

# 半导体多层结构的热应变弯曲和层应力

冯哲川 刘弘度

(北京大学物理系)

1981年11月28日收到

## 提 要

导出了杨氏模量和生长温度各不相同的多层结构的热应变弯曲半径和层内应力的普遍公式,包括衬底具有固有弯曲的情况,并给出在不同条件下公式的特殊形式,尤其是有较广泛应用的厚衬底条件下的近似式。应用导出的公式,计算了有源区掺 Al 和具有缓冲层的 GaAlAs DH 激光器中有源层应力随各层厚度和 Al 组分的变化,得到有源层应力为零的条件的显式;研究了 MSTO GaAlAs 多层结构的有源层内应力,计算了氧化层和金属层的贡献;还测量了 GaAs 上热氧化层  $Ga_2O_3$  的线胀系数和杨氏模量,此方法也适用于其他衬底上的薄层材料。

## 一、导 言

半导体激光器和集成光学器件,一般都具有多层结构,由于各层材料的热胀系数不同,将产生弯曲和应变,在各层内出现应力。了解应力分布和弯曲半径是实际研究工作中很感兴趣的问题,例如半导体激光器的工作寿命和特性都与有源区应力有关;也可利用应力及其光弹性效应形成光波导和光波导器件。因此,许多作者都对多层结构的应力问题进行了研究<sup>[1-6]</sup>。

但是,文献[2]—[6]都假设了各层的杨氏模量和生长温度均相等,得到的热应变弯曲曲率半径和层应力的近似公式,不能适用于更普遍的情况。例如,在氧化条形激光器<sup>[7]</sup>中,外延层之上淀积有  $SiO_2$  薄层;我们实验室新近发展的掩蔽与选择性热氧化(MSTO)多层结构<sup>[8]</sup>中,顶层的 GaAs 被氧化,形成  $Ga_2O_3$  层;通常的半导体激光器或集成光学器件的顶面,常淀积有 Cr-Au 等金属化层。这些氧化层和金属层的杨氏模量和生长或淀积温度与衬底材料的差别较大,因此,文献[2]—[6]的近似公式不能适用。

本文导出了多层结构的热应变弯曲和层应力的普遍公式,允许各层杨氏模量各不相同,生长或淀积温度各不相同,还包括衬底具有固有弯曲的情况。文献[1]—[6]的各公式都是我们的普遍公式的特例。文中还给出了在实际中有用的厚衬底条件下的简化公式。作为应用,计算了  $Ga_{1-x}Al_xAs-Ga_{1-y}Al_yAs$  双异质五层和六层结构的有源层应力,得出其为零的显式;测量了 Cr-Au 和  $Ga_2O_3$  薄层的线胀系数和杨氏模量;计算了热氧化 GaAs-GaAlAs DH 多层结构<sup>[8]</sup>的应力问题。

## 二、理 论

### 1. 方程组与普遍解

考虑如图 1 的 N 层一维结构,  $\alpha_i$ 、 $E_i$  和  $d_i$  分别是各层材料的线胀系数、杨氏模量和厚度,  $\Delta T_i$  为室温与第  $i + 1$  层生长温度之差. 与 Timoshenko<sup>[1]</sup> 的分析类似, 设每层内由于热应变弯曲产生的应力分布等效为一平均面应力  $P_i$  和面力矩  $M_i$  (单位宽度, 以图 1 中标示为正向) 的作用.

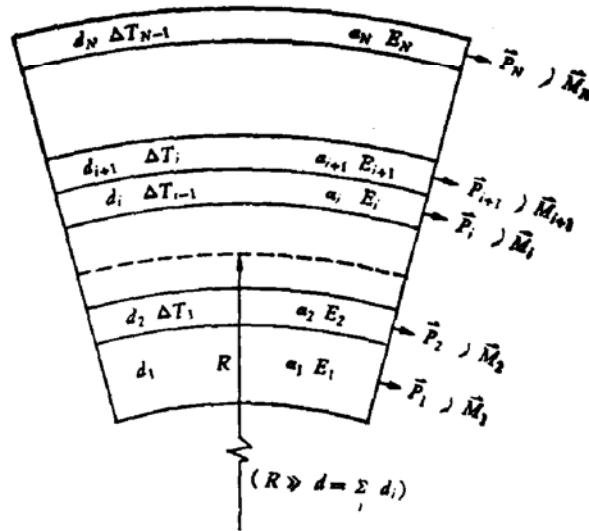


图 1 N 层结构一维示意图 (条宽  $\ll$  条长,  $R \gg \sum d_i$ )

由总作用力和总力矩平衡, 我们有

$$\sum_{i=1}^N P_i = 0, \tag{1}$$

$$\sum_{i=1}^N M_i + \sum_{i=1}^N P_i \left( \sum_{j=1}^{i-1} d_j + \frac{d_i}{2} \right) = 0. \tag{2}$$

