# Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底上GaN薄膜热应力和变形极差分析

# 王小增

嘉应学院电子信息工程学院,广东 梅州 514015

**摘要** 建立了氮化镓(GaN)薄膜和氧化铝(Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>)衬底三维有限元模型模拟因两种材料热膨胀系数不同导致的温度应 力和变形。进行了不同沉积温度、GaN薄膜厚度、Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底厚度和直径下的薄膜热应力和变形模拟正交实验。定量 分析了各因素对薄膜热应力和边缘变形的影响,确定了使薄膜热应力和边缘变形最小的最佳因素水平组合。薄膜应 力理论和数值解相差小于1.4%,建立的有限元模型可以用于薄膜应力和变形的分析。影响 GaN薄膜热应力的因素 次序为沉积温度、GaN薄膜厚度、Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底厚度、衬底直径,最佳因素水平组合为A<sub>1</sub>B<sub>3</sub>C<sub>3</sub>D<sub>1</sub>。影响 GaN薄膜边缘变形 的因素次序为Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底直径、GaN薄膜厚度、Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底厚度、沉积温度,最佳因素水平组合为A<sub>1</sub>B<sub>3</sub>C<sub>1</sub>D<sub>3</sub>。 关键词 薄膜;氮化镓(GaN)薄膜;极差分析;氧化铝(Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>)衬底;热应力;变形 中图分类号 TB43 **文献标识码** A doi: 10.3788/LOP52.041602

# Range Analysis of Thermal Stress and Displacement of GaN films on Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Substrate

#### Wang Xiaozeng

School of Electronic and Information Engineering, Jiaying University, Meizhou, Guangdong 514015, China

**Abstract** A three–dimensional (3D) Ansys model which is comprised of the GaN films and  $Al_2O_3$  substrate is developed to simulate the thermal stress and displacement from the difference of thermal expansion coefficient between two kinds of materials. The 3D model is used to analyze the thermal stress and displacement in GaN films under different deposition temperatures, GaN films thickness,  $Al_2O_3$  substrate thickness and diameters by the simulating orthogonal test. The influence of the above mentioned factors on the thermal stress and displacement in GaN films is analyzed, and the optimum level combination of factors to minimize the thermal stress and displacement in GaN films is determined. The error between the theoretical and numerical solution of GaN films stress is less than 1.4%. The developed model can be used to analyze the minimum thermal stress and displacement in GaN films. From big to small, the order of the effect of all kinds of factors on the thermal stress in GaN films is the deposition temperature, films thickness, substrate thickness and diameter. The most optimum combination is  $A_1B_3C_3D_1$  to minimize the thermal stress. For the displacement in GaN films, the order is the substrate diameter, films thickness, substrate thickness and deposition temperature, and the most optimum combination is  $A_1B_3C_3D_1$  for the deposition temperature.

**Key words** thin films; GaN films; range analysis;  $Al_2O_3$  substrate; thermal stress; displacement **OCIS codes** 160.3380; 310.6870; 230.3990

1 引 言

氮化镓(GaN)所属的 III 族氮化物半导体薄膜材料性能优异,在光电和微电子器件中有广泛的应用前 景。GaN 半导体材料禁带宽度在3.4~6.2 eV之间变化,覆盖了从红外到紫外的所有波长范围,是制作高效发 光二极管(LED)的理想材料,大尺寸的GaN 单晶材料很难得到,到目前为止,GaN 基器件通常在蓝宝石、碳 化硅(SiC)和硅(Si)衬底上通过异质外延的方法获得<sup>11-31</sup>。

用于 GaN 生长的最普遍的衬底材料是蓝宝石,其优点是化学稳定性好、对可见光无吸收、价格适中,制造技术相对成熟<sup>[4-6]</sup>。蓝宝石衬底材料的热膨胀系数为7.5×10<sup>-6</sup>℃<sup>-1</sup>,GaN 外延材料为5.59×10<sup>-6</sup>℃<sup>-1</sup>。当同一

