

Термоупругие напряжения, действующие в системах скольжения при выращивании из расплава методом Степанова (EFG) ленточных кристаллов оксида галлия

© 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 30 апреля 2025 г.

В окончательной редакции 4 июня 2025 г.

Принято к публикации 4 июня 2025 г.

Исследовано влияние анизотропии свойств кристалла оксида галлия на величину и распределение касательных напряжений, действующих в системах скольжения. Приведен алгоритм расчета касательных напряжений для кристаллов моноклинной сингонии. Найдены эквивалентные системы скольжения. Проведено сравнение распределений касательных термоупругих напряжений в различных системах скольжения для тонких кристаллических пластин оксида галлия, выращиваемых из расплава методом Степанова. Обнаружена корреляция расчетных касательных напряжений в ленте с ориентацией $[010]$ (210) с экспериментальными данными по дислокационной структуре.

Ключевые слова: моноклинная сингония, матрица перехода, эквивалентные системы.

DOI: 10.61011/JTF.2025.12.61771.222-25

Введение

Кристаллы β -фазы оксида галлия (β -Ga₂O₃), интенсивно исследуются в последнее время и имеют хорошие перспективы для широкого применения в микроэлектронике и электронике больших мощностей. Оксид галлия превосходит полупроводники третьего поколения шириной запрещенной зоны и величиной электрического пробоя, сочетающимися с радиационной стойкостью, превосходной сцинтилляционной способностью и прозрачностью в УФ-видимой области [1]. К настоящему времени уже появилось коммерческое производство японской компанией Tamura corp. кристаллов β -Ga₂O₃, выращиваемых из расплава в форме лент, и подложек на их основе. Однако для получения высококачественных бездефектных кристаллов необходима не только разработка различных процессов выращивания, но и изучение дефектов структуры и причин их образования. Таких исследований для кристаллов β -Ga₂O₃ проведено крайне мало.

В ряде работ [2–6] исследовалась дефектная структура пластин, ориентированных параллельно плоскостям (010) и (201) , методами рентгеновской топографии, селективного травления и просвечивающей электронной микроскопии. Nakai et al. [2] первыми нашли в поперечном сечении пластин (010) два типа дефектов: b -винтовые дислокации, образующие субзерновые границы, параллельные плоскостям (201) , (010) , и полые нанотрубки, вытянутые вдоль $[010]$. Yamaguchi et al. [3] провели анализ кристаллической структуры β -Ga₂O₃ на основе известного принципа, что основные плоскости и направления скольжения коррелируют с плотноупакованными плоскостями и кратчайшими векторами

трансляции соответственно. Были определены четыре плоскости скольжения: $\{201\}$, $\{101\}$, $\{310\}$, $\{3\bar{1}0\}$ и направления кратчайших трансляций в них (таблица, пункты 1.1–4.3). Методом рентгеновской топографии с помощью критерия невидимости строго установлено существование дислокаций системы $\{201\}$, а для других продемонстрированы ряды дислокаций, которые могут им соответствовать. Ueda et al. [4] обнаружили методом просвечивающей электронной микроскопии ряды краевых дислокаций с вектором Бюргерса вдоль $\langle 010 \rangle$, соответствующие ямкам травления на поверхности параллельной (201) , полые нанопластины, перпендикулярные плоскости (010) , а также двойниковые пластины (100) . Yao et al. [5] в подложке с ориентацией (010) с помощью синхротронной рентгеновской дифракции (XRD) и рентгеновской топографии (XRT) также обнаружили дислокации, принадлежащие еще трем системам скольжения $\langle 010 \rangle \{001\}$, $\langle 201 \rangle \{102\}$ и $\langle 001 \rangle \{100\}$ (см. таблицу, пп. 5–7). В недавнем обзоре [6] была собрана информация по всем известным системам скольжения, но приведены только индексы одной из ряда кристаллографически эквивалентных систем.

