

多层 GaN 外延片表面热应力分布及影响因素

陈 靖^{1,2}, 程宏昌¹, 吴玲玲^{1,2}, 冯 刘¹, 苗 壮¹

(1. 微光夜视技术重点实验室, 陕西 西安 710065;

2. 西安工业大学 光电工程学院, 陕西 西安 710021)

摘 要: 为了研究蓝宝石/AlN/GaN 外延片表面层热应力分布及影响因素, 以直径 d 为 $\Phi 40$ mm 的外延片为研究对象, 利用有限元分析法对其表面热应力分布进行了理论计算和仿真, 验证了仿真模型的合理性。分析了外延片生长温度、蓝宝石衬底和 AlN 过渡层厚度对表面热应力的影响。结果显示: 在 $1\ 200\ ^\circ\text{C}$ 的生长温度下, 外延片径向应力比轴向应力大一个量级; 在径向 ($d < \Phi 32$ mm) 区域内的热应力分布比较均匀, 热应力变化范围为 $\pm 0.38\%$; 生长温度在 $600\sim 1\ 200\ ^\circ\text{C}$ 范围内, 外延层表面应力与生长温度呈近似正比关系。研究成果可为该类外延片生长工艺研究和低应力外延片的筛选标准制定提供借鉴。

关键词: 热应力; 氮化镓外延层; 有限元分析; 仿真

中图分类号: TB43 **文献标志码:** A **DOI:** 10.3788/IRLA201645.1021001

Surface thermal stress distribution and the influence factors of Sapphire/AlN/GaN epilayers

Chen Jing^{1,2}, Cheng Hongchang¹, Wu Lingling^{1,2}, Feng Liu¹, Miao Zhuang¹

(1. Science and Technology on Low-Light-Level Night Vision Laboratory, Xi'an 710065, China;

2. Institute of Optoelectronic Engineering, Xi'an Technological University, Xi'an 710021, China)

Abstract: In order to research the surface thermal stress in Sapphire/AlN/GaN epilayer and the stress influence factor, the surface stress in materials with diameter of 40 mm were respectively calculated and studied by the finite element modeling method, and the rationality of the model was proved. The dependence between the epilayer surface thermal stress and different parameters were respectively analyzed including growth temperature, AlN transition layer thickness and Sapphire substrate thickness. The results indicated that the epilayer radial stress was an order of magnitude greater than the epilayer axial stress on $1\ 200\ ^\circ\text{C}$; and the stress was uniform in the radial direction with the variation of $\pm 0.38\%$ in the area with diameter of 32 mm; the epilayer surface thermal stress was in direct proportion to growth temperature during the temperature from $600\ ^\circ\text{C}$ to $1\ 200\ ^\circ\text{C}$. The results are helpful for study on new technology of epitayers growth and establish the quality choice standard of low stress epilayer.

Key words: thermal stress; GaN epilayer; finite element analysis; simulation

收稿日期: 2016-02-17; 修订日期: 2016-03-21

基金项目: 微光夜视技术重点实验室基金(BJ2014004); 西安工业大学校长基金(01001302)

作者简介: 陈靖(1976-), 男, 讲师, 主要从事测试仿真方面的研究。Email: cjing@xatu.edu.cn

0 引言

紫外探测技术是继红外和激光探测技术之后的重要的军民两用光电探测技术。美国斯坦福大学、美国西北大学、日本滨松公司的研究结果均证明基于 NEA 的 GaN 光电阴极作为紫外探测器件具有明显的应用优势和潜力^[1-4]。衬底材料的选择对于异质外延 GaN 的晶体质量影响很大。蓝宝石高温下稳定,价格适中,制备工艺成熟,可以大尺寸稳定生产,是现在比较成熟的使用最为广泛的衬底材料。但蓝宝石解理困难,且其晶格常数与 GaN 有较大的失配(高达 16%),与 GaN 热膨胀系数差异也较大。由于 AlN 与 GaN 属于同一系统的材料,它们具有较小的晶格失配(2.4%)和热膨胀系数(5.2%)失配。此外,AlN 还具有高的热导率、良好的绝缘性以及不吸收波长 200 nm 以上的光的特点,因此 AlN 是外延 GaN 材料合适的衬底。然而,时至今日获得大尺寸的 AlN 体单晶依然十分困难,所以外延 GaN 通常是在 AlN/蓝宝石模板上实现的。2002 年, Sakai 等人尝试了采用 MOVPE 在 AlN/蓝宝石衬底上直接生长 GaN,发现其晶体质量比在蓝宝石衬底上采用低温缓冲层生长的 GaN 更好^[4]。综上所述,为了解决蓝宝石衬底与 GaN 之间晶格失配和热膨胀系数差异引起的应力集中问题,可在蓝宝石衬底上用 AlN 作为过渡层,然后在其上外延生长高质量 GaN 层。