收稿日期: 2014-11-06; 收到修改稿日期: 2014-11-18; 网络出版日期: 2015-03-26

作者简介: 王小增(1973—), 男, 硕士, 副教授, 主要从事薄膜应力模拟方面的研究。E-mail: 21772778@qq.com

种材料内部受热不均,或两种材料的热膨胀系数差异导致材料内部产生热应力,热应力超过材料的承载极限会导致材料的开裂失效<sup>[7–9]</sup>。同样,蓝宝石衬底和GaN外延薄膜的热膨胀系数差异导致GaN外延膜高温生长后的降温过程中,在薄膜表面出现较大的拉应力导致薄膜塑性变形,薄膜变薄,内部应力增大,导致薄膜出现微裂纹,最后超过其承载能力而断裂。即便薄膜没有断裂,GaN外延薄膜的发光效率和磊晶质量会受到影响,从而影响到LED芯片的良率。因为多层薄膜结构热应力理论计算困难<sup>100</sup>,现有文献多采用Ansys分析蓝宝石衬底上GaN外延薄膜在冷却阶段的热应力,研究表明沉积温度和薄膜厚度对GaN外延薄膜应力的影响较大<sup>[11–12]</sup>。为此有研究采用低温和高温氮化铝(AIN)复合缓冲层的方法在蓝宝石衬底上外延生长Al-GaN/AIN结构,并进行应变分析<sup>[13]</sup>。也有研究采用金属有机化合物化学气相沉积(MOCVD)技术在r面蓝宝石衬底上采用两步AIN缓冲层法外延制备 a面GaN薄膜。利用高分辨X射线衍射技术和Raman散射技术分析样品的质量以及外延膜中的残余应力。高分辨X射线和Raman散射谱的残余应力研究表明,采用两步AIN缓冲层法制备的a面GaN薄膜不同,是由引入AIN带来的晶格失配和热失配的变化引起的<sup>[14-17]</sup>。

影响 GaN 薄膜热应力的因素很多,现有文献多采用单一方法分析各个因素的影响,为此本文建立 GaN 薄膜和 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底三维有限元分析模型,根据四因素三水平正交实验设计确定模型中 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底的直径和厚度、GaN 外延薄膜的厚度、沉积温度,计算 GaN 薄膜沉积过程中因温度变化导致的热应力和边缘变形,定量分析 4 个因素对 GaN 薄膜热应力和边缘变形的影响,确定使 GaN 薄膜热应力和边缘变形最小的最佳因素水平组合。

# 2 薄膜应力理论分析

薄膜通常需要在高温条件下沉积在衬底材料上,在薄膜制备过程中,温度的变化、薄膜和衬底材料的热膨胀系数差异导致薄膜和衬底材料内部产生热应力,因衬底材料厚度比薄膜厚度大很多,其热应力远远小于薄膜的热应力,因此薄膜热应力为分析的重点研究方向。根据薄膜和衬底材料热膨胀系数的不同,薄膜的应力状态如图1所示,温度没有变化时,薄膜和衬底没有变形,如图1(a)所示。薄膜温度应力为0;衬底热膨胀系数大于薄膜的热膨胀系数时,则在温度升高时薄膜发生翘曲,受到压应力作用,如图1(b)所示,薄膜容易发生分层和屈曲;衬底热膨胀系数小于薄膜的热膨胀系数时,则在温度升高时薄膜发生弯曲,受到拉应力作用,如图1(c)所示,薄膜容易发生断裂和龟裂。若温度降低,衬底热膨胀系数大于薄膜的热膨胀系数时,薄膜受到拉应力作用;衬底热膨胀系数小于薄膜的热膨胀系数时,薄膜受到压应力作用。薄膜应力可近似表达为<sup>111</sup>

$$\sigma_{\rm th} = \frac{E_{\rm f}}{1 - \upsilon_{\rm f}} \int_{T_{\rm f}}^{T_{\rm 2}} (\alpha_{\rm s} - \alpha_{\rm f}) \mathrm{d}t, \qquad (1)$$

