

Anisotropías Ópticas en películas de Silicio

Gustavo Ramírez Meléndez

Asesor:

Dr. Raúl Balderas Navarro

Maestría en Ingeniería Eléctrica Opción MDO

Enero 2012

Resumen

La movilidad de portadores en el silicio (Si) se incrementa notablemente al someter éste a esfuerzos mecánicos uniaxiales, ya sea de manera compresiva y/o tensil. Esto trae consecuencias importantes en el desarrollo de nuevos dispositivos microelectrónicos de ultra-alta velocidad. En la mayoría de los casos prácticos, los dispositivos electrónicos constan de películas de silicio tensadas y con espesores de unas cuantas decenas de nanómetros. Por lo tanto, es necesario contar con técnicas experimentales para la medición de dichos esfuerzos de manera no destructiva y que sean capaces de sensar únicamente dichas regiones. Una de estas técnicas es la espectroscopía de reflectancia diferencial (RD), que mide la anisotropías ópticas en la función dieléctrica de superficies de materiales semiconductores.

En este trabajo se reportan mediciones de anisotropías ópticas (OA) de superficies de películas delgadas de Si(001) crecidas epitaxialmente sobre sustratos relajados de aleaciones de $Si_{1-x}C_x$ y $Si_{1-y}Ge_y$, los cuales inducen deformaciones compresivas y tensiles, respectivamente en la capa superior de Si. Para la cuantificación del grado de las deformaciones, se presenta el desarrollo de un modelo teórico basado en el método perturbativo con el hamiltoniano de Pikus-Bir.

Índice general

1. Anisotropías ópticas en semiconductores	7
1.1. Estructura tipo diamante	7
1.2. Anisotropía en Si(001) bajo estrés uniaxial	8
2. Arreglo experimental para la medición de anisotropías ópticas	13
2.1. Arreglo experimental	14
2.1.1. Análisis Óptico[13]	17
3. Silicio bajo esfuerzos compresivos y tensiles: efectos del substrato	21
3.1. Deformación tensil producida por la aleación $Si_{1-x}Ge_x$	22
3.2. Deformación compresiva producida por la aleación Si_yC_{1-y}	22
4. Resultados experimentales y análisis	25
4.1. Análisis en E'_0 [18]	25
4.2. Ajuste en E'_0	37

INTRODUCCIÓN

En los últimos años ha sido enorme el avance tecnológico en los dispositivos microelectrónicos que conforman los sistemas de información. Dicho avance, acelerado en los dispositivos semiconductores, radica en la exigencia de una mayor rapidez en el procesamiento de datos, lo que está íntimamente relacionado con la miniaturización de los componentes, su calidad y condición estructural. Es por esta razón que ha aumentado en forma radical la investigación científica para contar con tecnología de sistemas electrónicos y opto-electrónicos integrados.

Uno de los semiconductores mas importantes en la industria electrónica es el silicio (Si). Específicamente el Si deformado, a diferencia del silicio en bulto (relajado o libre de esfuerzos), presenta una mayor movilidad en sus portadores, lo que resulta interesante para el mejoramiento de sistemas con tecnologías CMOS y dispositivos MOSFET [1]. De manera particular el uso de silicio sometido a esfuerzos mecánicos microscópicos (ya sea bajo compresión o tensión) se encuentra en la fabricación de la mayor parte de los microchips, acelerando el flujo de electrones a través de transistores que incrementan el funcionamiento y disminuyen el consumo de energía de éstos.

En relación a lo anterior, para crear dispositivos opto-microelectrónicos que sean confiables es necesario que posean propiedades físicas y químicas deseables y que cumplan con una calidad estricta, hasta el punto de demandar un control durante el momento mismo de los procesos cruciales de fabricación; es decir, in-situ y entiendo real. Esto se ha llevado a cabo utilizando sondas electrónicas y fotónicas[2]. En el caso de éstas últimas, no se requiere un ambiente especial y operan bajo casi cualquier condición ya que usan como agente sensor un haz de luz (usualmente proveniente de lámparas y láseres).

El objetivo de esta Tesis consiste en detectar y analizar, por medio de espectroscopías ópticas, el estrés presente en películas delgadas de Si. Una manera de obtener silicio estresado es creciendo éste sobre capas epitaxiales con diferente constante de red cristalina a la del Si relajado. En nuestro caso, contamos con sistemas de películas delgadas crecidas sobre sustratos de $Si_{1-x}Ge_x$ y $Si_{1-x}C_x$. Utilizando técnicas de espectroscopía modulada, como es el caso de la Reflectancia Diferencial (RD) [3], es posible detectar anisotropías ópticas en los sistemas mencionados. Dichas técnicas miden el cambio en la relectividad del cristal inducido por una perturbación y es por medio de estas que se ha obtenido la mayoría del conocimiento que se tiene sobre los puntos críticos en los semiconductores [4].

La red cristalina del Si solamente tiene un tipo de átomo, a diferencia de los semiconductores de las columnas II-VI y III-V en la tabla periódica de los elementos químicos. La estructura del Si es cúbica y por lo tanto nominalmente la propiedades ópticas, y en particular la reflectividad son isotrópicas; es decir, no dependen de la orientación ni de la polarización del campo electromagnético del fotón. Sin embargo, cuando ocurre un rompimiento de la simetría cúbica, la respuesta óptica no necesariamente preserva la isotropía. Esto ocurre por lo general en regiones cercanas a la superficie o interfaces; en consecuencia, al estar presente un agente que altere la simetría cúbica, la diferencia en reflectividad para dos polarizaciones ortogonales no es necesariamente cero.

Una de las espectroscopías ópticas que sirven como sonda para la medición de dicha pérdida en simetría se conoce como espectroscopía de reflectancia diferencial. Entre los agentes físicos que son responsables en la alteración de la simetría cúbica se encuentran: deformaciones mecánicas (elásticas o plásticas, como en el caso de este trabajo), campos eléctricos superficiales a través de un efecto piezoeléctrico, defectos puntuales (vacancias o intersitios), micro-rugosidades, absorción moléculas orgánicas (p.ej. ADN y CO), deformaciones en polímeros, etc [5]. Por lo tanto, la espectroscopía de reflectancia diferencial (RDS) es una técnica óptica no destructiva aplicable a superficies que se ha usado de manera rutinaria dentro de una amplia gama de ambientes (aire, vacío, gases y hasta en líquidos), para medirla anisotropía óptica asociadas y generadas en procesos superficiales, como los mencionados líneas arriba.

La RDS mide la diferencia en la reflexión a incidencia normal de luz linealmente polarizada entre dos direcciones ortogonales sobre el plano de la superficie de la muestra bajo estudio [6, 7, 8]. Dichas direcciones deben coincidir con los ejes simétricos del cristal. Por ejemplo, para la superficie (001), los ejes cristalográficos son $[1\bar{1}0]$ y $[110]$; mientras que para la cara (110), los ejes son $[001]$ y $[\bar{1}10]$. Típicamente, el haz de prueba en RDS opera en el rango ultravioleta-visible. La técnica RDS se ha utilizado en la mayoría de los casos en materiales semiconductores con estructura zincblenda, (p.ej., GaAs, CdTe, InP, GaP, InSb, GaSb, entre otros) o diamante (Si y Ge) y en metales nobles (p. ej. Cu, Au y Ag).

En esencia, los espectros de anisotropías presentan formas de línea con estructuras complejas que son una combinación lineal de primeras y segundas derivadas de la función dieléctrica, alrededor de las energías críticas tales como: $E_0, E_1, E_1 + \Delta_1, E'_0, E'_0 + \Delta'_0, E_2$, etc, para semiconductores [9] y en

la banda d en metales [10]. Estas transiciones ocurren en puntos críticos de alta simetría en la zona de Brillouin. De esta manera, la espectroscopía RD es sensible a los cambios mencionados y éstos se pueden correlacionar con los procesos superficiales. Esto hace que la RDS sea una herramienta muy útil y versátil para el monitoreo en procesos superficiales y poder estudiarlos vía un sistema de retroalimentación, siempre y cuando se identifiquen correctamente el origen físico de los agentes que producen una anisotropía óptica.

En nuestro caso aplicamos la RD a 8 estructuras, obteniendo como resultado que dos de ellas mostraban un desdoblamiento en energías en los puntos críticos E'_0 , E_1 y $E_1 + \Delta_1$ y E_2 . Es sabido que en el silicio en bulto estas tres energías se encuentran degeneradas, por lo que tal desdoblamiento es un indicador de estrés a lo largo de una de las direcciones cristalinas del Silicio.

La parte final de este trabajo consiste en la elaboración del modelo matemático capaz de reproducir la señal obtenida de la RD. Este trabajo está organizado como sigue:

El capítulo 1 presenta el concepto de anisotropías ópticas en los semiconductores centrándose en las anisotropías de las estructuras cristalinas tipo diamante; el capítulo 2 muestra el arreglo experimental utilizado para la medición de anisotropías, se describe el sistema y el análisis óptico para la obtención de la señal de RD. Posteriormente, en el capítulo 4 se presentan los dos tipos de estrés presentes en las estructuras medidas, se muestra la diferencia entre esfuerzos tensiles y compresivos así como la importancia en la desorientación del sustrato. Finalmente, en el capítulo 5 se desarrolla el análisis en el punto crítico E'_0 de la estructura $Si/Si_{1-y}C_y/Si(001)$, se muestra el modelo de la forma de línea para la RD y se presenta el valor de e_{\parallel} obtenido de dicho modelo.

Capítulo 1

Anisotropías ópticas en semiconductores

Los materiales isotrópicos presentan siempre el mismo comportamiento para una variable física, independientemente de la dirección. Por otro lado, en los materiales anisotrópicos las propiedades varían con la dirección. En el caso de la luz, los cristales anisotrópicos presentan distintos valores de sus índices de refracción en función de la dirección en que vibre la luz al atravesar el cristal.

