

可用于 GaAlAs/GaAs 异质结发光器件 应力设计的应力分布计算方法

李炳辉 李志宏 韩汝琦 王阳元

(北京大学微电子学研究所 北京 100871)

摘要 基于作者提出的改进应力分布力学模型得到了计算半导体异质结多层结构应力分布的公式。针对带缓冲层 GaAlAs 可见光激光器计算得到的有源层应力可以很好地解释 Shimizu 等有关器件寿命的实验结果。分析并指出了一些文献中处理半导体异质结多层结构应力问题的不合理之处。

EEACC: 0510D, 4320J

1 引言

对于半导体光电子器件特别是激光器来说, 应力对器件的激射模式^[1]和可靠性都有影响^[2~4]。实验发现有源区处于压应力状态较处于张应力状态对于提高器件的可靠性更为有利^[5]。早期有关半导体异质结构中应力分布的理论^[6~7]都基于 Timoshenko 针对双金属条所发展的梁平衡理论^[8]。Chu 等^[9]认为以上方法中将双金属条的弯矩看成是各自弯矩的简单相加其合理性值得怀疑, 并提出了新的处理方法。本文作者对这两种模型所依据的力学平衡条件进行了分析, 发现在各层都有相同的弯曲半径即均匀弯曲假设成立的条件下二者实际上是等价的。Chu 等在使用 Davidenkov^[10]的表示式计算弯矩的同时, 又采用了和文献[5]相同的界面匹配条件。本文作者针对 Chu 等模型的这一缺陷基于均匀弯曲假设提出了改进的应力分布模型, 并给出了单个外延层和衬底所组成的系统的模型结果, 对均匀弯曲假设成立的条件也进行了分析^[11]。本文将在此基础上首先给出半导体异质结多层结构中的应力分布计算公式, 然后将其用于计算 GaAlAs 可见光激光器有源区中应力与缓冲层参数(Al 组分、厚度)的关系并和文献中的实验结果进行比较。

