

УДК 621.315.592

МОДЕЛИРОВАНИЕ УСЛОВИЙ ТЕПЛОПЕРЕНОСА И ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ОБРАЗОВАНИЯ ДИСЛОКАЦИЙ ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ МОНОКРИСТАЛЛОВ АРСЕНИДА ГАЛЛИЯ ДИАМЕТРОМ 100 мм

А. П. Оксанич, М. С. Андросюк

Кременчугский национальный университет имени Михаила Остроградского
ул. Первомайская, 20, г. Кременчуг, 39600, Украина. E-mail: oksanich@kdu.edu.ua

Установлена причина возникновения дислокаций вследствие возрастания упругой деформации, возникшей из-за термических напряжений. Промоделирована закономерность распределения дислокаций в монокристаллах GaAs, выращенных по методу Чохральского. Разработана методика расчета и экспериментальной проверки распределения плотности дислокаций в плоскости пластины GaAs, предложена схема для контроля плотности дислокаций и оценки характера распределения дислокаций в плоскости пластины GaAs (100) вдоль кристаллографических направлений. Определены максимальные значения плотности дислокаций, достигающие $N_d \geq 10^7 \text{ см}^{-2}$, при диаметре пластины GaAs 100 мм. Показано, что распределение структурных нарушений носит четырехкратную симметрию в плоскости пластины (100) GaAs и имеет островковый характер.

Ключевые слова: монокристаллический арсенид галлия, структурные нарушения, температурный градиент, пластическая деформация.

МОДЕЛЮВАННЯ УМОВ ТЕПЛОПЕРЕНОСУ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ ПРОЦЕСІВ УТВОРЕННЯ ДИСЛОКАЦІЙ ПІД ЧАС ВИРОЩОВАННЯ МОНОКРИСТАЛЛІВ АРСЕНІДУ ГАЛІЮ ДІАМЕТРОМ 100 мм

А. П. Оксанич, М. С. Андросюк

Кременчуцький національний університет імені Михайла Остроградського
вул. Першотравнева, 20, м. Кременчук, 39600, Україна. E-mail: oksanich@kdu.edu.ua

Встановлено причину виникнення дислокацій внаслідок зростання пружної деформації, яка виникла через термічні напруги. Промодельована закономірність розподілу дислокацій в монокристалах GaAs, вирощених за методом Чохральського. Розроблено методику розрахунку та експериментальної перевірки розподілення щільності дислокацій в площині пластины GaAs, запропонована схема для контролю щільності дислокацій та оцінки характеру розподілу дислокацій в площині пластины GaAs (100) уздовж кристалографічних напрямків. Визначено максимальні значення щільності дислокацій, що досягають $N_d \geq 10^7 \text{ см}^{-2}$, при діаметрі пластины GaAs 100 мм. Показано, що розподіл структурних порушень носить чотирикратну симетрію в площині пластины (100) GaAs і має островковий характер.

Ключові слова: монокристалічний арсенід галію, структурні порушення, температурний градієнт, пластична деформація.

АКТУАЛЬНОСТЬ РАБОТЫ. За последние несколько лет резко возрос спрос на разнообразные устройства на GaAs подложках. В GaAs основное внимание сместилось со светодиодов, лазеров, малошумящих дискретных полевых транзисторов к интегральным схемам. Целенаправленные исследования по всему миру в этой области привели к созданию быстродействующих аналоговых и цифровых интегрированных схем со степенью интеграции порядка 3000 транзисторов. С другой стороны, GaAs стал материалом подложки при изготовлении как лавинных фотодиодов, так и р-і-п датчиков с рабочей длиной волны от 1,1 до 1,7 мкм. Этот диапазон считается идеальным для оптических связей вследствие малых потерь и минимальной дисперсии оптоволокна, изготовленного из GaAs.

Многие успехи полупроводниковой техники и технологий основываются не только на идеальности кристаллов на макроуровне, но также и контроле таких неоднородностей, как точечные и линейные дефекты на микроуровне. Монокристаллы GaAs диаметром до 100 мм могут быть выращены по методу Чохральского или Бриджмэна. При этом при выращивании в лодочке форма материала соответствует сосуду, а диаметр нужно регулировать при вытягивании по методу Чохральского.

