

## Research Paper

# Numerical Simulation of Thermo-elastic Stresses in Germanium Crystal Grown by Czochralski Technique during Different Lengths of Crystal<sup>1</sup>

Mehdi Jamehbozorgi<sup>\*2</sup> and Mohammad Hossein Tavakoli<sup>3</sup>

Received:2021.03.28

Revised:2021.06.01

Accepted:2021.06.15

## Abstract

In the process of crystal growth by the Czochralski technique, the lower part and core of the crystal are warmer than other parts of the crystal and its environment, which leads to expansion in different parts of the crystal. The result of this thermal gradient is strain, which eventually causes thermo-elastic stress in the crystal. Increasing this stress leads to the transition of the material from the elastic limit and entering the plastic area. To show thermo-elastic stress in crystals, a criterion called Von Mises stress is used. Using the solid mechanics' approach, the mechanical response of crystal to the stresses can be determined through appropriate structural equations. In this paper, using appropriate structural equations, a set of numerical simulations of temperature field, thermal stress and dislocation density for a Czochralski setup used to grow Ge single crystal have been done for different heights of crystal. In order to investigate dislocation density, using a simple first-order approximation, in which the dislocation density is proportional to the radial gradient of temperature is used. A two-dimensional steady state finite element method has been applied for all calculations. The numerical results reveal that the thermal field and thermal stress are mainly dependent on the crystal height, heat radiation, and gas flow in the growth system. As the height of the crystal increases and the shape of the crystal-melt interface changes, we see an increase in thermo-elastic stress and dislocation density.

**Keywords:** *Numerical Simulation, Thermo-elastic Stress, Czochralski Technique.*

---

<sup>1</sup> DOI: 10.22051/ijap.2021.35886.1206

<sup>2</sup> Ph. D. Student, Department of Physics, Bu-Ali Sina University, Hamedan, Iran. (Corresponding Author). Email: mjamebozorgi@gmail.com

<sup>3</sup> Associate Professor, Department of Physics, Bu-Ali Sina University, Hamedan, Iran. Email: mhtvkl@gmail.com

مقاله پژوهشی

## شبیه‌سازی تنش‌های گرماکشسانی در بلور ژرمانیوم رشد یافته به روش چکرالسکی در طول‌های متفاوت<sup>۱</sup>

مهدی جامه بزرگی\*<sup>۲</sup> و محمد حسین توکلی<sup>۳</sup>

تاریخ دریافت: ۱۴۰۰/۰۱/۰۸

تاریخ بازنگری: ۱۴۰۰/۰۳/۱۱

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۰/۰۳/۲۵

### چکیده

در فرایند رشد بلور به روش چکرالسکی قسمت پایین و هسته بلور گرم‌تر از قسمت‌های دیگر بلور و محیط آن است که این گرادیان دمایی سبب انبساط در قسمت‌های مختلف بلور می‌شود. نتیجه این گرادیان گرمایی، کرنش است که در نهایت باعث ایجاد تنش گرماکشسانی در بلور می‌شود. افزایش این تنش به گذار ماده از حد کشسان و وارد شدن به منطقه پلاستیک می‌انجامد. برای نشان دادن تنش گرماکشسانی در بلورها از معیاری با نام تنش فون مایسس استفاده می‌کنند. در این مقاله، با استفاده از معادلات ساختاری مناسب، شبیه‌سازی عددی میدان دمایی، تنش گرماکشسانی (گرماکشسانی) و چگالی نابه‌جایی‌های بلور در حال رشد ژرمانیوم توسط روش چکرالسکی برای طول‌های مختلف بلور انجام شده است. برای بررسی تراکم نابه‌جایی از یک

<sup>۱</sup> DOI: 10.22051/ijap.2021.35886.1206

<sup>۲</sup> دانشجوی دکترا، گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه بوعلی سینا، همدان، ایران. (نویسنده مسئول).

Email: mjamebozorgi@gmail.com

<sup>۳</sup> دانشیار، گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه بوعلی سینا، همدان، ایران. Email: mhtvkl@gmail.com

تقریب ساده درجه یک، که در آن چگالی نابه‌جایی متناسب با گرادیان شعاعی دماست، استفاده کرده‌ایم. این روش در تمام محاسبات، روش عناصر متناهی حالت پایای دو بُعدی است. نتایج حاکی از آن است که میدان دمایی و تنش گرمایی و چگالی نابه‌جایی بلور به طور صریح وابسته به ارتفاع بلور و انتقال گرمای تابشی و جریان گاز در سامانه رشد است. با افزایش ارتفاع بلور و تغییر شکل فصل مشترک بلور-مذاب، تنش گرمایی و چگالی نابه‌جایی افزایش می‌یابد.

## واژگان کلیدی: شبیه‌سازی عددی، تنش گرماکشسانی، روش چکرالسکی.

### ۱. مقدمه

عدد اتمی ژرمانیوم (Ge) ۳۲ است. از نظر ظاهری، براق و سخت و سفید مایل به خاکستری و عضو گروه کربن است. از نظر شیمیایی مشابه قلع (Sn) و سیلیکن (Si) و همسایگان هم گروه آن است. فراوانی ژرمانیوم ۶/۷ ذره در میلیون (ppm) در پوسته زمین تخمین زده شده است. امروزه، دو منبع اصلی برای تولید صنعتی ژرمانیم، سنگ معدن روی و زغال‌سنگ است. سهم این منابع در طول زمان متفاوت است و عمدتاً توسط مقدار استفاده از زغال‌سنگ در نیروگاه‌ها تعیین می‌شود. منبع اصلی ژرمانیوم در اتحاد جماهیر شوروی سابق و امروزه در روسیه است. ژرمانیوم خالص نیم‌رساناست و ظاهری شبیه به سیلیکن دارد. اگرچه این عنصر را مندلیف<sup>۴</sup> پیش‌بینی کرد، از ستون چهارم از جدول تناوبی در سال ۱۸۸۶ توسط وینکلر<sup>۵</sup> کشف شد، یعنی در حدود ۱۳۰ سال پیش و ۶۶ سال قبل از کشف سیلیکن. در ابتدا، ژرمانیوم ماده اصلی مورد استفاده در ترانزیستورهای نیم‌رسانا و مدارهای مجتمع بود، اما بعدها این نقش را سیلیکن بر عهده گرفت. تحرک پذیری عالی حامل‌های بار در ژرمانیوم در مقایسه با سیلیکن (دو برابر نسبت به الکترون‌ها و چهار برابر نسبت به حفره‌ها) باعث شد که این ماده به عنوان ماده اصلی برای تشکیل مدارهای پرسرعت در نظر گرفته شود. ضریب جذب عالی ژرمانیم در مقایسه با سیلیکن در محدوده طول موج ۱۵۵۰-۸۰۰ نانومتر، همراه با تحرک پذیری عالی حامل‌های آن، این ماده را به عنوان ماده‌ای مناسب برای حل برخی مشکلات خاص در توسعه سازه‌های ترانزیستوری در مقیاس نانو کرده است [۱، ۲].

