

Capítulo 4

Caracterización de las capas de $\alpha\text{-SiO}_x$ tratadas

4.1 Introducción

Desafortunadamente, durante el proceso PECVD de depósito del óxido de silicio se introducen impurezas en la red $\alpha\text{-SiO}_x$, generalmente en forma de hidrógeno, de nitrógeno y grupos OH [1, 2, 3, 4]. Estas impurezas dan lugar a bandas de absorción que aumentan las pérdidas de transmisión (ver figura 2.18). Estos problemas se pueden evitar mediante un recocido de las películas a temperaturas elevadas para facilitar la efusión de las impurezas. Sin embargo, otros procesos físicos y químicos tienen lugar durante el recocido tales como difusión y oxidación, así como el cambio estructural [5, 6, 7], e introducen cambios en las características de la película. Una posible solución a estos problemas es el “*tratamiento térmico rápido*” (RTA) [8], empleado extensamente en tecnología de circuitos integrados. Su ventaja principal es el corto tiempo del proceso.

En este capítulo se analiza las variaciones que experimentan las capas de sub-óxido de silicio crecidas por PECVD, tras someterlas a un tratamiento en atmósfera húmeda y al recocido. También, se analiza la influencia del tratamiento térmico rápido (RTA) a $950\text{ }^\circ\text{C}$ y durante 30 segundos sobre el índice de refracción, la composición y las propiedades estructurales y mecánicas de estas capas con distintos valores de la relación de flujos de los gases precursores.

4.2 Efectos de la humedad

La presencia de enlaces y impurezas causa un cambio en las características de la película del subóxido de silicio depositado por PECVD con el tiempo del envejecimiento en atmósfera húmeda. Las condiciones del depósito y el tratamiento de las muestras estudiadas en este apartado vienen dadas en las tablas 4.1 y 4.2, respectivamente.

Oblea	R	SiH ₄ (sccm)	N ₂ O (sccm)	T _d (°C)	Presión (mTorr)	Potencia (W)
AJ38	110	1	110	200	200	30
AJ39	110	1	110	250	200	30
AJ40	110	1	110	300	200	30
AJ41	110	1	110	350	200	30

Tabla 4.1: Condiciones de depósito de subóxidos de silicio sobre un substrato de silicio, $F_t = 111$.

Oblea	R	T _d (°C)	Tratamiento
AJ38	110	200	Humedad (7 Días)
			Humedad (30 Días)
AJ39	110	250	Humedad (7 Días)
			Humedad (30 Días)
AJ40	110	300	Humedad (7 Días)
			Humedad (30 Días)
AJ41	110	350	Humedad (7 Días)
			Humedad (30 Días)

Tabla 4.2: Condiciones de humedad de las muestras estudiadas, $F_t = 111$.

Se ha variado la temperatura del depósito entre 200 y 350 °C. La relación de flujos R, la presión en la cámara y la densidad de potencia de radiofrecuencia se mantienen fijos durante el proceso de depósito a los valores 110, 200 *mTorr* y 30 *watt* de potencia directa, respectivamente. El tratamiento con humedad se realizó poniendo las muestras en un recipiente cerrado que contiene agua, durante 7 días. Se procede a realizar las medidas correspondientes y las muestras se vuelven a introducir en el

recipiente durante un periodo de 30 días. Se han observado efectos del envejecimiento sobre las frecuencias características del enlace Si-O y de las impurezas que contienen estas películas.

La figura 4.1 muestra la posición del modo Si-O-Si stretching en función del envejecimiento de las películas en atmósfera húmeda para las películas depositadas a cuatro temperaturas diferentes y a una relación de flujos de $R = 110$. Con el aumento de tiempo del envejecimiento, la frecuencia del modo de stretching del enlace Si-O se desplaza hacia frecuencias más altas en el caso en que la temperatura de depósito sea inferior a $250\text{ }^{\circ}\text{C}$, mientras que en las depositadas a temperaturas superiores a $300\text{ }^{\circ}\text{C}$ no se aprecia ningún corrimiento en frecuencia.

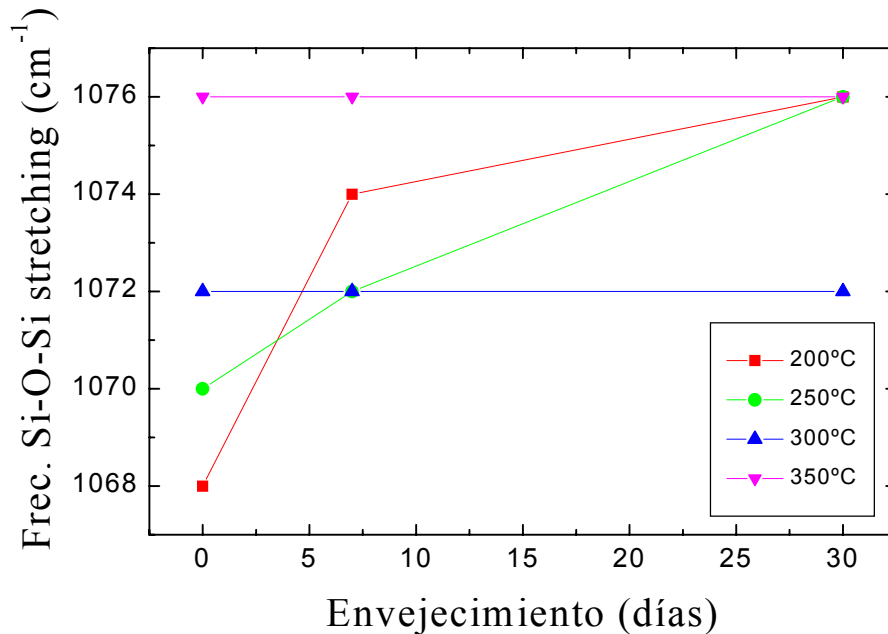


Figura 4.1: Variación de la frecuencia del Si-O-Si stretching en función del tiempo de envejecimiento de las películas depositadas a diferentes temperaturas.

Por lo que se refiere a la absorción de la banda de Si-OH, Pliskin [9, 10] ha demostrado que se ensancha con el envejecimiento. Las figuras 4.2 y 4.3 muestran las bandas del silanol en las películas depositadas a cuatro temperaturas diferentes y en caso de que se hayan sometido a una atmósfera húmeda.

Nuestro estudio confirma que, en atmósfera húmeda, sólo la intensidad de la banda

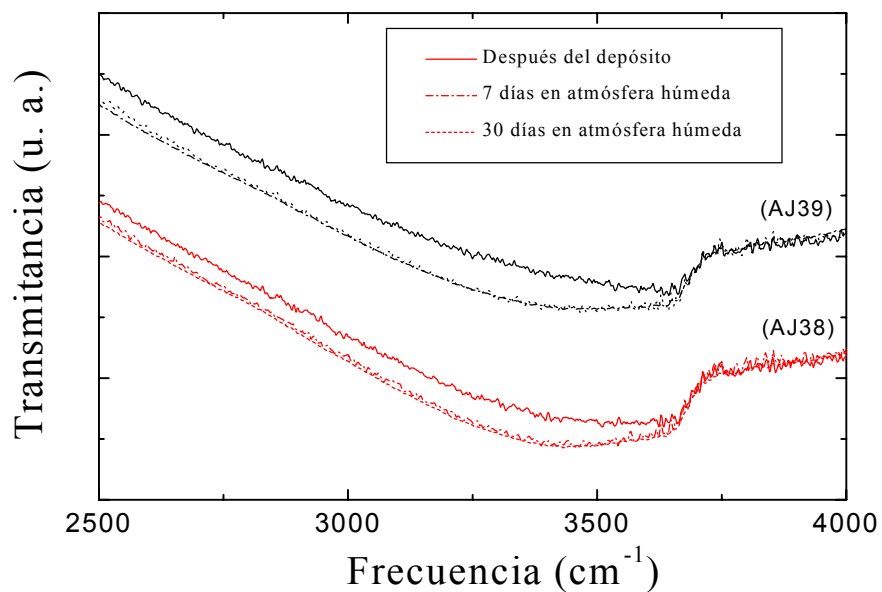


Figura 4.2: Cambio de la intensidad de la banda del silanol con el envejecimiento de la película del subóxido de silicio en atmósfera húmeda depositada a 200 y 250°C.

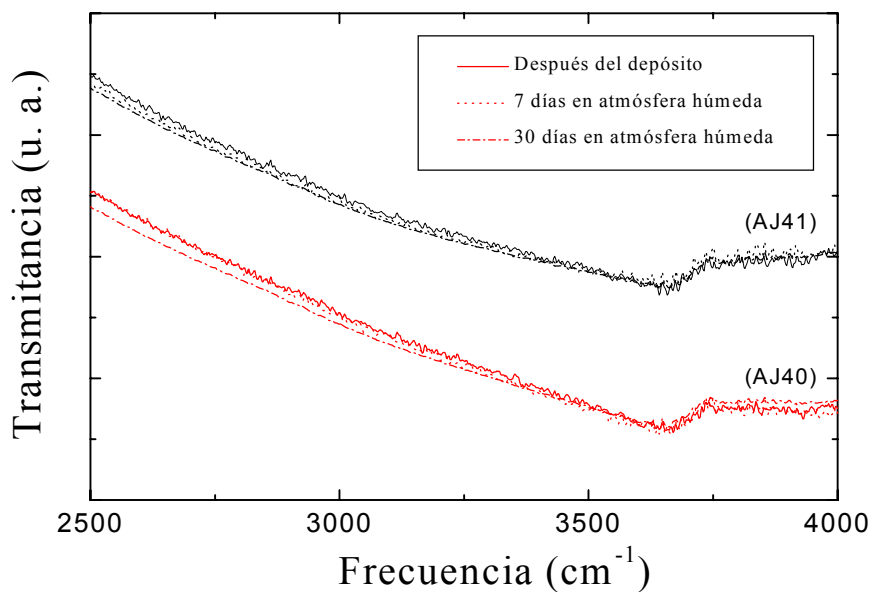


Figura 4.3: Cambio de la intensidad de la banda del silanol con el envejecimiento de la película del subóxido de silicio en atmósfera húmeda depositada a 300 y 350°C.

de Si-OH en la región de frecuencia más baja ($\sim 3400 \text{ cm}^{-1}$) aumenta. Estos cambios del silanol fueron observados claramente en las películas envejecidas que tenían una concentración más alta de tipo Si-OH primeros vecinos. Así pues, la concentración aislada de Si-OH no cambia, mientras que la acumulación del Si-OH tipo primeros vecinos aumenta con el tiempo de envejecimiento. Para temperaturas de depósito inferiores a $250 \text{ }^\circ\text{C}$, el desplazamiento del pico correspondiente al Si-O-Si stretching a frecuencias más altas se relaciona con el aumento de la concentración del enlace Si-OH tipo primeros vecinos y con el aumento del tiempo de envejecimiento. Esto es debido al hecho de que la parte correspondiente a frecuencias más bajas está asociada a los grupos Si-OH aislados, y durante el envejecimiento estos enlaces aislados se hacen más numerosos en atmósfera húmeda, que los convierte en grupos Si-OH primeros vecinos.