规定  $i = 1$  时,  $\sum_{j=1}^{i-1} d_j = 0$ . 以  $I_i$  为第  $i$  层的转动惯量,

$$M_i = \frac{E_i I_i}{R} = \frac{E_i d_i^3}{12R}. \tag{3}$$

要求第  $i$  层和第  $i + 1$  层相邻边界处切应变相等, 我们有

$$\alpha_i \Delta T_i + \frac{P_i}{E_i d_i} + \frac{d_i}{2R} = \alpha_{i+1} \Delta T_i + \frac{P_{i+1}}{E_{i+1} \Delta T_i} - \frac{d_{i+1}}{2R}, \quad (i < N) \tag{4}$$

由(1)和(4)式, 可解出(见附录 A)

$$P_i = \frac{E_i d_i}{\sum_j E_j d_j} \left\{ \frac{1}{R} \sum_j E_j d_j \left( \frac{d_i - d_j}{2} + \sum_{k < i} d_k - \sum_{k < i} d_k \right) \right\}$$

$$+ \sum_j E_j d_j \left[ \sum_{k < j} (\alpha_{k+1} - \alpha_k) \Delta T_k - \sum_{k < l} (\alpha_{k+1} - \alpha_k) \Delta T_k \right], \quad (5)$$

由(5)、(2)和(3)式, 可得

$$\frac{1}{R} = \frac{6 \sum_i E_i d_i \left( 2 \sum_{j < i} d_j + d_i \right) \sum_k E_k d_k \left[ \sum_{l < i} (\alpha_{l+1} - \alpha_l) \Delta T_l - \sum_{l < k} (\alpha_{l+1} - \alpha_l) \Delta T_l \right]}{\sum_i E_i d_i \left[ \sum_j E_j d_j^3 + 3 \left( 2 \sum_{j < i} d_j + d_i \right) \sum_k E_k d_k \left( d_i - d_k + 2 \sum_{l < i} d_l - 2 \sum_{l < k} d_l \right) \right]}. \quad (6)$$

(5)和(6)式中,  $i, j, k, l$  分别可取  $1, 2, \dots, N$ , 以下亦同.

当  $N = 2$  时, 由(6)式可得

$$\frac{1}{R} = \frac{6 E_1 E_2 d_1 d_2 (d_1 + d_2) (\alpha_2 - \alpha_1) \Delta T}{(E_1 d_1 + E_2 d_2) (E_1 d_1^3 + E_2 d_2^3) + 3 E_1 E_2 d_1 d_2 (d_1 + d_2)^2} - \frac{6(1+m)^2 (\alpha_2 - \alpha_1) \Delta T}{(d_1 + d_2) \left[ 3(1+m)^2 + (1+mn) \left( m^2 + \frac{1}{mn} \right) \right]}. \quad (7)$$

其中  $m = \frac{d_1}{d_2}$ ,  $n = \frac{E_1}{E_2}$ , 此即熟知的窄双金属条的热应变弯曲公式<sup>[1]</sup>.

## 2. 杨氏模量和生长温度相同的情况

若各层  $E_i = E$ ,  $\Delta T_i = \Delta T$ , 则由(5)和(6)式, 我们有

$$P_i = E d_i \left[ \frac{1}{2R} \left( \sum_{j < i} d_j - \sum_{j > i} d_j \right) + \frac{\Delta T}{d} \sum_j d_j (\alpha_j - \alpha_i) \right], \quad (8)$$

$$\frac{1}{R} = \frac{6 \Delta T}{d^3} \sum_i \sum_{j > i} d_i d_j (\alpha_j - \alpha_i). \quad (9)$$

其中  $d = \sum_i d_i$ ;  $i, j = 1, 2, \dots, N$ . (9)式即为 Sanl<sup>[2]</sup> 文献中的(12)式. Shimizu等<sup>[6]</sup>亦得与此形式相同的结果, 但附录C证明, 按他们的方程推导, 导出的  $R$  不同于(9)式, 因子  $d^3$  处应为  $\sum_i d_i^3$ , 只在  $d_1 \gg \sum_{i > 1} d_i$  条件下才与上式一致.

任意第  $i$  层内距该层中心线  $x_i$  处的应力为

$$\sigma_i(x_i) = \frac{P_i}{d_i} + E \frac{x_i}{R} - \frac{E \Delta T}{d} \sum_j d_j (\alpha_j - \alpha_i) + \frac{E}{2R} \left( \sum_{j < i} d_j - \sum_{j > i} d_j + 2x_i \right). \quad (10)$$

此式相当于文献[6]中的(8)式, 但他们的式子第二项括号内的  $\sum_j d_j$  项前面少了系数 2

(见 C-5 式).