式中 $\sigma_{th}$ 为薄膜温度应力,单位为MPa,  $E_{f}$ 为薄膜的弹性模量,单位为MPa,  $v_{f}$ 为薄膜的泊松比,  $\alpha_{s}$ 为衬底的热膨胀系数,单位为 $\mathbb{C}^{-1}$ ,  $\alpha_{f}$ 为薄膜的热膨胀系数,单位为 $\mathbb{C}^{-1}$ ,  $T_{2}$ 为终止温度,单位为 $\mathbb{C}$ ,  $T_{1}$ 为初始温度, 单位为 $\mathbb{C}$ 。



图1 薄膜应力状态示意图。(a)不受应力;(b)压应力;(c)拉应力

Fig.1 Schematic diagram of stresses in thin films. (a) Free stress; (b) compressive stress; (c) tensile stress

### 3 薄膜应力有限元模型

GaN 薄膜和 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底的三维(3D) 几何图形如图 2 所示。D为 GaN 薄膜和 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底的直径。为了分析直径对沉积过程中 GaN 薄膜热应力的影响,直径分别取 2、3、4 inch(1 inch=2.54 cm)。GaN 薄膜厚度  $t_2$ 分别为 4、 5、6  $\mu$ m, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底厚度  $t_1$ 分别为 300、400、500  $\mu$ m。Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底材料的弹性模量为 352 GPa, 泊松比取 0.25, 热膨

胀系数为7.5×10<sup>-6</sup>℃<sup>-1</sup>,GaN薄膜材料的弹性模量为210 GPa,泊松比取0.17,热膨胀系数为5.6×10<sup>-6</sup>℃<sup>-1[11]</sup>。

因为结构的对称性,为减少计算时间,取GaN薄膜和Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底3D几何图形的1/4分析GaN薄膜的热应力。Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底下表面中心施加全约束,限制其刚性位移。x坐标为0的截面上x向的位移为0,y坐标为0的截面上y向的位移为0,网格尺寸为1mm,以扫略方式生成的GaN薄膜和Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底有限元网格如图3所示。因GaN薄膜和Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底厚度小于1mm,所以两种材料在网格中均为单层结构。





Fig.3 Meshes of GaN films and Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> substrate in FEM

图 3 GaN 溥朋

Fig.2 3D geometric figure of GaN films and Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> substrate

Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底的有限元分析模型采用 Solid185实体单元类型,该单元用于构造 3D实体,单元通过 8个节点 定义,每个节点有*x*、*y*、*z*方向平移自由度,该单元具有超弹性、应力刚化、蠕变、大变形和大应变能力。GaN 薄膜采用 Solsh190 层状单元类型,该单元适用于各种厚度的壳体结构的建模,在拓扑学上表现为连续介质 实体单元,8个节点,每个节点3个自由度,可与其他连续介质单元相连接。忽略薄膜生长过程中 GaN 薄膜 和Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底材料物理性能的变化,将其假定为连续、均质、各向同性材料。在温度应力分析过程中,不考虑瞬 态温度变化的影响,只分析 GaN 薄膜热应力和变形的稳态数值。GaN 薄膜和 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底的直径为2 inch,GaN 薄膜厚度 *t*<sub>2</sub>为 4 µm,Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底厚度 *t*<sub>1</sub>为 300 µm。改变 GaN 薄膜和 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底的直径、GaN 薄膜和 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底 厚度、薄膜沉积温度,采用建立的有限元分析模型,计算 GaN 薄膜边缘某一点的热应力和*z*向的变形。根据 不同情况下应力和变形数据,分析 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底直径、GaN 薄膜、Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底厚度、薄膜沉积温度的影响。图4 为 GaN 薄膜热应力云图,图5 为 GaN 薄膜*z*向变形云图。