由于衬底和膜层材料的热膨胀系数失配,在高温下镀制外延层,当温度降低到室温时,衬底和膜层会产生不同大小的形变,从而产生热应力。多层膜中的热应力的存在不仅影响外延层-衬底系统的牢固性,还会严重影响器件的稳定性和寿命。

蓝宝石/AlN/GaN 多层结构已成为国际公认的该类材料的标准结构。蓝宝石/AlN/GaN 多层结构外延材料生长温度高,热应力是影响其材料质量的重要因素。通过热应力仿真研究蓝宝石/AlN/GaN 外延片表面热应力分布及影响因素,可为该类外延片生长工艺研究和低应力外延片的筛选标准制定提供借鉴,对提高 GaN 光阴极的性能有重要意义。尽管关于多层薄膜微结构的理论计算已有相关研究,且多层光学薄膜(如 ZnS/Y₂O₃/SiO₂)表面热应力的计算也用不同方法进行了研究^[5-9],但蓝宝石/AlN/GaN 光电发射多层外

延材料的热应力仿真研究未见公开报道。

有关多层外延材料表面热应力的计算,研究方法主要分为解析法和有限元法^[5-10]。文中针对蓝宝石/AlN/GaN 外延材料多层结构及生长工艺的特点,分别用解析法和有限元分析法对表面热应力进行了计算和仿真研究,为材料生长及材料筛选提供技术支撑。

1 热应力计算模型

图 1 给出了多层薄膜微结构计算模型的示意图^[10]。其中图 1(a)为多层薄膜结构在未受到热应力时的结构状态,建立如图坐标系,以衬底与薄膜的接触面为坐标轴 $y=0$,向上各层薄膜的厚度分别为 h_i ($i=1, 2, \dots, n$),衬底自由表面坐标为 $y=-t_s$, t_s 为衬底厚度,下标 s 表示衬底。图 1(b)为在温差 ΔT 作用下,各层结构产生一定弯曲的示意图。

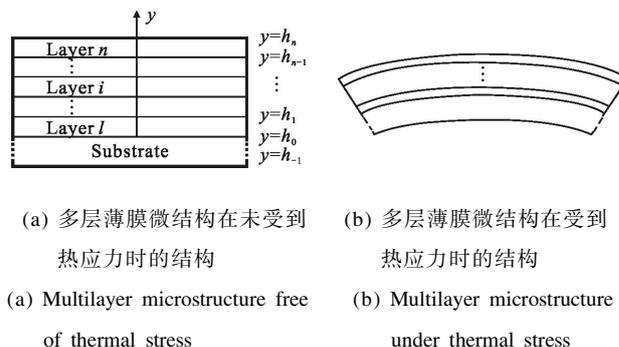


图 1 多层薄膜微结构计算模型示意图
Fig.1 Scheme of multilayer microstructure calculation model

根据图 1 给出的示意图,多层膜结构中由于热应力产生的应变 ε 可以分解为材料受温差影响产生的均匀应变以及由于各种材料膨胀率不同从而导致的弯曲应变两部分。其表达式为:

$$\varepsilon = c + \frac{y - t_b}{r}, \quad -t_s \leq y \leq h_n \quad (1)$$

式中: c 为均匀应变; t_b 为中性面(弯曲应变为 0 的平面)位置; r 为室温下最终 n 层结构的弯曲曲率半径; y 为厚度方向的坐标; h 为厚度坐标。根据胡克(Hooke)定律,衬底以及薄膜材料受到的应力与应变存在以下关系:

$$\sigma_s = E_s(\varepsilon - \alpha_s \Delta T), \quad -t_s \leq y \leq 0 \quad (2)$$

$$\sigma_i = E_i(\varepsilon - \alpha_i \Delta T), \quad i=1, 2, \dots, n \quad (3)$$