Además, a temperaturas más bajas ($\leq 250 \text{ }^\circ\text{C}$), con el tiempo de envejecimiento en atmósfera húmeda, el pico de Si-OH ($3300\text{-}3700 \text{ cm}^{-1}$) se ensancha en el intervalo de frecuencias y su intensidad aumenta. Se observa claramente que cuanto más baja es la temperatura del depósito, más ancha y más intensa se convierte la banda de Si-OH con el aumento de tiempo del envejecimiento en atmósfera húmeda.

Las películas del óxido depositadas a temperaturas más altas presentan generalmente densidades más bajas de Si-OH [11, 12], y nuestras películas muestran un comportamiento similar para temperaturas de depósito $T_d \geq 300 \text{ }^\circ\text{C}$. Además, estas películas no se ven afectadas con el tiempo de envejecimiento en atmósfera húmeda.

Los datos de FTIR muestran que cuanto más baja es la temperatura del depósito, tanto más alta es la concentración del enlace Si-OH primeros vecinos en las películas depositadas. Y para disminuir esta concentración se ha pensado en un tratamiento con recocido, que nos permita romper los enlaces Si-OH.

4.3 Efectos del recocido

A fin de ver la influencia que tiene el recocido sobre los enlaces Si-OH además del agua, incorporados en las capas depositadas por PECVD, hemos estudiado en este

apartado los espectros IR, obtenidos para dos valores de temperatura del recocido: 200 y 350 °C. Los resultados obtenidos permiten la caracterización de las capas depositadas y, por tanto, el estudio de la variación del contenido de agua antes y después del recocido.

Las condiciones del tratamiento de todas las muestras estudiadas en este apartado vienen dadas por la tabla 4.3. Todas estas muestras se han recocido a 200 °C, además la AJ37 se ha vuelto a recocer a una temperatura de 350 °C.

Oblea	R	T _d (°C)	Tratamiento
AJ37	55	200	Recocido a 200°C
			Recocido a 350°C
AJ38	110	200	Recocido a 200°C
AJ39	110	250	Recocido a 200°C
AJ40	110	300	Recocido a 200°C
AJ41	110	350	Recocido a 200°C

Tabla 4.3: Condiciones del tratamiento de las muestras estudiadas

4.3.1 Efecto del recocido después del depósito

Las figuras 4.4-4.7 muestran los espectros de transmitancia por FTIR de las películas del subóxido de silicio depositadas a cuatro temperaturas diferentes y una relación de flujos R= 110. Se observa que después del recocido a 200 °C, las películas depositadas a una temperatura del depósito inferior a 250 °C tienen una banda de Si-OH más estrecha en la región de frecuencias más bajas ($\sim 3400 \text{ cm}^{-1}$) y relacionada con los grupos Si-OH primeros vecinos o agua, mientras que para las películas depositadas a temperaturas superiores a 300 °C, no se nota ningún cambio.

En la figura 4.8 observamos que para relaciones de flujo altas, R= 55, y después del recocido a 350 °C, se observa un cierto cambio en la banda de absorción Si-OH que se vuelve más estrecha y menos intensa en las dos regiones de alta y baja frecuencia, eso significa que a temperaturas de recocido superiores a 350 °C, además de la eliminación del agua, se puede llegar a disminuir el número de grupos Si-OH aislados.

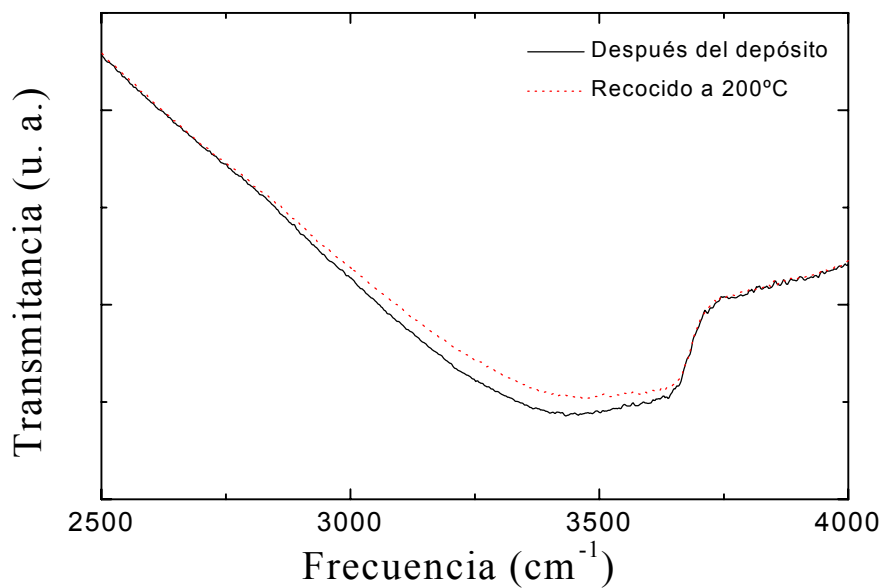


Figura 4.4: Espectros de transmitancia por FTIR del subóxido de silicio antes y después del recocido a 200°C de la muestra AJ38 $T_d = 200^\circ C$.

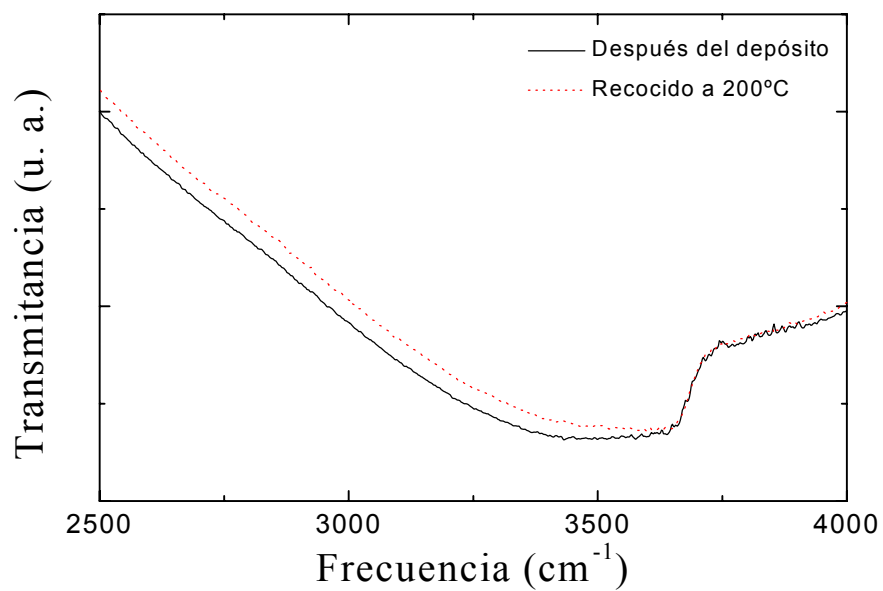


Figura 4.5: Espectros de transmitancia por FTIR del subóxido de silicio antes y después del recocido a 200°C de la muestra AJ39, $T_d = 250^\circ C$.

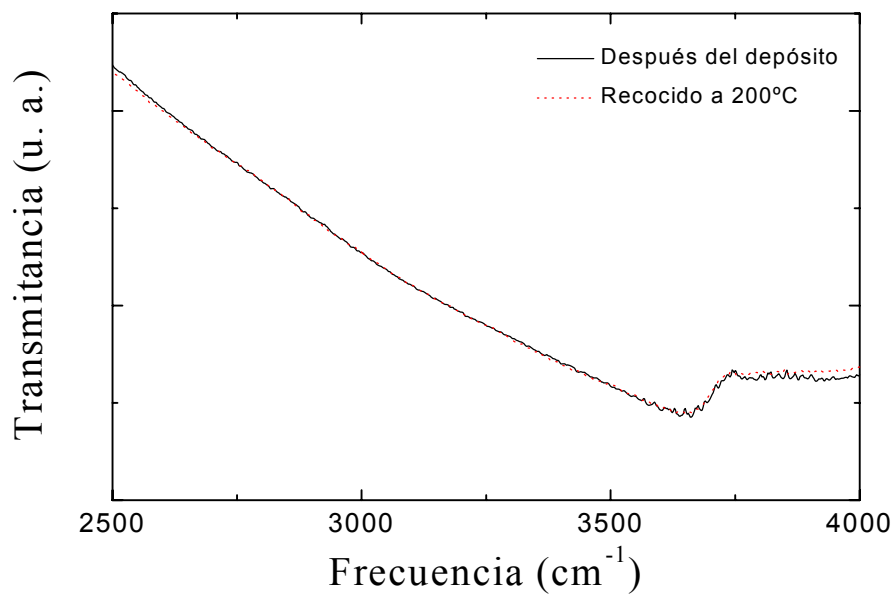


Figura 4.6: Espectros de transmitancia por FTIR del subóxido de silicio antes y después del recocido a 200°C de la muestra AJ40, $T_d = 300^\circ C$.

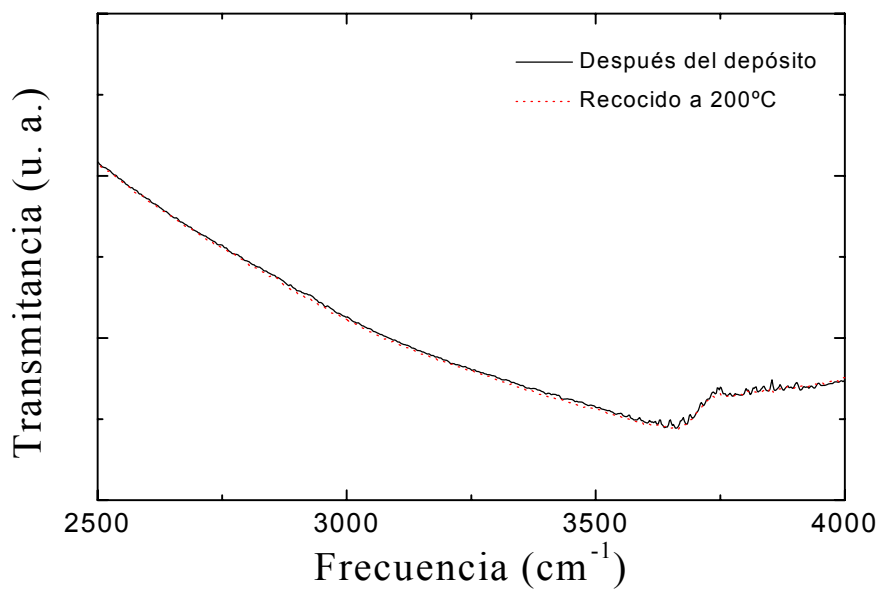


Figura 4.7: Espectros de transmitancia por FTIR del subóxido de silicio antes y después del recocido a 200°C de la muestra AJ41, $T_d = 350^\circ C$.

