

## MÔ PHỎNG STRAIN NHIỆT TRONG MÀNG TINH THỂ AlN ĐƯỢC CHẾ TẠO TRÊN ĐỂ AlN/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> SỬ DỤNG PHƯƠNG PHÁP PHẦN TỬ HỮU HẠN

Nhận bài:

20 – 08 – 2016

Chấp nhận đăng:

28 – 09 – 2016

<http://jshe.ued.udn.vn/>

Đình Thành Khấn

**Tóm tắt:** Strain nhiệt do sự khác nhau về thông số nhiệt giữa AlN và  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> trong màng tinh thể AlN được chế tạo trên đế AlN/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> đã được mô phỏng bằng phương pháp phần tử hữu hạn sử dụng phần mềm ANSYS. Các kết quả mô phỏng chỉ ra rằng strain nhiệt được phân bố một cách tuần hoàn dọc theo hướng tinh thể [1120] của màng AlN, tương ứng với sự tuần hoàn trong kết cấu được tạo rãnh của đế AlN/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Strain nhiệt giảm đáng kể xung quanh các khoảng trống (void) được tạo ra bên trong màng tinh thể AlN do quá trình mọc ngang của tinh thể AlN trên đế AlN/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> được tạo rãnh. Các kết quả mô phỏng đã chỉ ra rằng việc sử dụng các đế được tạo rãnh đã làm giảm đáng kể strain nhiệt trong các màng tinh thể thông qua sự tạo thành của các void.

**Từ khóa:** strain nhiệt; màng tinh thể AlN; ANSYS; phương pháp phần tử hữu hạn; FEM.

### 1. Giới thiệu

Aluminum nitride (AlN) đã thu hút rất nhiều sự quan tâm nghiên cứu trong các lĩnh vực đang phát triển như LED, LASER, các thiết bị điện tử tần số cao... bởi vì các tính chất nổi trội của chúng như độ cứng và độ dẫn nhiệt cao, khả năng chịu nhiệt cao... AlN cũng có thể kết hợp với GaN để tạo thành Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N, sử dụng trong các thiết bị quang điện có bước sóng ngắn hơn [1-4]. Do các tinh thể AlN ở dạng khối không có sẵn trong tự nhiên, người ta thường chế tạo các tinh thể AlN dưới dạng màng trên các đế có sẵn như  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> và SiC bằng phương pháp mọc ghép pha hơi hữu cơ kim loại và mọc ghép pha hơi hidrua [5-7]. Tuy nhiên, do sự không tương thích trong các thông số mạng và nhiệt giữa AlN và các vật liệu làm đế, các màng tinh thể AlN sau khi chế tạo thường bị co giãn ô cơ sở (strain), khuyết tật, uốn cong mặt mạng... [8, 9]. Gần đây người ta đã phát hiện ra rằng việc tạo ra những rãnh được phân bố một cách tuần hoàn trên các đế  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> và SiC đã nâng cao rất nhiều chất lượng của các màng

tinh thể AlN [10-12]. Tuy nhiên, sự phân bố của strain trong các màng tinh thể AlN vẫn chưa được làm sáng tỏ. Hơn nữa, thông qua các phép đo thực nghiệm như nhiễu xạ tia X và phổ tán xạ Raman, chúng ta chỉ thu được strain do ảnh hưởng của tất cả các yếu tố như sự không tương thích trong các thông số nhiệt và mạng... Trong nghiên cứu này, tác giả sử dụng phương pháp phần tử hữu hạn thông qua phần mềm ANSYS để mô phỏng sự phân bố của strain nhiệt trong màng tinh thể AlN được chế tạo trên đế AlN/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> được tạo rãnh. Việc làm sáng tỏ sự phân bố của strain nhiệt do sự không tương thích về thông số nhiệt giữa AlN và  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> cung cấp những thông tin hữu ích cho các nhà nghiên cứu thực nghiệm trong việc tìm ra các giải pháp để hạn chế ảnh hưởng của thông số nhiệt trong việc chế tạo các màng tinh thể AlN chất lượng cao.