由(9)和(10)式, 我们亦有

$$\sigma_i(x_i) = \frac{E\Delta T}{d} \sum_j d_j(\alpha_j - \alpha_i) + \frac{3E\Delta T}{d^3} \left( \sum_{k<i} d_k - \sum_{k>i} d_k + 2x_i \right) \times \sum_j \sum_{j>i} d_j d_j (\alpha_j - \alpha_i). \quad (11)$$

### 3. 厚衬底多层结构的情况

若  $d_1 \gg \sum_{i>1} d_i$ ,  $E_i$  同数量级, 则(6)式化为

$$\frac{1}{R} = \frac{6}{E_1 d_1^2} \sum_{i>1} E_i d_i \sum_{j<i} (\alpha_{j+1} - \alpha_j) \Delta T_j - \frac{6}{E_1 d_1^2} \sum_{i<N} (\alpha_{i+1} - \alpha_i) \Delta T_i \sum_{j>i} E_j d_j. \quad (12)$$

由(5)和(12)式, 可得

$$P_1 = \frac{E_1 d_1}{6R}, \quad (13)$$

$$P_i = E_i d_i \left[ \frac{2d_1}{3R} - \sum_{j<i} (\alpha_{j+1} - \alpha_j) \Delta T_j \right]. \quad (i > 1) \quad (14)$$

第  $i$  薄层内距该层中心线  $x_i$  处的应力为

$$\sigma_i(x_i) = \frac{P_i}{d_i} + E_i \frac{x_i}{R} = E_i \left[ \frac{2d_1}{3R} - \sum_{j<i} (\alpha_{j+1} - \alpha_j) \Delta T_j \right], \quad (i > 1) \quad (15)$$

各薄层内的应力主要是平均面应力, 其层内扭转应力可忽略. 厚衬底层内距其中心线  $x_1$  处的应力为

$$\sigma_1(x_1) = \frac{P_1}{d_1} + E_1 \frac{x_1}{R} = \frac{E_1}{6R} (d_1 + 6x_1), \quad (16)$$

在与第二层相邻的边界处应力最大, 达  $\sigma_{1\max} = \frac{2E_1 d_1}{3R}$ .

若  $E_i = E$ ,  $\Delta T_i = \Delta T$ , 即考虑杨氏模量和生长温度相同的厚衬底多层结构, 由(12)或(9)式, 以及(15)或(10)式, 可得

$$\frac{1}{R} = \frac{6\Delta T}{d_1^2} \sum_i d_i (\alpha_i - \alpha_1), \quad (17)$$

$$\sigma_i = E \left[ \frac{2d_1}{3R} - (\alpha_i - \alpha_1) \Delta T \right] - E\Delta T \left[ \frac{4}{d_1} \sum_j d_j (\alpha_j - \alpha_1) - (\alpha_i - \alpha_1) \right]. \quad (i > 1) \quad (18)$$

### 4. 衬底具有固有弯曲时的公式

若衬底具有固有弯曲, 即固有力矩

$$M_0 = \frac{E_1 I_1}{R_0} = \frac{E_1 d_1^3}{12R_0} \quad (19)$$

设  $M_0$  与  $M_i$  的方向相反, 此时, 前述(1)和(4)式仍成立; 总力矩平衡方程(2)式变为

$$\sum_i M_i - M_0 + \sum_i P_i \left( \sum_{j<i} d_j + \frac{d_i}{2} \right) = 0. \quad (20)$$

于是, 求得的  $P_i$  仍如(5)式,  $\frac{1}{R}$  的公式变为

$$\begin{aligned} \frac{1}{R} = & \left\{ \frac{E_1 d_1^3}{R_0} \sum_i E_i d_i + 6 \sum_i E_i d_i \left( 2 \sum_{j<i} d_j + d_i \right) \sum_k E_k d_k \right. \\ & \cdot \left[ \sum_{l<i} (\alpha_{l+1} - \alpha_l) \Delta T_l - \sum_{l<k} (\alpha_{l+1} - \alpha_l) \Delta T_l \right] \Bigg\} / \left\{ \sum_i E_i d_i \left[ \sum_j E_j d_j^3 \right. \right. \\ & \left. \left. + 3 \left( 2 \sum_{j<i} d_j + d_i \right) \sum_k E_k d_k \left( d_i - d_k + 2 \sum_{l<i} d_l - 2 \sum_{l<k} d_l \right) \right] \right\}. \quad (21) \end{aligned}$$

与(6)式相比较, 分子中增加了一项  $\frac{E_1 d_1^3}{R_0} \sum_i E_i d_i$ .