Обычно высокочувствительные тензодатчики реагируют на разницу в весе в зависимости от волнообразных воздействий на поперечное сечение, и затем уровень мощности корректируется. Не так давно был проведен детальный анализ сигнала увеличения веса, с учетом влияния герметизатора B_2O_3 и мениска [1]. Для оптоэлектронных устройств слитки GaAs n-типа можно получить путем введения Si соответственно в кристаллическую решетку. С другой стороны, GaAs транзисторные структуры в данном рассмотрении при прямом введении ионов требуют полуизолирующей подложки. Этого можно достичь путем баланса между глубокими и мелкими донорами и акцепторами, полученными из «родных» дефектов, и дефектами замещения вследствие легирования. Длительное время сохранение полуизолирующих свойств подложки представляло собой постоянную проблему. В частности, введение глубокого акцептора Cr [2] или фонового загрязнителя Mn меняло поверхностную зону на n или p-тип соответственно, вследствие аномальной обратной диффузии. Предпосылкой активного развития использования метода Чохральского стал прямой локальный синтез, который смог разрешить эту проблему [3].

Таким образом, основная проблема, тормозя-

щая промышленное выращивание кристаллов GaAs, заключается в избавлении от линейных дефектов (дислокаций) или, как минимум, снижении их количества. Возникновение дислокаций вызвало постоянные сложности в приборах на неосновных носителях, таких, как лазеры и светодиоды. Так, было установлено, что воздействие механической нагрузки, сопровождающееся генерацией дислокаций, увеличивает скорость деградации электролюминесцентных диодов при прямом смещении [4, 5]. Даже при отсутствии внешних воздействий происходит снижение внешней эффективности GaAs светодиодов, легированных Si, с ростом плотности дислокаций [6]. Исходная плотность дислокаций в подложке воспроизводится в эпитаксиальном слое, где дислокации выступают в роли безизлучательных рекомбинационных центров.

На коротких длинах волн у GaAs лазеров высокая плотность точечных дефектов образуется за счет рекомбинации пар, что приводит к ростовым дислокациям и выбиванию контуров (петель дислокаций). Такой процесс приводит к дефектам в виде темных линий – основной причине отказов в работе лазера. Возможно это следствие разницы в ширине запрещенной зоны у GaAs, большее значение в последнем случае препятствует росту дислокаций под действием возбуждения от рекомбинаций. Тем не менее, изучение плотности ямок травления с помощью тока, индуцированного электронным лучом, показывает наличие микроплазм, которые с большой вероятностью можно соотносить с дислокациями [7].

Принято считать, что в устройствах на основных носителях, таких как GaAs-транзисторы, не возникают дислокации в процессе протекания электрического тока. Данное мнение укрепилось в результате накопленного опыта изучения цифровых микроволновых структур, в которых до сих пор не было замечено влияние внешних воздействий на появление дефектов. Тем не менее, недавние успехи в производстве больших матриц полевых транзисторов на нелегированных полуизолирующих GaAs подложках методом прямой ионной имплантации позволили пересмотреть воздействие дислокаций на основные электрические параметры.

Компьютерные измерения тока сток-исток вокруг срезов {100} выявили сильную корреляцию с типовым четырехкратным распределением дислокаций [8]. Неоднородность порогового напряжения, имитирующего характер дислокаций, может негативно сказаться на работе ИС. Последние эксперименты позволили связать расстояние между ямками травления дислокаций и каналом сток-исток полевого транзистора с пороговым напряжением. С удаленностью полевого транзистора от ближайшей дислокации до 20–25 мкм пороговое напряжение меняется скачком от –1 до +3 В, с существенным среднеквадратичным отклонением. Если эффект так явно выражен, как заявляют, тогда предварительные статистические данные позволяют предположить, что сверхбыстродействующие интегральные схемы на основе GaAs-ИС невозможно реализовать на подложках

с плотностью дислокаций, превышающей 100–200 см⁻². Следовательно, снижение уровня дислокаций в кристаллах GaAs является первоочередной и актуальной задачей при выращивании кристаллов.

Цель работы – промоделировать закономерность распределения дислокаций в монокристаллах GaAs, выращенных по методу Чохральского, разработать методику расчета и экспериментальной проверки распределения плотности дислокаций в плоскости пластины GaAs, определить схему для контроля плотности дислокаций и оценки характера распределения дислокаций в плоскости пластины GaAs (100) вдоль кристаллографических направлений.