李炳辉 男, 1963年生, 讲师, 主要从事半导体器件物理和新结构器件的研究

韩汝琦 男, 1938年生, 教授, 博士生导师, 主要从事固体物理、半导体物理和新结构器件的研究

王阳元 男, 1935年生, 教授, 中国科学院院士, 博士生导师, 主要从事 VLSI 新工艺、新器件和新结构的研究

1995年6月27日收到初稿, 1996年1月10日收到修改稿

2 计算方法

下面考虑图1所示的多层异质结构。其中衬底的晶格常数、厚度和杨氏模量分别为 a_0, t_0

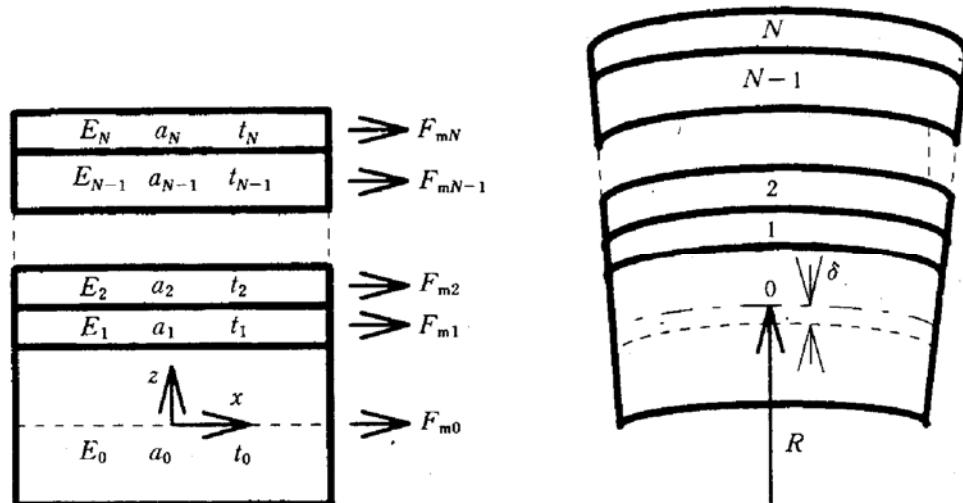


图 1 半导体异质结多层结构示意图

(a) 弯曲前(只受失配力作用); (b) 弯曲后。

和 E_0, N 个异质外延层未受应力作用时的晶格常数分别为 a_1, a_2, \dots, a_N , 厚度分别为 t_1, t_2, \dots, t_N , 杨氏模量分别为 E_1, E_2, \dots, E_N ; 另外, 各层泊松比应该接近, 假设相同且都为 ν 。为了不失一般性, 下面首先考虑存在一非相干界面的情况。假设在失配力的作用下各层沿界面方向的晶格常数分别变为 a_{xi} , 且在第 $k-1$ 和第 k 层的交界面有失配位错存在。令第 k 层相对于衬底的失配 $(a_{xk} - a_{x0})/a_{x0} = \epsilon_{\parallel k}$, 则界面匹配条件要求失配应变 $\epsilon_{mx0}, \epsilon_{mx1}, \epsilon_{mx2}, \dots, \epsilon_{mxN}$ 满足如下条件

$$a_i(1 + \epsilon_{mxi}) = a_0(1 + \epsilon_{mx0}) = a_{x0}, \quad 1 \leq i \leq k-1 \quad (1)$$

$$a_i(1 + \epsilon_{mxi}) = (1 + \epsilon_{\parallel k})(1 + \epsilon_{mx0})a_0 = a_{xk}, \quad k \leq i \leq N \quad (2)$$

由此可得

$$\epsilon_{mxi} = \frac{1 + \epsilon_{mx0}}{1 + (\Delta a/a)_{ri}} - 1, \quad 1 \leq i \leq k-1 \quad (3)$$

$$\epsilon_{mxi} = \frac{(1 + \epsilon_{\parallel k})(1 + \epsilon_{mx0})}{1 + (\Delta a/a)_{ri}} - 1, \quad k \leq i \leq N \quad (4)$$

其中

$$(\frac{\Delta a}{a})_{ri} = (\frac{a_i - a_0}{a_0}), \quad i = 1, 2, \dots, N$$

利用失配力 F_m 的平衡条件可得衬底的失配应变

$$\epsilon_{mx0} = \frac{\sum_{i=1}^{k-1} \frac{E_i t_i (\Delta a/a)_{ri}}{1 + (\Delta a/a)_{ri}} + \sum_{i=k}^N \frac{E_i t_i [(\Delta a/a)_{ri} - \epsilon_{\parallel k}]}{1 + (\Delta a/a)_{ri}}}{E_0 t_0 + \sum_{i=1}^N \frac{E_i t_i}{1 + (\Delta a/a)_{ri}}} \quad (5)$$

进一步利用弯曲力和力矩的平衡条件可得整个结构的弯曲半径 R 满足

$$-\frac{1}{R} = \left\{ \sum_{i=1}^{k-1} E_i t_i \left[\frac{1 + \epsilon_{mx0}}{1 + (\Delta a/a)_{ri}} - 1 \right] \left(\frac{t_i}{2} - \frac{t_0}{2} + \sum_{j=0}^{i-1} t_j \right) + \sum_{i=k}^N E_i t_i \left[\frac{(1 + \epsilon_{//k})(1 + \epsilon_{mx0})}{1 + (\Delta a/a)_{ri}} - 1 \right] \left(\frac{t_i}{2} - \frac{t_0}{2} + \sum_{j=0}^{i-1} t_j \right) \right\} / \sum_{i=0}^N E_i I_i \quad (6)$$

其中 I_i 为各层相对于中性面的惯性矩, 计算公式为

$$I_0 = \frac{t_0^3}{12} + t_0 \delta^2 \quad (7)$$

$$I_i = \frac{t_i^3}{12} + t_i \left[\delta - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^i (t_{j-1} + t_j) \right]^2, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (8)$$

δ 为 Z 坐标原点选为衬底中面时整个结构中性面的位置, 其计算公式为

$$\delta = \frac{\sum_{i=1}^N E_i \frac{t_i}{2} (t_0 + t_i + \sum_{j=1}^{i-1} 2t_j)}{\sum_{i=0}^N E_i t_i} \quad (9)$$