在  $E_i = E$ ,  $\Delta T_i = \Delta T$  时,  $P_i$  同于(8)式, 而  $\frac{1}{R}$  的公式为

$$\frac{1}{R} = \frac{1}{R_0} \cdot \frac{d_1^3}{d^3} + \frac{6\Delta T}{d^3} \sum_i \sum_{j>i} d_i d_j (\alpha_j - \alpha_i). \quad (22)$$

在厚衬底条件下, 由(21)式, 我们有

$$\frac{1}{R} - \frac{1}{R_0} = \frac{6}{E_1 d_1^2} \sum_{i>1} E_i d_i \sum_{j<i} (\alpha_{j+1} - \alpha_j) \Delta T_j. \quad (23)$$

即厚衬底情况下的弯曲半径(12)式的  $\frac{1}{R}$  用  $\left( \frac{1}{R} - \frac{1}{R_0} \right)$  代替了. 由(5)和(23)式, 可得

$$\sigma_1 = \frac{E_1 d_1}{6} \left( \frac{1}{R} - \frac{1}{R_0} \right) + \frac{E_1 x_1}{R}, \quad (24)$$

$$\sigma_i = E_i \left[ \frac{2d_1}{3R} - \frac{d_1}{6R_0} - \sum_{j<i} (\alpha_{j+1} - \alpha_j) \Delta T_j \right]. \quad (i > 1) \quad (25)$$

### 三、应 用

#### 1. $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}-\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}$ 双异质结多层结构的应力

一些作者的研究表明, 在五层结构的  $\text{GaAs}-\text{GaAlAs}$  DH 激光器的有源区加少量 Al (Al 组分不大于 0.1)<sup>[9,10]</sup>, 或在  $\text{GaAs}$  衬底和双异质结构之间引入一层<sup>[6]</sup>或多层<sup>[11]</sup>缓冲层, 都可使有源区应力显著降低, 减缓退化, 延长器件寿命. Olsen 等<sup>[5]</sup>和 Shimizu 等<sup>[6]</sup>计算了前一类  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}-\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}$  五层结构(图 2)的有源区应力随有源区 Al 组分  $x$  的变化; Shimizu 等<sup>[6]</sup>计算了后一类  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}-\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}$  六层结构(图 3)的有源区应力随缓冲层 Al 组分  $x$  和厚度  $d_2$  的变化, 他们都给出了数值计算的曲线结果, 并由此确定出有源区应力为零的条件.

利用本文导出的公式, 我们可以方便地得到图 2 和图 3 所示多层结构的有源区应力变化的解析式, 以及有源区应力为零的条件的显式.

$\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  材料的线胀系数  $\alpha_x$  可认为是在  $\text{GaAs}$  的线胀系数  $\alpha_1$  和  $\text{AlAs}$  的线胀系数  $\alpha_0$  之间随  $x$  作线性变化<sup>[12]</sup>

$$\alpha_x = \alpha_1 - x(\alpha_1 - \alpha_a). \tag{26}$$

对于图 2 的五层结构,由(18)和(26)式可得有源层内应力

$$\begin{aligned} \sigma_3 &= E\Delta T \left[ (\alpha_1 - \alpha_a) - \frac{4(d_2 + d_4)}{d_1} (\alpha_1 - \alpha_2) \right] \\ &= E\Delta T (\alpha_1 - \alpha_a) \left[ x - 4(y - x) \frac{d_2 + d_4}{d_1} \right], \end{aligned} \tag{27}$$

即  $\sigma_3$  随  $x$  线性变化.  $\sigma_3 = 0$  的条件是

$$x = 4(y - x) \frac{d_2 + d_4}{d_1}. \tag{28}$$

图 2 给出了文献[5]依据 GaAs 与 AlAs 晶格常数差解应变联立方程组所得的数值曲线与依本文(27)式确定的  $\sigma_3$ - $x$  关系的比较,结果是很吻合的. 各参量的选取同于[5],  $d_i$  如图 2 所示,  $E = 1 \times 10^{12} \text{dyn/cm}^2$ ,  $\Delta T = -800^\circ\text{C}$ ,  $\alpha_1 = 6.86 \times 10^{-6}/^\circ\text{C}$ ,  $\alpha_a = 5.20 \times 10^{-6}/^\circ\text{C}$ .

