

蓝宝石基 GaN 薄膜的热应力模拟分析

董位 左然 赖晓慧 师瑀草

(江苏大学能源与动力工程学院, 江苏 镇江 212013)

摘要 利用有限元分析软件 ANSYS 对蓝宝石基 GaN 薄膜的应力进行了模拟分析,并通过理论计算验证了其合理性。模拟出了蓝宝石基 GaN 薄膜应力的分布情况。分析了应力与沉积温度、薄膜厚度、衬底厚度的关系,同时研究了不均匀温度分布对应力的影响。模拟结果显示:薄膜上表面在径向上,中心处热应力最大,薄膜边缘应力发生了突降,其他部分应力分布比较均匀。研究表明沉积温度升高、薄膜厚度减小以及衬底厚度增大都会使热应力变大。衬底径向温度不均匀时,热应力有增大的趋势,且温差越大,热应力就越大。

关键词 薄膜; GaN 薄膜; 热应力; 沉积温度; 数值模拟

中图分类号 TB43 **文献标识码** A **doi:** 10.3788/LOP50.073101

Simulation of Stresses in GaN Thin Film on Sapphire

Dong Wei Zuo Ran Lai Xiaohui Shi Juncao

(School of Energy and Power Engineering, Jiangsu University, Zhenjiang, Jiangsu 212013, China)

Abstract Finite element analysis software ANSYS is used to calculate the stresses in GaN film on sapphire, and the results was proved to be reasonable by theoretical calculation. The stress distribution of GaN film on sapphire is simulated. The dependence of stress on deposition temperature, film thickness and substrate thickness is analyzed. The effect of non-uniform temperature distribution on stresses is also discussed. The results show that a largest thermal stresses appears in the center, a sharp reducing of stress occurs at the film edge and the rest parts are relatively uniform. When the deposition temperature increases, the film thickness reduce or the substrate thickness increases, thermal stresses will increase. When the radial direction temperature has a non-uniform distribution in the sapphire substrate, the film stress will increase, and the larger difference of temperature is, the larger thermal stress in the film will be.

Key words thin films; GaN film; thermal stresses; deposition temperature; numerical simulation

OCIS codes 310.6870; 230.0230; 160.3380

1 引言

Ⅲ族氮化物半导体薄膜材料^[1](GaN、AlN、InN 等二元或三元化合物)具有优异的光电性能。通过调整Ⅲ族氮化物的成分,其禁带宽度可以覆盖从红外到紫外的所有波长范围,是迄今制造高效发光二极管(LED)最为理想的材料^[2]。由于很难得到大尺寸的 GaN 体单晶材料,到目前为止,高质量 GaN 基器件通常都是以蓝宝石、SiC^[3]或 Si^[4]等材料为衬底,通过异质外延方法制备。与 SiC 和 Si 等相比,蓝宝石以其技术成熟、尺寸大、价格较低等优点,成为目前应用最为广泛的衬底材料。但是蓝宝石衬底与 GaN 外延层之间的晶格失配高达 13.3%,热膨胀系数差异也很显著^[5]。这会导致 GaN 在高温生长后的降温过程中产生较大的张应力而出现微裂纹,很难得到满足器件质量要求的 GaN 外延材料。

近年来不少学者对薄膜应力的成因和分布情况进行了研究。Tae SuOh 等^[6]通过拉曼散射和光致发光的方法测量了翘曲后蓝宝石衬底上 GaN 薄膜的微观空间应力分布情况,指出在凸状图案的蓝宝石上生长 GaN,通过减小本征点缺陷可以提高薄膜质量。吕建国等^[7]分析了晶格失配对薄膜应力的影响,指出当薄膜的厚度小于临界厚度时,将不发生位错,但会降低薄膜的质量甚至引起薄膜失效。因此在沉积薄膜时,薄膜

收稿日期: 2013-03-15; **收到修改稿日期:** 2013-04-09; **网络出版日期:** 2013-05-31

基金项目: 国家自然科学基金(61176009)

