

Моделирование напряженно-деформированного состояния в тонких структурированных пленках нитрида галлия на сапфировых подложках

© И.Н. Ивукин^{1,2}, Д.М. Артемьев^{1,2}, В.Е. Бугров^{1,2}, М.А. Одноблюдов¹, А.Е. Романов¹⁻³

¹ Группа компаний „Оптоган“,
Санкт-Петербург, Россия

² Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики,
Санкт-Петербург, Россия

³ Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: ivan.ivukin@optogan.com

(Поступила в Редакцию 16 апреля 2012 г.)

Представлены результаты моделирования напряженно-деформированного состояния в тонких структурированных пленках нитрида галлия на сапфировых подложках, содержащих открытые поры. Результаты получены методом конечных элементов в коммерческом программном комплексе. Вычислен коэффициент интенсивности напряжений K_I для модели, рассматривающей трещину на границе GaN/сапфир вблизи открытой поры. На основании расчетов упругих полей получена оценка перераспределения напряжений структурой с упорядоченным массивом открытых пор в пленках нитрида галлия.

Работа выполнена при поддержке гранта № РФФИ 12-08-00397-а и проекта Мари Кюри PИIF2-GA-2008-908419.

1. Введение

Подложки на основе структуры GaN/сапфир — это неотъемлемая часть многих современных полупроводниковых устройств, таких, например, как светоизлучающие диоды. Значительное различие коэффициентов температурного расширения нитрида галлия и сапфира приводит к высокому уровню механических напряжений в слоях подложки. Наличие высоких механических напряжений наряду с дефектами кристаллической структуры может быть причиной образования трещин, которые распространяются внутри светодиодов и значительно уменьшают их эффективность [1].

Формирование упорядоченной пористой структуры в пленках нитрида галлия на границе GaN/сапфир используется для уменьшения уровня механических напряжений. Существует ряд методов выращивания нитридных полупроводников с формированием различных пористых структур [1–4]. Однако в большинстве подобных работ акцент делается на уменьшение плотности проникающих дислокаций и лишь в некоторых изучается влияние пористой структуры на уровень механических напряжений. Основная технология формирования таких структур — заращивание нитрида галлия с наноклонными или вытравленными отверстиями [2,3,5]. В настоящей работе геометрия пор выбрана согласно результатам [5], где был рассмотрен практический способ создания упорядоченной пористой структуры. Метод, обсуждаемый в [5], описывает формирование периодического массива пор в слое нитрида галлия на сапфировом основании с использованием травления через маску. Преимуществами метода являются упорядоченность структу-

ры и простота контроля геометрических параметров пор.

Целью настоящей работы является анализ зависимости термических напряжений от геометрических параметров пористой структуры в пленке нитрида галлия, оценка влияния пористой структуры на возможность зарождения трещин на границе GaN/сапфир, а также вычисление коэффициентов интенсивности напряжений K_I при зарождении трещин различного размера в окрестности открытых пор на интерфейсе GaN/сапфир.

2. Описание модели

Для численного моделирования напряженно-деформированного состояния в подложках GaN/сапфир с пористыми структурами был выбран программный комплекс COMSOL, использующий метод конечных элементов. Была использована линейно-упругая модель с анизотропными свойствами материалов. [6]

2.1. Геометрия. На рис. 1 представлена геометрия модели: упорядоченный массив открытых пор в пленке нитрида галлия, расположенных в гексагональном порядке. На рисунке показаны основные геометрические параметры и кристаллографическая ориентация слоя нитрида галлия [0001]. H_f — высота пленки нитрида галлия, H_s — высота сапфирового основания, L_1 и L_2 — соответственно ширина и длина расчетной области, R — радиус вписанной в шестиугольник окружности. Расчетная область представляет собой упорядоченный массив элементарных блоков в виде параллелепипедов с основаниями площадью $d_1 \times d_2$ ($d_2/d_1 = 3$). Таким

