

**Universitat de Barcelona**  
**Facultat de Física**  
**Departament de Física Aplicada i Electrònica**

---

**OPTIMIZACIÓN DE SENSORES DE PRESIÓN  
PIEZORRESISTIVOS DE SILICIO PARA  
INSTRUMENTACIÓN BIOMÉDICA Y APLICACIONES A  
ALTA TEMPERATURA**

Santiago MARCO COLÁS

Memoria presentada para optar  
al grado de doctor en Ciencias Físicas

---

Barcelona, julio de 1993

---

**Capítulo III:**  
**Estudio del silicio policristalino:**  
**Aplicaciones en sensores y micromecánica**

---



### **III.1. Introducción:**

---

En la fabricación de sensores y actuadores intervienen una amplia variedad de materiales con propiedades eléctricas, térmicas y mecánicas muy diferentes. Muchos de estos materiales aparecen en forma de capas delgadas sobre un sustrato de silicio. Pueden actuar como material estructural, capa aislante o de conexionado eléctrico, máscara o pasivación. También pueden constituir el mismo elemento sensor donde se produce la transducción de una forma de energía en otra. Estos diversos materiales están en contacto en el dispositivo sensor: una falla en su comportamiento compromete el funcionamiento de todo el conjunto.

El conocimiento de las relaciones entre la microestructura de la capa delgada y sus propiedades macroscópicas de carácter eléctrico o mecánico es un objetivo fundamental en la ciencia de materiales. Este objetivo ha impulsado el desarrollo de nuevos materiales con propiedades controladas.

Durante mucho tiempo la investigación concerniente a aquellos materiales usados en la microelectrónica se ha centrado principalmente en las propiedades eléctricas de estos materiales. Sin embargo, el gran desarrollo experimentado por la micromecánica y los

sensores mecánicos basados en silicio ha impulsado el interés por sus propiedades mecánicas, en particular, por el control de los esfuerzos mecánicos residuales. La fabricación de sensores en tecnología de silicio implica procesos de crecimiento y depósito que se efectúan a altas temperaturas. Debido a los diferentes coeficientes de expansión térmica de los distintos materiales y a que muchos de estos procesos tienen lugar fuera del equilibrio termodinámico grandes esfuerzos mecánicos aparecen en las capas. Éstos pueden dar lugar a inestabilidades mecánicas: deformaciones por pandeo, fractura del material, problemas de adhesión o derivas a largo plazo. En particular, para los sensores mecánicos en los cuales la magnitud a medir se transforma en un campo de tensiones en el material, la presencia de esfuerzos mecánicos en los materiales puede alterar la respuesta del dispositivo variando características como: sensibilidad, offset, etc.

Es conocido también que las tensiones internas se ven amplificadas por factores 3, 4 en los bordes de la capa<sup>1</sup>. Experimentalmente se ha hallado una tendencia a perder adherencia en capas con altos niveles de esfuerzos residuales<sup>2</sup>. Si estas capas se encuentran sobre sustratos que se deforman, como ocurre en muchos dispositivos micromecánicos, estos problemas se agravan aún más y pueden dar lugar a problemas de histéresis.

### **III.1.1 Aplicaciones del polisilicio en micromecánica**

Si bien el progreso alcanzado en las dos últimas décadas en la fabricación de sensores se debe en buena medida al éxito del grabado anisótropo húmedo vía soluciones de KOH, EDP, etc; una tecnología alternativa ha logrado también un espectacular desarrollo. Nos estamos refiriendo a la micromecanización superficial<sup>3</sup>.

Esta tecnología se basa en el ataque selectivo de una capa de sacrificio bajo otra capa resistente al ataque (Figura 1). La aplicación de esta tecnología requiere por consiguiente, una combinación de capas delgadas y un agente químico muy selectivo de manera que se pueda eliminar la capa de sacrificio subyacente sin atacar de manera significativa la capa estructural o el sustrato. Para ello se han utilizado distintas combinaciones de materiales y agentes químicos como muestra la siguiente tabla:

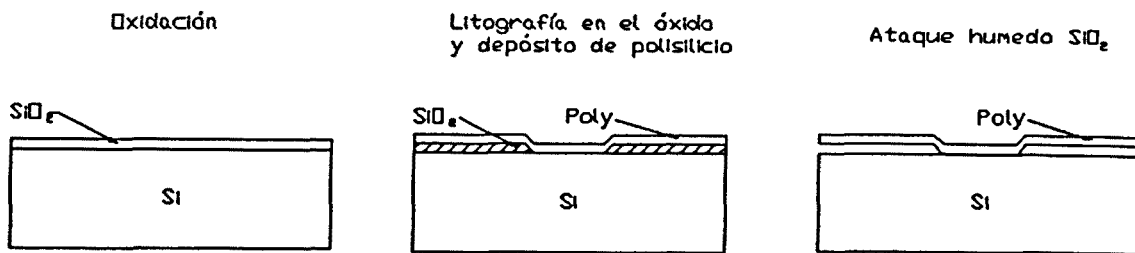


Fig. 1 Proceso básico del micromecanizado superficial.

Tabla I: Tecnologías básicas en el micromecanizado superficial.

Capa estructural	Capa de Sacrificio	Disolución	Ref.
Polisilicio	SiO <sub>2</sub>	HF+agua	4,5,6,7
Si <sub>3</sub> N <sub>4</sub>	Polisilicio	KOH+agua	8,9
a-Si:H	Aluminio	Ortofosfórico +Nítrico +Acético +agua	10
Poliimida	Aluminio	"	11,12

De todas estas combinaciones, la más estudiada es la basada en el tándem polisilicio/SiO<sub>2</sub>. A pesar de que se ha logrado la fabricación de estructuras muy diversas todavía existen algunas cuestiones problemáticas:

i) Estructuras con grandes áreas tienden a quedarse adheridas al sustrato en la limpieza final. Este fenómeno puede ser debido a la tensión superficial del agua utilizada en el aclarado final, o bien a la presencia de fuerzas electrostáticas entre la capa y el sustrato. Las cargas, origen de este fenómeno, podrían aparecer durante el mismo proceso de grabado de la capa de sacrificio como sugieren C. Linder et al.<sup>13</sup>.

ii) Otra cuestión fundamental, como hemos mencionado anteriormente, en el diseño de microestructuras utilizando la tecnología del micromecanizado superficial es el estado de esfuerzos presente en las capas. La aparición de diseños que contienen grandes estructuras liberadas del sustrato implica la obtención de capas con niveles de esfuerzos cada vez más

bajos.

También es fundamental para predecir el comportamiento mecánico de las microestructuras el conocimiento de propiedades mecánicas como el módulo de Young o el número de Poisson. Debido a la sensibilidad de las estructuras micromecánicas a estos parámetros, pueden utilizarse éstas para la medida in-situ de sus valores. Por ejemplo, el módulo de Young y el valor del esfuerzo residual pueden hallarse a partir de las medidas de las frecuencias de resonancia de puentes o membranas, o a partir de medidas de deflexión de esas mismas estructuras utilizando microscopía óptica<sup>14</sup>, SEM, métodos ópticos (por ej. anillos de Newton )<sup>15</sup>, perfilómetros<sup>16</sup> o nanoindentadores<sup>17</sup>.

Para la medida de las frecuencias de resonancia se emplea con frecuencia un interferómetro de Michelson para la detección de la deflexión<sup>18,19</sup>. De hecho en nuestro laboratorio se ha puesto a punto un sistema de medida basado en este principio. La excitación se realiza con un altavoz y la detección con un fototransistor. Mediante este método se ha logrado medir las frecuencias de resonancia de membranas de silicio de 1.5x1.5mm con un grosor de 4 micras<sup>20</sup>.

### III.1.2 Aplicaciones del polisilicio en sensores

El polisilicio es un material clave en la fabricación de sensores, pero no sólo como material estructural, sino también como material sensor. Si bien presenta un factor de *Gauge* menor que el del silicio monocristalino, todavía es marcadamente mayor al de los metales. Por ello ha sido utilizado con asiduidad para la fabricación de piezorresistencias sobre sustratos aislantes en sensores de presión, acelerómetros o resonadores. A pesar de sus menores sensibilidades presentan una serie de ventajas respecto a las piezorresistencias difundidas<sup>21,22,23</sup> como son:

- Operación a altas temperaturas, evitando las corrientes de fugas de las uniones p-n,
- Posibilidad de escoger el coeficiente de variación de la resistencia en un amplio rango de valores,
- Buena estabilidad temporal y linealidad.

Si bien las capas de polisilicio suelen depositarse sobre sustratos de silicio recubiertos con una capa de óxido, existen también casos en los que se depositan directamente sobre láminas metálicas<sup>24,25</sup> (Molibdeno, covar, acero inoxidable) recubiertas de una capa aislante. En este caso no se utilizan las posibilidades de micromecanización del silicio cristalino, sino simplemente el mayor factor de gauge del polisilicio sobre las habituales galgas de metal. Debido a los diferentes coeficientes de expansión térmica entre el polisilicio y el metal, estos dispositivos suelen dar lugar a grandes tensiones de salida a presión nula ('Offset').

Cuando se selecciona un proceso de depósito de polisilicio para la fabricación de piezorresistencias, uno de los objetivos prioritarios, además de la obtención de capas con resistividad controlable y reproducible, consiste en maximizar los coeficientes piezorresistivos. El valor de estos está directamente relacionado con la estructura de la capa. De hecho su valor puede obtenerse a partir del promediado de su valor en las distintas orientaciones de los granos presentes en la lámina. Este cálculo no es trivial y ha sido considerado por diversos autores<sup>26</sup>. En la mayoría de los casos se considera que el polisilicio es isótropo (todas las direcciones son igualmente probables) o bien contiene una sola textura. En nuestro grupo se ha diseñado un sistema de medida de los coeficientes piezorresistivos y existe una línea de trabajo en esta dirección<sup>27</sup>.

Los mayores factores de gauge se hallan en silicio recristalizado por láser<sup>28,29</sup>, en el cual se alcanzan tamaños de grano de hasta 100  $\mu\text{m}$  en la dirección de barrido. Mediante este método es posible también un control de la textura mediante la presencia de semillas obtenidas abriendo ventanas en la capa aislante depositada sobre un sustrato de silicio con la orientación deseada.

Como se ha mencionado anteriormente, otra característica del polisilicio es especialmente útil en el desarrollo de sensores: nos estamos refiriendo al coeficiente de temperatura de la resistividad o TCR. Varios autores han demostrado que el TCR de las resistencias de polisilicio puede modificarse en un amplio margen a través de la variación del nivel de dopaje<sup>30,31</sup>. Esta propiedad ha sido utilizada para la compensación en temperatura de la respuesta de sensores de presión, a través de una red de resistencias con TCR controlados<sup>32</sup>, e incluso para la realización de sensores de temperatura<sup>33</sup>. La variación del TCR con la dosis está en acuerdo cualitativo con las teorías de conducción en silicio policristalino, tal como se hayan descritas en los trabajos de Mandurah et al.<sup>34,35</sup>.

### **III.1.3 Descripción básica de los objetivos y del trabajo realizado**

En este contexto, el trabajo que se describe en este capítulo se ha centrado en el estudio del polisilicio depositado por LPCVD sobre capas de óxido de silicio, bien sea térmico o LPCVD. La caracterización ha sido tanto eléctrica como estructural, y se han estimado las deformaciones residuales mediante técnicas físicas de carácter microscópico. De manera complementaria también se procedió a un estudio de la estructura del óxido de silicio depositado a baja temperatura mediante LPCVD y de las modificaciones de la misma con tratamientos térmicos a temperaturas superiores. Al igual que en el polisilicio se ha hecho especial hincapié en la comprensión de los mecanismos físicos responsables del esfuerzo residual en el óxido y de su evolución con los tratamientos de recocido.



## III.2. Muestras

---

Un conjunto amplio de muestras se utilizaron a lo largo del estudio. A continuación se detallan sus principales características, clasificándolas en diferentes grupos según aquel aspecto más significativo. En todos los casos el polisilicio se depositó a partir de la descomposición de silano puro.

**GRUPO A:** Se depositaron capas de polisilicio con un grosor aproximado de 4500 Å sobre 1000 Å de óxido térmico crecido a 950°C. El polisilicio se depositó a 550°C, 590°C y 630°C a una presión de 70 mTorr. Las capas fueron implantadas con boro en dosis entre  $5 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  y  $5 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ . Algunas muestras se dejaron sin implantar. Posteriormente, las capas fueron recocidas durante 30 min en atmósfera de nitrógeno a temperaturas de 800°C, 950°C y 1100°C.

**GRUPO B:** Capas de polisilicio de 5500 Å de grosor se depositaron a temperaturas entre 560 y 630°C a una presión de 70 mTorr, sobre 1  $\mu\text{m}$  de óxido de silicio LPCVD depositado a 430°C.

**GRUPO C:** En este grupo se depositaron capas de 1.8  $\mu\text{m}$  de grosor a 630°C a una presión de 70 mTorr sobre 1.5  $\mu\text{m}$  de óxido de silicio LPCVD depositado a 430°C. Algunas obleas fueron recocidas a temperaturas entre 850°C y 1150°C durante 30 minutos en atmósfera de nitrógeno.

**GRUPO D:** Este último grupo se diferencia de los anteriores en el hecho de que se varió la presión en el reactor LPCVD. La presión utilizada en las muestras descritas anteriormente (70 mTorr) se sitúa en la zona baja entre las normalmente utilizadas en reactores LPCVD (hasta 500 mTorr). En este caso las capas tuvieron 1  $\mu\text{m}$  de grosor y se depositaron a 580 y 630°C a presiones de 70 o 300 mTorr sobre 1.6  $\mu\text{m}$  de óxido térmico húmedo crecido a 1100°C.

## III.3. Caracterización estructural de las capas de polisilicio

---

Las propiedades físicas de las capas de polisilicio son una consecuencia directa de su estructura. Por ésta entendemos si el material es amorfo o policristalino, el tamaño de los granos, su disposición en la capa y las orientaciones preferenciales o textura.

La estructura de las capas de silicio policristalino queda determinada por los parámetros tecnológicos que definen el proceso de obtención de la capa. Observemos que es un problema

complejo, pues son muchos los factores que intervienen: temperatura y presión en el depósito, elemento dopante, dosis, grosor de la capa, temperatura y tiempo de recocido, etc.

### III.3.1 Técnicas de caracterización estructural

#### III.3.1.1 TEM: Microscopía electrónica de transmisión

Es una de las técnicas más usuales para la obtención de información acerca de la estructura de capas cristalinas en microelectrónica. Tiene el inconveniente de que requiere una larga y cuidadosa preparación de la muestra para su posterior observación, siendo además una técnica destructiva. En contrapartida, se obtiene una imagen de la muestra que permite observar la disposición y tamaño de los granos siendo imprescindible en la discusión para interpretar los resultados de otras técnicas.

#### III.3.1.2 Difracción de rayos X

Esta técnica ha sido profusamente utilizada en este estudio. Los espectros realizados han permitido obtener información acerca del esfuerzo residual, tamaño de grano y orientaciones preferenciales.

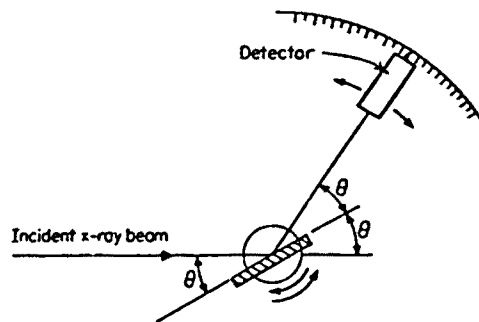


Fig. 2 Disposición geométrica de fuente muestra y detector en un difractómetro  $\theta$ - $2\theta$ .

Los espectros se realizaron en la configuración  $\theta$ - $2\theta$ . En ella, véase figura 2, los rayos X inciden y son refractados en la muestra con un ángulo  $\theta$  respecto a la superficie de la misma. Para registrar el espectro, el goniómetro del difractómetro rota la posición de la muestra variando el ángulo  $\theta$ , mientras simultáneamente mueve el detector para mantenerlo en un ángulo  $2\theta$  respecto al haz incidente. Cuando se cumple la ley de Bragg se produce un máximo en la intensidad difractada:

$$\lambda = 2d_{hkl}\sin\theta \quad (1)$$

$\lambda$  es la longitud de onda y  $d_{hkl}$  es el espaciado interatómico. Para un cristal cúbico este viene dado en función de los índices de Miller según:

$$d_{hkl} = \frac{a_0}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} \quad (2)$$

donde  $a_0$  es el parámetro de malla. Para el silicio  $a_0 = 5.43094(4)$  a  $25^\circ\text{C}$  según el estándar NBS-640, utilizado precisamente en la calibración del difractómetro.

### III.3.1.2.1 Orientaciones preferenciales

La formación de texturas está estrechamente relacionada con los mecanismos de nucleación del cristal y posterior crecimiento. Si la capa se deposita en una superficie plana y homogénea se forman cristalitos separados en la fase inicial del crecimiento según el modelo de Volmer-Weber<sup>36</sup> hecho indicativo de que los átomos están más fuertemente unidos entre sí que al sustrato. Bajo estas condiciones la mayoría de los cristalitos se colocarán de manera que su cara más extensa sea paralela al sustrato. En el caso de redes cristalinas con energía superficial altamente anisótropa (tales como HCP, Wurtzita) se producen texturas muy definidas. Para casos menos anisótropos, como los correspondientes a estructuras FCC o BCC, varias texturas pueden aparecer simultáneamente. Estas texturas se consideran normalmente como texturas de nucleación. Cuando todo el sustrato está recubierto de cristalitos, empieza un nuevo estadio en el desarrollo de la capa en el cual la competición entre granos vecinos juega un importante papel. Debido a la anisotropía en la velocidad de crecimiento, granos que posean las velocidades más elevadas en la dirección normal a la superficie del sustrato sobrevivirán al proceso de crecimiento.

A partir de la intensidad de las líneas de difracción puede obtenerse información sobre la abundancia relativa de una cierta orientación cristalográfica en el conjunto de granos de la muestra. Para un polvo de silicio completamente orientado al azar la intensidad de las líneas de difracción no es la misma para todas las reflexiones sino que varía de una línea a otra en función de una serie de factores de carácter físico y geométrico que listamos a continuación<sup>37</sup>:

- i) Factor de estructura,
- ii) Multiplicidad del plano,
- iii) Factor de polarización,
- iv) Factor de Lorentz,
- v) Factor de absorción y,

## vi) Factor de temperatura.

La expresión matemática final para la intensidad dispersada en la que intervienen los factores anteriores es:

$$I = K |f_a|^2 \exp\left(-\frac{2B \sin^2 \theta}{\lambda^2}\right) \left(1 - \exp\left(-\frac{2\mu t}{\sin \theta}\right)\right) \frac{1 + \cos^2(2\theta)}{\sin^2 \theta \cos \theta} \quad (3)$$

siendo

- K : constante  
 $f_a$  : factor de estructura  
 B : factor que depende de la temperatura  
 $\mu$  : inverso de la longitud de penetración para la longitud de onda empleada  
 t : grosor de la capa.

En la tabla II se muestra la intensidad relativa de cada pico de difracción en un polvo de silicio orientado al azar si el difractograma ha sido obtenido con un anticátodo de cobre (radiación  $\text{CuK}\alpha$ ). Estas intensidades incluyen la corrección del factor de Lorentz-Polarización (que depende de la longitud de onda empleada), pero no la corrección debido al grosor de la capa que variará de muestra a muestra.

Tabla II: Intensidades relativas en el estándar NBS-640.

hkl	I/I <sub>1</sub> (%)
111	100
220	55
311	30
400	6
331	11
422	12
511	6
440	3

Así pues, para calcular la fracción de volumen cristalino asociada a cada orientación, las intensidades experimentales deben corregirse por las intensidades del standard NBS, así como por el factor de absorción. En caso de utilizar otra longitud de onda, por ejemplo radiación  $\text{FeK}\alpha$ , las intensidades del silicio en polvo al azar deben corregirse por el cociente de los factores de Lorentz-polarización para ambas longitudes de onda. Si las áreas irradiadas no son iguales para todas las muestras las intensidades deben corregirse también por este factor.

### III.3.1.2.1 Determinación del tamaño de grano a partir del ensanchamiento de la línea de difracción

Sherrer en 1918 indica que el tamaño medio de los granos de un espécimen en polvo (o policristalino) está relacionado con la anchura de la línea de difracción según (4)

$$D = \frac{K\lambda}{\beta \cos\theta} \quad (4)$$

donde  $K$  es una constante próxima a 1, con ligeras variaciones según la forma de los granos. Para la estimación de  $\beta$  existen dos convenios que llevan a distintos valores de la constante  $K$ : el primero consiste en tomar  $\beta$  como la anchura a media altura ( $K = 0.9$ ), mientras el segundo consiste en tomar  $\beta$  como la anchura integral definida como la intensidad máxima dividida por el área del pico (en este caso  $K = 1.05$ ).

En el cálculo del tamaño de grano es esencial tener en cuenta que  $\beta$  es la anchura pura de la línea de difracción<sup>38</sup>, tras eliminar la contribución de la anchura instrumental  $b$  al valor observado experimentalmente  $B$ . La anchura instrumental se halla a través del difractograma correspondiente a un espécimen en polvo cuyos granos tengan un tamaño superior a 1 micra. Es necesario realizar este difractograma en las mismas condiciones experimentales que el resto de medidas.

La teoría básica para esta corrección descansa en suponer que el perfil observado  $h(\theta)$  es el producto de convolución de una función de peso propia del difractómetro  $g(\theta)$ , responsable del ensanchamiento instrumental, y el perfil de difracción puro  $f(\theta)$ .

$$h(\theta) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(\zeta) f(\theta - \zeta) d\zeta \quad (5)$$

Varios autores han demostrado que la función deseada, es decir, el perfil de difracción puro, se puede obtener a partir de las funciones accesibles experimentalmente  $g(\theta)$  y  $h(\theta)$ , utilizando la teoría de transformadas de Fourier. No obstante, cuando el principal objetivo es la comparación de tamaños de grano y una estimación de la dimensión media de los mismos, existen otros métodos de aplicación rápida y de fiabilidad suficiente. En ellos una determinada función relaciona  $\beta/B$  con  $b/B$ . En la figura 3 se muestra una de las funciones propuestas.

Los valores de  $\beta$  que intervienen en el cálculo son los correspondientes a una línea

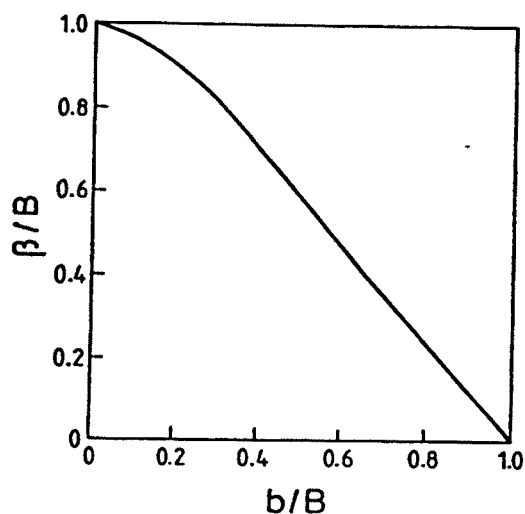


Fig. 3 Curvas para la corrección de anchuras de línea del ensanchamiento instrumental (Ref. 38).

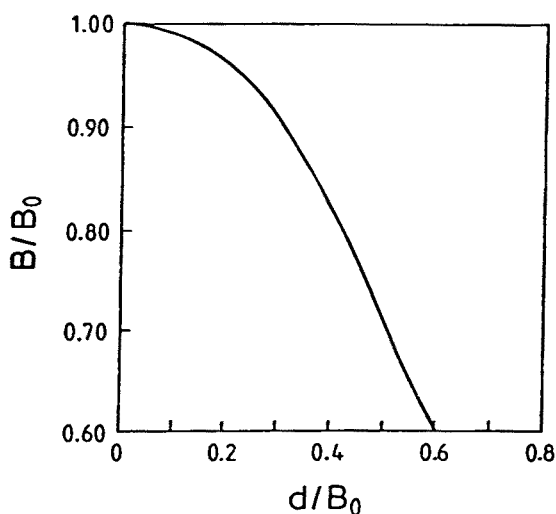


Fig. 4 Curva para la corrección de la anchura de línea debido al doblete  $K\alpha$ . (Ref. 38).

idealmente monocromática, por ello deben corregirse en primer lugar del ensanchamiento de la línea de difracción debido a la separación angular del doblete  $K\alpha_1\alpha_2$ ,  $d$ . Este efecto es usualmente pequeño a ángulos de Bragg bajos, pero pasa a ser progresivamente más importante a medida que  $\theta$  aumenta. Para ángulos suficientemente grandes y si las líneas de difracción no son muy anchas, es posible resolver independientemente cada una de las líneas, pero éste no es siempre el caso. Otra solución reside en utilizar la línea  $KB$  como fuente de radiación para el espectro de difracción. Es usual que el software de tratamiento de los

difractogramas disponga de algoritmos para la eliminación de la contribución de la línea  $K\alpha_2$  sobre el pico de difracción obtenido experimentalmente. En cualquier caso, también puede procederse a la corrección numérica a partir del fichero de datos utilizando alguno de los métodos descritos en la literatura<sup>39</sup>. También en este caso se han derivado curvas de corrección asumiendo que las líneas  $h(\theta)$  y  $g(\theta)$  tienen una cierta forma matemática. La figura 4 presenta alguna de estas curvas de corrección ( $B_0$  es la anchura de la línea experimental antes de realizar la corrección debida a la anchura del doblete  $d$ ).

En este análisis hay que tener en cuenta, no obstante, que el ensanchamiento de la línea de difracción puede deberse también a la presencia de micro-esfuerzos. Si se utiliza, simplemente la fórmula de Scherrer se está hallando en realidad una cota inferior del tamaño medio de los cristalitas. Existen varios métodos para intentar separar las dos componentes.

a) Experimentalmente es conocido que una de las funciones que mejor describe los perfiles de difracción de polvo es la función de Voigt. Esta función se describe como el producto de convolución de una gaussiana por una lorentziana. El primer método para la separación asume que la anchura de la componente gaussiana es debida al tamaño de grano, mientras la anchura de la componente lorentziana se debe a la presencia de micro-esfuerzos<sup>40</sup>. La utilización de esta metodología requiere de un extensivo y riguroso cálculo de errores si se quiere estar seguro de que las conclusiones extraídas tienen fundamento. En cualquier caso, la bondad de este método se fundamenta en los buenos acuerdos que se obtienen en el análisis cruzado con otras técnicas de medida.

b) El otro método desarrollado por Warren-Averbach, quizá más clásico y contrastado, es un procedimiento gráfico<sup>41</sup> que involucra la medida de distintos ordenes de reflexión de la misma línea de difracción. Los puntos experimentales se representan en el espacio  $(4 \sin\theta/\lambda, \beta \cos\theta/\lambda)$ . La pendiente de la recta estima el valor de microesfuerzo mientras la ordenada en el origen estima  $1/D$ .

Finalmente, es necesario hacer unas últimas precisiones: i) El valor del tamaño de grano extraído mediante XRD se refiere a la dimensión del mismo en la dirección  $z$ , o perpendicular al plano de la muestra, ii) El dominio de difracción coherente puede estar limitado por defectos 2-dimensionales como dislocaciones o defectos de apilamiento, iii) La difracción de rayos X proporciona valores bastante precisos para granos con dimensión inferior a los 500 Å y simplemente estimaciones del tamaño para dimensiones de hasta 3000 Å. Por encima de estos valores, los tamaños obtenidos no suelen ser fiables, pues la anchura integral es muy similar a la instrumental induciendo un gran error relativo en la corrección.

