленты соответственно; σ_z , τ_{yz} , σ_y — компоненты тензора напряжений. В предположении достаточно малого теплообмена на боковых плоскостях кристаллической ленты (критерий Био много меньше единицы), при отсутствии источников тепла внутри кристалла, можно считать распределение температуры одномерным:

$$T(y, z) = \hat{T}(z). \quad (9)$$

Малый параметр задачи есть отношение ширины ленты к ее длине ($\delta = B/L$).

Применение метода сингулярных возмущений к решению стационарной изотропной задачи термоупругости (задачи плоского напряженного состояния при малой толщине ленты) с граничными условиями, описанными в [5], с распределением температуры (9) и с учетом нелинейности теплового расширения вида (1) позволяет получить следующие приближенные выражения для составляющих тензора термоупругих напряжений в ленте:

$$\begin{aligned} \sigma_z &= -\frac{3y^2 - 1}{6} \frac{d^2}{dz^2} [\alpha(\hat{T})\hat{T}] \delta^2 + O(\delta^4), \\ \tau_{yz} &= \frac{(y^2 - 1)y}{6} \frac{d^3}{dz^3} [\alpha(\hat{T})\hat{T}] \delta^3 + O(\delta^5), \\ \sigma_y &= -\frac{(y^2 - 1)^2}{24} \frac{d^4}{dz^4} [\alpha(\hat{T})\hat{T}] \delta^4 + O(\delta^6). \end{aligned} \quad (10)$$

Сделаем оценку возможных напряжений, вызванных температурной зависимостью коэффициента теплового расширения. Предположим, что в случае выращивания ленточного кристалла созданы условия, обеспечивающие линейность распределения температуры по оси

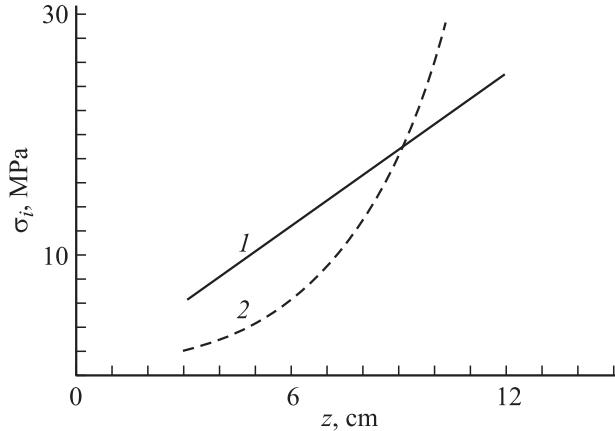


Рис. 3. Осевое распределение компоненты σ_z тензора термоупругих напряжений, возникающих в линейном температурном поле, при учете температурной зависимости коэффициента теплового расширения для ленты лейкосапфира сечением 30×1.5 mm. Значения σ_z на оси кристалла ($y = 0$) — кривая 1; критические напряжения сдвига в базисной системе легкого скольжения — 2.

ленты (аналогично рассмотренному выше случаю цилиндрического кристалла, см. формулу (6)).

В этом случае формулы (10) дают следующие выражения для компонент тензора термоупругих напряжений в ленте:

$$\begin{aligned} \sigma_z &= -\frac{3y^2 - 1}{3} [k_1 + 3k_2(az + b)] a^2 \delta^2 + O(\delta^4), \\ \tau_{yz} &= k_2 a^3 (y^2 - 1) y \delta^3 + O(\delta^5), \\ \sigma_y &= O(\delta^6). \end{aligned} \quad (11)$$

В качестве примера рассмотрим случай выращивания способом Степанова монокристалла сапфира в форме ленты шириной 30 и толщиной 1.5 mm. Типичная высота тепловой зоны при выращивании таких лент составляет $L \approx 15$ cm при температуре кристалла на выходе из экранов около 1000°C. Будем, как и в предыдущих примерах, полагать, что в тепловой зоне реализовано линейное распределение температуры.