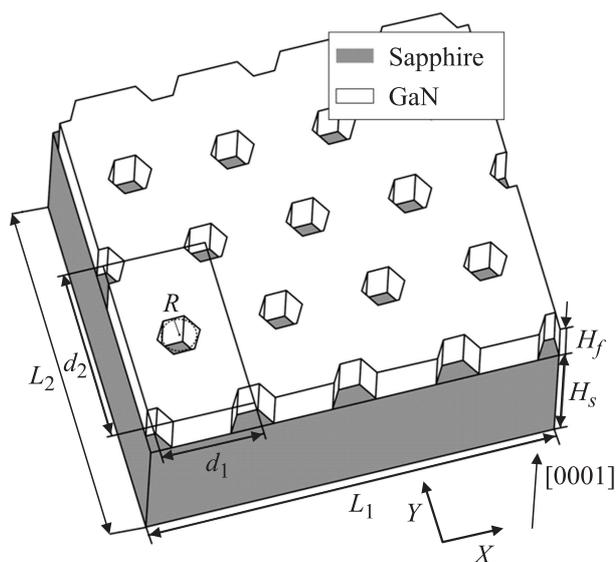


Рис. 1. Схема расчетной области для упорядоченной пористой структуры в пленке нитрида галлия на сапфировом основании с геометрическими параметрами, описанными в тексте.

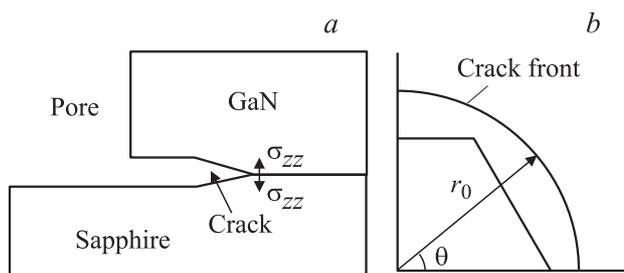


Рис. 2. Схема трещины нормального раскрытия на границе GaN/сапфир. *a* — вид сбоку, *b* — вид сверху.

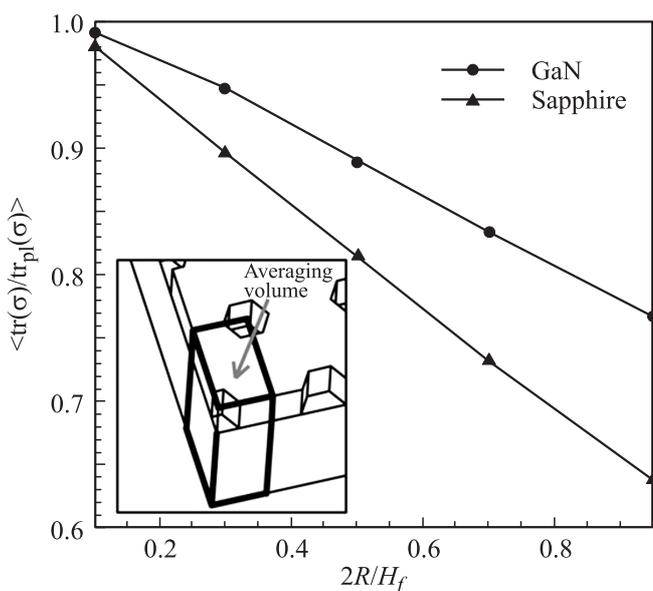


Рис. 3. Зависимость нормированного усредненного гидростатического напряжения от нормированного радиуса поры.

Упругие постоянные C_{ij} (GPa) и коэффициенты термического расширения α_{ij} (10^{-6} K^{-1})

Материал	C_{11}	C_{12}	C_{13}	C_{33}	C_{44}	α_{11}	α_{22}	α_{33}
Сапфир	497	163	116	501	147	7.5	7.5	8.5
GaN	367	135	103	405	95	5.59	5.59	3.17

образом, мы имеем дискретную геометрическую структуру, состоящую из блоков в количестве n_1 и n_2 по направлениям x и y соответственно.

На рис. 2 представлена модель с трещиной на границе GaN/сапфир в окрестности центральной поры.

Исходная геометрическая модель была разбита на конечные элементы неструктурированной тетраэдрической сеткой, которая имеет измельчение вблизи центральной поры, выделенной на рис. 3, для получения более гладких распределений напряжений. В расчетах с трещиной проводилось сгущение сетки в окрестности фронта трещины. Число конечных элементов в расчетах варьировалось в пределах 2–3.5 миллионов.

2.2. Свойства материала и нагрузки. Упругие модули материалов были взяты из работы [7] и представлены в таблице. Они находятся в доверительном интервале экспериментальных данных публикаций [8–10]. Была задана собственная деформация, соответствующая уменьшению температуры на 800 К, а в качестве граничных условий на двух смежных боковых гранях задано условие симметрии.