### III.3.1.3 Espectroscopía Raman

La espectroscopía Raman es una técnica especialmente adecuada para la caracterización de redes de silicio con diferentes grados de desorden<sup>42</sup>. En el espectro Raman de silicio monocristalino aparece un pico agudo en torno a  $520.5 \text{ cm}^{-1}$  debido al fonón óptico  $\Gamma_{25}$  con una anchura a media altura en torno a  $3.5 \text{ cm}^{-1}$ . En cambio, el espectro correspondiente al silicio amorfo consiste en una banda mucho más amplia centrada alrededor de  $480 \text{ cm}^{-1}$ .

Para silicio microcristalino (tamaño de grano del orden de  $100 \text{ \AA}$ ) se rompe la regla de selección  $k \approx 0$ . Por ello otros modos fonónicos longitudinales y transversales así como modos superficiales también contribuyen al espectro. En particular los modos ópticos que contribuyan a la dispersión Raman tendrán una frecuencia inferior a la correspondiente a la transición  $k=0$ . Por ello el pico se desplazará hacia energías inferiores. Por otro lado, la anchura a media altura aumenta siendo una medida del acoplamiento entre la transición permitida y otros fonones, y en consecuencia del orden de la red.

## III.3.2 Detalles experimentales

### III.3.2.1 Difracción de rayos X

Los espectros se realizaron en un difractómetro Siemens D-500 con geometría  $\theta$ - $2\theta$ , con un radio de  $20.05 \text{ mm}$ , utilizando un sistema de rendijas Soller y un monocromador de grafito en el haz secundario. La divergencia del haz en la fuente es  $1^\circ$  y la rendija en el detector es de  $0.15^\circ$ . En los espectros se detectaron los picos  $\{111\}$ ,  $\{220\}$ ,  $\{311\}$ ,  $\{400\}$ ,  $\{331\}$  y  $\{422\}$ . Tras una exploración inicial se realizó un examen más detallado en un entorno de cada pico con un paso de  $0.025^\circ$  y 5 segundos de conteo. Para la calibración del difractómetro, así como para la determinación de la anchura instrumental se efectuó un difractograma de polvo de silicio estándar (NBS 640). Se utilizó radiación  $\text{FeK}\alpha$  (40 KV, 30 mA) Se prefirió la línea  $\text{K}\alpha$  del hierro en lugar de la del cobre debido a la menor longitud de penetración de la primera en el silicio ( $38 \mu\text{m}$  frente a  $71 \mu\text{m}$ , respectivamente) lo que provoca un aumento de la intensidad refractada. Por otro lado, la longitud de onda del hierro es mayor que la longitud de onda del cobre lo que provoca que las reflexiones aparezcan a ángulos mayores. Ello es conveniente para una determinación precisa del espaciado interatómico, pues el error, deducido a partir de la ley de Bragg viene dado por:

$$\frac{\Delta d}{d} = -\frac{\Delta \theta}{\tan \theta} \quad (6)$$

Para eliminar la intensa reflexión  $\{400\}$  proveniente del sustrato, el acoplamiento  $\theta$ - $2\theta$  se



desajustó en  $2^{\circ 43}$ . Ello provoca una casi total desaparición del pico del sustrato, mientras que la intensidad del resto de los picos originados en la capa policristalina solo disminuye ligeramente.

En varias muestras se realizaron espectros con rotaciones arbitrarias en torno al eje z (perpendicular a la superficie de la muestra). Los resultados no mostraron diferencias significativas dentro del error experimental, indicando que no hay orientaciones preferenciales en el plano x-y, como era de esperar al depositar las capas de polisilicio sobre una capa continua de material amorfo.

### *III.3.2.2 TEM*

Las muestras fueron estudiadas en un microscopio Hitachi H-800NA. Fueron preparadas para su observación en sección transversal y en vista planar mediante adelgazamiento mecánico y posterior ion milling mediante iones de energía de 5 KeV hasta lograr la transparencia electrónica. Todas las micrográficas se obtuvieron con un voltaje de aceleración de 100 KeV.

### *III.3.2.3 Espectroscopía RAMAN*

Las medidas de espectroscopía RAMAN han sido realizadas en un espectrómetro Jobin-Yvon modelo T64010. Es un espectrómetro con triple monocromador y detección multicanal por CCD's. Para la excitación se utilizó la línea 514 nm de un láser de Argón, para la cual la penetración de la luz dispersada en el silicio cristalino se estimó del orden de 800 nm. Las medidas se obtuvieron en modo aditivo.

## **III.3.3 Resultados experimentales**

### *III.3.3.1 Orientaciones preferenciales*

La textura, u orientaciones preferenciales presentes en una capa delgada de polisilicio, está determinada por multitud de factores tecnológicos. Ello provoca que los distintos estudios realizados hasta el momento actual sólo proporcionen una visión parcial de la influencia de cada uno de los parámetros.

P. Joubert et al.<sup>44</sup> han recogido los resultados aparecidos en la literatura acerca de las orientaciones preferenciales presentes en capas de polisilicio tras el depósito. Según su estudio, los parámetros determinantes en la estructura final de las capas son la presión parcial de silano en el reactor y la temperatura de depósito. Voutsas et al.<sup>45</sup>, no obstante, muestran que de manera equivalente la estructura de la capa puede considerarse determinada por la

temperatura y por la velocidad de depósito.

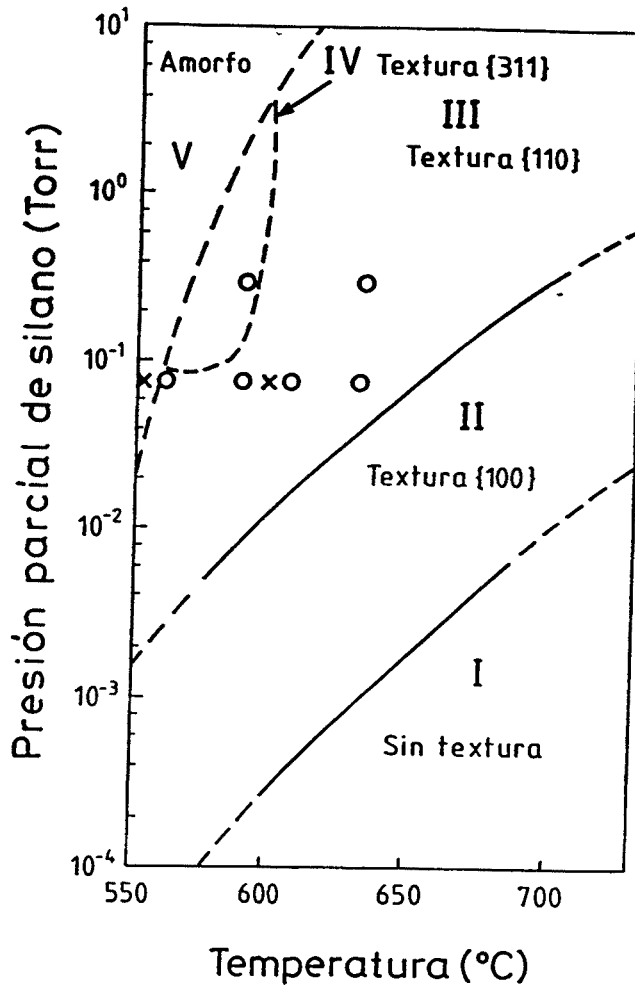


Fig. 5 Texturas dominantes en función de la temperatura y de la presión de silano. O y x indican las muestras estudiadas en este capítulo (Ref. 44).

Como podemos observar en la figura 5, si elaboramos un gráfico presión-temperatura se pueden diferenciar hasta cinco zonas con diferente estructura. A muy bajas presiones los granos están orientados al azar (zona I). Al aumentar la presión de silano las capas pasan a tener una textura {100} (zona II). A presiones aún mayores, los granos están orientados mayoritariamente en la dirección  $\langle 110 \rangle$  (zona III). Esta es la zona habitualmente utilizada por la mayoría de laboratorios. Aunque en ocasiones se asume que esta orientación es la predominante en capas de polisilicio LPCVD, puede deducirse del gráfico, que esta aseveración es sólo cierta en un intervalo de presiones y temperaturas. Existe aún una zona de pequeña 'extensión' en la cual las capas presentan una textura {311}. Obsérvese que para presiones superiores a 50 mTorr y para bajas temperaturas las capas obtenidas son amorfas.

La figura 5 muestra también claramente, que la temperatura de transición entre capas policristalina y amorfas es una función de la presión parcial de silano en el reactor.

Hay que tener en cuenta, no obstante, que el esquema de la figura 5 es necesariamente una simplificación de la realidad:

- a) las capas de silicio pueden estar texturadas en mayor o menor grado;
- b) las líneas que separan las diversas zonas deben comprender, por mera continuidad, una zona más o menos amplia en la cual dos o más orientaciones deben coexistir significativamente;
- c) Si bien la presión y la temperatura aparecen como las variables de más importancia, está claro que otros parámetros, como por ejemplo el grosor de la capa, pueden tener una influencia considerable en la estructura de la capa. En este sentido Kamins et al.<sup>46</sup> hallan que la textura {110} aumenta con el grosor de la capa.

Respecto a esta última consideración, debemos observar que aunque se depositen capas de silicio inicialmente amorfas, una cristalización gradual de la capa puede ocurrir si el tiempo de depósito es suficientemente largo<sup>47</sup>. Ello puede dar lugar a estructuras cambiantes según el grosor de la capa considerado.

En este marco, presentaremos a continuación los resultados obtenidos referentes a las orientaciones preferenciales existentes en las capas tras el depósito. En la figura 5 hemos incluido también los puntos correspondientes a nuestras muestras.

Analicemos en primer lugar los resultados obtenidos en las muestras obtenidas a la presión de 70 mtorr (figura 6). A 560°C las capas son prácticamente amorfas pues las intensidades de los picos en el difractograma son muy débiles. Sin embargo, como se puede observar en la figura la línea más intensa es la {311}, lo que concuerda con la cercanía del punto en el diagrama a la zona IV. Entre 580° y 600° la línea {220} es dominante, mientras las líneas {111} y {311} permanecen prácticamente al mismo nivel. Ello encaja perfectamente con la textura {110} asignada a la zona III. A la temperatura más alta 630°C la línea {220} sigue siendo la más intensa pero sufre una ligera disminución. Puede observarse, además, que su intensidad aumenta de manera importante con el grosor de la capa en acuerdo con lo apuntado por Kamins. Ya anteriormente habíamos señalado la importancia de la velocidad de crecimiento de cada orientación cristalina en la textura final de la capa. Por ejemplo, Tung<sup>48</sup> estudia la velocidad de crecimiento epitaxial en función de la orientación del substrato y halla que ésta es mayor para substratos {110} que {100} o {111}.

Vemos, pues, que las texturas o líneas principales, se muestran en acuerdo con el diagrama de Joubert, aunque nuestro análisis nos permite observar las transformaciones

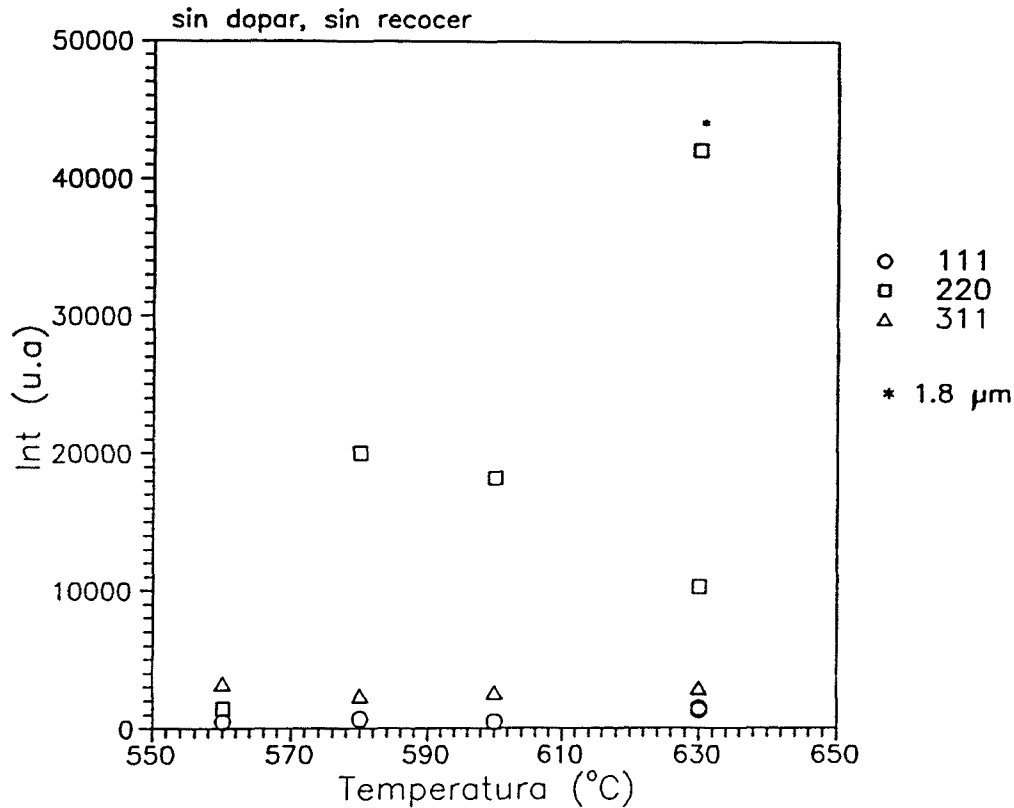


Fig. 6 Evolución de las orientaciones preferenciales en función de la temperatura de depósito. Presión de silano 70 mtorr. ○ {111}, □ {220}, △ {311}. (Grosor 0.55 μm).

correspondientes a otras reflexiones, así como la evolución de la fracción cristalina.

Consideremos ahora los resultados obtenidos con una presión de 300 mtorr. Los resultados correspondientes a las muestras del grupo D aparecen en la tabla III. Obsérvese que la muestra depositada a 630°C es {110} (zona III), mientras a 580°C es {311} (zona IV).

**Tabla III:** Intensidades normalizadas en las muestras del grupo D.

T (°C)	P (mtorr)	111	220	311	400	331	422
580	70	774	86281	3293	-	16227	-
580	300	5193	12334	19224	-	5541	11842
630	70	5073	19134	8327	44162	4796	13798
630	300	870	59908	6202	-	13426	4734

Estas dos últimas muestras no deben compararse con las del grupo B, pues tienen diferente grosor (1  $\mu\text{m}$  frente a 0.55  $\mu\text{m}$ ), sino con las de su mismo grupo. Así podemos observar como mientras la muestra depositada a 580°C, 300 mtorr es {311}, la muestra obtenida a 580°C, 70 mtorr tiene una textura {110} muy marcada. En cambio la muestra a 630°C, 70 mtorr es {100}, al contrario que la muestra equivalente del grupo B (mismas condiciones, pero grosor inferior), reflejando que el grosor de la capa tiene una importancia apreciable en la estructura final de la capa.

Tomando en consideración los mecanismos físicos y químicos que intervienen en el depósito se puede comprender la existencia de una zona con estructura amorfa en el diagrama de Joubert. La estructura de la capa está determinada en gran medida por la difusividad superficial de las especies adsorbidas<sup>49</sup>. Al aumentar la temperatura los átomos de silicio adsorbidos pueden difundirse una distancia mayor en la superficie. En consecuencia es más fácil que se unan a un núcleo ya existente, favoreciendo la cristalización, que no que formen uno nuevo. Por el contrario, una mayor presión en el reactor causa un mayor número de átomos adsorbidos en la superficie bloqueando la difusión de los átomos por la superficie y dificultando que se formen pocos pero mayores núcleos de cristalización. Todo ello resulta en estructuras amorfas al aumentar la presión o disminuir la temperatura.

Este modelo permite una interpretación cualitativa de la influencia de los distintos parámetros tecnológicos que definen la estructura de la capa. Muy recientemente Voutsas et al.<sup>45</sup> han dado un paso más allá y han elaborado un modelo cuantitativo teórico. Al igual que el modelo anterior, está basado en el concepto de la longitud de difusión de los átomos adsorbidos en la superficie. La expresión final para la longitud de difusión es:

$$L = \frac{\beta}{\sqrt{P}} \exp\left(-\frac{E_A - E_D}{2kT}\right) \quad (7)$$

donde  $E_A$  es la energía de activación de la difusividad superficial,  $E_D$  la energía de activación

asociada al depósito y  $P$  la presión total.  $\beta$  es una constante independiente de la temperatura y de la presión, pero dependiente de la dilución del silano en el gas portador. En este modelo se propone que el tamaño de grano es una medida directa de la longitud de difusión superficial. A pesar de que obtienen un buen acuerdo entre el modelo teórico y los resultados experimentales, la hipótesis anterior no parece válida pues puede haber un sustancial incremento en el tamaño de grano por la cristalización gradual del material en fase amorfa durante el mismo proceso de depósito de la capa. En este caso la dimensión del grano no está relacionada con la longitud de difusión.

Si bien las causas de la transición entre estructuras amorfas y policristalinas se conocen bien, al menos cualitativamente, no ocurre lo mismo sobre el origen de las distintas texturas en unos márgenes fijados de presión y temperatura. Puede intuirse que el desarrollo de una textura en particular está en íntima relación con la energía de activación para el crecimiento de cada uno de los granos, así como con el tamaño crítico del núcleo para que el grano empiece a crecer.

Hasta ahora hemos analizado la estructura de las capas tras el depósito. Sin embargo, para la mayoría de aplicaciones será más útil conocer la estructura de la capa tras ciertos tratamientos térmicos y/o de dopaje. En este punto el número de factores que afectan a la estructura vuelve a incrementarse: estructura inicial de la capa, condiciones de implantación - especie, dosis y energía-, y condiciones de recocido - atmósfera, tiempo y temperatura.

Gracias a esta variedad de factores los resultados de los distintos grupos son dispersos y difícilmente comparables. Los primeros trabajos sobre esta cuestión se deben una vez más a Kamins<sup>50</sup>. La figura 7 muestra la evolución de las orientaciones preferenciales con la

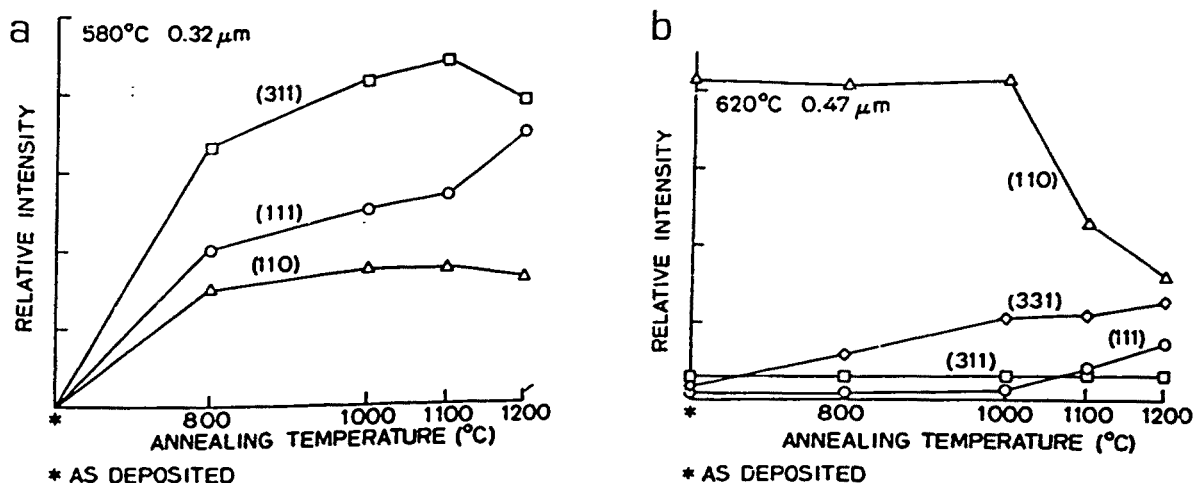


Fig. 7 Efecto del recocido en las orientaciones preferenciales en a) una capa depositada en fase amorfa a 580°C, b) en una capa depositada en fase policristalina a 620°C (Ref. 50).

temperatura de recocido para capas depositadas a 580 y 620°C. Aunque no menciona la presión de silano en cada caso, indica que se sitúa en el rango de 350 a 500 mtorrs. En las muestras depositadas a 580°C, inicialmente amorfas, se detecta un aumento generalizado de todas las líneas indicando la progresiva cristalización de la capa durante el recocido. En cambio, para las muestras depositadas a mayor temperatura en estado ya policristalino, se observa poca variación en la estructura hasta temperaturas en torno a 1000°C, para la cual, la textura  $\langle 110 \rangle$  ya presente en las capas tras la depósito disminuye bruscamente a la vez que aumentan las reflexiones  $\{331\}$  y  $\{111\}$ .

G. Harbeke et al.<sup>51,52</sup> presentan nuevos resultados sobre la textura de capas recocidas, si bien solo indican la textura predominante tras un recocido a 1000°C durante 30 min. La tabla muestra un resumen de sus resultados. Según sus resultados capas inicialmente en las zonas V y IV del diagrama de Joubert desarrollan una textura  $\{111\}$  tras el recocido. Las depositadas a más alta temperatura mantienen sus texturas iniciales tras el recocido. No obstante, debemos denotar la ausencia de resultados acerca de las texturas  $\{400\}$ ,  $\{331\}$  y  $\{422\}$ , cuyos picos no fueron registrados por los autores.

Tabla IV: Texturas en capas recocidas vs. temperatura de depósito según Harbeke et al.<sup>52</sup>

Temperatura de depósito	Textura más intensa
560°C	111
570°C	111
580°C	111
600°C	311
620°C	110

En este marco, nuestro estudio permite conocer la evolución de las distintas orientaciones existentes en las capas en función de la temperatura de depósito, así como estudiar el efecto de la implantación de boro.

Presentamos en primer lugar los resultados obtenidos con muestras no dopadas. El primer aspecto que llama la atención es la importancia de la línea  $\{422\}$  para las tres temperaturas de depósito (figura 8), siendo un línea habitualmente no considerada en los estudios de textura por los autores citados previamente. También destaca la textura  $\{100\}$  en las capas depositadas a 630°C, aumentando su importancia con la temperatura de recocido. Es de resaltar que esa línea no aparece siquiera en los difractogramas en las capas depositadas a temperaturas inferiores. Seguramente los cristalitos correspondientes a esta orientación existen en la muestra tras el depósito, pero no son detectados debido a baja eficiencia de la línea  $\{400\}$  para la dispersión de rayos X. El punto en el diagrama de Joubert correspondiente a las condiciones tecnológicas de depósito, aunque encuadrado en la zona

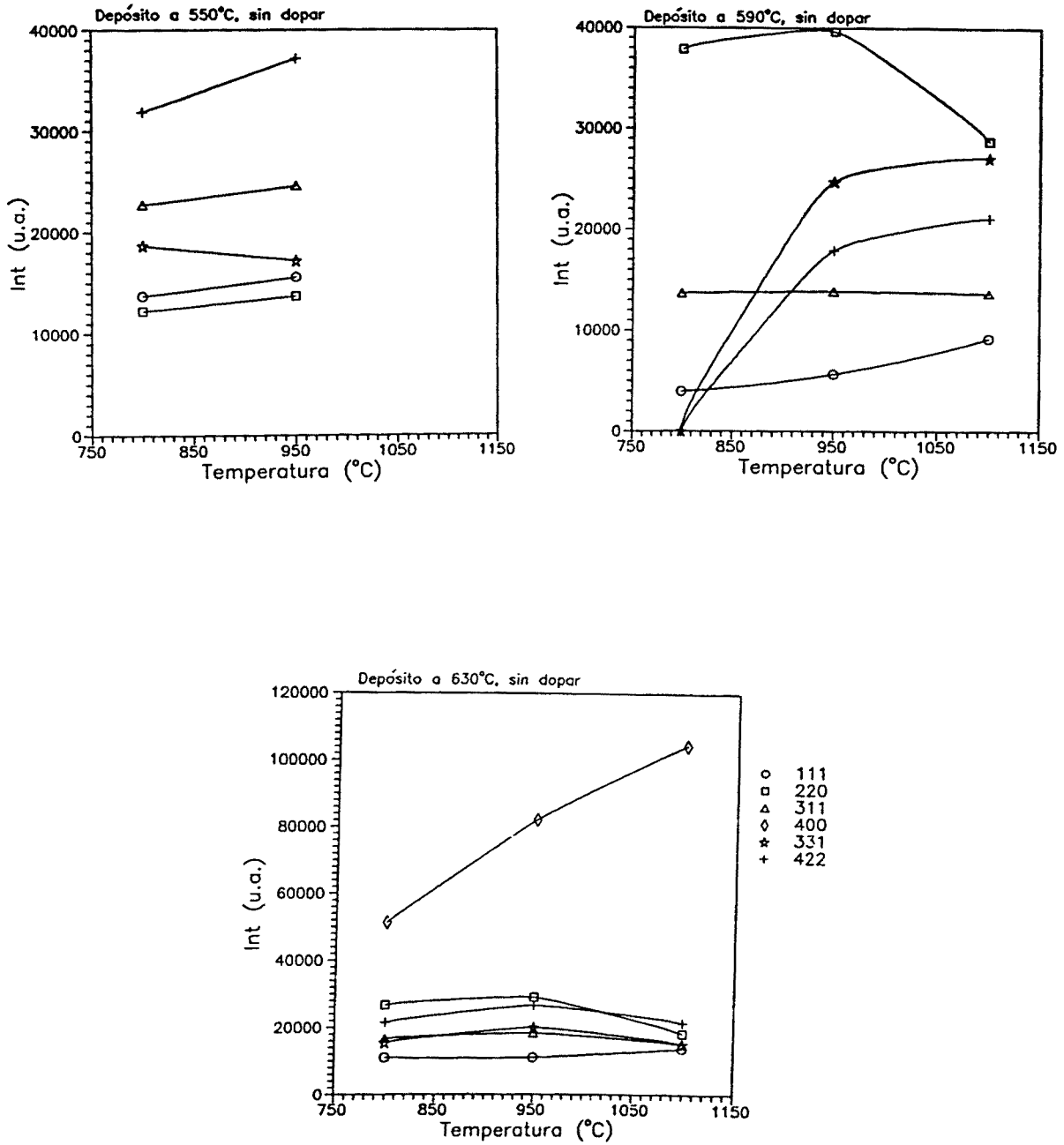


Fig. 8 Evolución de las orientaciones preferenciales con la temperatura de recocido.



de textura  $\{110\}$  está próximo a la zona de textura  $\{100\}$ . En contraste, las otras condiciones de depósito están mucho más alejadas de esta zona. Ello aclara porque la línea  $\{400\}$  no aparece siquiera tras los distintos procesos de recocido. Para esos puntos no existen semillas para el desarrollo de la textura en el posterior recocido.

Las muestras obtenidas a  $590^{\circ}\text{C}$  presentan una textura  $\{110\}$  según los resultados presentados en la figura 8b y mantienen esa orientación preferente para todas las temperaturas de recocido, aunque a  $1100^{\circ}\text{C}$  se produce una disminución de la intensidad de esta líneas, mientras simultáneamente crecen la  $\{331\}$  y la  $\{422\}$ .

