

ALMA MATER STUDIORUM · UNIVERSITÀ DI BOLOGNA

---

Scuola di Scienze  
Corso di Laurea Magistrale in Fisica

**Studio, microfabbricazione e  
caratterizzazione di dispositivi in silicio  
deformato per applicazioni  
opto-elettroniche**

**Relatore:**  
Prof. Beatrice Fraboni

**Presentata da:**  
Diego Marini

**Correlatore:**  
Dott. Gabriele Bolognini

**Sessione II**  
**Anno Accademico 2012/2013**

---

# Indice

<b>Introduzione</b>	<b>5</b>
<b>1 Stato dell'arte</b>	<b>9</b>
<b>Stato dell'arte: silicio deformato ed applicazioni in ottica</b>	<b>9</b>
1.1 Silicio deformato in microelettronica . . . . .	10
1.2 Il Silicio deformato in ottica . . . . .	12
<b>2 Teoria e metodi simulativi</b>	<b>17</b>
2.1 Struttura cristallina del Silicio . . . . .	17
2.2 Proprietà meccaniche del Silicio . . . . .	20
2.3 Proprietà elettriche ed ottiche del Silicio . . . . .	26
2.4 Effetto elettro-ottico nel Silicio . . . . .	29
2.5 Relazione fra Effetto elettro-ottico e non linearità del mezzo . . .	31
2.6 Stress e strain in film sottili . . . . .	32
2.7 Effetto foto-elastico . . . . .	34
2.8 Simulazioni di stress, strain ed elettromagnetiche con il metodo degli elementi finiti . . . . .	36
<b>3 Processo di microfabbricazione</b>	<b>41</b>
<b>4 Misure TEM</b>	<b>55</b>
4.1 La tecnica TEM (Transmission Electron Microscopy) . . . . .	55
4.2 Il microscopio TEM . . . . .	59
4.3 Misure di strain tramite diffrazione elettronica a fascio convergente	62
4.4 Immagini STEM e CBED dei campioni . . . . .	72
<b>5 Analisi dello strain e proprietà opto-elettroniche</b>	<b>83</b>
5.1 Analisi di strain . . . . .	83
5.2 Confronto con misure TEM . . . . .	89
5.3 Birifrangenza e indice di rifrazione efficace . . . . .	94
<b>Conclusioni</b>	<b>99</b>



# Introduzione

Il silicio, materiale di base per la realizzazione di gran parte dei dispositivi microelettronici, ha suscitato negli ultimi anni un grande interesse nell'ambito della fotonica per la possibile integrazione di dispositivi elettronici e ottici ad alta velocità su un unico chip. Ciò nonostante, il silicio non trova ancora largo impiego in fotonica principalmente a causa delle sue proprietà elettromagnetiche: oltre alla presenza di band-gap indiretto che impedisce una efficiente emissione di luce, la simmetria reticolare non permette infatti la presenza, o limita la consistenza, di alcuni effetti, come quello elettro-ottico, presenti invece nei materiali utilizzati in questo campo, come quelli piezo-elettrici (ad es. il niobato di litio). È stato dimostrato che la deformazione indotta dalla deposizione di film sottile ad alto stress intrinseco, tecnologia recentemente applicata in fotonica, è in grado di indurre alcuni di questi effetti rompendo le simmetrie della struttura. Tale tecnologia, che prevede l'utilizzo del nitruro di silicio come film ad alto stress intrinseco su dispositivi ottici in silicio, è promettente: diversi lavori sperimentali evidenziano infatti l'induzione di effetti non lineari e significativi coefficienti elettro-ottici nello strained silicon. I valori ottenuti, seppur distanti da quelli dei materiali impiegati attualmente in dispositivi elettro-ottici, lasciano pensare che tale tecnologia, già ampiamente impiegata nell'industria microelettronica, possa venire utilizzata anche nel campo delle telecomunicazioni aprendo la strada all'integrazione, permettendo di integrare dispositivi elettronici ed ottici sullo stesso chip.

È in questo contesto che si inquadra questo lavoro di tesi, in cui viene studiata la deformazione reticolare indotta da un film di nitruro depositato su strutture micrometriche in silicio.

Sono state effettuate inizialmente diverse simulazioni di distribuzioni di tensione (stress) e deformazione (strain) su strutture in silicio con lo scopo di verificare l'applicabilità del metodo agli elementi finiti implementato nel simulatore utilizzato, confrontando la validità dei valori ottenuti ed ottenendo stime di stress e strain. Successivamente alla microfabbricazione, si sono quindi eseguite simulazioni sulla deformazione con geometrie che riproducono le strutture che sono state effettivamente realizzate ed caratterizzate, al fine di studiare gli effetti meccanici prodotti dallo strato di nitruro. È stata inoltre studiata numericamente la deformazione reticolare indotta dal nitruro su dispositivi ottici

guidanti in silicio, come guide d'onda su substrato Silicon-on-insulator(SOI), calcolando la variazione di alcune proprietà ottiche come la birifrangenza e la variazione dell'indice efficace per stimarne l'entità e verificare la possibilità di impiegare silicio deformato in dispositivi elettro-ottici.

Relativamente agli aspetti di microfabbricazione, sono state realizzate, impiegando la tecnologia planare del silicio, delle strutture che permettessero lo studio delle proprietà del silicio deformato. La tecnologia prevede la deposizione di ossido di silicio a bassa temperatura (LTO), fotolitografia e rimozione selettiva di materiale tramite reactive ion etching (RIE) che hanno permesso di ottenere, a partire da wafer di silicio, linee (ridge) di dimensioni micrometriche. Su di esse è stato quindi depositato un film di nitruro stechiometrico, che grazie al suo elevato stress intrinseco provoca una significativa deformazione.

E' stato quindi misurato lo strain reticolare nel silicio deformato da  $\text{Si}_3\text{N}_4$  per le strutture realizzate. Le tecniche di misura comunemente usate per la caratterizzazione di film sottili si basano su diffrazione a raggi X, channeling e spettrometria Raman e allo stato attuale hanno una risoluzione micrometrica; data la dimensione delle strutture fabbricate, queste tecniche si sarebbero rivelate di poca utilità. Per questo è stata utilizzata la tecnica Convergent Beam Electron Diffraction (CBED) realizzabile al microscopio elettronico in trasmissione (TEM), che ha una risoluzione nanometrica ed una sensibilità molto elevata, dell'ordine di  $100 \mu\epsilon$ . Sono state analizzate le distribuzioni di alcune componenti di strain sulla sezione trasversa del campione, in particolare nella regione micrometrica di silicio, in prossimità del film di  $\text{Si}_3\text{N}_4$ . Grazie alle immagini STEM della sezione delle ridge in esame, è stato possibile osservare le non idealità

Sono stati dunque analizzati i risultati delle simulazioni di strain confrontandoli con i valori ottenuti nelle misure CBED al fine di testare l'applicabilità del metodo e delle geometrie utilizzate per le strutture in esame. La tecnica CBED necessita di una accurata e particolare procedura di preparazione dei campioni, che prevede l'assottigliamento fino a poche centinaia di nanometri. Ciò può generare particolari effetti che si ripercuotono nella misura. Per questo si è rivolta particolare attenzione all'analisi di questi risultati ed al confronto con quelli delle simulazioni cercando di individuare, nelle discrepanze, i limiti della simulazione e quelli della misura. Per ultimo si è effettuata una stima di alcune proprietà di guide d'onda in silicio, con geometria affine a quella ottenuta nei campioni, in particolare birifrangenza ed indice di rifrazione efficace al fine di studiarne l'applicabilità in dispositivi opto-elettronici.

Il lavoro di tesi, che comprende attività di tipo teorico, simulativo e sperimentale, è suddiviso in cinque capitoli.

Nel primo capitolo si riporta lo stato dell'arte mettendo in risalto gli impieghi dell'ottica ed opto-elettronica nel campo delle telecomunicazioni, speci-

ficatamente in sostituzione delle connessioni elettriche fra unità di calcolo che stanno raggiungendo i loro limiti fisici. Si descrive inoltre l'utilizzo del silicio deformato nell'industria microelettronica e si evidenzia il ruolo nell'evoluzione dell'integrazione dei transistor su larga scala. Si descrivono poi gli studi e le scoperte più significative sulle proprietà elettromagnetiche del silicio deformato ottenuto mediante deposizione di film sottili ad alto stress intrinseco.

Nel secondo capitolo vengono introdotte le proprietà meccaniche ed elettromagnetiche del silicio. Si mettono in evidenza le caratteristiche della struttura reticolare che impediscono la presenza di alcuni effetti, come quello elettro-ottico e rendono il silicio non deformato non particolarmente adatto ad applicazioni opto-elettroniche. Si introduce poi l'effetto foto-elastico che permette, tramite stress indotti, di modificare le proprietà ottiche del silicio. Vengono poi descritti il metodo agli elementi finiti (Finite Element Method FEM) ed il modello semi-analitico detto Plane Strain Model, utilizzati nelle simulazioni strutturali ed elettromagnetiche per la stima dello stress e così via.