### 2. Xây dựng mô hình và mô phỏng

Hệ thống phân tích cấu trúc tĩnh (static structural analysis system) trong phần mềm ANSYS được sử dụng để mô phỏng sự phân bố strain nhiệt trong màng tinh thể AlN được chế tạo trên đế được tạo rãnh AlN/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Hình 1 là ảnh chụp kính hiển vi điện tử quét (SEM) của màng tinh thể AlN được chế tạo trên đế được tạo rãnh AlN/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> bằng phương pháp mọc ghép pha hơi

\* Liên hệ tác giả

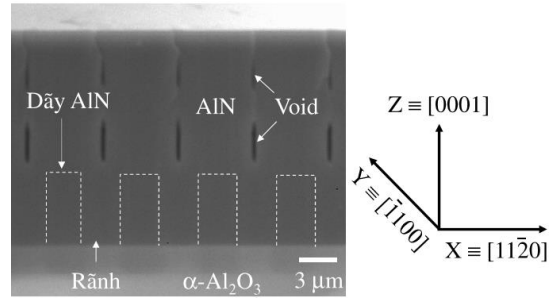
Đình Thành Khấn

Trường Đại học Sư phạm - Đại học Đà Nẵng

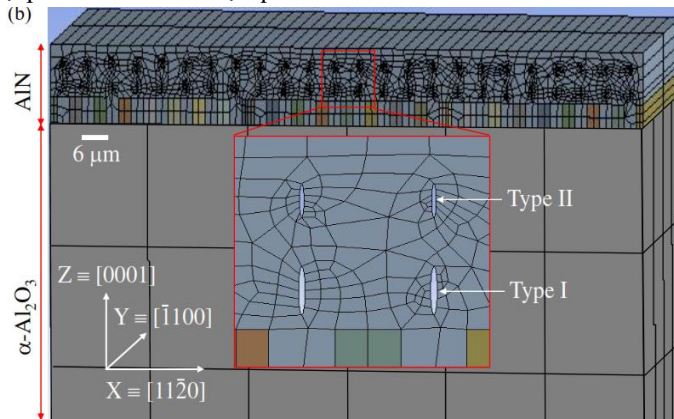
Email: dtkhan@ued.udn.vn

hiđrua ở nhiệt độ 1500°C. Hai loại void (khoảng trống) chạy dọc theo hướng tinh thể  $[1\bar{1}00]$  với kích thước theo phương thẳng đứng khác nhau được phân bố một cách tuần hoàn dọc theo hướng tinh thể  $[1\bar{1}20]$ . Dựa vào ảnh SEM của mẫu vật liệu đã được chế tạo, tác giả đã xây dựng mô hình tương ứng để mô phỏng sự phân bố của strain nhiệt trong màng tinh thể AlN trên đế được tạo rãnh AlN/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Hình 2 là mô hình phần tử hữu hạn ba chiều của màng của tinh thể AlN trên đế được tạo rãnh AlN/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Chiều dày của màng tinh thể AlN và đế  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> lần lượt là 15 $\mu$ m và 400 $\mu$ m. Kích thước của các void là 0.30 $\mu$ m  $\times$  2.50 $\mu$ m và 0.20 $\mu$ m  $\times$  1.75 $\mu$ m. Cấu hình và các kích thước trong mô hình ở Hình 2 là tương ứng với cấu hình và kích thước trong màng tinh thể AlN đã được chế tạo bằng thực nghiệm. Để thu được kết quả mô phỏng chính xác của sự phân bố strain nhiệt quanh

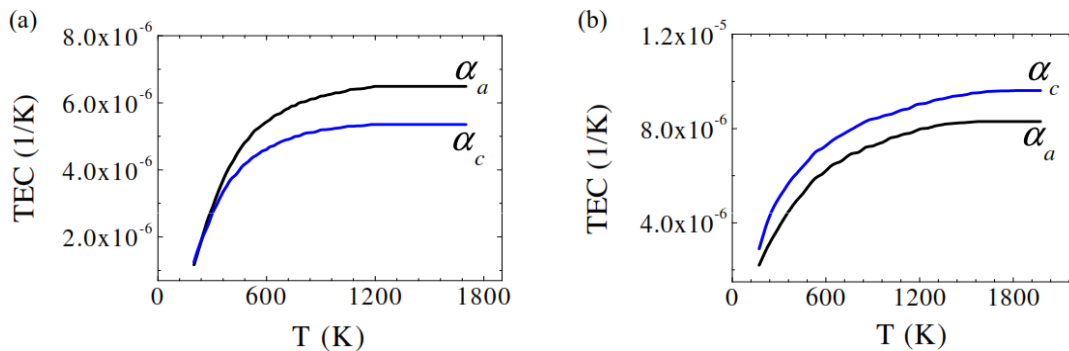
các void, tác giả sử dụng chức năng “finer mesh” trong hệ thống phân tích cấu trúc tinh xung quanh các void, như có thể quan sát trong Hình 2.