作者简介: 董位(1987—),男,硕士研究生,主要从事薄膜应力模拟分析方面的研究。E-mail: dw616585@126.com

导师简介: 左然(1955—),男,博士,教授,博士生导师,主要从事传热传质理论与应用和新能源等方面的研究。

E-mail: rzuo@jus.deu.cn

的厚度要大于临界值。伊甲运等^[8]研究了 Si(111)衬底上 GaN 材料中插入 1~2 层低温 AlN 薄层后其应力的变化。通过拉曼散射和室温光荧光谱测试分析发现, Si(111)衬底上 GaN 材料存在的是张应力, 插入低温 AlN 薄层后 GaN 材料的应力明显减小, 并且 GaN 材料的表面光亮无裂纹。

本文以蓝宝石衬底上生长 GaN 薄膜为研究对象, 利用 ANSYS 有限元分析软件对 GaN 薄膜在退火冷却阶段产生的热应力进行模拟计算与分析, 获得了薄膜热应力的大小和分布情况, 并分析了不同薄膜沉积温度和厚度下热应力的变化情况。

2 理论分析

薄膜中的应力受多方面因素的影响, 其中薄膜沉积工艺、热处理工艺以及材料本身的机械特性是主要影响因素^[9]。按照应力的产生根源可以将薄膜应力^[10]分为本征应力和热应力。本征应力又称为内应力, 是薄膜在沉积环境中产生的(如温度、压力、气流速率等), 它的成因比较复杂, 目前还没有系统的理论对此进行解释, 如晶格失配^[11]、杂质介入、晶格重构、相变等均会产生内应力。热应力是由于基底与薄膜之间热膨胀系数的差异引起的, 成膜时基片温度不同于应力测量温度及成膜过程中温度分布不均匀会导致热应力。薄膜的热应力可近似表示为^[12]

$$\sigma_{th} = \frac{E}{1 - \nu_f} \int_{T_1}^{T_2} (\alpha_s - \alpha_f) dT,$$

式中 E_f 和 ν_f 为薄膜的杨氏模量和泊松比, α_s 和 α_f 分别为基底和薄膜的热膨胀系数, T_1 为室温, T_2 为薄膜的沉积温度。

按应力的性质, 薄膜应力在作用方向上分为张应力和压应力^[13]。若薄膜具有沿膜面膨胀的趋势则基底对薄膜产生压应力; 相反, 薄膜沿膜面的收缩趋势造成张应力, 如图 1 所示。一般定义张应力为正值, 压应力为负值。

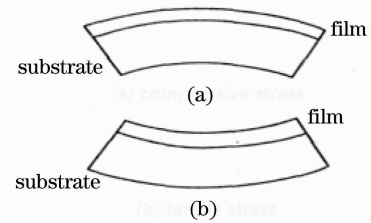


图 1 薄膜中(a)压应力与(b)张应力的示意图
Fig. 1 Schematic diagram of (a) compressive stress and (b) tensile stress in thin film

3 模型的建立

本文采用有限元分析软件 ANSYS 对薄膜的热应力进行模拟分析。考虑到蓝宝石晶片上生长的 GaN 薄膜具有二维轴对称性, 同时也为了减少网格数量、简化计算, 取薄膜的一个截面进行模拟计算。实际模型是在直径为 50.8 mm、厚度为 430 μm 的蓝宝石晶片上沉积厚度为 5 μm 的 GaN 薄膜。根据 GaN 薄膜的金属有机物化学气相沉积(MOCVD)生长条件^[14], 设基底温度为 1300 K, 环境温度 300 K。在 1300 K 高温下的材料物性参数见表 1^[15]。

表 1 材料的物性参数^[15]

Table 1 Physical property parameters of materials^[15]

Material	Density / (kg/m^3)	Specific heat/ [$\text{J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$]	Thermal conductivity / [$\text{W}/(\text{m} \cdot \text{K})$]	Thermal expansion coefficient /($10^{-6}/\text{K}^{-1}$)	Young's modulus / GPa	Poisson's ratio
Sapphire	3980	755	4	7.5	352	0.25
GaN	6110	355	210	5.6	210	0.17