需要说明的是, 这里所指的中性面只是弯曲应力为零, 实际上还存在失配应力和应变. 整个异质结构中的应变是失配应变和弯曲应变的和, 计算公式为

$$\epsilon_0(z) = \epsilon_{mx0} + \frac{z - \delta}{R}, \quad -\frac{t_0}{2} < z < \frac{t_0}{2} \quad (10)$$

$$\epsilon_{mxi}(z) = \frac{1 + \epsilon_{mx0}}{1 + (\Delta a/a)_{ri}} - 1 + \frac{z - \delta}{R}, \quad -\frac{t_0}{2} + \sum_{j=0}^{i-1} t_j < z < -\frac{t_0}{2} + \sum_{j=0}^i t_j, \\ i = 1, 2, \dots, k-1 \quad (11)$$

$$\epsilon_{mxi}(z) = \frac{(1 + \epsilon_{//k})(1 + \epsilon_{mx0})}{1 + (\Delta a/a)_{ri}} - 1 + \frac{z - \delta}{R}, \quad -\frac{t_0}{2} + \sum_{j=0}^{i-1} t_j < z < -\frac{t_0}{2} + \sum_{j=0}^i t_j, \\ i = k, k+1, \dots, N \quad (12)$$

这就是半导体异质结多层结构应变分布的计算公式. 知道了应变分布很容易得到应力分布, 两者只相差一常数因子 $E_i/(1-\nu)$, 这里 ν 为材料的泊松比.

对于 GaAlAs/GaAs 这种小失配系统, 一般不会出现失配位错, 同时各层的杨氏模量可认为是相同的. 这时应变和应力分布的计算可以大大简化. 首先(5)和(6)两式分子中的两项可以合并, (6)式分母中的 $\sum_{i=0}^N E_i I_i$ 也可以简化为

$$\sum_{i=0}^N E_i I_i = \frac{E}{12} \left(\sum_{i=0}^N t_i \right)^3 \quad (13)$$

此外, 计算中性面位置的(9)式可以简化为

$$\delta = \frac{\sum_{i=1}^N t_i}{2} \quad (14)$$

对实际结构应力分布的计算表明, 以上计算方法和基于 Timoshenko 模型的计算方法比较, 计算过程可以大为简化.

3 GaAlAs 可见光激光器有源区应力计算

对于图2所示的带缓冲层的 GaAlAs 可见光激光器多层结构,采用以上计算方法计算了 GaAlAs 有源区内应力与缓冲层厚度及组分的关系。该结构为六层结构,图中给出的有源区和限制层的组分对应的激光器的激射波长约为 755nm。图3和图4分别给出了在缓冲层厚度一定时($t_1 = 10\mu\text{m}$)有源区层应力(σ_3)与其组分(x_1)的关系以及当缓冲层组分一定时($x_1 = 0.5$)有源区层应力与其厚度的关系。在计算中假设各层的杨氏模量相等且 $E/(1-\nu) = 1 \times 10^{11}\text{Pa}$;

GaAs	$t_5 = 1\mu\text{m}$
GaAlAs	$x_4 = 0.6$ $t_4 = 1\mu\text{m}$
GaAlAs	$x_3 = 0.2$ $t_3 = 0.1\mu\text{m}$
GaAlAs	$x_2 = 0.6$ $t_2 = 1\mu\text{m}$
GaAlAs	x_1 (buffer) t_1
GaAs (substrate)	$t_0 = 80\mu\text{m}$

图2 带缓冲层 GaAlAs 可见光激光器结构示意图

室温下 GaAs 和 AlAs 间的晶格失配取文献[5]所选的值 $\epsilon = 1.26 \times 10^{-3}$, 根据 Vegard 定律, 计算公式中的 $(\Delta a/a)_i = x_i \epsilon = 1.26 \times 10^{-3} x_i$. 在这两个图中为了节省空间, 压应力(值为负)和张应力都画在了横轴的同一侧, 相应的值分别由左右两边的纵轴标度. 由图3. 可见有源区内的应力状态与缓冲层的 Al 组分 x_1 关系很大, 随 x_1 增加可从压应力变为张应力, 当 $x_1 = 0.41$ 时, 有源区内的应力为零. 由图4可见, 随缓冲层厚度的增加有源区的应力状态同样可以从压应力变为张应力, 有源区应力为零点对应的缓冲层厚度为 $t_1 = 7.5\mu\text{m}$.

