

Study of Interface Stress Property of GaN-Sapphire Hetero-Thick-Film System

Jia Li^{1*}, Junjie Shi², Jiejun Wu², Huizhao Liu¹, Haoran Qi¹

¹School of Science, Hebei University of Technology, Tianjin

²State Key Laboratory for Artificial Microstructures and Mesoscopic Physics, Research Center for Wide-Gap Semiconductors, School of Physics, Peking University, Beijing

Email: [*jiali@hebut.edu.cn](mailto:jiali@hebut.edu.cn), prince1000@163.com

Received: Nov. 7th, 2014; revised: Dec. 5th, 2014; accepted: Dec. 13th, 2014

Copyright © 2014 by authors and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

Abstract

Based on two hypothesis: a) eliminating the approximate condition that the thickness of film is far less than that of substrate adopted by Stoney model, and considering that the film thickness of GaN is comparable to that of Sapphire substrate; b) taking the GaN film as a film with non-uniform thickness which changes with r , we investigate the curvature and interface shear stress of GaN-Sapphire hetero-thick-film system. In addition, we take the film thickness of GaN as sinusoidal function of r , and study two types of film thickness variation, *i.e.* the thin-thick-thin model and thick-thin model. The results reveal that the system curvature is not a constant but a variable which changes with r . The interface shear stress shows a behavior of direction transition within the range of R , and transition point just corresponds to the extreme point of curvature, indicating that the curvature has a significant influence on the interface shear stress, which originates from our consideration of the non-uniform film thickness for GaN.

Keywords

GaN Film, Sapphire, Stress, Interface

GaN-蓝宝石异质厚膜体系界面应力特性研究

李 佳^{1*}, 史俊杰², 吴洁君², 刘辉召¹, 齐浩然¹

¹河北工业大学理学院, 天津

*通讯作者。

²北京大学宽禁带半导体研究中心, 人工微结构和介观物理国家重点实验室, 物理学院, 北京
Email: jiali@hebut.edu.cn, prince1000@163.com

收稿日期: 2014年11月7日; 修回日期: 2014年12月5日; 录用日期: 2014年12月13日

摘要

考虑两条假设: a) 去除Stoney模型中膜厚远小于基底厚度的近似条件, 考虑GaN膜的厚度和基底蓝宝石的厚度相当。b) 把GaN的膜厚考虑成非均匀的, 随面内径向坐标 r 变化。在此两条假设基础上研究了GaN-蓝宝石异质厚膜体系的曲率和界面剪切应力, 其中将GaN的膜厚取为坐标 r 的正弦函数, 且研究了从系统中心到边缘膜厚的薄-厚-薄和厚-薄的两种变化模式, 计算结果表明系统的曲率不再是常量而是随坐标 r 变化的变量, 界面剪切应力在整个半径 R 范围内出现方向的转变, 转变点正好对应曲率取极值的点, 可见曲率对界面剪切应力有重要影响, 根本原因来源于我们考虑了GaN膜厚的非均匀性。

关键词

GaN膜, 蓝宝石, 应力, 界面

1. 引言

GaN 是一种具有重要应用价值的半导体材料, 它有较宽的直接带隙, 可以应用到蓝光照明 LED、半导体激光器、高密度信息存储、高电子迁移率晶体管以及高性能探测等领域[1]-[3]。制备 GaN 常采用 GaN 衬底实现同质外延, 这样可以解决缺陷密度高、难以解理以及器件可靠性差等问题。制备 GaN 单晶衬底常用的方法主要有 MOCVD 和 HVPE 方法。目前, 氢化物气相外延(HVPE)方法是公认的主流方法, 其最高生长速度达 800 $\mu\text{m}/\text{h}$, 无裂纹厚度可达 300 微米以上, 位错密度可降低到 $10^6\sim 10^7\text{ cm}^{-2}$ 。单晶 GaN 主要在蓝宝石($\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$)基底上生长, 由于 GaN 厚膜和蓝宝石基底间具有较大的晶格失配, 并且两者的热膨胀系数差别较大, 所以在生长过程中会产生较大的应力, 常常导致 GaN 厚膜的翘曲和开裂, 而得不到完好的样品, 这显然与应力在厚膜内的积聚、分布以及演化特性有关。