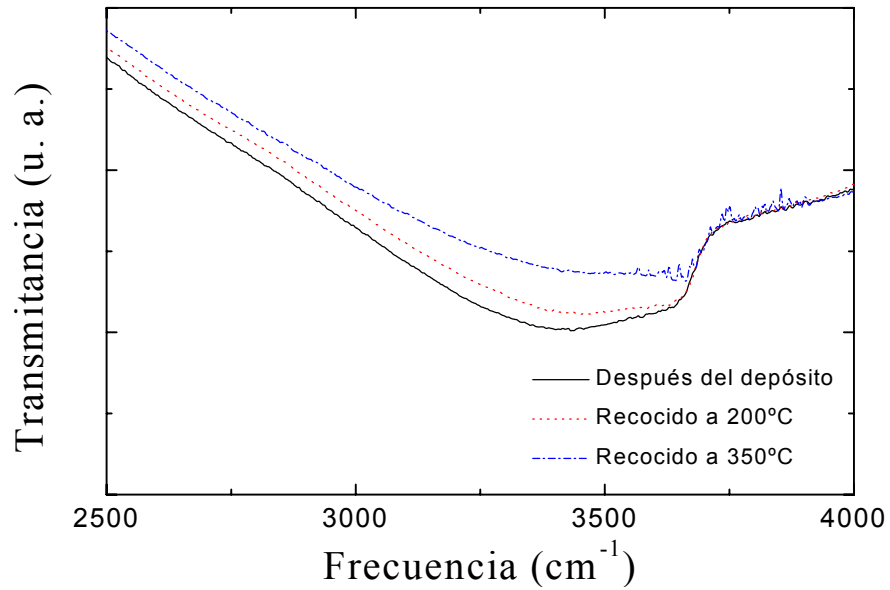


Figura 4.8: Espectros de transmitancia por FTIR del subóxido de silicio antes y después del recocido a 200 y 350°C de la muestra AJ37, $T_d = 200^\circ C$.

Así, podemos concluir que para las películas depositadas a temperaturas $\leq 250^\circ C$, se ha observado una reducción en la intensidad de la banda Si-OH primeros vecinos a una temperatura de recocido de 200 °C y además, se observa una reducción considerable en la intensidad de los grupos Si-OH aislados en el caso de proceder a un recocido a 350 °C.

4.3.2 Efecto del recocido después del envejecimiento en atmósfera húmeda

Las condiciones del tratamiento de todas las muestras estudiadas vienen dadas por la tabla 4.4.

Oblea	R	$T_d(^{\circ}C)$	Tratamiento
AJ1	5.5	300	Humedad (7Días) Recocido a 200°C
AJ2	9.8	300	Humedad (7Días) Recocido a 200°C
AJ3	15.2	300	Humedad (7Días) Recocido a 200°C
AJ6	20.7	200	Humedad (7Días) Recocido a 130°C Recocido a 180°C Recocido a 200°C
AJ7	20.7	300	Humedad (7Días) Recocido a 130°C Recocido a 180°C Recocido a 200°C

Tabla 4.4: Condiciones del tratamiento de las muestras estudiadas

En las figuras 4.9-4.11 se ha observado que la intensidad de los picos relacionados con las impurezas Si-H y N-H es insensible al tratamiento con humedad o al recocido a 200 °C después de la humedad.

En las figuras 4.12 y 4.13 se comparan los cambios en la banda Si-OH durante el recocido a 200 °C después de haber dejado las muestras 7 días en atmósfera húmeda.

Se observa que en las muestras AJ6 y AJ7 correspondientes a la relación de flujo R= 20.7 y depositadas por una temperatura de depósito a 200 °C y 300 °C, respectivamente, y tratadas anteriormente con húmedad, la banda Si-OH no sufre ningún cambio después del recocido a 200 °C.

Así, podemos concluir que después del recocido a 200 °C de las obleas de SiO_x/Si, las impurezas Si-H, N-H y Si-OH o agua no sufren ningún cambio, mientras que para un recocido a 350 °C si que se puede apreciar una reducción considerable en la intensidad de los grupos Si-OH. En este contexto, y para romper o eliminar todas las impurezas involucradas en las capas del subóxido de silicio, hemos procedido a un

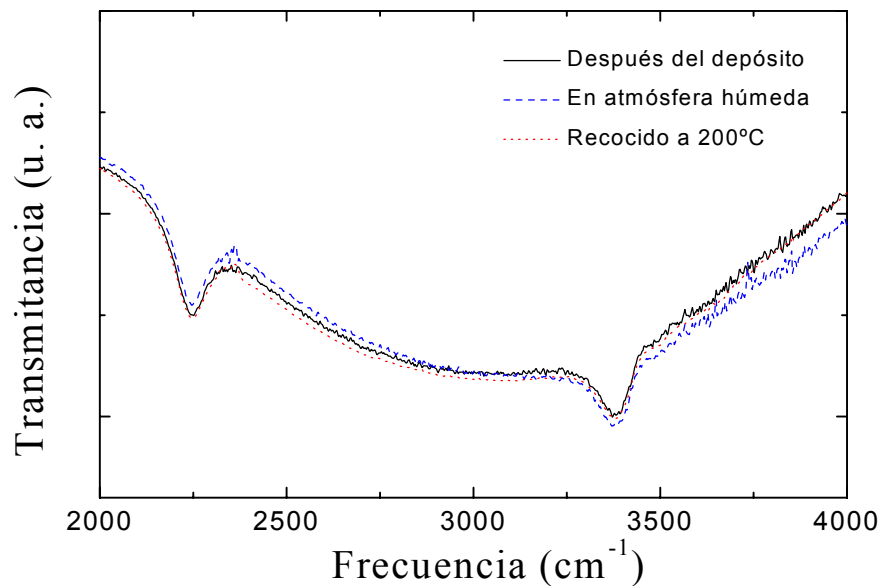


Figura 4.9: Espectros de transmitancia por FTIR del subóxido de silicio antes y después del recocido a 200°C de la muestra AJ1.

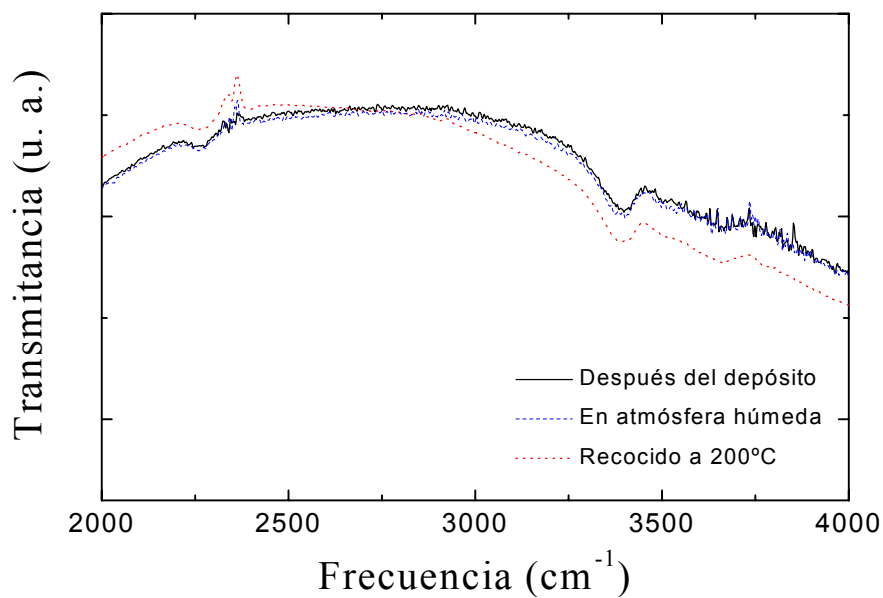


Figura 4.10: Espectros de transmitancia por FTIR del subóxido de silicio antes y después del recocido a 200°C de la muestra AJ2.

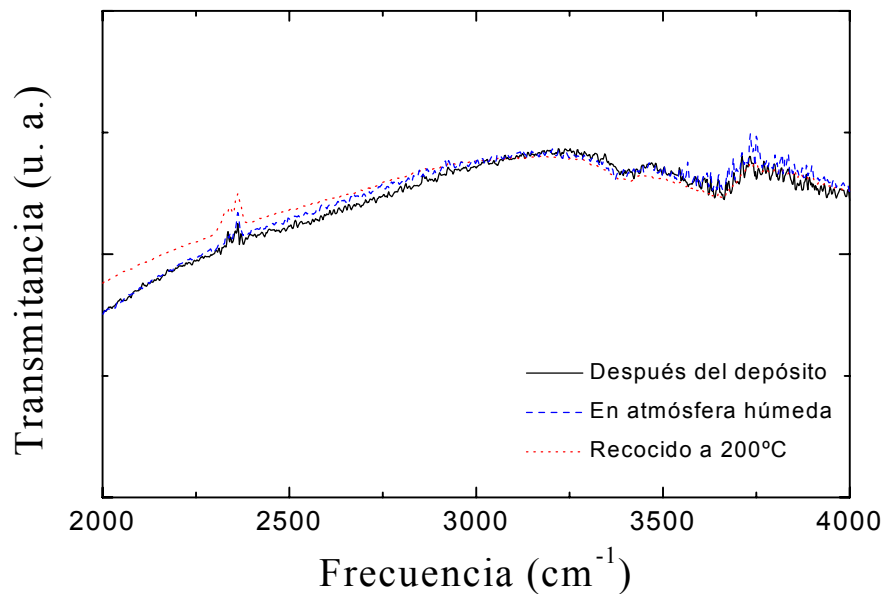


Figura 4.11: Espectros de transmitancia por FTIR del subóxido de silicio antes y después del recocido a 200°C de la muestra AJ3.

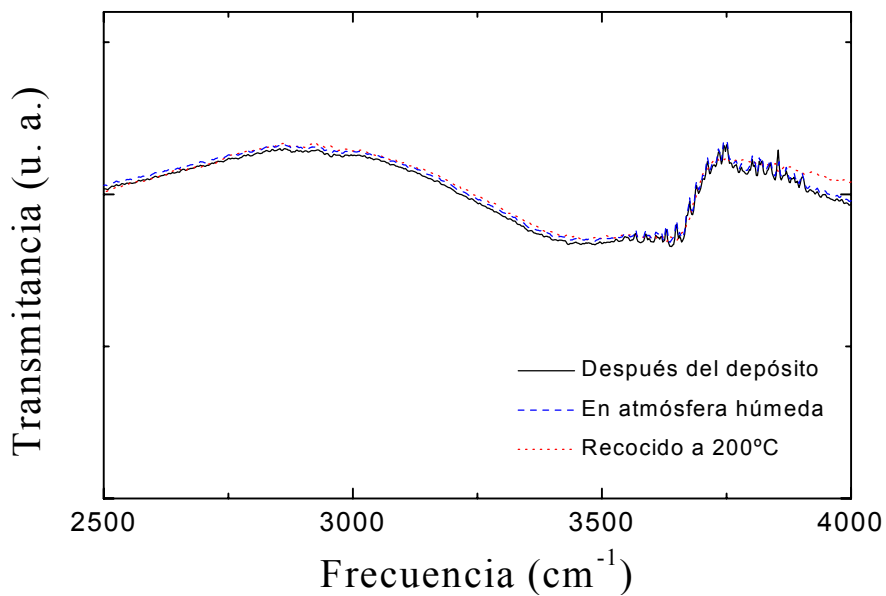


Figura 4.12: Espectros de transmitancia por FTIR del subóxido de silicio antes y después del recocido a 200°C de la muestra AJ6.