МАТЕРИАЛ И РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЙ. Первоначальное доказательство, указывающее на излишние термические напряжения как источник роста дислокаций в A_{III}B_V соединениях, выращенных по методу LEC, было получено в работе [9]. Было установлено, что плотность дислокаций в GaAs возрастает к периферии монокристалла, сопровождаемое линиями скольжения. Первые сообщения относительно происхождения дислокаций в GaAs были противоречивыми. В работе [9] предположили, что высокий уровень плотности дислокаций вблизи поверхности монокристалла вызван тепловыми напряжениями, связанными с большими радиальными температурными градиентами [10]. После определения линий скольжения путем травления и рентгеновской топографии, был сделан вывод, что дислокации были вызваны возрастанием упругой деформации, возникшей из-за термических напряжений [11].

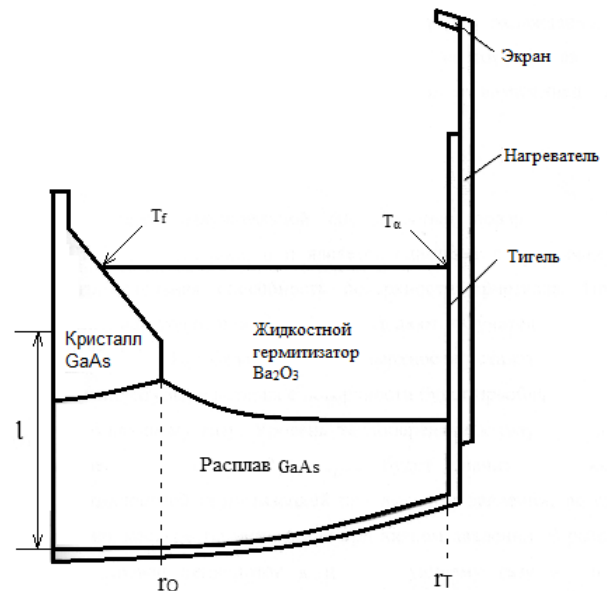


Рисунок 1 – Тепловой узел установки выращивания слитков GaAs по методу Чохральского с LEC технологией

Мы промоделировали закономерность распределения дислокаций в GaAs монокристаллах, выращенных по методу LEC, на базе аналитически установленного квазистационарного состояния тепло-массопереноса [12]. В качестве первого шага мы определили форму температурного профиля в рас-

тушем монокристалле. Были сделаны следующие предположения: цилиндрический кристалл с длиной l и радиусом r_0 выращивается за время t путем нисходящего движения тигля и плоской изотермы T_f точки плавления со скоростью p ; на вершине и боковых поверхностях монокристалла тепловой поток пропорционален температурной разнице между поверхностью и окружающей жидкостью, поддерживаемой при постоянной температуре T_a ; охлаждение осуществляется посредством естественной конвекции и радиации.

В цилиндрических координатах теплопроводность описывается уравнениями в частных производных

$$\frac{\partial T}{\partial t} = K \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right), \quad (1)$$

где K – это коэффициент теплопроводности, а z – ось роста.

Для удобства вычислений уравнения (1) может быть преобразовано в систему координат, привязанную к движущейся поверхности раздела твердой и жидкой фаз. В дальнейшем, с учетом постулата Розенталя [13] для движущихся тепловых источников, получаем дифференциальное уравнение с частными производными

$$\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial s^2} = \frac{P}{K} \frac{\partial T}{\partial s}, \quad (2)$$

где $s = z + pt$.

Уравнение (2) может быть решено методом разделения переменных, а после определяются некоторые безразмерные группы, и вводится экспоненциальный множитель, предложенный Смолуховским для обработки поля повышенной диффузии [14]. Затем находим температуру

$$T = T_a + e^{ps/2r_0} \sum_{n=1}^{\infty} J_0 \left(\frac{r}{r_0} \alpha_n \right) \times \left[A_n \sinh \frac{\beta_n}{r_0} (pt - s) + B_n \cosh \frac{\beta_n}{r_0} (pt - s) \right], \quad (3)$$

где J_0 – функция Бесселя 1-го рода и нулевого порядка, а

$$\beta_n = \alpha_n^2 + \left(\frac{pr_0}{2K} \right)^2$$

Собственное значение α_n и постоянная A_n и B_n выводятся из граничных условий, соответствующих перечисленным предположениям. Соответственно,

$$\frac{\partial T}{\partial r} + h(T - T_a)/r = r_0 = 0,$$

(конвекция от цилиндрической поверхности)

$$\frac{\partial T}{\partial s} + h(T - T_a)/s = pt = 0,$$

(конвекция от вершины)

$T = T_s$ и $S = 0$ (поверхность раздела твердой и жидкой фаз), где h – коэффициент конвективной теплопередачи.