Nel terzo capitolo viene quindi descritto il flusso di processo utilizzato per la realizzazione delle strutture in silicio su cui sono state effettuate misure di strain. Si analizzano i vari processi tecnologici: deposizione di Low Thermal Oxide (LTO), processo fotolitografico, attacco tramite Reactive Ion Etching (RIE) dell'ossido, rimozione del fotoresist, attacco RIE del silicio, attacco wet dell'LTO e deposizione del nitruro di silicio. Le scelte dei vari procedimenti utilizzati sono descritti in dettaglio così come gli effetti sui campioni realizzati, riportando, in corrispondenza di ogni passaggio, immagini al microscopio ottico.

Nel quarto capitolo vengono descritti i principi fisici della microscopia elettronica in trasmissione, evidenziandone le applicazioni per l'analisi strutturale dei materiali. In particolare sono forniti i dettagli della tecnica Convergent Beam Electron Diffraction (CBED) utilizzata per le analisi di strain analizzando le caratteristiche ed i limiti. Vengono quindi descritte tutte le fasi ed i processi che sono stati svolti per la preparazione dei campioni che sono stati analizzati. Infine sono presentati ed analizzati i dati sperimentali ottenuti.

Nel quinto capitolo sono riportati i risultati delle simulazioni di deformazione effettuate sulla geometria delle strutture realizzate ed il confronto con i dati ottenuti dall'analisi CBED sui campioni. Il confronto delle misure sperimentali presenta un buon accordo quantitativo con i dati ottenuti mediante l'analisi numerica con il metodo FEM, nonché con il Plane Strain Model confermando l'accuratezza e l'affidabilità dei due metodi nella descrizione meccanica ed elettromagnetica dei dispositivi in oggetto. Nello specifico vengono riportati i risultati dello studio numerico della birifrangenza e dell'indice di rifrazione efficace in guide d'onda realizzate con tecnologia SOI su cui è depositato un film sottile di nitruro di silicio stechiometrico per la realizzazione di dispositivi opto-elettronici ad altissima velocità.





# Capitolo 1

## Stato dell'arte

### Ottica in Silicio

Negli ultimi anni l'evoluzione della ricerca nel campo della microelettronica ha permesso un progressivo miglioramento delle capacità computazionali dei calcolatori e un aumento delle quantità di dati immagazzinabili. Si rivela dunque necessario un adeguato sistema di interconnessioni fra i sistemi di computazione in grado di gestire grandi flussi di informazioni e comunicazioni veloci, cioè con tempi brevi per la codifica, la decodifica, e il trasporto dell'informazione. Le reti elettroniche non sono in grado di svolgere efficacemente questo compito per velocità che possono arrivare a centinaia di Gb/s. Le ragioni sono molteplici: da una parte la densità delle piste ha ormai raggiunto il limite fisico legato all'isolamento elettrostatico e termico, dall'altra la bassa efficienza energetica porta ad un grande dispendio energetico poco sostenibile per comunicazioni ad altissima capacità. Anche l'efficienza energetica dei dispositivi di commutazione del segnale attuali, è tale da non potere essere impiegata per questo livello di comunicazione.

Ultimamente, in questi due campi, interconnessioni e sistemi di commutazione, si sta studiando la possibilità di integrare l'ottica. È stata rivolta particolare attenzione allo studio su microrisonatori ad anello (risonatori a forma circolare con dimensioni micrometriche) utilizzabili in diversi dispositivi di comunicazione (interruttori, modulatori, filtri etc...), basati su substrati di tipo SOI (Silicon On Insulator), costituiti, cioè, da uno strato di silicio su substrato in Silica  $\text{SiO}_2$  [27] [34]. Questa tecnologia è compatibile con le tecniche di fabbricazione CMOS (Complementary Metal-Oxide Semiconductor) utilizzate da decenni per la realizzazione di circuiti integrati, in modo tale che la fabbricazione di questi dispositivi non presenterebbe alti costi. La possibilità di selezionare (*tuning*) la lunghezza d'onda di risonanza del microrisonatore sarebbe sfruttata per varie

funzionalità nei dispositivi citati sopra.

Per il tuning della lunghezza d'onda di risonanza è stata studiata, in passato, la possibilità di sfruttare l'effetto termo-ottico (dipendenza dell'indice di rifrazione della temperatura), e l'effetto elettro-ottico (variazione dell'indice di rifrazione generata da un campo elettrico) indotto da iniezione di carica. Il primo metodo permette di selezionare una gamma di lunghezze d'onda più grandi del secondo ma ha tempi di commutazione più alti [13]. Un'altra possibilità, recentemente scoperta, è rappresentata dall'induzione dell'effetto elettro-ottico con deformazione, generata dalla deposizione di uno strato submicrometrico (film) di specifici materiali (come il Nitruro di Silicio  $Si_3N_4$ ) e controllata variando la composizione e spessore del film. Questo metodo porterebbe ad una velocità di commutazione paragonabile a quella per induzione con iniezione di carica, una gamma di lunghezza di risonanza ampia come quella per effetto termo-ottico ed una dissipazione di energia inferiore ad entrambi. Inoltre la tecnologia di realizzazione richiederebbe meno passaggi di quella utilizzata per l'induzione ad iniezione di carica. Tutte queste caratteristiche rendono il Silicio deformato una tecnologia promettente per un suo impiego in dispositivi ottici.

In questo lavoro si studia la deformazione indotta da un film di Nitruro di Silicio ( $Si_3N_4$ ) su strutture micrometriche in Silicio e la birifrangenza indotta dal film su guide d'onde in Silicio.

## 1.1 Silicio deformato in microelettronica

Recentemente, la tecnologia del silicio deformato sta ricoprendo un ruolo importante nell'industria microelettronica. La riduzione delle dimensioni dei transistor in silicio ha portato, soprattutto negli ultimi 3 decenni, a una crescita senza precedenti dell'industria dei semiconduttori. Al momento, la tecnologia permette l'integrazione di miliardi di transistor in un unico chip. Questa integrazione a larga scala (Very-Large-Scale Integration) di transistor CMOS (Complementary Metal-Oxide Semiconductor) trova ormai impiego nella maggioranza dei prodotti elettronici. In figura (2.2) si riporta una sezione schematica di un transistor CMOS.

L'industria del Silicio ha finora rispettato il trend dettato dalla legge di Moore, in accordo alla quale le dimensioni dei transistor si dimezzano ogni 18 mesi. Questa rapida evoluzione, infatti, ha reso possibile un progressivo miglioramento delle performance dei circuiti, ed una costante riduzione delle dimensioni dei chip e dei costi dei prodotti elettronici. Nel passaggio della larghezza del gate da dimensioni micrometriche a 130 nm, le regole di scaling hanno permesso di raddoppiare il numero di transistor per chip e di incrementare le performance dei circuiti del 20%, nel passaggio da una generazione della tecnologia CMOS ad un'altra. Le regole di scaling sono delle relazioni fra alcune grandezze caratteristiche di un transistor, quali i potenziali di alimentazione, drogaggi, larghezza del gate, spessore dell'ossido e via dicendo, che devono essere

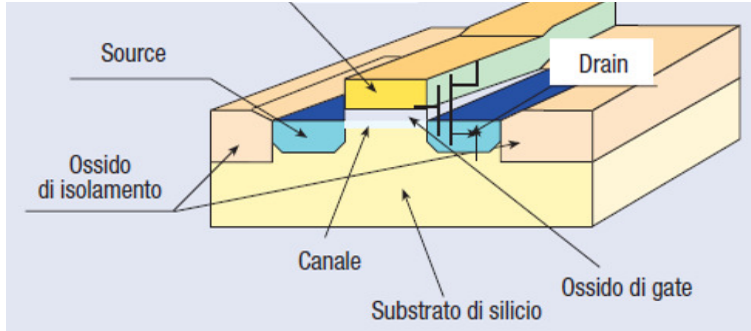


Figura 1.1: Rappresentazione schematica di transistor CMOS

rispettate per non degradare la performance quando si riducono le dimensioni. In figura 1.2 si riporta l'evoluzione di alcune grandezze caratteristiche di un transistor in corrispondenza dei vari nodi tecnologici.

Riducendo le dimensioni del gate oltre i 100 nm, le regole di scaling non permettono dei miglioramenti in termini di performance. Infatti a queste dimensioni entrano in gioco dei limiti fisici e tecnologici. È in corrispondenza di queste dimensioni che la tecnologia del silicio deformato ha iniziato ad essere utilizzata permettendo un netto miglioramento di prestazioni, nel passaggio dalla lunghezza di gate da 90 nm a 32 nm.