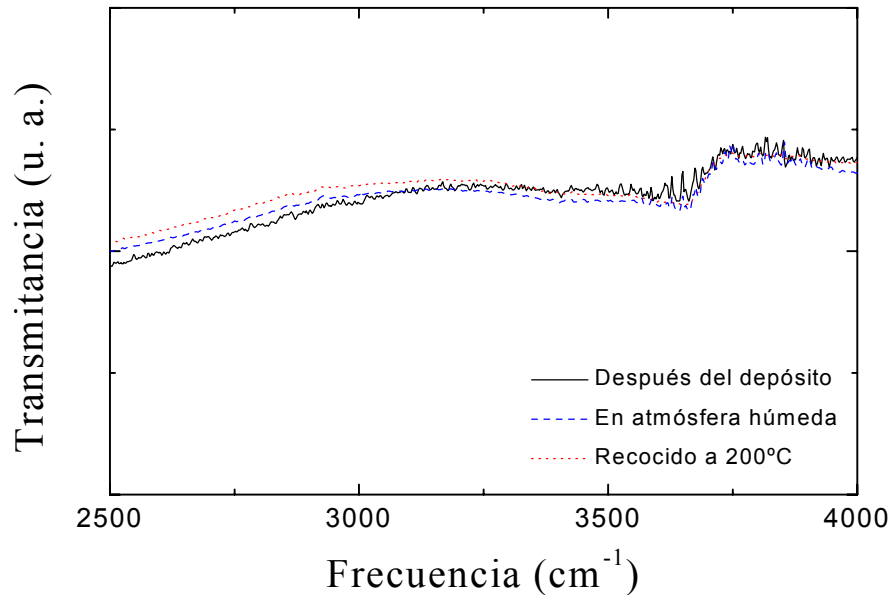


Figura 4.13: Espectros de transmitancia por FTIR del subóxido de silicio antes y después del recocido a 200°C de la muestra AJ7.

tratamiento con RTA a 950 °C y que vamos a presentar en el apartado siguiente.

4.4 Efectos del tratamiento térmico a alta temperatura (RTA)

La componente intrínseca de las tensiones mecánicas se ve influenciada por el contenido de las impurezas en las capas de SiO_x depositadas por PECVD. Para disminuir el contenido de estas impurezas, muestras obtenidas a diferentes relaciones de flujos han sido sometidas a un tratamiento térmico rápido (RTA: rapid thermal annealing), en un sistema comercial ADAX-1000, a 950 °C en atmósfera de nitrógeno. La rampa de calentamiento utilizada ha sido de 32 °C/s, y el tiempo de recocido de 30 segundos. El enfriamiento tiene lugar cortando la alimentación del sistema calefactor.

Las condiciones del depósito de las muestras estudiadas y tratadas con un tratamiento térmico a alta temperatura (RTA a 950 °C) en este apartado vienen dadas en la tabla 4.5, el flujo del protóxido de nitrógeno (N₂O), la temperatura del depósito, la

presión en la cámara, la densidad de potencia de radiofrecuencia se mantienen fijos durante el proceso de depósito a los valores 110, 300 °C, 200 *mTorr*, 30 *watt* de potencia directa, respectivamente.

Oblea	N ₂ O (sccm)	SiH ₄ (sccm)	R
AJ12	110	1	110
AJ13	110	2	55
AJ14	110	5	22
AJ15	110	7	15.9
AJ16	110	12	9.7
AJ17	110	20	5.5
AJ18	110	50	2.2

Tabla 4.5: Condiciones de depósito de las muestras estudiadas.

Los efectos del RTA se han estudiado en cuanto al cambio que produce sobre el índice de refracción, contenido de impurezas y tensiones mecánicas.

La figura 4.14 presenta los cambios del índice de refracción con el cociente de flujos R, en las capas depositadas y en los depósitos tratados por RTA. En el caso de las capas directamente depositadas se observa que para relaciones de flujos superiores a 15 el índice de refracción es constante y toma un valor de 1.46, similar al del óxido térmico, mientras que para valores de R inferiores a 15, el índice de refracción aumenta al disminuir R, observándose una fuerte dependencia de n con R para relaciones de flujo inferiores a 5.5. Esta evolución del índice de refracción está estrechamente relacionada con la variación de la composición de los depósitos SiO_x en función de la relación de flujos de los gases precursores. Después del tratamiento térmico, el índice de refracción se mantiene prácticamente invariable en caso de depósitos obtenidos con valores de R superiores a 9 (en particular, n se mantiene en un valor de 1.485 para R= 9.2). Sin embargo, para relaciones de flujo inferiores a 5.5, el índice de refracción aumenta progresivamente, obteniéndose un aumento espectacular de casi 0.5 en el caso de R= 2.2.

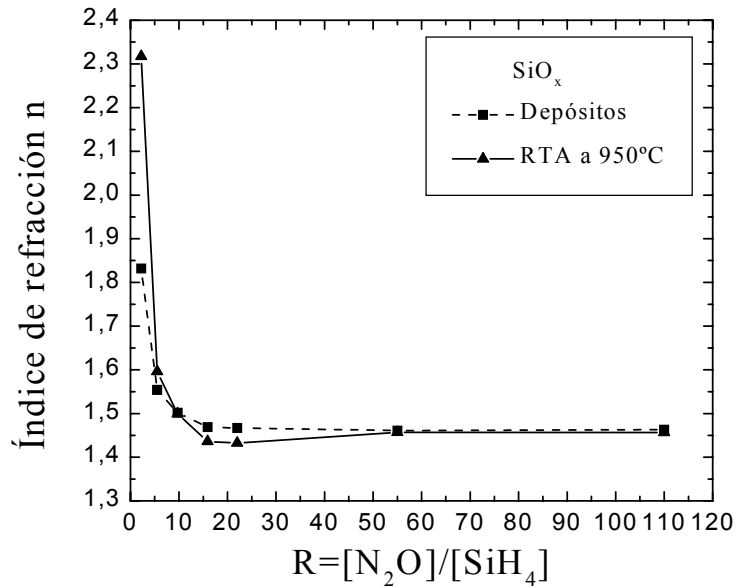


Figura 4.14: Variación del índice de refracción con la relación de flujos R.

La figura 4.15(a) muestra la evolución de los espectros IR de capas obtenidas con valores de R igual o inferiores a 15.7, juntamente con el espectro IR del óxido térmico, en el intervalo de frecuencias $400 - 2000 \text{ cm}^{-1}$. Los espectros medidos para valores de R superiores no se incluyen ya que en esta región espectral, son prácticamente idénticos al obtenido para $R = 15.7$. Nótese que los espectros correspondientes al óxido térmico y al caso de $R = 15.7$ son muy similares, mostrando claramente los modos Si-O de rocking, bending y stretching junto con la espalda a alta energía en el modo stretching, correspondiente a vibraciones inducidas por desorden. Las diferencias fundamentales entre estos espectros son el corrimiento hacia bajas frecuencias de la vibración stretching, la disminución relativa de la intensidad de los modos de rocking y bending respecto del modo de stretching y el aumento de las anchuras de todos los modos de vibración, en capas depositadas respecto del óxido térmico.

Al disminuir el valor de R, varios son los cambios que se producen. Por un lado, se

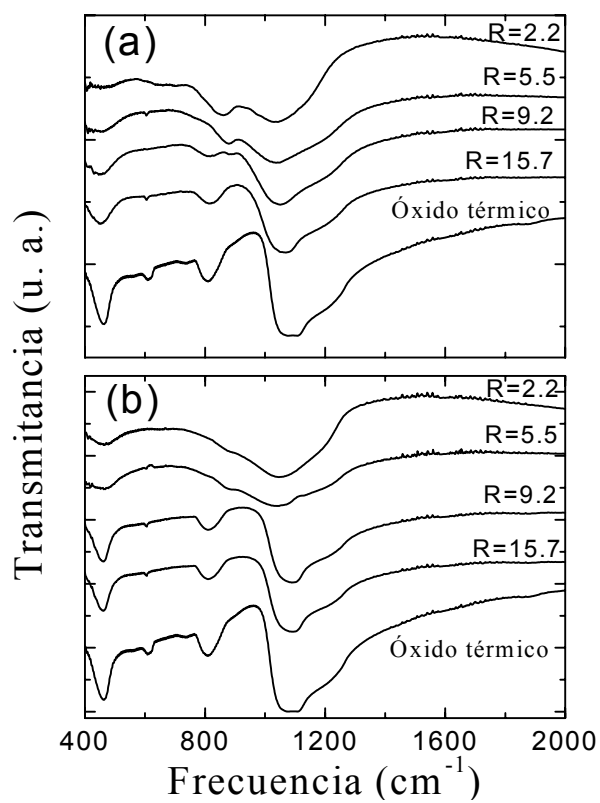


Figura 4.15: Espectros FTIR para distintos valores de R, (a) de las capas depositadas, (b) de las mismas capas después del RTA a 950°C.

aprecia una progresiva disminución de la frecuencia del modo stretching, desaparece rápidamente el modo bending y se mantiene una banda de poca intensidad a la frecuencia del modo rocking. Por otro lado, aparece a 890 cm^{-1} una nueva banda de absorción cuya intensidad aumenta al disminuir R, característica de la vibración bending del enlace Si-H. Un estudio detallado del espectro obtenido para $R= 2.2$ muestra la presencia de picos de absorción a $634, 790, 864, 982\text{ cm}^{-1}$, asociados a grupos $O_n\text{Si-H}$ [3].

Después del tratamiento térmico por RTA, ver figura 4.15(b), todos los espectros muestran un aumento en frecuencia del modo stretching y una disminución de la anchura de bandas. En particular, los espectros de vibración para R superiores a 9 son prácticamente idénticos y se asemejan al espectro del óxido térmico. No se aprecia traza alguna de enlaces de Si con impurezas. Sin embargo, para valores de R de 5.5 y 2.2, los espectros muestran que pese a haberse producido una fuerte efusión de impurezas de H, el tratamiento no las elimina completamente. Además, la pasivación de enlaces de Si con H no permite que se reordenen los enlaces Si-O.