متداول‌ترین روش رشد تک‌بلور ژرمانیوم، روش چکرالسکی است. با استفاده از این روش، بلور در حین کشیدن مواد مذاب به سمت بالا به آرامی رشد می‌کند. حرکت مذاب و گاز دو پارامتر مهم برای تولید بلور است، زیرا انتقال جرم و گرما و ناخالصی‌های وارد شده به بلور یا خارج شده از آن را تعیین می‌کند. کیفیت بلور در بلور رشدیافته مستقیماً به تاریخچه فرایند رشد و چرخش بلور و

<sup>۴</sup> Dmitri Mendeleev

<sup>۵</sup> Johann Heinrich Winckler

بوته، سرعت کشش و روش خنک کردن بستگی دارد [۸۳]. برای تشکیل بلورهای ژرمانیوم قابل استفاده در محدوده فرورسرخ، تنش‌های باقیمانده در بلور رشدیافته باید کاهش یابد. برای کاهش تنش‌های گرمایی، که مربوط به گرادیان دمایی شعاعی تقریباً کاهشی درون بلور است، باید سطح جانبی بلور رشدیافته، در طول روند رشد تا حد ممکن تخت نگه داشته شود. این شرایط را می‌توان با طراحی دقیق و تنظیم سامانه انجام داد. امروزه، مدل‌سازی ریاضی فرایندهای رشد بلوری به جایی رسیده است که می‌توان با موفقیت آن را برای مطالعه پدیده‌های بنیادی (فیزیکی، شیمیایی، مکانیکی) فرایند به کار برد. این روش ابزاری مؤثر برای ایجاد تغییرات مطلوب در فرایندها و تنظیم و توسعه و طراحی سامانه‌های جدید برای رشد بلورهای جدید است [۹-۱۲].

مطالعه حاضر شامل استفاده از تجزیه و تحلیل عددی در یک کوره رشد از تک‌بلور ژرمانیوم با سامانه گرمایشی القایی برای مراحل مختلف روند رشد است. نتیجه این مطالعه توصیف رفتار دمایی بلور رشدیافته و تنش گرمایی موجود در آن است. گرادیان دما از عوامل ایجاد تنش‌های گرمایی بوده که به دلیل غیرتعادلی بودن فرایند رشد بلور است. این تنش‌های گرمایی باعث ایجاد ناهنجاری‌ها در بلور ژرمانیوم می‌شود. عمده نقص‌های تک‌بلورهای ژرمانیوم ناهنجاری است. ناهنجاری و ترک خوردگی باعث کاهش شدید استفاده از بلورهای نیم‌رسانا می‌شود. ناهنجاری‌ها نقص‌های خطی در نیم‌رساناها بوده و برخی خصوصیات مشخصه نیم‌رساناها مانند میانگین پوشش آزاد حامل‌ها و تراکم حامل‌ها و میانگین عمر حامل‌های اقلیت به طور نامطلوبی تحت تأثیر آن‌ها قرار می‌گیرد. بنابراین، استفاده از این بلورهای معیوب در دستگاه‌های الکترونیکی، مشکلات لاینحلی ایجاد می‌کند [۱۳-۱۷].

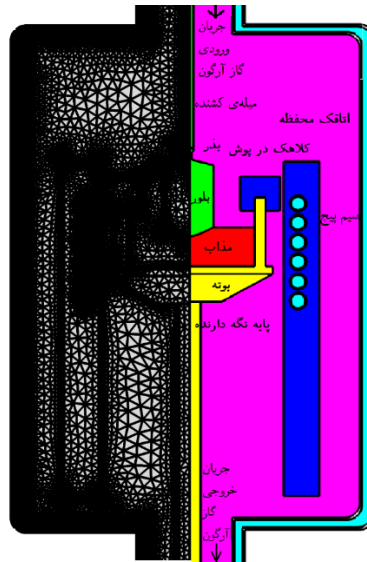
در فرایند رشد بلور به روش چکرالسکی، در محل فصل مشترک بلور-مذاب، گرما به بلور رسیده و از طریق سطوح جانبی توسط تابش و همرفت به محیط اطراف داده می‌شود. بنابراین، قسمت‌های زیرین و میانی بلور به ترتیب گرم‌تر از بالا و محیط بلور در حال رشد هستند. انبساط قسمت‌های مختلف بلور از این گرادیان‌های دمایی به وجود می‌آید و در نتیجه سبب ایجاد کرنش‌ها و تنش‌های دمایی (تنش گرماکشسانی) می‌شود. با استفاده از رویکرد مکانیک مواد جامد می‌توان از طریق معادلات ساختاری مناسب، پاسخ مکانیکی بلور را به تنش‌های ایجادشده مشخص کرد. افزایش این تنش به گذار ماده از حد کشسان و وارد شدن به منطقه پلاستیک می‌انجامد [۱۸]. برای مطالعه این ناپایداری پلاستیک از روشی بنیادی به نام فرضیه نظریه اعوجاج استفاده می‌کنند. براساس این فرضیه، بلور هنگامی از ناحیه کشسانی به ناحیه پلاستیک وارد می‌شود که انرژی کرنشی اعوجاج به