In queste tecnologie viene indotta un' appositamente deformazione nel reticolo cristallino del silicio sul canale del transistor che porta ad un aumento della mobilità dei portatori: elettroni e lacune. Le tecniche possono essere divise in due categorie in base alla deformazione: globale, in questo caso indotta dal substrato e locale, circoscritta a piccole aree e prodotta da particolari processi. Per indurre strain globale sul reticolo si è studiata, dagli anni '80, la possibilità di utilizzare substrati in SiGe. È però la seconda tipologia che è stata implementata nella realizzazione dei transistor, perché più facile da integrare, più affidabile e a minore costo. Le tipologie sono differenti e si basano sulla deposizione di film (di SiN nella tecnica Stress Memorization Technique SMT ad esempio [26]), o di quantità di vari materiali (SiC [39] o SiGe [33] nella regione di Source e Drain rispettivamente nella Embedded SiC Technique, ESiCT e Embedded SiGe Technique, ESiGeT) in grado di indurre deformazioni.

Gli effetti della deformazione sulle proprietà elettriche del Silicio sono note da più di 50 anni. Già nel 1954 Smith [30] aveva dimostrato la variazione della resistività del Silicio sottoposto a sforzi. Questo effetto, detto di piezoresistenza, può essere spiegato in termini di mobilità dei portatori di carica  $\mu$ , definita come:

$$\mu = q\tau/m^*, \quad (1.1)$$

con  $q$  la carica,  $\tau$  tempo di rilassamento legato agli scattering dei portatori e  $m^*$  massa efficace del portatore, legata alla resistività  $\rho$  dalla relazione

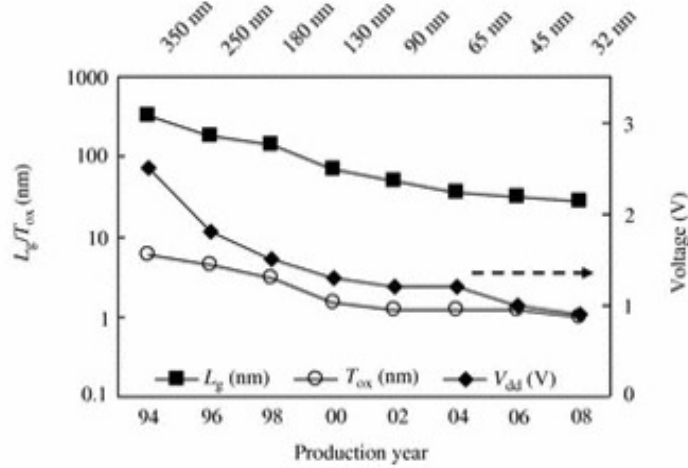


Figura 1.2: Andamento storico della lunghezza di gate, spessore dell'ossido e potenziale di alimentazione

$$\rho = nq\mu \quad (1.2)$$

con  $n$  la densità volumica dei portatori.

La massa efficace è definita come:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} \quad (1.3)$$

Sia la massa efficace che il tempo di rilassamento, sono legati alla struttura a bande del Silicio. Determinate deformazioni possono modificare questa struttura portando ad una diminuzione della massa efficace e ad una riduzione degli eventi di scattering dei portatori con un conseguente aumento del tempo di rilassamento. Controllando lo strain prodotto sul reticolo si può dunque alterare la mobilità del silicio ed migliorare le prestazioni dei transistor CMOS. Per una descrizione dettagliata degli effetti dello strain sulle bande di valenza e conduzione del Silicio, si veda ad esempio [31]

## 1.2 Il Silicio deformato in ottica

In ottica il Silicio deformato è stato studiato, inizialmente, per il degrado che la deformazione porta alle proprietà ottiche delle guide d'onda. Una guida d'onda è una struttura in grado di confinare un'onda elettromagnetica permettendone la propagazione guidata da un componente ottico ad un altro. Una guida d'onda è costituita da un nucleo (*core*) con un indice di rifrazione alto, in cui si propaga l'onda, ed un rivestimento (*cladding*) in materiale a più basso indice di rifrazione. In figura 1.3 sono riportate le sezioni, ortogonali alla direzione di propagazione,

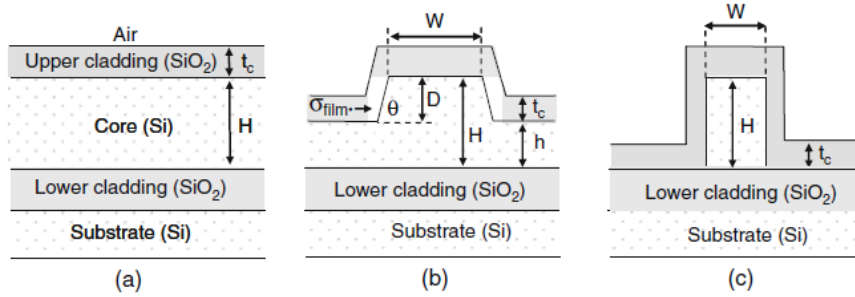


Figura 1.3:

delle geometrie più comuni delle guide d'onda planari (*slab* (a), *ridge* (b), *channel* (c)):

La geometria e le dimensioni del core determinano il numero di modi sostenuti dalla guida, ossia quante onde con distribuzione di campo elettrico differenti possono viaggiare nella guida .

Nel 2003, Huang [18] compie degli studi teorici sugli effetti che producono sforzi (*stress*) indotti durante i processi di fabbricazione in guide d'onde planari. Utilizzando un modello detto *plane strain model* in cui la deformazione lungo la direzione di propagazione viene considerata nulla, in [18] si mette in evidenza come il tipo e l'intensità di stress, in relazione allo spessore del core, possono influire sul numero di modi sostenuti dalla guida. Nello stesso lavoro viene messo in relazione il tipo di stress con la birifrangenza modale, ossia la differenza degli indici di rifrazione del modo polarizzato lungo la direzione x (orizzontale) e la direzione y (verticale) della guida e la differenza fra la perdita di questi due modi. La presenza di birifrangenza causa infatti delle perdite durante la propagazione dell'onda. In [18] viene, infine, evidenziato che l'entità del degrado delle proprietà ottiche indotte dallo stress è tale da non potere essere trascurato nella progettazione della guida.

Nel 2004 Xu et al. [37] ipotizzano di utilizzare lo stress indotto dal film di cladding per ridurre la birifrangenza modale geometrica, cioè la birifrangenza legata alla geometria del core sempre presente quando le dimensioni sono molto ridotte. Le guide studiate sono di tipo ridge mentre le geometrie del core sono rettangolare e trapezoidale. Il core e il substrato sono in silicio mentre il film di cladding in  $SiO_2$ . Xu et al. e dimostrano che variando l'intensità dello stress del film (tramite la modifica della pressione e della temperatura del processo di deposizione) e lo spessore, è possibile ridurre la birifrangenza, per le varie dimensioni studiate, da valori intrinseci di  $10^{-3}$  a valori inferiori a  $10^{-5}$ . Successivamente l'utilizzo dello stress per la riduzione della birifrangenza è stato applicato nella fabbricazione di diverse tipologie di dispositivi ottici: risonatori

ad anello, interferometri Mach-Zender e così via...

Più recentemente, nel 2006 Jacobsen et al. [19], dimostrano che, deformando il silicio, si può indurre un effetto elettro-ottico significativo. Le simmetrie nel cristallo di silicio non deformato impediscono infatti la presenza di una dipendenza lineare dell'indice di rifrazione da un campo elettrico applicato e la deformazione ha il ruolo di rompere queste simmetrie. Applicando quindi uno strato di nitruro di silicio  $Si_3N_4$  di  $0.75 \mu m$  ad una guida planare costituita da un core in silicio di  $200 nm$ , su un layer di  $SiO_2$  di  $1.2 \mu m$ , dimostrano la presenza di questo effetto. Jacobsen et al. infatti misurano una non-linearità del secondo ordine  $\chi^{(2)}$  dell'ordine di  $15 pm/V$ , assente nel silicio non deformato. La non-linearità del secondo ordine  $\chi^{(2)}$ , detta anche suscettività, è definita dalla relazione che lega il vettore polarizzazione  $\mathbf{P}$  al campo elettrico  $\mathbf{E}$ :

$$P = \epsilon_0(\chi^{(1)}E + \chi^{(2)}E^2 + \dots) \quad (1.4)$$

Come sarà illustrato nel capitolo ??, la non-linearità del mezzo è direttamente legata all'effetto elettro-ottico. Questa scoperta apre quindi la strada all'impiego del Silicio per le comunicazioni ottiche ultraveloci.

Successivamente alla scoperta di tale effetto nel silicio deformato, Cazzanelli et al. [10], nel 2011, studiano gli effetti non lineari indotti sul silicio con differenti distribuzioni di deformazione. Mediante simulazioni, gli autori del lavoro evidenziano che questi valori di  $\chi^{(2)}$  aumentano proporzionalmente all'intensità della deformazione in configurazioni non omogenee caratterizzate da elevati gradienti di strain, soprattutto in quelle in cui la deformazione passa da uno stato tensile (il campione si allunga) ad uno compressivo (il campione si accorcia). Le misure di  $\chi^{(2)}$  effettuate su guide d'onda di tipo SOI, con la geometria riportata in figura 1.4, verificano la dipendenza dalla non-omogeneità della deformazione.