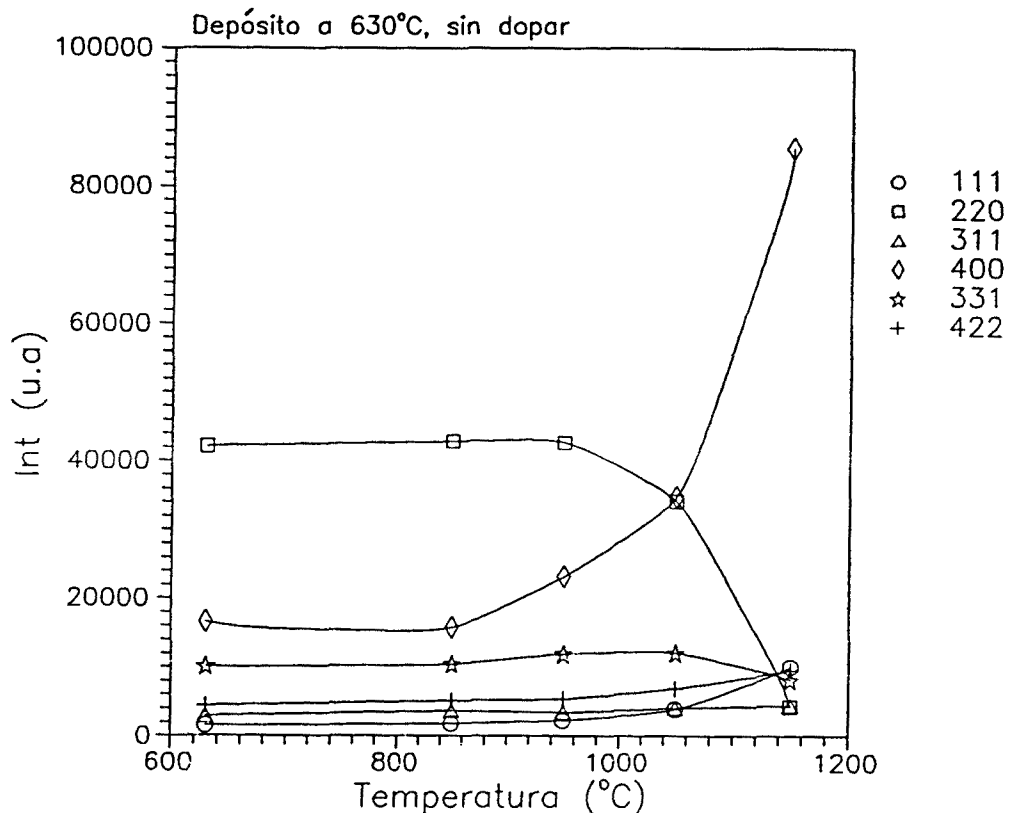


Fig. 9 Evolución de las orientaciones preferenciales en función de la temperatura de recocido.  $T_d = 630^{\circ}\text{C}$ , grosor  $1.8\ \mu\text{m}$ .

En la figura 9, se puede observar la evolución de las orientaciones preferenciales con la temperatura de recocido, para muestras depositadas a  $630^{\circ}\text{C}$ . El grosor de la capa de polisilicio es ahora mayor:  $1.82\ \mu\text{m}$ . La textura  $\{110\}$  se mantiene como predominante como ocurría para las capas depositadas a  $590^{\circ}\text{C}$ , hasta  $950^{\circ}\text{C}$ , punto a partir del cual la intensidad cae bruscamente. La textura  $\{100\}$ , al igual que en para las muestras depositadas a  $630^{\circ}\text{C}$  experimenta un fuerte aumento con la temperatura de recocido y pasa a ser la textura

predominante para temperaturas superiores a 1000°C. El resto de líneas sigue una evolución más suave, excepto la línea {111} que también sufre un intenso ascenso.

De esta comparación puede concluirse que aunque los valores concretos obtenidos dependen del grosor de la capa, la evolución observada es básicamente la misma y sólo responden al hecho de partir de una diferente estructura inicial tras el depósito.

Tanto en los resultados de Kamins, como en los obtenidos en nuestras muestras, puede observarse el espectacular colapso de la línea {220} que decrece a expensas de otras líneas. Ello debe estar ligado sin duda a una reordenación de las fronteras de grano y al crecimiento de unos granos en detrimento de otros.

Presentaremos a continuación los resultados obtenidos en las mismas muestras del grupo A, pero tras sufrir una implantación de boro con una energía de 70 KeV y una dosis de  $5 \cdot 10^{15}$  cm<sup>-2</sup> (figura 10)<sup>53</sup>.

Tras la implantación y el recocido se ha producido un leve aumento de la cristalinidad de las capas reflejado en un aumento de la intensidad de las líneas de difracción. En las muestras depositadas a 550°C cabe destacar un significativo aumento de la línea {311} mientras la {220} sigue siendo la menos intensa. Cuando la temperatura de depósito es 590°C, la implantación de boro provoca que la textura {220} aumente levemente. En aquellas muestras obtenidas a 630°C, sigue manteniéndose la textura {100} que ahora es aún más intensa. Se produce también para esta temperatura un aumento importante de la línea {220}.

El origen de estas modificaciones en la textura está posiblemente en el daño creado por la implantación. Aún así, la amorfización de la capa no debe ser completa, pues la textura tras la implantación tampoco sufre un cambio drástico. Dada la energía de implantación escogida, el pico de concentración de boro aparece en el centro de la capa. Por ello, el máximo en el daño inducido por la implantación estará situado en la mitad superior de la capa, quedando menos alterada la mitad inferior. En el recocido posterior los granos cercanos a la interfaz óxido-polisilicio pueden actuar como semillas del crecimiento. La amorfización selectiva de ciertas texturas mediante la técnica SSIC ('Seed Selection through Ion Channeling') y posterior recocido, es utilizada para obtener capas de polisilicio con una textura previamente determinada<sup>54</sup>. En nuestro caso, no obstante granos con distintas orientaciones permanecen tras la implantación y ello explica el recuerdo de la textura provocada por las condiciones del depósito.

### *III.3.3.2 Disposición y tamaño de los granos*

En las muestras del grupo A se ha realizado un estudio de los tamaños de grano estimados

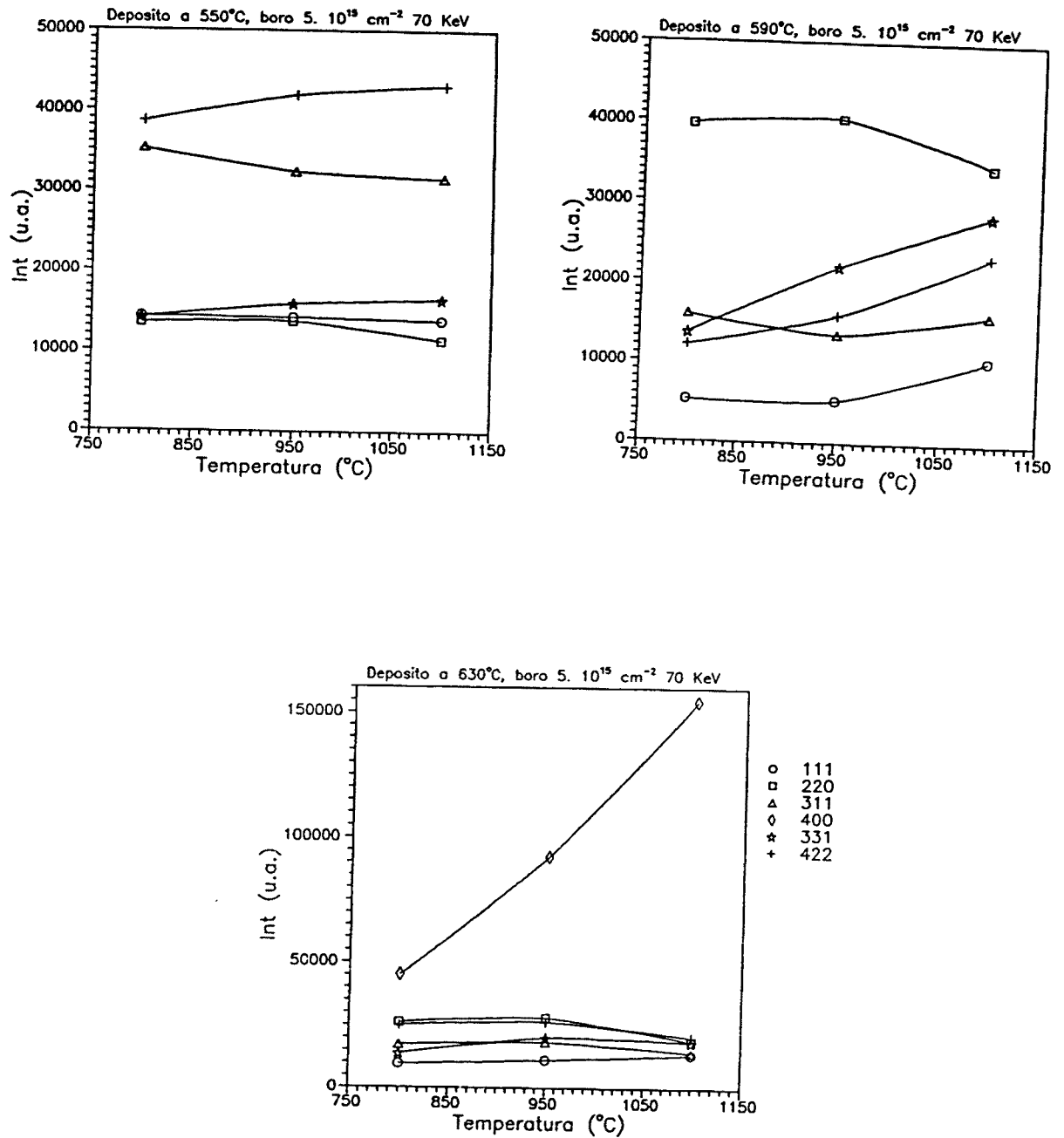


Fig. 10 Orientaciones preferenciales en función de la temperatura de recocido y depósito para muestras implantadas con boro:  $5 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ .

a partir de la anchura a media altura de los picos de difracción de rayos X. Se han comparado las muestras sin implantar con las que han recibido la dosis de implantación máxima ( $5 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ ). Se han evaluado los resultados para los picos {111}, {220} y {311} que por ser los más intensos permiten una determinación más precisa de la anchura integral.

En la figura 11 se presentan los resultados obtenidos. El tamaño promedio de los granos en la dirección perpendicular al grosor de la capa aumenta en todos los casos con la temperatura de recocido. Es de destacar la similitud de valores y evoluciones para los tamaños de grano en muestras dopadas con boro y sin dopar. Este resultado reafirma los obtenidos por otros autores que indican la leve influencia del boro sobre el tamaño de grano, en oposición a la influencia del fósforo conocido por su efecto 'catalizador' sobre el aumento del tamaño de grano<sup>55</sup>. Al analizar estos resultados debe tenerse cuidado en separar el efecto del átomo dopante del efecto del daño creado por la implantación. Así, no es de extrañar observar una disminución del tamaño de grano si se emplean dosis elevadas; efecto que desaparece para las temperaturas de recocido más altas<sup>56</sup>.

Fijemos ahora nuestra atención sobre la influencia de la temperatura de depósito. Los granos correspondientes a las orientaciones {111} y {311} presentan un comportamiento similar. La temperatura de depósito que produce los mayores granos es la inferior, es decir,  $550^\circ\text{C}$  donde la capa depositada tiene una estructura amorfa con leves inclusiones microcristalinas. Por orden de tamaño de grano siguen las temperaturas de  $630^\circ\text{C}$  y  $590^\circ\text{C}$ , aunque la posición de estas temperaturas se intercambia cuando el recocido se produce a  $1100^\circ\text{C}$ . Reparemos ahora en los resultados obtenidos en los granos {110}. Podemos observar que presentan una evolución distinta. Su tamaño aumenta con la temperatura de depósito.

Las imágenes TEM obtenidas en vista planar (figura 12) muestran que los granos son mucho mayores para la temperatura de depósito de  $550^\circ\text{C}$ . Ello refuerza los resultados obtenidos para los granos de la textura {111} y {311}. Por otro lado, la textura {220} es la menos intensa para las muestras depositadas a esta temperatura, lo que indica que estos granos tendrán muy poca influencia en la estructura de las muestras depositadas a esta temperatura.

En los resultados sobre orientaciones preferenciales presentados previamente se observa como la textura {110} disminuye a altas temperaturas de recocido. Sin embargo, el tamaño medio de los granos {110} aumenta. Ello solo puede conciliarse con una reducción del número de granos, o bien con una disminución del tamaño en el plano de la oblea a la que los rayos X son insensibles.

Si bien el boro parece tener poco efecto en el tamaño en la dirección z de los granos de polisilicio, de las fotos TEM en sección transversal (figura 13) parece desprenderse un aumento del tamaño en el plano de la oblea. Este efecto es debido no sólo al dopaje con boro

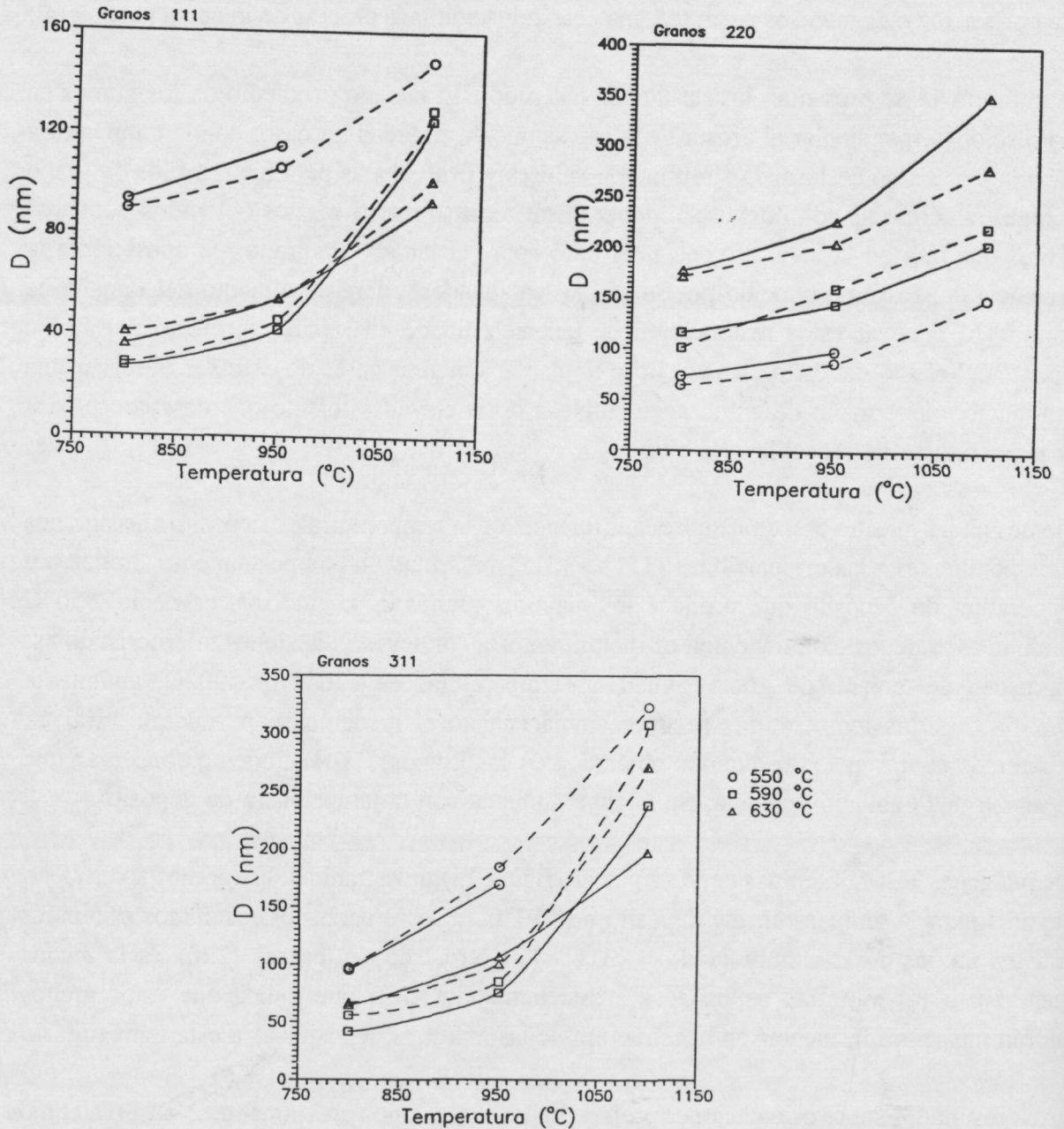
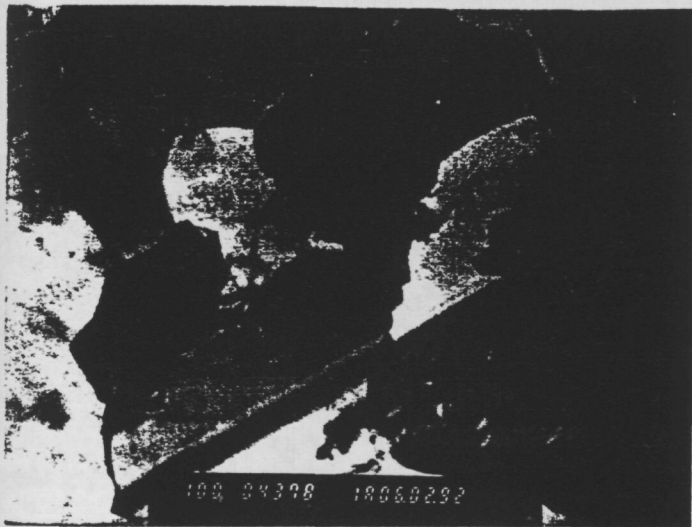
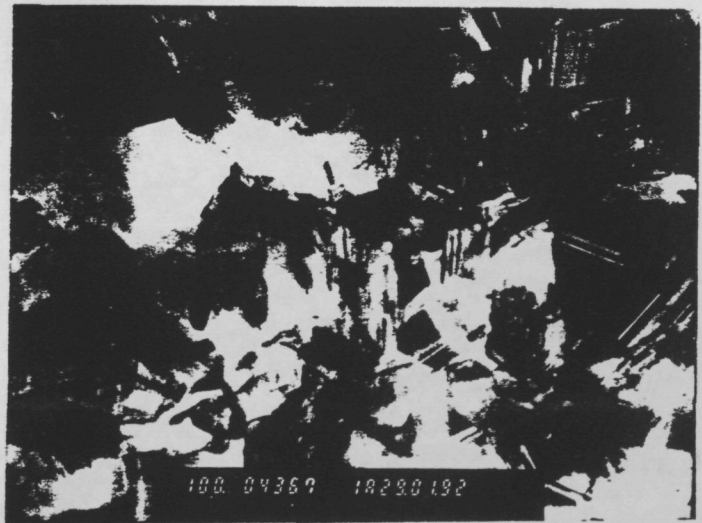


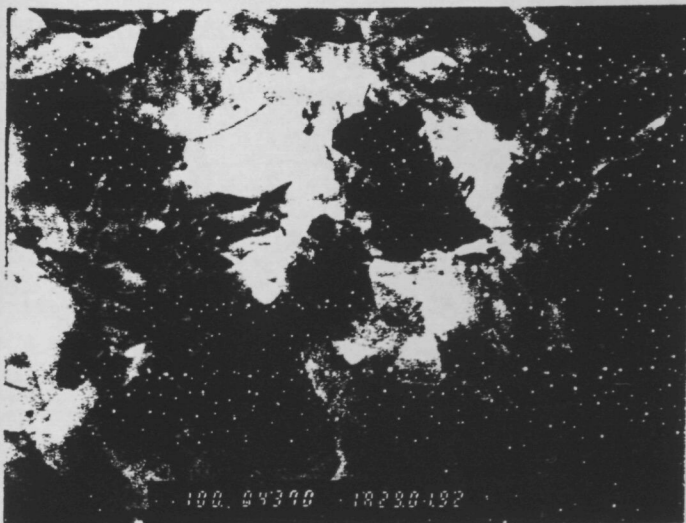
Fig. 11 Tamaños de grano a partir del ensanchamiento de las líneas de difracción: línea continua: sin dopar, discontinua: boro  $5 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ .



a



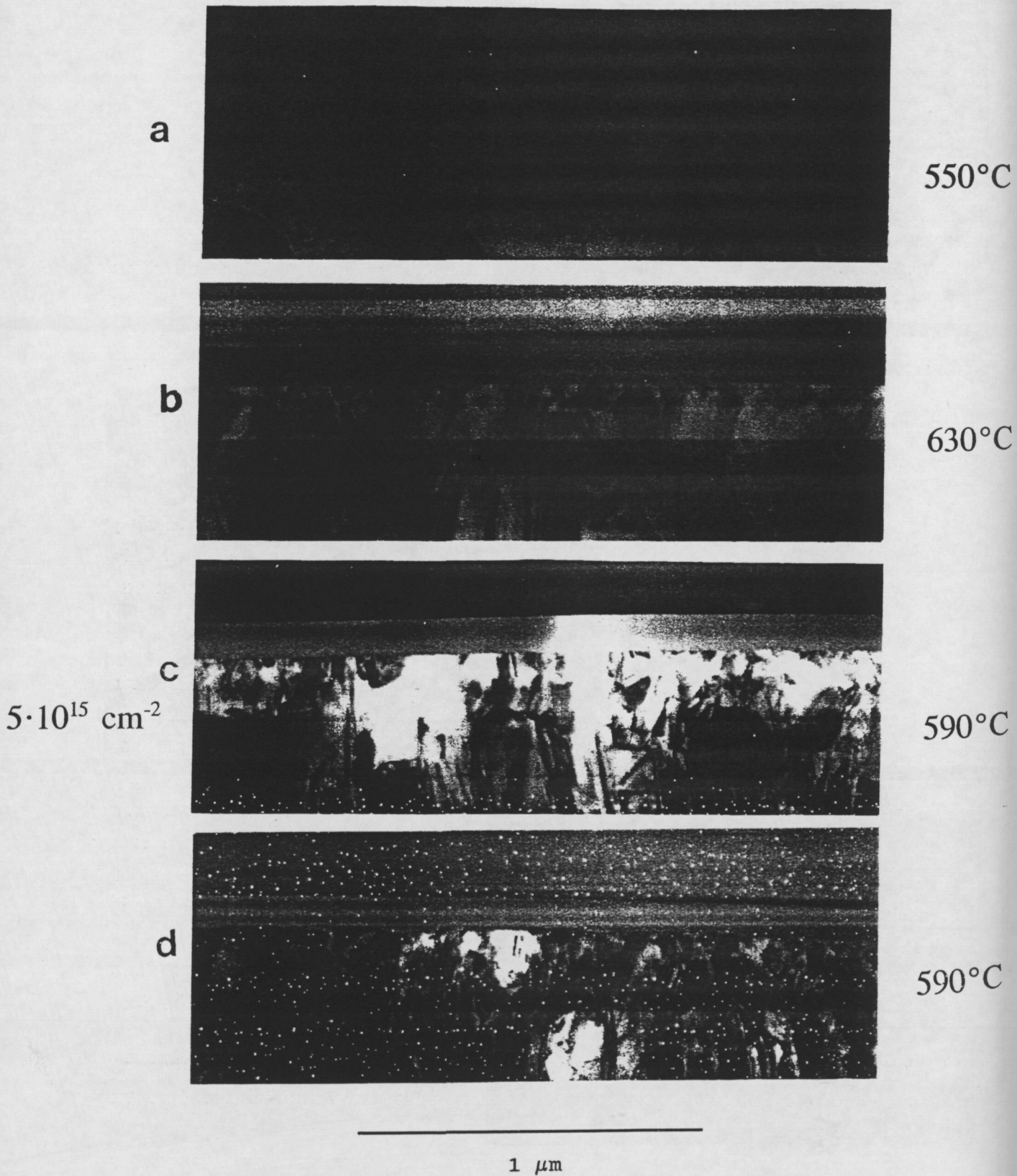
b



c

0.5 μm

Fig. 12 Imágenes TEM de la estructura de las muestras dopadas con boro en vista planar: a)  $T_d = 550^\circ\text{C}$ , b)  $T_d = 590^\circ\text{C}$ , c)  $T_d = 630^\circ\text{C}$ . Recocido a  $1100^\circ\text{C}$ .



**Fig. 13** Imágenes TEM de la estructura de las muestras en sección transversal: recocido a 1100°C. Depósito: a) 550°C, b) 630°C, c) 590°C, d) 590°C. a,b,c dopadas con boro, d sin dopar.

sino al daño introducido en el proceso de implantación. La capa se amorfiza parcialmente y ello conlleva una reducción en la densidad de cristalitos. La recristalización posterior durante el recocido los granos crecen a expensas del material amorfo o simplemente dañado y ello les permite alcanzar mayores tamaños de grano en la dirección de la oblea.

En las fotos TEM en sección transversal también puede observarse que las muestras depositadas a 590°C presentan una estructura muy columnar mientras en cambio en las capas depositadas a 550°C se observan granos equiaxiados, situándose las muestras depositadas a 630°C en un caso intermedio. La estructura columnar aparece normalmente en capas texturadas en la dirección {110}. Ello concuerda plenamente con los resultados obtenidos referentes a las orientaciones preferenciales que muestran como las capas obtenidas a la temperatura intermedia son {110} para todas las temperaturas de recocido, mientras las otras capas presentan texturas {100} y {422} (630°C y 550°C respectivamente).

### *III.3.3.3 Análisis estructural mediante espectroscopía Raman*

En la figura 14 se muestra los espectros Raman obtenidos en muestras depositadas a 590°C, no-dopadas en función de la temperatura de recocido. Los espectros consisten básicamente en un pico agudo correspondiente a la transición  $k \approx 0$  con una contribución más o menos pronunciada en la zona de bajas frecuencias próxima al pico.

En las muestras de silicio policristalino sin dopar, tras el recocido el pico parece estar compuesto por dos bandas. La más intensa y aguda aparece ligeramente desplazada hacia frecuencias más bajas y es ligeramente más ancha que la correspondiente al silicio cristalino. Esta banda, cuya intensidad denotaremos por  $I_v$ , corresponde a los modos volúmicos del interior del grano. La segunda banda constituyente del espectro aparece a frecuencias inferiores a la habitual para el silicio monocristalino pero a frecuencias marcadamente superiores a las del pico típico del silicio amorfo. Esta banda tiene su origen en los modos vibracionales superficiales de los granos de silicio (intensidad  $I_s$ )<sup>57</sup>. En la figura 14 puede comprobarse como la razón de intensidades  $I_s/I_v$  decrece al aumentar la temperatura de recocido. Bajo la interpretación anterior este fenómeno denotaría un aumento del tamaño promedio. Al aumentar éste la razón entre volumen y superficie de los granos disminuye.