مقدار معینی برسد که به آن *مقدار بحرانی* می‌گویند. این معیار به تابع *تسلیم فون مایسس*<sup>۶</sup> معروف است، که برای نشان دادن تنش گرماکشسانی در بلورها استفاده می‌شود [۱۹، ۲۰]. برای محاسبه تنش فون مایسس درون بلور، ما به اطلاعات مربوط به جابه‌جایی‌ها و کرنش‌ها و تنش‌های گرماکشسانی، که از حل مسئله کشسانی حاصل می‌شود، نیاز داریم [۲۱]. تنش‌های گرماکشسانی برای ارزیابی تغییر شکل پلاستیک و این که چه ناحیه‌ای از بلور چگالی نابه‌جایی دارد و همچنین مقدار آن استفاده می‌شود. بنابراین این تنش‌ها در بلور ژرمانیوم در حال رشد، باید کنترل شده و به مقدار کمینه برسد. تنش‌های به جای مانده معمولاً در ناحیه پلاستیک بوده و ناشی از میدان‌های تنش‌ی جایگزیده در فرایند رشد بلور است. با افزایش تنش‌های به جای مانده، نابه‌جایی‌ها شکل گرفته و به آسانی از سطح بلور به داخل آن انتشار می‌یابد. از مقایسه تنش فون مایسس با مقدار بحرانی (تنش برشی تفکیک شده  $\sigma_{CRSS}$ ) می‌توان آن نواحی از بلور که دچار افزایش نابه‌جایی شده‌اند، پیش‌بینی کرد. با کمینه کردن بیشینه مقدار تنش فون مایسس در هنگام رشد بلور، می‌توان چگالی نابه‌جایی‌ها را به کمترین مقدار رساند [۱]. نتایج به ویژه در فرایندهای صنعت رشد بلور نیم‌رسانا به ویژه رشد بلور ژرمانیوم به روش چکرالسکی که در حال حاضر بر روی شمش‌های خالص و بدون نابه‌جایی می‌باشد، کاربرد فراوانی دارند.

## ۲. توصیف سامانه رشد، معادله‌ها و شرایط مرزی حاکم

سامانه رشد بلور ژرمانیوم شامل این‌هاست: یک پیچه آراف شامل شش دور، بوته‌ای از جنس گرافیت، نگه‌دارنده بوته، میله نگه‌دارنده بذر از جنس کوارتز، اتاقک محفظه از جنس استیل، در پوش بوته از جنس آلومینا و لوله شامل جریان آب در گردش که از بدنه داخلی اتاقک محفظه گذشته و وارد پیچه می‌شود. اتاقک محفظه از گاز آرگون پر شده است. بوته توسط ژرمانیم خام به وزن  $5\text{ kg}$  پر شده و وزن بلور به دست آمده  $3/5\text{ kg}$  است. بلور ژرمانیوم به دست آمده در جهت  $\langle 100 \rangle$  بوده و قطر آن  $7\text{ cm}$  است. زمان لازم برای کل فرایند رشد ۲ روز و سرعت کشیدن بلور از مذاب  $10\text{ mm/h}$  است. در شکل ۱ هندسه و اجزاء دستگاه و شبکه‌بندی رشد بلور ژرمانیوم به روش چکرالسکی را نمایش داده‌ایم.

<sup>۶</sup> Von Mises



شکل ۱. هندسه و اجزاء دستگاه و شبکه بندی رشد بلور ژرمانیوم به روش چکرالسکی.

همچنین خصوصیات فیزیکی مواد مورد استفاده در سامانه در جدول (۱) نشان داده شده است.  $C_p$  ،  $\epsilon$  و  $S$  ،  $T$  ،  $k$  ، به ترتیب ظرفیت گرمایی، رسانایی گرمایی، چگالی، رسانایی الکتریکی و تابندگی هستند [۹].

جدول ۱ خصوصیات فیزیکی مواد مورد استفاده در سامانه.

$\rho (\frac{g}{cm^3})$	$s (\frac{S}{m})$	$\epsilon$	$k (\frac{W}{m.K})$	$C_p (\frac{J}{kg.K})$	
-	$5/9 \times 10^7$	-	۴۰۰	۳۸۵	پیچ (مس)
-	$7 \times 10^4$	۰/۹۸	۱۵۰	۷۱۰	بوته و نگه دارنده (گرافیت)
-	-	۰/۹	۲۷	۹۰۰	سرپوش بوته (آلومینا)
۵/۳	$2 \times 10^6$	۰/۲	۷۵	۳۱۰	مذاب (ژرمانیوم)
۵/۴	$2 \times 10^6$	۱/۴	۷۵	۳۲۲	بلور (ژرمانیوم)
-	$4/0.3 \times 10^6$	۰/۵۵	۴۴/۵	۴۷۵	اتاقک محفظه (استیل)
-	-	۰/۴	۰/۴	-	میله کشنده (کوارتز)

ابتدا ژرمانیوم خام درون بوته گرافیتی قرار گرفته، یک جریان الکتریکی متناوب با بسامد  $23 kHz$  در پیچه القایی باعث القاء جریان الکتریکی در رساناها و همچنین ژرمانیوم شده که این جریان القایی، سبب تولید گرما در بوته و همچنین ژرمانیم شده (گرمای ژول) که در نهایت به ذوب ژرمانیوم خام در بوته می‌انجامد. به دلیل همگن شدن دما در راستای شعاعی، بلور و بوته در خلاف جهت یکدیگر می‌چرخند. در نهایت، دانه با مذاب تماس می‌یابد و تک‌بلور ژرمانیوم از مذاب بیرون کشیده می‌شود [۴، ۲۱]. قوانین کلیدی برای مطالعه تنش گرماکشسانی شامل معادلات حرکت (رابطه تعادل)، معادلات کرنش (گرادیان بردار جابه‌جایی) و معادلات ساختاری (رابطه بین تنش و کرنش) است. برای حل عددی معادلات، روش عناصر متناهی حالت پایای دوبعدی در نظر گرفته شده که در نهایت با استفاده از نرم‌افزار کامسول شبیه‌سازی شده است. کامسول یک نرم‌افزار جامع و بسیار کاربردی برای انجام شبیه‌سازی‌های فیزیکی است. این نرم‌افزار امکان شبیه‌سازی همزمان پدیده‌ها با ماهیت متفاوت در یک بعد و دو بعد و سه بعد را دارد. در حالت کلی، تغییر آرام دما در داخل محیط پیوسته به ایجاد تنش گرمایی می‌انجامد. نظریه گرماکشسانی خطی براساس رابطه بین جمع خطی کرنش‌های گرمایی و کرنش‌های مکانیکی است. مواد گرماکشسانی به صورت همگن و همسانگرد در نظر گرفته شده و دارای خواص ثابتی است [۲۲-۲۴].