在建模过程中, 选择 Coupled Field PLANE13 单元类型, 模型建立完成后, 进行网格划分, 划分网格过程采用的是智能划分(Smart size)。

为了便于分析, 计算过程中不考虑瞬态效应的影响, 忽略薄膜外延生长过程中材料性能的变化, 将薄膜与基片看成是各向同性的弹性材料。对薄膜的中心处施加对称的边界条件, 将原点的 X、Y 的自由度位移设为 0, 即限制其刚体的位移。模型如图 2 所示。

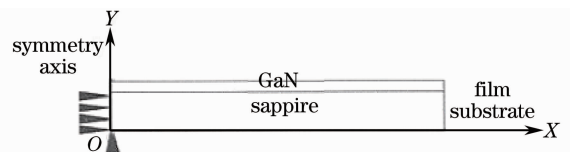


图 2 蓝宝石基 GaN 薄膜应力模型示意图
Fig. 2 Model for analyzing the stress in GaN thin film on sapphire substrate

4 结果及讨论

由于蓝宝石衬底的热膨胀系数大于 GaN 的热膨胀系数,在由室温加热至沉积温度的过程中,蓝宝石受热膨胀的较快,而 GaN 受热膨胀的较慢,因此薄膜受张应力会发生凹形翘曲,如图 3 所示。

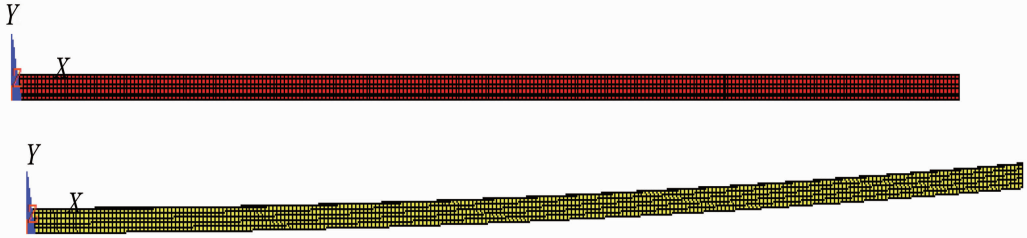


图 3 加热前后的模型截面图

Fig. 3 Diagram of the model cross profile before and after heated

4.1 GaN 薄膜应力的分布情况

利用有限元分析软件 ANSYS 模拟出来的薄膜上表面从中心到边界应力分布曲线如图 4 所示,由此可以看出,模拟计算出的薄膜应力是张应力,其值为 0.4796 GPa,而利用(1)式计算的理论值为 0.4807 GPa,两者十分接近,说明所建立的有限元模型是合理的。而且在薄膜上表面的径向上,中心的应力最大,在薄膜边缘发生应力突降,其余部分应力分布较均匀。

4.2 薄膜应力与沉积温度、薄膜厚度以及衬底厚度的关系

为了了解热应力与沉积温度的关系,在模拟过程中,只改变薄膜的沉积温度,记录下相应的热应力值,并与(1)式计算的相应热应力进行对比,温度选取范围为 900~1300 K。如图 5 所示,随着薄膜沉积温度的增加薄膜的热应力近似线性增大。模拟值与理论值一致,因此,降低薄膜的沉积温度,可以减小热应力。

