ПРИМЕНЕНИЕ МОДЕЛИ АЛЕКСАНДЕРА – ХААЗЕНА ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ ПРОЦЕССА РАЗВИТИЯ ДИСЛОКАЦИЙ В МОНОКРИСТАЛЛЕ

П.С. Аронов, А.О. Гусев

ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, г. Москва

aronovps@mail.ru, aogus@mail.ru

Одним из наиболее распространенных способов получения монокристаллов, использующихся в приборостроении, является их направленная кристаллизация из расплавов. Однако температурные градиенты, возникающие при выращивании монокристаллов из высокотемпературных расплавов, приводят к формированию неоднородного распределения температурных напряжений, которые, в свою очередь, являются одной из главных причин образования дислокаций. Наличие дислокаций существенно влияет на механические и электрофизические свойства полупроводников, поэтому плотность дислокаций и их распределение в кристалле являются одними из самых важных характеристик качества получаемых материалов.

В работе изучено возникновение и развитие температурных напряжений и дислокаций в двухкомпонентном монокристалле A_xB_{1-x}, выращенном методом вертикальной направленной кристаллизации (методом Бриджмена).

На первом этапе решена осесимметричная задача кристаллизации двухкомпонентного расплава, в основе математической модели которой лежат уравнения Навье – Стокса, уравнения тепломассопереноса в твердой и жидкой фазах и условия термодинамического равновесия на границе раздела фаз [1]. На втором этапе температурные поля, полученные при решении задачи кристаллизации, использованы для моделирования термомеханического состояния монокристалла и распределения плотности дислокаций с помощью решения термоупругопластической задачи механики деформируемого твердого тела в квазистатическом приближении [2].

Для моделирования процесса развития дислокаций применена модель Александера – Хаазена, являющаяся одной из основных моделей макроуровня, описывающих развитие дислокаций в кристаллах. Это локальная модель, которая описывает размножение дислокаций, но не их генерацию, при этом скорость размножения не зависит от значений плотности соседних дислокаций. Изначально кристалл должен иметь небольшую ненулевую плотность дислокаций, которая будет увеличиваться с разной скоростью, в зависимости от уровня напряжений и температуры. Модель Александера – Хаазена включает в себя уравнение для изменения плотности дислокаций во времени, соотношение Орована и соотношение для функции скорости движения дислокаций [3].

Для дискретизации задачи механики деформируемого твердого тела применен метод конечных элементов, использованы четырехугольные конечные элементы второго порядка [2].

На рисунке 1 представлены двумерные распределения интенсивностей напряжений и десятичных логарифмов плотности дислокаций в момент времени 480 ч.

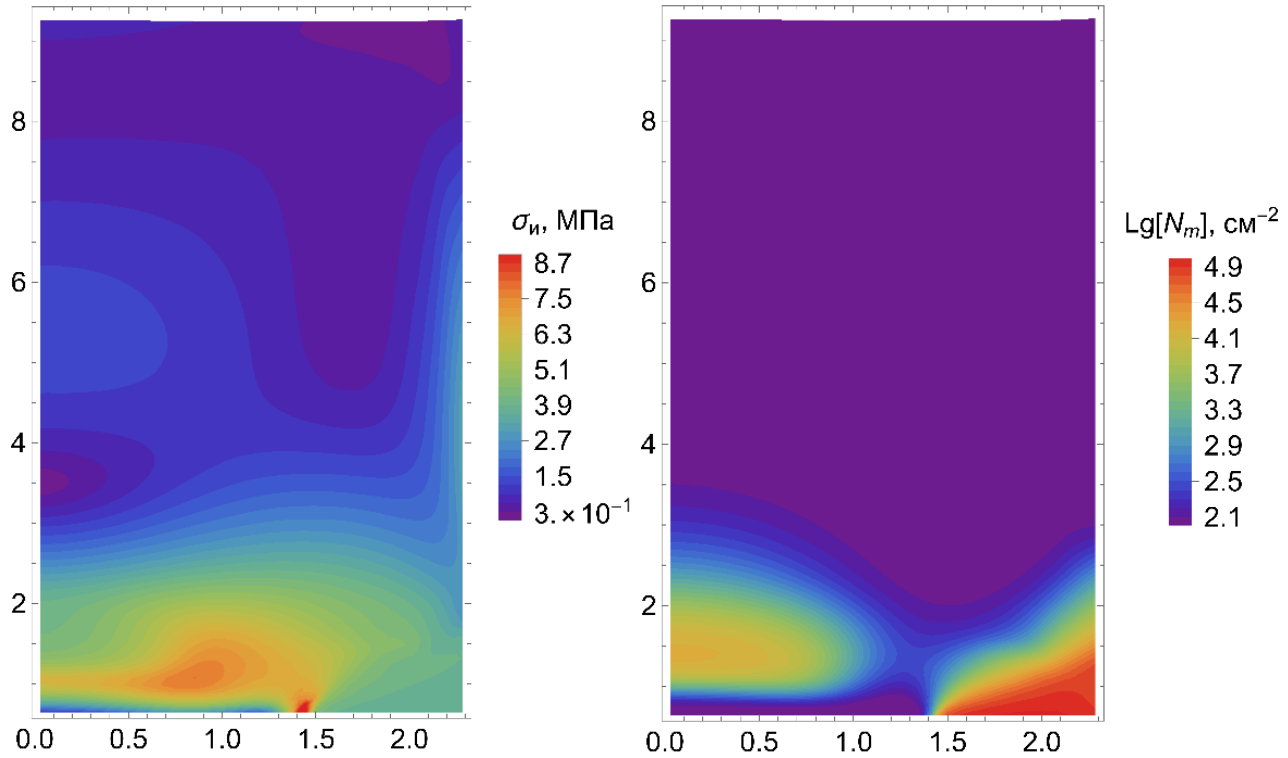

Рис. 1. Двумерные распределения на момент времени 480 ч: интенсивности напряжений (слева), плотности дислокаций (справа).

Приведенные результаты демонстрируют, что максимальные значения плотности дислокаций (около $4{,}5 \cdot 10^5$ см$^{-2}$) достигаются в нижней области около боковой поверхности кристалла, там же, где сосредоточены наибольшие значения температурных градиентов, и следовательно, возникающие термические напряжения (см. [2]). При этом рост пластических деформаций (максимальные значения около $2{,}5 \cdot 10^{-3}$) и плотности дислокаций приводит к уменьшению уровня напряжений в нижней части кристалла с течением времени и смещению зоны максимальных напряжений (около 12 МПа) в направлении оси кристалла.

Список литературы:

1. Gusev A.O., Shcheritsa O.V., Mazhorova O.S. Conservative finite volume strategy for investigation of solution crystal growth techniques // Computers & fluids. 2020. Vol. 202. No. 104501.
2. Аронов П.С., Гусев А.О., Родин А.С. Моделирование напряженно-деформированного состояния монокристалла, выращенного методом Бриджмена // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2023. № 8. 26 с.
3. Аронов П.С., Галанин М.П., Гусев А.О., Родин А.С. Анализ развития дислокаций в монокристалле с помощью модели Александера – Хаазена // Необратимые процессы в природе и технике: XIII Всероссийская конференция (Москва, 28–30 января 2025 года): сборник статей. Т. 2. С. 7–10.