Hình 1. Ảnh SEM của màng tinh thể AlN trên đế được tạo rãnh AlN/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>



Hình 2. Mô hình phần tử hữu hạn của màng tinh thể AlN trên đế được tạo rãnh AlN/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Type I và II là hai loại void với kích thước khác nhau được hình thành trong màng AlN



Hình 3. Hệ số nở nhiệt trong các hướng a ( $\alpha_a$ ) và c ( $\alpha_c$ ) của (a) AlN và (b)  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

Để mô phỏng strain nhiệt trong màng tinh thể AlN trên đế được tạo rãnh AlN/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, tác giả sử dụng hệ

số nở nhiệt phụ thuộc nhiệt độ và các hằng số đàn hồi của AlN và  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> như các thông số đầu vào của hệ

thống phân tích [13-17]. Hình 3 miêu tả sự phụ thuộc vào nhiệt độ của hệ số nở nhiệt của AlN và  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Các hằng số đàn hồi của AlN và  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> được thể hiện ở Bảng 1. Sự thay đổi nhiệt độ từ nhiệt độ chế tạo AlN, 1500°C, đến nhiệt độ phòng được sử dụng như tải (load) trong hệ thống phân tích. Do tính đối xứng quanh hướng [0001] của màng AlN, chỉ một phần tư màng AlN được mô phỏng bởi việc chọn các mặt bên trái và mặt sau của mô hình làm các mặt đối xứng trong điều kiện biên trong hệ thống phân tích.

**Bảng 1.** Hằng số đàn hồi của AlN và  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

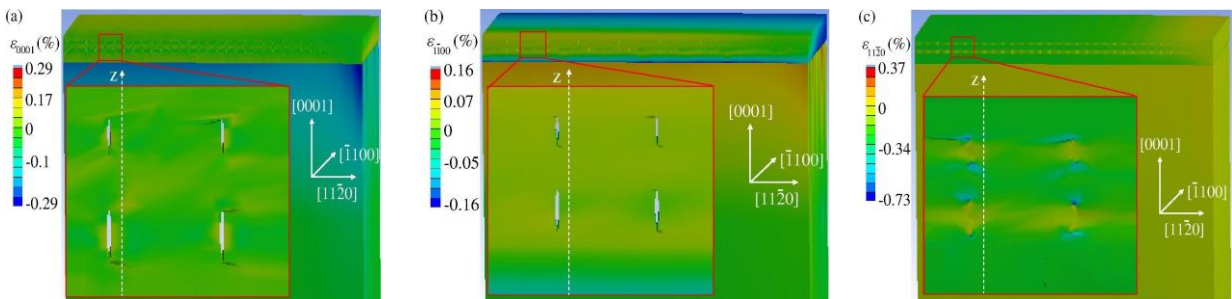
	Suất Young	Tỉ số Poisson
AlN	354 GPa	0.22
$\alpha$ -Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	345 GPa	0.33