Por otro lado, la componente volúmica del pico aparece ensanchada y desplazada respecto al material monocristalino. El origen de estas variaciones puede residir en varios fenómenos: granos con dimensiones inferiores a 300 Å<sup>58</sup>, una distribución de esfuerzos mecánicos o la presencia de una gran cantidad de defectos cristalinos en el interior de éste. Dados los valores hallados del ensanchamiento a media altura el origen no puede residir en esfuerzos mecánicos residuales, pues ello implicaría valores muy superiores a los normalmente hallados en capas de polisilicio. Por otro lado, tanto a partir de las imágenes TEM, como a partir de



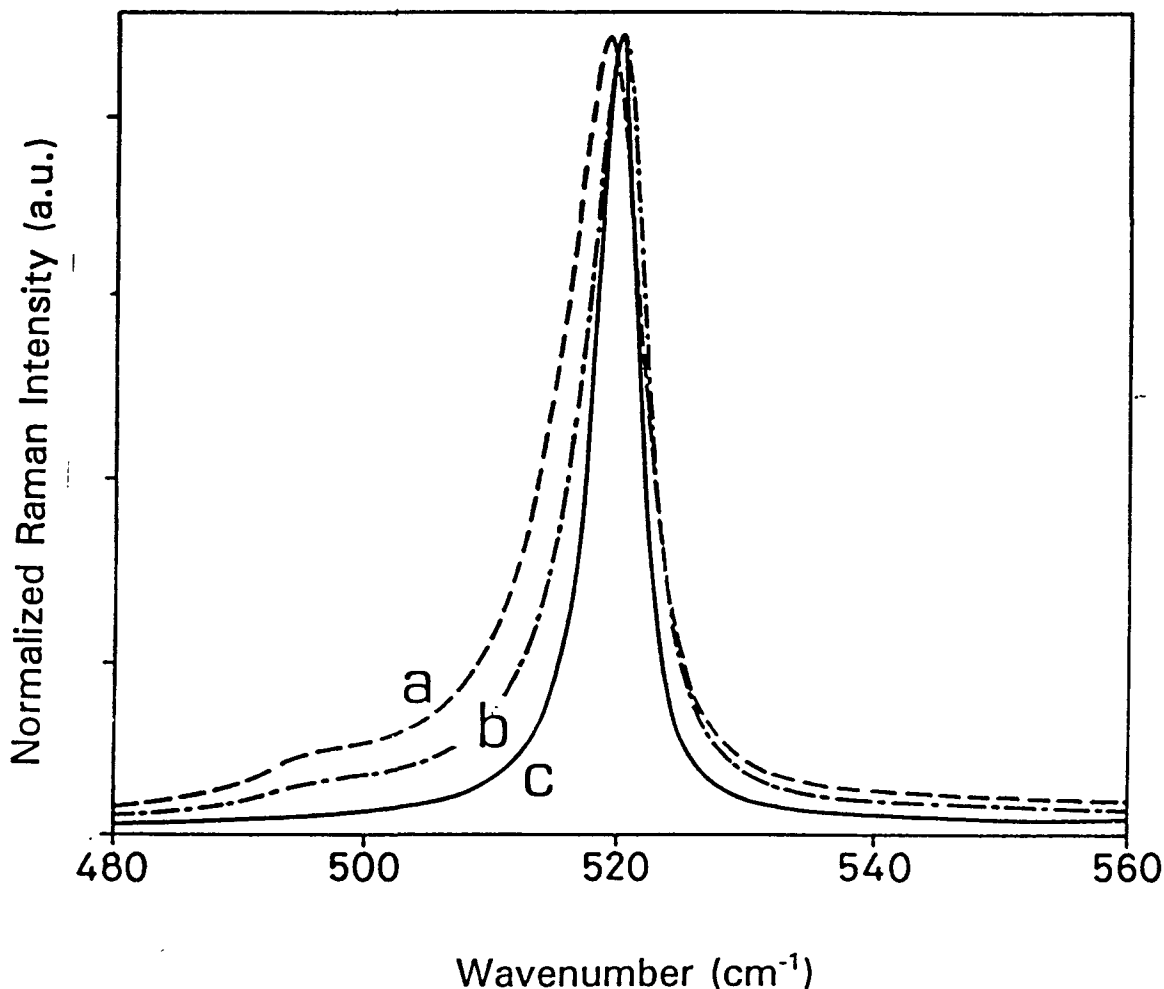


Fig. 14 Evolución del espectro RAMAN en función de la temperatura de recocido para muestras sin dopar depositadas a 590°C: a) 800°C, b) 950°C, c) 1100°C.

la medida de los granos mediante difracción de rayos X podemos concluir que el la dimensión media de los cristalitos es superior a 300 Å, valor normalmente considerado como umbral para que este efecto se manifieste en la anchura a media altura del pico Raman. Resta pues como única hipótesis válida la existencia de granos de silicio con una gran cantidad de defectos que van desapareciendo a medida que se incrementa la temperatura de recocido.

En las muestras implantadas el pico de Raman es asimétrico (figura 15) y presenta una anchura a media altura muy superior a las normalmente observadas en las muestras sin dopar. Además este valor aumenta con la temperatura de recocido. Diferentes estudios<sup>59,60,61</sup> han mostrado que la presencia de portadores libres lleva a una disminución de la energía del pico y a un aumento de la anchura de la línea. La explicación teórica de este fenómeno en silicio tipo p se basa en la existencia de un continuo de excitaciones electrónicas producidas por transiciones inter-banda, cuya energía se solapa con la del fonón. La interacción entre espectros continuos y discretos fue estudiada por Fano<sup>62</sup>, y es conocido que produce líneas asimétricas como las observadas. Este fenómeno se hace patente a partir de concentraciones del orden de  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . Para las muestras dopadas la revelación de información estructural a partir del espectro Raman se complica por la presencia de esta interacción entre la banda de valencia y el espectro fonónico.

#### III.4. Conductividad eléctrica en el silicio policristalino LPCVD dopado con boro

Las propiedades eléctricas del silicio policristalino son ampliamente utilizadas en tecnología de circuitos integrados y en particular son fundamentales en el diseño de sensores piezorresistivos o sensores de temperatura basados en termistores. Aunque existen en la

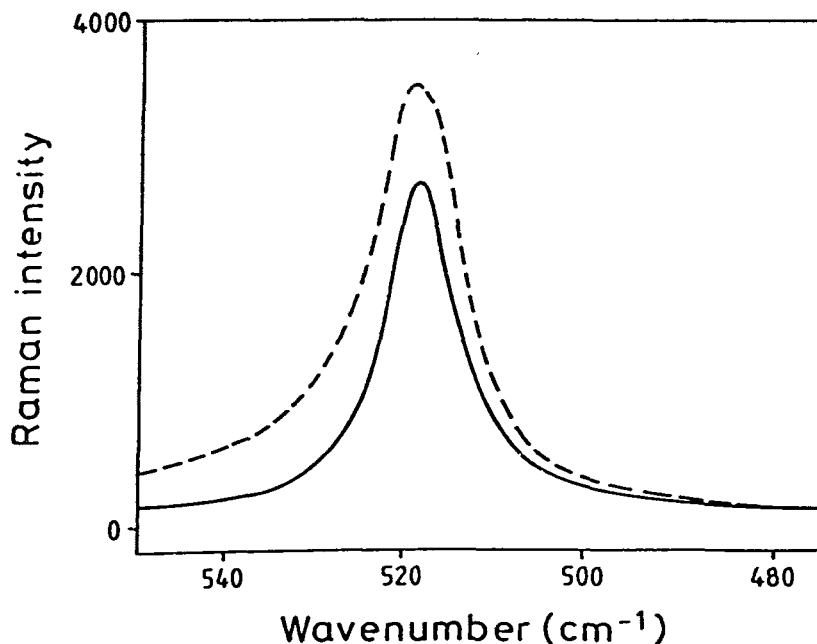


Fig. 15 Espectros RAMAN para muestras depositadas a 590°C y dopadas con boro. Recocido: a) 800°C, b) 1100°C.

literatura estudios sobre este tema, normalmente se basan en capas de polisilicio obtenidas bajo condiciones estándar (para la mayoría de laboratorios temperaturas entre 620 y 640°C y presiones parciales de silano entre 300 y 500 mtorrs). Para estas condiciones el silicio se deposita en forma policristalina y normalmente presenta una textura  $\langle 110 \rangle$ . Sin embargo, es usual en la tecnología de sensores depositar este material en otras condiciones con objeto de maximizar o minimizar otros parámetros como factores de gauge o esfuerzos residuales. La inexistencia de estudios sistemáticos sobre la influencia de las condiciones de depósito en las propiedades eléctricas justifica una exploración previa.

### III.4.1 Teoría de la conducción eléctrica en silicio policristalino

A bajas concentraciones de impurezas, el silicio policristalino se caracteriza por una resistividad mucho mayor que la del silicio monocristalino, con una baja sensibilidad a cambios en la concentración de átomos dopantes. A concentraciones medias, la resistividad cae drásticamente ante pequeños aumentos de la concentración (figura 16). En capas altamente dopadas el valor de la resistividad se aproxima al del silicio monocristalino, aunque siempre permanece algo mayor.

El silicio policristalino se modela generalmente<sup>63</sup> como formado por pequeños cristalitos. La región limítrofe entre unos y otros se denomina frontera de grano. Si bien dentro de cada cristalito los átomos forman una red periódica las fronteras de grano están formadas por átomos en una red desordenada con una gran densidad de defectos y enlaces no-saturados. Todo ello es el origen de estados trampa, y lugares idóneos para la segregación de impurezas.

Para calcular la conductividad eléctrica del polisilicio es necesario conocer la concentración de portadores libres que participan en la conducción. Dadas las consideraciones anteriores hay que tener en cuenta dos efectos:

- a) Disminución de la concentración de dopantes activos debido a la segregación de átomos de impureza en las fronteras de grano.
- b) Atrapamiento de portadores en los niveles energéticos situados en la banda prohibida debidos a las fronteras de grano.

Si bien la segregación es más importante para átomos dopantes de tipo n (Fósforo, Arsénico) que de tipo p (Boro), el atrapamiento de carga en las fronteras de grano sucede en similar grado para polisilicio de ambas polaridades.

La carga atrapada en las fronteras de grano se compensa por zonas de depleción de carga

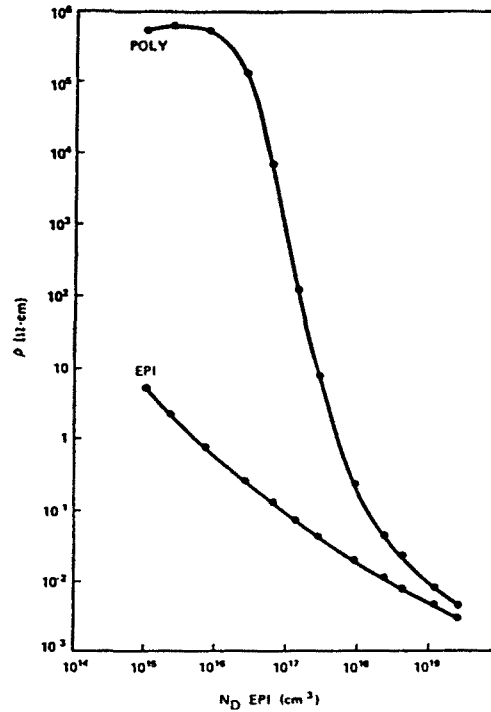


Fig. 16 Comparación entre la resistividad del polisilicio y la del silicio cristalino en función del nivel de dopaje (ref. 63).

opuesta. Esta distribución de carga induce curvatura en las bandas de energía y, por lo tanto, aparecen barreras de potencial que se oponen a la conducción. La altura de la barrera de potencial es:

$$V_B = \frac{eN}{2e} x_d^2 \quad (8)$$

siendo  $N$  la concentración de dopante en el interior del grano y  $x_d$  la anchura de la zona de carga espacial (ZCE).

A bajas concentraciones de impurezas el número total de portadores libres es menor que el número de trampas en la interfaz entre granos. Por ello, la mayoría de portadores libres quedan atrapados y no participan en la conducción. En este caso la ZCE se extiende a lo largo de todo el grano. Si  $L$  es el tamaño de grano, la altura de la barrera de potencial aumenta linealmente con la concentración de dopante:

$$V_B = \frac{eN}{2e} \left(\frac{L}{2}\right)^2 \quad (9)$$

Cuando aumenta la concentración de impurezas sustitucionales llega un momento en el que todas las trampas están llenas. Un ulterior aumento de la concentración provoca la aparición de zonas neutras en el interior de los granos, y la anchura de la ZCE empieza a disminuir. En esta zona la barrera de potencial es inversamente proporcional a la concentración (figura 17):

$$V_B = \frac{eN_T^2}{8\epsilon N} \quad (10)$$

siendo  $N_T$  el número de trampas por unidad de área.

A concentraciones de dopante moderadas, los portadores libres se desplazan de un grano a otro mediante emisión termoiónica por encima de la barrera. En este caso la conductividad presenta un comportamiento activado térmicamente:

$$\sigma = \frac{e^2 n v_c L}{kT} \exp\left(-\frac{eV_B}{kT}\right) \quad (11)$$

siendo  $v_c$  la velocidad térmica y  $n$  la densidad de portadores libres.

Para concentraciones de dopante muy elevadas, la anchura de la zona de carga espacial disminuye y permite que los portadores se desplacen por efecto túnel atravesando la barrera de potencial. A partir de ese momento la conductividad deja de estar activada térmicamente y su dependencia con la temperatura pasa a estar marcada por fenómenos de dispersión.

En el marco de esta visión general de la conducción eléctrica en silicio policristalino presentaremos los resultados hallados en nuestro análisis.

### III.4.2 Medida mediante el método de cuatro puntas

La figura 18 muestra de forma simplificada el esquema del sistema de medida por cuatro puntas. Por las dos puntas exteriores se inyecta una corriente eléctrica y se mide la diferencia de potencial que cae en el par interior. En el caso de una capa delgada conductora sobre un material aislante (como ocurre en nuestro caso) la expresión de la resistividad es<sup>64</sup>:

$$\rho = \frac{V}{I} \pi w \ln 2 \quad (12)$$

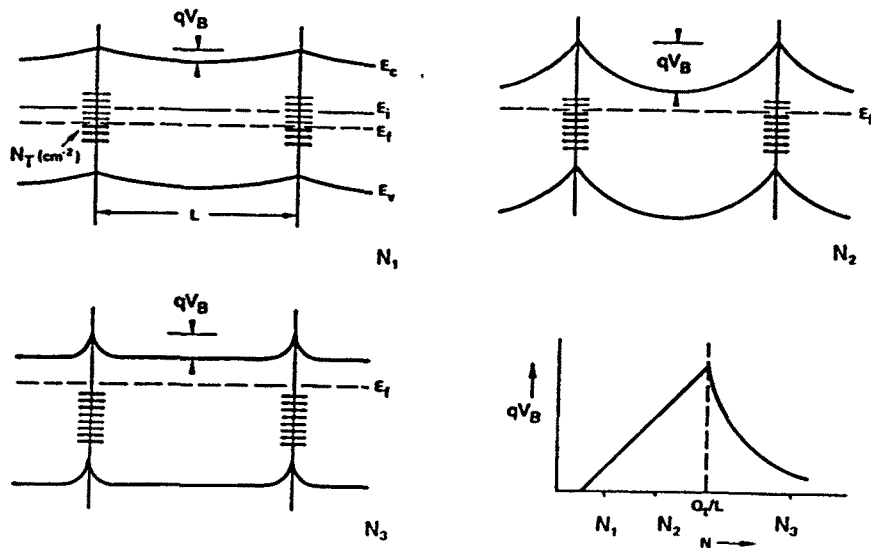


Fig. 17 Representación esquemática del efecto del nivel de dopaje en la altura de la barrera entre granos.

siendo  $w$  el espesor de la capa. El sistema experimental diseñado permitió realizar medidas de resistividad entre temperatura ambiente y  $200^\circ\text{C}$ .

### III.4.3 Resultados experimentales

En la figura 19 puede observarse la evolución de la resistividad frente al inverso de la temperatura para muestras con diferentes dosis de implantación. Como puede observarse la conductividad está activada térmicamente. A medida que aumenta la dosis, la energía de activación disminuye (figura 20). Según la teoría presentada anteriormente esta evolución nos

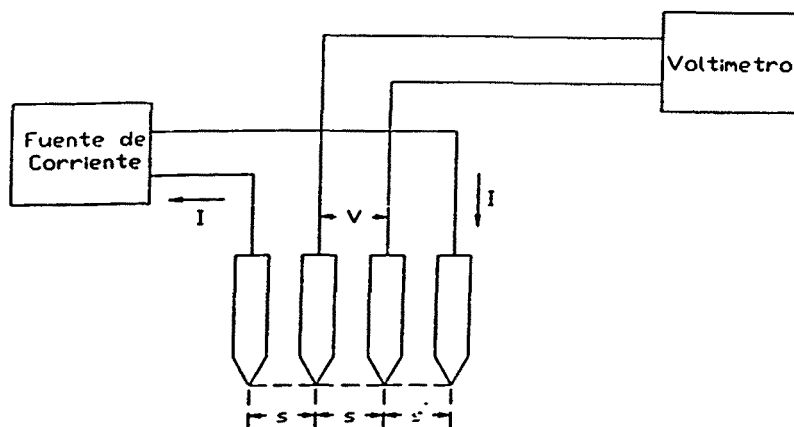


Fig. 18 Medida de la resistividad por el método de las cuatro puntas.

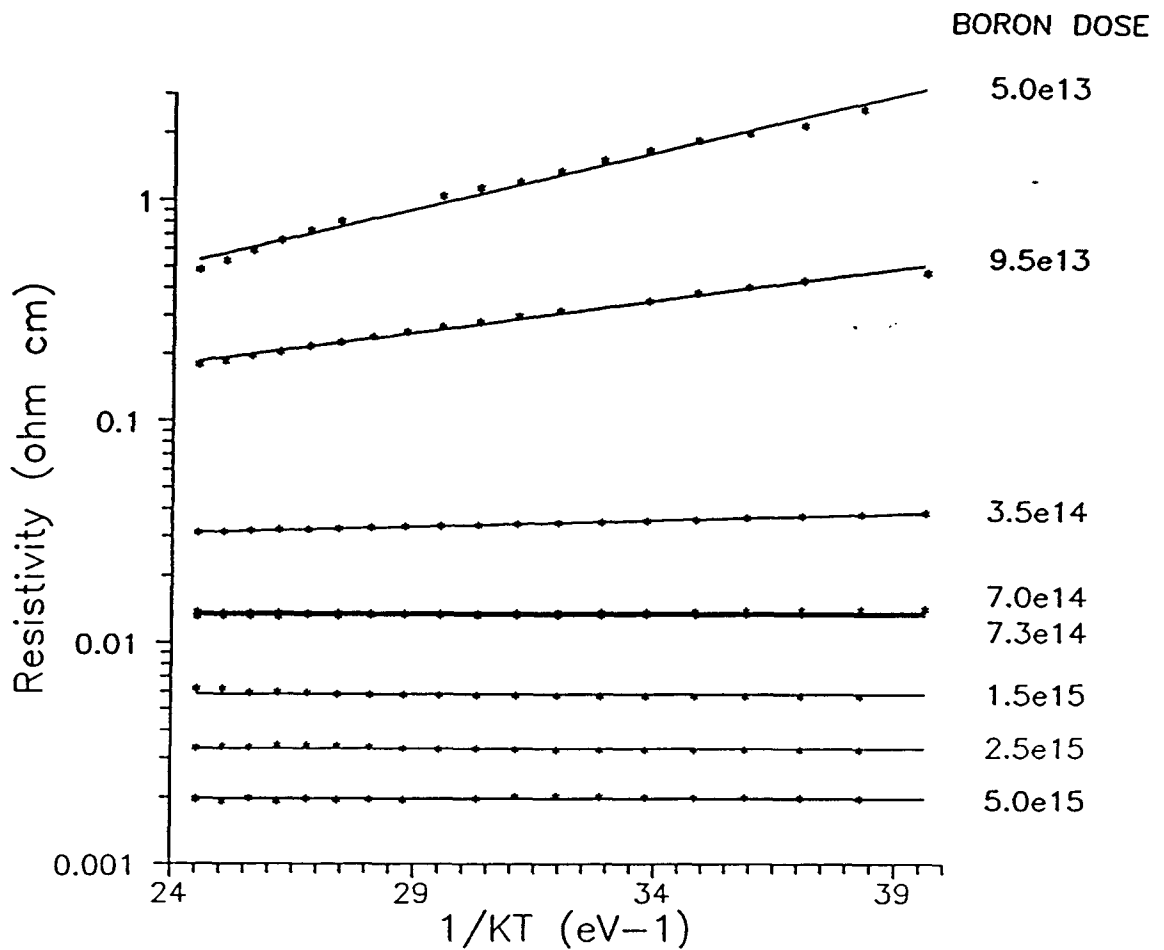


Fig. 19 Variación en la dependencia de la resistividad con la temperatura al cambiar la dosis de implantación. Depósito a 550°C y recocido a 1100°C.

indica que estamos en el rango de concentraciones para el cual ya existen zonas neutras en el interior de los granos por estar ocupadas las trampas existentes en las fronteras de grano. Para dosis suficientemente altas, la resistividad aumenta con la temperatura si bien con un coeficiente térmico muy pequeño<sup>65</sup>.

La evolución de la resistividad con la temperatura de recocido se observa en la figura 21. La disminución observada tiene su origen en dos fenómenos distintos: la activación eléctrica de los átomos de boro implantados y el aumento del tamaño de grano. Este último fenómeno conlleva una reducción en el número de fronteras de grano que se oponen a la conducción.

Quizás el resultado más interesante se muestra en la figura 22. En ella se presenta la evolución de la resistividad con la temperatura para diferentes temperaturas de depósito. Aquellas muestras con una menor resistividad son las depositadas en fase amorfa a 550°C.

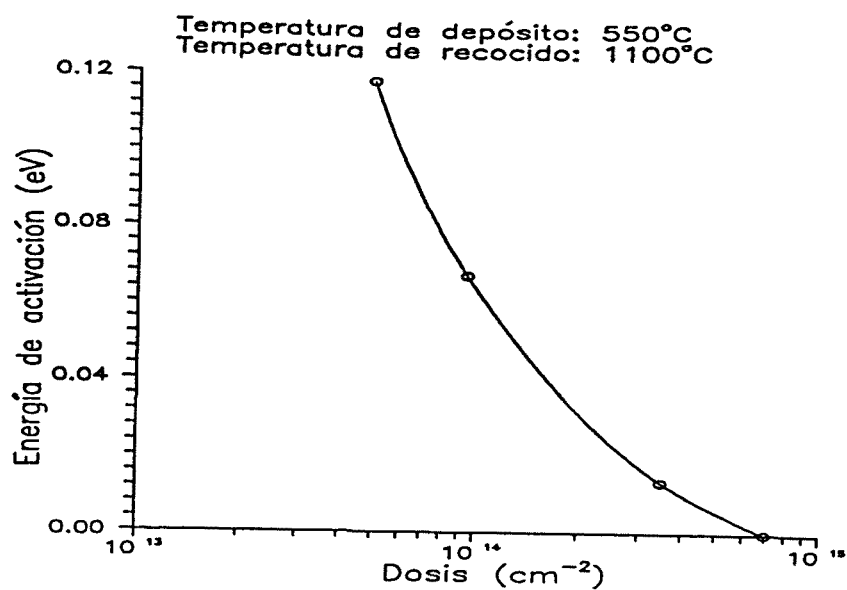


Fig. 20 Variación de la energía de activación con la dosis a partir de los resultados de la figura 20.

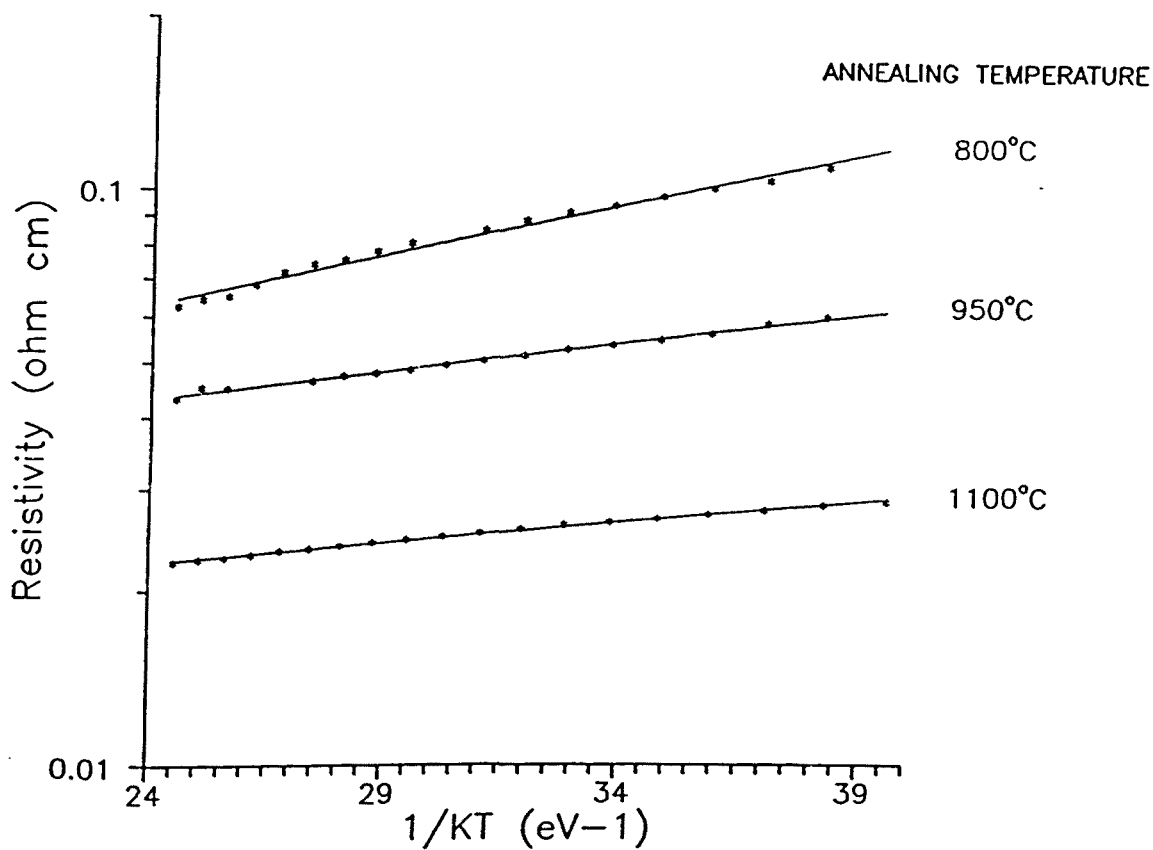


Fig. 21 Disminución de la resistividad al aumentar la temperatura de recocido. Depósito: 590°C, Dosis: 5.10<sup>14</sup> cm<sup>-2</sup>.



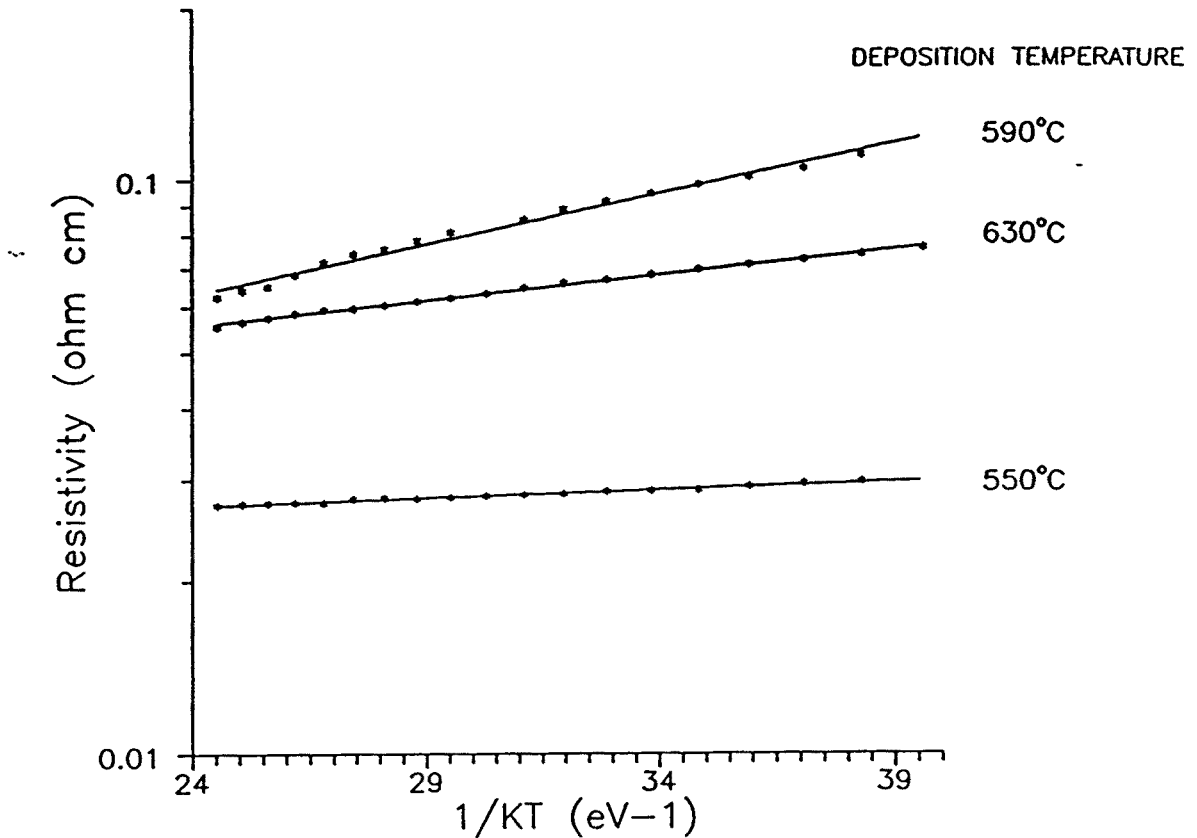


Fig. 22 Dependencia de la resistividad con la temperatura de depósito. Temperatura de recocido: 800°C, dosis:  $5 \cdot 10^{14}$  cm<sup>-2</sup>.