Расширение температуры на границе в функции Бесселя дает распределение температуры в форме монокристалла.

$$T_a = 2r_0 h (T_f - T_a) e^{ps/2r_0} \sum_{n=1}^{\infty} J_0 \left(\frac{r}{r_0} \alpha_n \right) \phi_n(s), \quad (4)$$

$$\phi_n(s) = \frac{1}{J_0(\alpha_n) [(r_0 h)^2 + \alpha_n^2]} \times \frac{1}{[r_0(h + p/2k \sinh \beta_n(pt - s)/r + \beta_n \cosh \beta_n(pt - s)/r_0)]} \times \frac{1}{[r_0(h + p/2k) \sinh \beta_n pt/r_0 + \beta_n \cosh \beta_n pt/r_0]^{-1}}$$

n уравнения характеристик,

$$r_0 h J_0(\alpha_n) J_1(\alpha_n) = 0,$$

где J_l – функция Бесселя 1-го рода 1-го порядка определяет собственные значения α_n .

Подставляя правдоподобные параметрические значения в уравнение (4), можно получить температурный профиль растущего монокристалла как функцию радиального расстояния и осевого положения. Альтернативное представление поля температуры осуществляется с помощью изотермических линий. На рис. 2 мы представили изотермы для монокристаллов GaAs диаметром 100 мм и длиной 100 мм, растущих в низко- и высокотемпературной среде. В целом, скученные изотермы приводят к острому температурному градиенту между осью и периферией кристалла при заданной высоте, которая непосредственно соответствует термическим напряжениям.

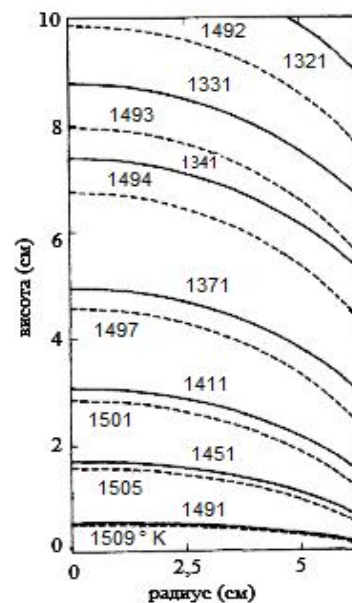


Рисунок 2 – Изотермы для монокристаллов GaAs диаметром 100 мм и длиной 100 мм

Классическая теория термоупругости предусматривает радиальный, тангенциальный и осевой компоненты напряжений в длинном изотропном цилиндре с осесимметричным распределением температур. В случае плоской деформации, где возможно точное решение, можно предположить, что оси остаются фиксированными, смещение исключительно радиальное, а боковая поверхность – без натяжения. Отсутствие натяжения на вершине и внизу достигается посредством принципа Сент-Венана. Соответствующая группа уравнений (4) приводит к следующим уравнениям напряжения [12]:

$$\sigma_r = 2r_0 h e^{ps/2k} \frac{\alpha E}{1-\nu} (T_f - T_\alpha) \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{J_1(\alpha_n)}{\alpha_n} - \frac{J((r/r_0)\alpha_n)}{(r/r_0)\alpha_n} \right) \phi_n(s), \quad (5a)$$

$$\sigma_\theta = 2r_0 h e^{ps/2k} \frac{\alpha E}{1-\nu} (T_f - T_\alpha) \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{J_1(\alpha_n)}{\alpha_n} - \frac{J((r/r_0)\alpha_n)}{(r/r_0)\alpha_n} - J_0\left(\frac{r}{r_0}\alpha_n\right) \right) \phi_n(s), \quad (5b)$$

$$\sigma_z = 2r_0 h e^{ps/2k} \frac{\alpha E}{1-\nu} (T_f - T_\alpha) \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{2J_1(\alpha_n)}{\alpha_n} - J_0\left(\frac{r}{r_0}\alpha_n\right) \right) \phi_n(s), \quad (5c)$$

где α , E и ν – коэффициент линейного температурного расширения, модуль Юнга и коэффициент Пуассона соответственно.