人们针对膜-基底系统的应力问题建立了许多力学模型, 其中最著名的当属 Stoney 模型[4], 1909 年 Stoney 观察到金属薄膜沉积到厚的基底上会产生拉伸或者压缩, 为了表达外延膜材料的剩余应力与基底的翘曲曲率之间的关系, 基于圆盘形的基底-膜体系提出了著名的 Stoney 模型, 此模型基于几个基本假设: 1) 外延膜的膜厚远小于基底厚度。2) 体系产生的应变足够小。3) 基底材料和膜材料是均匀各向同性的, 满足弹性的线性特征。4) 沿厚度方向的所有应力分量是零。Stoney 模型是研究膜-基底体系的应力特征较早的模型之一, 其成功的建立了应力与曲率之间的联系, 可以与实验上发展起来的曲率测量技术[5]相结合有效的估算外延膜的剩余应力。但是, 此模型只适用于薄膜, 不能体现应力沿膜厚方向的演化特点, 而且没有包含膜材料的具体特性, 如弹性特征以及尺度等, 所以得到的应力相当粗略。此外, 还有 Freund 模型与 Timoshenko 模型, 1993 年 Freund 等人在 Stoney 模型基础上, 改进了其第(1)和第(2)条假设, 认为外延膜的厚度并非远小于基底厚度, 而且形变足够大, 将膜的厚度和弹性模量引入曲率表达式, 提出了 Freund 模型[6]。如果将模型中膜的厚度按远小于基底厚度处理则回到 Stoney 公式。1925 年 Timoshenko 基于条带形基底-膜体系提出了 Timoshenko 模型[7], 它假设在条带形的膜-基底体系中取出一部分, 由于失配应变等因素发生翘曲变形, 产生的力和力矩保持平衡, 由此推出曲率的表示式, 即 Timoshenko 模型, 和 Freund 模型相似, 在膜厚远小于基底厚度的极限下回到 Stoney 公式。因此, 虽

然 Freund 模型和 Timoshenko 模型是基于不同形状的基底 - 膜体系, 但是它们本质上是等价的。然而, 这两个模型仍存在如下缺陷: 没有考虑边界效应, 忽略了垂直于 z 轴的面间的力, 并由此假设曲率在整个面间是均匀的, 对于小的形变这些假设是合理的, 得到的曲率也足够精确, 但是如果形变较大则面间的力不能忽略, 那么此模型的计算结果将不再准确。

虽然以往这些模型在描述膜 - 基底系统的应力特性方面都取得了不同程度的成功, 但是一个普遍特征是只考虑面间的正应力, 不考虑剪切应力。本研究在 stoney 模型基础上, 考虑剪切形变, 讨论 GaN 厚膜 - 蓝宝石基底界面的剪切应力特性以及系统的曲率变化特性。

2. 剪切应力模型的建立

2.1. 厚膜 - 基底体系的几何模型

我们考虑一个厚膜 - 基底系统, 如图 1 所示, 坐标系统采用柱坐标 (r, q, z) , 界面的中心点选为坐标原点。厚膜和基底的厚度分别为 h_f 和 h_s , 整个盘形系统的半径为 R 。假设厚膜和基底材料为各向同性的。在这里, 我们不再把膜的厚度作为常量来处理, 而考虑为一个变量, 即 $h_f(r)$, 这也符合实验规律, 因为在膜的外延生长过程中其厚度不能保证在整个半径 R 内是严格相等的, 并且为了满足某种需求厚度在 R 范围内还是可以人为调节的。此外, 我们去掉 Stoney 模型的第一条假设——膜的厚度远小于基底的厚度, 即 $h_f \ll h_s$, 认为 h_f 和 h_s 是相当的。在以前的模型中常常不考虑基底的形变, 只考虑膜的形变, 而在这里, 我们将膜和基底的力学和几何特性考虑成对等的, 都存在由于热膨胀不同导致的形变, 且形变均为轴对称的, 即独立于极角 θ 。因此, 膜的面间位移 $u_f(r)$ 和基底的面间位移 $u_s(r)$ 只是坐标 r 的函数。

2.2. 厚膜 - 基底体系的力学连续性方程

根据线性弹性连续力学方程, 厚膜应力 N_r^f 和 N_θ^f 以及基底应力 N_r^s 和 N_θ^s 可以表示为

$$\begin{cases} N_r^f = \frac{E_f h_f}{1-\nu_f^2} \left[\frac{du_f}{dr} + \nu_f \frac{u_f}{r} \right] \\ N_\theta^f = \frac{E_f h_f}{1-\nu_f^2} \left[\nu_f \frac{du_f}{dr} + \frac{u_f}{r} \right] \\ N_r^s = \frac{E_s h_s}{1-\nu_s^2} \left[\frac{du_s}{dr} + \nu_s \frac{u_s}{r} \right] \\ N_\theta^s = \frac{E_s h_s}{1-\nu_s^2} \left[\nu_s \frac{du_s}{dr} + \frac{u_s}{r} \right] \end{cases} \quad (1)$$