Однако в описанных выше работах не рассмотрены причины и механизмы образования дефектов в процессе роста. Между тем исследования [7], проведенные при выращивании других кристаллов из расплава методом Степанова (EFG), показали, что одной из основных причин образования дефектов является пластическая деформация под действием термических напряжений в системах скольжения. Для кристаллов β -Ga₂O₃ цилиндрической и ленточной форм в работах [8,9] были рассчитаны термоупругие напряжения с учетом анизотро-

Возможные системы скольжения кристаллов β -Ga₂O₃

№	Плоскость скольжения	Направление скольжения	Эквивалентные системы
1.1	$\{\bar{2}01\}$	$\langle 010 \rangle$	$(\bar{2}01) [010], (\bar{2}01) [0\bar{1}0], (\bar{2}01) [010], (\bar{2}01) [0\bar{1}0]$
1.2	$\{\bar{2}01\}$	$\langle 112 \rangle$	$(\bar{2}01) [112], (\bar{2}01) [1\bar{1}2], (\bar{2}01) [\bar{1}12], (\bar{2}01) [\bar{1}\bar{1}2]$
2.1	$\{101\}$	$\langle 010 \rangle$	$(101) [010], (101) [0\bar{1}0], (\bar{1}01) [010], (\bar{1}01) [0\bar{1}0]$
2.2	$\{101\}$	$\langle 10\bar{1} \rangle$	$(101) [10\bar{1}], (\bar{1}01) [\bar{1}01]$
3.1	$\{\bar{3}10\}$	$\langle 001 \rangle$	$(\bar{3}10) [001], (\bar{3}10) [00\bar{1}], (\bar{3}10) [00\bar{1}], (\bar{3}10) [001]$
3.2	$\{\bar{3}10\}$	$\langle 1\bar{3}0 \rangle$	$(\bar{3}10) [1\bar{3}0], (\bar{3}10) [130], (\bar{3}10) [\bar{1}30], (\bar{3}10) [\bar{1}\bar{3}0]$
3.3	$\{\bar{3}10\}$	$\langle 1\bar{3}2 \rangle$	$(\bar{3}10) [1\bar{3}2], (\bar{3}10) [132], (\bar{3}10) [\bar{1}32], (\bar{3}10) [\bar{1}\bar{3}2]$
4.1	$\{\bar{3}10\}$	$\langle 001 \rangle$	$(310) [001], (310) [00\bar{1}], (\bar{3}10) [001], (\bar{3}10) [00\bar{1}]$
4.2	$\{\bar{3}10\}$	$\langle 130 \rangle$	$(310) [130], (\bar{3}10) [1\bar{3}0], (310) [\bar{1}30], (\bar{3}10) [\bar{1}\bar{3}0]$
4.3	$\{\bar{3}10\}$	$\langle 132 \rangle$	$(310) [132], (\bar{3}10) [1\bar{3}2], (310) [\bar{1}32], (\bar{3}10) [\bar{1}\bar{3}2]$
5	$\{001\}$	$\langle 010 \rangle$	$(001) [010], (001) [0\bar{1}0], (001) [010], (001) [0\bar{1}0]$
6	$\{10\bar{2}\}$	$\langle 201 \rangle$	$(10\bar{2}) [201], (\bar{1}02) [\bar{2}01]$
7	$\{100\}$	$\langle 001 \rangle$	$(100) [001], (\bar{1}00) [00\bar{1}]$

пии коэффициентов упругости и теплового расширения, но без учета систем скольжения.

В настоящей работе проведен расчет термоупругих касательных напряжений в системах скольжения кристаллов β -Ga₂O₃, выращиваемых в форме лент в направлении $[010]$, по предложенному алгоритму с учетом эквивалентных систем. Исследована их ориентационная зависимость во всех действующих системах скольжения при повороте нормали к плоскости ленты от исходного положения (100) на 360° вокруг направления выращивания $[010]$

1. Алгоритм расчета касательных напряжений в системах скольжения для ленточных кристаллов моноклинной сингонии