Le varie configurazioni di deformazione vengono indotte applicando alla guida d'onda SOI uno strato di  $Si_3N_4$ . Lo spessore del nitruro determina se la deformazione in prossimità dello strato è di tipo tensile o compressiva. I valori misurati, nelle varie geometrie e dimensioni delle guide, hanno raggiunto valori massimi di  $\chi^{(2)}$  di  $40 pmV^{-1}$ . Cazzanelli et al, prevedono anche valori di  $\chi^{(2)}$  dello stesso ordine di grandezza di quelli del niobato di litio ( $LiNbO_3$ ) in corrispondenza di grandi deformazioni.

Nel 2011, Chmielak et al.[11] dimostrano, per un modulatore elettro-ottico con guide d'onda di tipo rib in Silicio deformato, un grande incremento della non-linearità del secondo ordine  $\chi^{(2)}$ , che raggiunge valori di  $122 pm/V$ , notevolmente maggiori di quelli evidenziati da Jacobsen [19], sebbene ancora distanti comunque dai valori del  $LiNbO_3$ , (su cui si basano attualmente i modulatori elettro-ottici), che presenta non-linearità  $\chi^{(2)} = 360 pm/V$ . La non-linearità nelle guide in silicio deformato, risulta essere particolarmente sensibile alle dimensioni del core: variando l'ampiezza da  $450 nm$  a  $400 nm$ , il fattore  $\chi^{(2)}$  cala da  $122 pmV^{-1}$  a  $75 pmV^{-1}$ . La deformazione è indotta da uno strato di nitruro

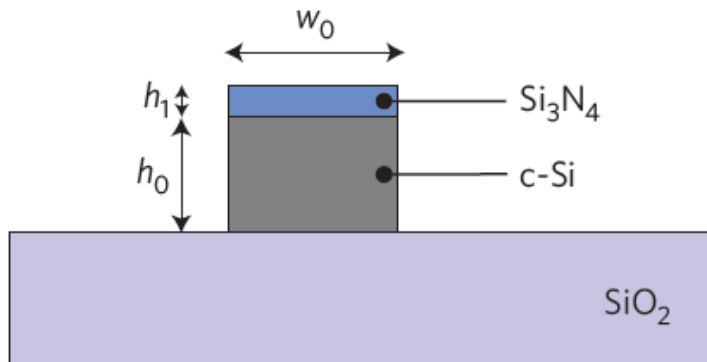


Figura 1.4:

di silicio,  $\text{Si}_3\text{N}_4$ , di  $350 \text{ nm}$  depositato, nel lavoro di Chmielak et al. direttamente sul core di Silicio, e non sullo strato di cladding di  $\text{SiO}_2$ . Le misure effettuate evidenziano una distribuzione di strain non omogenea e non simmetrica anche sui bordi verticali della guida. La guida d'onda presenta, inoltre, una relazione lineare fra la differenza di potenziale applicata ai capi e la variazione dell'indice di rifrazione  $\Delta n$  dei modi sostenuti. Il rapporto  $m$  fra la variazione dell'indice e il potenziale è dato da :  $m = \frac{n_{eff}}{V} \sim 0.05 \cdot 10^{-5} \text{ V}^{-1}$ .





## Capitolo 2

# Teoria e metodi simulativi

In questo lavoro si studiano gli effetti della deformazione, indotta dalla deposizione di uno strato di nitruro di silicio ( $Si_3N_4$ ), su strutture in silicio. La deformazione modifica l'ordinamento atomico del materiale alterandone le proprietà fisiche. Queste ultime sono infatti legate alla simmetria della sua struttura: la presenza di particolari simmetrie impedisce ad esempio la presenza dell'effetto elettro-ottico lineare, come si vedrà più avanti. Lo studio della struttura del Silicio si rivela dunque utile per ottenere delle informazioni generali sulle proprietà di questo materiale. Perciò, nei successivi paragrafi vengono brevemente richiamate le nozioni fondamentali di cristallografia, viene introdotta la terminologia e definiti i principali parametri che permettono di descrivere le caratteristiche più importanti della struttura del silicio.

### 2.1 Struttura cristallina del Silicio

Un cristallo è costituito da *unità*, semplici atomi e molecole, o strutture più complesse, che si ripetono con regolarità. Il reticolo di Bravais rappresenta la struttura geometrica in cui queste unità vengono ordinate. Ci sono due definizioni equivalenti di reticolo di Bravais:

- un insieme infinito di punti con un ordinamento che è lo stesso prendendo come origine un punto qualsiasi
- l'insieme dei punti  $\mathbf{R}$  dati dalla combinazione lineare (in 3 dimensioni):

$$\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3 \quad (2.1)$$

con  $\mathbf{a}_i$  vettori, detti **vettori primitivi**, non appartenenti allo stesso piano, e  $n_i$  numeri interi. La scelta di questi vettori non è univoca. Siano  $a_1, a_2, a_3$ , i moduli dei 3 vettori primitivi e  $\alpha$  l'angolo tra  $\mathbf{a}_2$  e  $\mathbf{a}_3$ ,  $\beta$  l'angolo tra  $\mathbf{a}_1$  e  $\mathbf{a}_3$  e  $\gamma$  l'angolo tra  $\mathbf{a}_1$  e  $\mathbf{a}_2$ . Il modulo e l'orientazione dei vettori identificano **7 sistemi**

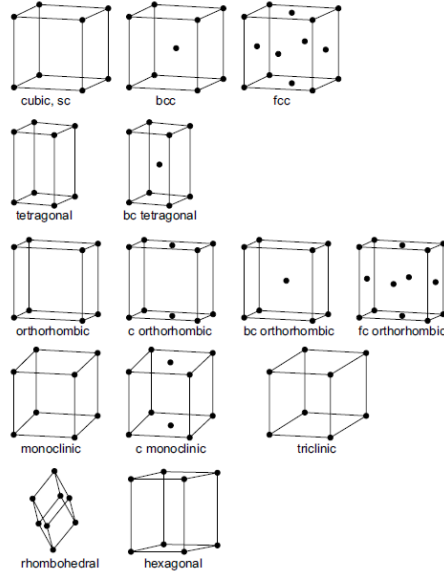


Figura 2.1: I 14 reticoli di bravais in 3D. Immagine tratta da Grundmann M. *The physics of semiconductors*, Springer,2006. p.= 36

( o classi) e 14 reticoli [16]

Classe	numero di reticoli	condizioni
Triclinico	1	nessuna
Monoclinico	2	$\alpha = \gamma = \pi/2$
Ortorombico	4	$\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$
Tetragonale	2	$a_1 = a_2$ , $\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$
Cubico	3	$a_1 = a_2 = a_3$ , $\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$
Esagonale (Trigonale)	1	$a_1 = a_2$ , $\alpha = \beta = \pi/2$ , $\gamma = 120$
Romboedrico	1	$a_1 = a_2 = a_3$ , $\alpha = \beta = \gamma$

Il reticolo del Silicio appartiene al sistema cubico a facce centrate che ha i 3 vettori primitivi dati da:

$$\mathbf{a}_1 = a\hat{\mathbf{x}}, \quad \mathbf{a}_2 = a\hat{\mathbf{y}}, \quad \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{z}}) \quad (2.2)$$

Il Silicio ha una struttura detta *struttura a diamante*: un reticolo cubico a facce centrate ed una base costituita da due atomi nelle posizioni  $(0, 0, 0)$  e  $\frac{a}{4}(1, 1, 1)$  con parametro di cella  $a = 5.43 \text{ \AA}$  :

Si definisce trasformazione isometrica, una trasformazione in cui le distanze fra i punti non vengono alterate (non c'è deformazione). Un reticolo è **simmetrico** rispetto ad una trasformazione isometrica se la configurazione finale ha lo stesso ordinamento di quella iniziale. In questo caso la trasformazione è una

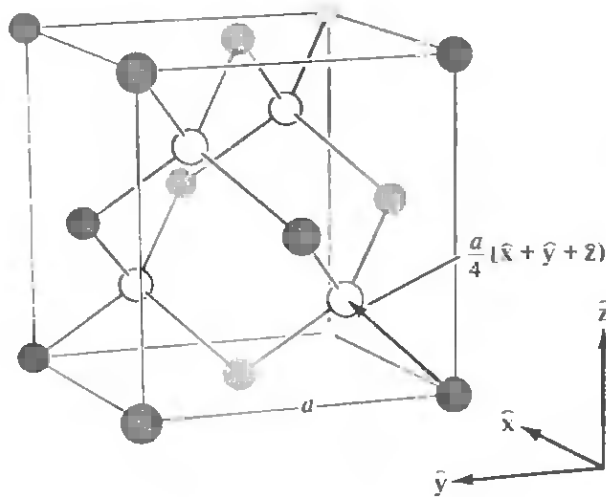


Figura 2.2: Rappresentazione della struttura a diamante. Immagine tratta da Ashcroft N.W. *Solid state physics*, Saunders College, p.76

**simmetria** del reticolo [15]. Un reticolo di Bravais può avere solo determinati tipi di simmetrie:

- identità
- rotazioni attorno ad un asse, di un angolo  $\Omega = 2\pi/n$  con  $n = 1, 2, 3, 4, 6$
- riflessioni rispetto ad un piano passante per un punto del reticolo
- inversioni rispetto ad un punto detto centro di inversione
- rotazioni improprie: rotazioni rispetto ad un asse e inversione rispetto ad un punto dell'asse.