Es interesante notar que el desplazamiento del modo stretching hacia las altas frecuencias en una cantidad de 17 cm^{-1} (caso de $R= 2.2$) y 9 cm^{-1} (caso de $R= 5.5$), en comparación con los valores medidos en las muestras depositadas, sugiere que el tratamiento térmico induce una reordenación que aumenta el valor de x y, por tanto, aumenta su estequiometría. Sin embargo, si nos atenemos a los valores medidos del índice de refracción, su aumento posterior al tratamiento térmico sugiere lo contrario. Una posible explicación a esta aparente contradicción, sería considerar que para bajos valores de R la RTA provoca la formación de clusters de Si.

Tal como se ha dicho, las capas de subóxido crecidas por PECVD incorporan en general cantidades no despreciables de impurezas tales como el hidrógeno y el nitrógeno que aparecen en forma de enlaces Si-H, N-H, y Si-OH. El número de impurezas se reduce aumentando la temperatura de depósito, razón por la cual los depósitos se han realizado a la temperatura de $300\text{ }^\circ\text{C}$.

La figura 4.16(a) muestra los espectros de absorción de los cuatro depósitos con

valores inferiores de R en la región de la vibración stretching del enlace Si-H, alrededor de 2200 cm^{-1} .

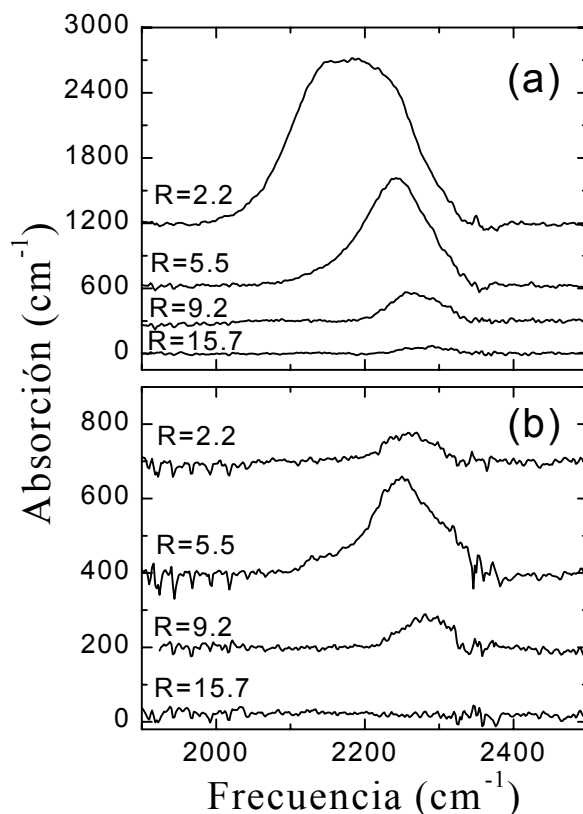


Figura 4.16: Espectros de absorción de la banda Si-H stretching para diferentes valores de R, (a) de las capas depositadas, (b) de las mismas capas después del RTA a 950°C .

En esta figura se observa claramente que la concentración de enlaces Si-H es mayor para las muestras con valores de R pequeños (mayor contenido relativo de silicio). La capa con $R=2.2$ muestra una estructura muy ancha que abarca desde 2000 a 2300 cm^{-1} . La frecuencia de la vibración stretching del enlace Si-H, es distinta dependiendo del entorno atómico al que está unido el enlace [13, 6]. Ello implica que en el espectro de absorción, la señal resultante sea ancha. La deconvolución de la curva de absorción en lorentzianas, da la contribución de tres frecuencias distintas a 2148 , 2200 y 2256 cm^{-1} de intensidad comparable y que se corresponden a los entornos $\text{OSi}_2\text{-SiH}$, $\text{O}_2\text{Si-SiH}$ y $\text{O}_3\text{-SiH}$ respectivamente. La capa con $R=5.5$ presenta may-

oritariamente el entorno $O_3\text{-SiH}$ con una pequeña contribución (12%) del entorno $O_2\text{Si-SiH}$. Para valores superiores de R, muestras con mayor contenido de oxígeno, sólo aparecen entornos en los cuales el átomo de Si está rodeado de tres átomos de oxígeno. Una estimación aproximada del contenido de enlaces Si-H de acuerdo con el método descrito por Brodsky y Maley [14, 15] da 44 át% y 20 át% en las muestras con relaciones de flujo 2.2 y 5.5, respectivamente. La evolución del contenido de hidrogeno enlazado con R queda también reflejado en la variación de la intensidad relativa del modo bending del enlace Si-H a 890 cm^{-1} observada en la figura 4.15(a).

En la figura 4.17 se muestran los espectros de absorción centrados alrededor de 3370 cm^{-1} y relacionados con el modo stretching del enlace N-H de las muestras con menores valores R. La concentración de enlaces N-H varía entre 2 at% para R= 2.2 y 12 at% para R= 5.5. El contenido de impurezas de nitrógeno es muy pequeño para R= 2.2, ya que para valores tan reducidos de R la concentración relativa de nitrógeno en la mezcla de gases precursores es muy pequeña. La concentración de enlaces N-H es máxima para R= 5.5 y disminuye al aumentar el contenido de oxígeno en las capas, hasta encontrarse por debajo de los límites de detección para valores de R superiores a 20.

El contenido de impurezas en las capas depositadas se reduce por efusión mediante tratamientos térmicos posteriores. Estos tratamientos originan la disociación de los enlaces Si-H y la pérdida de importantes cantidades de hidrógeno lo cual afecta a las propiedades estructurales, ópticas y mecánicas de las capas. Después del recocido, el contenido de enlaces Si-H disminuye considerablemente tal como se observa en los espectros de absorción que se muestran en la figura 4.16(b). En particular, para los dos valores menores de R, las bandas a 2148 y 2200 cm^{-1} han desaparecido prácticamente, mientras que la banda a 2250 cm^{-1} todavía persiste después del recocido a $950\text{ }^\circ\text{C}$ durante 30 segundos. Este hecho puede interpretarse teniendo en cuenta que los átomos de hidrógeno en las configuraciones $O\text{Si}_2\text{-SiH}$ y $O_2\text{Si-SiH}$ son menos estables que en la configuración $O_3\text{-SiH}$, de acuerdo con la mayor electronegatividad debida a los tres átomos de oxígeno. Ello explica también que la capa con R= 5.5 sea la que mayor número de enlaces retiene después del recocido, ya que originariamente contiene una mayor proporción de hidrógeno ligado a un entorno de tres átomos de

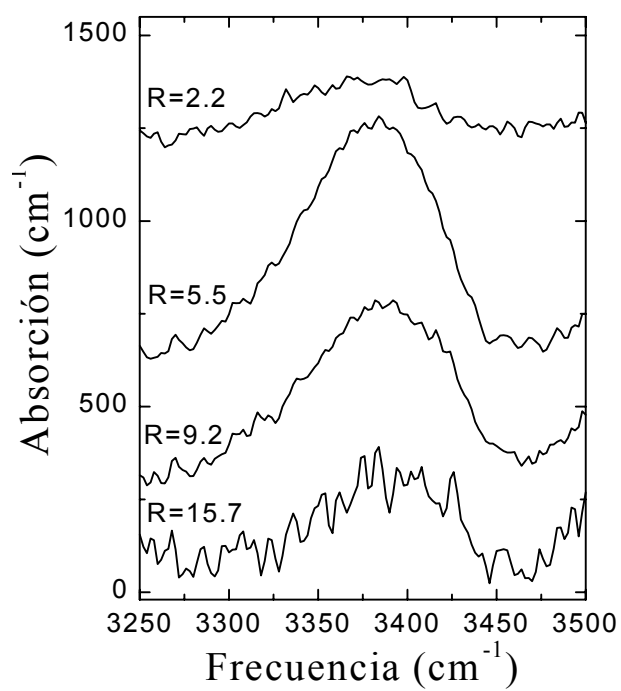


Figura 4.17: Espectros de absorción de la banda N-H stretching en muestras depositadas para diferentes valores de R.

oxígeno. Contrariamente, el tratamiento térmico a $950\text{ }^{\circ}\text{C}$ es suficiente para romper los enlaces N-H y reducir su contenido por debajo de los límites de detección en todas las capas estudiadas.

Las frecuencias características del enlace Si-OH aparecen en la zona de 3600 cm^{-1} . Capas depositadas con valores de R inferiores a 10 no presentan bandas de IR relacionadas con el enlace Si-OH, debido probablemente a la acción de bloqueo de los enlaces Si-H, según el mecanismo propuesto por Machida et al. [16]. Sin embargo, capas con valores intermedios y elevados de R presentan una cantidad no despreciable de enlaces Si-OH. Estos enlaces pueden incorporarse a las capas tanto durante el proceso de crecimiento, como posteriormente debido a la incorporación de humedad ambiental en la estructura porosa de la capa depositada [17]. El proceso de RTA hace que se elimine el contenido de humedad, tal como se observa en la figura 4.18, y que la estructura se haga más compacta y estable a la humedad extrínseca, afectando al mismo tiempo a sus propiedades mecánicas.

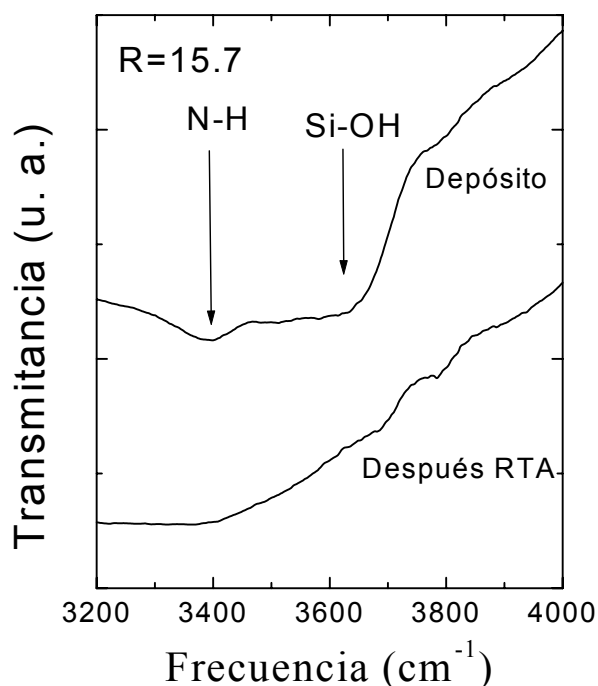


Figura 4.18: Espectros FTIR de la banda Si-OH para la capa con $R=15.7$ antes y después del RTA a 950°C .