### 3. Kết quả và thảo luận

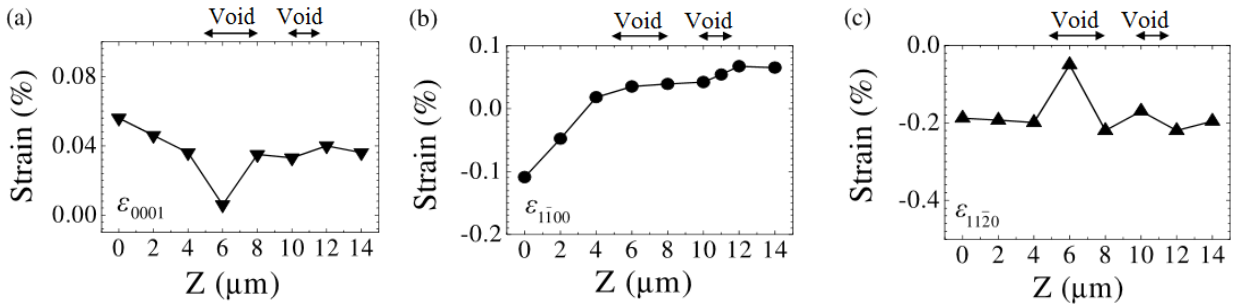
Hình 4 miêu tả sự phân bố của strain nhiệt trong các hướng [0001], [1100] và [1120] ( $\epsilon_{0001}$ ,  $\epsilon_{1100}$ , và  $\epsilon_{1120}$ ). Chúng ta có thể thấy rằng strain nhiệt dương trong hướng [0001] và âm trong các hướng [1100] và [1120]. Dọc theo các hướng [1100] và [1120], do hệ số nở nhiệt  $\alpha_a$  của màng AlN

Dọc theo các hướng [1100] và [1120], do hệ số nở nhiệt  $\alpha_a$  của màng AlN nhỏ hơn hệ số nở nhiệt của  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, sự co lại của màng AlN trong quá trình làm lạnh từ nhiệt độ chế tạo 1500°C đến nhiệt độ phòng chậm hơn so với sự co lại của đế  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Như một kết quả, lực nén sẽ tác dụng vào màng AlN dọc theo các

hướng [1100] và [1120] để cân bằng sự co của màng và để khi mẫu vật liệu được đưa về nhiệt độ phòng sau khi được chế tạo [18,19]. Do đó, strain nhiệt âm xuất hiện trong màng AlN dọc theo các hướng [1100] và [1120]. Theo hiệu ứng Poisson, khi một vật liệu bị nén theo một phương nào đó, nó sẽ giãn ra theo các phương còn lại. Do đó, strain nhiệt trong màng AlN sẽ dương trong hướng [0001]. Cũng từ Hình 4 chúng ta có thể thấy rằng đi dọc theo một hướng nào đó từ chính giữa màng về phía biên, strain nhiệt trong hướng đó trở nên giảm đáng kể. Sự giảm của strain nhiệt gần biên của màng là do cơ chế uốn cong lên của màng AlN gần phía biên, như có thể quan sát được trong Hình 4, dưới tác dụng của lực nén do sự không tương thích trong quá trình co lại của màng và đế. Từ các Hình 4(a) và 4(c), chúng ta có thể thấy rằng strain nhiệt trong các hướng [0001] và [1120],  $\epsilon_{0001}$  và  $\epsilon_{1120}$ , được phân bố một cách tuần hoàn dọc theo hướng [1120], tương ứng với sự sắp xếp tuần hoàn của các rãnh trên đế AlN/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> và các void trong màng tinh thể AlN. Hơn nữa, các strain nhiệt này giảm đáng kể xung quanh các void. Ngược lại, sự phân bố của strain nhiệt trong hướng [1100],  $\epsilon_{1100}$ , hầu như không phụ thuộc vào lối tuần hoàn của rãnh trên đế cũng như sự có mặt của void trong màng AlN. Các kết quả mô phỏng cho ta thấy sự tạo thành của void khi sử dụng đế được tạo rãnh AlN/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> có ảnh hưởng lớn đến sự phân bố của strain nhiệt trong màng AlN.



**Hình 4.** Sự phân bố của các strain nhiệt (a)  $\epsilon_{0001}$ , (b)  $\epsilon_{1100}$  và (c)  $\epsilon_{1120}$



**Hình 5.** Sự thay đổi của các strain nhiệt (a)  $\epsilon_{0001}$ , (b)  $\epsilon_{1100}$  và (c)  $\epsilon_{1120}$  dọc theo hướng  $z \equiv [0001]$