式中: E 为弹性模量,下标 s 和 i 分别表示衬底与第 i 层薄膜,对于非条状的尺寸结构而言,应该用双轴弹

性模量来替换,即 $\frac{E_i}{1-\nu_i}$, ν_i 为第 i 层材料的泊松比^[5], α 为线性膨胀系数; ε 为应变; ΔT 为温差。

$$\sigma_s = \frac{2}{t_s} \left(3y + 2t_s - \frac{2}{E_s} \sum_{j=1}^n E_j t_j \right) \cdot \sum_{i=1}^n E_i t_i (\alpha_i - \alpha_s) \Delta T$$

$$-t_s \leq y \leq 0 \quad (4)$$

$$\sigma_i = E_i \left(\alpha_s - \alpha_i + 4 \sum_{j=1}^n \frac{E_j t_j (\alpha_j - \alpha_s)}{E_j t_j} \right) \Delta T, i=1, 2, \dots, n \quad (5)$$

这就是为多层膜系统中应力应变计算的精确解^[9]。当薄膜的厚度远小于衬底的厚度时,对这些解可进行相应的简化,得到:

$$\sigma_s = \frac{2(3y+2t_s)}{t_s} \cdot \sum_{i=1}^n E_i t_i (\alpha_i - \alpha_s) \Delta T, -t_s \leq y \leq 0 \quad (6)$$

$$\sigma_i = E_i (\alpha_i - \alpha_s) \Delta T, i=1, 2, \dots, n \quad (7)$$

该解相当于Townsend 等提出的近似解^[11]。

2 有限元模型建立

采用有限元软件 ANSYS Workbench 对蓝宝石/AIN/GaN 外延材料热应力进行仿真研究,并通过理论值验证。材料参数见表 1^[12-13]。

表 1 材料特性参数

Tab.1 Physical property parameters of materials

Material	Young's modulus /GPa	Thermal expansion coefficient $\alpha/^\circ\text{C}$	Poission's ratio ν	Thermal conductivity /W·(m· $^\circ\text{C}$) ⁻¹
Sapphire	345	a 7.5×10^{-6} c 8.5×10^{-6}	0.28	24
AIN	340	4.5×10^{-6}	0.25	200
GaN	290	a 5.59×10^{-6} c 3.17×10^{-6}	0.20	220

在进行热应力仿真之前,首先根据结构参数,在直径为 40 mm、厚度为 2 mm 的圆形蓝宝石衬底上沉积厚度不同的 AIN 过渡层,再外延生长 GaN,用 ANSYS Workbench 中的 DM 模块生成衬底和多层膜的微结构,如图 2 所示。

模拟计算中,生长温度作为参考温度,环境温度作为热耦合的外延层和衬底的温度载荷。为了便于分析,建模过程中不考虑瞬态效应的影响,忽略外延层外延生长过程中材料性能的变化,将外延层与衬底看成是各向同性的弹性材料,认为热应力产生主要由冷