Пусть в кристаллографической системе координат выбрана система скольжения $\{n_1, n_2, n_3\} \langle l_1, l_2, l_3 \rangle$. Здесь n_1, n_2, n_3 — кристаллографические индексы плоскости скольжения, соответствующие индексам нормали к ней в обратной решетке, а l_1, l_2, l_3 — индексы направления скольжения, заданные в прямой решетке. Заметим, что для кристаллов моноклинной сингонии, к которой относится оксид галлия, кристаллографическая система координат не является декартовой. Обозначим вектор перпендикулярный плоскости скольжения $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)^T$, а вектор направления скольжения $\mathbf{l} = (l_1, l_2, l_3)^T$. Далее в кристаллофизической системе координат компоненты этих векторов обозначим как $\mathbf{N} = (N_1, N_2, N_3)^T$ и $\mathbf{L} = (L_1, L_2, L_3)^T$, соответственно, и выразим через

кристаллографические координаты согласно [10,11]:

$$\mathbf{N} = \frac{E \mathbf{n}}{H^*(n_1, n_2, n_3)}, \quad \mathbf{L} = \frac{(A)^T \mathbf{l}}{R(l_1, l_2, l_3)},$$

где E — матрица разложения ортов кристаллофизической системы координат по базисным векторам кристаллической решетки:

$$E = \begin{pmatrix} a^* & 0 & -c^* \cos \beta \\ 0 & b^* & 0 \\ 0 & 0 & c^* \sin \beta \end{pmatrix};$$

A — матрица разложения векторного базиса кристаллической решетки по ортам кристаллофизической системы координат:

$$A = \begin{pmatrix} a \sin \beta & 0 & a \cos \beta \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix};$$

H^* — длина вектора $\mathbf{n}$ в обратной решетке для кристаллов моноклинной сингонии:

$$H^*(n_1, n_2, n_3) = (n_1^2(a^*)^2 + n_2^2(b^*)^2 + n_3^2(c^*)^2 + 2n_1n_3a^*c^*\cos(\beta^*))^{0.5};$$

R — длина вектора $\mathbf{l}$ в прямой решетке:

$$R(l_1, l_2, l_3) = (l_1^2a^2 + l_2^2b^2 + l_3^2c^2 + 2l_1l_3ac \cos \beta)^{0.5},$$

A, E, H^*, R — определяются параметрами прямой и обратной решетки кристалла. Для моноклинного

β -Ga₂O₃ [12] — $a = 12.214 \text{ \AA}$; $b = 3.037 \text{ \AA}$; $c = 5.798 \text{ \AA}$; $\alpha = \gamma = \pi/2$; $\beta \sim 1.812 \text{ rad}$; $a^* = 0.084 \text{ \AA}^{-1}$; $b^* = 0.329 \text{ \AA}^{-1}$; $c^* = 0.178 \text{ \AA}^{-1}$; $\alpha^* = \gamma^* = \pi/2$; $\beta^* = \pi - \beta$.

Найдем матрицу C_0 , связывающую систему скольжения и кристаллофизическую систему координат. Эта матрица выражается через компоненты векторов $\mathbf{N} = (N_1, N_2, N_3)^T$ и $\mathbf{L} = (L_1, L_2, L_3)^T$ следующим образом:

$$C_0 = C_0(n_1, n_2, n_3, l_1, l_2, l_3) = \begin{pmatrix} N_1 & N_2 & N_3 \\ L_1 & L_2 & L_3 \\ N_2L_3 - N_3L_2 & N_3L_1 - N_1L_3 & N_1L_2 - N_2L_1 \end{pmatrix}.$$

Рассмотрим ленту β -Ga₂O₃, выращиваемую в кристаллографическом направлении [010]. Ориентацию ленты, при которой ось x_3 совпадает с направлением выращивания [010], а ось x_1 направлена перпендикулярно плоскости ленты и совпадает с направлением (100), считаем исходной кристаллофизической ориентацией пластины. Строим матрицу перехода из рабочей системы координат в кристаллофизическую систему. В качестве рабочей системы координат выбираем систему координат, полученную из исходной кристаллофизической системы поворотом вокруг оси x_1 на угол 90° против часовой стрелки с последующим поворотом вокруг новой оси x_3 (вокруг направления [010]) на угол ψ против часовой стрелки. Тогда матрица перехода от рабочей системы координат к исходной кристаллофизической системе примет вид

$$C_{0R} = \begin{pmatrix} \cos \psi & 0 & \sin \psi \\ \sin \psi & 0 & -\cos \psi \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}^{-1}.$$