La struttura cubica del Silicio è quella a più alto grado di simmetria. Ha infatti diversi centri di inversione all'interno della cella primitiva, rotazioni di  $\pi/4$  e  $\pi/3$ , piani di riflessione ed assi di rotazioni improprie.

Si definisce **proprietà fisica** la relazione fra due grandezze misurabili. Nella rappresentazione vettoriale o tensoriale delle grandezze, le proprietà fisiche si rappresentano come tensori che legano le varie grandezze fra loro.

Il **principio di Neumann** stabilisce il legame fra proprietà fisiche del cristallo e le simmetrie del suo reticolo:

*Se una struttura ha una operazione di simmetria  $R$ , allora ogni proprietà fisica del cristallo deve essere invariante all'azione di  $R$ .* Ad esempio, per il

Silicio le proprietà fisiche rappresentate da tensori del secondo ordine che legano grandezze rappresentate da tensori del primo ordine, hanno una sola componente indipendente e si esprimono:

$$\begin{bmatrix} K_{11} & 0 & 0 \\ 0 & K_{11} & 0 \\ 0 & 0 & K_{11} \end{bmatrix}$$

## 2.2 Proprietà meccaniche del Silicio

La distribuzione della deformazione del Silicio, indotta dallo strato di nitruro, dipende dalle sue proprietà meccaniche. La teoria dell'elasticità studia come un corpo reagisce ad un sistema di forze deformandosi. Si introducono a questo proposito le grandezze fondamentali della teoria nell'ambito della meccanica dei continui, in cui i corpi vengono trattati come distribuzioni continue di materia, per la descrizione delle proprietà elastiche del Silicio. I risultati sono stati utilizzati come equazioni di base per le simulazioni che si sono poi confrontati con i dati sperimentali come vedremo nel sesto capitolo.

Si consideri un corpo che viene deformato: si definiscono i campi vettoriali  $\mathbf{r}'(x, y, z)$  ed  $\mathbf{r}(x, y, z)$  i vettori posizione di un punto originariamente nella posizione  $(x, y, z)$  prima e dopo la deformazione. Sia  $\mathbf{u}(x, y, z)$  il campo di spostamento

$$\mathbf{u}(x, y, z) = \mathbf{r}'(x, y, z) - \mathbf{r}(x, y, z) \quad (2.3)$$

Si definisce **campo tensoriale di deformazione (strain)**  $\varepsilon_{ij}(x, y, z)$ :

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.4)$$

con  $i, j = 1, 2, 3$  le direzioni del sistema di riferimento non deformato. Il tensore è simmetrico ( $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$ ) e può essere sempre diagonalizzato, con un opportuno cambiamento di coordinate, con elementi principali:  $\varepsilon_{11}, \varepsilon_{22}, \varepsilon_{33}$ . La traccia  $S = \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}$  è invariante rispetto al cambiamento di coordinate ed è legata alla variazione di un elemento di volume infinitesimo  $dV$  dalla relazione:

$$dV' = dV(1 + S) \quad (2.5)$$

Considerando l'elemento diagonale

$$\varepsilon_{ii} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right) = \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \quad (2.6)$$

se  $\varepsilon_{ii}$  e' positivo, lo spostamento rispetto alla posizione originaria aumenta quindi lo strain e' detto **tensile**. Se  $\varepsilon_{ii}$  e' negativo lo spostamento rispetto alla

posizione originaria diminuisce e lo strain e' detto **compressivo** [21].

Si definisce **tensione (stress)** la distribuzione di forze che si origina in un corpo in seguito, ad esempio, all'applicazione di carichi sulla superficie o a differenti espansioni termiche delle parti costituenti. La presenza di questi agenti esterni causa una deformazione del corpo. L'ordinamento degli atomi o delle molecole che costituiscono la struttura viene alterato e si originano delle forze che tendono a riportare il corpo nella configurazione originaria. Queste forze sono dette **stress interni**. Queste interazioni sono a corto raggio, ossia la forza di cui risente un punto all'interno del corpo, è dovuta solamente all'interazione con i punti più prossimi [21].

Si consideri un corpo sul quale agiscono forze esterne. Su un punto interno  $P$  agiscono solamente forze interne per quanto detto sopra. Prendendo in esame superfici infinitesime di area  $dA_l$  passanti per il punto, con vettore parallelo all'asse  $l$  si definisce il tensore di stress  $\sigma_{kl}$ :

$$\sigma_{kl} = \frac{dF_k}{dA_l} \quad (2.7)$$

con  $dF_k$  la componente lungo l'asse  $k$  della forza che agisce sulle molecole o atomi appartenenti alla superficie  $dA_l$ , in seguito all'interazione con le molecole all'esterno della superficie. Gli elementi del tensore di strain hanno quindi le dimensioni di una forza su una superficie e nel S.I. si misurano in  $[N/m^2]$ .

La forza totale agente lungo una direzione  $i$  sul corpo risulta quindi l'integrale sulla superficie  $S$ , del tensore di stress contratto con l'elemento di superficie  $dS_l$ :

$$F = \int_S \sigma_{kl} dS_l = \int_V \nabla \cdot [\sigma_{kl}] dV \quad (2.8)$$

nell'ultimo passaggio si e' sfruttato il teorema della divergenza. In condizioni di equilibrio la forza totale agente sul corpo si annulla. E' possibile estendere questa analisi a qualsiasi parte del campione, cioè a qualsiasi volume. Di conseguenza, all'equilibrio il tensore di stress deve soddisfare questa condizione:

$$\nabla \cdot [\sigma_{kl}] = 0. \quad (2.9)$$

Introducendo il campo  $F$  come la forza agente per unita' di volume, si generalizza la (2.9) :

$$\nabla \cdot [\sigma_{kl}] + F = 0 \Rightarrow \mathbf{L}^T + \mathbf{F} = 0 \quad (2.10)$$

con  $L$  operatore definito come:

$$L = \begin{bmatrix} \partial/\partial x & 0 & 0 & \partial/\partial y & 0 & \partial/\partial z \\ 0 & \partial/\partial y & 0 & \partial/\partial x & \partial/\partial z & 0 \\ 0 & 0 & \partial/\partial z & 0 & \partial/\partial y & \partial/\partial z \end{bmatrix} \quad (2.11)$$

Prendiamo in considerazione il regime elastico in cui una volta rimosso lo stress, il corpo torna alla forma originaria. Generalizzando la legge di Hooke,

per la quale la deformazione e' proporzionale alla forza applicata, si introducono le seguenti **relazioni costitutive**:

$$\varepsilon_{ij} = S_{ijkl}\sigma_{kl} \quad (2.12)$$

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}s_{kl} \quad (2.13)$$

con i tensori del quarto ordine  $\{S_{ijkl}\}$  e  $\{C_{ijkl}\}$  detti **tensore di compliance** e **tensore di stiffness**. Data la simmetria dei tensori  $\{\varepsilon_{ij}\}$  e  $\{\sigma_{ij}\}$ , i tensori di compliance e stiffness sono invarianti rispetto allo scambio degli indici  $ij$  e  $kl$ . Le combinazioni di ogni coppia di indici  $ij$  e  $kl$  si riducono così a 6 elementi ciascuna e il numero di elementi indipendenti dei due tensori a 36.

Si rinominano le due coppie di indici  $ij$  e  $kl$  con la coppia di indici  $IK$  in accordo alla tabella

	i=1	2	3
j=1	1	6	5
2	6	2	4
3	5	4	3

Per il silicio e tutti i cristalli cubici, le simmetrie del cristallo riducono il numero di componenti indipendenti a 2.