其中, u_f 和 u_s 分别是厚膜和基底的面间位移, E_f 和 E_s 分别是厚膜和基底的杨氏模量, ν_f 和 ν_s 分别是厚膜和基底的泊松比, h_f 和 h_s 分别是厚膜和基底的厚度。

对于厚膜和基底, 根据面间的力学平衡, 可有如下方程成立

$$\begin{cases} \frac{dN_r^f}{dr} + \frac{N_r^f - N_\theta^f}{r} - \tau = 0 \\ \frac{dN_r^s}{dr} + \frac{N_r^s - N_\theta^s}{r} + \tau = 0 \end{cases} \quad (2)$$

其中 τ 为膜和基底的界面剪切力。

根据线性弹性连续理论, 厚膜与基底的弯矩可以表示为

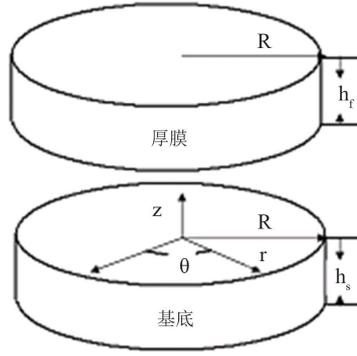


Figure 1. Diagram illustrating the thick film-substrate system in cylindrical coordinates. h_f and h_s is the thickness for thick film and substrate, respectively. They both have the radius R

图 1. 柱坐标下的厚膜 - 基底系统示意图。 h_f 和 h_s 分别为厚膜和基底的厚度，整个盘形样品的半径为 R

$$\begin{cases} M_r^f = \frac{E_f h_f^3}{12(1-\nu_f^2)} \left(\frac{d^2 w_f}{dr^2} + \frac{\nu_f}{r} \frac{dw_f}{dr} \right) \\ M_\theta^f = \frac{E_f h_f^3}{12(1-\nu_f^2)} \left(\nu_f \frac{d^2 w_f}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dw_f}{dr} \right) \\ M_r^s = \frac{E_s h_s^3}{12(1-\nu_s^2)} \left(\frac{d^2 w_s}{dr^2} + \frac{\nu_s}{r} \frac{dw_s}{dr} \right) \\ M_\theta^s = \frac{E_s h_s^3}{12(1-\nu_s^2)} \left(\nu_s \frac{d^2 w_s}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dw_s}{dr} \right) \end{cases} \quad (3)$$

其中， M_r^f 和 M_θ^f 为厚膜的弯矩， M_r^s 和 M_θ^s 为基底的弯矩， w_f 和 w_s 分别为厚膜和基底沿 z 方向的位移。

垂直于面间的力和力矩平衡要求如下成立

$$\begin{cases} \frac{dM_r^f}{dr} + \frac{M_r^f - M_\theta^f}{r} + \frac{h_f}{2} \tau = 0 \\ \frac{dM_r^s}{dr} + \frac{M_r^s - M_\theta^s}{r} + \frac{h_s}{2} \tau = 0 \end{cases} \quad (4)$$

在厚膜和基底的界面处位移的连续性要求

$$u_f - \frac{h_f}{2} \frac{dw_f}{dr} = u_s - \frac{h_s}{2} \frac{dw_s}{dr} \quad (5)$$

把(1)和(2)式带入(3)和(4)式有

$$\frac{dh_f}{dr} \left[\frac{du_f}{dr} + \nu_f \frac{u_f}{r} \right] + \left[\frac{d^2 u_f}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{du_f}{dr} - \frac{u_f}{r^2} \right] = \frac{1-\nu_f^2}{E_f h_f} \cdot \tau \quad (6)$$

$$\frac{d^2 u_s}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{du_s}{dr} - \frac{u_s}{r^2} = -\frac{1-\nu_s^2}{E_s h_s} \cdot \tau \quad (7)$$

$$\frac{3}{h_f} \frac{dh_f}{dr} \left(\frac{d^2 u_f}{dr^2} + \frac{\nu_f}{r} \frac{dw_f}{dr} \right) + \left(\frac{d^3 w_f}{dr^3} + \frac{1}{r} \frac{d^2 w_f}{dr^2} - \frac{1}{r^2} \frac{dw_f}{dr} \right) = -\frac{6(1-\nu_f^2)}{E_f h_f^2} \cdot \tau \quad (8)$$

$$\frac{d^3 w_s}{dr^3} + \frac{1}{r} \frac{d^2 w_s}{dr^2} - \frac{1}{r^2} \frac{dw_s}{dr} = \frac{6(1-\nu_s^2)}{E_s h_s^2} \cdot \tau \quad (9)$$