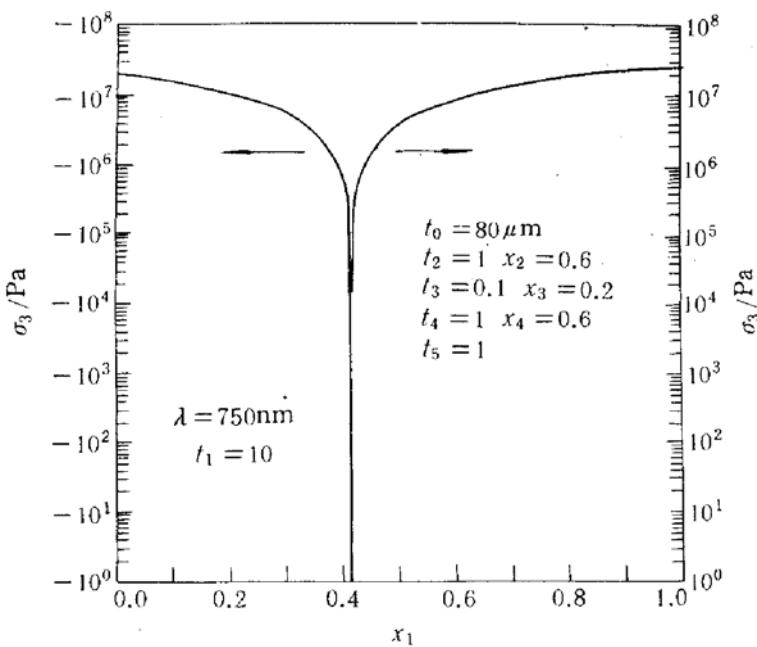


图3 GaAlAs 可见光激光器有源区应力与缓冲层 Al 组分的关系

4 讨论

按照图4的计算结果, 对于组分为 0.5 的缓冲层, 当其厚度稍小于 $7.5\mu\text{m}$ 时, 有缓冲层激光器有源区的应力将远小于没有缓冲层时的应力, 同时有源区是受压应力作用的. 根据压应力状态较张应力状态对提高器件寿命有利这一实验结论, 采用组分为 0.5 厚度稍大于 $7.5\mu\text{m}$ 的缓冲层更有利于提高波长 755nm 可见光激光器的寿命. Shimizu 等^[12]实际制作了有缓冲层的波长 755nm 可见光激光器, 并和相同波长不带缓冲层器件的寿命进行了比较. 外延层结构和图3基本相同, 只是顶层 GaAs 接触层的厚度($1.2\mu\text{m}$)稍大了一些, 缓冲层的组分和厚度 0.5 分别为和 $7\mu\text{m}$. 根据图5的结果, 这时有源区的压应力只有 $7.4 \times 10^5\text{Pa}$, 远小于无缓冲层时的压应力值 $1.8 \times 10^7\text{Pa}$. Shimizu 等的实验结果表明, 带缓冲层结构器件的寿命明显提高. 因此本文的模型计算结果可以很好地解释这一实验结果. 本文只对波长 755nm 可见光激光器的外延多层结构计算了