2.3. Порядок расчета. В конечно-элементном анализе мы использовали следующий набор геометрических параметров:

$$M = \frac{\Delta}{H_f}, \quad A = \frac{R}{H_f}, \quad \frac{H_s}{H_f} = \text{const} = 225, \quad (1)$$

где A — нормированный радиус вписанной в шестиугольник поры окружности, M — нормированный шаг пористой структуры, $\Delta = d_1 - R$. Расчеты проводились для различных значений этих параметров. Отношение высот H_s/H_f было выбрано таким, чтобы соответствовать реальной конфигурации пор [5].

В качестве представительной величины было выбрано нормированное гидростатическое напряжение

$$\frac{\text{tr}(\sigma)}{\text{tr}_{pl}(\sigma)} = \frac{(\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz})}{(\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz})_{pl}} \quad (2)$$

ввиду инвариантности при изменении системы координат и прямого отношения к биаксиальным напряжениям в беспористой (pl) тонкой пленке нитрида галлия на сапфировом основании. Также в рамках настоящей работы была рассмотрена компонента напряжений σ_{zz} . Все нормализующие величины были взяты из расчета беспористой структуры подобного размера. Для количественной оценки напряженно-деформированного состояния проводилось усреднение нормализованного

гидростатического напряжения в объеме вокруг поры, выделенном на вставке к рис. 3.

В случае дискообразной трещины нормального раскрытия в полярной системе координат существует следующая асимптотическая формула [11] для коэффициента интенсивности напряжений:

$$K_I = \lim_{r \rightarrow r_0+0} \left([2\pi(r - r_0)]^{\frac{1}{2}} \sigma_{zz}(r, \theta, 0) \right). \quad (3)$$

Для получения зависимости K_I от длины трещины проводились расчеты для указанной выше постановки задачи с внесением в геометрию центральной поры радиальной дискообразной трещины (рис. 2). Нашей целью было получение нижней оценки K_I . Для этого сначала находилось направление, характеризующееся углом θ_0 , при котором значения σ_{zz} в окрестности фронта трещины минимальны. Затем полученное распределение σ_{zz} в направлении радиуса r_0 вблизи фронта трещины аппроксимировалось функцией вида $\sigma_{zz}(r, \theta_0, 0) = \frac{A}{\sqrt{r-r_0}}$, находилась константа A и по формуле (3) вычислялось значение K_I для текущей длины трещины.

3. Результаты и обсуждение

Исследовалась зависимость нормированного усредненного гидростатического напряжения от нормированного радиуса поры с фиксированным шагом $M = 1.35$, выбранным в соответствии с указанным в работе [5]. Эта зависимость представлена на рис. 3. Видно, что соотношение между нормированным радиусом поры и нормированным усредненным гидростатическим напряжением

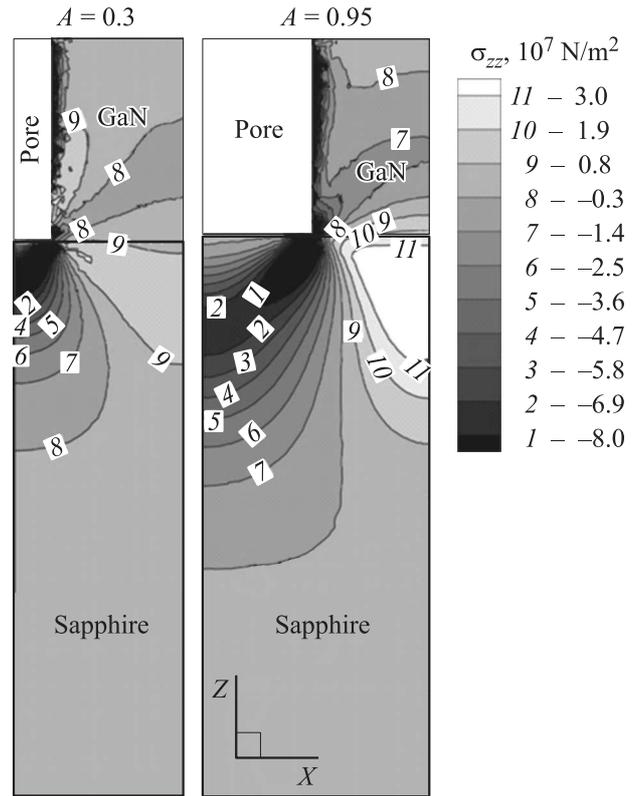


Рис. 5. Распределение компоненты напряжений σ_{zz} для открытых пор с нормированной высотой $A = 0.3$ и 0.95 и шагом $M = 1.35$ в плоскости симметрии.