I tensori di stiffness  $C$  e compliance  $S$ , con la convenzione riportata sopra e con il sistema di riferimento orientato nelle direzioni dei vettori principali del sistema cubico semplice (detto sistema di riferimento cubico), sono rappresentate dalla seguenti forme matriciali:

$$C = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} \end{bmatrix} \quad (2.14)$$

$$S = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{12} & 0 & 0 & 0 \\ s_{12} & s_{11} & s_{12} & 0 & 0 & 0 \\ s_{12} & s_{12} & s_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s_{44} \end{bmatrix} \quad (2.15)$$

Si riportano in tabella i valori dei coefficienti [17] :

$c_{11}$	$c_{12}$	$c_{44}$
$165.6 \cdot 10^9 Pa$	$63.6 \cdot 10^9 Pa$	$79.5 \cdot 10^9 Pa$

$s_{11}$	$s_{12}$	$s_{44}$
$7.68 \cdot 10^{-12} Pa$	$-2.14 \cdot 10^{-12} Pa$	$12.6 \cdot 10^{-12} Pa$

Per ottenere i tensori di compliance e stiffness rispetto ad una orientazione arbitraria è necessario applicare alcune trasformazioni a queste matrici (si veda ad esempio [36]). Per orientazioni arbitrarie nessun elemento dei tensori è necessariamente nullo .

Per un materiale isotropo la deformazione non dipende dalla direzione in cui viene applicata la forza. In questo caso le relazioni fra stress e strain possono essere espresse in forma scalare e le proprietà del materiale vengono descritte da alcune costanti, dette **costanti elastiche**. Dato uno stress  $\sigma$  lungo la direzione  $i$ , le deformazioni parallela allo stress  $s_t$  e normale allo stress  $s_n$ , si definiscono **modulo di Young E**, **rapporto di Poisson  $\nu$**  e **modulo di taglio G**:

$$E \equiv \frac{\sigma}{s_t} \quad (2.16)$$

$$\nu \equiv -\frac{s_n}{s_t} \quad (2.17)$$

$$G \equiv \frac{\sigma}{s} \quad (2.18)$$

Per i materiali anisotropi, le costanti elastiche dipendono dalla direzione di applicazione della forza rispetto alla struttura. Una forza applicata, ad esempio, lungo uno degli assi del cristallo o lungo la diagonale che unisce i vertici del cubo, causa deformazioni differenti. Si possono generalizzare le espressioni delle costanti elastiche:

$$E_i \equiv \frac{\sigma_i}{s_i} \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.19)$$

$$\nu_{ij} \equiv -\frac{\sigma_i}{s_j} \quad i, j = 1, 2, 3 \quad i \neq j \quad (2.20)$$

$$G_{ij} \equiv \frac{\sigma_i}{s_r} \quad i, j = 4, 5, 6 \quad (2.21)$$

Il Silicio è un materiale **ortotropico**, ossia ha una struttura con almeno 2 piani di simmetria ortogonali. Questo permette di esprimere il tensore di compliance, rispetto da un sistema di riferimento orientato arbitrariamente, in termini delle costanti elastiche:

$$S = \begin{bmatrix} \frac{1}{E_x} & -\frac{\nu_{yx}}{E_y} & -\frac{\nu_{xz}}{E_z} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu_{xy}}{E_x} & \frac{1}{E_y} & -\frac{\nu_{zy}}{E_z} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu_{xz}}{E_x} & -\frac{\nu_{yz}}{E_y} & \frac{1}{E_z} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{yz}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{zx}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{xy}} \end{bmatrix} \quad (2.22)$$

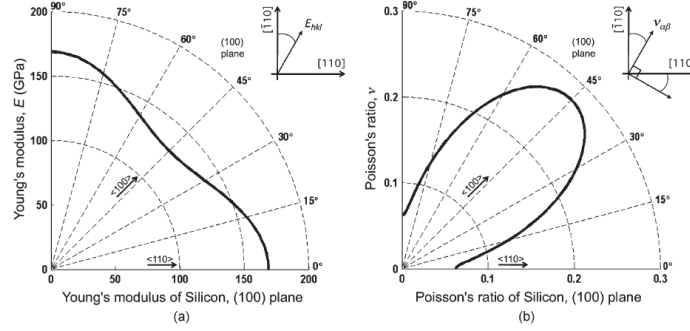


Figura 2.3: Moduli di Young e di Poisson del silicio nel piano (100). [17]

con  $E_i$ ,  $\nu_{ij}$  e  $G_{ij}$  le costanti elastiche calcolate rispetto alla direzione in esame [17].

Le figure riportano l'andamento dei moduli di Young e di Poisson rispetto ad una direzione che varia nel piano (100):

In particolare, nel sistema di riferimento cubico:

$$E_x = E_y = E_z = 130 \text{ GPa} \quad (2.23)$$

$$\eta_{xy} = \eta_{xz} = 0.28 \quad (2.24)$$

$$G_{xy} = G_{xz} = G_{yz} = 79,6 \text{ GPa} \quad (2.25)$$

Per il sistema di riferimento con gli assi dati da  $[110]$ ,  $[\bar{1}10]$  e  $[001]$

$$E_x = E_y = 169 \text{ GPa} \quad E_z = 130 \text{ GPa} \quad (2.26)$$

$$\eta_{xy} = 0.064 \quad \eta_{yz} = 0.36 \quad \eta_{xz} = 0.28 \quad (2.27)$$

$$G_{xz} = G_{yz} = 79,6 \text{ GPa} \quad G_{xy} = 50.9 \text{ GPa} \quad (2.28)$$

Il wafer impiegato per la realizzazione dei nostri campioni, come la maggioranza dei wafer utilizzati, ha l'orientazione indicata in figura 2.4.

## Strain e parametri di cella

Le componenti del tensore di strain possono essere espresse in termini delle variazioni dei parametri di cella. Per il Silicio valgono le seguenti relazioni:



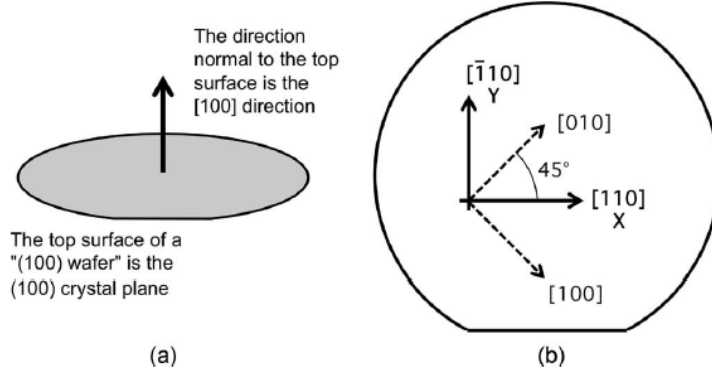


Figura 2.4: Orientazione del wafer utilizzato per la realizzazione dei campioni. [17]

$$\varepsilon_{xx} = \frac{a_1^z - a}{a} \quad (2.29)$$

$$\varepsilon_{yy} = \frac{a_2^s - a}{a} \quad (2.30)$$

$$\varepsilon_{zz} = \frac{a_3^s - a}{a} \quad (2.31)$$

$$\varepsilon_{xy} = \frac{1}{2} \left( \frac{\pi}{2} - \gamma_s \right) \quad (2.32)$$

$$\varepsilon_{xz} = \frac{1}{2} \left( \frac{\pi}{2} - \beta_s \right) \quad (2.33)$$

$$\varepsilon_{yz} = \frac{1}{2} \left( \frac{\pi}{2} - \alpha_s \right) \quad (2.34)$$

con  $a_i^s$  il modulo dei vettori primitivi, e  $\alpha_s, \beta_s$  e  $\gamma_s$  gli angoli fra i vettori primitivi, della struttura deformata. Queste relazioni sono utilizzate, come sarà illustrato nel capitolo 4, per la misura dello strain tramite diffrazione elettronica a fascio convergente.

## 2.3 Proprietà elettriche ed ottiche del Silicio

### Mezzi dielettrici

Si è detto che una deformazione nella struttura del Silicio può portare alla modifica delle sue proprietà. Come riportato nel capitolo ??, è stata dimostrata

la possibilità di indurre effetto elettro-ottico nel Silicio, rompendo la simmetria del cristallo tramite deformazione. In questo paragrafo si introducono le grandezze fondamentali per la definizione delle proprietà elettromagnetiche che servono per la birifrangenza indotta nel core della guida.

Siano  $B(\mathbf{r}, t)$  e  $H(\mathbf{r}, t)$  e  $E(\mathbf{r}, t)$  e  $D(\mathbf{r}, t)$  rispettivamente il campo di induzione magnetica, il campo magnetico, il campo elettrico e il campo spostamento elettrico, legati da queste relazioni:

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} \quad (2.35)$$

$$\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H} + \mu_0 \mathbf{M} \quad (2.36)$$

con  $\epsilon_0 = 8.854 \cdot 10^{12} C^2 / Jm$  e  $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} N/A^2$   $\mathbf{P}$  è il vettore polarizzazione elettrica ed è definito come la densità di polarizzazione elettrica. Analogamente  $\mathbf{M}$  è il vettore magnetizzazione e rappresenta la densità di polarizzazione magnetica.