Скольжение в GaAs активируется в системе $\{111\}$, $\langle 110 \rangle$. Оно представляет собой 12 допустимых операций скольжения. В соответствии с законом Шмида, скольжение происходит, когда устранены напряжения сдвига (τ) в специфической плоскости скольжения, а направление скольжения превышает предельно разрешенное напряжение сдвига ($\tau_{кр}$), внутреннее свойство материала. Чтобы рассчитать $\tau_{кр}$ для каждой из 12 систем скольжения, сначала необходимо определить компоненты напряжения, действующие на xy , xz и yz прямоугольных координатных плоскостях от σ_r , σ_θ и σ_z температурных напряжений, испытываемых растущим монокристаллом. Затем ориентация вытягивания идентифицируется с осью z и τ , действующим на обычной плоскости скольжения в заданном направлении, это происходит по стандартной технике тензорной трансформации.

Следуя Пеннингу, можно утверждать, что температурное напряжение преимущественно упруго; однако, небольшая постоянная часть высвобождается путем пластической деформации. Следовательно, плотность дислокации, соответствующая одной из 12 систем скольжения, является пропорциональной количеству скольжения и деформации скольжения. Общая плотность дислокации также пропорциональна общей деформации скольжения, которая

пропорциональна общему избыточному напряжению сдвига, τ , определяемому как

$$\tau = 4\sigma_1^e + 2(\sigma_2^e + \sigma_3^e + \sigma_4^e + \sigma_5^e). \quad (6)$$

Исходя из этого плотность τ , пропорциональной плотности дислокации как функцию r , s , θ для (001) и (111) направлений вытягивания. Однако, чтобы достичь непосредственного сравнения с экспериментально полученными моделями дислокаций, следует отдать предпочтение проявлению контурных линий плотности дислокации, а не пластине. Следовательно, должно быть разработано численное отображение расчета в форме

$$r = f(s, \theta, t, T).$$

При постоянных осевой локации и времени устанавливается θ , и затем рассчитывается τ по сравнению с r , которая может быть преобразована как r по сравнению с τ посредством многочленной подгонки. Добавочные изменения в θ позволяют генерировать семейство кривых, касающихся r и τ .

На рис. 4 показана рассчитанная модель дислокации, использующая «серую шкалу» изображения в половину роста пластины GaAs при допустимой окружающей температуре 200K ниже точки плавления ($T_f - T_a = 200$ K). На макрофотографии (рис. 3) показана структура дислокаций, выявленная путем травления в расплавленном КОН, из пластины (100), отрезанной от легированного Сг монокристалла. Распределение нечувствительно к примесям и типично для вершины монокристалла и около нее. Подъем дислокации приводит к более рассеянному расположению далее от сердцевин.

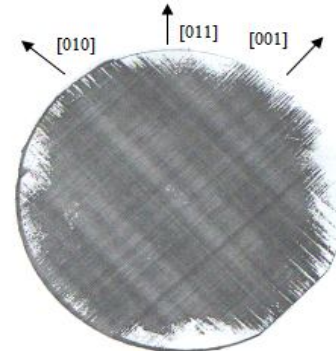


Рисунок 3 – Распределения дислокаций и линий скольжения в пластине полужолирующего GaAs диаметром 100 мм в направлении (100)

На макрофотографии показана структура линий скольжения, выявленная путём травления в расплавленном КОН пластины GaAs (100), отрезанной от слитка GaAs, легированного хромом. Увеличение плотности дислокаций мы видим к краю пластины. Хорошее соответствие между предполагаемыми и наблюдаемыми закономерностями поддерживает гипотезу, что излишний температурный градиент является главной причиной увеличения плотности дислокаций в слитках GaAs диаметром 100 мм.

Важными особенностями распределения дислокаций в $\langle 100 \rangle$ монокристаллах GaAs является:

а) четырёхкратная симметрия; б) максимум плотности дислокаций в направлении $[001]$ края пластины GaAs; в) минимум плотности в кольцевом пространстве вокруг центра пластины в направлении $[001]$.