对于图 3 的六层结构,在  $d_1 \gg d_3 + d_4 + d_5 + d_6$  的近似条件下,并考虑到实际的  $d_2$  仍较小于  $d_1$ ,由(11)式,我们有

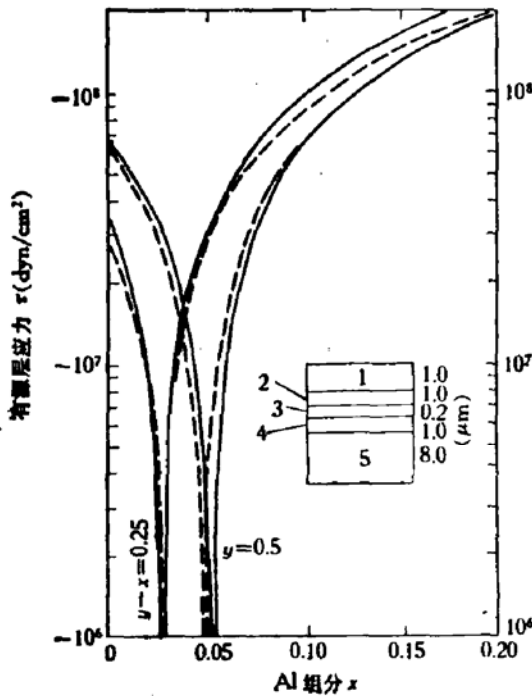


图 2 五层  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}-\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}$  结构及其应力随  $x$  的变化  
 ——为文献[5]图 5 的结果  
 ——依本文(27)式计算的结果  
 1. GaAs 2.  $\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}$  3.  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$   
 4.  $\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}$  5. GaAs

$$\begin{aligned} \sigma_4 &= E\Delta T (\alpha_1 - \alpha_a) \left[ x - \frac{d_2(4d_1 + d_2)}{(d_1 + d_2)^2} u \right. \\ &\quad \left. - \frac{(d_3 + d_5)(4d_1 + d_2)}{(d_1 + d_2)^2} (y - x) \right], \end{aligned} \tag{29}$$

或

$$\begin{aligned} \sigma_4 &\approx E\Delta T (\alpha_1 - \alpha_a) \left[ x - 4u \frac{d_2}{d_1} \right. \\ &\quad \left. - 4(y - x) \frac{d_3 + d_5}{d_1} \right]. \end{aligned} \tag{30}$$

$d_6$	GaAs	$\alpha_6 = \alpha_1$
$d_5$	$\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}$	$\alpha_5 = \alpha_3$
$d_4$	$\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$	$\alpha_4 = \alpha_1 - x(\alpha_1 - \alpha_a)$
$d_3$	$\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}$	$\alpha_3 = \alpha_1 - y(\alpha_1 - \alpha_a)$
$d_2$	$\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$	$\alpha_2 = \alpha_1 - u(\alpha_1 - \alpha_a)$
$d_1$	GaAs	$\alpha_1$
$(d_1 \gg d_3 + d_4 + d_5 + d_6)$		

图 3 有缓冲层的六层  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}-\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}$  结构

有源层应力  $\sigma_4$  随有源层 Al 组分  $x$  及缓冲层的 Al 组分  $u$  和厚度  $d_2$  均线性变化.  $\sigma_4 = 0$  的条件是

$$u = \frac{(d_1 + d_2)^2}{d_2(4d_1 + d_2)} x - \frac{(d_3 + d_5)}{d_2} (y - x), \tag{31}$$

或

$$u \approx \left( \frac{d_1}{4d_2} + \frac{7}{16} \right) x - \frac{(d_3 + d_5)}{d_2} (y - x). \quad (32)$$

利用(29)或(30)式,可以很方便地计算文献[6]中图4和图5的应力变化曲线;若要估计应力为零的条件,则只须利用(31)或(32)式,便可立即得出.对于更复杂的结构,如Ladany等<sup>[4]</sup>加有三层缓冲层的八层结构,利用(11)式计算,也比他们所采用的Olsen和Ettenberg<sup>[5]</sup>解应变联立方程的方法简便得多.

## 2. 蒸发 Cr-Au 膜的 $\alpha$ 和自生长热氧化 $\text{Ga}_2\text{O}_3$ 膜的 $\alpha$ 和 $E$ 的测定<sup>[13]</sup>.

我们设计如下简单的实验:同时在 Si、GaAs 和 GaAs + 自生长  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  薄层的样品上蒸发 Cr-Au 膜,分别测量其氧化前后和蒸金前后的晶片的弯曲半径,并测量各层的厚度,利用体材料 Si 和 GaAs 的线胀系数  $\alpha$  和杨氏模量  $E$  值,便可估算出 Cr-Au 和  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  膜的  $\alpha$  和  $E$ .