至此，我们得到五个微分方程(5)~(9)和五个未知数 u_f 、 u_s 、 w_f 、 w_s 和 τ 。如果有足够多的边界条件和初值条件，这些方程是可以解出来的。然而，实验上并没有足够多的边界条件和初值条件可供参考，但是，我们可以将以上微分方程进一步简化获得某些量的解。我们只考虑(8)和(9)式，根据 L. B. Freund 理论，膜 z 方向的位移 w_f 可以表示为 $\frac{1}{2}\kappa_f r^2$ ，其中 κ 是厚膜的曲率[8]，即，曲率 κ 为 $\frac{d^2 w_f}{dr^2}$ 。同样，基底的曲率 κ_s 为 $\frac{d^2 w_s}{dr^2}$ 。此外，我们假设 κ_f 和 κ_s 相等，即在形变过程中厚膜和基底始终贴在一起。定义 w'_f 和 w'_s 分别代表 $\frac{dw_f}{dr}$ 和 $\frac{dw_s}{dr}$ ， w''_f 和 w''_s 分别代表 $\frac{d^2 w_f}{dr^2}$ 和 $\frac{d^2 w_s}{dr^2}$ ，则(8)和(9)式可以表示为如下形式

$$\left[1 + \frac{E_s h_s^2 (1-\nu_f^2)}{E_f h_f^2 (1-\nu_s^2)} \right] \frac{d\kappa}{dr} + \left[\frac{3}{h_f} \frac{dh_f}{dr} + \frac{1}{r} + \frac{E_s h_s^2 (1-\nu_f^2)}{E_f h_f^2 (1-\nu_s^2)} \frac{1}{r} \right] \kappa + \left(\frac{3}{h_f} \frac{dh_f}{dr} \frac{\nu_f}{r} - \frac{1}{r^2} \right) w'_f - \frac{E_s h_s^2 (1-\nu_f^2)}{E_f h_f^2 (1-\nu_s^2)} \frac{1}{r^2} w'_s = 0 \quad (10)$$

$$w''_f = \kappa \quad (11)$$

$$w''_s = \kappa \quad (12)$$

给定 κ ， w'_f 和 w'_s 的初始条件，则(10)、(11)和(12)式的数值解可以计算出来。由于 $w'_f = w'_s = \kappa r$ ，所以， w'_f 和 w'_s 相等。系统界面处的剪切应力可以由(9)式推得，为

$$\tau = \frac{E_s h_s^2}{6(1-\nu_s^2)} \left(\frac{d\kappa}{dr} + \frac{1}{r} \kappa - \frac{1}{r^2} w'_s \right) \quad (13)$$

2.3. GaN 厚膜 - 蓝宝石基底系统的参数选择

我们将 GaN 厚膜的膜厚 h_f 随坐标 r 的变化取为正弦函数，但是从中心到边缘的薄厚变化分两种情况进行研究：a) 薄-厚-薄模式，HVPE 方法生长的 GaN 厚膜一般为 500 微米左右，膜厚上下浮动约为 5%，圆盘形样品的半径为 1 英寸(0.0254 米)。因此，膜厚 h_f 取如下形式

$$h_f = \left(500 + 25 \sin \left(\frac{\pi}{R} r \right) \right) \times 10^{-6} \text{ m} \quad (14)$$

其中， R 为厚膜的半径，在 $r = R/2$ 处膜厚取最大值 525 微米。在中心和边缘处均取最小值 500 微米。

b) 厚-薄模式，中心处取最大值 525 微米，边缘处取最小值 500 微米，膜厚 h_f 取如下形式

$$h_f = \left(525 - 25 \sin \left(\frac{\pi}{2R} r \right) \right) \times 10^{-6} \text{ m} \quad (15)$$

此外，GaN 厚膜和蓝宝石基底的其它参数取为如下： $E_f = 196 \times 10^9 \text{ Pa}$ [9]， $E_s = 425 \times 10^9 \text{ Pa}$ [9]， $h_f = 500 \times 10^{-6} \text{ m}$ ， $h_s = 450 \times 10^{-6} \text{ m}$ ， $\nu_f = 0.37$ [10]， $\nu_s = 0.28$ [11]，其中 E_f 和 E_s 分别为 GaN 和蓝宝石的杨氏模量。 ν_f 和 ν_s 分别为 GaN 和蓝宝石的泊松比。HVPE 方法生长的 GaN 厚膜曲率半径一般为 0.5 米，所以 κ ， w'_f 和 w'_s 的初始条件分别设为 2.0 m^{-1} ， 2.0×10^{-100} 和 2.0×10^{-100} 。