Để thấy rõ hơn ảnh hưởng của void đến các strain nhiệt  $\epsilon_{0001}$  và  $\epsilon_{1120}$ , sự thay đổi của các strain nhiệt  $\epsilon_{0001}$ ,  $\epsilon_{1100}$ , và  $\epsilon_{1120}$  theo phương  $z \equiv [0001]$  (đường nét đứt màu trắng trong mỗi bức ảnh ở Hình 4) bắt đầu từ mặt giới hạn giữa màng và đế đến bề mặt của màng AlN đã được vẽ ra và được thể hiện ở Hình 5. Từ Hình 5(a) và 5(c), chúng ta có thể dễ dàng thấy rằng strain nhiệt  $\epsilon_{0001}$  và  $\epsilon_{1120}$  giảm đáng kể xung quanh các void. Đặc biệt quanh các void gần mặt giới hạn giữa màng và đế, màng AlN hầu như không bị strain nhiệt trong các hướng  $[0001]$  và  $[1120]$ . Ngược lại, như có thể nhìn thấy trong Hình 5(b), sự xuất hiện của các void không ảnh hưởng đến strain nhiệt trong hướng  $[1100]$ . Từ các kết quả mô phỏng, chúng ta có thể thấy rằng sự xuất hiện của các void khi sử dụng các đế được tạo rãnh đóng vai trò như một cơ chế để làm giảm strain nhiệt trong các hướng vuông góc với hướng của các void trong các màng tinh thể.

#### 4. Kết luận

Strain nhiệt do sự khác nhau về thông số nhiệt giữa AlN và  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  trong màng tinh thể AlN được chế tạo trên đế AlN/ $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  đã được mô phỏng bằng phương pháp phần tử hữu hạn sử dụng phần mềm ANSYS. Các kết quả mô phỏng đã chỉ ra rằng strain nhiệt phân bố một cách tuần hoàn dọc theo hướng tinh thể  $[1120]$  của màng AlN, tương ứng với sự sắp xếp tuần hoàn của các void trong màng AlN. Strain nhiệt trong các hướng vuông góc với void giảm đáng kể xung quanh các void. Các kết quả mô phỏng đã chỉ ra rằng sự xuất hiện của các void khi sử dụng các đế được tạo rãnh đóng vai trò

như một cơ chế để làm giảm strain nhiệt trong các hướng vuông góc với hướng của void trong các màng tinh thể.

#### Tài liệu tham khảo

- [1] Y. Taniyasu, M. Kasu, and T. Makimoto (2006), “An aluminium nitride light-emitting diode with a wavelength of 210 nanometres”, *Nature (London)*, *441*, 325-328.
- [2] H. Hirayama, S. Fujikawa, N. Noguchi, J. Norimatsu, T. Takano, K. Tsubaki, and N. Kamata (2009), “222-282 nm AlGaIn and InAlGaIn-based deep-UV LEDs fabricated on high-quality AlN on sapphire”, *Phys. Status Solidi A*, *206*, 1176-1182.
- [3] R. McClintock, A. Yasan, K. Mayes, D. Shiell, S. R. Darvish, P. Kung, and M. Razeghi (2004), “High quantum efficiency AlGaIn solar-blind p-i-n photodiodes”, *Appl. Phys. Lett.*, *84*, 1248-1250.
- [4] L. M. Sheppard (1990), “Aluminum nitride: A versatile but challenging material”, *Am. Ceram. Soc. Bull.*, *69*, 1801-1812.
- [5] Y. Katagiri, S. Kishino, K. Okuura, H. Miyake, K. Hirayama (2009), “Low-pressure HVPE growth of crack-free thick AlN on a trench-patterned AlN template”, *J. Cryst. Growth*, *311*, 2831-2833.
- [6] S. A. Newman, D. S. Kamber, T. J. Baker, Y. Wu, F. Wu, Z. Chen, S. Namakura, J. S. Speck, and S. P. DenBaars (2009), “Lateral epitaxial overgrowth of (0001) AlN on patterned sapphire using hydride vapor phase epitaxy”, *Appl. Phys. Lett.*, *94*, 121906.
- [7] M. Imura, K. Nakano, N. Fujimoto, N. Okada, K. Balakrishnan, M. Iwaya, S. Kamiyama, H. Amano, I. Akasaki, T. Noro, T. Takagi, and A. Bandoh (2006), “High-temperature metal-organic vapor phase epitaxial growth of AlN on sapphire by multi transition growth mode method varying V/III ratio”, *Jpn. J. Appl. Phys.*, *45*, 8639–8643.