图 4 GaN 薄膜热应力云图 Fig.4 Nephogram of directional thermal stress in GaN films





代入 GaN 薄膜和 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 衬底的几何和物理参数,由薄膜应力理论(1)式计算得到的薄膜应力为 510 MPa,由 GaN 薄膜和 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底有限元分析模型得到的薄膜热应力为 502.8 MPa,误差小于 1.4%。说明建立的有限元 分析模型是合理的,可以用于 GaN 薄膜和 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底的应力和变形分析。

4 薄膜应力和变形正交实验设计

#### 4.1 正交实验基本理论

正交实验使用规范化的正交表进行,能够用较少的实验次数定量分析各因素对实验指标的影响程度,

#### 激光与光电子学进展

找出影响实验指标的主要因素、确定最佳的因素水平组合。

因素的水平为实验中因素变化的状态和条件或各个因素的具体数值。各个因素水平一般用阿拉伯数 字表示。为利于正交实验结果的分析,因素选用三个水平,水平通常取等间隔,另外各个因素水平应该是具 体的、数值可以在实验过程中更改,且其变化导致实验指标也跟着变化。正交实验的步骤主要包括实验设 计、实验实施、实验数据统计分析、解释实验结果、获取实验结论。极差指的是一组数据中的最大值与最小 值之差,也称为变异幅值。极差反映了一组数据的最大离散程度。极差*R*表达为

$$R = x_{\max} - x_{\min},\tag{2}$$

式中xmin为最小数据, xmax为最大数据。

正交实验设计的基础是正交表。用正交表设计出来的实验方案之所以合理,是因为其具有如下两个重要的特征:1)均衡搭配,即正交性,可以用较少的实验次数替代全部可能实验组合中好的、中等的、不好的搭配 组合,使选出的较少的搭配组合具有均衡的代表性;2)综合可比,即数据分析的依据,可把复杂的多因素实验 数据处理问题转化成单因素实验数据处理。通过实验数据的适当组合,可发现各组实验数据以及各因素影 响之间的某种可比性。最常用的标准型正交表的水平数为素数或素数整数幂的正交表,例如最常用的:L。 (3<sup>4</sup>),为四因素三水平正交表,实验次数为9次。

#### 4.2 正交实验水平设置

在MOCVD外延炉中,在Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底上制备GaN外延薄膜时,薄膜的应力和变形受到Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底的直径和 厚度、GaN外延薄膜的厚度和沉积温度等4个因素的影响。正交实验中各个因素水平的选取参考了市场上 常见的Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底的尺寸,以及GaN外延薄膜的制备工艺。根据四因素三水平正交实验要求,确定每种因素 的三个不同水平,如表1所示。薄膜的应力和变形的极差分析是采用建立的Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底和GaN外延薄膜有限 元模型,通过四因素三水平正交实验,找出每一因素不同水平最大值、最小值之差,分析Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底的直径、厚 度、GaN外延薄膜的厚度和沉积温度等4个因素对薄膜的应力和变形的影响次序,最终确定出减少薄膜应力 和变形的优化的水平搭配方案。设计薄膜的应力和变形正交实验方案,解决GaN外延薄膜的应力和变形过 大的问题。分析影响实验指标(即GaN薄膜的应力和变形越小越好)的主要因素,选取适当的因素水平组合 使薄膜的应力和变形最小。

Level	Substrate diameter /mm	Substrate thickness /µm	GaN films thickness /µm	Deposition temperature / $^{\circ}\!$
1	50.8	430	4	1080
2	101.6	530	5	1100
3	152.4	650	6	1120

表1 正交实验影响因素水平分配表 Table 1 Allocation table of orthogonal test influence factors

#### 4.3 正交实验结果

根据影响 GaN 外延薄膜应力和变形的因素及水平的多少,选择四因素三水平的正交表 L<sub>9</sub>(3<sup>4</sup>)进行薄膜 应力和变形的有限元模拟正交实验。不同因素各个水平的实验组合如表2所示,采用该表中提供的数据建 表2 四因素三水平实验方案和实验结果