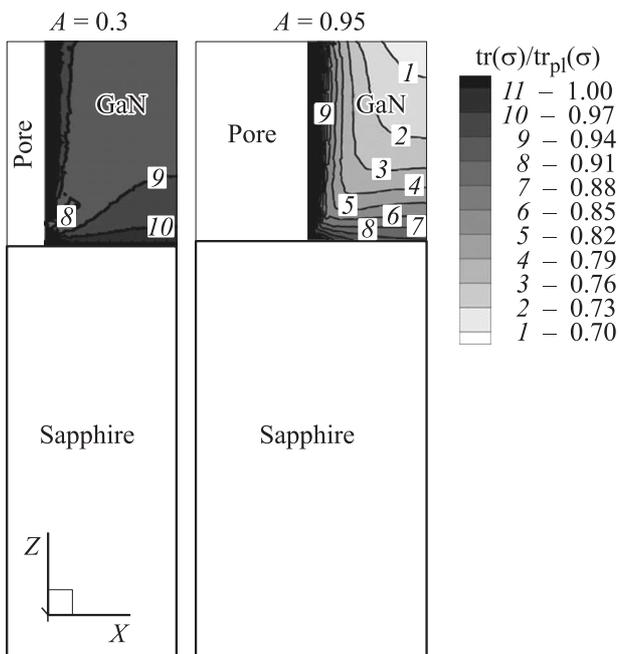


Рис. 4. Распределение нормированного гидростатического напряжения для открытых пор с нормированной высотой $A = 0.3$ и 0.95 и шагом $M = 1.35$ в плоскости симметрии. Контур 11 в поле рисунка не подписан ввиду его малого размера.

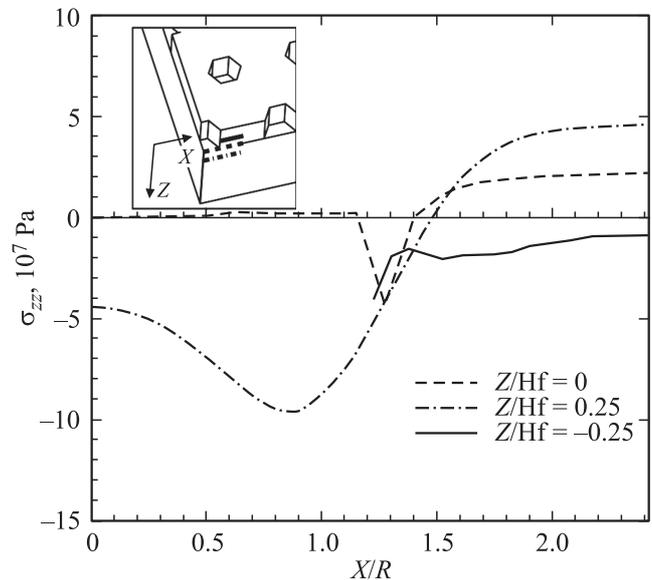


Рис. 6. Распределение компоненты напряжений σ_{zz} вдоль линий, параллельных границе GaN/сапфир (см. схему на вставке), на разном расстоянии от этой границы.

в пленке нитрида галлия и сапфировом основании имеет практически линейный характер. Угловой коэффициент для нитрида галлия равен -0.27 .

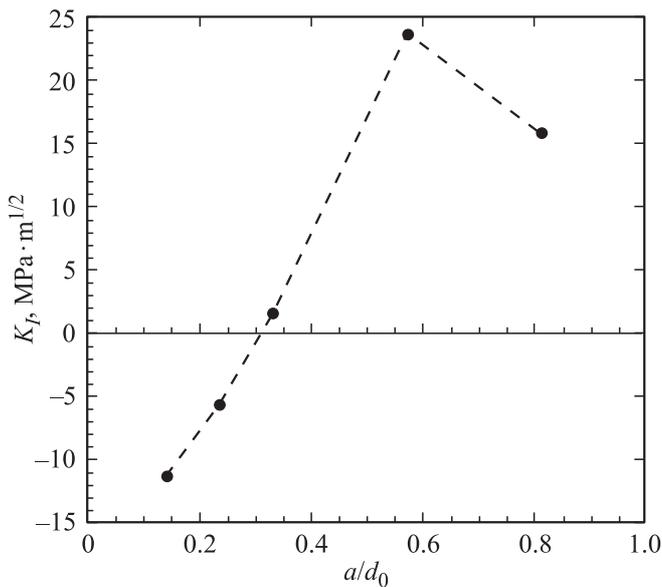


Рис. 7. Зависимость K_I на границе GaN/сапфир от доли длины трещины в материале, отнесенной к минимальному расстоянию между порами d_0 .