- [8] L. W. Sang, Z. X. Qin, H. Fang, T. Dai, Z. J. Yang, B. Shen, G. Y. Zhang, X. P. Zhang, J. Xu, and D. P. Yu (2008), "Reduction in threading dislocation densities in AlN epilayer by introducing a pulsed atomic-layer epitaxial buffer layer", *Appl. Phys. Lett.*, 93, 122104.
- [9] K. Hiramatsu, T. Detchprom, and I. Akasaki, (1993), "Relaxation mechanism of thermal strain in heterostructure of GaN grown on sapphire by vapor phase epitaxy", *Jpn. J. Appl. Phys.*, 32, 1528-1533.
- [10] K. Nakano, M. Imura, G. Narita, T. Kitano, Y. Hirose, N. Fujimoto, N. Okada, T. Kawashima, K. Iida, K. Balakrishnan, M. Tsuda, M. Iwaya, S. Kamiyama, H. Amano, I. Akasaki, (2006), "Epitaxial lateral overgrowth of AlN layers on patterned sapphire substrates", *Phys. Status Solidi A*, 203, 1632-1635.
- [11] Z. Chen, R. S. Q. Fareed, M. Gaevski, V. Adivarahan, J. W. Yang, A. Khan, J. Mei, F. A. Ponce (2006), "Pulsed lateral epitaxial overgrowth of aluminum nitride on sapphire substrates", *Appl. Phys. Lett.*, 89, 081905.
- [12] J. Mei, F. A. Ponce, R. S. Q. Fareed, J. W. Yang, A. Khan (2007), "Dislocation generation at the coalescence of aluminum nitride lateral epitaxy on shallow-grooved sapphire substrates", *Appl. Phys. Lett.*, 90, 221909.
- [13] S. Figge, H. Kröncke, D. Hommel, and B. M. Epelbaum (2009), "Temperature dependence of the thermal expansion of AlN", *Appl. Phys. Lett.* 94, 101915.
- [14] E. R. Dobrovinskaya, L. A. Lytvynov, and V. Pishchik (2009), "Sapphire: material, manufacturing and applications", *Springer Science + Business Media, LLC*.
- [15] C. Deger, E. Born, H. Angerer, O. Ambacher, M. Stutzmann, J. Hornsteiner, E. Riha, and G. Fischerauer (1998), "Sound velocity of Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N thin films obtained by surface acoustic-wave measurements", *Appl. Phys. Lett.* 72, 2400-2402.
- [16] R. Langer, A. Barski, A. Barbier, G. Renaud, M. Leszczynski, I. Grzegory, and S. Porowski (1999), "Strain relaxation in AlN epitaxial layers grown on GaN single crystals", *J. Cryst. Growth* 205, 31-35.
- [17] K. Hiramatsu, T. Detchprom, I. Akasaki (1993), "Relaxation mechanism of thermal stress in the heterostructure of GaN grown on sapphire by vapor phase epitaxy", *Jpn. J. Appl. Phys.* 32, 1528-1533.
- [18] G.H. Olsen, M. Ettenberg (1977), "Calculated stresses in multilayered heteroepitaxial structures", *J. Appl. Phys.* 48, 2543-2547.
- [19] K. Hiramatsu, T. Detchprom, I. Akasaki (1993), "Relaxation mechanism of thermal stresses in the heterostructure of GaN grown on sapphire by vapor phase epitaxy", *Jpn. J. Appl. Phys.* 32, 1528-1533.

## SIMULATION OF THERMAL STRAIN IN AlN CRYSTALLINE FILM GROWN ON A TRENCH-PATTERNED AlN/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> TEMPLATE USING THE FINITE ELEMENT METHOD

**Abstract:** Thermal strain that results from differences in thermal parameters between AlN and  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> in an AlN crystalline film grown on a trench-patterned AlN/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> template has been simulated via the finite element method using the software ANSYS. The simulation results show that the thermal strain is distributed in circulation along the [1120] direction in correspondence with the circulation of the trench-patterned structure of the AlN/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> template. The thermal strain reduces considerably around voids formed in crystalline AlN films due to the horizontal overgrowth of AlN crystals on the trench-patterned AlN/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> template. The simulation results clearly indicate that the use of trench-patterned templates has significantly reduced the thermal strain in crystalline films through the formation of voids.

**Key words:** thermal strain; AlN crystalline film; ANSYS; finite element method; FEM.