Las muestras obtenidas a temperatura más alta 630°C presentan una mayor resistividad. Sería lógico esperar que las muestras depositadas a 590°C presentaran un valor entre ambas. Sin embargo, lo que se obtiene es que son las más resistivas. Este fenómeno se repite para todas las dosis de implantación y temperaturas de recocido<sup>66</sup>.

Este comportamiento tiene un origen estructural. El análisis morfológico llevado a cabo y presentado anteriormente ha revelado que las capas depositadas entre 580°C y 600°C con una presión parcial de silano de 70 mtorr están fuertemente texturadas en la dirección {110} y que presentan una estructura columnar. Por ello, el número de fronteras de grano que deben atravesar los portadores libres en su recorrido paralelo a la superficie es mucho mayor que si las capas presentan otro tipo de estructura.

## III.5. Esfuerzos residuales

### III.5.1 Técnicas para la medida de esfuerzos en capas delgadas

Dividiremos las técnicas experimentales para la medida de tensiones en capas delgadas sobre substratos en dos categorías:

- i) Aquellas que revelan el cambio de una magnitud microscópica: por ejemplo, el parámetro de malla medido mediante rayos X, o la alteración de los potenciales de deformación fonónicos detectados a través de la modificación del espectro Raman.
- ii) Aquellas basadas en alteraciones mecánicas causadas por el esfuerzo de la capa. Este grupo puede dividirse a su vez en dos subgrupos:
  - ii.a) El esfuerzo presente en la capa puede deducirse a través de la curvatura introducida en el substrato.
  - ii.b) Estructuras micromecánicas que sufren deformaciones en presencia de esfuerzos residuales.

#### III.5.1.1 Medidas basadas en la curvatura inducida en el substrato

La teoría elástica de los esfuerzos mecánicos en un sistema multicapa se encuentra detallada con claridad y rigor en el trabajo de Townsend et al.<sup>67</sup>. Las principales conclusiones para el caso de varias capas delgadas depositadas sobre un substrato más grueso son:

- a) La dimensión planar del substrato no se ve alterada por la presencia de las capas.
- b) La curvatura final es la superposición lineal de los efectos de flexión introducidos por cada capa que interactúa independientemente sobre el substrato.

$$\frac{1}{R} = \sum_i \frac{1}{R_i} = \sum_i 6 \frac{E_i (1-\nu_i)}{E_s (1-\nu_s)} \frac{t_i}{t_s^2} \ln \left( \frac{d_s}{d_i} \right) \quad (13)$$

Siendo  $d_s$  y  $d_i$  las dimensiones del substrato y de cada una de las capas en ausencia de ligaduras externas,  $t_s$  y  $t_i$  los espesores del substrato y de cada una de las capas. El esfuerzo final en cada una de las capas viene expresado por:

$$\sigma_i = \frac{E_i t_s^2}{6 (1-\nu_s) t_i R_i} \quad (14)$$

Esta expresión es simplemente la obtenida por Stoney<sup>68</sup> para un sistema de dos capas con la salvedad que el radio de curvatura no es el total del sistema, sino simplemente el inducido por la presencia de la capa  $i$ .

En el análisis elástico de la curvatura de un sistema multicapa se establecen ciertos requerimientos que condicionan la validez de los valores obtenidos:

- 1- El material no ha sufrido deformaciones plásticas durante el proceso.
- 2- No se considera la existencia de inhomogeneidades en la dirección perpendicular a la capa.
- 3- Pequeñas deflexiones.

La importancia de este último supuesto ha sido evaluada por Fahnline<sup>69</sup>. En presencia de grandes curvaturas el principio de superposición deja de ser válido y la teoría predice que el estado de curvatura esférica es inestable y deriva en dos posibles estados de curvatura elíptica. La existencia de radios de curvatura distintos según la dirección de medida es un resultado habitual en el análisis del esfuerzo en capas delgadas<sup>70</sup>.

### III.5.1.2. Determinación de la deformación unitaria mediante Rayos X

La difracción de rayos X nos da información sobre el espaciado interatómico para cada familia de planos presentes en el difractograma. Ello nos permite acceder al valor de la deformación unitaria en la dirección perpendicular al plano de la capa.

Es imprescindible en la determinación del espaciado interatómico una localización muy precisa de las posiciones de los picos del difractograma. Por ello se procede a ajustar el pico a una función analítica. El método más común consiste en ajustar aquellos puntos experimentales con una intensidad superior al 85% de la intensidad máxima por una parábola. Un ajuste más preciso, aunque también más laborioso, lleva a utilizar formas funcionales que describan todo el pico. En la literatura se citan varias, entre las que cabe destacar lorentzianas modificadas y funciones Pearson VII<sup>71</sup>. A nivel teórico, y como hemos mencionado anteriormente, se considera que la forma del pico está muy bien descrita por una función de Voigt. Una buena aproximación analítica es la llamada función de Pseudo-Voigt<sup>72</sup>:

$$I = I_0 \left[ \eta \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{\sigma_g^2}\right) + \frac{1-\eta}{1+\left(\frac{x-x_0}{\sigma_l}\right)^2} \right] \quad (15)$$

Para proceder al ajuste es importante que los picos sean lo más intensos posible para disminuir el ruido estadístico, y se encuentren situados a ángulos grandes. Para picos a ángulos inferiores a 90° en los cuales no sea posible separar el doblete K $\alpha$  es preferible utilizar una longitud de onda pesada por la intensidad relativa de cada línea, más que

proceder a la eliminación de la línea  $K\alpha_2$ .

$$\langle \lambda \rangle = \frac{2}{3} \lambda_1 + \frac{1}{3} \lambda_2 \quad (16)$$

La determinación del esfuerzo mediante rayos X puede hacerse mediante la técnica conocida como SSPP<sup>73</sup>. Ésta requiere una configuración especial del goniómetro que permite un nuevo grado de libertad: el ángulo  $\psi$  (figura 23). En ella se representa el espaciado interatómico frente a  $\sin^2\psi$ . El análisis teórico predice una variación lineal con una pendiente proporcional al esfuerzo en la capa.

Un método alternativo más sencillo, aunque también más sensible a errores sistemáticos, consiste simplemente en medir el desplazamiento de los picos de difracción respecto a la posición de un silicio en polvo libre de tensiones (por ejemplo el estándar NBS). La dificultad de este método radica en que se mide la deformación en la dirección perpendicular al plano de la capa que es intrínsecamente menor, provocando desplazamientos de los picos muy pequeños.

### III.5.2 Resultados experimentales y discusión

Los resultados que se presentan a continuación están basados en la comparación entre el desplazamiento de la línea {220} del difractograma de las muestras en relación a la posición del polvo de silicio estándar NBS-640 y medidas de esfuerzos de carácter macroscópico tales como las basadas en la curvatura inducida en la oblea o bien las basadas en el pandeo de estructuras micromecánicas. La extracción de resultados a partir de los espectros Raman<sup>74</sup> es más conflictiva pues diversos efectos: como tamaño de grano, perfección cristalina<sup>75,76</sup> o nivel de dopaje<sup>77,78</sup>, pueden contribuir al desplazamiento de la posición del pico, siendo difícil discriminar en nuestras muestras en particular cual de ellos es el responsable definitivo.

En la figura 24, se comparan los resultados obtenidos en capas sin implantar con aquellas obtenidas en las capas dopadas con boro con una dosis de  $5 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ . En estas últimas el comportamiento ha cambiado de manera importante respecto al observado en las muestras sin implantar. En primer lugar, con el dopado la evolución con la temperatura de recocido es más regular, evolucionando todas las muestras hacia valores menores a medida que al temperatura de recocido crece. En segundo lugar, las diferencias en valor absoluto entre las diferentes muestras se han visto reducidas considerablemente. Las muestras según estos resultados se encuentran en tensión biaxial (en la dirección perpendicular al plano de la capa las capas están en compresión). Una evolución muy similar, tanto en valores como en

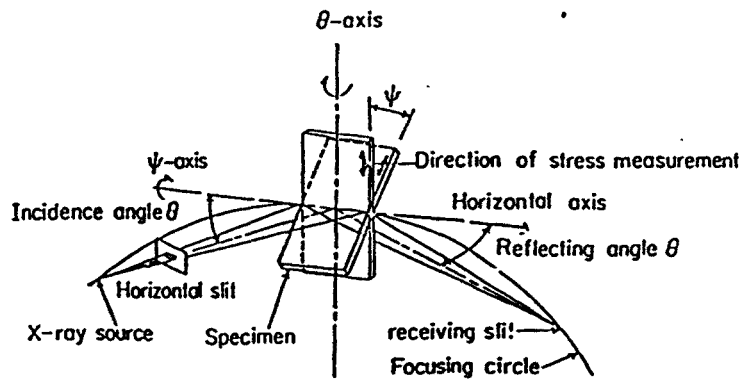


Fig. 23 Geometría de un goniómetro psi para medidas de esfuerzos residuales.

tendencia ha sido observada por Hendricks et al.<sup>79</sup>. aunque estos autores sólo presentan resultados para una temperatura de depósito: 625°C. Por otro lado Guckel et al.<sup>80</sup> hallan que si bien capas depositadas en estado amorfo estaban inicialmente en compresión tras un recocido el estado de esfuerzos cambia de signo y pasa a ser de tensión. Este cambio

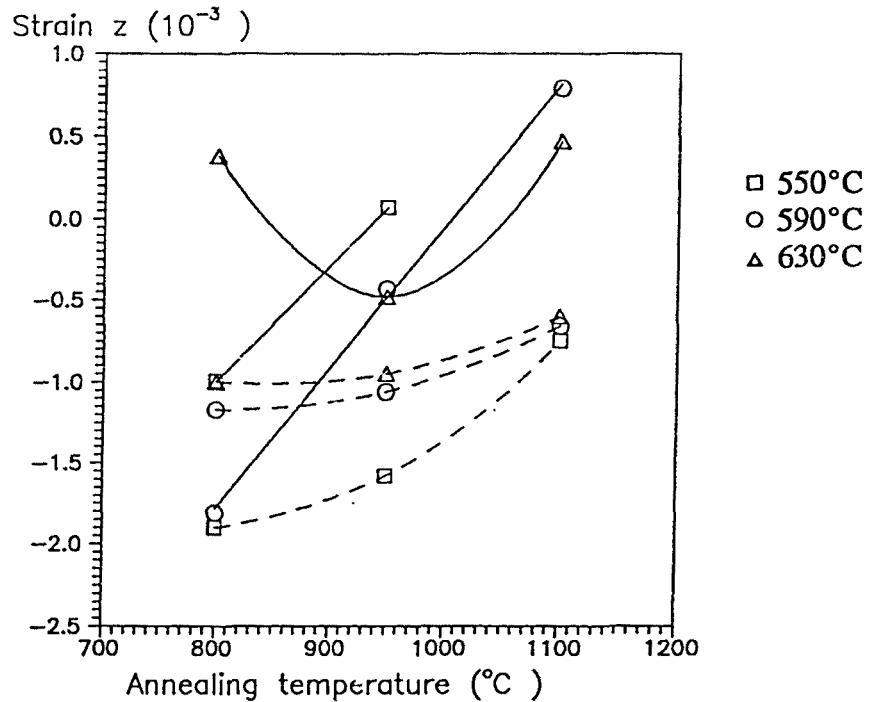


Fig. 24 Deformación residual en función de la temperatura de recocido. línea contnua: sin implantar., línea discontinua: implantadas con boro:  $5 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ .

inducido por la cristalización de la capa puede explicarse si la densidad del silicio amorfo es inferior a la del silicio cristalino lo cual es plausible dado el alto índice de empaquetamiento para las estructuras FCC.

También se examinó la evolución del esfuerzo residual en las capas de polisilicio depositadas a  $630^{\circ}\text{C}$  sobre óxido LPCVD (figura 25). La evolución es similar a la obtenida previamente en las capas depositadas sobre óxido térmico a la misma temperatura. Sin embargo, hay un desplazamiento hacia valores de deformación tensiles. Este efecto puede estar relacionado con las transformaciones estructurales que sufre el óxido LPCVD al ser sometido a tratamientos térmicos a temperaturas superiores a la de depósito<sup>81</sup>.

En contraste, a partir de medidas de curvatura<sup>82</sup> en muestras sin dopar la evolución observada es diferente. Aunque el nivel de esfuerzo también disminuye al aumentar la temperatura de recocido, el signo es el opuesto. Las capas se hallan en compresión. Similares resultados (figura 26), al menos, en cuanto a signo y tendencia se han hallado utilizando los motivos de test micromecánicos<sup>83</sup>. Desacuerdos entre resultados mecánicos y técnicas

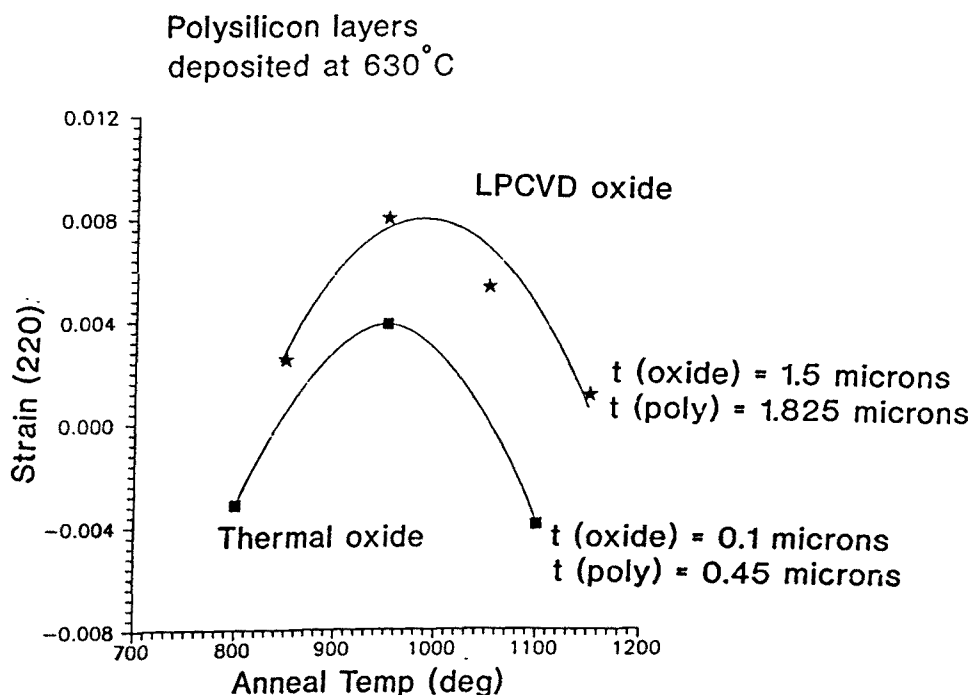


Fig. 25 Comparación entre el esfuerzo residual en el polisilicio cuando está depositado sobre óxido térmico (○) o bien sobre óxido LPCVD (■).

- (1)  $T_D = 580^\circ\text{C}$ , sin dopar  
 (2)  $T_D = 605^\circ\text{C}$ , sin dopar  
 (3)  $T_D = 630^\circ\text{C}$ , sin dopar  
 (4)  $T_D = 580^\circ\text{C}$ , boro  $10^{15}\text{ cm}^{-2}$   
 (5)  $T_D = 630^\circ\text{C}$ , boro  $10^{15}\text{ cm}^{-2}$

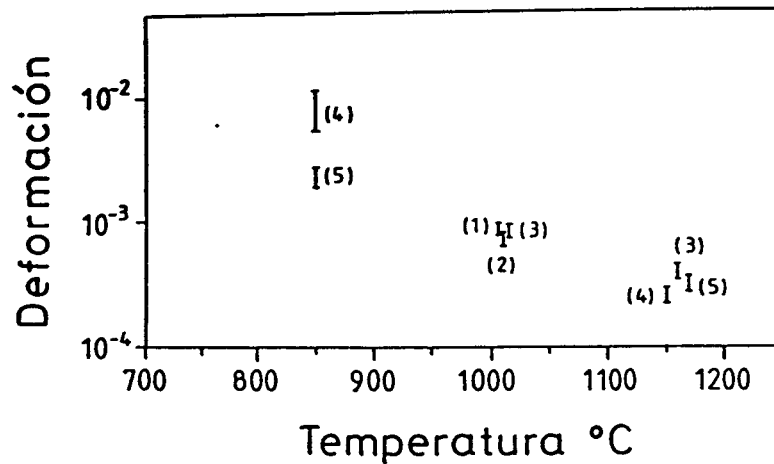


Fig. 26 Deformación residual en función de la temperatura de recocido a partir de estructuras micromecánicas de test (ref 82).

microscópicas han sido obtenidos previamente en materiales policristalinos. Mediante XRD se obtiene información sobre el esfuerzo residual en el interior del grano, y mediante métodos mecánicos macroscópicos, bien sea a partir de medidas de curvatura o de motivos de test, se obtiene un resultado más general que involucra también el comportamiento de las fronteras de grano<sup>84</sup>. Sin embargo, ambos resultados podrían reconciliarse según los resultados teóricos de Krulevitch et al.<sup>85</sup>. Estos autores argumentan que la cristalización de un grano en una matriz amorfa debe dar lugar a un estado de tensiones triaxial que será tensivo o compresivo dependiendo de la razón de densidades. Desde este punto de vista, a partir de esfuerzos compresivos en la dirección  $z$ , perpendicular al plano de la capa, no puede inferirse directamente que la capa se encuentre en tensión, sino que podría hallarse igualmente en compresión. No obstante, no es evidente que este argumento pueda extenderse a las capas depositadas en forma policristalina a temperaturas de depósito más altas.

### III.6. Sumario

El silicio policristalino, material básico en el desarrollo de MEMS (Micro-Electro-Mechanical Systems), ha sido estudiado desde un punto de vista estructural y eléctrico. La utilización de condiciones de depósito no-estándar ha sido analizada: la temperatura de depósito y la presión parcial de silano se han revelado como parámetros fundamentales en la estructura final de la capa. Se ha determinado la evolución de las orientaciones

preferenciales con los distintos parámetros tecnológicos mediante la difracción de rayos X. Se ha observado como las muestras depositadas entre 580°C y 600°C, a bajas presiones de silano presentan una fuerte textura {110}. Las observaciones mediante microscopía electrónica de transmisión (TEM) han mostrado la correlación entre esta textura y la estructura columnar. Estas muestras presentan una resistividad más elevada que las depositadas en otras condiciones. El origen de este comportamiento está directamente relacionado con la estructura columnar pues los portadores libres deben atravesar más fronteras de grano que suponen barreras de potencial que se oponen a la conducción. En cambio muestras depositadas a baja temperatura en fase amorfa presentan tras un recocido posterior una estructura formada por granos equiaxiales y de mayor tamaño.

La implantación de boro no induce cambios estructurales muy significativos. La textura apenas se altera como consecuencia de la no-total amorfización de la capa y el tamaño de grano, aunque experimenta un ligero aumento en el plano de la oblea, tampoco sufre cambios drásticos. En cambio, provoca que el estado de esfuerzos residuales se homogenice y dependa en menor medida de las condiciones de depósito, presentando además una evolución más regular.

El análisis eléctrico ha mostrado que es posible controlar el coeficiente térmico de las resistencias a través del nivel de dopaje. A niveles moderados la resistencia está activada térmicamente y disminuye con la temperatura. En cambio para niveles más altos la resistividad aumenta con la temperatura aunque la dependencia es más leve.

El análisis del estado de esfuerzos residual ha mostrado que el nivel de esfuerzos presentes en una capa no solo dependen de las condiciones tecnológicas de la misma sino que pueden verse afectados por otras capas presentes en la estructura.



### III.7. Referencias

---

1. S.M. Hu  
*Film-edge-induced stress in silicon substrates*  
Appl. Phys. Lett. **32**, 5-7, (1978).
2. M. Mehregany, M.G. Allen, S.D. Senturia  
*The Use of Micromachined Structures for the Measurement of Mechanical Properties and Adhesion of Thin Films*  
IEEE Solid State Sensor and Actuator Workshop. Hilton Head Island (1986).
3. R.T. Howe  
*Surface Micromachining for Microsensors and Microactuators*  
J. Vac. Sci. Technol. **B6** 1809-1813, (1988).
4. H. Guckel, D.W. Burns  
*Fabrication Techniques for Integrated Sensor Microstructures*  
IEEE Int. Electron Devices Meeting, 176-179, (1986).
5. L. Fan, Y. Tai, R.S. Muller  
*Integrated Movable Micromechanical Structures for Sensors and Actuators*  
IEEE Trans. Electron Devices **ED-35**, 724-730 (1988).
6. M. Orpana, A.O.K. Korhonen  
*Control of Residual Stress of Polysilicon Thin Films by Heavy Doping in Surface Micromachining*  
TRANSDUCERS'91, 957-960, (1991).
7. R.T. Howe, R.S. Muller  
*Polycrystalline Silicon Micromechanical Beams*  
Extended Abstracts Electrochemical Society Meeting, 184-185 Montreal-(1982).
8. S. Sugiyama, T. Suzuki, K. Kawahata, K. Shimaoka, M. Takigawa, I. Igarashi  
*Micro-Diaphragm Pressure Sensor*  
IEEE Int. Electron Devices Meeting 184-187, (1986).
9. S. Sugiyama, I. Igarashi  
*Micromachining and Its Application for Pressure Sensors*  
Extended Abstracts of the 21st Conference on Solid-State Devices and Materials, Tokyo (1989), 189-192.
10. S. Chang, W. Eaton, J. Fulmer, C. González, B. Underwood, J. Wang, R.L. Smith  
*Micromechanical Structures in Amorphous Silicon*  
TRANSDUCERS'91, 751-754 (1991).
11. M.A. Schmidt, R.T. Howe, S.D. Senturia, J.H. Haritonidis  
*Surface Micromachining of Polyimide/metal Composites for a Shear Stress Sensor*  
IEEE Micro Robots and Teleoperators (1987).

12. F. Maseeh, M.A. Schmidt, M.G. Allen, S.D. Senturia  
*Calibrated Measurements of Elastic Limit, Modulus, and the Residual Stress of Thin Films using Micromachined Suspended Structures*  
Tech. Dig. IEEE Solid-State Sensors and Actuators Workshop, Hilton Head Is. USA, June-1988, pp. 84-87.
13. C. Linder, N.F. De Rooij  
*Investigations of Free-standing Polysilicon Beams in View of their Application as Transducers*  
Sensors and Actuators, A21-A23, 1053-1059, (1990).
14. M. Mehregany, M.G. Allen, S.D. Senturia.  
*The use of micromachined structures for the measurement of mechanical properties and adhesion of thin films*  
Tech. Dig. IEEE Solid-State Sensor and Actuator Workshop, Hilton Head Is. USA, (1986).
15. O. Tabata, K. Kawahata, S. Sugiyama, I. Igarashi  
*Mechanical Property Measurements of Thin Films Using Load-Deflection of Composite Rectangular Membranes*  
Sensors and Actuators, 20, 135-141, (1989).
16. K.E. Crowe, R.L. Smith  
*A New-Technique for Determination of Tensile Stress in Thin Films*  
J. Electrochem. Soc., 136, 1566-1568, (1989).
17. J.A. Schweitz  
*A New and Simple Micromechanical Approach to the Stress-Strain Characterization of Thin Coatings*  
J. Micromech. Microeng. 1, 10-15, (1991).
18. L.M. Zhang, D. Walsh, D. Uttamchandani, B. Culshaw  
*Effect of optical power on the resonance frequency of optically powered microresonators*  
Sensors and Actuators, A29, 73-78, (1991).
19. L.M. Zhang, D. Uttamchandani, B. Culshaw  
*Measurements of the mechanical properties of silicon microresonators*  
Sensors and Actuators, A29, 79-84, (1991).
20. O. Beltràn, comunicació privada.
21. J. Suski, V. Mosser, J. Goss  
*Polysilicon SOI pressure sensor*  
Sensors and Actuators, 17, (1989) 405-414.
22. E. Obermeier, P. Kopystynski  
*Polysilicon as a material for microsensor applications*  
Sensors and Actuators, A30, 149-155, (1992).

23. O. Zucker, W. Langneinrich, J. Meyer  
*Investigation of Polysilicon for its Application to Multi-functional Sensors*  
Sensors and Actuators, A25-27, 647-651, (1991).
24. J.C. Erskine  
*Polycrystalline Silicon-on-Metal Strain Gauge Transducers*  
IEEE Trans. Electron Dev. ED-30, 796-801, (1983).
25. F. Sato, Y. Sakamoto, H. Hashimoto, M. Tamura  
*Pressure Sensor Using Polycrystalline Silicon Thin Film Strain Gauge with Hybrid IC Amplifier*  
Sensors and Materials, 3, 335-343, (1992).
26. P.J. French, A.G.R. Evans  
*Polycrystalline silicon as a strain gauge material*  
J. Phys. E. Sci. Instrum. 19, 1055-1058 (1986).
27. C. Rubio  
Trabajo experimental de tercer ciclo, (1993).
28. J. Binder, W. Henning, E. Obermeier, H. Schaber, D. Cutter,  
*Láser-recrystallized polysilicon resistors for sensing and integrated circuits applications*  
Sensors and Actuators, 4, 527-536 (1983).
29. V.A. Voronin, A.A. Druzhinin, I.I. Marjamova, V.G. Kostur, J.M. Pankov.  
*Láser-recrystallized polysilicon layers in sensors*  
Sensors and Actuators A30, 143-147, (1992).
30. E. Obermeier, P. Kopystynski, R. Niessl  
*Characteristics of polysilicon layers and their application in sensors*  
Tech. Dig. IEEE Solid-St. Sensors Workshop, Hilton Head Is. SC USA. 1986 p. 1.
31. G. Shuwen, T. Songshen, W. Weiyvan  
*Temperature Characteristics of Microcrystalline and Polycrystalline Silicon Pressure Sensors*  
Sensors and Actuators A21-A23 133-136, (1990).
32. H. Schäfer, V. Graeger, R. Kobs.  
*Temperature-independent pressure sensors using polycrystalline silicon strain gauges*  
Sensors and Actuators, 17, 521-527 (1989).
33. O. Zucker, W. Langneinrich, M. Hierholzer, J. Meyer  
*Realization of a Temperature Transducer by a Standard Polysilicon Process*  
Sensors and Actuators, A21-23, 1015-1018, (1990).
34. M.M. Mandurah, K.C. Saraswat, T.I. Kamins,  
*A Model for Conduction in Polycrystalline Silicon-Part I: Theory.*  
IEEE Trans. Electron Dev. ED-28, 1163-1171, (1981).