却到室温的过程中衬底与外延层的热膨胀系数不同所引起。在边界条件中不考虑系统的导热、对流和辐射等影响,同时忽略环境对材料性质的影响^[14]。

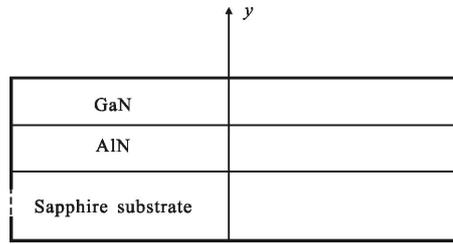


图 2 外延层微结构模型示意图

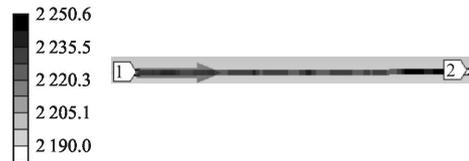
Fig.2 Scheme of epilayer microstructure

3 模型验证

3.1 GaN 外延层应力的分布情况

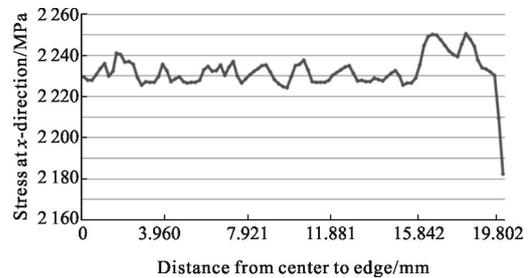
从生长温度为 1 200 $^\circ\text{C}$ 下降为环境温度 25 $^\circ\text{C}$ 时,蓝宝石衬底厚度 2 mm,AIN 过渡层 600 nm 和 GaN 激发层 200 nm 情况下,利用有限元模型计算外延层热应力结构径向应力分布如图 3 所示。

P:0.5-0.000 6-0.000 2(1 200 $^\circ\text{C}$)
Surface stress in GaN
Type:normal stress(x axis)
Unit:MPa
Global coordinate system
Time:1
Max:2250.6
Min:2182.4



(a) x 方向应力的分布情况

(a) Distribution of stress at x-direction



(b) x 方向应力变化趋势图

(b) Stress variation at x-direction

图 3 GaN 外延层表面中心到边缘 x 方向应力的分布情况

Fig.3 Distribution of stress at x-direction in the GaN epilayer from the center to edge

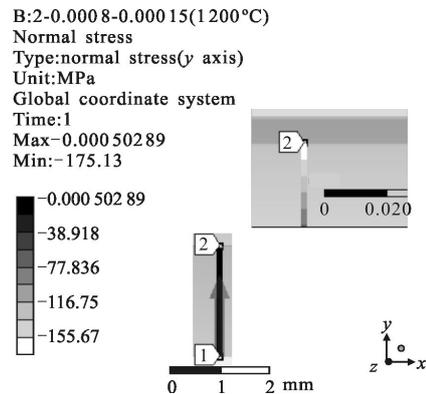
图 3(a)中, x 轴方向为径向, y 轴为厚度方向, 即轴向。图中 1 点为 GaN 外延材料的中心位置, 即 $\Phi 40$ mm 外延材料径向方向的几何中心, 2 点为边缘。图中所示的灰度柱状图表示为 GaN 外延层径向(x 方向)的应力变化情况。膜层内热应力最大值为 2 250.6 MPa, 数值为正, 表明外延层所受应力主要为拉应力。用公式(7)计算得到的理论值为 2 270.2 MPa, 误差为 -0.86% 。当镀膜温度为 $1000\text{ }^{\circ}\text{C}$ 时, 模型计算值为 1 869.9 MPa, 理论值为 1 833.8 MPa, 误差为 -0.74% 。可见, 文中所建立的仿真模型与理论计算值在不同条件下都是吻合的, 说明该模型是合理的。图 3(b)是 GaN 外延材料上表面由中心到边缘的 x 方向应力变化趋势图, 从图中可以看出: 除了边缘处 ($\Phi 32\text{ mm} < d < \Phi 40\text{ mm}$) 由于边缘效应导致外延层热应力出现突变外, 外延层其余位置 ($d < \Phi 32\text{ mm}$) 所受的拉应力沿径向震荡分布, 且分布较为均匀, 最小为 2 224.2 MPa, 最大为 2 241.1 MPa, 围绕 2 232.65 MPa 震荡分布, 热应力变化范围为 $\pm 0.38\%$ 。

圆盘中心处, 衬底下表面到外延层上表面的 y 方向应力变化趋势如图 4 所示。

图 4(a)展示了外延层内 y 方向的应力随厚度变化情况 ($\Phi 40$ mm 材料几何中心处)。图 4(a)中左侧所示的灰度柱状图表示为 GaN 外延层 y 方向的应力变化情况。图 4(a)下方图形中, 点 1 为蓝宝石衬底下表面的几何中心, 点 2 为 GaN 外延材料上表面的中心位置。可以看出: y 方向衬底中的应力较小, 趋于零。为了表现衬底和外延层的界面上的应力情况, 将点 2 处的应力分布情况进行放大, 显示在图 4(a)的右上方。从该局部放大图可以看出: GaN 外延材料上表面的中心处应力的极值为 -175.13 MPa , 表现为压应力。图 4(b)是 GaN 外延材料 y 方向中心处衬底下表面到 GaN 外延层上表面应力的变化趋势图。可以看出: 2 mm 厚的衬底内应力都趋于零, 这是因为降温过程中衬底基本上处于自由收缩状态, 所以内部应力很小。衬底和外延层的界面上的应力出现了突变, 迅速由趋于零变化为 -175.13 MPa , 表现为压应力。显然, 与衬底的应力相比, GaN 外延层表面热应力占主导地位。