Le equazioni di Maxwell nella materia, in assenza di cariche libere, correnti, e mezzi magnetici ( $\mathbf{M} = 0$ ) si scrivono:

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (2.37)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (2.38)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (2.39)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0 \quad (2.40)$$

Le proprietà elettromagnetiche della materia sono racchiuse nella relazione fra  $P$  e  $E$ , detta **equazione del mezzo**. Il mezzo è detto:

- *lineare* se il vettore  $P$  è una funzione lineare del campo  $E$ .
- *temporalmente non dispersivo* se  $P$  è determinato al tempo  $t$ , dal valore di  $E$  al tempo  $t$  e non dai valori assunti a  $t' < t$
- *spazialmente non dispersivo* se la relazione fra  $P$  ed  $E$  è locale, cioè il valore che assume  $P$  nella posizione  $\mathbf{r}$  dipende solamente da  $E$  nella stessa posizione
- *omogeneo* se la relazione non dipende da  $\mathbf{r}$
- *isotropo* se la relazione fra  $P$  e  $E$  non dipende dalla direzione di  $E$ , così che ogni direzione, per il mezzo è equivalente.  $P$  ed  $E$  risultano paralleli

Per il Silicio, che è un mezzo lineare, temporalmente e spazialmente non dispersivo, omogeneo ed isotropo, l'equazione del mezzo assume questa forma:

$$\mathbf{P} = \epsilon_0 \chi \mathbf{E} \quad (2.41)$$

con  $\chi$  detta **suscettività**. In accordo all (2.35) possiamo esprimere la relazione fra  $\mathbf{D}$  ed  $\mathbf{E}$ :

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \epsilon_r \mathbf{E} \quad (2.42)$$

con  $\epsilon_r$  detta **permettività** che è data da:

$$\epsilon = 1 + \chi \quad (2.43)$$

## Mezzi anisotropi

Il Silicio deformato rimane un mezzo lineare, temporalmente e spazialmente non dispersivo ed omogeneo, non è più però un mezzo isotropo. In questo caso i campi  $\mathbf{P}$  ed  $\mathbf{E}$  non sono necessariamente paralleli e si può esprimere:

$$P_i = \sum_j \epsilon_0 \chi_{ij} E_j \quad (2.44)$$

con gli indici  $i, j = 1, 2, 3$  che indicano le componenti x,y,z. La matrice  $\chi_{ij}$  è detta  **tensore suscettività**.

In accordo alla formula (2.47) possiamo esprimere la relazione fra  $\mathbf{D}$  ed  $\mathbf{E}$ :

$$D_i = \sum_j \epsilon_{ij} E_j \quad (2.45)$$

la matrice  $\epsilon_{ij}$  è detta  **tensore permittività** ed è legata al tensore suscettività dalla seguente relazione:

$$\epsilon_{ij} = \mathbb{1} + \chi_{ij} \quad (2.46)$$

Con un' opportuna scelta del sistema di riferimento, è sempre possibile diagonalizzare il tensore  $\epsilon_{ij}$ , data la sua simmetria, ed esprimere:

$$D_1 = \epsilon_1 E_1 \quad D_2 = \epsilon_2 E_2 \quad D_3 = \epsilon_3 E_3 \quad (2.47)$$

con  $\epsilon_1 = \epsilon_{11}$ ,  $\epsilon_2 = \epsilon_{22}$  e  $\epsilon_3 = \epsilon_{33}$ . Questo sistema di coordinate, rispetto al quale  $\mathbf{D}$  ed  $\mathbf{E}$  sono paralleli, identifica gli **assi principali**. Gli assi sono presi, d'ora in poi, paralleli a questi assi.

Si definiscono **indici di rifrazione principali**:  $n_1$   $n_2$   $n_3$  dati da:

$$n_1 = \sqrt{\frac{\epsilon_1}{\epsilon_0}}, \quad n_2 = \sqrt{\frac{\epsilon_2}{\epsilon_0}}, \quad n_3 = \sqrt{\frac{\epsilon_3}{\epsilon_0}} \quad (2.48)$$

In generale gli indici di diffrazione principali sono tutti diversi fra loro ( $n_1 \neq n_2 \neq n_3$ ). In questo caso il cristallo è detto **cristallo biassiale**. Se due indici di

rifrazione principali sono uguali ( $n_1 = n_2 \neq n_3$ ), i cristalli sono detti **cristalli uniassiali** e  $n_1 = n_2 = n_o$  sono detti **indici ordinari** mentre  $n_3 = n_s$  è detto **indice straordinario**. L'asse  $z$  di un cristallo uniassiale è detto **asse ottico**. I cristalli con tutti gli indici di rifrazioni principali uguali ( $n_1 = n_2 = n_3$ ) sono detti invece **otticamente isotropi**. Il Silicio è fra questi.

Invertendo la (2.45) possiamo esprimere  $\mathbf{E} = \boldsymbol{\epsilon}^{-1}\mathbf{D}$  con  $\boldsymbol{\epsilon}^{-1}$  inverso del tensore permittività. Si definisce **tensore di impermeabilità** il tensore  $\boldsymbol{\eta} = \epsilon_0\boldsymbol{\epsilon}^{-1}$ .

Visto che  $\boldsymbol{\epsilon}$  è simmetrico, anche  $\boldsymbol{\eta}$  lo è, e rispetto agli assi principali  $\boldsymbol{\eta}$  è diagonale con gli elementi principali dati da  $\epsilon_0/\epsilon_1 = 1/n_1^2$ ,  $\epsilon_0/\epsilon_2 = 1/n_2^2$ ,  $\epsilon_0/\epsilon_3 = 1/n_3^2$ .

## Indicatrice ottica

Una possibile rappresentazione geometrica di un tensore del secondo ordine  $\chi_{ij}$  è data dalla superficie quadratica (un ellissoide) definita da:

$$\sum_{ij} \chi_{ij} x_i x_j = 1 \quad (2.49)$$

Questa rappresentazione è detta **rappresentazione quadratica**. La superficie è invariante rispetto ad un cambio di coordinate e se il tensore  $\alpha_{ij}$  è diagonale, la superficie ha questa forma:

$$\alpha_1 x_1^2 + \alpha_2 x_2^2 + \alpha_3 x_3^2 = 1 \quad (2.50)$$

con  $\alpha_i$  gli elementi diagonali. L'ellissoide ha come assi principali quelli del tensore, la semilunghezza degli assi risulta  $\alpha_1^{-1/2}$ ,  $\alpha_2^{-1/2}$ ,  $\alpha_3^{-1/2}$ .

Si definisce **indicatrice ottica** la rappresentazione quadratica del tensore impermeabilità elettrica  $\boldsymbol{\eta} = \epsilon_0\boldsymbol{\epsilon}^{-1}$ :

$$\sum_{ij} \eta_{ij} x_i x_j = 1 \quad (2.51)$$

Nel sistema di coordinate degli assi principali, l'indicatrice ottica è data da:

$$\frac{x_1^2}{n_1^2} + \frac{x_2^2}{n_2^2} + \frac{x_3^2}{n_3^2} = 1 \quad (2.52)$$

L'indicatrice ottica del silicio e di tutti i cristallo otticamente isotropi ( $n_1 = n_2 = n_3 = n$ ) è una sfera di raggio  $r = n$ , mentre quella di un cristallo uniassiale è un ellissoide di rivoluzione.

Questa rappresentazione è utile per ricavare le proprietà ottiche del mezzo. Si può dimostrare infatti che un'onda piana che si propaga nel mezzo, lungo una direzione individuata dal versore  $\hat{\mathbf{u}}$ , ha due modi normali polarizzati linearmente. L'indice di rifrazione di questi modi e la loro direzione si possono ricavare con una costruzione geometrica che coinvolge l'indicatrice ottica.

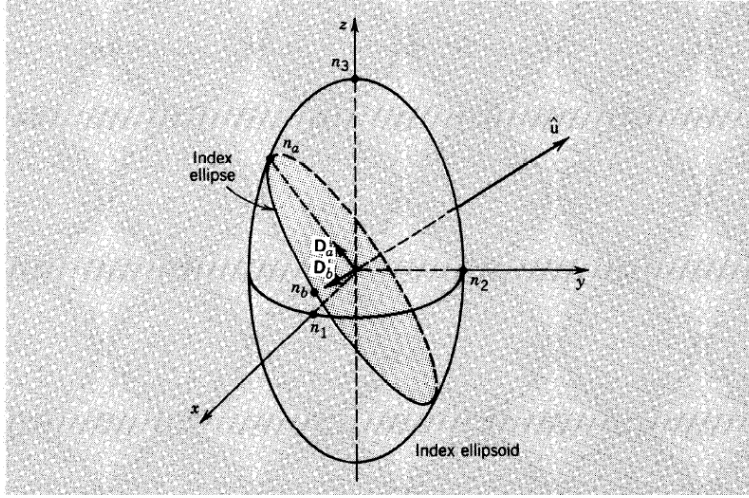


Figura 2.5: Modi normali ottenuti dall'indicatrice ottica [28]

Data la direzione  $\hat{\mathbf{u}}$  della propagazione dell'onda e il piano ad essa ortogonale, l'intersezione del piano con l'indicatrice ottica è un'ellisse, detta **ellisse degli indici**.