35. M.M. Mandurah, K.C. Saraswat, T.I. Kamins,  
*A Model for Conduction in Polycrystalline Silicon-Part II: Comparison of Theory and Experiment.*  
IEEE Trans. Electron Dev. ED-28, 1171-1176, (1981).
36. E.I. Gigargizov  
*Oriented Crystallization on Amorphous Substrates*  
Plenum Press, New York (1991).
37. B.D. Cullity  
*Elements of X-Ray Diffraction*  
Addison-Wesley, Reading MA, (1977).
38. H.P. Klug, L.E. Alexander  
*X-Ray Diffraction Procedures*  
J. Wiley, New York, (1974).
39. R. Delhez, E.J. Mittemeijer  
*An Improved  $\alpha_2$  Elimination*  
J. Appl. Cryst. 8, 609-611, (1975).
40. T.H. De Keijser, J.I. Langford, E.J. Mittemeijer, A.B.P. Vogels  
*Use of the Voigt Function in a Single-Line Method for the Analysis of the X-Ray Diffraction Line Broadening*  
J. Appl. Cryst. 15, 308-314, (1982).
41. G.K. Williamson, W.H. Hall  
Acta Metall., 1, 22-31, (1953).
42. B. Prévot, J. Wagner  
*Raman Characterization of Semiconducting Materials and Related Structures*  
Prog. Crystal Growth and Charact. 22, 245-319, (1991).
43. T.I. Kamins, M.M. Mandurah, K.C. Saraswat  
*Structure and Stability of Low Pressure Chemically Vapor-Deposited Silicon Films*  
J. Electrochem. Soc. 125, 927-932, (1978).
44. P. Joubert, B. Loisel, Y. Chouan, L. Hagi  
*The Effect of Low Pressure on the structure of LPCVD Polycrystalline Silicon Films*  
J. Electrochem. Soc., 134, 2541-2545, (1987).
45. A.T. Voutsas, M.K. Hatalis  
*Structure of As-deposited LPCVD Silicon Films at Low Deposition Temperatures and Pressures*  
J. Electrochem. Soc., 139, 2659-2665, (1992).
46. T.I. Kamins  
*Structure of chemically deposited polycrystalline silicon films*  
Thin Solid Films, 10, 147-165 (1973).

47. E. Kinsbron, M. Sternheim, R. Knoell  
*Crystallization of amorphous silicon films during low pressure chemical vapor deposition*  
Appl. Phys. Lett. **42**, 835-837, (1983).
48. S.K. Tung  
*The effects of substrate orientation on epitaxial growth*  
J. Electrochem. Soc., **112**, 436-438.
49. T.I. Kamins  
*Design Properties of Polycrystalline Silicon*  
Sensors and Actuators, A21-A23, 817-824, (1990).
50. T.I. Kamins  
*Structure and Properties of LPCVD Silicon Films*  
J. Electrochem. Soc. **127**, 686-690, (1980).
51. G. Harbeke, L. Krausbauer, E.F. Steigmeier, A.E. Widmer, H.F. Kappert  
*High quality polysilicon by amorphous low pressure chemical vapor deposition*  
Appl. Phys. Lett. **42**, 249-251, (1983).
52. G. Harbeke, L. Krausbauer, E.F. Steigmeier, A.E. Widmer, H.F. Kappert  
*Growth and Physical Properties of LPCVD Polycrystalline Silicon Films*  
J. Electrochem. Soc., **131**, 675-682, (1984).
53. O. Ruiz, S. Marco, J. Samitier, J.R. Morante, J. Bausells  
*Effect of boron implantation on the structure and residual stress of LPCVD polysilicon films*  
Journal of Micromechanics and Microengineering, **2**, 170-172, (1992).
54. K. Egami, A. Ogura, M. Kimura  
*Low-temperature grain growth of initially {100} textures polycrystalline silicon amorphized by silicon ion implantation with normal incident angle*  
J. Appl. Phys. **59**, 289-291, (1986).
55. L. Mei, M. Rivier, Y. Kwuark, R.W. Dutton  
*Grain-Growth Mechanisms in Polysilicon*  
J. Electrochem. Soc., **129**, 1791-1795, (1982).
56. M. Hendricks, R. Delhez, Th. H. de Keijser, S. Radelaar, F.H.P.M. Habraken, A.E.T. Kuiper, P.R. Boudewijn  
*X-Ray Diffraction Study and Electrical Characterization of Boron-Implanted Low-pressure Chemical Vapor Deposited Polycrystalline Silicon Layers*  
J. Appl. Phys. **56**, 2751-2761, (1984).
57. L.P. Avakyants, L.L. Gerasimov, V.S. Gorelik, N.M. Manja, E.D. Obraztsova, Y.I. Plotnikov  
*Raman Scattering in Amorphous Silicon Films*  
J. Molecular Structure, **267**, 177-184, (1992).

58. G.X. Cheng, H. Xia, K.J. Chen, W. Zhang, X.K. Zhang  
*Raman Measurement of the Grain-Size for Silicon Crystallites*  
Phys. Stat. Sol. A, **118**, K51-K54, (1990).
59. F. Cerdeira, M. Cardona  
*Effect of Carrier Concentration on the Raman Frequencies of Si and Ge*  
Phys. Rev. B, **5**, 1440-1454, (1972).
60. F. Cerdeira, T.A. Fjeldly, M. Cardona  
*Effect of Free Carriers on Zone-Center Vibrational Modes in Heavily Doped p-type Si: II-Optical Modes*  
Phys. Rev. B, **8**, 4734-4745, (1973).
61. G. González de la Cruz, G. Contreras-Puente, F.L. Castillo-Alvarado, C. Mejía-García, A. Compañ.  
*Raman Scattering by Phonons in Heavily Doped Semiconductors*  
Solid State Communications, **82**, 927-929, (1992).
62. U. Fano  
Phys. Rev. **124**, 1866 (1961).
63. J.Y.W. Seto  
*The electrical properties of polycrystalline silicon films*  
J. Appl. Phys., **46**, 5247-5254, (1975).
64. L.B. Valdés  
*Resistivity measurements on germanium for transistors*  
Proc. of the IRE, **42**, 420-427, (1954).
65. C. Rubio  
Trabajo experimental de tercer ciclo, (1993).  
Universidad de Barcelona.
66. S. Marco, O. Ruiz, J. Samitier, J.R. Morante, J. Bausells  
*Relation between electrical conductivity and structural characteristics in boron-doped LPCVD polycrystalline silicon used in sensor devices*  
Aceptado en Sensors and Actuators.
67. P.H. Townsend, D.M. Barnett, T.A. Brunner  
*Elastic Relationships in layered composite media with approximation for the case of thin films on a thick substrate*  
J. Appl. Phys. **62**, 4438-4444 (1987).
68. G.C. Stoney  
Proc. R. Soc. London. Ser. A **82**, 172 (1909).
69. D.E. Fahnline  
*Effect of Initial Substrate Curvature on Nonlinear Bending Measurements of Thin-Film Stress*

- Mat. Res. Soc. Symp. Proc. **239**, 251-256, (1992).
70. M<sup>a</sup>. A. Benítez, comunicación privada.
71. H. Toraya  
*Whole-Powder-Pattern Fitting Without Reference to a Structural Model: Application to X-Ray Powder Diffractometer Data*  
J. Appl. Cryst. **19**, 440-447, (1987).
72. R.A. Young, D.B. Wiles  
*Profile Shape Functions in Rietveld Refinements*  
J. Appl. Cryst. **15**, 430-438 (1982).
73. I.C. Noyan, J.B. Cohen  
*Residual Stress*  
Springer-Verlag, New York, (1987).
74. E. Anastassakis, E. Liarokapis  
*Polycrystalline Si under strain: Elastic and Lattice-Dynamical Considerations*  
J. Appl. Phys. **62**, 3346-3352, (1987).
75. Z. Iqbal, S. Veprek  
*Raman Scattering from hydrogenated microcrystalline and amorphous silicon*  
J. Phys. C: Solid State Phys. **15**, 377-392 (1982).
76. I.H. Campbell, P.M. Fauchet  
*The Effects of Microcrystal Size and Shape on The Phonon Raman Spectra of Crystalline Semiconductors*  
Sol. State. Comm., **58**, 739-741, (1986).
77. F. Cerdeira, T.A. Fjeldly, M. Cardona  
*Effect of Free Carriers on the Zone-Center Vibrational Modes in Heavily Doped p-type Si: II. Optical Modes*  
Phys. Rev. B, **8**, 4734-4745, (1973).
78. G. González de la Cruz, G. Contreras-Puente, F.L. Castillo-Alvarado, C. Mejía-García, A. Compañ.  
*Raman Scattering by Phonons in Heavily Doped Semiconductors*  
Sol. State. Comm. **82**, 927-929, (1992).
79. M. Hendriks, R. Delhez, Th.H. De Keijser, S. Radelaar, F.H.P.M. Habraken, A.E.T. Kuiper, P.R. Boudewijn  
*X-Ray Diffraction Study and Electrical Characterization of Boron-Implanted Low-Pressure Chemical Vapor Deposited Polycrystalline Silicon Layer*  
J. Appl. Phys., **56**, 2751-2761, (1984).
80. H. Guckel, D.W. Burns, C.C.G. Visser, H.A.C. Tilmans, D. DeRoo.  
*Fine-Grained Polysilicon with Built-in Tensile Strain*  
IEEE Trans. Electron Dev. ED-35, 800, (1988).

81. S. Marco, O. Ruiz, J. Samitier, J.R. Morante, J. Esteve-Tintó, J. Bausells  
*Stress measurements of SiO<sub>2</sub>-Polycrystalline-Silicon structures for micromechanical devices by means of infrared spectroscopy technique*  
TRANSDUCERS'91. The 6th International Conference on Solid-State Sensors and Actuators, San Francisco, Junio 1991.
82. A. Benítez  
*Estudio del esfuerzo en el silicio policristalino para su aplicación en micromecánica*  
Trabajo de investigación de tercer ciclo  
Universidad Autónoma de Barcelona (1992).
83. A. Benítez, J. Bausells, E. Cabruja, J. Esteve, J. Samitier  
*Stress in LPCVD Polycrystalline Silicon Films Deposited Below 0.1 Torr*  
Aceptado para publicación en Sensors and Actuators.
84. J. Samitier, S. Marco, O. Ruiz, J.R. Morante, M.A. Benítez, J. Bausells, J. Esteve  
*Stress Measurements in micromechanical structures: comparison between mechanical and structural methods*  
International Workshop on Smart Sensors and Integrated Actuators, Toulouse , octubre 1991
85. P. Krulevitch, G.C. Johnson, R.T. Howe  
*Stress and Microstructure in LPCVD Polycrystalline Silicon Films: Experimental Results and Closed Form Modeling of Stresses.*  
Mat. Res. Soc. Symp. Proc., 239, 13-18, (1992).





---

**Capítulo IV:**  
**Simulación mecánica de microestructuras:**  
**aplicación al diseño de sensores de presión**

---



## IV.1. Introducción:

---

La posibilidad de obtener a través del micromecanizado de silicio estructuras básicas tales como vigas, diafragmas, etc. permite la realización de diversos sensores basados en el comportamiento mecánico de estructuras con diversos grados de complejidad. En ellos la magnitud medida da lugar al desplazamiento de la estructura, a la aparición de un campo de tensiones en la estructura o bien a un cambio en su frecuencia de resonancia. Los desplazamientos se detectan mediante un cambio capacitivo o bien ópticamente. Las tensiones mecánicas pueden detectarse mediante el efecto piezoeléctrico de una capa depositada, o bien mediante el efecto piezorresistivo propio del silicio.

La simulación numérica permite al investigador la construcción de modelos matemáticos de las estructuras, la aplicación de cargas y el estudio de las respuestas físicas del sistema tales como la distribución de esfuerzos o los desplazamientos, magnitudes fundamentales para predecir la respuesta eléctrica final del sensor. Este proceso da a los grupos de I+D en sensores una alternativa (figura 1) a la realización de múltiples prototipos, análisis y rediseño, metodología no deseable dados sus altos costos en tiempo y personal.

En este contexto este capítulo describe el trabajo llevado a cabo en la simulación y diseño

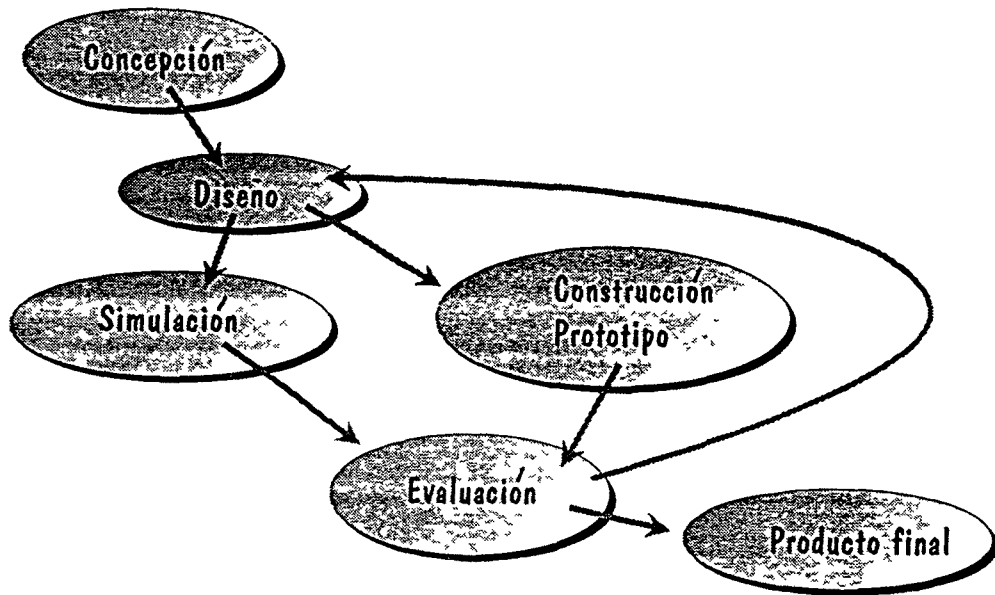


Fig. 1 El análisis por elementos finitos permite evitar la construcción de múltiples prototipos en la fase de desarrollo del dispositivo.

de estructuras mecánicas para sensores de presión piezorresistivos. Se revisarán los métodos semi-analíticos utilizados para el análisis de sensores basados en membranas rectangulares de grosor uniforme, y se presentarán las simulaciones realizadas mediante el método de los elementos finitos en el caso de análisis más complejos.

## IV.2. Análisis anisótropo de una membrana cuadrada uniforme

El método de cálculo presentado en el apéndice III para el análisis del comportamiento mecánico de membranas uniformes considera al silicio como un material isótropo. Esta simplificación es usual en la mayoría de cálculos sobre el comportamiento mecánico del silicio pues aligera de manera importante su complejidad. No obstante, los errores introducidos dependerán de la geometría de la estructura considerada. Para considerar con más detalle el caso particular de la membrana rectangular uniforme con bordes empotrados se resolvió la ecuación de Lagrange modificada<sup>1</sup>:

que se obtiene a partir de las siguientes relaciones deformación-esfuerzo:

$$D_x \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} + 2(D_1 + 2D_{xy}) \frac{\partial^4 w}{\partial x^2 \partial y^2} + D_y \frac{\partial^4 w}{\partial y^4} = p \quad (1)$$

$$\sigma_{11} = E' e_{11} + E'' e_{22}$$

$$\sigma_{22} = E'' e_{11} + E' e_{22} \quad (2)$$

$$\sigma_{12} = G e_{12}$$

Los coeficientes que aparecen en la ecuación diferencial son:

$$D_x = D_y = \frac{E' h^3}{12}$$

$$D_o = \frac{E'' h^3}{12} \quad (3)$$

$$D_{xy} = \frac{G h^3}{12}$$

En forma adimensional la ecuación de Lagrange modificada queda reducida a:

$$\frac{\partial^4 \bar{w}}{\partial \bar{x}^4} + 2A \frac{\partial^4 \bar{w}}{\partial \bar{x}^2 \partial \bar{y}^2} + \frac{\partial^4 \bar{w}}{\partial \bar{y}^4} = 1 \quad (4)$$

siendo:

$$A = \frac{D_o + 2D_{xy}}{D_x} = \frac{E'' + 2G}{E'} \quad (5)$$

Para el caso isótropo mencionado anteriormente  $A=1$ , y la ecuación de Lagrange pasa a ser biarmónica. No así en el caso anisótropo, donde en general  $A \neq 1$ . En particular, para el silicio en la dirección [110]  $A=0.665$ . En la figura 2 se muestra la comparación entre el resultado isótropo y el anisótropo, siempre en forma adimensional. Se presentan tanto los cálculos realizados a través de la resolución de la ecuación de Lagrange, como los correspondientes a la simulación por el método de los elementos finitos (en adelante, FEM). Como puede observarse en la figura 2a, la deflexión real de la membrana es significativamente mayor que la predicha por el modelo isótropo. Este error tendrá mayor importancia para los sensores capacitivos donde la magnitud fundamental que regula la señal

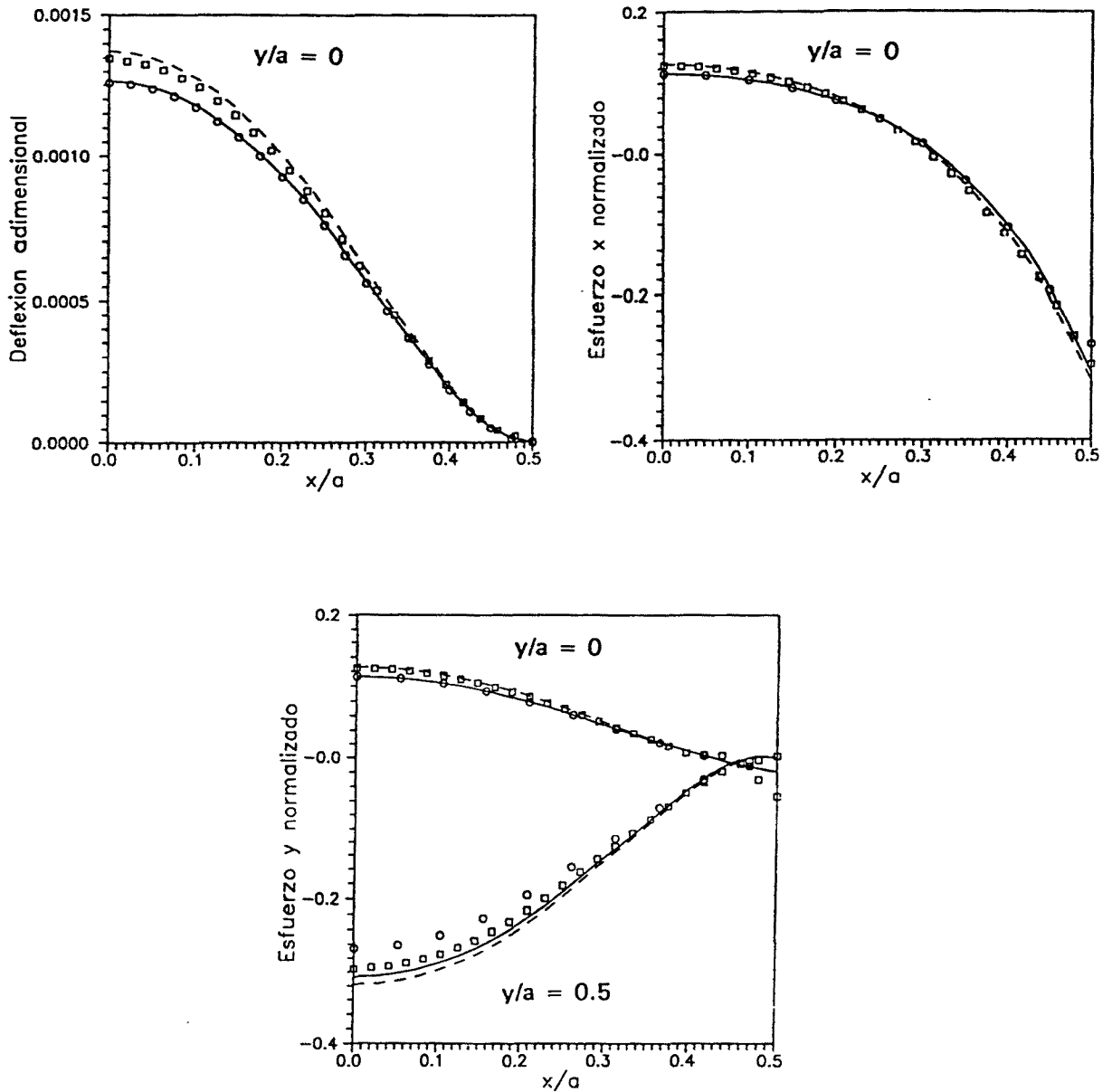


Fig. 2 Comparación entre el cálculo isotrópico (línea continua) y anisótropo (discontinua) mediante el método de Timoshenko. Simulación FEM. □ anisótropo, ○ isotrópico.

del sensor es el desplazamiento de la estructura. En las figuras 2b y 2c se presenta la comparación de los esfuerzos en las direcciones x e y. En este caso, las diferencias, aunque existen son menores, indicando que la simplificación introducida al considerar el silicio isotrópico no da lugar a grandes errores. De la figura 2 puede constatarse también el buen acuerdo logrado entre los programas de simulación basados en la solución de Timoshenko y las simulaciones FEM.

### IV.3. El método de los elementos finitos

---

La búsqueda de soluciones analíticas, o numéricas mediante el método de las diferencias finitas, impone serias limitaciones en el análisis de las estructuras deseables en el diseño de sensores mecánicos:

- Geometrías extremadamente sencillas,
- pequeñas deflexiones,
- imposibilidad de la presencia de varios materiales, etc.

La necesidad de superar estos obstáculos ha llevado a los investigadores en este campo al uso de herramientas de cálculo enormemente más potentes: programas para el análisis estructural mediante el método de los elementos finitos,.

Una forma habitual de abordar un cierto problema, consiste en separar el sistema en sus componentes individuales cuyo comportamiento es más sencillo de analizar que el del conjunto. A continuación se reconstruye el sistema original a partir de sus componentes. En algunos casos, el sistema no puede reducirse a componentes discretos y la subdivisión prosigue indefinidamente, lo que lleva al uso del concepto de infinitésimo y a la deducción de las ecuaciones diferenciales que rigen el comportamiento del sistema.

Con el gran progreso experimentado por la informática, la reducción de un sistema a un conjunto de componentes discretos, aunque éste sea muy elevado, permite su solución computacional. El método de los elementos finitos (FEM)<sup>2</sup> tiene un origen matemático reciente, pues data de 1960, aunque pueden encontrarse trabajos precursores en las décadas de los 40 y 50. Este método se define como un procedimiento de aproximación de problemas continuos de manera que:

- a) El continuo se divide en un número finito de partes (elementos), cuyo comportamiento se especifica mediante un número finito de parámetros.
- b) La solución al sistema completo se produce como ensamblaje de todos los elementos como si fueran componentes discretos.

Esta teoría nace de la necesidad de cálculo de tensiones y deformaciones en continuos elásticos en problemas de ingeniería mecánica. Actualmente, este método se aplica a problemas muy diversos: térmicos, fluidos, electromagnéticos, etc.

Más que incidir en el fundamento matemático del método, bastante complejo, presentaremos con más detalle diversos conceptos cuyo conocimiento es imprescindible para la discusión de las modelizaciones realizadas. Un análisis FEM involucra necesariamente una serie de operaciones:



- a) El continuo se divide, mediante líneas o superficies imaginarias, en un número de *elementos finitos*.
- b) Estos elementos están conectados entre sí mediante un número discreto de puntos o *nodos*. Los desplazamientos, o en general, los diferentes grados de libertad<sup>1</sup> de estos nodos son las incógnitas fundamentales del problema.
- c) Se toma un conjunto de funciones (*funciones de forma*) que definan de manera única el campo de desplazamientos dentro de cada elemento en función de los desplazamientos nodales de dicho elemento.
- d) Estas funciones de desplazamientos definirán entonces de manera única el estado de deformación dentro del elemento en función de los desplazamientos nodales. Estas deformaciones, junto con las condiciones iniciales y las propiedades físicas del material, definirán el estado de tensiones en todo el elemento y, por consiguiente, también en sus contornos.
- e) Se determina un sistema de fuerzas concentradas en los nodos, tal que equilibre las tensiones del contorno y cualquiera de las cargas repartidas.
- f) Una vez alcanzado éste punto se impone que en el análisis estático, todos los elementos estén en equilibrio.

Esta imposición da lugar a una ecuación matricial de la forma:

$$[K]\{u\} = \{F\} \quad (6)$$

donde  $[K]$  es la matriz de rigidez total,  $\{u\}$  es el vector de desplazamientos nodales, y  $\{F\}$  el vector de fuerzas incluye todas las cargas nodales impuestas al sistema: fuerzas concentradas, cargas térmicas, presiones, etc.

El trabajo de simulación FEM que se presenta en este capítulo ha sido realizado mediante dos programas: una versión universitaria del paquete ANSYS 4.4A (Swanson Analysis Systems Inc.) y la versión comercial del programa MEF/MOSAIC (Framasoft+CSI). El primero de ellos se ejecutaba en un PC'386 a 33 MHz, mientras el segundo fue instalado en una estación de trabajo Silicon Graphics 4D/35.

---

<sup>1</sup> Los grados de libertad pueden ser desplazamientos, rotaciones, temperaturas, presiones, voltajes, potenciales magnéticos u otras magnitudes físicas dependiendo del tipo de problema abordado. Las magnitudes 'carga' variarán igualmente.

## IV.4. El problema de la no-linealidad

---

### IV.4.1 Definición y origen

La no-linealidad es una medida de la desviación respecto a la linealidad en la respuesta del sensor que usualmente se expresa en términos del porcentaje respecto a la salida a fondo de escala, para un valor dado del mesurando. De entre los distintos métodos existentes para especificar el valor de la no-linealidad<sup>3</sup> los más utilizados son:

- i) BSFL: Desviación respecto al mejor ajuste lineal
- ii) Desviación respecto a una línea recta que une los dos extremos de la característica.

El primer método, comúnmente utilizado por los fabricantes, proporciona valores de NL que son aproximadamente la mitad de los que provee el segundo método.

En la respuesta de un sensor de presión, la no-linealidad presenta dos orígenes diferentes: aquella causada por la no-linealidad intrínseca del efecto piezorresistivo y aquella causada por la aparición de grandes deflexiones. La primera ha sido contemplada en el apéndice referido al efecto piezorresistivo, nos centraremos brevemente ahora en el origen de la segunda.

Como hemos mencionado, cuando la presión aplicada provoca grandes deflexiones aparecen esfuerzos no-lineales en el diafragma. Éstos aparecen debido a la elongación finita del plano medio. En la figura 3<sup>4</sup> se muestra el esfuerzo total bajo tensión y bajo compresión originado en un cierto punto del diafragma al aplicar una presión positiva o negativa. El esfuerzo total en un punto dado del diafragma tiene dos componentes: la tensión originada por la flexión y la causada por la deformación axial inducida en la membrana. Esta última tiene el mismo signo bajo tensión o compresión (es decir, en la superficie superior e inferior del diafragma). Por otro lado, las tensiones originadas por la flexión son iguales pero de signo opuesto, ello provoca que la influencia de la tensión de membrana sobre el valor final del esfuerzo sea diferente para los puntos bajo tensión o bajo compresión. Hay que observar también que incluso el esfuerzo originado por la flexión es no-lineal. Ello se debe al denominado efecto membrana: la rigidez a flexión de un cierto elemento mecánico es función de su carga axial.