La figura 4.19 muestra la variación de la tensión acumulada en las capas en función de la relación de flujos R . Las capas depositadas presentan todas ellas una tensión compresiva (valores negativos) lo cual hace que presenten una curvatura convexa si se observan desde la cara del óxido. La tensión mecánica acumulada es, en general, independiente del espesor de las capas. El valor de la tensión acumulada aumenta al aumentar el valor de R , hasta alcanzarse valores de -0.4 GPa . Este aumento se ha relacionado con una reducción del coeficiente de expansión térmica resultante del cambio en la composición [18]. Esta reducción conlleva un aumento en la componente térmica de la tensión. Después del tratamiento RTA se observa una relajación del nivel de tensión en las capas, llegándose a medir valores de tensión prácticamente nulos para relaciones de flujo inferiores a 15.

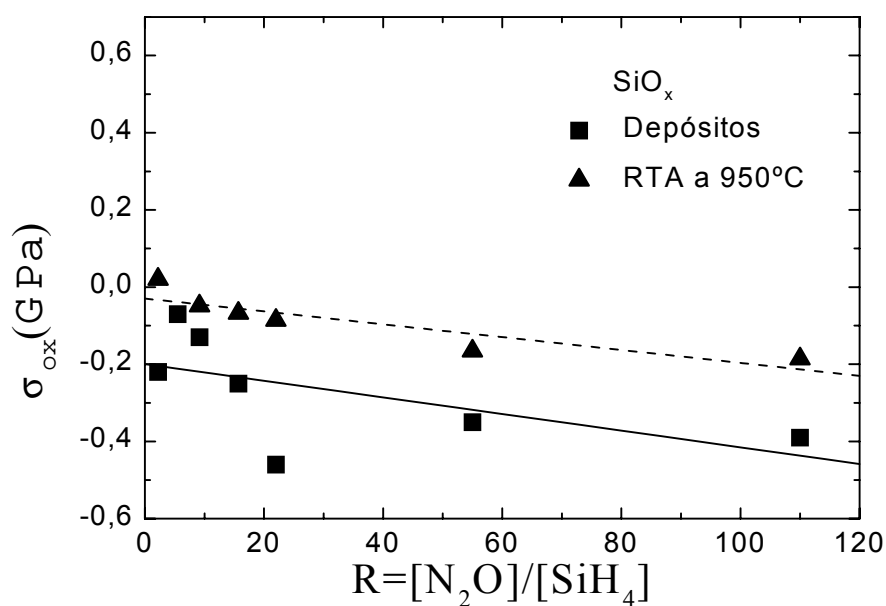


Figura 4.19: Dependencia de la tensión mecánica con R en las capas depositadas y tratadas por RTA a 950°C .

Estos resultados se han interpretado a partir de los efectos del RTA sobre la estructura y composición de las capas. Durante el tratamiento térmico, tiene lugar una efusión de las impurezas, lo cual origina una compactación de la estructura y una

disminución del espesor de la capa. La disminución del efecto de las impurezas sobre la componente intrínseca de la tensión da como resultado una disminución del valor total de la tensión.

4.5 Conclusiones

En este capítulo se ha estudiado la influencia del envejecimiento en atmósfera húmeda, el recocido y el tratamiento térmico rápido a alta temperatura (RTA) en la estructura de las capas de $a\text{-SiO}_x$ depositadas por PECVD sobre sustratos de silicio. Los resultados obtenidos son:

✓ El envejecimiento de las películas de $a\text{-SiO}_x$ se ha estudiado exponiendo las capas en atmósfera húmeda.

- Para relaciones de flujo bajas, inferiores a 15, se ha mostrado que las películas del óxido inicialmente depositadas no sufren ningún cambio después del envejecimiento en atmósfera húmeda.

- Las películas envejecidas, crecidas con R alta y temperaturas de depósito inferiores a 250°C , sufren grandes cambios. La frecuencia del modo stretching del enlace Si-O se desplaza hacia valores más altos y ello tanto más cuanto mayor sea el tiempo de envejecimiento. La banda de Si-OH ($3300\text{-}3700\text{ cm}^{-1}$) se ensancha en la zona de frecuencias más bajas, correspondientes a los grupos Si-OH primeros vecinos, además del agua, y su intensidad aumenta. Las películas depositadas a temperaturas superiores a 300°C , no se ven afectadas por el envejecimiento.

✓ Se ha observado por FTIR el efecto que tiene el recocido sobre las películas de $a\text{-SiO}_x$.

- Para relaciones de flujo bajas, inferiores a 15, las películas no sufren ningún cambio después de un recocido a 200°C .

- Para relaciones de flujo altas, $R=110$, en las películas depositadas a temperaturas inferiores a 250°C , se observa una disminución en la intensidad de la banda Si-OH primeros vecinos, además del agua, después de proceder a un recocido de 200°C . Una reducción considerable en la intensidad de los grupos Si-OH aislados se obtiene cuando se procede a un posterior recocido a 350°C . Nuevamente, las películas depositadas

a temperaturas superiores a 300°C no se ven afectadas por el recocido.

✓ A fin de disminuir el contenido de impurezas en las capas del óxido depositadas, hemos ensayado el efecto de un tratamiento térmico rápido (RTA) a 950°C.

- Para relaciones de flujo bajas, inferiores a 10, los resultados de los espectros de FTIR muestran que el exceso de silicio se mantiene después del RTA en las capas depositadas. Sin embargo el tratamiento térmico produce una efusión de las impurezas lo cual induce un incremento del orden estructural de la red Si-O-Si y una densificación de las capas. Estos cambios producen un aumento significativo en el índice de refracción de las capas y, en general, una reducción de la tensión mecánica acumulada en las capas en el proceso de deposición.

- Para relaciones de flujo altas, superiores a 15, el proceso de RTA hace que se elimine el contenido de los enlaces Si-OH, lo que induce a que la estructura se haga más compacta y estable a la humedad extrínseca, afectando al mismo tiempo a la tensión mecánica de la capa.

Bibliografía

- [1] H. J. Schiliwinski, et al., *J. Electrochem. Soc.*, **139**, 1730 (1992).
- [2] F. Plais, et al., *Proceedings of the Eighth Symposium on Plasma Processing*, **90-14**, 544 (1990).
- [3] D. Della Sala and G. Fortunato, *J. Electrochem. Soc.*, **137**, 2550 (1990).
- [4] M. Moreno, et al., *Advances in Inorganic Films and Coatings*. Techna Srl. Florence, 149 (1995).
- [5] A. C. Adams, et al., *J. Electrochem. Soc.*, **128**, 1545 (1981).
- [6] A. Sassella, et al., *J. Vac. Sci. Technol.*, **A15**, 377-389 (1997).
- [7] A. Borghesi, et al., *Solid State Commun.*, **100**, 657 (1996).
- [8] R.B. Fair (Ed.), *Rapid Thermal Precessing: Science and Technology* Academic Press, Boston, 1993.
- [9] W. A. Pliskin, *J. Vac. Sci. Technol.*, **14**, 1064 (1977).
- [10] W. A. Pliskin, *Semiconductor Silicon*, edited by H. R. Huff and R. R. Burgess (Electrochemical Society, Pennington, NJ, 1973), p. 506.
- [11] G. Lucovsky, P. D. Richard, D. V. Tsu, S. Y. Lin, and R. J. Markunas, *J. Vac. Sci. Technol.*, **A4**, 681 (1986).
- [12] J. D. Chapple-Sokol, W. A. Pliskin, R. A. Conti, E. Tierney, and J. Batey, *J. Electrochem. Soc.*, **138**, 3723 (1991).
- [13] D.V. Tsu, G. Lukovsky, and B.N. Davidson, *Phys. Rev.*, **B40**, 1795 (1989).

- [14] M. H. Brodsky et al., Phys. Rev., **B16**, 3556 (1977).
- [15] N. Maley, Phys. Rev., **B46**, 2078 (1992).
- [16] K. Machida, N. Shimoyama, J. Takahashi, Y. Takahashi, N. Yabumoto and E. Arai, IEEE Trans. Elect. Dev., **41**, 709 (1994).
- [17] M.S. Haque, H. A. Naseem and W. D. Brown, J. Appl. Phys., **82**, 2922 (1997).
- [18] C. Domínguez. J.A. Rodríguez. F. J. Muñoz, and N. Zine, Thin Solid Films, **346**, 202 (1999).

Conclusiones

La posibilidad de variar la composición, y por tanto, el índice de refracción de los depositos por PECVD de óxidos de silicio hace que esta técnica sea especialmente interesante en la fabricación componentes ópticos pasivos (guías de onda, divisores de haz, acopladores) con una tecnología compatible con la tecnología standard CMOS.

En esta memoria, se han expuesto los resultados obtenidos del crecimiento y la caracterización de películas de subóxidos de silicio de grosores alrededor de $1 \mu m$, depositadas por la técnica PECVD sobre obleas de silicio, en un reactor de flujo radial, con electrodos plano-paralelos, utilizando el silano y el protóxido de nitrógeno como gases precursores. Las propiedades de las capas depositadas dependen de los parámetros del depósito. Una parte del trabajo se ha dedicado al estudio las propiedades de las capas depositadas (velocidad de crecimiento, composición, contenido en impurezas, índice de refracción, densidad y tensión mecánica) variando de manera sistemática los parámetros de crecimiento (flujo total, temperatura, potencia y presión). En la segunda parte del trabajo se han estudiado los efectos de envejecimiento en atmósfera húmeda y los efectos de los distintos tratamientos térmicos sobre las propiedades de las capas depositadas. Las técnicas de análisis que se han utilizado en la caracterización de los materiales son: la Espectroscopía Infrarroja por Transformada de Fourier, la elipsometría y medidas de curvatura. En este contexto podemos enumerar las siguientes conclusiones y logros:

- ✓ La variable que más afecta a las propiedades de las capas depositadas es la

relación de flujos, $R=[N_2O]/[SiH_4]$, de los gases precursores. Valores bajos del caudal total, entre 110 y 150 sccm, nos permite obtener un intervalo amplio de valores de R, desde 2 hasta 110. A medida que disminuye la relación de flujos, las capas crecidas poseen un mayor contenido en silicio, como demuestran los elevados índices de refracción ($n > 1.88$). Aumentando la relación de flujos, las capas crecidas poseen un mayor contenido en oxígeno, los espectros obtenidos son análogos al del óxido de silicio térmico y los índices de refracción tienden al valor 1.46 propio del óxido estequiométrico. El cambio de pendiente que sufre la velocidad de depósito en función de la relación de flujos, es indicativo de los diferentes mecanismos que intervienen en el depósito de las capas. Mediante la espectroscopía de FTIR se ha mostrado que la frecuencia del Si-O-Si “stretching” aumenta de 1036 a 1072 cm^{-1} al aumentar la relación de flujos, de acuerdo con el cambio en la composición. Se ha estudiado la concentración de las bandas de impurezas Si-H, N-H, Si-OH y H₂O. Se ha observado que la densidad de las bandas Si-H y N-H se incrementa cuando el contenido de oxígeno en las películas depositadas es bajo. La concentración de grupos Si-OH y de H₂O, es más alta en películas ricas en oxígeno.