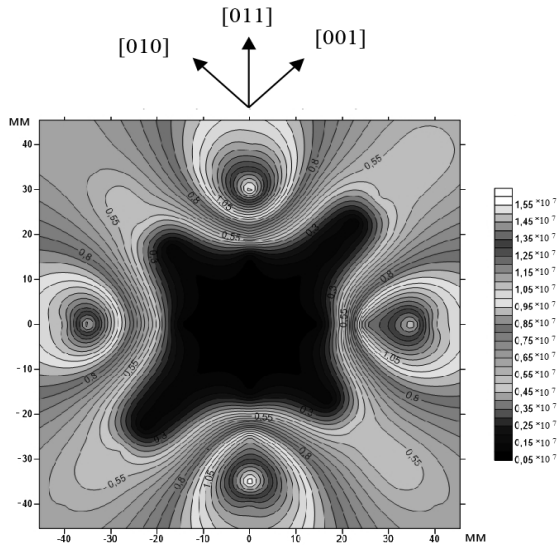


Рисунок 4 – Топограмма рассчитанных областей плотности дислокаций в направлении (100)

На рис. 4 показана топограмма рассчитанных областей плотности дислокаций в пластине GaAs (100) . Расчёт проводился по предложенной методике с помощью программы [13].

В качестве образцов для измерений использовались пластины арсенида галлия с ориентацией (100) , легированные хромом, с концентрацией примесей $5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$, удельным сопротивлением $10^7 \text{ Ом} \cdot \text{см}$, диаметром 92 мм, толщиной 1,2 мм.

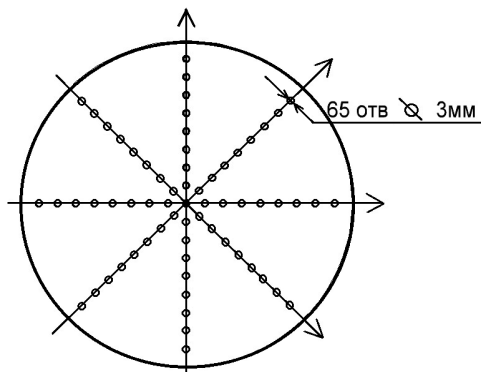


Рисунок 5 – Схема измерений плотности дислокаций в пластинах арсенида галлия с ориентацией (100)

Контроль плотности дислокаций и оценка характера распределения дислокаций в плоскости пластин (100) вдоль кристаллографических направлений производился по схеме (рис. 5), измерения осуществляются на химически полированных и травленных в расплавленном КОН пластинах арсенида галлия, путем выявления дислокационных ямок. Измерения производились с помощью микроскопа МИИ-4.

Плотность дислокаций определялась не для всей поверхности пластины, а для каждой точки отдельно. Внутри каждой точки производилось по шесть измерений (рис. 6).

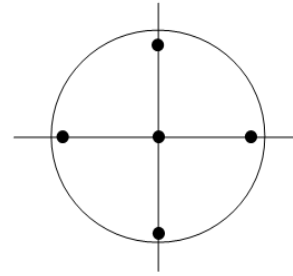


Рисунок 6 – Схема измерения плотности дислокаций в одной точке

Измерение плотности дислокаций осуществлялось по следующему выражению:

$$N_d = \frac{n_{cp}}{S}, \quad (7)$$

где n_{cp} – среднее количество дислокационных ямок в поле зрения микроскопа; S – площадь поля зрения в см^2 .

Данные полученных плотностей дислокаций вносились в программу, с помощью которой строились области равных плотностей дислокаций. Результат программы представлен на рис. 7.

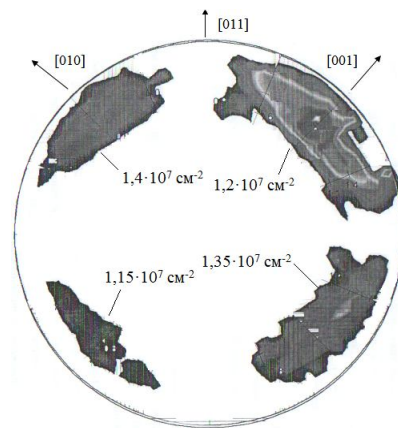


Рисунок 7 – Области максимальных плотностей дислокаций в пластине полуизолирующего GaAs диаметром 100 мм в направлении (100)

Как показали экспериментальные исследования, максимальные значения плотности дислокаций $N_d \geq 10^7 \text{ см}^{-2}$ находятся в симметрических областях с ориентацией $[010]$, $[001]$, что подтверждается и теоретическими расчетами (рис. 4)

ВЫВОДЫ.