La anisotropía es una consecuencia de la estructura interna del material; los materiales que cristalizan en el sistema cúbico, es decir, el de máxima simetría, con sus átomos o iones igualmente distribuidos en las tres direcciones principales del espacio, son isotrópicos. Los pertenecientes al resto de los sistemas cristalinos (hexagonal, trigonal, tetragonal, ortorómbico, monoclinico y triclinico) son anisotrópicos.

1.1. Estructura tipo diamante

Para los semiconductores con estructura tipo diamante [?], como es el caso del Silicio o el Germanio, se tiene que existe isotropía o anisotropía óptica dependiendo de la dirección o de crecimiento de las capas superficiales. En la figura 1.1 se presenta un cristal con estructura tipo diamante. Se muestran las superficies (001) y (110) con sus respectivas direcciones ortogonales; y de acuerdo con el arreglo atómico podemos observar que:

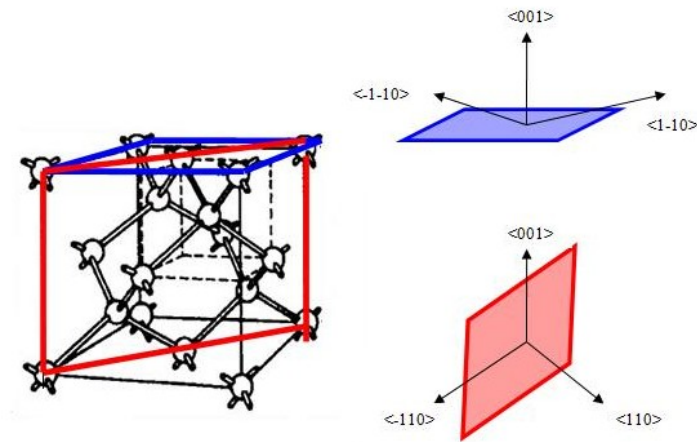


Figura 1.1: Estructura Cristalina tipo diamante. En azul la superficie [001], en Rojo la superficie [110].

1. Para una incidencia sobre Si (001) con dos polarizaciones ortogonales correspondientes a las direcciones $[\bar{1}\bar{1}0]$ y $[1\bar{1}0]$ se tendrá isotropía óptica
2. Para una incidencia sobre Si (110) con dos polarizaciones ortogonales correspondientes a las direcciones $[001]$ y $[\bar{1}10]$ se tendrá anisotropía óptica

La técnica espectroscópica de Reflectancia Diferencial nos permite, en primera instancia, detectar la presencia de anisotropías ópticas en la superficies. Utilizando esta técnica puede observar el efecto anterior. Se muestran en la figura 1.2 mediciones realizadas a substratos de Si(110) y de Si(001) de acuerdo con las polarizaciones mostradas en la figura 1.1. Podemos observar que para las superficies (110) se presenta una señal de RD intrínseca, mientras que para las superficies (001) no se tiene señal.

1.2. Anisotropía en Si(001) bajo estrés uniaxial

Como se observó en la sección 1.1 el Silicio, al poseer una estructura cristalina tipo diamante, es ópticamente isotrópico en la superficie (001). Es posible, sin embargo, bajo una tensión uniaxial a lo largo de alguna dirección cristalográfica ($[110]$ ó $[1\bar{1}0]$), provocar que la simetría del cristal se modifique

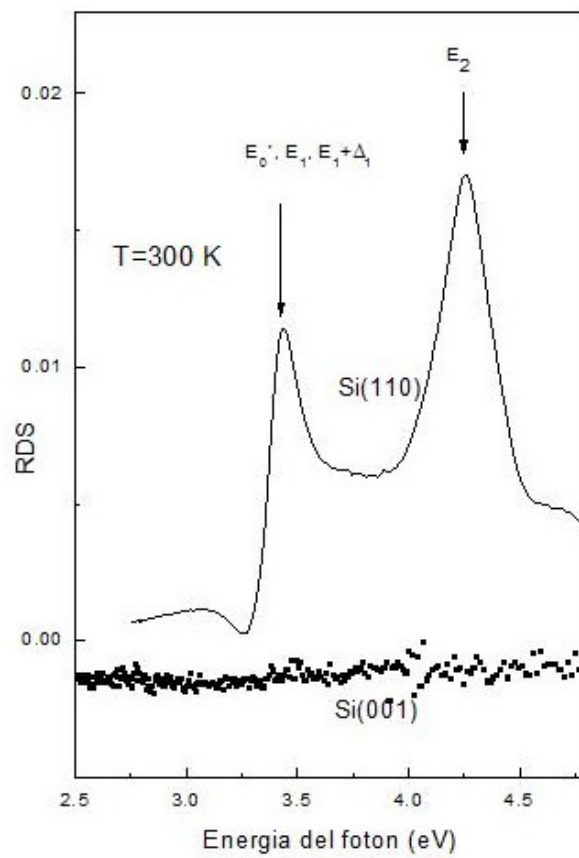


Figura 1.2: Señal RDS para Si (110) y Si (001)

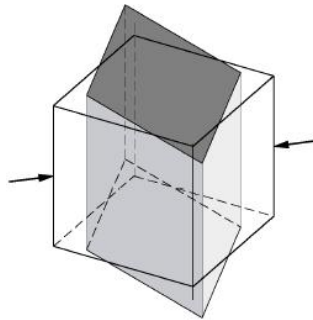


Figura 1.3: Deformación de un cristal cúbico bajo un esfuerzo uniaxial a lo largo de $[110]$.

de cúbica (T_d) a ortorrómbica (C_{2v}) [11] (fig. 1.3), esto provoca que el cristal se vuelva ópticamente anisotrópico. Un resultado del fenómeno anterior puede observarse en la figura 1.4, el cual muestra una señal de RDS obtenida de un sustrato de Si (100) deformado mecánicamente [12].

Dicho resultado sirve de antecedente para realizar el análisis de estructuras de Si deformadas por efecto del crecimiento de capas epitaxiales con distinta constante de red. Como veremos mas adelante, esto en conjunto con una desorientación inicial en el sustrato produce efectos de anisotropía óptica en Si(001).

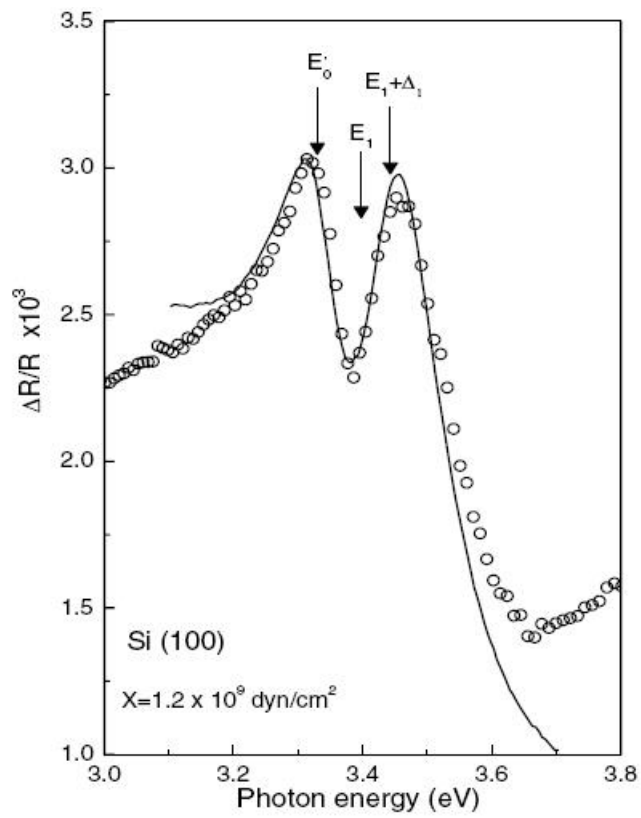


Figura 1.4: Señal de RDS para Si(100) sometido a un esfuerzo uniaxial a lo largo de la dirección [110]. [12]

Capítulo 2

Arreglo experimental para la medición de anisotropías ópticas

Cuando un cristal es cúbico este debe mostrar isotropía, de modo que si se presenta una señal de RD en dicho cristal se concluye que existe alguna anisotropía debida a una pérdida de simetría. En RD, la medición de la diferencia en reflectividad se logra primeramente con un haz que incide sobre el cristal con dos polarizaciones mutuamente perpendiculares; en lo que sigue se detalla como se realiza esta medición.

La reflectividad compleja de un material tiene la forma $\tilde{r} = re^{i\theta}$, de modo que el cambio en la reflectividad se puede expresar de la siguiente manera:

$$\Delta\tilde{r} = e^{i\theta}\Delta r + ire^{i\theta}\Delta\theta, \quad (2.1)$$

Dividiendo 2.1 entre la reflectividad compleja obtenemos la anisotropía óptica en términos de la reflectividad [5]:

$$\frac{\Delta\tilde{r}}{\tilde{r}} = \frac{\Delta r}{r} + i\Delta\theta, \quad (2.2)$$

en donde $\frac{\Delta r}{r}$ y $\Delta\theta$ representan las partes real e imaginaria de la anisotropía respectivamente.