实验的样品都能满足厚衬底条件,故由(23)式,  $N = 2$  时有

$$\frac{1}{R} - \frac{1}{R_0} = \frac{6E_2d_2(\alpha_2 - \alpha_1)\Delta T}{E_1d_1^2} \quad (33)$$

对于 Si + (Cr-Au) 和 GaAs + (Cr-Au) 样品,分别应用(33)式,可求得 Cr-Au 薄层的等效  $\alpha$  和  $(E\Delta T)$  值,在我们的实验条件下,  $\alpha_{\text{Cr-Au}} = 6.9 \times 10^{-6}/^\circ\text{C}$ <sup>[13]</sup>.  $N = 3$  时,(23)式化为

$$\frac{1}{R} - \frac{1}{R_0} = \frac{6}{E_1d_1^2} \{ E_2d_2(\alpha_2 - \alpha_1)\Delta T_1 + E_3d_3[(\alpha_3 - \alpha_2)\Delta T_2 + (\alpha_2 - \alpha_1)\Delta T_1] \}. \quad (34)$$

对 GaAs +  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  + (Cr-Au) 三层样品,应用(34)式,以及对 GaAs +  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  应用(33)式,便可求出  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  薄层的线胀系数  $\alpha$  和杨氏模量  $E$ . 我们的测量结果<sup>[13]</sup>为

$$\alpha_{\text{Ga}_2\text{O}_3} = (5.2 \pm 0.3) \times 10^{-6}/^\circ\text{C}, \quad E_{\text{Ga}_2\text{O}_3} = (8 \pm 2) \times 10^{11} \text{ dyn/cm}^2.$$

## 3. MSTO GaAs-GaAlAs DH 激光器有源层内应力

应力对于 III-V 族化合物半导体光电子学器件性能有显著的影响, MSTO 条形 GaAs-GaAlAs 激光器就是一个例子,其层结构如图4所示.在通常的 GaAs-GaAlAs DH 外延片之上,热氧化生长  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  层,再淀积薄的 Cr-Au 层.由前可知,  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  和 Cr-Au 层的杨氏模量和生长、淀积温度与 GaAs 及  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  层的极不相同.由(15)式,有源层内的热应变应力为

$$\sigma = \frac{4E_2}{d_1} (d_2 + d_4)(\alpha_1 - \alpha_2)\Delta T_1$$

0.1 $\mu\text{m}$	$d_7$	Au	$\alpha_7$	$E_7$	$\Delta T_7$
2 $\mu\text{m}$	$d_6$	$\text{Ga}_2\text{O}_3$	$\alpha_6$	$E_6$	$\Delta T_2$
	$d_5$	p <sup>+</sup> -GaAs	$\alpha_5$	$E_5$	$\Delta T_1$
2 $\mu\text{m}$	$d_4$	p-Ga <sub>1-x</sub> Al <sub>x</sub> As	$\alpha_4$	$E_4$	$\Delta T_1$
	$d_3$	p-GaAs	$\alpha_3$	$E_3$	$\Delta T_1$
2 $\mu\text{m}$	$d_2$	n-Ga <sub>1-x</sub> Al <sub>x</sub> As	$\alpha_2$	$E_2$	$\Delta T_1$
	$d_1$	n-GaAs	$\alpha_1$	$E_1$	$\Delta T_1$
100 $\mu\text{m}$	$(d_1 \gg d_2 + d_3 + d_4 + d_5 + d_6 + d_7)$				

图4 MSTO 多层结构示意图 ( $\Delta T_1$ 、 $\Delta T_2$ 、 $\Delta T_7$  分别为室温与外延温度、氧化温度和淀积 Cr-Au 的等效温度之差)

$$\begin{aligned}
 & + \frac{4E_6}{d_1} d_6 (\alpha_1 - \alpha_6) \Delta T_2 \\
 & - \frac{4E_7}{d_1} d_7 [(\alpha_7 - \alpha_6) \Delta T_3 - (\alpha_1 - \alpha_6) \Delta T_2]. \quad (35)
 \end{aligned}$$

其中第一项为各外延层对有源层内应力的贡献,即 Reinhart 等<sup>[3]</sup>的(7)式;第二项为  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  层的贡献;第三项为 Cr-Au 层的贡献. 利用图 4 中的数据 and 前面得出的  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  和 Cr-Au 层的  $\alpha$  和  $E$  值(Cr-Au 层的  $E$  取  $E_{\text{Cr}}$  和  $E_{\text{Au}}$  的平均值),可算得第一项为  $4.7 \times 10^7 \text{dyn/cm}^2$ , 第二项为  $4.8 \times 10^7 \text{dyn/cm}^2$ , 第三项为  $(-1.7) \times 10^7 \text{dyn/cm}^2$ . 可见,在我们的例子中,  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  层对有源层应力的贡献最大, Cr-Au 层的贡献最小,并且符号相反. 据我们所知,在本文之前,尚无文献从理论上计算出外延片上的氧化层和金属层对有源区应力的影响.