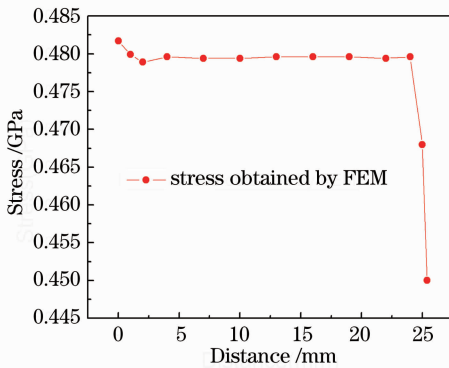


图 4 薄膜上表面从中心到边界应力分布图

Fig. 4 Stress distribution on the film surface from the center to boundary

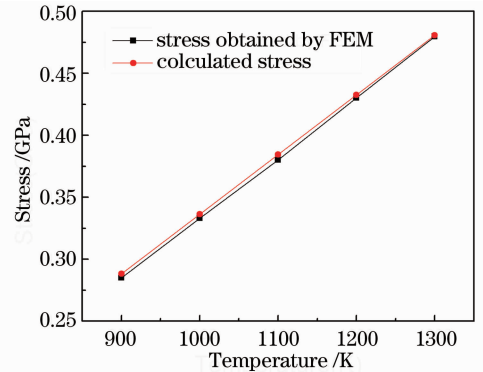


图 5 应力与温度的关系

Fig. 5 Dependence of stress on temperature

为了了解热应力与薄膜厚度的关系,保持衬底厚度 430 μm 不变,薄膜厚度分别为 1、3、5、7、9 μm ,其他材料参数、边界条件及施加的载荷都不变,分别进行模拟计算。通过(1)式计算出相应热应力理论值。结果如图 6 所示。从图中可以看出,随着薄膜厚度的增加,热应力减小。因此,在实际过程中可以适当增加薄膜厚度来降低薄膜热应力。

为了了解热应力与衬底厚度的关系,保持薄膜厚度 5 μm 不变,衬底厚度分别为 230、330、430、530、630 μm ,其他材料参数、边界条件及施加的载荷都不变,分别进行模拟计算。通过(1)式计算出相应热应力理论值。结果如图 7 所示。从图中可以看出,随着衬底厚度的增加,薄膜的热应力增加。因此,在实际过程中可以适当减小衬底厚度来降低薄膜热应力。

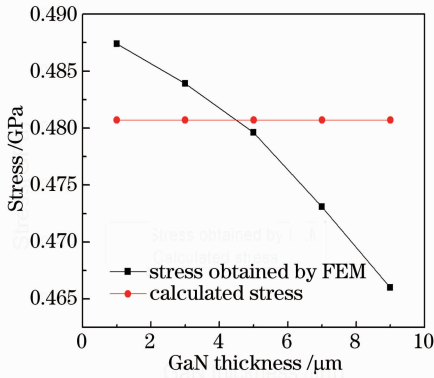


图6 应力与薄膜厚度的关系

Fig. 6 Dependence of stress on film thickness

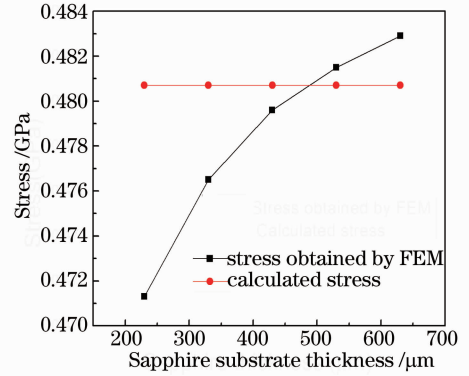
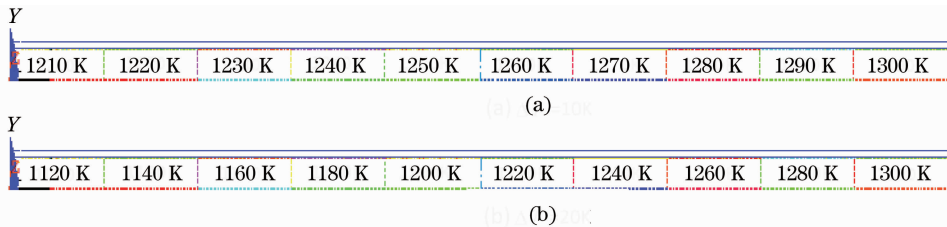


图7 应力与衬底厚度的关系

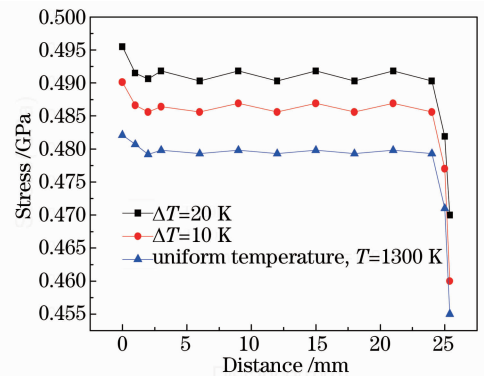
Fig. 7 Dependence of stress on substrate thickness