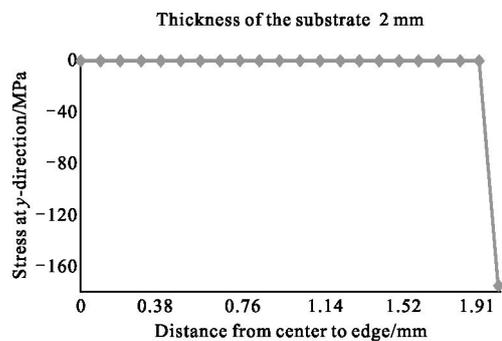
比较图 3 和图 4 中展示的 x 和 y 两方向的应力分布情况, 可以看出: y 方向为压应力, x 方向为拉应力; y 方向应力总体来说都非常小, 即厚度方向的压

应力与径向拉应力相差 1 个数量级, 因此后面的模拟仿真主要研究径向应力。



(a) y 方向应力的分布情况

(a) Distribution of stress at y -direction



(b) y 方向应力变化趋势图

(b) Stress variation at y -direction

图 4 y 方向中心处衬底下表面到 GaN 外延层上表面应力的分布情况

Fig.4 Distribution of stress at y -direction in the centre from the downside surface of substrate to upside surface of GaN epilayer

3.2 GaN 外延层应力与生长温度的关系

为了研究 GaN 外延层表面热应力与生长温度的关系, 在模拟过程中, 蓝宝石衬底厚度 2 mm , AlN 过渡层 800 nm 和 GaN 激发层 150 nm 情况下, 改变外延层的生长温度, 温度选取范围为 $600\sim 1200\text{ }^{\circ}\text{C}$, 利用有限元模型计算, 记录相应的最大热应力与最小热应力, 并与公式(7)计算的相应热应力进行对比。由模拟仿真和数值计算分别获得的 GaN 外延层表面热应力值与温度的对应关系如图 5 所示。

图 5 中横坐标为生长温度, 即由该温度降温到达室温 $25\text{ }^{\circ}\text{C}$ 计算 GaN 上表面的应力值, 以 GaN 上

表面的应力值作为纵坐标。由图可以看出:在生长温度为 600~1 200 °C 的范围内,随着 GaN 外延层生长温度的增大,模型计算获得的外延层表面热应力的最大值与最小值均与温度呈近似正比关系,模拟值与理论值的变化趋势一致。因此,降低外延层的生长温度,可以减小热应力。此外,最大热应力值与数值计算获得的理论值更为接近,因此后面的模拟仿真都选取外延层表面热应力的最大值。

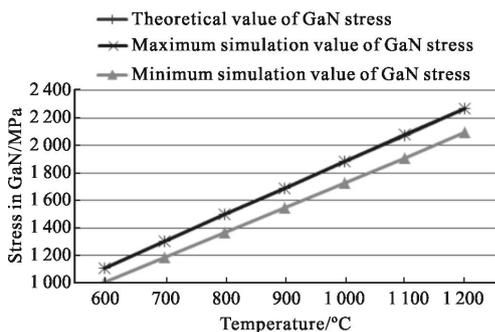
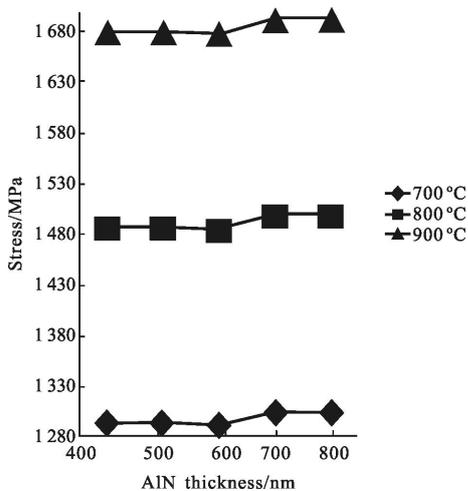