Consideremos el problema de la no-linealidad en sensores de membrana uniforme. A medida que el rango de presiones se reduce, si el diseñador intenta obtener la misma salida a fondo de escala (FSO) aumentando la razón  $a/h$  ( $a$  lado,  $h$  grosor), el dispositivo final presenta una no-linealidad significativa. Este hecho surge de la diferente dependencia de la tensión y la no-linealidad en relación a las dimensiones del diafragma. Mientras el esfuerzo es proporcional a  $(a/h)^2$ , la no-linealidad aumenta como  $(a/h)^4$ . El diseño de sensores

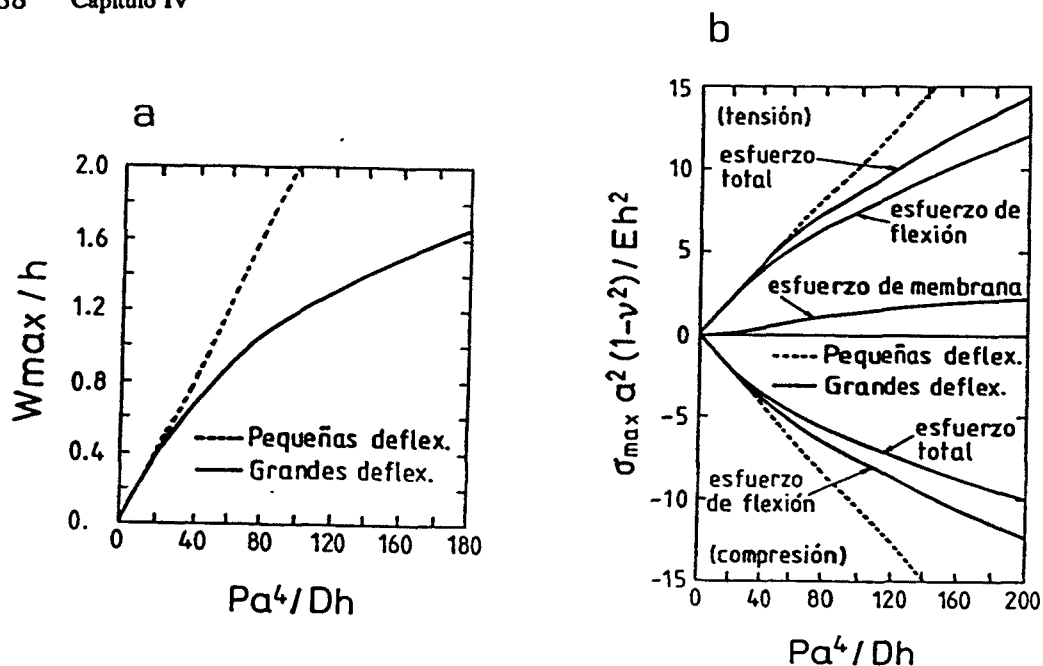


Fig. 3 a) Deflexión máxima adimensional. b) Esfuerzos máximos adimensionales (Ref 4).

piezorresistivos que eviten estos inconvenientes ha impulsado la investigación durante la última década. No obstante, las soluciones propuestas son todavía inadecuadas para la producción de bajo coste cuando la miniaturización es primordial.

Diferentes estructuras han sido presentadas por distintos grupos. Todas ellas están basadas en la existencia de zonas más rígidas en el interior del diafragma, mientras las galgas sensoras se mantienen en una zona de concentración de esfuerzos. Es también importante tener en cuenta la contribución a la no-linealidad del efecto piezorresistivo. Por esta razón, la mayoría de los diseños colocan a las piezorresistencias bajo esfuerzo transversal, lo que lleva a una auto-compensación parcial de esta contribución a la no-linealidad cuando se utiliza un puente de Wheatstone completo.

Shimazoe et al.<sup>5</sup> presentan una membrana circular obtenida mediante ataque isótropo con una zona más gruesa concéntrica en la parte posterior del diafragma. Este tipo de estructura fue utilizada asimismo por Binder et al.<sup>6</sup> en Siemens. La misma idea, pero en esta ocasión basándose en el ataque anisótropo para la obtención en un diafragma cuadrado fue presentada por Mallon et al.<sup>7</sup>. Sandmaier<sup>8,9</sup> adopta la misma estructura para membranas rectangulares consiguiendo una mejora de las características.

Probablemente la estructura con más éxito, conocida como el diafragma con "doble-isla" fue propuesta por Wilner en Endeveco<sup>10</sup>. Posteriores desarrollos basados en esta estructura han sido llevados a cabo por Whittier<sup>11</sup> y J.R. Mallon et al.<sup>12</sup>.

Estos diseños permiten obtener una buena linealidad manteniendo niveles de sensibilidad altos. Sin embargo, no son especialmente adecuados para la miniaturización debido a las laderas  $\{111\}$  de las zonas gruesas (4 en el caso de una sola isla, o 6 para la estructura con dos islas - figura 4). En ocasiones para reducir este problema se utilizan obleas más delgadas (por ejemplo de  $125 \mu\text{m}$ ), pero esta opción da lugar a un bajo rendimiento durante el proceso debido a la fragilidad de las obleas.

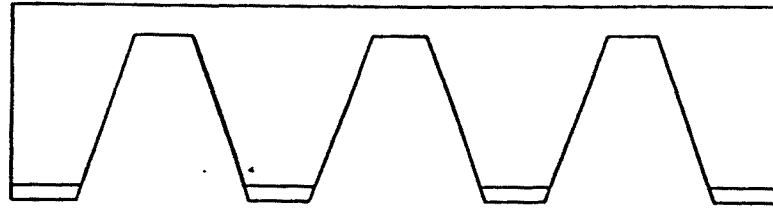
Recientemente M.H. Bao<sup>13,14</sup> ha propuesto una nueva estructura basada en una viga que atraviesa el diafragma. Su fabricación utiliza grabado anisótropo por ambas caras y paro automático en capas  $p^{++}$ . Este nuevo diseño permite una mayor miniaturización y una mayor frecuencia de resonancia dado que la masa de las zonas rígidas es menor. Sin embargo, pueden aparecer problemas en la fabricación debido al procesado no-planar en la cara activa, o en la respuesta del dispositivo debido a la presencia de grandes esfuerzos tensivos en la membrana asociados a las zonas con altas dosis de boro.

#### IV.4.2 Simulación mecánica de membranas no uniformes

Parte de la investigación llevada a cabo durante la realización de esta memoria tenía como uno de sus objetivos finales el desarrollo de un sensor de presión para aplicaciones cardiovasculares con las dimensiones adecuadas para poder ser encapsulado en el extremo de un catéter 7F con un diámetro exterior de 2.3 mm. El rango de presiones en las cuales debe trabajar el transductor en esta aplicación particular es de 300 mmHg (400 mbar). En contraste con otros sensores presentados previamente en la literatura<sup>15,16,17,18</sup> el sensor no estaría montado lateralmente en el catéter, sino en el mismo extremo<sup>19</sup> del mismo con el objetivo de prevenir distorsiones en la lectura de la presión.

Esta concepción del encapsulado impone severas restricciones en el tamaño del diafragma, el cual no puede hacerse mayor utilizando una membrana rectangular (lo cual sí es posible cuando el sensor está montado lateralmente). Para acomodar el sensor en ese tipo de catéter el tamaño del chip se tomó  $1.25 \times 1.25 \text{ mm}$ , lo cual proporciona una dimensión diagonal de 1.56 mm. Para este tamaño de la pastilla de silicio, el lado mayor de la membrana no puede ser mayor de  $600 \mu\text{m}$ . Para obtener una alta sensibilidad con estas dimensiones, el grosor del diafragma debe situarse entre 5-10  $\mu\text{m}$ . Para diafragmas con las citadas dimensiones la no-linealidad es considerable. Sin embargo, debido a la pequeña área la utilización de masas con el grosor total de la oblea no es posible.

Sin embargo, no es necesario que las masas tengan un grosor en torno a  $300 \mu\text{m}$  para lograr los efectos de concentración de esfuerzos deseados, así como el aumento general de la rigidez del diafragma sensor. Recordemos que la rigidez a flexión en una placa:



**Fig. 4** Sección transversal de un sensor de presión basado en la estructura de "doble-isla".

$$D = \frac{Eh^3}{12(1-\nu^2)} \quad (7)$$

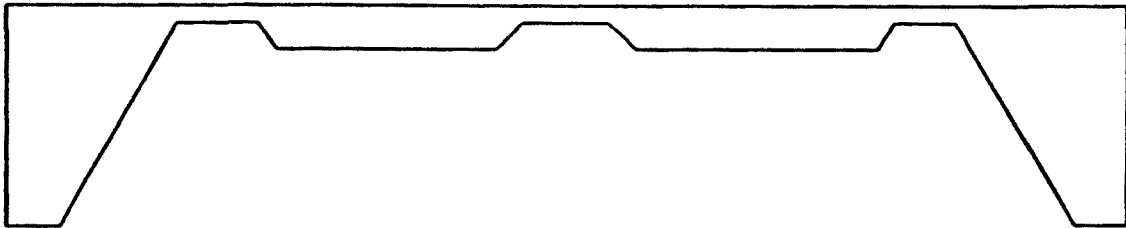
depende del cubo del grosor  $h$  ( $E$  módulo de Young,  $\nu$  número de Poisson). Por lo tanto, utilizando razones de grosores no muy elevadas pueden obtenerse razones de rigidez suficientes. Por ejemplo, un factor 4 en el grosor implica un factor 64 en la rigidez a flexión. Como mostrará el trabajo de simulación llevado a cabo esto es suficiente en la mayoría de diseños. Esta razón de grosores puede alcanzarse haciendo uso de las posibilidades del paro electroquímico en difusiones a varios niveles.

Basándonos en estas consideraciones hemos realizado un extensivo trabajo de simulación por elementos finitos. Se ha analizado el comportamiento mecánico de diferentes tipos de estructuras:

- a) Diafragmas cuadrados de grosor uniforme (diseño similar al presentado en el capítulo I, aunque convenientemente escalado),
- b) rectangulares con las piezorresistencias sometidas a esfuerzo transversal,
- c) diafragmas con una sola zona rígida central,
- d) con dos zonas rígidas (estructura "doble-isla"),
- e) diafragma con una viga transversal,

Si bien el diseño geométrico de las estructuras c), d), ha sido utilizado previamente por otros autores, hay que recalcar que en nuestro análisis la razón de rigidez entre las zonas gruesas y delgadas es diferente. La estructura e) es ligeramente diferente a la propuesta por M.H. Bao como ilustra la figura 5. Además dos nuevas estructuras han sido evaluadas. Éstas presentan la particularidad de que no pueden ser fabricadas usando las técnicas estándar de ataque anisótropo. Una idea más clara de las estructuras mecánicas consideradas puede extraerse de la figura 6, donde se muestran además las distintas variables de diseño consideradas cuyo valor fija la geometría final de la estructura.

Estructura analizada en el trabajo



Estructura propuesta por M.H. Bao

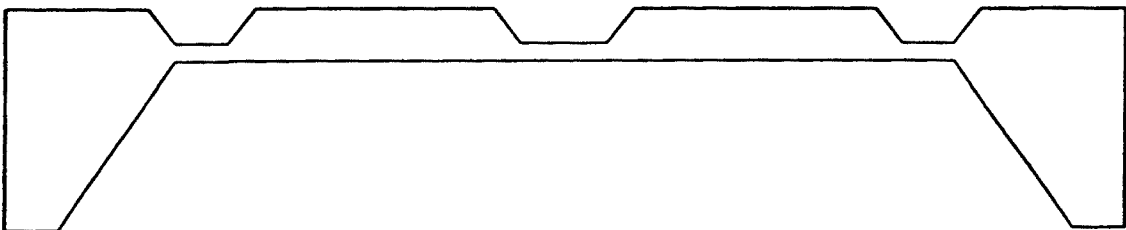


Fig. 5 Modificación de la estructura propuesta por M.H.Bao (ref. 13, 14).

El objetivo de las simulaciones efectuadas ha sido averiguar hasta que punto estas nuevas estructuras pueden mejorar las prestaciones del diseño estándar de sensores de presión basado en la membrana cuadrada, bien sea en linealidad o en sensibilidad. Para el análisis de estas estructuras, la simulación FEM es inevitable debido a la imposibilidad de un enfoque analítico. A continuación indicaremos algunos puntos de interés respecto a la forma en la cuál las simulaciones han sido realizadas:

- i) La estructura simulada se ha restringido siempre a un cuarto de la estructura completa dada la simetría existente.
- ii) En todos los casos, el análisis ha considerado la anisotropía elástica del silicio.
- iii) Los bordes del diafragma se han supuesto perfectamente empotrados.
- iv) Se ha considerado la no-linealidad geométrica y los efectos de membrana en el diafragma<sup>20</sup>.
- v) Se han realizado múltiples simulaciones de cada tipo de estructura variando los valores de los parámetros geométricos.
- vi) Por razones tecnológicas algunos parámetros han sido restringidos a valores plausibles.
- vii) Usualmente el lado mayor del diafragma y los grosores se han fijado.

Debido al gran número de parámetros que aparecen en algunas estructuras se han utilizado

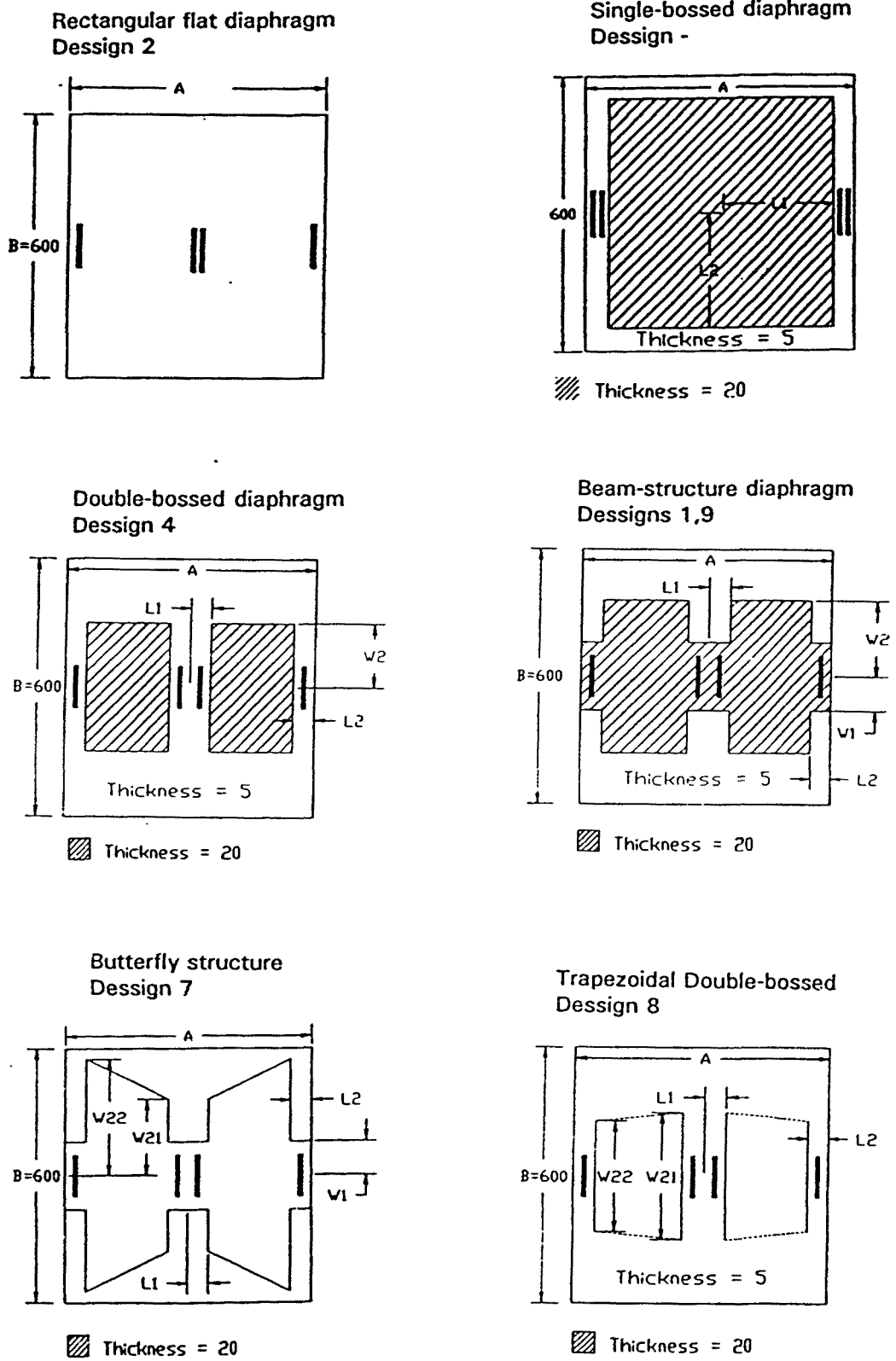


Fig. 6 Esquemas de las distintas estructuras consideradas en la simulación.

las capacidades de optimización del programa ANSYS<sup>21</sup>, basadas en la utilización de la metodología de la superficie de respuesta descrita en el apéndice III.

En el análisis se han calculado dos valores clave:

- **Máxima salida teórica a fondo de escala (FSO):** Este valor ha sido calculado asumiendo resistencias puntuales situadas en el borde y/o en el centro del diafragma.
- **No-linealidad:** Dado el excesivo tiempo de cálculo que suponía calcular muchos puntos en la característica V(P), debido al carácter no-lineal del cálculo, se optó por simplicidad por la siguiente definición de no-linealidad, correspondiente a tomar el valor en el centro de la característica.

$$NL \equiv \left| \frac{V_{out}\left(\frac{P_{max}}{2}\right) - \frac{1}{2}V_{out}(P_{max})}{V_{out}(P_{max})} \times 100 \right| \quad (8)$$

Como se ha señalado anteriormente es importante considerar la contribución de la no-linealidad del efecto piezorresistivo. El cálculo realizado se basa en los resultados publicados por Matsuda et al.<sup>22</sup> correspondientes a una concentración superficial de  $2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  (el resultado esperado en nuestro proceso tecnológico). Estos autores señalan precisamente una importante dependencia de la no-linealidad con la concentración.

Además de obtener la superficie de respuesta para las variables NL y FSO, la finalidad de la optimización fue obtener un FSO mayor de 20 mV/V, minimizando la no-linealidad. Una vez el bucle de optimización converge, siendo necesario en ocasiones el cálculo de más de 30 geometrías distintas, el programa provee un polinomio de segundo orden en los parámetros así como los estimadores de la bondad del ajuste. Este polinomio permite observar la evolución de la sensibilidad y la no-linealidad con los distintos parámetros. También permite observar la tolerancia del diseño a pequeñas variaciones de cada uno de los parámetros.

#### IV.4.3 Método gráfico para la evaluación de la bondad de una estructura mecánica en el diseño de sensores de presión

Cuando el diseñador se pregunta si una estructura proporcionará mejores resultados que el diseño estándar, el cálculo de una única geometría no proporciona la respuesta definitiva. Incluso un conjunto de simulaciones sólo suministra una intuición de las posibilidades de la estructura. La pregunta fundamental es: para una sensibilidad prefijada, ¿proporcionará la nueva estructura una no-linealidad inferior?, o de forma inversa: dada una no-linealidad



máxima, ¿Proporcionará la nueva estructura una mayor sensibilidad?

Los diagramas NL/FSO permiten discutir este tipo de problemas de forma gráfica<sup>23</sup>. Consideremos en primer lugar el diseño estándar ( $600 \times 600 \times h \mu\text{m}$ ), referencia para este tipo de análisis. Al variar el grosor  $h$ , obtenemos los valores de las curvas  $NL=NL(h)$  y  $FSO=FSO(h)$ . Combinando ambas respuestas podemos hallar una curva paramétrica  $NL=NL(FSO)$ , representada como una línea continua en los diagramas 8-12. La curva muestra claramente el dramático aumento de NL más allá de límites tolerables a medida que se desea una mayor sensibilidad.

Esta línea divide el diagrama en dos zonas. Un diseño concreto queda representado por un único punto en el diagrama. Si el punto cae en la zona superior, su respuesta puede considerarse como peor que la correspondiente a un diafragma uniforme. En consecuencia no vale la pena utilizar una más compleja tecnología, al menos bajo la óptica de la respuesta  $V_{\text{out}}(P)$ . Sin embargo, si el punto cae en la zona inferior el nuevo diseño supone una mejora.

La respuesta de geometrías complejas puede discutirse en estos diagramas. Imaginemos que tras simular una geometría particular ésta no mejora el resultado del diafragma cuadrado. ¿Puede ésta evolucionar hacia la parte inferior del diagrama variando el valor de algún parámetro geométrico? Aquí puede incidir la intuición del investigador, pero cuando el número de parámetros es alto la existencia de efectos cruzados puede llevar a conclusiones erróneas. Tal como hemos mencionado anteriormente, utilizando la metodología de la superficie de respuesta es posible hallar las funciones  $NL=NL(x_1, x_2, \dots, x_N)$  y  $FSO=FSO(x_1, x_2, \dots, x_N)$  donde  $N$  es el número de variables de diseño. Al representar  $NL=NL(FSO)$  no obtendremos una única curva, sino toda una área que indica que zonas del diagrama NL/FSO son teóricamente posibles para una estructura determinada. Si esa zona incluye en parte la zona inferior del diagrama podremos afirmar que bajo ciertas condiciones la respuesta puede mejorar la del diseño estándar.

Como observaremos al comentar los diagramas, este procedimiento nos indicará también las mejores prestaciones teóricas para cada tipo de diseño. Ello indicará, por ejemplo, que algunas estructuras serán únicamente valiosas para cierto rango de sensibilidades.

#### IV.4.4 Resultados de simulación

Las simulaciones FEM de la distribución final de esfuerzos en el diafragma (figura 7) demuestran que la razón de grosores 20/5 es suficiente para alcanzar una concentración efectiva de tensiones en la zona donde se encuentran ubicadas las piezorresistencias.

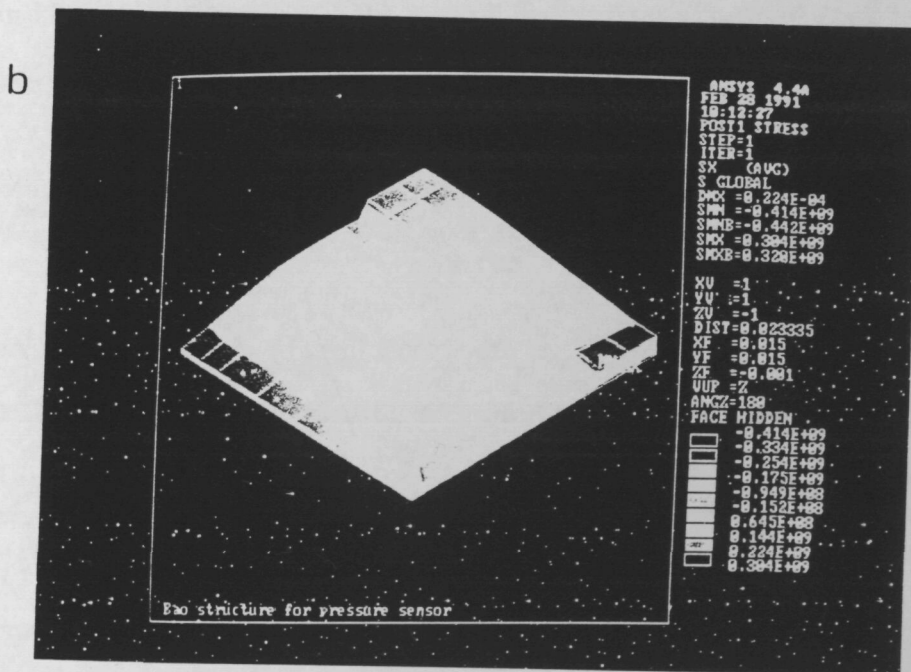
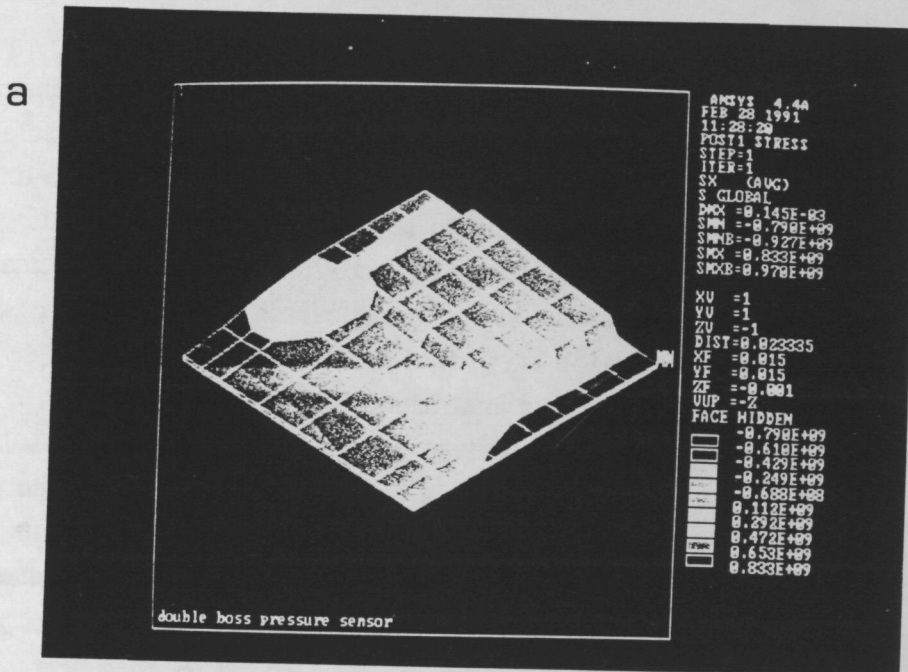


Fig. 7 Distribución de esfuerzos bajo presión en: a) Estructura de "doble-isla", b) Estructura con viga central. (Presión 0.4 bar, los esfuerzos aparecen en dina/cm<sup>2</sup>).