Level	Substrate diameter	Substrate thickness	GaN films thickness	Deposition temperature	Films stress /MPa	Films displacement /µm
1	1	1	1	1	502.8	30.6
2	1	2	2	2	510.5	37.5
3	1	3	3	3	517.5	41.5
4	2	1	2	3	520.1	150.1
5	2	2	3	1	499.5	165
6	2	3	1	2	511.8	100.8
7	3	1	3	2	508.9	394.6
8	3	2	1	3	521.6	257.4
9	3	3	2	1	500.4	268.5

Table 2 Experimental scheme and results of 4 factors and 3 levels

#### 激光与光电子学进展

立 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底和 GaN 外延薄膜有限元模型确定不同实验条件下 GaN 外延薄膜应力和变形数据,实验结果填入表2中。表3、表4分别为 GaN 外延薄膜应力和变形分析计算结果。表3、表4中 K<sub>1</sub>为水平1下 GaN 外延薄膜应力和变形性能指标之和,K2为水平2下 GaN 外延薄膜应力和变形性能指标之和,K2为水平2下 GaN 外延薄膜应力和变形性能指标之和。表3、表4中 K<sub>1</sub>为水平1下 GaN 外延薄膜应力和变形性能指标的平均值, K<sub>2</sub>为水平2下 GaN 外延薄膜应力和变形性能指标平均值,K<sub>3</sub>为水平3下 GaN 外延薄膜应力和变形性能指标

表3 差	热应力	极差分析表	長(单位:MPa)
------	-----	-------	-----------

Factors	Substrate diameter /mm	Substrate thickness / $\mu m$	GaN films thickness /µm	Deposition temperature / $\!\!\!\!\!^{\mathcal{C}}$
$K_1$	1530.8	1531.8	1536.2	1502.7
$K_{2}$	1531.4	1531.6	1531	1531.2
$K_{\scriptscriptstyle 3}$	1530.9	1529.7	1525.9	1559.2
$K_{\scriptscriptstyle 1'}$	510.27	510.6	512.07	500.9
$K_{2'}$	510.47	510.53	510.33	510.4
$K_{\scriptscriptstyle 3'}$	510.3	509.9	508.63	519.73
R	0.2	0.7	3.44	18.83

表4 薄膜边缘变形极差分析表(单位:μm)

Table 4 Rang analysis of displacement in GaN films (unit:  $\mu m$ )

Factors	Substrate diameter /mm	Substrate thickness / $\mu$ m	GaN films thickness /µm	Deposition temperature / $\!\!\!^{\circ}\!\!\!^{\circ}\!\!C$
$K_1$	109.6	575.3	388.8	464.1
$K_{2}$	415.9	459.9	456.1	532.9
$K_3$	920.5	410.8	601.1	449
$K_{\scriptscriptstyle 1'}$	36.53	191.77	129.6	154.7
$K_{2'}$	138.63	153.3	152.03	177.63
$K_{\scriptscriptstyle 3'}$	306.83	136.93	200.37	149.67
R	270.3	54.84	70.77	27.96

# 5 正交实验结果极差分析

#### 5.1 薄膜热应力极差分析

1) 薄膜热应力直接分析

由表2中薄膜热应力数据可以直接看出,在5号实验(A₂B₂C₃D₁)条件下,即Al₂O₃衬底直径101.6 mm, Al₂O₃衬底厚度430 μm,GaN薄膜厚度6 μm和沉积温度1080 ℃时,GaN薄膜的热应力最小,为499.5 MPa。 这种条件是否为使GaN薄膜的热应力最小的因素水平最佳搭配还需要通过进一步极差分析确定。