Debido a que la reflectancia se relaciona con la reflectividad como: $R = r^2$, podemos escribir la señal de reflectancia diferencial de la forma:

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{2r}{r^2} \Delta r = 2 \frac{\Delta r}{r} \quad (2.3)$$

2.1. Arreglo experimental

En la figura 1.3 se observa el sistema utilizado para realizar las mediciones de RD. Sus componentes se describen continuación [5]:

Lámpara de Xenón: La fuente de radiación consiste de una lámpara de Xenón de 75 W (Hamamatsu, C6979-01). Esta lámpara provee una buena intensidad y es suficiente para que el espectrómetro trabaje en un rango de 1.5 a 5.5 eV

Arreglo de espejos: La luz es enfocada a la muestra a través arreglo de espejos (espejo plano $\frac{1}{4}$ de onda UV y espejo esférico con distancia focal efectiva de 101.6 mm, marca Edmund, 25mm de diámetro)

Prisma tipo Rochon: La polarización lineal se realiza mediante un prisma tipo Rochon formado por dos cristales de cuarzo (PUR-10-2-X-Z, Optics for research) orientado a un ángulo de 45° respecto al plano de incidencia. La luz entra al polarizador por una de las facetas laterales y se divide en dos haces. Los haces salientes divergen del prisma con un ángulo que depende del ángulo de corte de los prismas. El haz extraordinario es obstruido, mientras que el ordinario pasa a través del Modulador Fotoelástico (MFE).

Modulador Fotoelástico (MFE): El MFE trabaja en base el efecto piezoeléctrico y está formado por una cristal rectangular de sílice acoplado mecánicamente con un transductor piezoeléctrico, el cual le transfiere deformaciones periódicas en forma pulsos a una razón de 42 KHz.18 Debido a la tensión aplicada al piezoeléctrico, la sílice se convierte en birrefringente, induciendo un retardo periódico para uno de los dos componentes del vector de polarización de la luz incidente. Esto es, si el elemento óptico está comprimido, el componente de polarización paralelo al eje modulador viaja ligeramente más rápido que el componente vertical. Si el elemento óptico se alarga, la componente horizontal va detrás de la componente vertical; esto trae como consecuencia que la luz emerge elípticamente polarizada.

Analizador: El analizador es un elemento polarizador, se utiliza otro Prisma Rochon, este se encuentra orientado 0° .

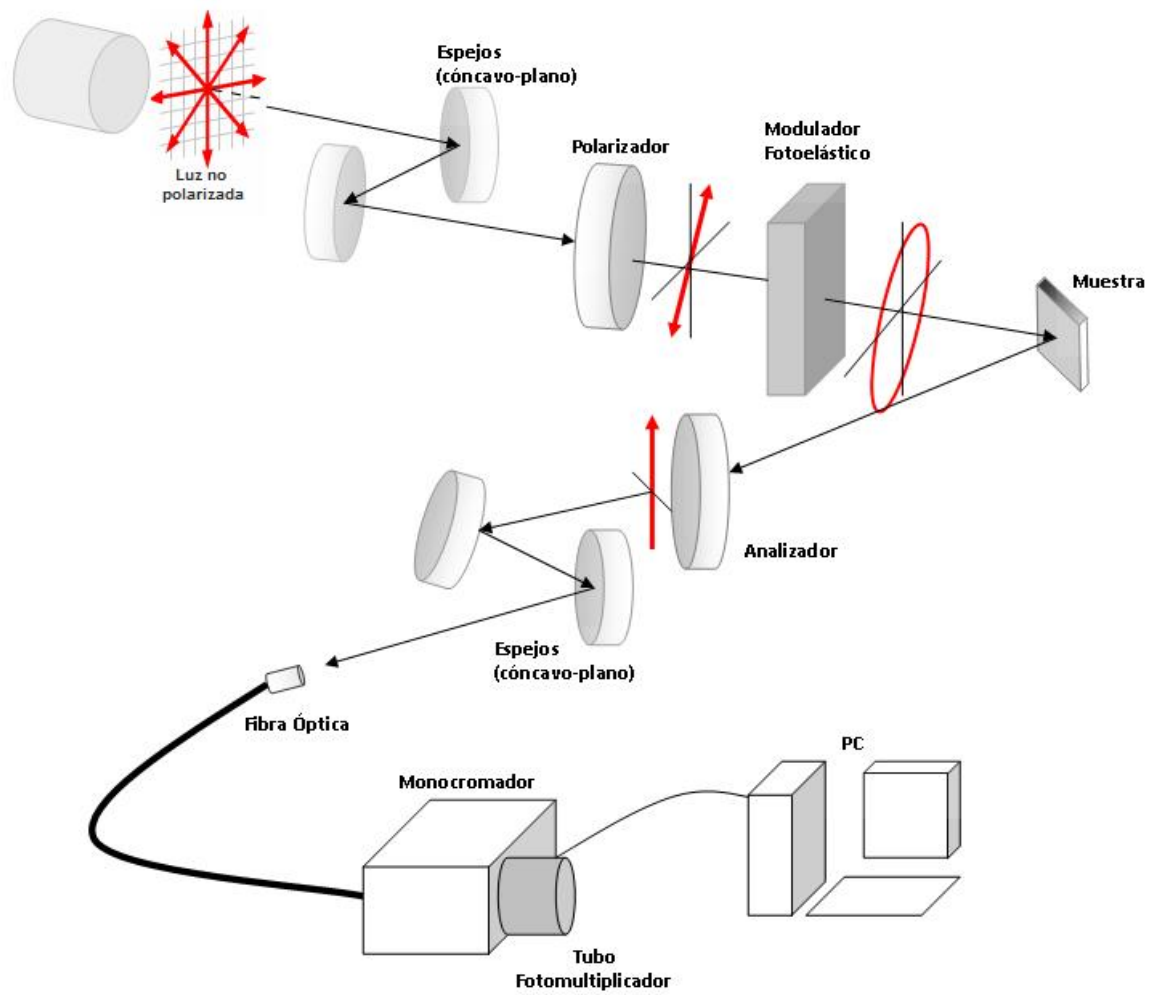


Figura 2.1: Arreglo experimental para la medición de Anisotropías Ópticas.

Arreglo de espejos: De igual modo utilizamos un espejo plano y otro cóncavo; esta vez el propósito es enfocar la luz hacia la fibra óptica.

Monocromador.: Realiza una dispersión de la luz por medio de rejillas de difracción, permitiendo seleccionar alguna frecuencia específica. Se utilizó para éste arreglo el Spectra Pro 2500i, Action research Corporation.

Tubo fotomultiplicador: Una vez que la luz es reflejada por la muestra, ésta se debe procesar detectar y convertir luz a voltaje, para poder obtener una señal proporcional a la ecuación 3.1. Para ello, se usó como elemento detector en nuestro espectrómetro un fotomultiplicador (PMT, photo-tube multiplier, por sus siglas en inglés). Este detector de radiación trabaja con el principio de efecto fotoeléctrico. El efecto fotoeléctrico consiste en la emisión y multiplicación de electrones por un material alcalino cuando éste se le ilumina con radiación electromagnética.

Este transductor convierte dichas señales luminosas a eléctricas y tiene una relación lineal entre la entrada y la salida. Consta de tres elementos principales que son el fotocátodo, dinodos multiplicadores y un ánodo colector de carga eléctrica. Su modo de operación es aplicando un alto voltaje (alrededor de -500 a -900 Volts), produciendo una fotocorriente. Se caracterizan por ser elementos muy sensibles y son ideales en aplicaciones en donde la cantidad de radiación a detectar es muy débil.

Cuando un fotón de luz incide sobre el fotocátodo, se desprende un electrón que viaja hasta el primer dinodo impulsado por la diferencia de potencial aplicada entre este y el cátodo. Esto le transfiere energía cinética suficiente para llegar al primer dinodo. En éste proceso, es capaz de arrancar varios electrones por cada electrón incidente. Como el dinodo siguiente tiene un potencial mayor que el anterior, el proceso de multiplicación (avalancha) se repite produciendo una multiplicación de electrones. De ésta manera al ánodo arriban alrededor de 10^6 electrones por cada electrón que incide, dando un alto factor de ganancia.

En este trabajo se utilizó un fotomultiplicador R928 tiene una alta eficiencia cuántica, alta corriente de amplificación y una amplia respuesta espectral de los rayos UV para el infrarrojo cercano que va desde 185 a 900 nm.

Lock-in: Amplificador sensible a la fase sincronizado a la frecuencia del modulador fotoelástico.

De modo resumido, el proceso de obtención de la señal de AO es el siguiente:

La luz proveniente de la lámpara de Xenón es colimada y enfocada hacia la muestra con ayuda de los dos espejos. En su camino hacia la muestra, la luz es pasada por un prisma Rochon donde se obtiene una polarización lineal orientada 45 grados respecto al plano de incidencia. El haz extraordinario es obstruido mientras que el haz ordinario se hace pasar a su vez a través del modulador fotoelástico y de ahí a la superficie de la muestra.

La luz que refleja la muestra pasa a través de un analizador perpendicular respecto al eje óptico y mediante otro arreglo de espejos se enfoca el haz hacia la fibra óptica.

El haz modulado se dispersa por medio del monocromador y de aquí la radiación es detectada por el tubo fotomultiplicador. Este convierte la luz a corriente y su salida se conecta a una resistencia de 10 K para convertir dicha corriente a voltaje, el cual es medido por un multímetro y un amplificador sensible a la fase. Estos dos últimos miden la componente DC de la señal (proporcional a la reflectividad) y la diferencia en reflexión, respectivamente.

2.1.1. Análisis Óptico[13]

El vector de Jones de la luz, después de atravesar el polarizador, es:

$$E = \frac{|\mathbf{E}|}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (2.4)$$

donde E es la intensidad del campo electromagnético del fotón.