3. GaN 厚膜 - 蓝宝石基底体系膜厚在薄 - 厚 - 薄模式下的界面剪切应力特性以及曲率变化

按薄 - 厚 - 薄模式计算的曲率 κ 和 w'_f 分别如图 2 和图 3 所示。从图 2 可以看出，曲率不再是常量，而是随 r 变化的变量。坐标 r 在 0~0.0254 米范围内，曲率先下降然后上升，在 $r=0.012$ 米处取最小值 1.82 米^{-1} ，在 $r=0.0254$ 米处，即边缘处取最大值 2.1 米^{-1} 。曲率随 r 的这种变化特征实际上源于我们考虑了 GaN 膜厚随 r 的变化。从图 3 可以看出， w'_f 随 r 的变化几乎是线性的，实际上并非线性的，而是按照 κr 变化的。

GaN-蓝宝石系统界面剪切应力如图 4 所示，剪切应力在整个变化范围 $-1000 \text{ Pa} \sim 1000 \text{ Pa}$ 内呈现单调上升趋势，在系统的边缘取最大值，约为 1000 Pa 。可见，界面剪切力比以往报道的面间应力小很多，例如以往报道的面间应力有 $\sim 0.1 \text{ GPa}$ [1] [12] 和 $\sim 1.0 \text{ GPa}$ [13]。剪切应力从负值变到正值表明在等于零的地方应力方向发生了改变。与图 2 进行对比，我们很容易发现剪切应力为零的点实际上对应着曲率取最小值的点，这表明曲率变化的特性对应力特性产生了重要影响。

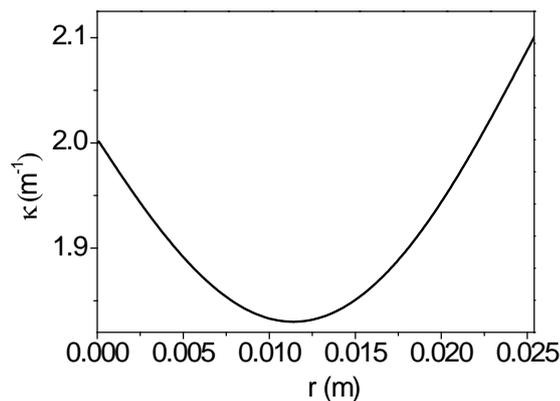


Figure 2. The calculated curvature of GaN thick film as a function of coordinate r in the whole sample radius R at thin-thick-thin mode

图 2. 计算得到的薄 - 厚 - 薄模式下的 GaN 厚膜在整个样品半径 R 范围内曲率随坐标 r 的变化

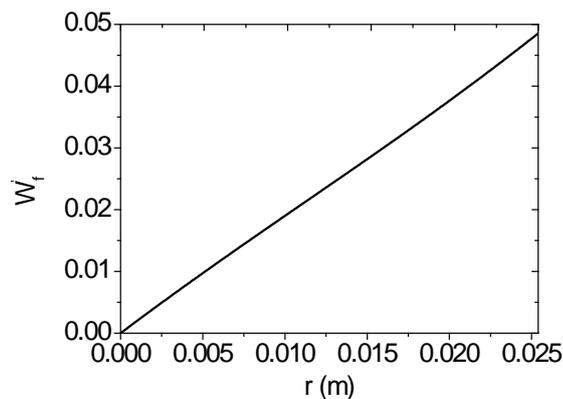


Figure 3. The calculated first-order derivative of the displacement in z direction, i.e. w'_f as a function of coordinate r in the whole sample radius R at thin-thick-thin mode

图 3. 计算的薄 - 厚 - 薄模式下的 z 方向位移的一阶导数，也就是在整个半径 R 范围内 w'_f 随坐标 r 的变化

为了方便理解，我们把界面剪切应力的方向画在图5中，由于蓝宝石的热膨胀系数比GaN大，所以在样品生长完成温度降到室温之后GaN-蓝宝石系统会发生弯曲，弯曲形状如图5中所示，其凸面在GaN一方。剪切应力的方向如箭头所示，对于GaN厚膜，在半径范围 $r=0\sim 0.012$ 米，剪切应力的方向朝向中心方向，在半径范围 $r=0.012\sim 0.025$ 米，方向朝向系统的边缘。而对于蓝宝石，剪切应力的方向和GaN厚膜完全相反，在半径范围 $r=0\sim 0.012$ 米，界面剪切应力的方向朝向体系的边缘，而在半径范围 $r=0.012\sim 0.025$ 米，方向朝向系统的中心。