Матрицу перехода от рабочей системы координат к системе координат, связанной со скольжением, можно записать в виде $C = C_0 C_{0R}$. Тогда касательные напряжения, действующие в выбранной системе скольжения, определяются следующей формулой:

$$\tau_{12} = C_{1\alpha} C_{2\beta} \sigma_{\alpha\beta}, \quad \alpha, \beta = 2, 3,$$

где $\sigma_{\alpha\beta}$ — тензор термоупругих напряжений, соответствующий плоскому напряженному состоянию. При повороте рабочей системы координат изменяются не только компоненты матрицы C_{0R} , но и компоненты тензора термоупругих напряжений $\sigma_{\alpha\beta}$, вследствие анизотропии тепловых и упругих свойств материала ленты.

2. Расчет касательных напряжений в системах скольжения для ленточных кристаллов оксида галлия

Находим касательные напряжения в тонкой кристаллической пластине β -Ga₂O₃ длиной l , прямоугольного

сечения $\Omega = [-b, b] \times [-h, h]$ ($2b$ — ширина ленты, $2h$ — ее толщина). Работаем в декартовой системе координат $(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_3)$. Размерные величины обозначаем чертой сверху. Ось $\bar{x}_1$ ортогональна плоскости ленты, 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: $\bar{x}_1 = hx_1$, $\bar{x}_2 = bx_2$, $\bar{x}_3 = lx_3$. Далее переходим к безразмерным коэффициентам теплопроводности, теплового расширения и упругой податливости с помощью нормировки на соответствующие инварианты. Для расчета термоупругих напряжений в ленте используем приближенные формулы для компонент $\bar{\sigma}_{33}$, $\bar{\sigma}_{23}$, $\bar{\sigma}_{22}$ тензора термоупругих напряжений, описывающие плоское напряженное состояние в тонкой анизотропной пластине. Эти формулы были получены в [13] методом асимптотического интегрирования уравнений термоупругости в предположении малости параметров $\delta = h/b$, $\varepsilon = b/l$ и слабого теплообмена на гранях $x_1 = \pm 1$. Рассмотрен случай выращивания методом Степанова (EFG) прямоугольной пластины длиной 0.1, шириной 0.02 и толщиной 0.002 м. Направление роста [010], нормаль к плоскости [100]. Для исследования влияния анизотропии свойств оксида галлия на величину и распределение касательных напряжений в системах скольжения был рассмотрен поворот пластины вокруг оси роста на угол ψ против часовой стрелки. Термоупругие напряжения были взяты в точке с координатами $(x_2 = 0.5, x_3)$, находящейся в средней части ленты по длине.

3. Результаты расчетов

Были найдены все эквивалентные системы скольжения для основных систем, приведенных в таблице. При этом учитывалось, что данный кристалл относится к классу симметрии $2/m$ моноклинной сингонии и содержит 2 элемента симметрии: ось симметрии второго порядка и перпендикулярную ей плоскость симметрии m , а воздействие каждого элемента симметрии на произвольное кристаллографическое направление описывается своей матрицей поворота.

Результаты расчетов касательных напряжений для различных систем скольжения при повороте пластины на угол ψ вокруг направления выращивания [010] приведены на рис. 1–3. На рис. 1, а показана схема кристаллической решетки кристалла β -Ga₂O₃ с ориентацией направления выращивания [010]. Плоскость ленты на схеме совпадает с плоскостью скольжения (210). На схеме показаны другие возможные плоскости скольжения: (101), (310), (100) и (001). На рис. 1, б построена зависимость касательных напряжений в системе 1.1 (нумерация систем приведена в таблице) от угла поворота ψ вокруг направления [010] в полярных координатах для четырех эквивалентных систем. Расчеты показали, что две из четырех систем попарно совпадают и имеют разный знак при изменении угла поворота ψ . Макси-