El modulador fotoelástico provee al vector dado por la ecuación 2.2 un retardo δ , y por lo tanto el haz que emerge elípticamente polarizado se puede representar por la siguiente matriz:

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{-i\delta} \end{pmatrix} \frac{|\mathbf{E}|}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{|\mathbf{E}|}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\delta} \end{pmatrix}. \quad (2.5)$$

Asumiendo incidencia normal sobre la muestra, la respuesta óptica de la superficie se caracteriza por la matriz de Jones, la cual está dada por:

$$M = \begin{pmatrix} r_1 \cos^2 \theta + r_2 \sin^2 \theta & \Delta r \sin \theta \cos \theta \\ \Delta r \sin \theta \cos \theta & r_2 \cos^2 \theta + r_1 \sin^2 \theta \end{pmatrix}, \quad (2.6)$$

en donde r_1 y r_2 son las reflectancias complejas a lo largo de los dos ejes ópticos y θ es la orientación del eje óptico de la muestra. Para máxima anisotropía, $\theta = 45^\circ$

Por lo tanto despues de reflejarse en la superficie, utilizando las ecuaciones 2.3 y 2.4 obtenemos la matriz total que representa el nuevo estado de la polarización de la luz:

$$\frac{|\mathbf{E}|}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} r_1 + r_2 & \Delta r \\ \Delta r & r_2 + r_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{-i\delta} \end{pmatrix} = \frac{|\mathbf{E}|}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} r_1 + r_2 - \Delta r e^{-i\delta} \\ \Delta r + (r_2 + r_1)e^{-i\delta} \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

Posteriormente, este haz es pasado a traves del analizador, obteniéndose la siguiente señal:

$$S = \frac{|\mathbf{E}|}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_1 + r_2 - \Delta r e^{-i\delta} \\ \Delta r + (r_2 + r_1)e^{-i\delta} \end{pmatrix} = \frac{|\mathbf{E}|}{2\sqrt{2}} (-\Delta r + (r_2 + r_1)e^{-i\delta}). \quad (2.8)$$

La intensidad luminosa que llega al fotomultiplicador esta dada por:

$$SS^* = \frac{|\mathbf{E}|^2}{4} (r_1\bar{r}_1 + r_2\bar{r}_2 + (r_2\bar{r}_2 - r_1\bar{r}_1)\cos\delta + i(r_1\bar{r}_2 - \bar{r}_1r_2)\sen\delta); \quad (2.9)$$

si hacemos $R = \frac{1}{2}(|r_1|^2 + |r_2|^2)$, $\Delta R = (|r_1|^2 - |r_2|^2)$ y $r_1\bar{r}_2 - \bar{r}_1r_2 = |r_1||r_2|\sen(\theta_1 - \theta_2)$ con $\Delta\theta \approx 0$, tenemos entonces que la ecuación (2.7) se puede escribir como sigue:

$$I(t) = SS^* = \frac{|\mathbf{E}|^2}{4} (2R + \Delta R\cos\delta + R\Delta\theta\sen\delta) \quad (2.10)$$

Tomando en cuenta que el retardo impuesto por el modulador (MFE) es de la forma $\delta = \pi\sen(\omega t)$ y normalizando la ecuación anterior, se obtiene la ecuación final de RD final:

$$\frac{I(t)}{I(0)} = \frac{|\mathbf{E}|^2}{4} \left(2 + \frac{\Delta R}{R} \cos(\pi\sen\omega t) + \Delta\theta\sen(\pi\sen\omega t) \right). \quad (2.11)$$

De esta última ecuación tenemos que la señal contiene los términos $\frac{\Delta R}{R}$ y $\Delta\theta$ desarrollados al inicio de este capítulo. Las expresiones que acompañan a estos términos ($\cos(\pi \text{sen}\omega t)$ y $\text{sen}(\pi \text{sen}\omega t)$) pueden expandirse por medio de las funciones de Bessel[23]:

$$\cos(x \text{sen}\theta) = J_0(x) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} J_{2n}(x) \cos(2n\theta) \quad (2.12)$$

$$\text{sen}(x \text{sen}\theta) = 2 \sum_{n=1}^{\infty} J_{2n-1}(x) [\text{sen}(2n-1)\theta] \quad (2.13)$$

de modo que para $x = \pi$, $\theta = 2\pi f$ y $n = 1$ se tiene que para el término que acompaña a $\frac{\Delta R}{R}$ el valor fundamental está en una frecuencia $2f$, mientras que el término que acompaña a $\Delta\theta$ tiene su valor fundamental a una frecuencia f .

Las gráficas de la figura muestran la comparación en frecuencia para estas dos expresiones. Puede observarse como el periodo de la primera expresión es exactamente la mitad del periodo de la segunda expresión, correspondientes a frecuencias de 84 y 42 kHz respectivamente y de acuerdo con el valor de $f = 42 \text{ kHz}$ dado por la modulación del MFE.

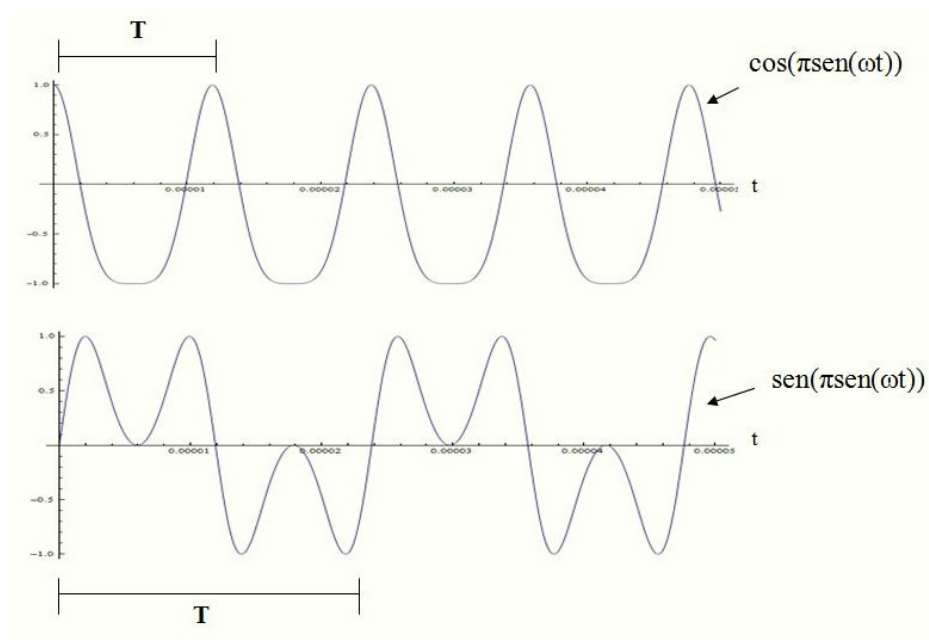


Figura 2.2: Comparación de las expresiones $\cos(\pi \text{sen}\omega t)$ y $\text{sen}(\pi \text{sen}\omega t)$

Capítulo 3

Silicio bajo esfuerzos compresivos y tensiles: efectos del substrato

Como se ha mencionado a lo largo de este trabajo, una de las maneras de lograr estrés en un cristal es por medio del crecimiento de capas epitaxiales con distinta constante de red, de tal modo que se provoque un estiramiento o compresión de los enlaces cristalinos. En nuestro caso contamos con 8 estructuras crecidas sobre substratos de Silicio, las cuales se enlistan a continuación.

- $Si/Si_{1-y}C_y/n - Si(110)$
- $Si/Si_{1-y}C_y/p - Si(001)5^\circ \text{desorientado}$
- $Si_{1-y}C_y/n - Si(110)$
- $Si_{1-y}C_y/p - Si(001)5^\circ \text{desorientado}$
- $SiGe/p - Si(001)5^\circ \text{desorientado}$
- $Si/SiGe/SiGe\text{gradado}/p - Si(001)5^\circ \text{desorientado}$
- $SiGe\text{gradado}/p - Si(001)5^\circ \text{desorientado}$
- $SiGe/p - Si(001)5^\circ \text{desorientado}$

En la lista anterior la desorientación es de 5° hacia el eje [110]. El estrés está determinado por la aleación (SiGe o SiC), cuya constante de red depende de la concentración de acuerdo con la ley de Vegard[14]. Para nuestros casos, esta ley se puede escribir de la siguiente manera:

$$a_{Si_{1-x}Ge_x} = xa_{Ge} + (1-x)a_{Si}, \quad (3.1)$$

$$a_{Si_{1-x}C_x} = xa_C + (1-x)a_{Si}. \quad (3.2)$$

donde a es la constante de red, x es la concentración y los subíndices Si, Ge y C se refieren a los elementos que forman de la aleación.

Podemos hacer entonces la división en dos fenómenos de estrés presentes en estos sistemas, uno tensil y otro compresivo

3.1. Deformación tensil producida por la aleación

$$Si_{1-x}Ge_x$$

La ecuación 3.1 se puede escribir:

$$a_{Si_{1-x}Ge_x} = (a_{Ge} - a_{Si})x + a_{Si}. \quad (3.3)$$

Debido a que la constante de red del Germanio es mayor que la del Silicio ($a_{Ge} > a_{Si}$), el valor de $(a_{Ge} - a_{Si})$ será siempre positivo. En consecuencia, de acuerdo con (3.3), la constante de red de la aleación ($a_{Si_{1-x}Ge_x}$) será mayor que la constante de red del Silicio en bulto (a_{Si}).

Al crecer Silicio sobre estructuras de $Si_{1-x}Ge_x$ relajado, se obtendrá una deformación con simetría tetragonal debido a la tensión.

En la figura 3.1 se muestra el proceso [15], primeramente se tiene una capa de Silicio en bulto a la cual se le crece la aleación de $Si_{1-x}Ge_x$; este, al relajarse, posee una estructura cristalina cúbica con una constante de red mayor que la del Silicio. Finalmente se tiene que el Si crecido sobre la aleación, al tener que adaptarse a la estructura de la misma, estará deformado de manera tensil sobre el plano.