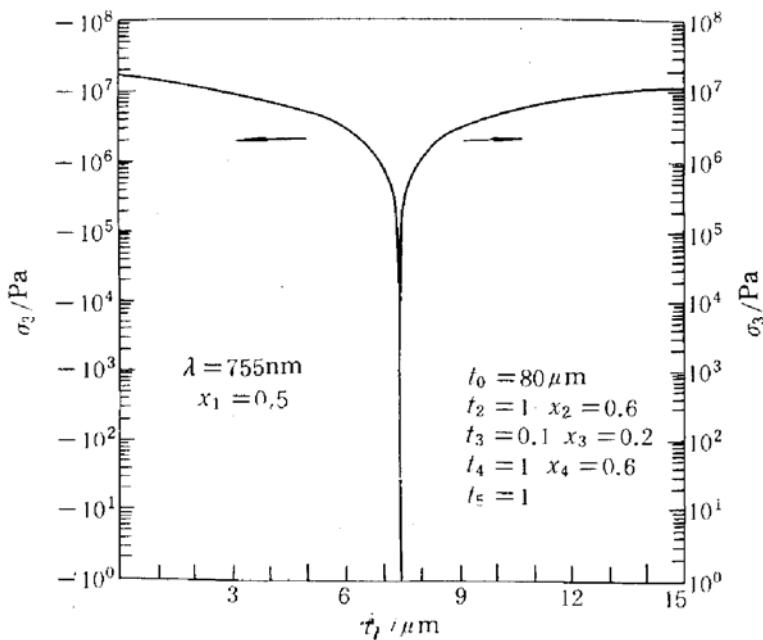


图 4 GaAlAs 可见光激光器有源区应力与缓冲层厚度的关系

引入热膨胀系数和温度差(生长温度和室温之间)所产生的后果。由于在界面匹配条件中有温度差引入的应变项 $\alpha_i \Delta T$, 所得到的弯曲半径与温度差成反比, 应力则与温度差成正比。由于对于确定组分的材料热膨胀系数应该是一定的, 按照这种模型当生长温度不同时, 最后得到的室温材料的应力状态也将不同。这显然也是不合理的。事实上只要最后得到的材料没有缺陷, 无论采用 MBE 技术低温生长还是利用液相外延技术在较高的温度下生长, 当回到室温时材料中的应力都应该是相同的。文献[8]在处理半导体多层结构应力时同样采用了和热应变有关的匹配条件, 其处理方法也是有问题的。分析半导体多层异质结构中的应力分布是一个静力学平衡问题, 而温度差是一与过程有关的量, 不应该出现在其中。降温过程可能影响外延层的室温状态, 如在某一界面产生不同数目的位错, 但这只能通过引入新的与状态有关的量来描述。对于只在一个界面存在失配位错的特殊情况, 可以直接应用本文的计算模型。

5 结论

给出了利用改进的应力分布力学模型得到的计算半导体异质结构多层结构应力分布和弯曲半径的有关公式。和基于 Timoshenko 模型的计算方法比较, 利用这些公式计算应力分布可使计算大为简化。对于 GaAlAs/GaAs 异质结这一小失配系统来说, 这些公式不仅可以被用于计算给定结构中的应力分布, 还特别适合发光器件的应力设计以提高可靠性。最后还指出了处理相同问题的一些文献所存在的不合理之处。

有源区的应力, 主要是为了和 Shimizu 等的实验结果作比较。显然, 本文中的应力计算模型可以用于任何 GaAlAs/GaAs 异质结多层结构中应力的计算, 因而可用于各种波长激光器各层厚度的设计, 以减小有源区的应力, 进而提高器件的可靠性。

应该指出的是, Shimizu 等在同一文章中也给出了一种计算应力分布的模型。并给出了和图3和图4类似的结果。其模型和文献[6]给出的模型相似, 都基于 Timoshenko 的双金属条平衡理论。Shimizu 等采用了和 Saul^[6]不同的界面匹配条件, 但文中给出的计算弯曲半径的表示式(原文(9)式)除了因假设力的方向不同所引入的符号差别外则和 Saul 的相同。这显然是有问题的。下面再分析一下这两篇文献在界面匹配条件中

参 考 文 献

- [1] F. K. Reinhart and R. A. Logan, *J. Appl. Phys.*, 1973, **44**:3171.
- [2] R. L. Hartman and A. R. Hartman, *Appl. Phys. Lett.*, 1973, **23**:147.
- [3] T. Kamejima, K. Ishida and J. Matsui, *Jap. J. Appl. Phys.*, 1977, **16**:233.
- [4] A. R. Goodwin, P. A. Kirkby, I. G. A. Davis *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, 1979, **34**:647.
- [5] G. H. Olsen and M. Ettenberg, *J. Appl. Phys.*, 1977, **48**:2543.
- [6] R. H. Saul, *J. Appl. Phys.*, 1969, **40**:3273.
- [7] Zhe-chuan Feng and Hong-du Liu, *J. Appl. Phys.*, 1983, **54**:83.
- [8] S. Timoshenko, *J. Opt. Soc. Amer.*, 1925, **11**:233.
- [9] S. N. G. Chu, A. T. Macrander, K. E. Streege *et al.*, *J. Appl. Phys.*, 1985, **57**:249.
- [10] N. N. Davidenkov, *Sov. Phys. Solid State*, 1961, **2**:2595.
- [11] 李炳辉, 韩汝琦, 王阳元, *半导体学报*, 待发表.
- [12] H. Shimizu, K. Itoh, M. Wada *et al.*, *IEEE. J. Quantum Electron.*, 1981, **5**:763.

Multilayer Structure Stress Distribution Calculation Applicable to Stress Design of GaAlAs/GaAs Heterostructure Light Emitting Devices

Li Binghui, Li Zhihong, Han Ruqi and Wang Yangyuan

(Institute of Microelectronics, Peking University, Beijing 100871)

Received 27 June 1995, revised manuscript received 10 January 1996

Abstract Based on our new mechanical model given in a previous publication, formulas for stress distribution in a multilayer structure are obtained. The calculated active layer stress for a practical GaAlAs visible laser with a buffer layer can well explain the improvement in operation life. The faults in some previous publication which also deal with stress distribution in multilayer structures are pointed out.

EEACC: 0510D, 4320J