2) 薄膜热应力极差分析

正交实验因素水平与 GaN 薄膜热应力指标关系如图 6 所示。图 6 以各因素水平为横坐标,以相应水平下的 GaN 薄膜热应力平均值为纵坐标。根据 GaN 薄膜热应力正交表的综合可比性,由极差和趋势分析图 6 得出以下结论:为使 GaN 薄膜热应力最小,Al₂O₃衬底直径为 50.8 mm(A<sub>1</sub>);Al₂O₃衬底厚度为 650 µm(B₃);GaN 薄膜厚度为 6 µm(C₃);沉积温度为 1080 ℃(D<sub>1</sub>)。根据 GaN 薄膜热应力指标的极差分析,确定最佳因素水平组合为 A<sub>1</sub>B<sub>3</sub>C<sub>3</sub>D<sub>1</sub>。

3) 影响 GaN 薄膜热应力因素主次分析

按 GaN 薄膜热应力极差计算结果确定影响其数值的主次因素,即极差越大,影响越主要。由表3和GaN 薄膜实验因素水平与热应力指标关系图6可知,数据点升降的幅度越大,影响越大,沉积温度对GaN 薄膜热应力的影响最大,GaN 外延薄膜厚度的影响次之,Al₂O₃衬底的厚度再次,Al₂O₃衬底直径的影响最小。即各个因素对GaN 薄膜热应力的影响次序由大到小依次为:D→C→B→A。

4) 直接分析结果与计算分析结果的比较



图 6 GaN 薄膜热应力和实验因素水平关系。(a) Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底直径; (b) Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底厚度; (c) GaN 薄膜厚度; (d) 沉积温度 Fig.6 Relationship between experimental factors and thermal stress of GaN films. (a) Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> substrate diameter; (b) Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> substrate thickness; (c) GaN films thickness; (d) deposition temperature

根据 GaN 薄膜热应力有限元模拟实验数据,使薄膜热应力最小的最佳因素水平组合的直接分析结果为 A<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C<sub>3</sub>D<sub>1</sub>。直接分析结果只是正交表中规定的9次实验条件下的最优水平搭配,不是所有81种实验条件下 最优的水平搭配。极差分析可以找出比直接分析结果更好的水平搭配,使各因素下的GaN 薄膜热应力指标 平均值均最小的水平组合为最佳水平搭配。根据GaN 薄膜热应力极差分析确定各个因素最佳水平搭配为 A<sub>2</sub>B<sub>2</sub>C<sub>3</sub>D<sub>1</sub>。

#### 5.2 薄膜边缘变形极差分析

1) 薄膜边缘变形直接分析

由表2中GaN薄膜边缘变形数据可以看出,在1号(A<sub>i</sub>B<sub>i</sub>C<sub>i</sub>D<sub>i</sub>)实验条件下,即Al₂O<sub>3</sub>衬底直径50.8 mm、Al₂O<sub>3</sub> 衬底厚度330 μm、GaN薄膜厚度4 μm和沉积温度1080 ℃条件下,GaN薄膜的边缘变形最小,为30.6 μm,这种 条件是否为使GaN薄膜边缘变形最小的因素水平的最佳搭配,需要通过进一步极差分析确定。

2) 薄膜边缘变形极差分析

正交实验各个因素水平与 GaN 薄膜边缘变形指标关系如图 7 所示。图 7 以各因素的水平为横坐标,以 相应水平下的 GaN 薄膜边缘变形的平均值为纵坐标。根据 GaN 薄膜边缘变形正交表的综合可比性,由极差 和趋势图 7 分析得出以下结论:为使 GaN 薄膜边缘变形最小,Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底直径为 50.8 mm(A<sub>1</sub>);Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底厚度 为 650 μm(B<sub>3</sub>);GaN 薄膜厚度为 4 μm(C<sub>1</sub>);沉积温度为 1120 ℃(D<sub>3</sub>)。根据 GaN 薄膜边缘变形指标的极差 分析,确定最佳因素水平组合为A<sub>1</sub>B<sub>3</sub>C<sub>1</sub>D<sub>3</sub>。