3.2. Deformación compresiva producida por la aleación Si_yC_{1-y}

El mismo efecto producido por la aleación anterior se puede presentar con una aleación que posea una constante de red menor a la del Silicio. Tal es el caso de $Si_{1-y}C_y$ el cual posee una constante de red que se decrementa conforme se aumenta la concentración de carbono. De igual manera se produce

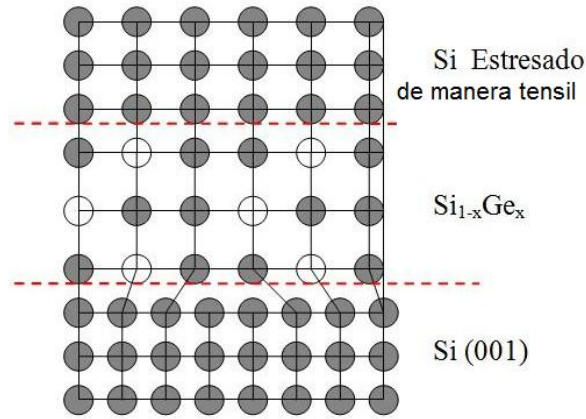


Figura 3.1: Deformación tensil producida por la aleación $Si_{1-x}Ge_x$

una deformación en la simetría del cristal, pero a diferencia del caso anterior, esta deformación se debe a un esfuerzo compresivo.

Reescribiendo la ecuación 3.4 se tiene:

$$a_{Si_{1-x}C_x} = (a_C - a_{Si})x + a_{Si}. \quad (3.4)$$

Debido a que la constante de red del Carbono es menor que la del Silicio ($a_C < a_{Si}$), el valor de $(a_C - a_{Si})$ será siempre negativo. En consecuencia, de acuerdo con (3.4), la constante de red de la aleación ($a_{Si_{1-x}C_x}$) será menor que la constante de red del Silicio en bulto (a_{Si}).

La figura 3.2 muestra el efecto producido. Se tiene primero el sustrato de Silicio con simetría cúbica; al crecer sobre este $Si_{1-y}C_y$ se presenta una estructura igualmente con simetría cúbica pero con una menor constante de red [16, 17]; finalmente se crece Si sobre esta aleación y se obtiene Silicio estresado debido a la compresión.

En ambos casos (estrés compresivo y tensil) observamos que existe un rompimiento en la simetría cúbica del cristal y en consecuencia una tensión, sin embargo, esto no es suficiente para obtener anisotropías detectables por medio de la RD. Las anisotropías se obtienen debido a la tensión en conjunto

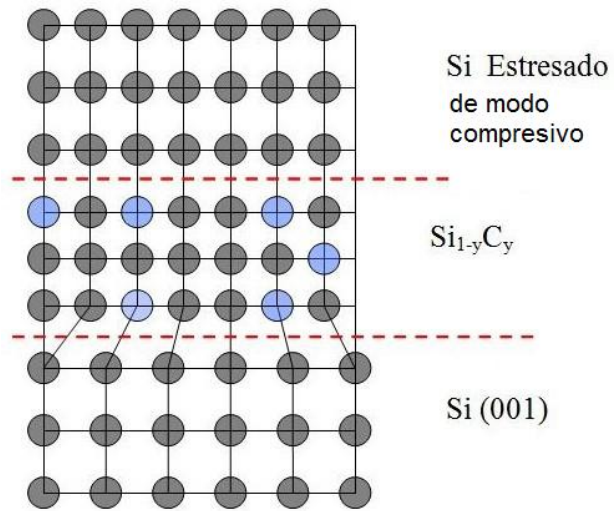


Figura 3.2: Deformación compresiva producida por la aleación $Si_{1-y}C_x$

con una desorientación de 5° hacia $[110]$ en los substratos de Silicio.

Capítulo 4

Resultados experimentales y análisis

En las figuras 4.1 a 4.4 se muestran los resultados al medir RD a las 8 estructuras mencionadas en el capítulo anterior. El análisis que se presenta en este trabajo corresponde a la estructura $Si/Si_{1-y}C_y/Si(001)$ desorientado. (Fig. 4.4). El interés en esta estructura radica en el rompimiento en la degeneración de los puntos E'_0 , E_1 y $E_1 + \Delta_1$.

En la figura 4.5 se muestran los espectros de Reflectividad para una muestra de Si en bulto y para la muestra $Si/SiC/Si(001)$. Se puede observar que estos espectros presentan la misma forma, con las energías E'_0 , E_1 y $E_1 + \Delta_1$ degeneradas en ambos casos.

Diferenciando los espectros de estas dos estructuras y dividiendo entre R, obtenemos la gráfica de la figura 4.6; podemos notar aquí que domina el espectro del punto crítico E'_0 para ambas estructuras, para el caso de las energías E_1 y $E_1 + \Delta_1$ se muestra un rompimiento en la degeneración únicamente para la estructura $Si/SiC/Si(001)$.

Se procederá a continuación a realizar el análisis en el punto crítico E'_0

4.1. Análisis en E'_0 [18]

En este punto tenemos transiciones de la banda de valencia con simetría Γ_8^v a la banda de conducción con simetría Γ_7^c , cuyas funciones de onda son las siguientes:

Para la banda de valencia Γ_8^v las funciones de onda sin perturbar son:

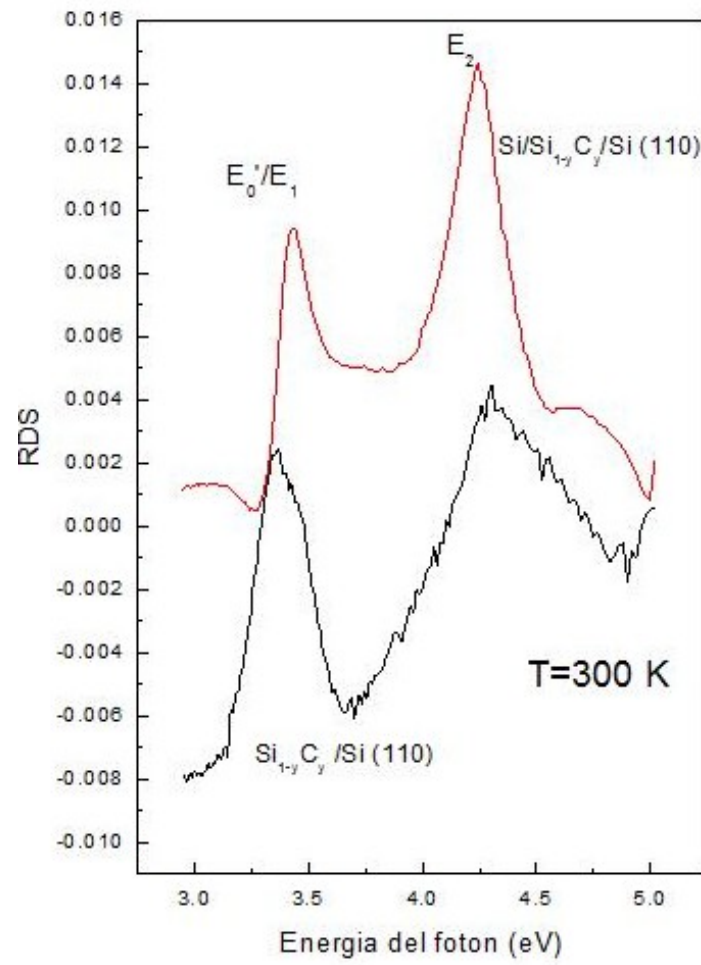


Figura 4.1: Señal RD para SiC crecido sobre Si (110)