图 5 GaN 表面应力与温度的关系

Fig.5 Relationship between surface stress in GaN and temperature

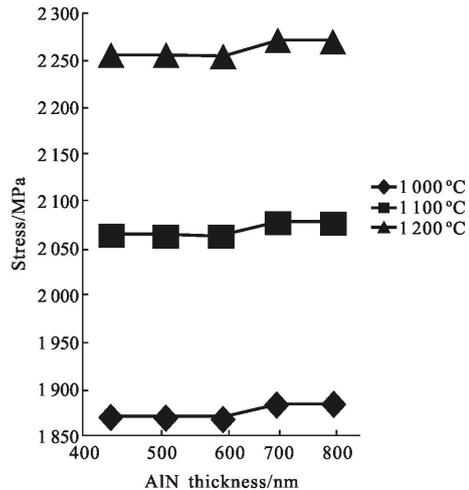
3.3 GaN 外延层应力与 AlN 过渡层厚度的关系

为了研究热应力与 AlN 过渡层厚度的关系,保持衬底厚度 2 mm 不变,在 700、800、900、1 000、1 100、1 200 °C 的生长温度下,均选取 GaN 厚度为 150 nm, AlN 过渡层厚度分别为 400、500、600、700、800 nm,在其他材料参数、边界条件及施加的载荷都相同的情况下,进行模拟仿真,结果如图 6 所示。



(a) 生长温度为 700、800、900 °C 时的应力变化

(a) Stress variation with temperature of 700, 800 and 900 °C



(b) 生长温度为 1 000、1 100、1 200 °C 的应力分布变化

(b) Stress variation with temperature of 1 000, 1 100 and 1 200 °C

图 6 GaN 表面应力与 AlN 过渡层厚度的关系

Fig.6 Relationship between surface stress in GaN film and AlN transition layer thickness

图 6(a)和图 6(b)的横坐标为 AlN 过渡层的厚度,纵坐标为 GaN 上表面的应力值。由图可以看出:在不同生长温度下,GaN 表面应力随 AlN 过渡层厚度变化的趋势是一致的,即在 AlN 过渡层厚度 400~600 nm 范围内,随着厚度的增加,GaN 上表面的热应力缓慢减小;在 AlN 过渡层厚度 600~700 nm 范围内,随着厚度的增加,GaN 上表面的热应力明显增大;而在 AlN 过渡层厚度 700~800 nm 范围内,随着厚度的增加,GaN 上表面的热应力基本不变。图 6 表明 AlN 过渡层厚度为 600 nm 时,从 700~1 200 °C 范围内的各生长温度下 GaN 上表面的热应力都是最小的。所以选取 600 nm 的 AlN 过渡层厚度对 GaN 的应力有改善作用。

3.4 GaN 外延层应力与蓝宝石衬底厚度的关系

为了研究热应力与衬底厚度的关系,在生长温度为 1 200 °C,GaN 外延层厚度为 200 nm,AlN 过渡层的厚度 800 nm,衬底厚度分别为 0.3、0.5、1、1.5、2、2.5、3、3.5 和 4 mm,在其他材料参数、边界条件及施加的载荷都相同的情况下,分别进行模拟仿真。结果如图 7 所示。

图 7 中横坐标为蓝宝石衬底的厚度,纵坐标为 GaN 上表面的应力值。由图 7 可以看出:在衬底厚度为 0.3~4 mm 的变化范围内,随着衬底厚度的增加,外延层的热应力缓慢增加。图 7 表明蓝宝石衬底厚

度对 GaN 上表面的应力值影响显著。当衬底很薄时,外延层与衬底温度差异小,热应力也较小,随着衬底厚度的增加,外延层表面与衬底温度差异逐渐变大,其表面热应力缓慢增加。因此,在实际过程中可以适当地选择衬底厚度来降低外延层热应力。