معادله تنش-کرنش بلور به صورت زیر نوشته می‌شود که همان قانون هوک است،

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}(\varepsilon_{kl} - \alpha\theta\delta_{kl}) \quad \theta = T - T_0 \quad (1)$$

که در آن،  $\sigma_{ij}$  تانسور تنش و  $C_{ijkl}$  تانسور ثابت کشسانی است که بستگی به ساختار بلور و جهت رشد دارد، ضریب انبساط گرمایی را با  $\alpha$  نشان داده‌ایم و  $\varepsilon_{kl}$  و  $\delta_{kl}$  به ترتیب تانسور کرنش و دلتای کرونگر و  $T_0$  دمای مرجع است که صفر در نظر گرفته می‌شود. در نظریه کشسانی خطی، کرنش را کوچک فرض کرده‌ایم و رابطه کرنش-جابه‌جایی به صورت زیر بیان می‌شود [۲۵]،

$$\varepsilon = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) \quad (2)$$

که با استفاده از نماد اندیسی به شکل زیر نیز نوشته می‌شود:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (3)$$

که در آن،  $\mathbf{u} = u_r \hat{\mathbf{r}} + u_\theta \hat{\boldsymbol{\theta}} + u_z \hat{\mathbf{z}}$  بردار جابه‌جایی در مختصات استوانه‌ای است و گرادیان آن به شکل زیر بیان می‌شود،

$$\nabla \mathbf{u} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u_r}{\partial r} & \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} - \frac{u_\theta}{r} & \frac{\partial u_r}{\partial z} \\ \frac{\partial u_\theta}{\partial r} & \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{u_r}{r} & \frac{\partial u_\theta}{\partial z} \\ \frac{\partial u_z}{\partial r} & \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} & \frac{\partial u_z}{\partial z} \end{pmatrix} \quad (۴)$$

ژرمانیوم رشد داده توسط روش چکرالسکی استوانه‌ای شکل بوده و لذا تقارن استوانه‌ای دارد [۲۶]. در نتیجه، مؤلفه‌های کرنش طولی و برشی در مختصات استوانه‌ای به صورت زیر نوشته می‌شود،

$$\begin{aligned} \varepsilon_{rr} &= \frac{\partial u}{\partial r}, & \varepsilon_{\theta\theta} &= \frac{u}{r}, & \varepsilon_{zz} &= \frac{\partial w}{\partial z} \\ \varepsilon_{r\theta} &= 0, & \varepsilon_{\theta z} &= 0, & \varepsilon_{zr} &= \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial r} \end{aligned} \quad (۵)$$

که در آن،  $u$  و  $w$  مؤلفه‌های جابه‌جایی در جهت  $r$  و  $z$  است. بر اساس فرض تقارن محوری، تغییر جابه‌جایی در جهت سمتی صفر است ( $\frac{\partial}{\partial \theta} = 0$ ). بنابراین، تنش‌های دایره‌ای  $\sigma_{r\theta}$  و  $\sigma_{\theta z}$  صفر بوده و محاسبه نمی‌شود. تنش گرمایی به تغییر شکل بلور انجامیده و معادله حرکت در حالت تعادل، از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{b} = 0 \quad (۶)$$

در این رابطه،  $\mathbf{b}$  نیروی حجمی و  $\boldsymbol{\sigma}$  تانسور تنش است. فرض می‌کنیم می‌توان از اثر گرانش چشم‌پوشی کرد، در نتیجه  $\mathbf{b} = 0$  بوده و تعادل مکانیکی در بلور برقرار است. با استفاده از شرط تعادل

در جهت شعاعی و محور تقارن مختصات استوانه‌ای، می‌توان روابط زیر را نوشت [۲۲]

$$\begin{aligned} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \sigma_{rr}) - \frac{1}{r} \sigma_{\theta\theta} + \frac{\partial \sigma_{zr}}{\partial z} &= 0 \\ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \sigma_{zz}) + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z} &= 0 \end{aligned} \quad (۷)$$



ژرمانیوم ماده‌ای همسانگرد است، یعنی مشخصات فیزیکی آن شامل مدول کشسانی و ضریب پواسون و ضریب انبساط گرمایی در نقطه مشخصی از ماده، مستقل از راستای آن نقطه است: بنابراین ماتریس ثابت (سختی) فقط دارای سه مؤلفه مستقل  $c_{\phi\phi} = c_{\delta\delta} = c_{\psi\psi} = c_{\psi}$  و  $c_{\phi\phi} = c_{\psi\psi} = c_{\psi\psi} = c_{\phi}$  و  $c_{\phi\psi} = c_{\psi\phi} = c_{\psi\psi} = c_{\psi}$  است و مابقی عناصر ماتریس صفر است. از این رو، (۱) به صورت زیر نوشته می‌شود،

$$\begin{pmatrix} \sigma_{rr} \\ \sigma_{\theta\theta} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{rz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{\phi} & c_{\psi} & c_{\psi} & 0 \\ c_{\psi} & c_{\phi} & c_{\phi} & 0 \\ c_{\psi} & c_{\psi} & c_{\phi} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{\psi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{rr} - \alpha T \\ \varepsilon_{\theta\theta} - \alpha T \\ \varepsilon_{zz} - \alpha T \\ \varepsilon_{rz} \end{pmatrix} \quad (۸)$$

همچنین، برای عنصر ژرمانیوم ضریب مدول یانگ  $E = ۱۰۲/۷ \text{ GPa}$  و ضریب پواسون  $\nu = ۰/۲۶$  است. با استفاده از (۵) و (۷) و (۸) مؤلفه‌های جابه‌جایی  $(u_r, u_{\theta}, u_z)$  را به دست آورده و در نهایت می‌توانیم مؤلفه‌های تنش و کرنش را در بلور ژرمانیوم محاسبه کنیم.

## ۲-۱ تنش فون مایسس

یکی از مسائل مهم در زمینه بلورشناسی و رشد بلور، کم کردن مقدار تنش‌های اعمال شده بر بلور به منظور جلوگیری از گذار ماده از ناحیه کشسان به ناحیه پلاستیک است. بلور هنگامی به حد ارتجاعی خود رسیده و شروع به تغییر پلاستیک می‌کند که انرژی کرنشی کشسانی اعوجاج به مقدار بحرانی برسد. این معیار تسلیم همانطور که در مقدمه اشاره کردیم، به عنوان تابع فون مایسس معروف است. برای نشان دادن تنش گرمایی در بلورها از تنش فون مایسس استفاده می‌کنند. بعد از یافتن تنش‌های عمودی و برشی، تنش فون مایسس از رابطه زیر به دست می‌آید [۲۷]،

$$\sigma_{von} = \sqrt{\frac{(\sigma_{rr} - \sigma_{zz})^2 + (\sigma_{rr} - \sigma_{\theta\theta})^2 + (\sigma_{\theta\theta} - \sigma_{zz})^2 + 6\sigma_{rz}^2}{2}} \quad (۹)$$

از مقایسه تنش به دست آمده از (۹) با مقدار بحرانی، مناطقی از بلور که دچار افزایش نابه‌جایی شده قابل پیش‌بینی خواهد بود. بنابراین، یک روش بسیار مفید برای کمینه کردن چگالی نابه‌جایی، کاهش بیشینه مقدار تنش فون مایسس در هنگام رشد بلور است.