4. GaN厚膜-蓝宝石基底体系膜厚在厚-薄模式下的界面剪切应力特性以及曲率变化

在厚-薄模式下计算的GaN厚膜的曲率随坐标 r 的变化如图6所示，曲率在 $r=0$ 的2.00开始逐渐上升，在 $r=0.023$ 米附近达到最大值2.19，而从 $r=0.023$ 米一直到样品边缘处 $r=0.0254$ 稍微有下降，但是变化很小。这里曲率的变化特性与薄-厚-薄模式下的曲率变化(如图2)明显不同，原因在于采用了不同的膜厚的变化模式。计算的 z 方向位移的一阶导数如图7所示，随坐标 r 变化看起来类似线性关系，从0.00上升到0.05左右，其实是按 κr 变化的，这里的结果与薄-厚-薄的结果非常接近(如图3)。

计算的体系界面处的剪切应力如图8所示，剪切应力 τ 在 $r=0$ 处取最大值450 Pa，随半径 r 增大呈

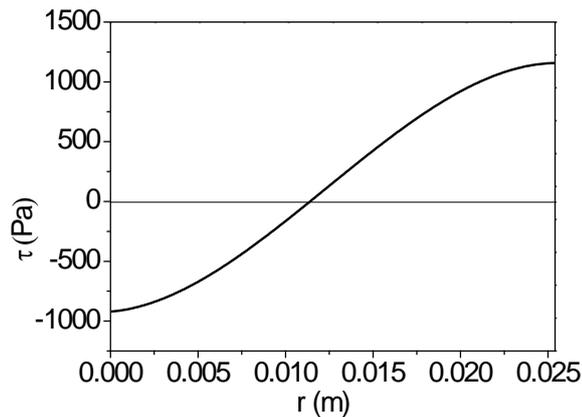


Figure 4. The calculated interface shear stress between the GaN thick film and Sapphire as a function of coordinate r in the whole sample radius R at thin-thick-thin mode
图4. 计算的薄-厚-薄模式下的GaN和蓝宝石界面处的剪切应力 τ 在整个半径 R 范围内随坐标 r 的变化

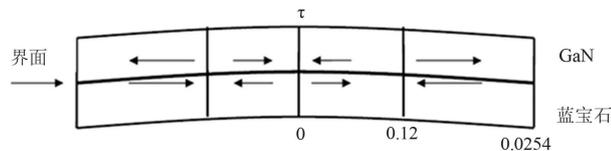


Figure 5. Diagram illustrating the shear stress τ of interface between the thick film GaN and substrate sapphire at thin-thick-thin mode. The arrow indicates the direction of shear stress τ . The coordinate $r=0$ denotes the center of GaN-sapphire system, and $r=0.012$ denotes the place where the stress is equal to zero

图5. 薄-厚-薄模式下GaN厚膜-蓝宝石体系界面处的剪切应力 τ 的示意图。箭头代表剪切应力 τ 的方向。坐标原点 $r=0$ 选在系统的中心处， $r=0.012$ 米处剪切应力为零

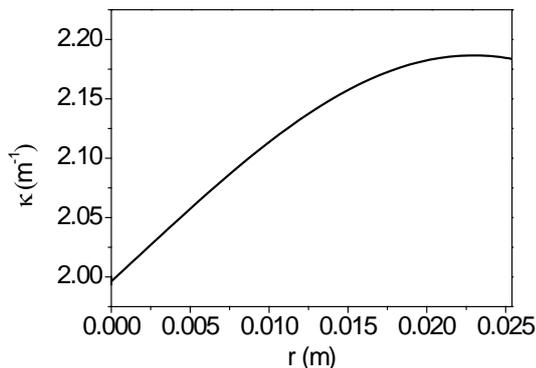


Figure 6. The calculated curvature of GaN thick film as a function of coordinate r in the whole sample radius R at thick-thin mode
图 6. 计算得到的厚 - 薄模式下 GaN 厚膜在整个样品半径 R 范围内曲率随坐标 r 的变化