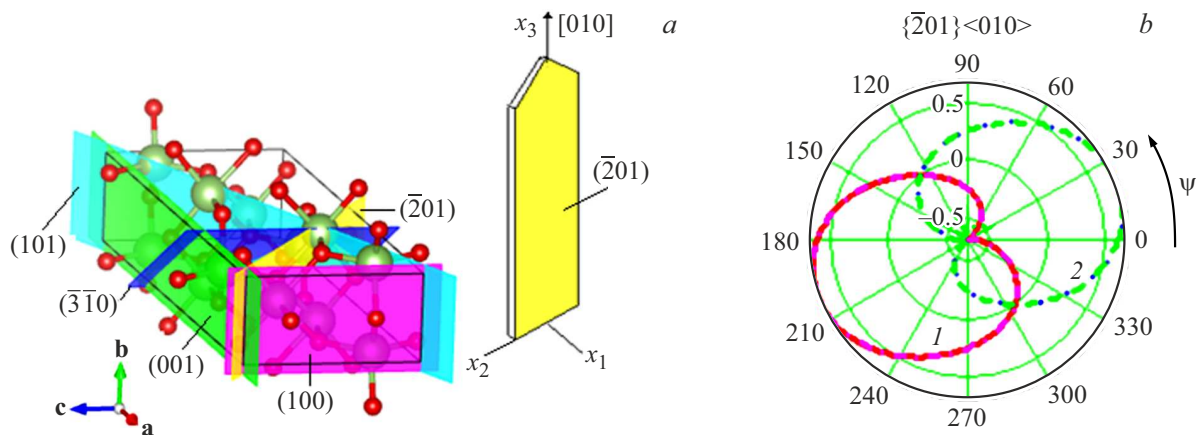


Рис. 1. *a* — схема ленты и кристаллической ячейки кристалла β -Ga₂O₃ с ориентацией направления выращивания [010]. Плоскость ленты совпадает с плоскостью скольжения $(\bar{2}01)$. На схеме показаны также другие возможные плоскости скольжения: (101), $(\bar{3}10)$, (100) и (001); *b* — зависимость касательных напряжений в системе $\{201\} \langle 010 \rangle$ от угла поворота ψ вокруг направления [010] в полярных координатах для четырех эквивалентных систем: 1 — системы скольжения (201) [010] и $(\bar{2}01) [\bar{0}\bar{1}0]$, 2 — (201) [010] и $(\bar{2}01) [\bar{0}\bar{1}0]$.