3) 影响 GaN 薄膜边缘变形的因素主次分析

按 GaN 薄膜边缘变形极差计算结果确定影响其大小的主次因素,即极差越大,影响越主要。由表4 和 GaN 薄膜实验因素水平与边缘变形指标关系图7可知,数据点升降的幅度越大,影响越大。Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底直径 对 GaN 薄膜边缘变形的影响最大,GaN 外延薄膜厚度的影响次之,Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底的厚度再次,沉积温度的影响 最小。即各个因素对 GaN 薄膜热应力的影响次序由大到小依次为:A、C、B、D。

4) 直接分析结果与计算分析结果的比较

根据 GaN 薄膜边缘变形有限元模拟实验数据,使薄膜边缘变形最小的最佳因素水平组合的直接分析结 果为A<sub>i</sub>B<sub>i</sub>C<sub>i</sub>D<sub>i</sub>。直接分析结果只是正交表中规定的9次实验条件下的最优水平搭配,不是所有81种实验条 件下最优的水平搭配。极差分析可以找出比直接分析结果更好的水平搭配,使各因素下的GaN薄膜边缘变 形指标平均值均最小的水平组合为最佳水平搭配。根据GaN薄膜边缘变形极差分析确定各个因素最佳水



图 7 GaN 薄膜的边缘变形和实验因素水平关系。(a) Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底直径; (b) Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底厚度; (c) GaN 薄膜厚度; (d) 沉积温度 Fig.7 Experimental factors and the marginal displacement of GaN films. (a) Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> substrate diameter; (b) Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> substrate thickness; (c) GaN films thickness; (d) deposition temperature

平搭配为A<sub>1</sub>B<sub>3</sub>C<sub>1</sub>D<sub>3</sub>。

# 6 结 论

1)薄膜应力理论和数值解相差小于1.4%,建立的GaN薄膜和Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底有限元模型可以用于薄膜应力 和变形分析。

2)影响 GaN 薄膜热应力的因素次序为:沉积温度、GaN 外延薄膜厚度、Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底的厚度、Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底直径,最佳因素水平组合为A<sub>1</sub>B<sub>3</sub>C<sub>3</sub>D<sub>1</sub>,其中沉积温度起决定作用。

3)影响 GaN 薄膜边缘变形的因素次序为:Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底直径、GaN 外延薄膜厚度、Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底的厚度、沉积温度,最佳因素水平组合为A<sub>1</sub>B<sub>3</sub>C<sub>1</sub>D<sub>3</sub>,其中Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底直径起决定作用。

#### 参考文献

- 1 Yang H, Chen L H, Zhang S M, *et al.*. Material growth and device fabrication of GaN based blue violet laser diodes [J]. Chinese J Semiconductors, 2005, 26(2): 414–417.
- 2 Liu H B, Tao J, Gautreau Y, *et al.*. Simulation of thermal stresses in SiC–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> composite tritium penetration barrier by finite– element analysis [J]. Materials and Design, 2009, 30(8): 2785–2790.
- 3 Song S W, Liang H W, Shen R S, *et al.*. Influence of *in-situ* SiNx interlayer on strain relief and optical character of GaN epilayer grown on 6H–SiC [J]. Chinese J Luminescence, 2013, 34(8): 1017–1021.
- 4 Wang T, Cui Z Z, Xu L X. Thermoelastic stress field investigation of GaN material for laser lift of technique based on finite element method [J]. Chin Phys Lett, 2009, 26(9): 094601.
- 5 Valeria C, Cristina L, Aldo R B. Numerical models for thermal residual stresses in Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> platelets/borosilicate glass matrix composites [J]. Materials Science and Engineering, 2002, 323(1–2): 246–250.
- 6 Hu Q, Wei T B, Duan R F, *et al.*. Characterization of thick GaN films directly grown on wet etching patterned sapphire by HVPE [J]. Chin Phys Lett, 2009, 26(9): 096801.
- 7 Zhang Yaoping, Zhang Yundong, Ning Ling, *et al.*. Finite element analysis based on the residual stress of thin film [J]. Laser & Optoelectronics Process, 2005, 42(10): 23–27.

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): 23-27.