Результаты расчета компоненты σ_z по формулам (11) для точек на оси ленты ($y = 0$) показаны на рис. 3 в сопоставлении с критическими напряжениями сдвига [11]. Как и в случае стержня, полученные значения напряжений превосходят критические в значительной части кристалла.

Заключение

1. Методом асимптотического интегрирования решена стационарная задача изотропной термоупругости для неоднородного тела (рассмотрен случай нелинейного теплового расширения). Впервые получены приближенные выражения для компонент тензора термоупругих напряжений в цилиндрических и ленточных кристаллах

с учетом параболической зависимости коэффициента теплового расширения от температуры.

2. Для оценки влияния рассматриваемого фактора на величину термоупругих напряжений были выполнены расчеты по полученным формулам в предположении линейности температурного поля в кристалле. Поскольку при постоянстве теплофизических свойств линейность температуры является условием отсутствия термоупругих напряжений, такой расчет позволяет выявить влияние температурной зависимости температурного расширения в чистом виде.

Результаты, полученные для цилиндрических и ленточных монокристаллов лейкосапфира, стержней германия, выращиваемых способом Степанова, и монокристаллов кремния большого диаметра, получаемых методом Чохральского, показывают, что во всех рассмотренных случаях учет зависимости $\alpha(T)$ приводит к появлению дополнительных напряжений, сопоставимых с критическими напряжениями начала пластической деформации при предплавильных температурах.

Список литературы

- [1] Антонов П.И., Затуловский Л.М., Костыгов А.С. и др. Получение профилированных монокристаллов и изделий способом Степанова / Под ред. В.Р. Регеля, С.П. Никанорова. Л.: Наука, 1981. 280 с.
- [2] Антонов П.И., Бахолдин С.И., Васильев М.Г. и др. // Изв. РАН. Сер. физ. 1994. Т. 58. № 9. С. 72.
- [3] Мамедов В.М., Юферев В.С., Бахолдин С.И. и др. // Изв. РАН. Сер. физ. 2009. Т. 73. № 10. С. 1441.
- [4] Галактионов Е.В., Тропп Э.А. // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1976. Т. 40. № 7. С. 1399.
- [5] Антонов П.И., Бахолдин С.И., Галактионов Е.В., Тропп Э.А. // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1980. Т. 44. № 2. С. 255.
- [6] Galarher P.K., O'Bryan N.M., Brandle C.D. // Thermohim. Acta. 1988. Vol. 133. Р. 1.
- [7] Ковалевский Д.В., Смирнов П.В. // Вестн. СПбГУ. 2006. Сер. 4. № 3. С. 24.
- [8] Кржизжановский Р.Е., Штерн З.Ю. // Теплофизические свойства неметаллических материалов. Л.: Энергия, 1973. 333 с.
- [9] Рубин и Сапфир / Под ред. М.В. Классен-Неклюдовской, Х.С. Багдасарова. М.: Наука, 1974. 236 с.
- [10] Хантингтон Г. // УФН. 1961. Т. 3. С. 461.
- [11] Peter K., Lagerlof D., Heuer A.H. et al. // J. Am. Ceram. Soc. 1994. Vol. 77. N 2. P. 385.
- [12] Антонов П.И., Колесникова Э.Н., Крымов В.М. и др. // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1976. Т. 40. № 7. С. 1407.
- [13] Slack G.A. // J. Appl. Phys. 1975. Vol. 46. P. 89.
- [14] Буренков Ю.А., Никаноров С.П., Степанов А.В. // ФТТ. 1970. Т. 12. Вып. 8. С. 2428.
- [15] Освенский В.Б., Шифрин С.С., Мильвидский М.Г. // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1973. Т. 37. № 11. С. 2356.
- [16] Верезуб Н.А., Простомолотов А.И. // Изв. вузов. Материалы электрон. техники. 2000. № 3. С. 28.
- [17] Верезуб Н.А., Мильвидский М.Г., Паевилов И.В., Простомолотов А.И. // Изв. вузов. Материалы электрон. техники. 2001. № 2. С. 52.