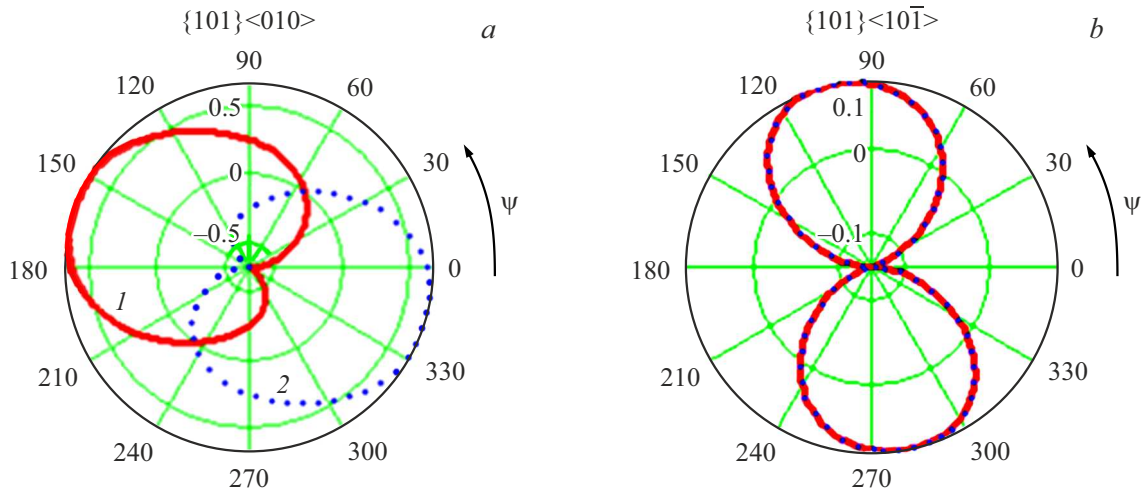


Рис. 2. Зависимость касательных напряжений от угла поворота ψ вокруг направления [010] в полярных координатах в системах: *a* — $\{101\} \langle 010 \rangle$ (1 — система скольжения (101) [010], 2 — (101) [010]); *b* — $\{101\} \langle 101 \rangle$.

мальные значения касательных напряжений (до 0.7 МПа) в этой системе достигаются тогда, когда плоскость ленты совпадает с кристаллографической плоскостью $(\bar{2}01)$, т. е. с рассматриваемой плоскостью скольжения. Расчеты в системе 1.2 также демонстрируют сильную ориентационную зависимость, но уровень касательных напряжений ниже (до 0.26 МПа).

Зависимость касательных напряжений от угла поворота ψ в системах 2.1 и 2.2 показана на рис. 2. Эти системы отличаются разным количеством эквивалентных систем скольжения (в первой их четыре, во второй — две), кроме того, во второй системе напряжения в семь раз меньше. Видно, что в одной плоскости скольжения характер угловой зависимости и величины касательных напряжений зависят от направления скольжения.

Системы 3 и 4 оказались идентичны. Плоскости $\{310\}$ и $\{3\bar{1}0\}$ отличаются от других тем, что наклонены

относительно направления вытягивания. Несмотря на это полярные графики и максимальные значения напряжений для системы 3.1 (до 0.7 МПа при повороте на 15°) оказались похожи на графики и значения напряжений в системе 1.1 (рис. 3, *a*). В системах 3.2 и 3.3 уровень касательных напряжений значительно ниже (до 0.1 МПа). Из последних трех систем можно выделить систему 5, которая дает максимальный уровень касательных напряжений (до 0.74 МПа) при совпадении плоскости ленты с кристаллографической плоскостью (001) (рис. 3, *b*). В системах 6 и 7 касательные напряжения малы (0.1 МПа).

Сопоставление результатов расчетов с экспериментальными данными по распределению дефектов в кристаллах требует отдельного рассмотрения. Однако предварительно можно сказать, что рассчитанные напряжения в системах 1.1 и 5 могут приводить к образованию

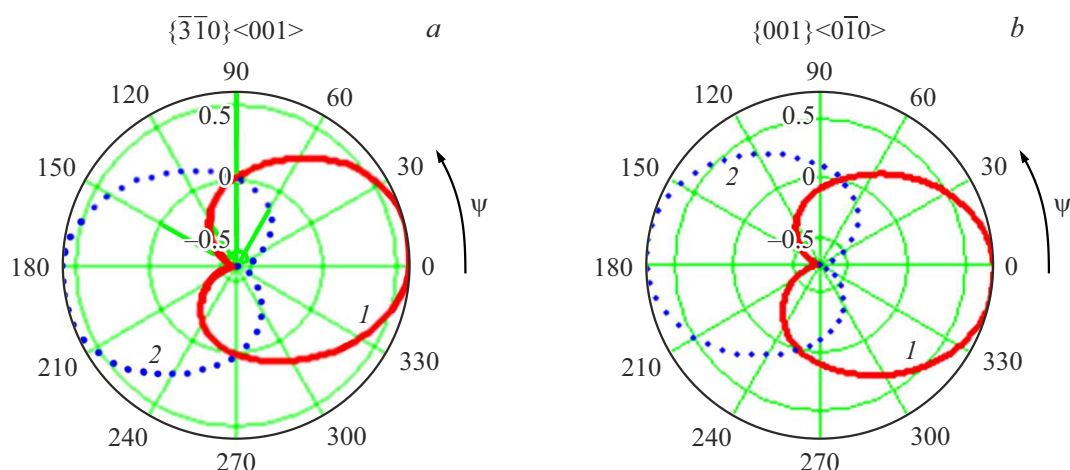


Рис. 3. Зависимость касательных напряжений от угла поворота ψ вокруг направления $[010]$ в полярных координатах в системах: a — $\{310\} \langle 001 \rangle$ (1 — система скольжения: $(\bar{3}10) [001]$, 2 — $(\bar{3}10) [001]$); b — $\{001\} \langle 010 \rangle$ (1 — $(001) [010]$, 2 — $(001) [010]$).