4.3 薄膜应力与温度均匀性的关系

为了了解不均匀的衬底温度对薄膜热应力的影响,将蓝宝石衬底横截面分成十等份,给每段衬底施加不同的温度载荷,相邻两段温度相差分别为 10 K 和 20 K。温差为 10 K 时,温度从中心的 1210 K 均匀递增到边缘的 1300 K;温差为 20 K 时,温度从中心的 1120 K 均匀递增到边缘的 1300 K,如图 8 所示。衬底厚度为 430 μm ,薄膜的厚度为 5 μm ,其他材料参数保持不变,进行模拟计算。又在此模型中蓝宝石衬底上施加 1300 K 的均匀温度进行模拟计算。绘出这三种情况下薄膜上表面的应力分布曲线如图 9 所示。

图8 蓝宝石衬底上施加温度载荷的分布。(a) $\Delta T=10$ K; (b) $\Delta T=20$ KFig. 8 Dependence of temperature loading on sapphire substrate. (a) $\Delta T=10$ K; (b) $\Delta T=20$ K

从图 9 可以看出:当衬底温度在 1210~1300 K 之间均匀变化,即相邻两段衬底温度相差 10 K 时,GaN 薄膜应力在 0.486 GPa 上下波动,比衬底温度为 1300 K 的均一温度时模拟计算得到的 GaN 薄膜应力要大。当衬底温度在 1120~1300 K 之间均匀变化,即相邻两段衬底温度相差 20 K 时,GaN 薄膜应力在 0.491 GPa 上下波动,比温差为 10 K 时的薄膜应力大。也就是说,衬底径向上不均匀的温度分布带来了更大的热应力,且温度变化越大,薄膜应力就越大。因此,在实际过程中应尽量使蓝宝石衬底的径向温度更加均匀以减小薄膜应力。

图9 不同温度分布下薄膜上表面中心到边界应力分布图
Fig. 9 Stress distribution on the film surface from the center to boundary under different temperature distributions

5 结论

利用有限元分析软件 ANSYS 对蓝宝石衬底上 GaN 薄膜的热应力进行数值模拟,并通过理论计算验证了所模型建立的合理性。得到了 GaN 薄膜应力值及应力分布情况,分析了应力与沉积温度、薄膜厚度、衬底厚度的关系,同时研究了不均匀温度分布对应力的影响。得出以下结论:薄膜上表面,中心热应力最大,在边缘发生应力突降,其余部分的热应力分布较均匀;沉积温度的升高、薄膜厚度的减小以及衬底厚度的增加,都会使薄膜热应力增大;当衬底径向温度不均匀时,薄膜应力有增大的趋势,而且温差越大,薄膜热应力就越大。