برای محاسبه تنش‌های گرمایی شرایط مرزی به صورت زیر داده می‌شود:

۱. در مرز فصل مشترک بلور-مذاب و سطح بلور هیچ گونه تنش عمودی وجود ندارد

$$(\sigma \cdot \hat{n}) = 0$$

۲. هیچ گونه تنشی در میله نگهدارنده و بذر بلور در بالای بلور وجود ندارد.

## ۲-۲ جوانه‌زنی نابه‌جایی و تکثیر آن در هنگام کشیدن بلور

همه بلورهای واقعی حاوی نقص‌هایی است که ممکن است به صورت نقطه‌ای، خطی، سطحی یا حجمی باشد و به طور موضعی آرایش منظم اتم‌ها را مختل کند. وجود این نقص‌ها می‌تواند به طرز چشمگیری خواص جامدات بلوری را اصلاح کند. نابه‌جایی‌ها از نوع نواقص خطی هستند و شامل تعداد زیادی اتم می‌شوند که در امتداد یک خط مرتب شده‌اند. اولین بار، مطالعه دقیق از آن‌ها بین سال‌های ۱۹۴۵ تا ۱۹۵۰ صورت گرفت و تلاش‌های فراوانی برای سازش مقادیر نظری و تجربی تنش برشی اعمال‌شده مورد نیاز برای تغییر شکل پلاستیک بلور منفرد حاصل شد [۲۸]. تک‌بلورهای مختلف، مانند تک‌بلورهای نیم‌رسانا و تک‌بلورهای اکسید به عنوان مواد دستگاه‌های الکترونیکی-نوری استفاده می‌شود. از آنجا که در بلور در حال رشد، گرادیان گرمایی همیشه وجود دارد، تنش‌های گرمایی ایجاد می‌شود و می‌توانند سبب ایجاد نابه‌جایی شوند.

از ایجاد نابه‌جایی در ابزارهای الکترونیکی جلوگیری می‌شود، اما برای کاربردهای درجه نوری بلور ژرمانیوم، در تعداد و انواع کاملاً مشخص لازم است. علاوه بر این، تنش‌های گرمایی می‌تواند باعث از بین رفتن موضعی در تقارن شود که به نوبه خود به اثرات ناهمسانگردی مانند شکست مضاعف (برای مثال، ناهمسانگردی نوری) می‌انجامد. در تک‌بلورهای اکسید، حتی ممکن است باعث ایجاد شکستگی در بلور شود. این بلورها به دلیل کاهش بهره‌وری، ماده مناسبی در دستگاه‌های الکترونیکی-نوری محسوب نمی‌شوند. بنابراین، استفاده از مکانیک جامدات و استحکام مواد در رشد مذاب تک‌بلورها برای درک و حل مشکلات مربوط به تولید و تکثیر نابه‌جایی‌ها و شکستگی تک‌بلورها لازم است.

روش اجزای محدود ابزاری قدرتمند برای تجزیه و تحلیل تنش در مواد جامد است. با استفاده از این روش مسائل مربوط به تنش گرمایی الاستیک و چگالی نابه‌جایی تک‌بلورها، با در نظر گرفتن ناهمسانگردی در ثابت‌های کشسانی و ضرایب انبساط گرمایی، حل می‌شود [۲۹]. در فرایند رشد بلور ژرمانیوم از مذاب به روش چکرالسکی، به دلیل وجود گرادیان‌های غیرخطی، تنش‌های گرمایی زیادی در تک‌بلور ایجاد می‌شود. این تنش گرمایی باعث ایجاد و تکثیر نابه‌جایی‌ها می‌شود که در عملکرد دستگاه‌ها تأثیر می‌گذارد. بنابراین تنش‌های گرمایی موجود در بلور ژرمانیوم که رشد کرده است، باید کنترل و به حداقل برسد. تنش‌های باقیمانده معمولاً در مراحل رشد به مناطق تغییر شکل یافته پلاستیکی در بلور چسبیده می‌شود، که این ناشی از میدان‌های تنش موضعی بلور است. با افزایش تنش‌های باقیمانده، نابه‌جایی شکل می‌گیرد و سپس به راحتی از سطح بلور به داخل گسترش

یابد. لازم است ذکر کنیم که تنش گرمایی در بلورهای بزرگ در حال رشد، دلیل اصلی حرکت نابه‌جایی است.

اگرچه میدان گرمایی تقریباً یکنواخت به نظر می‌رسد، همانطور که قبلاً گفتیم بیشترین میدان تنش گرماکشسانی در کناره دیواره بلور و فصل مشترک بلورمذاب است. بدیهی است که با رسیدن به سطح تنش بحرانی، این مناطق برای تولید نابه‌جایی مطلوب هستند. بررسی تراکم نابه‌جایی در بلور در حال رشد جالب خواهد بود. برای انجام این کار، یک تقریب ساده درجه یک از چگالی نابه‌جایی  $n_{dis}$  مربوط به فرایند تبلور به صورت رابطه زیر در نظر گرفته شده است [۳۱، ۳۰]:

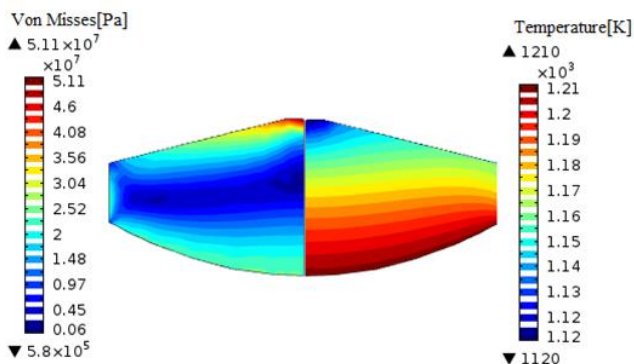
$$n_{dis} = \frac{\alpha_e}{b} \frac{\partial T}{\partial r} \quad (10)$$

در این رابطه،  $\partial T / \partial r$  تغییر دمای شعاعی و  $\alpha_e$  ضریب انبساط خطی و  $b$  طول بردار برگزیده<sup>۷</sup> است. در این تقریب، از تأثیر دما در تکثیر نابه‌جایی و ناپایداری‌های موجود در شکل‌گیری نابه‌جایی صرف نظر شده است. در علم مواد، بردار برگزیده برداری است، که اغلب با  $b$  نشان می‌دهند و نشان‌دهنده اندازه و جهت اعوجاج شبکه در نتیجه نابه‌جایی در شبکه بلوری است. در این روش، تغییر پارامتر شبکه که فرایند انجماد باعث ایجاد تنش در بلور در حال رشد می‌شود. چگالی نابه‌جایی  $n_{dis}$ ، اندازه تعداد نابه‌جایی‌ها در واحد حجم یک ماده بلوری است. با استفاده از تقریب داده‌شده، میدان توزیع چگالی نابه‌جایی برای بلور ژرمانیوم در طول‌های متفاوت در شکل ۵ نشان داده شده است. به طور معمول برای اندازه‌گیری  $n_{dis}$  از دو روش استفاده می‌کنند. در روش اول، طول کل خط نابه‌جایی‌ها را در یک واحد اندازه‌گیری و بر حجم تقسیم می‌کنند و در روش دوم تعداد خطوط نابه‌جایی‌ها را که از سطح واحد عبور می‌کنند، برای نمونه محاسبه می‌کنند.