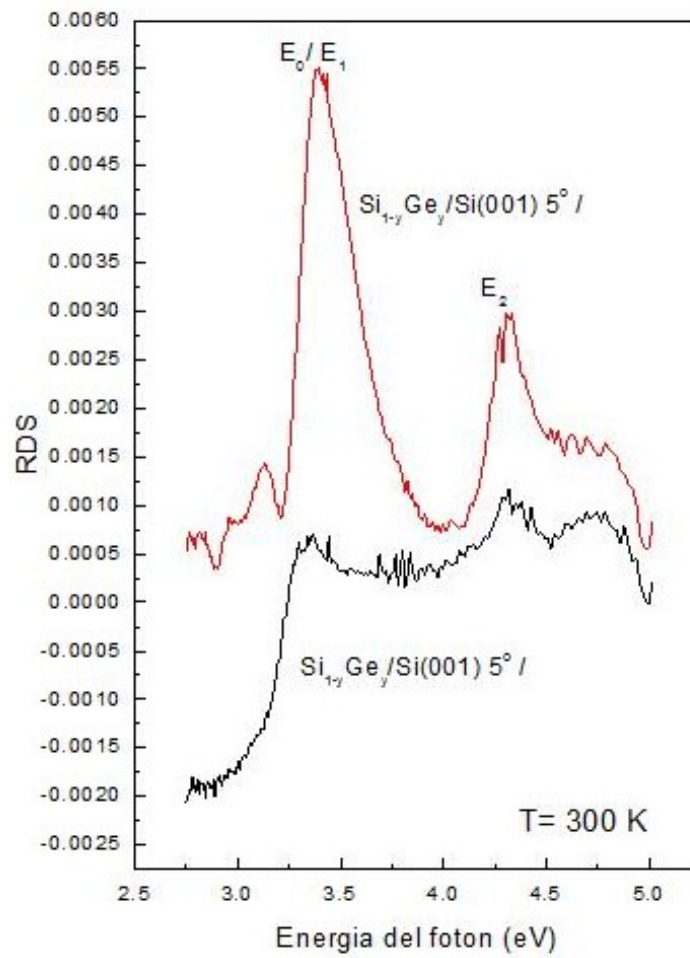


Figura 4.2: Señal RD para SiGe crecido sobre Si (001) 5° desorientado

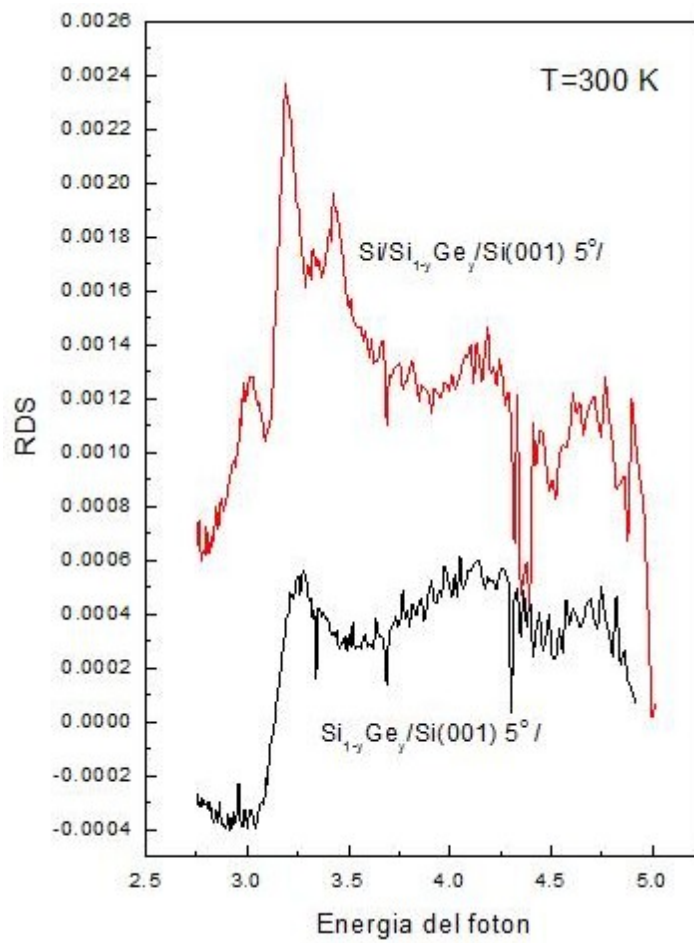


Figura 4.3: Señal RD para SiGe crecido sobre Si (001) 5° desorientado y Si crecido sobre SiGe relajado

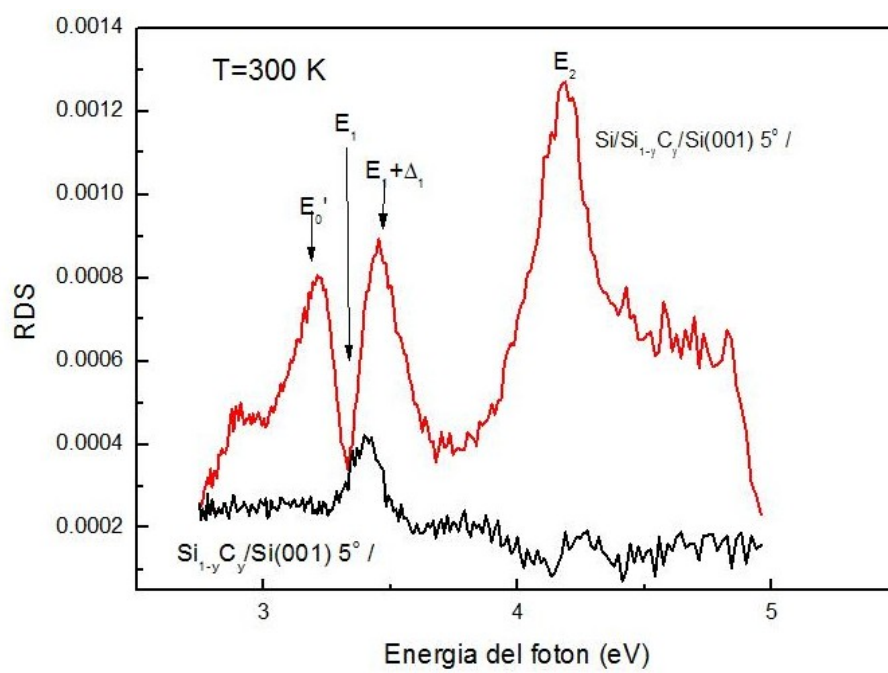


Figura 4.4: Señal RD para SiC crecido sobre Si (001) 5° desorientado y Si crecido sobre SiC relajado

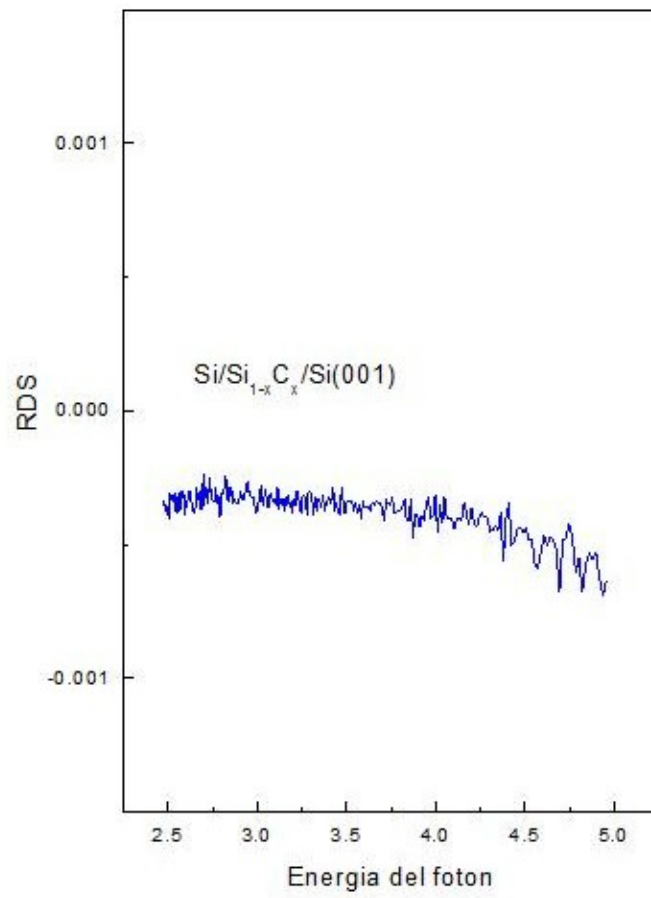


Figura 4.5: Señal RD para Si/SiC/Si (001) sin desorientación

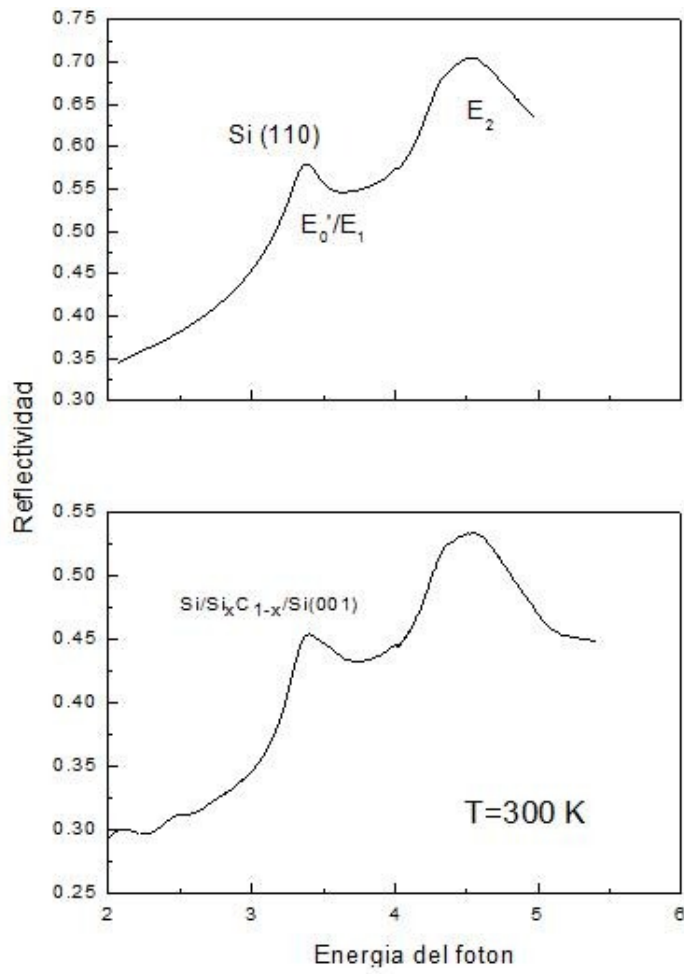


Figura 4.6: Señal de R para Si y $Si/SiC/Si(001)$

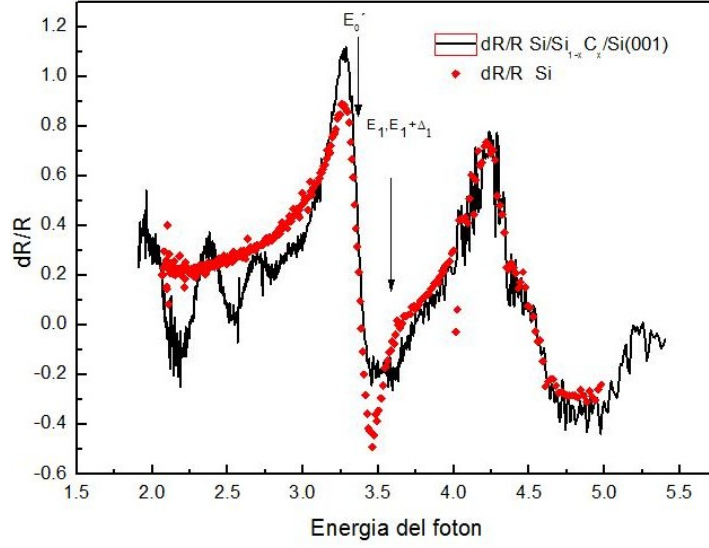


Figura 4.7: Señal de dR/R para Si y $Si/SiC/Si(001)$

$$|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}(x + iy)|\uparrow\rangle, \quad (4.1)$$

$$|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(x - iy)|\downarrow\rangle, \quad (4.2)$$

$$|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle = -\frac{1}{\sqrt{6}}(x + iy)|\downarrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}z|\uparrow\rangle, \quad (4.3)$$

$$|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = -\frac{1}{\sqrt{6}}(x - iy)|\uparrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}z|\downarrow\rangle, \quad (4.4)$$

donde x, y y z son las bases de los orbitales que describen los enlaces de la estructura cúbica del diamante, y están orientados, respectivamente a lo largo de $[100], [010]$ y $[001]$.