Распределения нормированного усредненного гидростатического напряжения для моделей с $M = 1.35$ и $A = 0.3, 0.95$ показаны на рис. 4. Из результатов, показанных на рис. 4, видно, что открытые поры приводят к уменьшению гидростатических напряжений в их окрестности. Напряжения концентрируются на границе поры и слоя нитрида галлия. Эффект локализации напряжений усиливается с увеличением нормированного радиуса пор.

Из рис. 5 видно наличие растягивающих напряжений σ_{zz} на границе GaN/сапфир, что может способствовать формированию трещин нормального раскрытия в этой области. Кроме того, значения σ_{zz} на границе GaN/сапфир повышаются с увеличением нормированного радиуса пор.

Из рис. 6 очевидно, что компонента напряжений σ_{zz} на границе GaN/сапфир достаточно быстро (менее чем на четверти высоты поры) сменяется растягивающим напряжением в пленке нитрида галлия.

На рис. 7 представлена полученная зависимость K_I от длины трещины. На границе GaN/сапфир вблизи поры складываются условия для возможного распространения трещины размером не менее трети ширины перегородки между порами. Это в конечном счете может привести к отделению подложки от пленки.

4. Заключение

Полученные результаты позволяют сделать следующие выводы.

1. Исследуемая пористая структура характеризуется более чем 20% падением гидростатических напряжений в пленке нитрида галлия.

2. Увеличение нормированного радиуса пор обуславливает уменьшение усредненного гидростатического напряжения в пленке нитрида галлия.

3. Эффект локализации напряжений усиливается с увеличением нормированного радиуса открытых пор.

4. Возможно зарождение трещин на границе GaN/сапфир и последующее отделение сапфировой подложки при повторном нагревании структуры.

Можно заключить, что рассмотренная пористая структура способна уменьшать механические напряжения в подложках GaN/сапфир.

Список литературы

- [1] J.-M. Bethoux, P. Venegues, F. Natali, E. Feltin, O. Tottereau, G. Nataf, P. De Mierry, F. Semon. *J. Appl. Phys.* **94**, 6499 (2003).
- [2] Y.-S. Chen, W.-Y. Shiao, T.-Y. Tang, W.-M. Chang, C.-H. Liao, C.-H. Lin, K.-C. Shen, C.C. Yang, M.-C. Hsu, J.-H. Yeh, T.-C. Hsu. *J. Appl. Phys.* **106**, 023 521 (2009).
- [3] T. Gehrke. *J. Nanophotonics* **2**, 021 990 (2008).
- [4] D.-S. Wu, H.-W. Wu, S.-T. Chen, T.-Y. Tsai, X. Zheng, R.-H. Horng. *J. Cryst. Growth* **311**, 3063 (2009).
- [5] M. Ali, A.E. Romanov, S. Suihkonen, O. Svensk, P.T. Torma, M. Sopanen, H. Lipsanen, M.A. Odnoblyudov, V.E. Bougrov. *J. Cryst. Growth* **315**, 188 (2010).
- [6] Н.А. Берг, А.Л. Колесникова, И.К. Королев, А.Е. Романов, А.Б. Фрейдин, В.В. Чалдышев, Е.С. Aifantis. *ФТТ* **53**, 1986 (2011).
- [7] F. Wright. *J. Appl. Phys.* **82**, 2833 (1997).
- [8] A.E. Romanov, T.J. Baker, S. Nakamura, J.S. Speck. *J. Appl. Phys.* **100**, 023 522 (2006).
- [9] W. Qian, M. Skowronski, G.R. Rohrer. In: III-nitride, SiC, and diamond materials for electronic devices. *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* / Eds D.K. Gaskill, C.D. Brandt, R.J. Nemanich. Pittsburgh, PA (1996). V. 423. P. 475.
- [10] A. Polian, M. Grimsditch, I. Grzegory. *J. Appl. Phys.* **79**, 3343 (1996).
- [11] Г.П. Черепанов. *Механика разрушения композитных материалов*. Наука, М. (1983). 296 с.