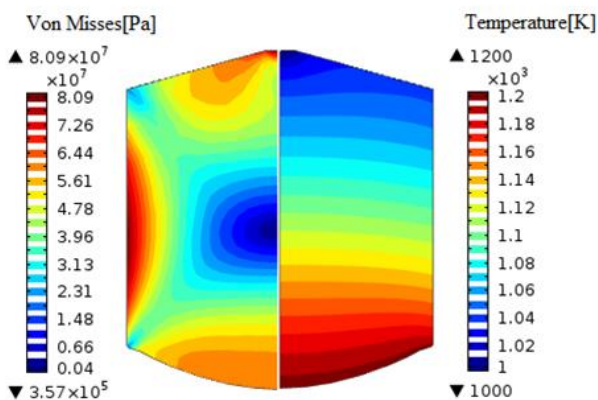
### ۳. بحث و نتیجه‌گیری

در شکل‌های ۲ تا ۴ توزیع دما و تنش فون‌مایسس در بلور رشدیافته برای سه طول مختلف  $1\text{ cm}$  و  $5\text{ cm}$  و  $9\text{ cm}$  نشان داده شده است.

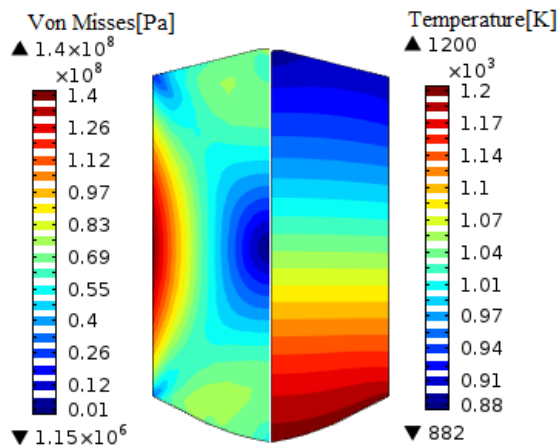
<sup>۷</sup> Jan Burgers



شکل ۲ توزیع دما (راست) و تنش فون مایسیس (چپ) برای حالت ۱  $cm$ .



شکل ۳ توزیع دما (راست) و تنش فون مایسیس (چپ) برای حالت ۲  $cm$ .



شکل ۴ توزیع دما (راست) و تنش فون مایسیس (چپ) برای حالت ۳  $cm$ .

افت دما در بلور ناشی است از استخراج گرما از بذر و میله نگهدارنده آن توسط رسانش و اثر تابش گرما از دیواره‌های اطراف و همچنین گاز آرگون که باعث خنک شدن است. در بلور دارای طول  $5\text{ cm}$  بیشترین مقدار تنش گرمایی در مجاورت بذر اتفاق می‌افتد که به دلیل کاهش عمده سطح مقطع بلور در آن مکان است. با افزایش ارتفاع بلور، تنش گرمایی در مجاورت سطوح بلور در حال رشد افزایش می‌یابد، زیرا گرمای خارج شده از سطح بلور خیلی مؤثرتر از گاز آرگون خنک کننده و تابش از سطح بلور، عمل می‌کند. همچنین، درخور ذکر است که شدت تنش گرمایی با افزایش ارتفاع بلور زیاد شده و نیز در مجاورت فصل مشترک بلورمذاب به دلیل شکل خمیده فصل مشترک، شدت تنش گرمایی افزایش می‌یابد. با افزایش ارتفاع بلور، گرادیان دمایی در بلور، وابسته به استخراج گرما از سطح جانبی بلور می‌شود که نتیجه آن، افزایش تنش گرمایی در آن ناحیه است. این تغییر در خصوصیات اتلاف گرمایی بلور، تأثیرگذار در میدان دمایی و میدان توزیع تنش گرمایی در این قسمت از کوره است. بنابراین، می‌توان گفت که تنش گرمایی با افزایش ارتفاع بلور افزایش می‌یابد. تنش‌های به جا مانده معمولاً به صورت پلاستیک، آن ناحیه از بلور را از شکل طبیعی خود خارج می‌کند. این بدشکلی ناشی از میدان‌های تنشی در بلور در حین رشد است.

با افزایش تنش‌های به جا مانده، نابه‌جایی‌ها شکل می‌گیرد و به آسانی از سطح بلور به سمت داخل آن منتشر می‌شود. نقص‌ها به طور مستقیم در فصل مشترک بلورمذاب و همچنین دیواره جانبی بلور ایجاد می‌شود. قسمت‌های دارای انحنای زیاد مربوط به جبهه مقابل در حال تبلور (مقعر یا محدب) همیشه منشأ نواحی با  $n_{dis}$  زیاد هستند [۳۲]. از شکل ۵ می‌توان دریافت که تراکم نابه‌جایی در قسمت استوانه‌ای بلور  $10^4\text{ cm}^{-2}$  است که برای کاربردهای نوری در تابش‌های مادون قرمز مناسب است. با افزایش طول بلور، هندسه تنظیمات در طول فرایند کشیدن به طور مداوم تغییر می‌کند. بنابراین، شکل فصل مشترک بلورمذاب و در نتیجه تغییرات دمایی و تنش‌های بلوری به آرامی تغییر می‌کند، که به نوبه خود، چگالی نابه‌جایی درون بلور رشدیافته را تغییر می‌دهد. از آنجا که گرادیان‌های دما در قسمت‌های مخروطی بالا و پایین بلور و در مرزهای قسمت استوانه‌ای دارای بیشترین مقدار است، این مکان‌ها مکان‌های مناسب برای ایجاد نابه‌جایی، همچنین رشد و تقویت آنهاست [۳۱]. نابه‌جایی‌ها نیز می‌توانند به راحتی از بذر به داخل بلور منتشر شوند [۳۳].