Para el caso de la banda de conducción con simetría Γ_7^c las funciones de onda sin perturbar están dadas por:

$$|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(x + iy)|\downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|\uparrow\rangle, \quad (4.5)$$

$$|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(x - iy)|\uparrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}}|\downarrow\rangle. \quad (4.6)$$

El tensor de la deformación para los casos 3.1 y 3.2 se describe de la siguiente forma:

$$e = \begin{pmatrix} e_{\parallel} & 0 & 0 \\ 0 & e_{\parallel} & 0 \\ 0 & 0 & e_{\perp} \end{pmatrix}, \quad (4.7)$$

donde $e_{\perp} = -2\frac{C_{12}}{C_{11}}e_{\parallel}$, C_{11} y C_{12} son las compliancias elásticas y e_{\parallel} es la deformación en el plano dada por:

$$e_{\parallel} = \frac{a_{SiC} - a_{Si}}{a_{Si}} \quad (4.8)$$

$$e_{\parallel} = \frac{a_{SiGe} - a_{Si}}{a_{Si}}, \quad (4.9)$$

donde a es la constante de red.

La perturbación introducida por la tensión se puede representar con el Hamiltoniano de Pikus y Bir. Para la i -ésima banda este se escribe de la siguiente manera:

$$H^{(i)} = -a^{(i)}Tr(e) - 3b^{(i)}\left((Lx^2 - \frac{1}{3}L^2)e_{xx} + c.p.\right) - \frac{6}{\sqrt{3}}d^{(i)}(\{Lx, Ly\}e_{xy} + c.p.) \quad (4.10)$$

donde $a^{(i)}$, $b^{(i)}$ y $c^{(i)}$, son los potenciales de deformación hidrostático, ortogonal y ortorrómbico respectivamente y c.p. se refiere a la permutación cíclica.

Al aplicar 4.10 a las funciones de onda obtenemos la siguiente matriz donde:

$$E_A = \delta E_H + \delta E_S, \quad (4.11)$$

$$E_B = \delta E_H - \delta E_S, \quad (4.12)$$

$$\delta E_H = 2\frac{e_{\parallel}}{C_{11}}a^v(C_{12} - C_{11}), \quad (4.13)$$

$$\delta E_s = \frac{e_{\parallel}}{C_{11}}b^v(2C_{12} + C_{11}). \quad (4.14)$$

Estado	$ \frac{3}{2}, \pm\frac{3}{2}\rangle$	$ \frac{3}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$
$\langle \frac{3}{2}, \pm\frac{3}{2} $	E_A	0
$\langle \frac{3}{2}, \pm\frac{1}{2} $	0	E_B

Cuadro 4.1: Matriz del Hamiltonianos para la banda de valencia (Ec. 4.10)

mientras que para la banda de conducción la matriz es:

Estado	$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$
$\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} $	δE_H^c	0
$\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} $	0	δE_H^c

Cuadro 4.2: Matriz de Hamiltonianos para la banda de conducción

$$\text{con } \delta E_H^c = 2\frac{e_{\parallel}}{C_{11}}a^c(C_{12} - C_{11})$$

Al tener una interacción radiación-materia, la probabilidad de transición está dada por la regla de oro de Fermi la cual involucra el estado de polarización, el momento y las funciones de onda inicial y final, esta probabilidad se escribe de la siguiente manera[18]:

$$\sum_{i,f} |\langle \Psi_f | \hat{e} \cdot \vec{p} | \Psi_i \rangle|^2 \quad (4.15)$$

Las polarizaciones de la luz en el sistema coordenado del laboratorio son las siguientes:

$$\hat{e}_a = \frac{(1, -1, 0)}{\sqrt{2}}, \quad (4.16)$$

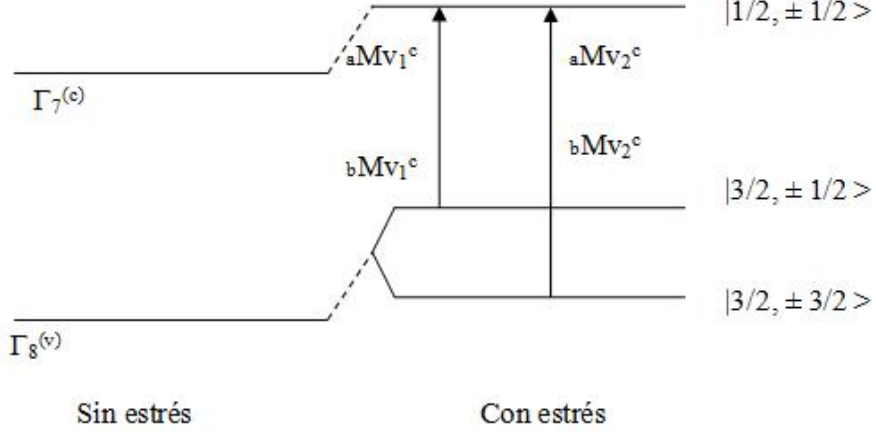


Figura 4.8: Efecto del estrés en las bandas de conducción y de valencia

$$\hat{e}_b = \left(\frac{\cos\theta}{\sqrt{2}}, \frac{\cos\theta}{\sqrt{2}}, -\sin\theta \right), \quad (4.17)$$

donde θ es el ángulo de desorientación hacia [110].

Tomando como base la figura 4.1, podemos observar el efecto en las bandas antes y después de aplicar estrés. Primeramente se tiene un corrimiento en la banda de conducción. Del mismo modo se presenta un corrimiento en la banda de valencia así como un desdoblamiento en energías. Se tiene entonces que están presentes dos transiciones denotadas en la figura con los subíndices v1 y v2; a su vez para cada una de estas dos transiciones se presentan dos polarizaciones ortogonales indicados en la figura con las letras a y b.

Calculando las probabilidades de transición para las dos transiciones y las dos polarizaciones obtenemos:

$${}_aM_{v1}^c = | \langle \Psi_c | \hat{e}_a \cdot \vec{p} | \Psi_{v1} \rangle |^2 = P_0^2, \quad (4.18)$$

$${}_bM_{v1}^c = | \langle \Psi_c | \hat{e}_b \cdot \vec{p} | \Psi_{v1} \rangle |^2 = P_0^2 \cos^2\theta, \quad (4.19)$$

$${}_aM_{v2}^c = | \langle \Psi_c | \hat{e}_a \cdot \vec{p} | \Psi_{v2} \rangle |^2 = \frac{P_0^2}{3}, \quad (4.20)$$

$${}_bM_{v_2}^c = | \langle \Psi_c | \hat{e}_b \cdot \vec{p} | \Psi_{v_2} \rangle |^2 = \frac{2P_0^2}{9} ((\cos\theta + \sqrt{2}\sin\theta)^2 + 2(\frac{\cos\theta}{2} - \sqrt{2}\sin\theta)^2). \quad (4.21)$$

Se tiene entonces que para la transición $|v_1\rangle \rightarrow |c\rangle$

$$\Delta M_{v_1}^c = {}_aM_{v_1}^c - {}_bM_{v_1}^c = P_0^2 \sin^2\theta \quad (4.22)$$

mientras que para la transición $|v_2\rangle \rightarrow |c\rangle$

$$\Delta M_{v_2}^c = {}_aM_{v_2}^c - {}_bM_{v_2}^c = -P_0^2 \sin^2\theta \quad (4.23)$$

Para la función dieléctrica sin perturbar tenemos la expresión [19]:

$$\tilde{\epsilon} = CMJ(E, E_0'), \quad (4.24)$$

donde C es una constante, M es el elemento de matriz de la transición, J es la densidad de estados conjuntos y E es la energía.

El cambio en la función dieléctrica dado por la perturbación es:

$$\Delta\tilde{\epsilon} = \Delta\tilde{\epsilon}_1 + \Delta\tilde{\epsilon}_2, \quad (4.25)$$

donde

$$\Delta\tilde{\epsilon}_1 = C\Delta M_{v_1}^c J(E, E_0' - \delta E_s) \quad (4.26)$$

y

$$\Delta\tilde{\epsilon}_2 = C\Delta M_{v_2}^c J(E, E_0' + \delta E_s) \quad (4.27)$$

De (4.22), (4.23) y (4.25) se obtiene para el cambio en la función dieléctrica:

$$\begin{aligned} \Delta\tilde{\epsilon} &= CP_0^2 \sin^2\theta [J(E, E_0' - \delta E_s) - J(E, E_0' + \delta E_s)] = \\ &= 2CP_0^2 \sin^2\theta \frac{[J(E, E_0' - \delta E_s) - J(E, E_0' + \delta E_s)]}{2\delta E_s} \delta E_s, \end{aligned} \quad (4.28)$$

que puede escribirse como:

$$\Delta\tilde{\epsilon} = 2sen^2\theta \frac{\partial\tilde{\epsilon}}{\partial E} \delta E_s. \quad (4.29)$$

donde el valor de δE_s esta definido como:

$$\delta E_s = \frac{e_{\parallel}}{C_{11}} b^v (2C_{12} + C_{11}), \quad (4.30)$$

ecuación en la cual e_{\parallel} es la componente paralela del tensor de deformación, b^v es el potencial de deformación tetragonal para la banda de valencia en E'_0 , C_{12} y C_{11} son las componentes del tensor de rigidez.