参 考 文 献

- 1 J T Torvik, J I Pankove, B Van Zeghbroeck. GaN/SiC heterojunction bipolar transistor[J]. Solid-State Electronics, 2000, 44(7): 1229—1233.
- 2 Xiong Yijing, Zhang Meng, Xiong Chuanbing, *et al.*. Investigation of strain of GaN light-emitting diode films transferred to metal substrate from Si(111)[J]. Chinese J Luminescence, 2010, 31(4): 533—537.
熊贻婧, 张 萌, 熊传兵, 等. Si 衬底 GaN 基 LED 外延薄膜转移至金属基板的应力变化[J]. 发光学报, 2010, 31(4): 533—537.
- 3 Li Lianbi, Chen Zhiming. Influence of growth temperature on photoluminescence of thin SiCGe films on 6H-SiC[J]. Chinese J Luminescence, 2010, 31(3): 373—377.
李连碧, 陈治明. 生长温度对 6H-SiC 上 SiCGe 薄膜发光特性的影响[J]. 发光学报, 2010, 31(3): 373—377.
- 4 Jianjun Tang, Ting Liang, Weili Shi, *et al.*. The testing of stress-sensitivity in heteroepitaxy GaN/Si by Raman spectroscopy[J]. Appl Surf Sci, 2011, 257(21): 8846—8849.
- 5 Qiao Guanru. Semiconductor Technology Principles of Chemical Engineering[M]. Nanjing: Jiangsu Science and Technology Publishing House, 1979. 57.
乔冠儒. 半导体工艺化学原理[M]. 南京: 江苏科学技术出版社, 1979. 57.
- 6 Tae SuOh, Ah Hyun Park, Hyun Jeong, *et al.*. Spatial stress distribution and optical properties of GaN films grown on convex shape-patterned sapphire substrate by metalorganic chemical vapor deposition[J]. J Alloys and Compounds, 2011, 509(6): 2952—2956.
- 7 Lü Jianguo, Wang Chengbiao, Yu Xiang, *et al.*. Analysis on lattice mismatch stress on films[J]. Science and Technology Innovation Herald, 2008, 20: 14—15.
吕建国, 王成彪, 于 翔, 等. 薄膜的晶格失配应力分析[J]. 科技创新导报, 2008, 20: 14—15.
- 8 Yin Jiayun, Liu Bo, Zhang Sen, *et al.*. Stress analysis of GaN materials grown on Si (111) substrates [J]. Micronanoelectronic Technology, 2008, (12): 703—705.
伊甲运, 刘 波, 张 森, 等. Si(111)衬底上 GaN 外延材料的应力分析[J]. 微纳电子技术, 2008, (12): 703—705.
- 9 L B Freund, S Suresh. Thin Film Materials: Stress, Formation of Defect and Evolution of the Surface[M]. Lu Lei, Tao Nairong, Zhang Guangping *et al.* Transl.. Beijing: Science Press, 2007. 49.
L B Freund, S Suresh. 薄膜材料——应力、缺陷的形成和表面演化[M]. 卢 磊, 陶乃镛, 张广平等译. 北京: 科学出版社, 2007. 49.
- 10 Shao Shuying, Fan Zhengxiu, Fan Ruiying, *et al.*. A review of study of stress in thin films[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2005, 42(1): 22—27.
邵淑英, 范正修, 范瑞瑛, 等. 薄膜应力研究[J]. 激光与光电子学进展, 2005, 42(1): 22—27.
- 11 Xiao Qiling, Shao Shuying, Shao Jianda, *et al.*. Influences of oxygen partial pressure and deposition rate on residual stress of YSZ thin films[J]. Chinese J Lasers, 2009, 36(5): 1195—1199.
肖祁陵, 邵淑英, 邵建达, 等. 氧分压和沉积速率对 YSZ 薄膜残余应力的影响[J]. 中国激光, 2009, 36(5): 1195—1199.
- 12 Jiang Zhao, Chen Xuegeng. Stress release and control of thin films materials used in devices fabrication[J]. J Vacuum Science and Technology, 2008, 28(5): 17—21.
蒋 钊, 陈学庚. 薄膜应力控制技术研究现状[J]. 真空科学与技术学报, 2008, 28(5): 17—21.
- 13 Zhang Yaoping, Zhang Yundong, Ling Ning, *et al.*. Finite element analysis based on the residual stress of thin film[J]. Chinese J Lasers, 2005, 42(10): 23—26.
张耀平, 张云洞, 凌 宁, 等. 薄膜残余应力有限元分析研究[J]. 激光与光电子学进展, 2005, 42(10): 23—26.
- 14 A Paul, P K Chael, K R Avijit. Film-stress-induce deformation of EUV reflective optics [C]. SPIE, 1999, 3676: 724—733.
- 15 Lei Zhang, Yongliang Shao, Xiaopeng Hao, *et al.*. Comparison of the strain of GaN films grown on MOCVD-GaN/Al₂O₃ and MOCVD-GaN/SiC samples by HVPE growth[J]. J Crystal Growth, 2011, 334: 62—66.