استفاده از یک بذر بدون نابه‌جایی به همراه گردن‌گیری<sup>۸</sup> بذر در ابتدای کشیدن بلور این مشکل را به حداقل رسانده است. کشیدن بلورهای سنگین با قطر ۲۰۰ و ۳۰۰ میلی‌متر نیاز به استفاده از بذر

<sup>۸</sup> Necking

بزرگ‌تر و فرایند گردن‌گیری دارد تا بتواند وزن بیشتری از بلور را حفظ کند. این امر مطالعه دقیق‌تری را برای فرایند گردن‌گیری و کیفیت بذر تحمیل می‌کند. قابل ذکر است که رشد بلور ژرمانیوم بدون نابه‌جایی با قطر بزرگ به دلیل رسانش گرمایی کم و همچنین تنش برشی زیاد بحرانی، از بلور سیلیکن پردردستر است. بنابراین، تنش گرمایی بیشتری در داخل بلور ژرمانیوم رشد می‌کند و نابه‌جایی به سادگی می‌تواند تولید شود و گسترش یابد [۳۴]. اگرچه میدان دمایی تقریباً یکنواخت به نظر می‌رسد، میدان تنش‌های گرماکشسانی دارای مقدار بیشینه، هم در دیواره بلور و هم در فصل مشترک بلور-مذاب نزدیک محور اصلی می‌باشد. این نواحی، وقتی که تنش به مقدار بحرانی می‌رسد، برای ایجاد نابه‌جایی مناسبند. در مطالعه ما از رشد ژرمانیوم، با افزایش ارتفاع بلور، فصل مشترک بلور-مذاب به سمت مذاب تحذب پیدا می‌کند، در نتیجه تنش‌های گرمایی افزایش یافته و بنابراین چگالی نابه‌جایی متناظر بزرگ‌تر می‌شود.

نتایج مقاله حاضر توافق خوبی با محاسبات انجام شده در [۳۴] برای تک‌بلور ژرمانیوم دارد. همچنین، در [۳۵] برای سیلیکن که تشابه ساختاری با ژرمانیوم دارد، نتایج ما تعمیم‌پذیر است. در نهایت، در این مقاله با استفاده از شبیه‌سازی‌های عددی نتایج زیر به دست می‌آید:

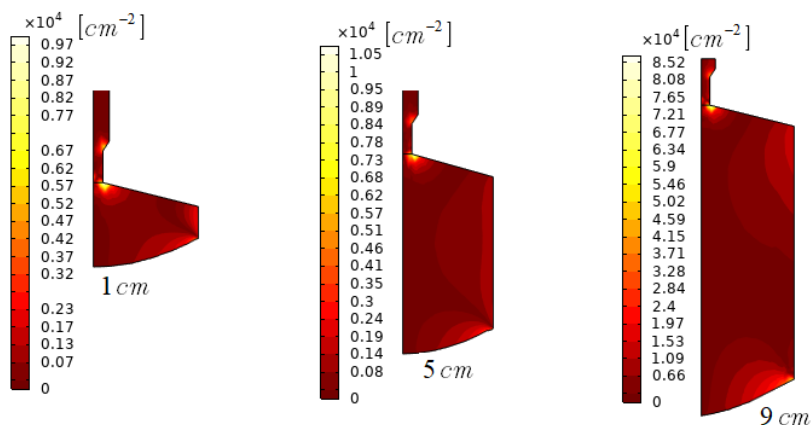
۱. افزایش ارتفاع بلور سبب حرکت به سمت بالا در مکان بیشترین دما در مذاب مطابق شکل ۶، در سامانه تولید گرمای القایی می‌شود.

۲. با استفاده از مقدار و شار گرمای مشخصه در داخل بلور می‌توان نتیجه گرفت که تنش فون‌مایسس و همچنین توزیع چگالی نابه‌جایی در بلور در حال رشد در حال تغییر است.

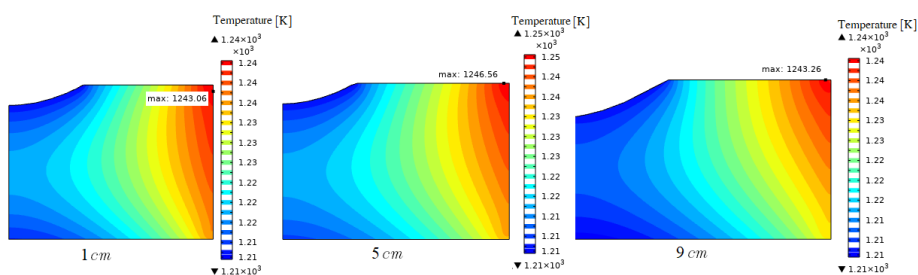
۳. با افزایش ارتفاع بلور، جبهه تبلور تحذب بیشتری به سمت مذاب می‌یابد و بنابراین تنش‌های گرمایی افزایش یافته و در نهایت چگالی نابه‌جایی نیز بزرگ‌تر می‌شود.

با استفاده از شبیه‌سازی‌های دینامیکی همراه با روش تحلیل الکساندرهاسن-سامینو<sup>۹</sup> می‌توان محاسبه دقیق‌تری از چگالی نابه‌جایی در بلور در حال رشد به دست آورد. در نهایت، یک هندسه نامتقارن که در سامانه واقعی وجود دارد باعث سه‌بعدی شدن میدان جریان و میدان دمایی در کوره رشد می‌شود، که به نوبه خود در کیفیت بلور تاثیر می‌گذارد. به همین دلیل، برای به دست آوردن نتایج بهتر، یک محاسبه سه‌بعدی باید انجام شود.

<sup>۹</sup> Alexander-Haasen-Sumino



شکل ۵ میدان توزیع چگالی نا به جایی  $n_{dis}$  برای بلورهایی به طول‌های  $1\text{ cm}$ ،  $5\text{ cm}$  و  $9\text{ cm}$ .



شکل ۶ حرکت به سمت بالا در مذاب برای بیشترین دما با افزایش ارتفاع بلور.