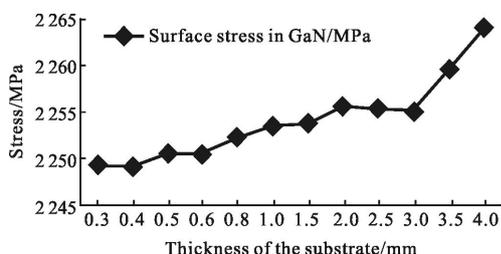


图 7 GaN 表面应力与衬底厚度的关系

Fig.7 Relationship between surface stress in GaN and substrate thickness

4 结 论

文中以 $\Phi 40$ mm 蓝宝石/AlN/GaN 外延片为研究对象,利用有限元分析软件 ANSYS 对蓝宝石/AlN/GaN 多层结构的外延片表面热应力的分布进行了模拟分析和理论计算,验证了仿真模型的合理性。同时分析了外延片生长温度、蓝宝石衬底和 AlN 过渡层厚度对表面热应力大小的影响。结果表明:在 $1200\text{ }^{\circ}\text{C}$ 的生长温度下,外延片径向应力比轴向应力大一个量级;在径向,边缘位置($\Phi 32\text{ mm} < d < \Phi 40\text{ mm}$)应力发生了突变,在径向($d < \Phi 32\text{ mm}$)区域内的热应力分布比较均匀,热应力变化范围为 $\pm 0.38\%$;生长温度在 $600\sim 1200\text{ }^{\circ}\text{C}$ 范围内,外延层表面应力与生长温度呈近似正比关系;AlN 过渡层厚度为 600 nm 时,在不同制备温度下应力均最小;在衬底厚度为 $0.3\sim 4\text{ mm}$ 的变化范围内,随着衬底厚度的增加,外延层的热应力缓慢增加。研究成果可为该类外延片生长工艺研究和低应力外延片的筛选标准制定提供借鉴。

参考文献:

[1] Shahedipour F S, Ulmer M P. Efficient GaN photocathodes for low-level ultraviolet signal detection [J]. *IEEE Journal*

of Quantum Electronics, 2002, 38(4): 333-335.

[2] Guo Xiangyang, Chang Benkang, Qiao Jianliang, et al. Comparison of stability of GaN and GaAs photocathode [J]. *Infrared Technology*, 2010, 32(2): 117-120. (in Chinese)

[3] Du Yujie, Chang Benkang, Fu Xiaoqian, et al. Effects of NEA GaN photocathode performance parameters on quantum efficiency [J]. *Optik*, 2012, 123(9): 800-803.

[4] Li Xiangyang, Xu Jingtong, Tang Yingwen, et al. GaN based ultraviolet detectors and its recent development [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2006, 35 (03): 276-280. (in Chinese)

[5] Hsueh C H. Thermal stresses in elastic multilayer systems [J]. *Thin Solid Films*, 2002, 418(2): 182-188.

[6] Cao T, Zhang L, Xiao Z, et al. Enhancement and tenability of fano resonance in symmetric multilayer metamaterials at optical regime [J]. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2013, 46(39): 395103.

[7] Shao Shuying, Fan Zhengxiu, Fan Ruiying, et al. A review of study of stress in thin films [J]. *Laser & Optronics Progress*, 2005, 42(1): 22-27. (in Chinese)

[8] Chen Weilan. Research on stresses in optical films [D]. Hangzhou: Zhejiang University, 2008. (in Chinese)

[9] Kinoshita K, Maki K, Nakamizo K, et al. Stress in vacuum deposited films of silver [J]. *Japanese Journal of Applied Physics*, 1967, 6(1): 42-50.

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

[11] Townsend P H, Barnett D M, Brunner T A. Elastic relationships in layered composite media with approximation for the case of thin films on a thick substrate [J]. *Journal of Applied Physics*, 1987, 62(11): 4438-4444.

[12] Li Ying'ai. Preparation and field emission characteristics of AlN thin films [D]. Changchun: Jilin University, 2004. (in Chinese)

[13] Xing Zhigang. Study on micro-structure of GaN films epitaxially grown on patterned sapphire substrate [D]. Beijing: Institute of Physics CAS, 2007. (in Chinese)

[14] Wu Liangzhen, Tang Jieyu, Ma Yuanxin, et al. Simulation of thermal stress in SiO_2 thin film [J]. *Journal of South China Normal University (Natural Science Edition)*, 2009, 1(1): 52-55. (in Chinese)