1. Разработана методика расчета и экспериментальной проверки распределения плотности дислокаций в плоскости пластины GaAs.

2. Показано, что распределение структурных нарушений носит четырёхкратную симметрию в плоскости пластины (100) GaAs.

3. Определено, что при диаметре GaAs 100 мм максимальные значения плотности дислокаций достигают $N_d \geq 10^7 \text{ см}^{-2}$ и имеет островковый характер.

ЛИТЕРАТУРА

- Jordan A.S., Caruso R., Von Neida A.R. An Analysis of the Derivative Weight-Gain Signal From Measured Crystal Shape: Implications for Diameter Control of GaAs // *Bell Syst. Tech. Journal*. – 1983. – № 62. – PP. 477–498.
- Vasudevi P.K., Wilson R.G., Evans C.A. Chromium redistribution during thermal annealing of semiinsulating GaAs as a function of encapsulant and implant fluence // *Journal of Applied Physics Letters*. – 1980. – № 36. – PP. 873–879.
- Kanber H., Feng M., Whelan J.M. Redistribution of manganese after annealing of GaAs implanted with Si and Se // *Journal of Applied Physics Letters*. – 1982. – № 40. – PP. 960–963.
- Jordan A. S. Determination of the total emittance of n-type GaAs with application to Czochralski growth // *Journal of Applied Physics*. – 1980. – № 51. – PP. 2218–2228.
- Laudise R.A. Crystal growth progress in response to the needs for optical communications // *Journal of Crystal Growth*. – 1983. – № 65. – PP. 3–23.
- Jordan A.S. An evaluation of the thermal and elastic constants affecting GaAs crystal growth // *Journal of Crystal Growth*. – 1980. – № 49. – PP. 631–642.
- Jordan A.S., Caruso R., Von Neida A. R. A Thermoelastic Analysis of Dislocation Generation in Pulled GaAs Crystals // *Bell Syst. Tech. Journal*. – 1980. – № 59. – PP. 593–637.
- Jacob G. A novel crystal growth method for GaAs: The liquid encapsulated kyropoulos method // *Journal of Crystal Growth*. – 1982. – № 58. – PP. 455–459.
- Nygren S.F. Liquid encapsulated Czochralski growth of 35 mm diameter single crystals of GaAs // *Journal of Crystal Growth*. – 1973. – № 19. – PP. 21–32.
- Brice J.C. An analysis of factors affecting dislocation densities in pulled crystals of gallium arsenide // *Journal of Crystal Growth*. – 1970. – № 7. – PP. 9–12.
- Miyazawa S., Honda T., Ishii Y., Ishida S., Improvement of crystal homogeneities in liquid-encapsulated Czochralski grown, semi-insulating GaAs by heat treatment // *Journal of Applied Physics Letters*. – 1984. – № 44. – PP. 410–415.
- Программа установления параметров условий теплопереноса полупроводниковых материалов «TERMIX» [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.uni-erlangen.de/CGL/soft/softham.html>. – Название заголовка с экрана.
- Miyazawa S., Ishii Y., Ishida S., Nanishi Y. Direct observation of dislocation effects on threshold voltage of a GaAs field-effect transistor // *Journal of Applied Physics Letters*. – 1983. – № 43. – PP. 853–856.
- Jordan A. S., Nikolakopoulou G. A. A numerical study of manganese redistribution in GaAs employing an interstitial-substitutional model // *Journal of Applied Physics Letters*. – 1984. – № 55. – PP. 4194–4208.
- Jordan A.S., Caruso R., Von Neida A.R., Nielsen J.W. A comparative study of thermal stress induced dislocation generation in pulled GaAs, InP, and Si crystals // *Journal of Applied Physics*. – 1981. – № 52. – PP. 3331–3336.