8 Wang Minggang, Yang Weifeng, Hu Dongdong, *et al.*. Patterned sapphire substrate technique [J]. Laser & Optoelectronics Process, 2012, 49(8): 080005.

汪明刚,杨威风,胡冬冬,等.图形化蓝宝石衬底技术综述[J].激光与光电子学进展,2012,49(8):080005.

9 Jiang Yang, Luo Yi, Xi GuangYi, *et al.*. Effect of AlGaN intermediate layer on residual stress control and surface morphology of GaN grown on 6H–SiC substrate by metal organic vapour phase epitaxy [J]. Acta Physica Sinica, 2009, 58(10): 7282–7287.

江 洋,罗 毅,席光义,等. AlGaN插入层对6H-SiC上金属有机物气相外延生长的GaN薄膜残余应力及表面形貌的影响 [J].物理学报,2009,58(10):7282-7287.

10 Liu Xing, Zhu Jiaqi, Han Jiecai. Thermal stresses in elastic multilayer systems [J]. Mechanics in Engineering, 2014, 36 (4): 453-456.

刘 星,朱嘉琦,韩杰才.多层膜结构热应力计算[J].力学与实践,2014,36(4):453-456.

11 Dong Wei, Zuo Ran, Lai Xiaohui, *et al.*. Simulation of stresses in GaN thin film on sapphire [J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2013, 50(7): 073101.

董 位, 左 然, 赖晓慧, 等. 蓝宝石基 GaN 薄膜的热应力模拟分析 [J]. 激光与光电子学进展, 2013, 50(7): 073101.

12 Yin Jiayun, Liu Bo, Zhang Sen, *et al.*. Stress analysis of GaN materials grown on Si (111) substrates [J]. Micronanoelectronic Technology, 2008, 45(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, 45(12): 703-705.

13 Liang Dong, Yuan Fengpo, Zhang Baoshun, et al.. Analysis of strain on AlGaN/AlN structures grown on sapphire substrates [J]. Semiconductor Technology, 2007, 32(19): 765–767.

梁 栋, 袁凤坡, 张宝顺, 等. 蓝宝石衬底上生长 AlGaN/AlN 结构的应变分析[J]. 半导体技术, 2007, 32(19): 765-767.

14 Yan Jianfeng, Zhang Jie, Guo Liwei, *et al.*. Growth and stress analysis of a-plane GaN films grown on r-plane sapphire substrate with a two-step AlN buffer layer [J]. Chinese J Semiconductors, 2007, 28(10): 1562–1567. 颜建锋,张 洁,郭丽伟,等.r面蓝宝石衬底上采用两步AlN缓冲层法外延生长a面GaN薄膜及应力研究[J]. 半导体学报, 2007, 28(10): 1562–1567.

15 Shao Shuying, Fan Zhengxiu, Fan Runying, *et al.*. A review of study of stress in thin films [J]. Laser & Optoelectronics Process, 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.

16 Wang Huanyou, Li Yalan, Xie Guangqi, et al.. Influence of cone-shaped pattern sapphire substrates on dislocation density and stress-strain of GaN epifilms by MOCVD [J]. Scientia Sinica Physica Mechania & Astronomica, 2013, 43 (11): 1519-1524.

王焕友,李亚兰,谢光奇,等.圆锥形图形化蓝宝石衬底对 MOCVD 生长 GaN 外延膜的位错密度和应力应变影响[J].中国科学:物理学力学天文学,2013,43(11):1519-1524.

17 Li Xianan, Yu Naisen, Cao Baosheng, *et al.*. Stress and effect on optical properties of GaN epilayers grown by using porpous SiN*x* interlayers [J]. Chinese Journal of Liquid Crystals and Displays, 2010, 25(6): 776–779.

李夏南,于乃森,曹保胜,等.原位SiNx掩膜生长GaN材料的应力及其对光学性质的影响[J].液晶与显示,2010,25(6):776-779.

栏目编辑:张浩佳