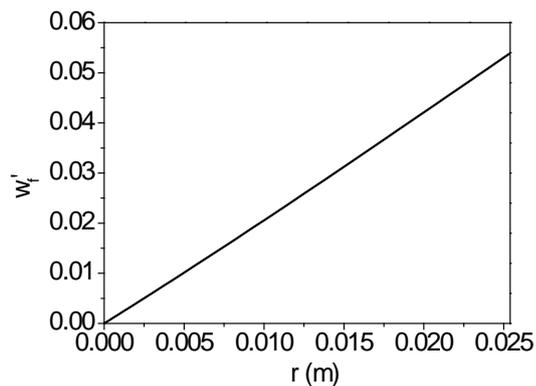


Figure 7. The calculated first-order derivative of the displacement in z direction, *i.e.* w'_z as a function of coordinate r in the whole sample radius R at thick-thin mode
图 7. 计算的厚 - 薄模式下 z 方向位移的一阶导数, 也就是在整个半径 R 范围内 w'_z 随坐标 r 的变化

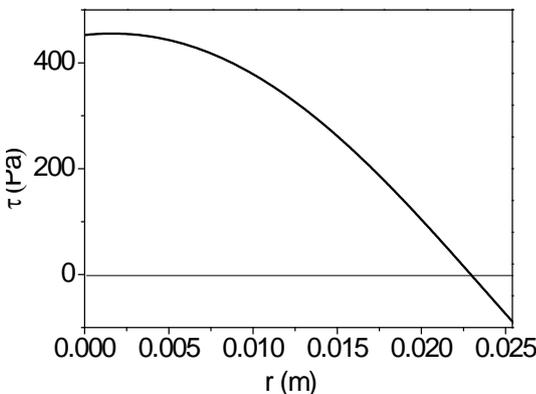


Figure 8. The calculated interface shear stress between the GaN thick film and Sapphire as a function of coordinate r in the whole sample radius R at thick-thin mode
图 8. 计算的厚 - 薄模式下的 GaN 和蓝宝石界面处的剪切应力 τ 在整个半径 R 范围内随坐标 r 的变化

单调下降趋势，在 $r = 0.023$ 米处下降为零，然后继续下降，一直到边缘处，即 $r = 0.0254$ m，达到最小值 -85 Pa。由此可见，剪切应力在 $r = 0.023$ 米处方向发生了转变，显然方向发生转变的点对应着曲率取最大值的点，这种曲率的极值点与剪切力方向转变点对应的特点与薄 - 厚 - 薄模式是一致的。图 9 画出了剪切应力的方向，对于 GaN 厚膜，在半径范围 $r = 0 \sim 0.023$ 米，应力方向朝向边缘，在半径范围 $r = 0.023 \sim 0.0254$ 米，方向朝向中心。而对于蓝宝石，剪切应力的方向和 GaN 厚膜完全相反，在半径范围 $r = 0 \sim 0.023$ 米，剪切应力的方向朝向体系的中心，而在半径范围 $r = 0.023 \sim 0.025$ 米，方向朝向系统的边缘。

5. 结论

本文做了如下两条基本假定：a) 去掉 Stoney 模型的近似条件——膜的厚度远小于基底的厚度，即 $h_f \ll h_s$ ，我们考虑 GaN 膜的厚度和基底蓝宝石的厚度可以相比。b) 我们把 GaN 厚膜的厚度考虑成非均匀的，是面内径向坐标 r 的函数。以此两条基本假设为基础建立力学微分方程组，研究了 GaN 厚膜 - 蓝宝石系统的曲率和界面剪切应力特性，其中将 GaN 厚膜的膜厚 h_f 与坐标 r 的函数关系取为正弦函数，并且研究了从样品中心到边缘的薄 - 厚 - 薄和厚 - 薄的两种膜厚的变化模式。计算结果表明：GaN 厚膜 - 蓝宝石系统的曲率不再是常量，而是随坐标 r 变化，界面剪切应力在整个半径范围内出现方向的转变，转变点正好对应曲率取极值的点。薄 - 厚 - 薄和厚 - 薄两种 GaN 膜厚的变化模式得到的曲率和剪切应力随坐标 r 的变化特性不同，在薄 - 厚 - 薄模式下，半径 r 在范围 $0 \sim 0.012$ 米，曲率逐渐下降，在 $r = 0.012$ 米处达到最小值，然后开始逐渐增大，在 $r = 0.0254$ 米，即系统的边缘处达到最大值。剪切应力从 -1000 Pa \sim 1000 Pa 内呈现单调上升趋势，在系统的边缘取最大值，约为 1000 Pa， $r = 0.012$ m 处剪切应力为零，对应曲率的最小值点。

在厚 - 薄模式下，曲率在 $r = 0$ 的 2.00 开始逐渐上升，在 $r = 0.023$ 米附近达到最大值 2.19 ，而从 $r = 0.023$ 米一直到样品边缘处 $r = 0.0254$ 米稍微有下降，但是变化很小。剪切应力随半径 r 增大呈单调下降趋势，在 $r = 0.023$ 米处下降为零，然后继续下降，一直到边缘处，即 $r = 0.0254$ 米，达到最小值 -85 Pa。总之，计算结果表明曲率对界面剪切应力有重要影响，根本原因来源于 GaN 的膜厚的非均匀性。