Una vez obtenida la expresión para el cambio en la función dieléctrica (Ec. 4.28), esta se incluye en la expresión para la forma de línea de la Reflectancia Diferencial:

$$\frac{\Delta R}{R} = Re[(\alpha - i\beta)\Delta\tilde{\epsilon}] = Re[(\alpha - i\beta)2sen^2\theta \frac{\partial\tilde{\epsilon}}{\partial E} \delta E_s], \quad (4.31)$$

donde α y β son los coeficientes de Seraphin [20] dados por:

$$\alpha = \frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial \epsilon_r}, \quad (4.32)$$

$$\beta = \frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial \epsilon_i}, \quad (4.33)$$

donde ϵ_r y ϵ_i se refieren a las partes real e imaginaria de la función dieléctrica respectivamente.

4.2. Ajuste en E'_0

La respuesta óptica lineal macroscópica del Silicio esta representada por la función dieléctrica, la cual está relacionada con la estructura de bandas electrónica del material. Las estructuras observadas en el espectro de la función dieléctrica $\epsilon(\omega)$ se atribuyen a transiciones interbanda, estas pueden ser analizadas en términos de la forma de línea estándar [21, 22]:

$$\epsilon(\omega) = C - Ae^{i\Phi}(\hbar\omega - E + i\Gamma)^n \quad (4.34)$$

donde A es la amplitud, E la energía de transición, Γ el ancho y Φ el ángulo de fase excitónico.

Ecuación	Parámetro	Valor
4.35	A	- 11.7 eV
	Φ	-30 °
	E	3.27 eV
	Γ	0.08 eV
4.30	ϵ_{\parallel}	0.015
	C ₁₁	1.6577 dinas/cm ²
	C ₁₂	0.6392 dinas/cm ²
	b ^v	2.2 eV

Figura 4.9: Parámetros utilizados en las ecuaciones 4.30 y 4.35 para el ajuste teórico en E'_0

El exponente n toma el valor de 0 para transiciones 2D, dejándolo en forma logarítmica:

$$\epsilon(\omega) = A^{i\Phi} \ln(\hbar\omega - E + i\Gamma) \quad (4.35)$$

mientras que para transiciones excitónicas n toma el valor de -1.

Para modelar E'_0 se tomó la ecuación (4.35) correspondiente a una transición 2D. Esta forma de línea se sustituyó en (4.30) y se obtuvo la gráfica de la figura 4.10. La relación entre los valores y las ecuaciones utilizadas se muestran en la tabla de la figura 4.9

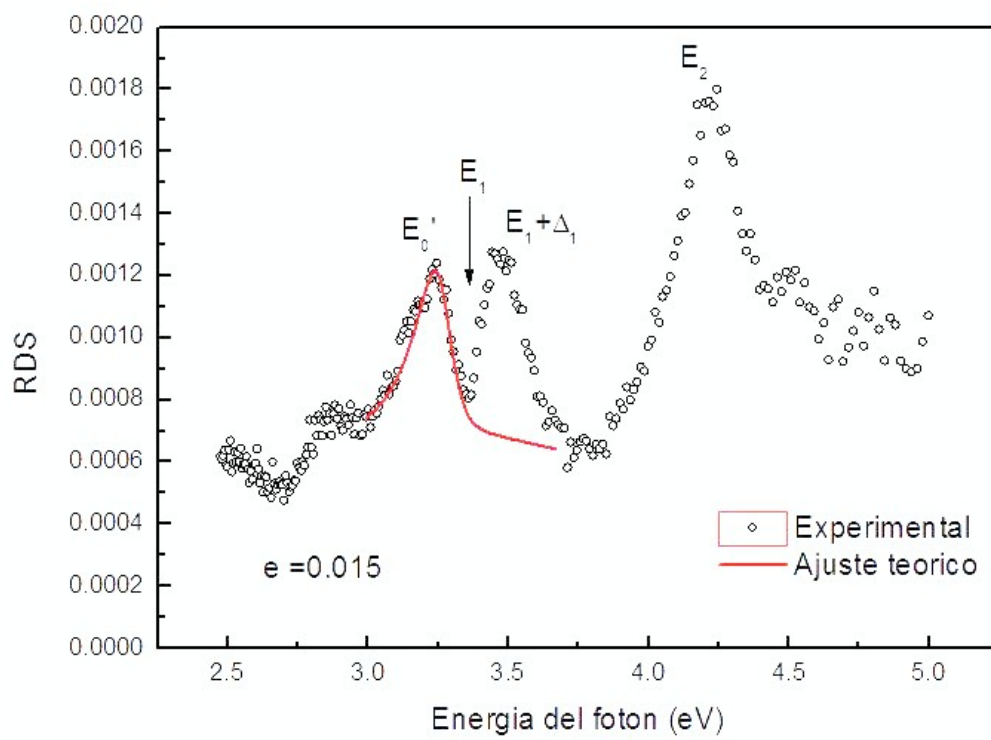


Figura 4.10: Ajuste teórico para E_0'

CONCLUSIONES

Se realizaron mediciones de RD para 8 sistemas crecidos sobre Substratos de Silicio con una desorientación de 5° hacia [110]. De estas mediciones se obtuvieron señales de anisotropía en todos los casos, sin embargo nuestro interés se centró en la estructura $Si/Si_{1-y}C_y/Si(001)5^\circ$ desorientado.

Se utilizó el Hamiltoniano de Pikus-Bir para realizar el análisis de la anisotropía en el punto crítico E'_0 obteniéndose un resultado consistente con el espectro de RD experimental. Se concluye de aquí que la anisotropía en el sistema mencionado es debida a dos fenómenos: Primeramente a la desorientación en el substrato de Silicio y posteriormente al estrés compresivo experimentado por el Si de la última capa como resultado de la diferencia entre las constantes de red entre el substrato y la aleación de $Si_{1-y}C_y$.

Se obtuvo el valor de e_{\parallel} del tensor de deformación modelando en el punto crítico E'_0 con una transición 2D para la forma de línea de la función dieléctrica.

Se comprobó el efecto de alteración en la simetría de Si (001) debido al crecimiento de capas epitaxiales y se propone la RD en conjunto con el modelo perturbativo de Pikus-Bir para la cuantificación del grado de las deformaciones.

Bibliografía

- [1] D.K.Nayak, S.K. Chun, Appl. Phys. Lett. 64 (19) (1994)
- [2] J.F. McGlip J. Phys. Condens Matter 22 (2010)
- [3] D.E. Aspnes and A.A. Studna, Phys. Rev. Lett, 54, 1956 (1985)
- [4] Peter Y.Yu, M. Cardona, Fundamentals of Semiconductors, (Third edition Springer, 2001), p. 315
- [5] M.O. Villalobos Aguilar. Tesis de Maestría. Facultad de Ciencias, UASLP. (2009). p 1
- [6] Weightman P.,Martin D.S., Cole R.J., Farrel T. Reports on progress in Physics 68, 1251 (2005)
- [7] L.F. Lastras Martínez, A. Lastras Martínez, R.E. Balderas Navarro, Review of Scientific Instruments 64, 2147 (1993)
- [8] O. Ascher, A reflectance anysotropy spectrometer for real time measurements review of scientific instruments 63, 5332 (1992)
- [9] D. E. Aspnes, Phys. Rev. B 27, 985 (1983)
- [10] L.D. Sun, Hohage M., Zeppenfeld P., Balderas Navarro R. E., Surface Science 589, 153 (2005)
- [11] R.H Jasso. Tesis Maestría, Fac. Ciencias UASLP p.5 (2009)
- [12] L.F. Lastras Martínez, R.E. Balderas Navarro, R. Castro García, R. Herrera Jasso, M. Chavira Rodríguez, and A. Lastras Martínez, Ann. Phys 523, 121-128, (2011)
- [13] H. Fujiwara,J. Willey, Spectroscopic Ellipsometry: Principles anda Applications, (2007), p. 63
- [14] A.R. Denton, N. W. Aschcroft, Phys. Rev. A, 43 3161-3164 (1991)

- [15] J.J. Welser, Mat. Res. Soc. Symp. Proc. Vol. 379 (Materials Research Society 1995)
- [16] Iyer et al. Appl. Phys Lett. Vol 60,356
- [17] Journal Appl. Phys. 39, 4365 (1968)
- [18] F. E Pollak and M. Cardona, Phys. Rev. 172 3 (1968)
- [19] L.F. Lastras Martínez and A. Lastras Martínez, Phys. Rev. 54 10726 (1996)
- [20] B.O. Seraphin and N. Botka, Phys. Rev. 145 2 (1966)
- [21] P. Lautenschangler, M. Garriga, L. Viña, M. Cardona, Phys. Rev. B 36 5 (1987)
- [22] M.Balkanski, Optical Properties of Solids Vol. 2, Ed. Elsevier Science (Noth Holland 1980)
- [23] Arfken G. , Mathematical Methods for Physicists, 2nd Edition Academic Press (1970), pp. 482
- [24] Formation of compressively strained $Si/Si_{1-x}C_x/Si(100)$ heterostructures using gas-source molecular beam epitaxy, Keisuke Arimoto, Hiroshi Furukawa, Junji Yamanaka, Chiaya Yamamoto, Kiyokazu Nakagawa, Noritaka Usami, Kentarou Sawano, Yasuhiro Shiraki, Journal of Crystal Growth(2012),doi:10.1016/j.jcrysgro.2011.12.084