✓ Se ha estudiado la influencia que la temperatura del depósito produce sobre la incorporación del hidrógeno en las capas del subóxido de silicio. Se ha mostrado que, para valores de R inferiores a 29, un aumento de la temperatura de depósito hasta 350 °C, disminuye la concentración de los enlaces Si-H y N-H, mientras que la tensión mecánica no sufre ningún cambio. Para valores de R superiores a 29, se ha mostrado que para temperaturas de depósito por encima de 300 °C, los grupos Si-OH primeros vecinos o bien el H₂O, desaparecen. Aun cuando inicialmente a altas temperaturas de depósito se inhiba la absorción de agua por las capas depositadas, el agua no enlazada absorbida en el proceso de enfriamiento, induce un aumento de la tensión mecánica.

✓ Se han variado la potencia y la presión entre 10-50 Watt y 100-300 mTorr, respectivamente. La potencia y presión, afectan en menor grado a las propiedades de las capas, debido a que estas variables no se ven involucradas en cambios de mecanismo y únicamente propician procesos secundarios, como la formación de especies activas en fase gaseosa o las reacciones de adsorción-desorción.

En el estudio de las películas de subóxido de silicio tratadas, concluimos que:

✓ Se ha estudiado el envejecimiento de las películas de α -SiO_x exponiéndolas en atmósfera húmeda. Para relaciones de flujo bajas, inferiores a 15, se ha mostrado que las películas del óxido depositadas no sufren ningún cambio después del envejecimiento. Las películas envejecidas, crecidas con relaciones de flujo altas y temperaturas de depósito inferiores a 250°C, sufren grandes cambios. La frecuencia del modo stretching del enlace Si-O se desplaza hacia frecuencias más altas con el aumento de tiempo de envejecimiento y la banda de Si-OH (3300-3700 cm⁻¹) se ensancha en la zona de frecuencias más bajas correspondientes a los grupos Si-OH primeros vecinos, además del agua, y su intensidad aumenta. Las películas depositadas a temperaturas superiores a 300°C, no se ven afectadas por el envejecimiento.

✓ Se han estudiado los efectos del recocido sobre las características de las capas depositadas. Se ha observado que, para relaciones de flujo bajas, inferiores a 15, las películas no sufren ningún cambio después de un recocido a 200°C. Para relaciones de flujo altas, superiores a 55, en las películas depositadas a temperaturas inferiores a 250°C, se observa una disminución en la intensidad de la banda Si-OH primeros vecinos, además del agua, después de proceder a un recocido de 200°C. Una reducción considerable en la intensidad de los grupos Si-OH aislados se obtiene cuando se procede a un posterior recocido a 350 °C. Nuevamente, las películas depositadas a temperaturas superiores a 300°C no se ven afectadas por el recocido.

✓ Finalmente, se han estudiado los efectos del tratamiento térmico rápido (RTA) a 950°C y a 30 segundos. Para relaciones de flujo inferiores a 10, el exceso de silicio se mantiene después del RTA en las capas depositadas. Sin embargo el tratamiento térmico produce una efusión de las impurezas lo cual induce un incremento del orden estructural de la red Si-O-Si y una densificación de las capas. Estos cambios producen un aumento significativo en el índice de refracción y, en general, una reducción de la tensión mecánica acumulada en las capas en el proceso de deposición. Para relaciones de flujo superiores a 15, el proceso de RTA hace que se elimine el contenido de los enlaces Si-OH, lo que induce a que la estructura se haga más compacta y estable a la humedad extrínseca, afectando al mismo tiempo a la tensión mecánica de la capa.

Apéndice A

Propiedades del Si y del SiO₂

A.1 Propiedades del Silicio a 300K

Átomos/cm³ = $5.0 \cdot 10^{22}$

Peso atómico = 28.09

Estructura cristalina: Diamante

Densidad = 2.328 g/cm^3

Constante dieléctrica = 11.9

Índice de refracción = 3.42

Energía del gap = 1.12 eV

Constante de red = 5.43095 \AA

Coefficiente lineal de dilatación térmica $\Delta L/L\Delta T = 2.6 \cdot 10^{-6} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$

Temperatura del punto de fusión = $1415 \text{ }^\circ\text{C}$

Calor específico = $0.7 \text{ J/g }^\circ\text{C}$

Conductividad térmica = $1.5 \text{ W/cm }^\circ\text{C}$

Densidad de estados efectiva en la banda de conducción $N_0 = 2.80 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$

Densidad efectiva de estados en la banda de valencia $N_v = 1.04 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$

Afinidad electrónica = 4.05 V

Concentración intrínseca de portadores = $1.45 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$

Resistividad intrínseca = $2.3 \cdot 10^5 \text{ } \Omega\text{cm}$

Masa efectiva electrones $m^*/m_0 = 0.19$ (masa transversa) y 0.98 (masa longitudinal)

Masa efectiva huecos $m^*/m_0 = 0.16$ (huecos ligeros) y 0.49 (huecos pesados)

A.2 Propiedades del α -SiO₂ y del SiO₂ cristalino

Forma	Estructura	Ang. Si-O-Si (°)	$d_{\text{Si-O}}$ (Å)	$d_{\text{O-O}}$ (Å)	Anillos
α -cuarzo	trigonal	144	1.61	2.60 – 2.67	6
β -cuarzo	hexagonal	146	1.62	2.60	6
α -cristobalita	tetragonal	148			
β -cristobalita	cúbica	142 – 180	1.58 – 1.69	2.53	6
β -tridimita	hexagonal	140 – 173	1.58 – 1.62	2.63	6
Coesita	monoclínica	120	1.60 – 1.63	2.60 – 2.67	4
a - SiO ₂	amorfa	120 – 180	1.60 – 1.62	2.62 – 2.65	4 – 6

Tabla A.1: Propiedades del α -SiO₂ y del SiO₂ cristalino

Densidad:

$$\alpha - \text{cuarzo} = 2.65 \text{ g/cm}^3$$

$$a - \text{SiO}_2 = 2.2 - 2.3 \text{ g/cm}^3$$

Los datos que se dan a continuación son referentes al SiO₂ amorfo a 300K de temperatura:

$$\text{Punto de fusión} = 1600^\circ\text{C}$$

$$\text{Índice de refracción} = 1.46$$

$$\text{Constante dieléctrica} = 3.9$$

$$\text{Energía del gap} = 9 \text{ eV}$$

$$\text{Coeficiente de dilatación térmica} = 5 \cdot 10^{-7} / ^\circ\text{C}$$

$$\text{Conductividad térmica} = 0.014 \text{ W/cm K}$$

$$\text{Resistividad} = 10^{14} - 10^{16} \text{ } \Omega\text{cm}$$

Apéndice B

Elasticidad

B.1 La ley de Hooke

Un cuerpo sólido cambia su dimensión cuando está sujeto a una tensión. Si la tensión se encuentra por debajo de cierto valor límite, el límite elástico, la deformación es recuperable, es decir, el cuerpo vuelve a su dimensión original cuando se suprime la tensión. En una primera aproximación (ley de Hooke) cuando las tensiones son suficientemente pequeñas la deformación es proporcional a la magnitud de la tensión aplicada. Por ejemplo, supongamos que una barra de un sólido isotrópico está sometida a una tensión extensible de valor σ , sea la deformación longitudinal ϵ igual a $\Delta l/l$, donde Δl es el aumento en longitud y l es la longitud original. La ley de Hooke se escribe:

$$\epsilon = s\sigma \tag{B.1}$$

donde s es una constante. s es la llamada constante elástica, para esta disposición determinada de las direcciones de las tensiones σ y ϵ . Como alternativa podríamos escribir:

$$\sigma = c\epsilon, \quad c = 1/s,$$

donde c es la constante de rigidez elástica (stiffness), o rigidez. c se llama también módulo de Young.

En un sistema general, la relación entre la deformación y la tensión aplicada es compleja:

$$\begin{aligned}
 \epsilon_1 &= s_{11}\sigma_1 + s_{12}\sigma_2 + s_{13}\sigma_3 + s_{14}\sigma_4 + s_{15}\sigma_5 + s_{16}\sigma_6 \\
 \epsilon_2 &= s_{21}\sigma_1 + s_{22}\sigma_2 + s_{23}\sigma_3 + s_{24}\sigma_4 + s_{25}\sigma_5 + s_{26}\sigma_6 \\
 \epsilon_3 &= s_{31}\sigma_1 + s_{32}\sigma_2 + s_{33}\sigma_3 + s_{34}\sigma_4 + s_{35}\sigma_5 + s_{36}\sigma_6 \\
 \epsilon_4 &= s_{41}\sigma_1 + s_{42}\sigma_2 + s_{43}\sigma_3 + s_{44}\sigma_4 + s_{45}\sigma_5 + s_{46}\sigma_6 \\
 \epsilon_5 &= s_{51}\sigma_1 + s_{52}\sigma_2 + s_{53}\sigma_3 + s_{54}\sigma_4 + s_{55}\sigma_5 + s_{56}\sigma_6 \\
 \epsilon_6 &= s_{61}\sigma_1 + s_{62}\sigma_2 + s_{63}\sigma_3 + s_{64}\sigma_4 + s_{65}\sigma_5 + s_{66}\sigma_6
 \end{aligned}$$

En el caso de un sistema cúbico (caso del silicio), la simetría del sistema impone restricciones. Así,

$$\begin{aligned}
 \epsilon_1 &= s_{11}\sigma_1 + s_{12}\sigma_2 + s_{12}\sigma_3 \\
 \epsilon_2 &= s_{12}\sigma_1 + s_{11}\sigma_2 + s_{12}\sigma_3 \\
 \epsilon_3 &= s_{12}\sigma_1 + s_{12}\sigma_2 + s_{11}\sigma_3 \\
 \epsilon_4 &= s_{44}\sigma_4 \\
 \epsilon_5 &= s_{44}\sigma_5 \\
 \epsilon_6 &= s_{44}\sigma_6
 \end{aligned}$$

donde:

$$\begin{aligned}
 s_{11} &= s_{22} = s_{33} \\
 s_{12} &= s_{23} = s_{31} \\
 s_{i4} &= s_{i5} = s_{i6} = 0 \quad (i = 1, 2, 3) \\
 s_{44} &= s_{55} = s_{66} \\
 s_{ij} &= 0 \quad (i, j = 4, 5, 6)
 \end{aligned}$$

Y si además el sistema es isótropo [1], tendremos: $s_{44} = 2(s_{11} - s_{12})$.