#### 四、结 论

本文在各层杨氏模量和生长温度各不相同的普遍情况下,导出了多层结构的热应变弯曲和层应力的普遍公式,还考虑了衬底具有固有弯曲的情况,文献[1]—[6]的相应公式都可以作为我们的普遍公式在不同条件下的特例,还给出了较有用的厚衬底条件下的近似式. 这对半导体光电子学器件及集成光学研究都有实际价值. 应用以上理论公式,我们导出了有源区掺 Al 的 GaAlAs DH 五层结构和有缓冲层的可见光  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}-\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}$  六层结构激光器的有源层应力的公式及其为零的条件的表达式,这对于设计、制作长寿命的红外和可见光 GaAlAs DH 及其他类型的半导体激光器,是有意义的. 此外,应用本文的公式还估算了 Cr-Au 和  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  薄层的  $\alpha$  和  $E$  值,这一测量薄层材料线胀系数和杨氏模量的实验方法,还可应用于测量其他多层结构中薄层材料的  $\alpha$  和  $E$ . 本文还首次计算了在 GaAs-GaAlAs DH 结构上有杨氏模量和生长温度极不相同的氧化层和金属层的 MSTO GaAlAs DH 多层结构的有源层内应力.

作者感谢郭长志、让庆澜和黄植文同志对本工作的支持,感谢陈焜兮同志以及李惠兰和贾丽敏同志在实验工作中的帮助.

#### 附录 A (5)式的推导

由(4)式的前  $i-1$  项相加,可得

$$\frac{P_i}{E_i d_i} - \frac{P_j}{E_j d_j} + \frac{1}{R} \left( \frac{d_i - d_j}{2} + \sum_{j < i} d_j \right) = \sum_{j < i} (\alpha_{j+1} - \alpha_j) \Delta T_j \quad (\text{A-1})$$

由 (A-1) 和 (1) 式,可解出

$$\begin{aligned}
 P_i = & - \frac{E_i d_i}{R \sum_j E_j d_j} \sum_j E_j d_j \left( \frac{d_i - d_j}{2} + \sum_{j < i} d_j \right) \\
 & + \frac{E_i d_i}{\sum_j E_j d_j} \sum_{i > j} E_j d_j \sum_{j < i} (\alpha_{j+1} - \alpha_j) \Delta T_j \quad (\text{A-2})
 \end{aligned}$$



由 (A-1) 和 (A-2) 式, 我们有

$$P_i = E_i d_i \left\{ \frac{1}{R} \left[ \frac{d_i - d_i}{2} + \sum_{j < i} d_j - \frac{1}{\sum_j E_j d_j} \sum_j E_j d_j \left( \frac{d_j - d_i}{2} + \sum_{k < j} d_k \right) \right] \right. \\ \left. - \sum_{j < i} (\alpha_{j+1} - \alpha_j) \Delta T_j + \frac{1}{\sum_{j > i} E_j d_j} \sum_{j > i} E_j d_j \sum_{k < j} (\alpha_{k+1} - \alpha_k) \Delta T_k \right\}, (i > 1) \quad (\text{A-3})$$

(A-2) 与 (A-3) 式可合写为 (5) 式。

### 附录 B (9) 式的推导

(6) 式在  $E_i = E$ ,  $\Delta T_i = \Delta T$  条件下, 化为

$$\frac{1}{R} = \frac{6\Delta T \sum_i d_i \left( 2 \sum_{j < i} d_j + d_i \right) \sum_k d_k (\alpha_i - \alpha_k)}{d \sum_i d_i^3 + 3 \sum_i d_i \left( 2 \sum_{j < i} d_j + d_i \right) \sum_k d_k \left( d_i - d_k + 2 \sum_{l < i} d_l - 2 \sum_{l < k} d_l \right)} \\ = \frac{6\Delta T \sum_i \sum_{j > i} (d_i + 2d_{j+1} + \dots + 2d_{j-1} + d_j) d_i d_j (\alpha_j - \alpha_i)}{d \left[ \sum_i d_i^3 + 3 \sum_i d_i \left( 2 \sum_{j < i} d_j + d_i \right) \left( \sum_{k < i} d_k - \sum_{k > i} d_k \right) \right]} \\ = \frac{6\Delta T \sum_i d_i [(d_i + \dots + d_{i-1}) - (d_{i+1} + \dots + d_N)] \alpha_i}{\sum_i d_i^3 + 3 \sum_i d_i \left( 2 \sum_{j < i} d_j + d_i \right) \left( \sum_{k < i} d_k - \sum_{k > i} d_k \right)} \quad (\text{B-1})$$

可证 (B-1) 式右边的分子 =  $\sum_i \sum_{j > i} d_i d_j (\alpha_j - \alpha_i)$ ; 且可用数学归纳法证明 (B-1) 式右边的分母 =  $\left( \sum_i d_i \right)^3$ 。因此, (9) 式成立。