винтовых дислокаций, обнаруженных в лентах оксида галлия в работе [2].

Заключение

Разработан алгоритм расчета касательных напряжений в системах скольжения для ленточных кристаллов моноклинной сингонии. Изучена зависимость этих напряжений от поворота кристаллографической плоскости ленты вокруг оси выращивания $[010]$ для кристаллов оксида галлия. Проведенные расчеты показывают, что величина и ориентация касательных напряжений в действующих системах скольжения зависят от исходных компонент тензора термоупругих напряжений и от кристаллографической структуры кристалла. В случае, когда в тензоре одна компонента σ_{33} , она проектируется только на плоскости $\{310\}$ и $\{\bar{3}10\}$, а при учете трех компонент тензора напряжений работают все системы скольжения. Максимальная величина касательных напряжений наблюдается при совпадении плоскости ленты с плоскостью скольжения.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] Z. Chi, J. Asher, M.R. Jennings, E. Chikoidze, A. Pérez-Tomás. *Materials*, **15** (3), 1164 (2022). DOI: 10.3390/ma15031164
- [2] K. Nakai, T. Nagai, K. Noami, T. Futagi. *Jpn. J. Appl. Phys.*, **54** (5), 051103 (2015). DOI: 10.7567/JJAP.54.051103
- [3] H. Yamaguchi, A. Kuramata, T. Masui. *Superlattices and Microstructures*, **99**, 99 (2016). DOI: 10.1016/j.spmi.2016.04.030
- [4] O. Ueda, N. Ikenaga, K. Koshi, K. Iizuka, A. Kuramata, K. Hanada, T. Moribayashi, S. Yamakoshi, M. Kasu. *Jpn. J. Appl. Phys.*, **55** (12), 1202BD (2016). DOI: 10.7567/JJAP.55.1202BD
- [5] Y. Yao, Y. Ishikawa, Y. Sugawara. *Jpn. J. Appl. Phys.*, **59** (12), 125501 (2020). DOI: 10.35848/1347-4065/abc1aa
- [6] Y. Wang, M. Zhu, Y. Liu. *China Foundry, Special Rev.*, **21**, 491 (2024). DOI: 10.1007/s41230-024-4131-5
- [7] С.И. Бахолдин, Е.В. Галактионов, В.М. Крымов. *Изв. АН, сер. физ.*, **63** (9), 1816 (1999).
- [8] С.И. Бахолдин, Е.В. Галактионов, В.М. Крымов. *ЖТФ*, **93** (12), 1708 (2023). DOI: 10.61011/JTF.2023.12.56800.f249-23 [S.I. Bakholdin, E.V. Galaktionov, V.M. Krymov. *Tech. Phys.*, **68** (12), 1584 (2023).]
- [9] В.М. Крымов, Е.В. Галактионов, С.И. Бахолдин. *ЖТФ*, **94** (12), 1955 (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).]
- [10] Ю.И. Сиротин, М.П. Шаскольская. *Основы кристаллофизики* (Наука, М., 1979), с. 134.
- [11] Б.К. Вайнштейн. *Современная кристаллография* (Наука, М., 1979), т. 1, с. 221.
- [12] W. Müller, K. Böttcher, Z. Galazka, J. Schreuer. *Crystals*, **7** (1), 26 (2017). DOI: 10.3390/cryst7010026
- [13] И.Е. Зино, Э.А. Тропп. *Асимптотические методы в задачах теории теплопроводности и термоупругости* (Изд-во ЛГУ, Л., 1978)