B.1.1 Módulo de Young (E)

El Módulo de Young se define como:

$$\frac{1}{E} = s_{11} \quad (\text{B.2})$$

En el caso de una tensión aplicada según una dirección arbitraria \vec{l} , tendremos:

$$\left(\frac{1}{E}\right)_{\vec{l}} = s'_{11} \quad (\text{B.3})$$

$$= (s_{11})_{\vec{l}} \quad (\text{B.4})$$

$$\begin{aligned} &= l_1^4 s_{11} + 2l_1^2 l_2^2 s_{12} + 2l_1^2 l_3^2 s_{13} + (2l_1^2 l_2 l_3 s_{14}) + 2l_1^3 l_3 s_{15} + (2l_1^3 l_2 s_{16}) + \\ &\quad + l_2^4 s_{22} + 2l_2^2 l_3^2 s_{23} + (2l_2^3 l_3 s_{24}) + 2l_1 l_2^2 l_3 s_{25} + (2l_1 l_2^3 s_{26}) + \\ &\quad + l_3^4 s_{33} + (2l_2 l_3^3 s_{34}) + 2l_1 l_3^3 s_{35} + (2l_1 l_2 l_3^2 s_{36}) + l_2^2 l_3^2 s_{44} + \\ &\quad + (2l_1 l_2 l_3^2 s_{45}) + 2l_1 l_2^2 l_3 s_{46} + l_1^2 l_3^2 s_{55} + (2l_1^2 l_2 l_3 s_{56}) + l_1^2 l_2^2 s_{66}. \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

donde: $l_1 = \cos \alpha_x$, $l_2 = \cos \alpha_y$ y $l_3 = \cos \alpha_z$.

En el caso de un sistema cúbico, con una dirección \vec{l} de la tensión aplicada, la ecuación B.5 se puede escribir como:

$$\left(\frac{1}{E}\right)_{\vec{l}} = s_{11} - 2(s_{11} - s_{12} - \frac{1}{2}s_{44})(l_1^2 l_2^2 + l_2^2 l_3^2 + l_3^2 l_1^2) \quad (\text{B.6})$$

donde:

$$s_{11} = s_{22} = s_{33}$$

$$s_{12} = s_{23} = s_{31}$$

$$s_{i4} = s_{i5} = s_{i6} = 0 \quad (i = 1, 2, 3)$$

$$s_{44} = s_{55} = s_{66}$$

$$s_{ij} = 0 \quad (i, j = 4, 5, 6)$$

En el caso de un sistema cúbico como el silicio, con una dirección \vec{l} en el plano perpendicular a (001), la ecuación B.6 se puede escribir como:

$$\left(\frac{1}{E}\right)_{(001)} = s_{11} - 2(s_{11} - s_{12} - \frac{1}{2}s_{44})l_1^2 l_2^2 \quad (\text{B.7})$$

donde:

$$l_1 = \cos \alpha_x,$$

$$l_2 = \cos \alpha_y = \cos\left(\frac{\pi}{2} - \alpha_x\right) = \sin \alpha_x$$

$$l_3 = \cos \frac{\pi}{2} = 0$$

B.1.2 Coeficiente de Poisson

Se define como:

$$\nu = -\frac{s'_{12}}{s'_{11}} \quad (\text{B.8})$$

Para un cúbico, con tensión según \vec{l} y deformación según \vec{m} , la ecuación B.8 se puede escribir como:

$$\nu = -\frac{s_{12} + (s_{11} - s_{12} - \frac{1}{2}s_{44})(l_1^2 m_1^2 + l_2^2 m_2^2 + l_3^2 m_3^2)}{s_{11} - 2(s_{11} - s_{12} - \frac{1}{2}s_{44})(l_1^2 l_2^2 + l_2^2 l_3^2 + l_3^2 l_1^2)} \quad (\text{B.9})$$

En particular, en el caso de una oblea de silicio tipo (001) y ejes en el plano (1,0,0), (0,1,0) tendremos:

$$\nu_{(001)} = -\frac{s_{12} + (s_{11} - s_{12} - \frac{1}{2}s_{44})(l_1^2 m_1^2 + l_2^2 m_2^2)}{s_{11} - 2(s_{11} - s_{12} - \frac{1}{2}s_{44})l_1^2 l_2^2} \quad (\text{B.10})$$

donde:

$$l_1 = \cos \alpha_x,$$

$$l_2 = \cos \alpha_y = \cos\left(\frac{\pi}{2} - \alpha_x\right) = \sin \alpha_x$$

$$l_3 = \cos \frac{\pi}{2} = 0$$

$$m_1 = \cos\left(\alpha_x + \frac{\pi}{2}\right) = -\sin \alpha_x,$$

$$m_2 = \cos\left(\alpha_y - \frac{\pi}{2}\right) = \sin \alpha_y = \sin\left(\frac{\pi}{2} - \alpha_x\right) = \cos \alpha_x$$

$$m_3 = \cos \frac{\pi}{2} = 0$$

La ecuación B.10 puede escribirse como:

$$\nu_{(001)} = -\frac{s_{12} + (s_{11} - s_{12} - \frac{1}{2}s_{44})l_1^2 l_2^2}{s_{11} - 2(s_{11} - s_{12} - \frac{1}{2}s_{44})l_1^2 l_2^2} \quad (\text{B.11})$$

Y la constante de rigidez elástica se puede escribir como:

$$\left(\frac{E}{1-\nu}\right)_{(001)} = \frac{1}{s_{11} - 2(s_{11} - s_{12} - \frac{1}{2}s_{44})l_1^2 l_2^2} \frac{1}{1 + \frac{s_{12} + 2(s_{11} - s_{12} - \frac{1}{2}s_{44})l_1^2 l_2^2}{s_{11} - 2(s_{11} - s_{12} - \frac{1}{2}s_{44})l_1^2 l_2^2}} \quad (\text{B.12})$$

$$= \frac{1}{s_{11} + s_{12}} \neq f(\vec{l}, \vec{m}) \quad (\text{B.13})$$

lo que demuestra que $\left(\frac{E}{1-\nu}\right)_{(001)}$ no depende de la dirección al plano.

B.1.3 Aplicación de una tensión biaxial:

$$\vec{\sigma} = \sigma \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{aligned} \sigma_1 &= \sigma_2 = \sigma \\ \sigma_3 &= 0 \\ \sigma_4 &= \sigma_5 = \sigma_6 = 0 \end{aligned}$$

y en este caso tendremos:

$$\epsilon_1 = s_{11}\sigma + s_{12}\sigma = (s_{11} + s_{12})\sigma$$

$$\epsilon_2 = \epsilon_1$$

$$\epsilon_3 = 2s_{12}\sigma$$

$$\epsilon_4 = \epsilon_5 = \epsilon_6 = 0$$

Si estamos interesados en las deformaciones del plano de la oblea,

$$\epsilon = (s_{11} + s_{12})\sigma = \left[\left(\frac{E}{1-\nu}\right)_{(001)} \right]^{-1} \sigma \quad (\text{B.14})$$

o bien

$$\sigma = \left(\frac{E}{1-\nu}\right)_{(001)} \epsilon \quad (\text{B.15})$$

Caso isotrópico:

En este caso E no depende de la dirección lo que implica que:

$$s'_{11} = s_{11} \Leftrightarrow (s_{11} - s_{12} - \frac{1}{2}s_{44}) = 0$$

$$\Rightarrow \left(\frac{1}{E}\right)_{(001)} = s_{11}$$

$$\nu_{(001)} = -\frac{s_{12}}{s_{11}}$$

$$\Rightarrow \left(\frac{E}{1-\nu}\right)_{(001)} = \frac{1}{s_{11}+s_{12}}$$

Y la ecuación B.15 se puede escribir como:

$$\sigma = \frac{1}{s_{11} + s_{12}} \epsilon \quad (\text{B.16})$$

En la Fig. B.1 se representa la variación de la constante de rigidez elástica $\left(\frac{E}{1-\nu}\right)_{(001)}$ en función de la temperatura. Para el caso del Si(001) se ve claramente que la variación de $\left(\frac{E}{1-\nu}\right)_{(001)}$ en función de la temperatura es muy pequeña y tiene una pendiente $\sim -0,0014$, lo que significa que $\left(\frac{E}{1-\nu}\right)_{(001)}$ puede considerarse como constante.

Por lo que se refiere al film, que podemos considerar un medio elástico isótropo, Carloti et al. [2] han determinado $\left(\frac{E_f}{1-\nu_f}\right)$ a partir de las medidas de las constantes elásticas mediante espectroscopia de Brillouin. Como que, α_{Si} y α_f (coeficientes de expansión térmica del substrato y del depósito respectivamente) pueden considerarse constantes en el rango de temperaturas utilizando, la tensión térmica, que viene dada por la fórmula siguiente:

$$\sigma_{th} = \int_{T_d}^T \frac{E_f}{1-\nu_f} (\alpha_{\text{Si}} - \alpha_f) dT \quad (\text{B.17})$$

se puede escribir como:

$$\sigma_{th} \simeq \frac{E_f}{1-\nu_f}(\alpha_{Si} - \alpha_f) \int_{T_d}^T dT \quad (\text{B.18})$$

$$\simeq \frac{E_f}{1-\nu_f}(\alpha_{Si} - \alpha_f)(T - T_d) \quad (\text{B.19})$$

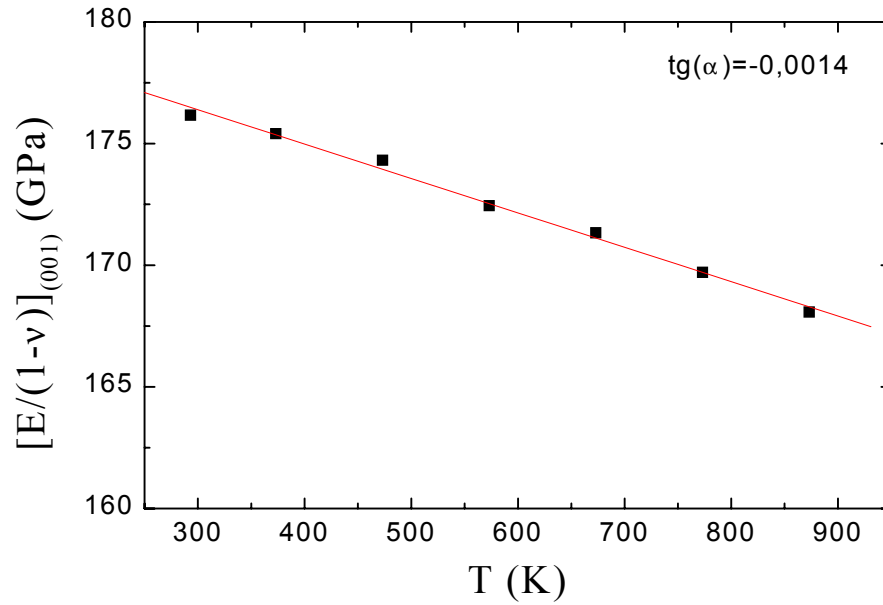


Figura B.1: Representación de la constante de rigidez elástica del Si en función de la temperatura.

Bibliografía

- [1] J.F.NYE, M.A., Ph.D., *Physical Properties of Crystals*, p. 140.
- [2] G. Carlotti, L. Doucet and M. Dupeux, *J. Vac. Sci. Technol.*, **B14**, 3460 (1996).