SIMULATION OF HEAT TRANSFER PROCESSES AND RESEARCH OF DISLOCATION FORMATION IN GROWING THE MONOCRYSTALS OF GALLIUM ARSENIDE WITH 100 mm DIAMETER

A. Oksanych, M. Androsiuk

Kremenchuk Mykhailo Ostrohradskyi National University

vul. Persotravneva, 20, Kremenchuk, 39600, Ukraine. E-mail: oksanich@kdu.edu.ua

The cause of dislocations emergence as a consequence of the elastic deformation increase, which was arisen due to thermal stresses, was found. The regularity of dislocations distribution in GaAs monocrystals that were grown by the Czochralski method was simulated. The method of calculation and experimental verification of dislocations density distribution was developed. Also it was proposed the scheme to control the dislocations density and the evaluation of the nature of the dislocations distribution in the plane of the GaAs plate (100) along the crystallographic directions. The maximum values of the dislocation density, which is reaching $N_d \geq 10^7 \text{ cm}^{-2}$, within the 100 mm diameter of GaAs plate were defined. It was shown that the distribution of structural defects has a four-fold symmetry in the plane of the plate (100) GaAs and has an insular character.

Key words: monocrystalline gallium arsenide, structural defect, temperature gradient, plastic deformation.

REFERENCES

- Jordan, A.S., Caruso, R., Von Neida, A.R. (1983) “An Analysis of the Derivative Weight-Gain Signal From Measured Crystal Shape: Implications for Diameter Control of GaAs”, *Bell Syst. Tech. Journal*, no. 62, pp. 477–498.
- Vasudev, P.K., Wilson, R.G., Evans, C.A. (1980) “Chromium redistribution during thermal annealing of semiinsulating GaAs as a function of encapsulant and implant fluence”, *Journal of Applied Physics Letters*, no. 36, pp. 847–840.
- Kanber, H., Feng, M., Whelan, J.M. (1982) “Redistribution of manganese after annealing of GaAs implanted with Si and Se”, *Journal of Applied Physics Letters*, no. 40, pp. 960–963.
- Jordan, A.S. (1980) “Determination of the total emittance of n-type GaAs with application to Czochralski growth”, *Journal of Applied Physics*, no. 51 pp. 2218–2228.
- Laudise, R.A. (1983) “Crystal growth progress in response to the needs for optical communications”, *Journal of Crystal Growth*, no. 65 pp. 3–23.
- Jordan, A.S. (1980) “An evaluation of the thermal and elastic constants affecting GaAs crystal growth” *Journal of Crystal Growth*, no. 49, pp. 631–642.
- Jordan, A.S., Caruso, R. and Von Neida, A.R. (1980) “A Thermoelastic Analysis of Dislocation Generation in Pulled GaAs Crystals”, *Bell Syst. Tech. Journal*, no. 59, pp. 593–637.

8. Jacob, G. (1982) "A novel crystal growth method for GaAs: The liquid encapsulated kyropoulos method", *Journal of Crystal Growth*, no. 58, pp. 455–459.

9. Nygren, S.F. (1973) "Liquid encapsulated Czochralski growth of 35 mm diameter single crystals of GaAs", *Journal of Crystal Growth*, no. 19 pp. 21–32.

10. Brice, J.C. (1970), "An analysis of factors affecting dislocation densities in pulled crystals of gallium arsenide", *Journal of Crystal Growth*, no. 7, pp. 9–12.

11. Miyazawa, S., Honda, T., Ishii, Y., Ishida, S. (1984) "Improvement of crystal homogeneities in liquid-encapsulated Czochralski grown, semi-insulating GaAs by heat treatment", *Journal of Applied Physics Letters*, no. 44, pp. 410–415.

12. "Program of settings of parameters of conditions heat mass transfer of semiconductor materials" (2014) «TERMIX», Erlangen, Germany, available at:

<http://www.uni-erlangen.de/CGL/soft/softham.html> (accessed August 10, 2014).

13. Miyazawa, S., Ishii, Y., Ishida, S., Nanishi, Y. (1983) "Direct observation of dislocation effects on threshold voltage of a GaAs field-effect transistor", *Journal of Applied Physics Letters*, no. 43, pp. 853–856.

14. Jordan, A.S., Nikolakopoulou, G.A. (1984) "A numerical study of manganese redistribution in GaAs employing an interstitial-substitutional model", *Journal of Applied Physics Letters*, no. 55 pp. 4194–4208.

15. Jordan, A.S., Caruso, R., VonNeida, A.R., Nielsen, J.W. (1981) "A comparative study of thermal stress induced dislocation generation in pulled GaAs, InP, and Si crystals", *Journal of Applied Physics*, no. 52, pp. 3331–3336.

Стаття надійшла 30.10.2014.