Comentaremos a continuación los diagramas NL/FSO para los distintos diseños.

i) El diagrama de la figura 8 corresponde a una membrana rectangular uniforme en la cual las piezorresistencias están sometidas a esfuerzo transversal. En este diseño se impuso que la membrana tuviera un grosor superior a  $5 \mu\text{m}$ . Con este requerimiento el diseño solo supera al estándar para FSO inferiores a  $10 \text{ mV/V}$ . Para sensibilidades mayores la no-linealidad aumenta considerablemente. En este tipo de diseño la membrana evoluciona hacia formas rectangulares para maximizar la diferencia entre el esfuerzo longitudinal y transversal en las galgas centrales (diferencia nula cuando el diafragma es cuadrado). En cualquier caso, debe alcanzarse un compromiso pues una razón  $b/a$  ( $b$  fijo) demasiado alta lleva a una reducción del área del diafragma y consecuentemente a una reducción de la sensibilidad.

ii) El diagrama de la figura 9 presenta el resultado para el diafragma con una sola masa central. La respuesta es mejor para FSO inferiores a  $16 \text{ mV/V}$ . Por encima de este valor la NL aumenta abruptamente. Este diseño tiene la característica de que a cada lado de la zona rígida los esfuerzos cambian de signo en un espacio muy reducido, lo que le hace muy sensible a variaciones geométricas en esa zona.

iii) La figura 10 muestra la respuesta para el diafragma con dos 'islas', o zonas rígidas. Es remarkable que este diseño mejora sustancialmente la respuesta de un sensor de diafragma uniforme. La NL permanece sorprendentemente baja incluso para FSO's altos ( $35 \text{ mV/V}$ ), e incluso a partir de ahí aumenta muy lentamente. Dentro de las restricciones impuestas en

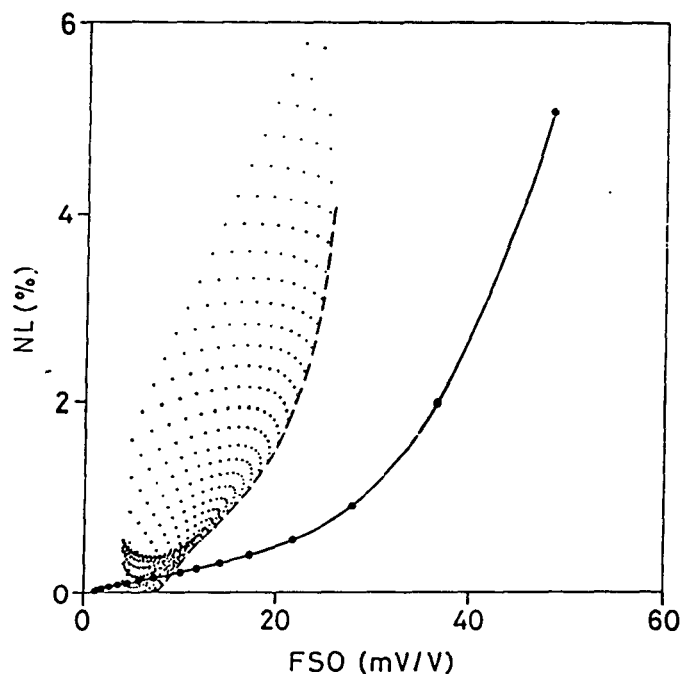


Fig. 8 Diagrama NL/FSO para un diafragma rectangular uniforme.

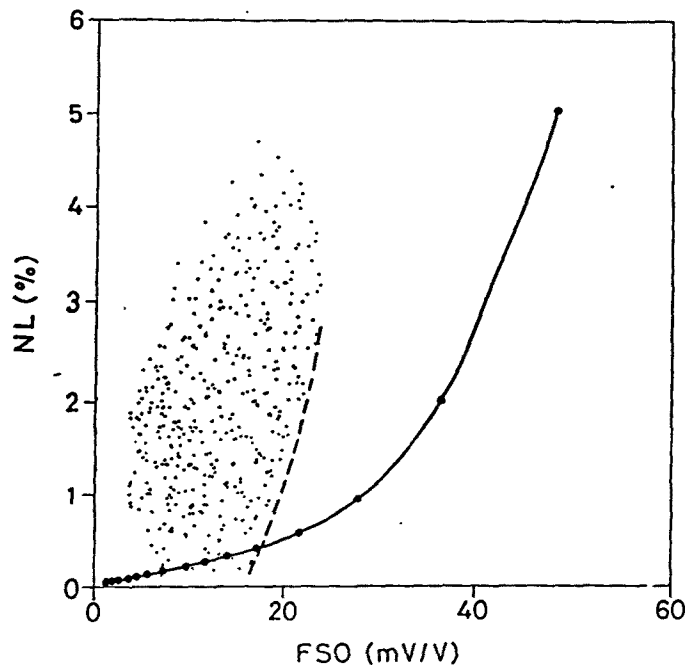


Fig. 9 Diagrama NL/FSO para un diafragma con una sola masa central.

estas simulaciones esta estructura proporciona los mejores resultados entre todas las consideradas.

Por otro lado, la comparación muestra que para la estructura con dos 'islas' la razón de grosores 20/5 es más efectiva que para la estructura con una sola masa. Existen dos factores añadidos que mejoran el comportamiento de la estructura de "doble-isla":

- Si realizamos una sección transversal de la estructura por una línea imaginaria perpendicular a las piezorresistencias observaríamos la existencia de tres zonas más delgadas donde se encuentra concentrada la curvatura inducida por la diferencia de presiones. En cada una de ellas, el signo de la curvatura no cambia en contraste con lo que ocurría en el diseño con una única masa central. En este último caso, la rigidez de la zona central debería ser mayor para obtener una mejora en los resultados.
- Del análisis de la no-linealidad en un puente de Wheatstone puede deducirse que para minimizar la no-linealidad es importante que las cuatro galgas activas presenten la misma sensibilidad. En el diseño considerado la sensibilidad de las resistencias centrales y las de los bordes se puede ajustar independientemente variando los parámetros L1 y L2, lo cual facilita una mejor compensación.

Las prestaciones típicas alcanzables con la estructura con una viga central se muestran en la

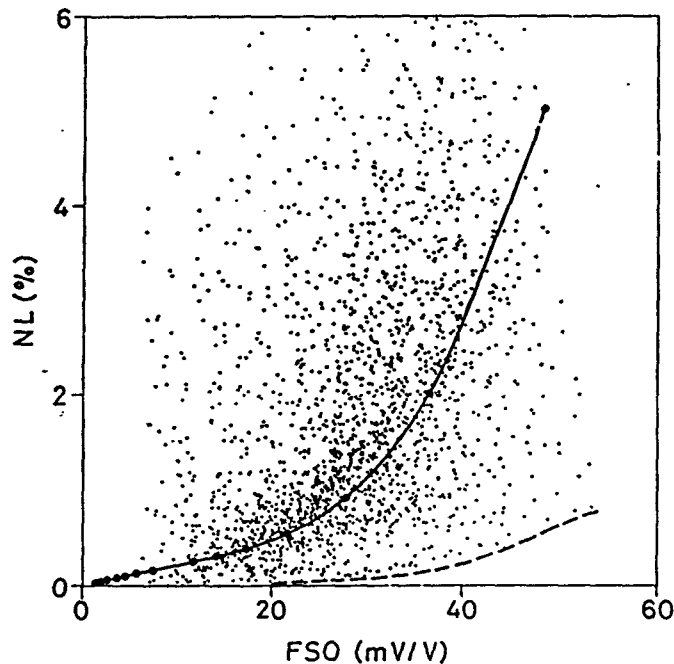


Fig. 10 Diagrama NL/FSO para un diafragma con "doble-isla".

figura 11. Obsérvese que este diseño difiere de los anteriormente presentados en la posición de las resistencias, ahora en la zona más gruesa. Por esta razón, una razón de grosores 20/5 lleva a sensibilidades muy bajas. En este diseño la razón de grosores se fijó a 15/5. Muy buenos resultados pueden alcanzarse para FSO inferiores a 16 mV/V, aunque hasta 25 mV/V la respuesta continúa siendo mejor que la de una membrana cuadrada. Respecto a otros diseños esta estructura presenta una ventaja: maximiza la sensibilidad de las resistencias centrales. Las simulaciones realizadas mostraron que en el resto de los diseños analizados los esfuerzos  $\sigma_x$  y  $\sigma_y$  en el centro del diafragma presentan el mismo signo, y en consecuencia se contrarrestan en virtud del diferente signo de los coeficientes piezorresistivos longitudinal y transversal. En cambio para la estructura con una viga central  $\sigma_x$  y  $\sigma_y$  son de signo opuesto: mientras  $\sigma_x$  es compresiva,  $\sigma_y$  es tensil (superficie superior de la membrana cuando la presión se aplica en esa misma superficie). Este diferente comportamiento se debe a la transmisión de esfuerzos desde la zona más delgada del diafragma a la viga central de la que de alguna manera estira dando lugar a esta diferencia en el signo.

Como hemos remarcado anteriormente, una de las ventajas de la tecnología presentada en el capítulo II radica en la posibilidad de dibujar las zonas más rígidas mediante fotolitografía sin restringirse a unos planos cristalinos determinados. Como ejemplo se han analizado los diseños e) y f) en la figura 6. A partir de la estructura con dos masas o con una viga central se deja que las zonas rígidas tomen formas trapezoidales. Para estas simulaciones solo dos parámetros se dejaron libres, manteniendo los otros fijos. En las figuras 12, 13 se muestra

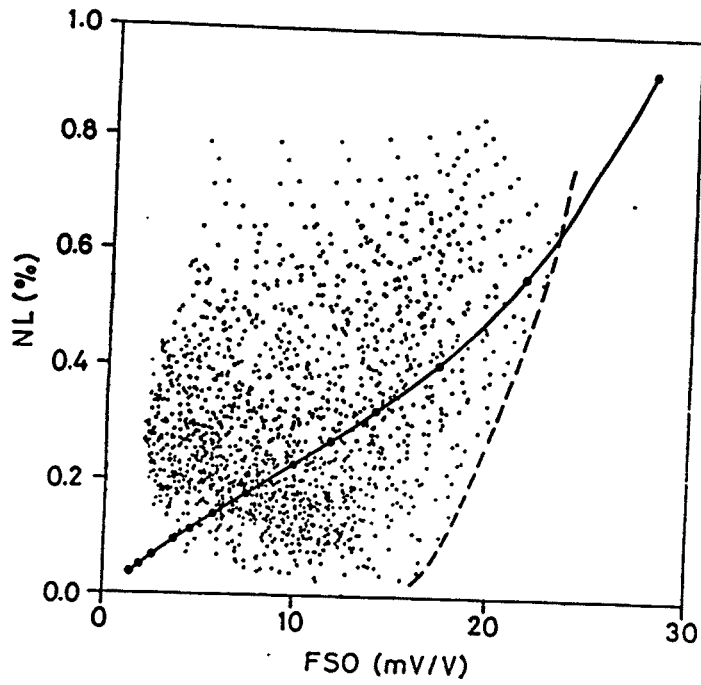


Fig. 11 Diagrama NL/FSO para la estructura con viga central.

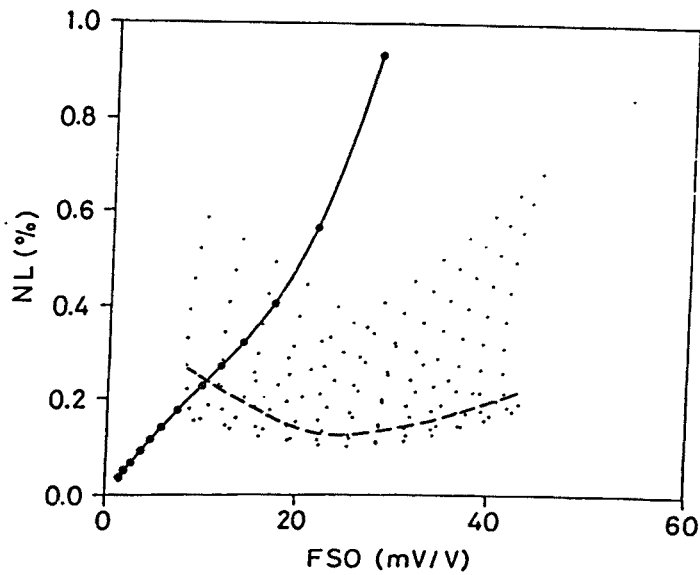


Fig. 12 Comparación entre las prestaciones de un sensor con estructura de "doble-isla" rectangular (línea discontinua), o "doble-isla" trapezoidal (puntos).

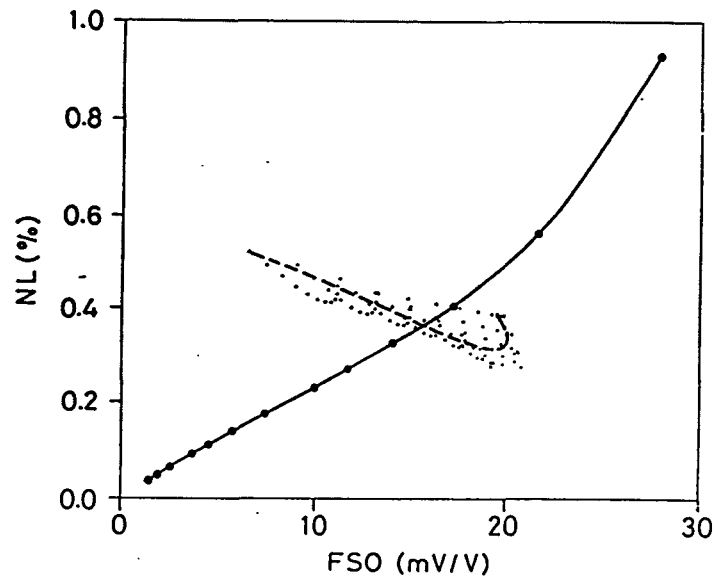


Fig. 13 Comparación entre las prestaciones de un sensor con estructura de viga central (línea discontinua), o con estructura mariposa (puntos).

una comparación entre el comportamiento de estos nuevos diseños y los previamente analizados ('diseños base'), donde se observa como su respuesta es ligeramente mejor.

## IV.5. Diseños seleccionados

Una vez analizados los resultados del trabajo de simulación se procedió a escoger los diseños que serían fabricados. En algunos casos los diseños seleccionados se modificaron ligeramente respecto a óptimos hallados por razones tecnológicas y para mejorar la tolerancia de cada diseño a pequeñas variaciones en los parámetros geométricos. Asimismo se fijó la razón de grosores a 20/5 con el objetivo de no multiplicar innecesariamente el número de diseños distintos. En total se tomaron 8 dispositivos distintos:

- 2 sensores de diseños estándar con dimensiones de membrana  $600 \times 600 \times 8 \mu\text{m}$ . Ambos diseños difieren en la distancia de las piezorresistencias al borde de la membrana: 15 (tipo 3) y  $20 \mu\text{m}$  (tipo 6).
- Un sensor con diafragma rectangular de grosor uniforme ( $5 \mu\text{m}$ ) con las resistencias sujetas a esfuerzo transversal (tipo 2).
- Dos sensores con viga central con distintas dimensiones geométricas (tipos 1 y 9).
- Un diseño con doble isla (tipo 4).

- Un diseño tipo Butterfly (tipo 7).
- Un diseño con doble isla trapezoidal (tipo 8).

Tabla I: Principales resultados de la simulación de las distintas estructuras

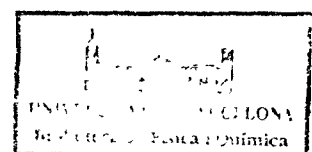
Estructura	Dimensiones	FSO(mV/V)	NL <sub>1</sub> (%)	NL <sub>2</sub> (%)
Estándar Cuadrada tipos 3,6	$h = 8 \mu\text{m}$	21.6	-0.20	0.56
Rectangular tipo 2	$h = 5.5 \mu\text{m}$	16.1	0.06	0.91
Doble-isla tipo 4	$h_1 = 5.5 \mu\text{m}$ $h_2 = 21 \mu\text{m}$ $A = 426 \mu\text{m}$ $L1 = 26 \mu\text{m}$ $L2 = 79 \mu\text{m}$ $W2 = 165 \mu\text{m}$	19.0	-0.06	0.20
Doble-isla Trapezoidal tipo 8 (1)	$W11 = 144 \mu\text{m}$ $W22 = 111 \mu\text{m}$	21.1	0.06	0.20
Viga-central tipo 9	$h_1 = 5.5 \mu\text{m}$ $h_2 = 21 \mu\text{m}$ $A = 461 \mu\text{m}$ $L1 = 80 \mu\text{m}$ $L2 = 26 \mu\text{m}$ $W1 = 30 \mu\text{m}$ $W2 = 103 \mu\text{m}$	9.5	0.03	0.50
Viga-central tipo 1 (2)	$h_1 = 5.5 \mu\text{m}$ $h_2 = 21 \mu\text{m}$ $A = 504 \mu\text{m}$ $L1 = 26 \mu\text{m}$ $L2 = 50 \mu\text{m}$ $W1 = 50 \mu\text{m}$ $W2 = 72 \mu\text{m}$	8.8	0.03	0.26
Mariposa tipo 7	$W21 = 54 \mu\text{m}$ $W22 = 198 \mu\text{m}$	12.5	0.01	0.34

NL<sub>1</sub> indica la no-linealidad de origen mecánico

NL<sub>2</sub> indica la no-linealidad total.

(1) Resto de parámetros con el mismo valor que en la estructura doble-isla.

(2) Resto de parámetros con el mismo valor que en la estructura con viga-central tipo 1.





En la tabla I se listan sus dimensiones características así como los resultados predichos por la simulación. Como puede observarse de los resultados mostrados aquellos diseños en los cuales las resistencias están colocadas sobre la viga gruesa dan lugar a menores sensibilidades. No obstante la diferencia se sitúa alrededor de un factor 2 cuando la diferencia de grosores pudiera hacer esperar una diferencia mucho mayor. Ello es debido a la transmisión antes citada de esfuerzos de la zona delgada del diafragma a la viga central.

Obsérvese como algunos diseños presentan una no-linealidad de origen mecánico extremadamente baja, y en consecuencia enfatizan la importancia de la no-linealidad del efecto piezorresistivo cuando se pretende disminuir al máximo la no-linealidad.

Como se señaló en la sección que describía el trabajo de simulación, se realizaron en éste una serie de aproximaciones para automatizar el proceso y disminuir el tiempo de cálculo. Veamos ahora con más detalle cual puede ser su efecto sobre el resultado final obtenido.

#### i) Resistencias puntuales en el borde del diafragma

Para evaluar el efecto de éste parámetro, se recalculó la sensibilidad de los sensores con un diseño estándar promediando las tensiones sobre el área ocupada por cada una de las galgas sensoras. Los resultados se muestran en la tabla II:

Tabla II: Sensibilidad de sensores con diafragma cuadrado para distintas aproximaciones

FSO (caso A)	FSO (caso B)	Aproximaciones
21.6 mV/V		A1
19.6 mV/V	18.2 mV/V	A2
16.2 mV/V	14.5 mV/V	A3

Caso A: resistencias a 15  $\mu\text{m}$  del borde.

Caso B: resistencias a 20  $\mu\text{m}$  del borde.

A1: Resistencias puntuales en el borde del diafragma.

A2: Resistencias puntuales a 20 o 15  $\mu\text{m}$  del borde del diafragma.

A3: Resistencias de tamaño finito (80 x 10  $\mu\text{m}$ ) a 20 o 15  $\mu\text{m}$  del borde del diafragma.

Como podemos ver la aproximación efectuada sobreestima la sensibilidad real del sensor. Este aspecto deberá ser tenido en cuenta en el momento de comparar con las características de los dispositivos fabricados.

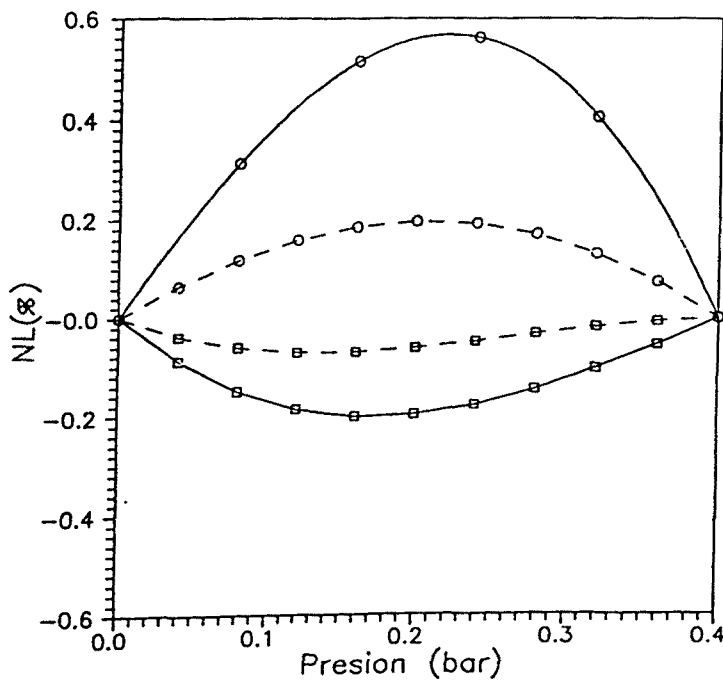
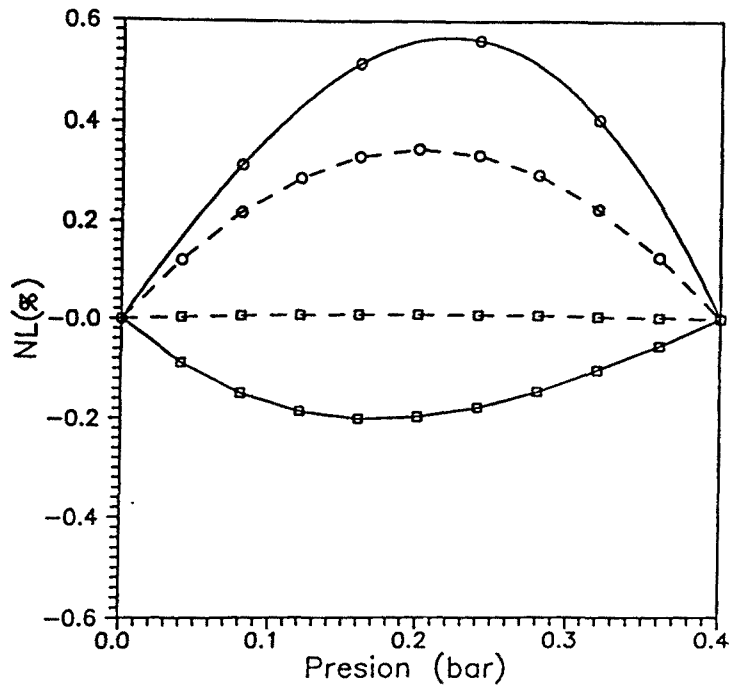


Fig. 14 No-linealidad mecánica ( $\square$ ) y total ( $\circ$ ) para las estructuras tipos 7 y 8 (línea discontinua). Comparación con un diafragma cuadrado uniforme (línea contnua).

*ii) No-linealidad*

Durante el trabajo de simulación se tomó que la no-linealidad máxima se producía en el centro de la característica  $V_{out}(P)$ . Para evaluar la bondad de esta aproximación se volvieron a calcular las característica  $V_{out}(P)$  de los diseños finales pero incluyendo más puntos. Como puede observarse en la figura 14, la no-linealidad presenta en todos los casos el máximo en una posición cercana a la posición central de la característica indicando que la aproximación realizada no introduce errores significativos.

## VI.6. Sumario

---

En este capítulo diversas cuestiones referentes al comportamiento de las estructuras mecánicas propias de los sensores de presión han sido analizadas. En primer lugar se ha evaluado los errores cometidos al simular el comportamiento mecánico de un diafragma uniforme suponiendo que el silicio es un material isótropo. Errores significativos aparecen en el cálculo de las deflexiones, si bien el cálculo de los esfuerzos es mucho más preciso.

En segundo lugar se ha considerado con detalle el problema de la no-linealidad en sensores de dimensiones reducidas. El uso de zonas rígidas con un grosor reducido en diferentes tipos de estructuras ha sido analizado y la validez como método para la reducción de la no-linealidad ha sido verificada. Mediante un método gráfico basado en un diagrama no-linealidad/salida a fondo de escala, las prestaciones de cada estructura han sido comparadas con las del diseño estándar basado en un diafragma uniforme. En función de los resultados un conjunto de geometrías han sido seleccionadas para la fabricación de dispositivos.

## IV.7. Referencias

---

1. T.Y. Bin, R.S. Huang  
*CAPPS: A thin diaphragm capacitive pressure sensor simulator*  
Sensors and Actuators, (1987).
2. O.C. Zienkiewicz  
*The Finite Element Method*  
McGraw-Hill, (1967).
3. H.N. Norton  
*Handbook of Transducers*  
Prentice Hall, London (1989).
4. K. Suzuki, T. Ishihara, M. Hirata, H. Tanigawa.  
*Non-linear analysis of a CMOS integrated Silicon Pressure Sensor*  
IEEE Trans. Electron Devices ED-34, 1260-1366, (1987).
5. M. Shimazoe, Y. Matsuka, A. Yasukawa, M. Tanabe  
*A special silicon diaphragm pressure with high output and high accuracy*  
Sensors and Actuators, 2, 275-282, (1982).
6. J. Binder, K. Becker, G. Ehrler  
*Silicon Pressure Sensors for the Range 2 KPa to 40 MPa*  
Siemens components, 2, 64-67, (1985).
7. J.R. Mallon, A.D. Kurtz  
*Transducers employing convoluted diaphragms*  
U.S. Patent 4 467 657, (1983).
8. H. Sandmaier, K. Kühl  
*Piezoresistive Low-Pressure Sensor with High Sensitivity and High Accuracy*  
Sensors and Actuators, A21-A23, 142-145, (1990).
9. H. Sandmaier  
*Non-linear Analytical Modelling of Bossed Diaphragms for Pressure Sensors*  
Sensors and Actuators A25-A27, 815-819 (1991).
10. L.B. Wilner  
*A Diffused Silicon Pressure Transducer with Stress Concentrated at the Transverse Gages*  
ISA, 23rd International Instrumentation Symposium, Las Vegas, NV, USA (1977).
11. R.M. Whittier  
*High Performance Miniaturized Piezoresistive Pressure Transducers*  
Proc. of the 1st Int. Conf. on Micro-Electro-Opto-Mechanical Systems and Components,  
Berlin, Alemania, Sept. 10-13, 587-592. Ed. H. Reichl. Springer Verlag (1990).
12. J.R. Mallon, J.R.F. Pourahmadi, K. Petersen, P. Barth, T. Vermeulen, J. Bryzek.  
*Low-Pressure Sensors Employing Bossed Diaphragms and Precision Etch-Stopping*  
Sensors and Actuators, A21-A23, 89-95, (1990).

13. M.H. Bao, L. Yu, Y. Wang  
*Micromachined Beam-diaphragm Structure improves Performances of Pressure Transducer Sensors and Actuators*, A21-A23, 137-141, (1990).
14. M.H. Bao, L. Yu, Y. Wang,  
*Stress Concentration Structure with Front Beam for Pressure Sensor Sensors and Actuators* A28, 105-112 (1991) .
15. X.P. Wu, M.F. Hu, J.Y. Shen, Q.H. Ma  
*A miniature piezoresistive catheter pressure sensor Sensors and Actuators*, A35, 197-201 (1993).
16. H.L. Chau, K.D. Wise  
*An Ultraminiature Solid-State Pressure Sensor for a Cardiovascular Catheter* IEEE Trans. Electron Dev., ED-35, 2355-2362, (1988).
17. M.J.S. Smith, L. Bowman, J.D. Meindl  
*Analysis, Design, and Performance of a Capacitive Pressure Sensor IC* IEEE Trans. Biomed. Eng. BME-33, 163-174, (1986).
18. B. Puers, A.V.D. Bossche, E. Peeters, W. Sansen  
*An Implantable Pressure Sensor for Use in Cardiology Sensors and Actuators*, A21-A23, 944-947, (1990).
19. M. Esashi, H. Komatsu, T. Matsuo, M. Takahashi, T. Takishima, K. Imabayashi, H. Ozawa  
*Fabrication of Catheter-Tip and Sidewall Miniature Pressure Sensors* IEEE Trans. Electron Dev. ED-29, 57-63, (1982).
20. *Structural Non-linearities Seminar*  
ANSYS Technical Documentation (1990).
21. *Design Optimization Seminar*  
ANSYS Technical Documentation (1990).
22. K. Matsuda, Y. Kanda, K. Yamamura, K. Suzuki  
*Nonlinearity of Piezoresistance Effect in p- and n-Type Silicon Sensors and Actuators*, A21-A23, 45-48, (1990).
23. S. Marco, J. Samitier, O. Ruiz, J. Esteve, J.R. Morante  
*Analysis of Non-Linearity in High Sensitivity Piezoresistive Pressure Sensors*  
Aceptado en Sensors and Actuators.