致 谢

感谢国家自然科学基金资助项目(No.61204013, 51072007, 60711127203)、河北省高等学校科学技术研究优秀青年基金资助项目(No.Y2012004)、河北省自然科学基金资助项目(E2014202189)对本论文工作的资助。

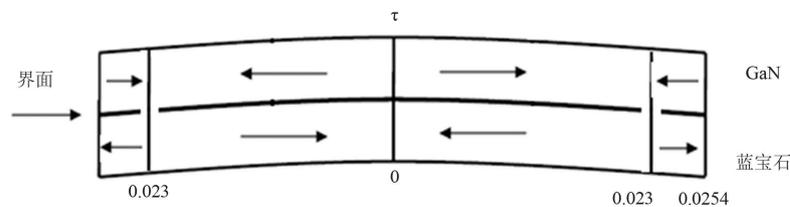


Figure 9. Diagram illustrating the shear stress τ of interface between the thick film GaN and substrate sapphire at thick-thin mode. The arrow indicates the direction of shear stress τ . The coordinate $r = 0$ denotes the center of GaN-sapphire system, and $r = 0.023$ denotes the place where the stress is equal to zero
图 9. 厚 - 薄模式下 GaN 厚膜 - 蓝宝石体系界面处的剪切应力 τ 的示意图。箭头代表剪切应力 τ 的方向。坐标原点 $r = 0$ 选在系统的中心处， $r = 0.023$ 米处剪切应力为零

项目基金

国家自然科学基金资助项(No.61204013, 51072007, 60711127203); 河北省高等学校科学技术研究优秀青年基金资助项目(No.Y2012004)、河北省自然科学基金资助项目(E2014202189)。

参考文献 (References)

- [1] Chung, K., Lee, C.-H. and Yi, G.-C. (2010) Transferable GaN layers grown on ZnO-coated graphene layers for optoelectronic devices. *Science*, **330**, 655-657.
- [2] Taniyasu, Y., Kasu, M. and Makimoto, T. (2006) An aluminium nitride light-emitting diode with a wavelength of 210 nanometres. *Nature*, **441**, 325-328.
- [3] Zhang, S., Shi, J.-J., Zhang, M., Yang, M. and Li, J. (2011) First-principles investigation on optical properties of GaN and InGaN alloys. *Journal of Physics D: Applied Physics*, **44**, 495304.
- [4] Stoney, G.G. (1909) The tension of metallic films deposited by electrolysis. *Proceedings of the Royal Society of London*, **82**, 172-175.
- [5] Floro, J.A., Lucadamo, G.A., Chason, E., Freund, L.B., Sinclair, M., Twisten, R.D. and Hwang, R.Q. (1998) SiGe island and shape transitions induced by elastic repulsion. *Physical Review Letters*, **80**, 4717.
- [6] Freund, L.B., Floro, J.A. and Chason, E. (1999) Extensions of the Stoney formula for substrate curvature to configurations with thin substrates or large deformations. *Applied Physics Letters*, **74**, 1987-1989.
- [7] Timoshenko, S.P. (1925) Analysis of bi-metal thermostats. *Journal of the Optical Society of America*, **11**, 233-255.
- [8] Freund, L.B. and Suresh, S. (2003) Thin film materials: Stress, defect formation, and surface evolution. Cambridge University Press, London.
- [9] Barghout, K. and Chaudhuri, J. (2004) Calculation of residual thermal stress in GaN epitaxial layers grown on technologically important substrates. *Journal of Materials Science*, **39**, 5817-5823.
- [10] Hiramatsu, K., Detchprohm, T. and Akasaki, I. (1993) Relaxation mechanism of thermal stresses in the heterostructure of GaN grown on sapphire by vapor phase epitaxy. *Japanese Journal of Applied Physics*, **32**, 1528-1533.
- [11] Touloukian, Y.S., Kirby, R.K., Taylor, R.E. and Lee, T.Y.R., Eds. (1977) Thermophysical properties of matter. Plenum Press, New York.
- [12] Murray, C.E. and Noyan, I.C. (2002) Finite-size effects in thin-film composites. *Philosophical Magazine A*, **82**, 3087-3117.
- [13] Itoh, N., Rhee, J.C., Kawabata, T. and Koike, S. (1985) Study of cracking mechanism in GaN/ α -Al₂O₃ structure. *Journal of Applied Physics*, **58**, 1828.