## منابع

- [1] Claeys, C., and Simoen, E. Germanium-based technologies: from materials to devices. elsevier, 2011.
- [2] Pamplin, B. R. Crystal Growth: International Series on the Science of the Solid State. Elsevier, 2013.
- [3] Nada, H. Computer simulations: Essential tools for crystal growth studies, 2018.
- [4] Hurlle, D. T. Crystal pulling from the melt. Springer Science & Business Media, 2012.
- [5] Van den Bogaert, N., and Dupret, F. Dynamic global simulation of the czochralski process i. principles of the method. Journal of crystal growth 171, 1-2 (1997), 65-76.
- [6] Volk, J. Handbook of crystal growth 2b, ch. 14, 1994.
- [7] Van den Bogaert, N., and Braet, J. Time-dependent simulation of czochralski growth: application to the production of germanium crystals. In EMC'91: Non-Ferrous Metallurgy-Present and Future. Springer, 1991, pp. 483-491.
- [8] Van den Bogaert, N., and Dupret, F. Dynamic global simulation of the czochralski process i. principles of the method. Journal of crystal growth 171, 1-2 (1997), 65-76.

- [9] Depuydt, B., Theuwis, A., and Romandic, I. Germanium: From the first application of czochralski crystal growth to large diameter dislocation-free wafers. *Materials Science in Semiconductor Processing* 9, 4-5 (2006), 437-443.
- [10] Tavakoli, M., and Wilke, H. Numerical investigation of heat transport and fluid flow during the seeding process of oxide czochralski crystal growth part 1: non-rotating seed. *Crystal Research and Technology: Journal of Experimental and Industrial Crystallography* 42, 6 (2007), 544-557.
- [11] Singh, S., Desai, D., Singh, A., Sen, S., Gadkari, S., and Gupta, S. Growth of germanium single crystals by czochralski technique. In *AIP Conference Proceedings* (2012), vol. 1447, American Institute of Physics, pp. 1091-1092.
- [12] Kirpo, M. Global simulation of the czochralski silicon crystal growth in ansys fluent. *Journal of crystal growth* 371 (2013), 60-69.
- [13] Van Goethem, L., Van Maele, L. P., and Van Sande, M. Trade-offs using poly versus monocrystalline germanium for infrared optics. In *Infrared and Optical Transmitting Materials* (1986), vol. 683, International Society for Optics and Photonics, pp. 160-165.
- [14] Hibbard, D., Neff, B., Reinbolt, B., Klinger, R., and Stout, M. Critical performance differences of monocrystalline versus polycrystalline germanium for optical applications.
- [15] Gao, B. and Kakimoto, K. Three-dimensional analysis of dislocation multiplication in single-crystal silicon under accurate control of cooling history of temperature. *Journal of crystal growth*, 396:7-13, 2014.
- [16] B Gao, Nakano, S., Harada, H., Miyamura, Y. and Kakimoto, K. Three-dimensional analysis of dislocation multiplication during thermal process of grown silicon with different orientations. *Journal of Crystal Growth*, 474:121-129, 2017.
- [17] Honarmandnia, M., Tavakoli, MH, and Sadeghi, H. Global simulation of an rf czochralski furnace during different stages of germanium single crystal growth, part ii: to investigate the effect of the crucible's relative position against the rf coil on the isotherms, low fields and thermo-elastic stresses. *Cryst Eng Comm*, 19(3):576-583, 2017.
- [18] Ryckmans, Y., Nicodeme, P., and Dupret, F. Numerical simulation of crystal growth: Influence of melt convection on global heat transfer and interface shape. *Journal of crystal growth* 99, 1-4 (1990), 702-706.
- [19] Bhihe, C., Mataga, P., Hutchinson, J., Rajendran, S., and Kalejs, J. Residual stresses in crystal growth. *Journal of Crystal Growth* 137, 1(1994), 86-90.
- [20] Hetnarski, R. B., Eslami, M. R., and Gladwell, G. *Thermal stresses: advanced theory and applications*, vol. 41. Springer, 2009.
- [21] Fang, H., Zheng, L., Zhang, H., Hong, Y., and Deng, Q. Reducing melt inclusion by submerged heater or baffle for optical crystal growth. *Crystal Growth and Design* 8, 6 (2008), 1840-1848. Hetnarski, R. B., Eslami, M. R., and Gladwell, G. *Thermal stresses: advanced theory and applications*, vol. 41. Springer, 2009.
- [22] Hetnarski, R. B., Eslami, M. R., and Gladwell, G. *Thermal stresses: advanced theory and applications*, vol. 41. Springer, 2019.
- [23] Hetnarski, R. B., and Eslami, R. B. *Theory of elasticity and thermal stresses: explanations, problems and solutions*. Dordrecht: Springer, 2013.
- [24] Boley, B. A., and Weiner, J. H. *Theory of thermal stresses*. Courier Corporation, 2012.
- [25] Dokos, S. *Modelling organs, tissues, cells and devices: using Matlab and Comsol multiphysics*. Springer, 2017.
- [26] Fainberg, J., and Leister, H.-J. Finite volume multigrid solver for thermo-elastic stress analysis in anisotropic materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 137, 2 (1996), 167-174.



- [27] Fang, H., Pan, Y., Zheng, L., Zhang, Q., Wang, S., and Jin, Z. To investigate interface shape and thermal stress during sapphire single crystal growth by the cz method. *Journal of crystal growth* 363 (2013), 25–32v
- [28] Hull, D., and Bacon, D. J. *Introduction to dislocations*. Butterworth-Heinemann, 2001.
- [29] Rudolph, P. *Handbook of crystal growth: Bulk crystal growth*. Elsevier, 2014.
- [30] Depuydt, B., Boone, P. M., Union, P., Muys, P. F., Vyncke, D., and Goessens, C. Interferometric characterization of stress birefringence in germanium. In *Optical Inspection and Micromasurements II* (1997), vol. 3098, International Society for Optics and Photonics, pp. 559–565.
- [31] Billig, E. Some defects in crystals grown from the melt- i. Defects caused by thermal stresses. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* 235, 1200 (1956), 37–55.
- [31] Bennett, D., and Sawyer, B. Single crystals of exceptional perfection and uniformity by zone leveling. *Bell System Technical Journal* 35, 3 (1956), 637–660.
- [33] Belyaev, A., Vasilevskaya, V., and Miselyuk, E. Investigation of the effect of certain factors on formation of dislocations during crystallization and on the dislocation states in germanium monocrystals. *SOVIET PHYSICS-SOLID STATE* 2, 2 (1960), 208–214.
- [34] Tavakoli, M. H., Renani, E. K., Honarmandnia, M., and Ezheiyan, M. Computational analysis of heat transfer, thermal stress and dislocation density during resistively czochralski growth of germanium single crystal. *Journal of Crystal Growth* 483 (2018), 125–133.
- [35] Smirnova, O., Durnev, N., Shandrakova, K., Mizitov, E., and Soklakov, V. Optimization of furnace design and growth parameters for si cz growth, using numerical simulation. *Journal of Crystal Growth* 310, 7-9 (2008), 2185–2191.