### 附录 C Shimizu 等<sup>[6]</sup>的 $R$ 和 $\sigma_i$ 公式的重新推导

依文献<sup>[6]</sup>, 本文内 (1)–(3) 式成立, 代替 (4) 式的是

$$\alpha_i \Delta T + \frac{P_i}{E_i d_i} = \dots = \alpha_1 \Delta T + \frac{P_1}{E_1 d_1}, (i = 1, 2, \dots, N) \quad (\text{C-1})$$

将各层界面处切应变相等的 (4) 式中左、右两边的  $\frac{d_i}{2R}$  项均忽略了。由 (1) 和 (C-1) 式, 类似于附录 A 的推导, 我们得到

$$P_i = \frac{E_i d_i}{\sum_j E_j d_j} \sum_j E_j d_j (\alpha_j - \alpha_i) \Delta T \quad (\text{C-2})$$

由 (2)、(3) 和 (C-2) 式, 我们有

$$\frac{1}{R} = \frac{6\Delta T}{\left( \sum_i E_i d_i^3 \right) \left( \sum_j E_j d_j \right)} \sum_i \sum_{j > i} E_i E_j d_i d_j (d_i + 2d_{i+1} + \dots + 2d_{j-1} + d_j) (\alpha_j - \alpha_i). \quad (\text{C-3})$$

当  $E_i = E$  时,

$$\frac{1}{R} = \frac{6\Delta T}{\sum_i d_i^2} \sum_i \sum_{j>i} d_i d_j (\alpha_j - \alpha_i), \quad (\text{C-4})$$

由 (C-2) 和文献[6]的(5)–(7)式, 可得应力为

$$\sigma_i(y_i) = \frac{E\Delta T}{d} \sum_j d_j (\alpha_j - \alpha_i) + \frac{E}{2R} \left( 2 \sum_{j<i} d_j - \sum_j d_j + 2y_i \right). \quad (\text{C-5})$$

其中  $y_i$  由第  $i$  层底边算起, 即  $y_i = \frac{d_i}{2} + x_i$ .

### 参 考 文 献

- [1] S. P. Timoshenko, *Collected Papers*, McGraw-Hill, New York 1953, p. 403.
- [2] R. H. Saul, *J. Appl. Phys.*, **40**, 3273 (1969).
- [3] F. K. Reinhart and R. A. Logan, *ibid.*, **44**, 3171 (1973).
- [4] R. Dingle and W. Wiegmann, *ibid.*, **46**, 4312 (1975).
- [5] G. H. Olsen and M. Ettenberg, *ibid.*, **48**, 2543 (1977) 或 *Crystal Growth Theory and Techniques*, edited by C. Goodman, Plenum Press, London, 1977, Vol. 2, p. 1–56.
- [6] H. Shimizu, K. Itoh, M. Wada, T. Sugino and I. Teramoto, *IEEE. J. Quantum Electron.*, **QE-17**, 763 (1981).
- [7] J. E. Ripper, J. C. Dymant, L. A. D'Asaro and T. L. Paoli, *Appl. Phys. Lett.*, **18**, 155 (1971).
- [8] H. D. Liu, B. Zhang, D. H. Wang and W. X. Chen, *Appl. Phys. Lett.*, **38**, 557 (1981).
- [9] M. Ettenberg, H. Kressel and H. F. Lockwood, *Appl. Phys. Lett.*, **25**, 82 (1974).
- [10] Y. Nannichi and I. Hayashi, *J. Cryst. Growth*, **27**, 126 (1974).
- [11] I. Ladany, T. R. Furman and D. P. Marinelli, *Electron. Lett.*, **15**, 342 (1979).
- [12] M. Ettenberg and R. J. Paff, *J. Appl. Phys.*, **41**, 3926 (1970).
- [13] 刘弘度, 陈巍兮, 冯哲川, *半导体学报*, **3**, 359 (1982).

## Curvature Radius and Layer Stresses for Thermal Strain in Semiconductor Multilayer Structures

Feng Zhechuan and Liu Hongdu

(Department of Physics, Peking University)

### Abstract

The generalized formula has been deduced for the curvature radius and layer stresses for thermal strain in semiconductor multilayer structure with different elastic moduli and growth temperatures, including the case of substrate with initial curved momentum. Various approximate expressions are given, especially the useful forms for the thick substrate. We have using the formulas derived, calculated the active layer stress and its dependence on layer thicknesses and Al fractions for conventional GaAs-GaAlAs DH lasers and visible buffered GaAlAs DH lasers, obtained the analytical expressions for the vanishing of active layer stress, measured the thermal expansion coefficient and Young's modulus of native oxide  $\text{Ga}_2\text{O}_3$ , and calculated the active layer stress due to native oxide and metallic films for MSTO structure.