- La direzione degli assi maggiore e minore dell'ellisse sono paralleli alla direzione di dei vettori  $\mathbf{D}_a$  e  $\mathbf{D}_b$  dei vettori normali. Queste direzioni sono normali.
- La lunghezza degli assi maggiore e minore valgono il doppio degli indici di rifrazione dei due modi  $n_a$  e  $n_b$ .

i campi elettrici dei due modi normali si ricavano dalle (2.47).

## 2.4 Effetto elettro-ottico nel Silicio

Il Silicio, come detto nel capitolo 2, non è un materiale elettro-ottico lineare. Per descriverne le cause, si descrivono in linea generale l'effetto elettro-ottico in materiali anisotropi ed in particolare si analizza questo effetto nel Silicio. Alcuni materiali, se soggetti ad un campo elettrico costante o a frequenza bassa, modificano le proprietà ottiche. La variazione dell'indice di rifrazione in seguito all'applicazione di un campo elettrico costante nel tempo o che oscilla a bassa frequenza, è detto effetto **effetto elettro-ottico**. Se questa variazione è proporzionale al campo si parla di **effetto elettro-ottico lineare** o **effetto Pockels**. Se è proporzionale al quadrato del campo si parla di **effetto elettro-ottico quadratico** o **effetto Kerr**. Tipicamente, la variazione dell'indice di

rifrazione è piccola, ma a distanze grandi rispetto alla lunghezza d'onda dell'onda in propagazione, gli effetti sono evidenti. Ad esempio una diminuzione dell'indice di rifrazione di  $10^{-5}$  causa una variazione della lunghezza d'onda di  $2\pi$  a distanza di  $10^5\lambda$ .

In generale, applicando un campo elettrico, gli elementi del tensore impermeabilità diventano una funzione di  $\mathbf{E}$ ,  $\eta_{ij} = \eta_{ij}(\mathbf{E})$ . Così l'indicatrice ottica viene modificata. Espandendo in serie di Taylor i coefficienti  $\eta_{ij}(\mathbf{E})$  attorno a  $\mathbf{E} = 0$  si ottiene :

$$\eta_{ij}(\mathbf{E}) = \eta_{ij} + \sum_k r_{ijk} E_k + \sum_{kl} g_{ijkl} E_k E_l \quad (2.53)$$

con  $i, j, k, l = 1, 2, 3$ ,  $\eta_{ij} = \eta_{ij}(\mathbf{0})$ ,  $r_{ijk} = \partial\eta_{ij}/\partial E_k$ ,  $g_{ijkl} = \frac{1}{2}\partial^2\eta_{ij}/\partial E_k\partial E_l$  con le derivate calcolate in  $\mathbf{E} = \mathbf{0}$ . Il tensore del terzo ordine  $r_{ijk}$  è detto **tensore di Pockels** o dell'effetto-ottico lineare, il tensore del quarto ordine  $g_{ijkl}$  è detto **tensore di Kerr** o dell'effetto-ottico quadratico.

Dato che il tensore impermeabilità è simmetrico ( $\eta_{ij} = \eta_{ji}$ ), i tensori di Pockels e Kerr devono essere invarianti alla permutazione degli indici  $i$  e  $j$  ( $r_{ijk} = r_{jik}$  e  $g_{ijkl} = g_{jikl}$ ). Inoltre gli elementi  $g_{ijkl} = \frac{1}{2}\partial^2\eta_{ij}/\partial E_k\partial E_l$ , sono invarianti invertendo l'ordine di derivazione. Allora  $g_{ijkl} = g_{ijlk}$ . Di conseguenza  $r_{ijk}$  ha  $6 \times 3$  componenti indipendenti mentre  $g_{ijkl}$  ne ha  $6 \times 6$ .

Per il Silicio tutti i coefficienti del tensore Pockels sono nulli e il tensore di Kerr ha solamente 2 componenti indipendenti:

$$\begin{bmatrix} g_{11} & g_{12} & g_{12} & 0 & 0 & 0 \\ g_{12} & g_{11} & g_{12} & 0 & 0 & 0 \\ g_{12} & g_{12} & g_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & g_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & g_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & g_{44} \end{bmatrix}$$

$$\text{con } g_{44} = \frac{g_{11} - g_{12}}{2}.$$

## Effetto Kerr nel Silicio

Dato un campo elettrico diretto lungo la direzione  $z$   $\mathbf{E} = (0, 0, E)$ , l'indicatrice del Silicio assume questa forma:

$$\left(\frac{1}{n^2} + g_{12}E^2\right)(x_1^2 + x_2^2) + \left(\frac{1}{n^2} + g_{11}E^2\right)x_3^2 = 1 \quad (2.54)$$

L'indicatrice ottica non è più una sfera, ma un ellissoide di rotazione con asse lungo l'asse  $z$ .

Gli indici di rifrazione principali sono:

$$\left(\frac{1}{n_o^2(E)}\right) = \left(\frac{1}{n^2}\right) + g_{12}E^2 \quad (2.55)$$

$$\left(\frac{1}{n_e^2(E)}\right) = \left(\frac{1}{n^2}\right) + g_{11}E^2 \quad (2.56)$$

Dato che i termini  $g_{13}E$  e  $g_{33}E$  sono piccoli, usiamo l'approssimazione per  $(1 + \Delta)^{-1/2} \approx 1 - \frac{\Delta}{2}$ . Si ha:

$$n_o(E) \approx n - \frac{1}{2}n^3g_{12}E^2 \quad (2.57)$$

$$n_e(E) \approx n - \frac{1}{2}n^3g_{11}E^2 \quad (2.58)$$

Così applicando un campo elettrico  $\mathbf{E}$ , il silicio, cristallo otticamente anisotropo diventa un cristallo uniassiale con l'asse ottico diretto lungo la direzione del campo. Gli indici di rifrazione ordinari e straordinari sono funzioni quadratiche di  $E$ . L'effetto elettro-ottico è quindi presente nel Silicio cristallino, ma la dipendenza quadratica dal campo elettrico e l'entità dei coefficienti di Kerr lo rendono a tutti gli effetti trascurabile.

## 2.5 Relazione fra Effetto elettro-ottico e non linearità del mezzo

Il Silicio ha il coefficiente non lineare del secondo ordine,  $\chi^{(2)}$ , introdotto nel capitolo ?? nullo. Come detto, evidenze di birifrangenza modale nel Silicio non deformato sono accompagnate da valori  $\chi^{(2)}$  non nulli. La presenza dell'effetto elettro-ottico, infatti, è direttamente legata alla non linearità del mezzo. In questo paragrafo si mette in evidenza questo legame.

Come introdotto nel capitolo 2, un mezzo si dice non lineare se la dipendenza del vettore polarizzazione  $\mathbf{P}$  non è lineare in  $\mathbf{E}$ . Anche per onde elettromagnetiche intense, come quelle prodotte da laser, il campo elettrico risulta piccolo rispetto alle forze intra-atomiche e ai campi cristallini. Questo permette di approssimare la relazione che lega  $P$  ad  $E$  con lo sviluppo in serie di Taylor attorno ad  $E = 0$ :

$$P(E) = a_1E + \frac{1}{2}a_2E^2 + \frac{1}{6}a_3E^3 + \dots \quad (2.59)$$

con  $a_1$   $a_2$   $a_3$  le derivate di  $P$  rispetto ad  $E$  calcolate in  $E = 0$ . Di solito si esprime la relazione in questa forma

$$P = \epsilon_0(\chi E + \chi^{(2)}E^2 + \chi^{(3)}E^3 + \dots) \quad (2.60)$$

con  $\chi^{(2)}$  e  $\chi^{(3)}$  coefficienti del secondo e terzo ordine. Si consideri un mezzo in cui i coefficienti superiori al secondo grado sono trascurabili ed un campo elettrico  $E(t)$  dato da:

$$E(t) = E(0) + ReE(\omega)exp(j\omega t) \quad (2.61)$$

Si definisce  $E(0)$  campo elettrico e  $E(\omega)$  campo ottico. La polarizzazione non lineare  $P_{NL}(t) = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 P}{\partial E^2}$  è data da:

$$P_{NL}(t) = P_{NL}(0) \operatorname{Re} P_{NL}(\omega) \exp(j\omega t) + \operatorname{Re} P_{NL}(2\omega) \exp(j2\omega t) \quad (2.62)$$

con:

$$P_{NL}(0) = d[2E^2(0) + |E(\omega)|^2] \quad (2.63)$$

$$P_{NL}(\omega) = 4dE(0)E(\omega) \quad (2.64)$$

$$P_{NL}(2\omega) = dE(0)E(\omega) \quad (2.65)$$

Per un campo ottico non particolarmente intenso rispetto a quello elettrico ( $|E(\omega)|^2 \ll |E(0)|^2$ ), la componente della polarizzazione oscillante a  $2\omega$  è trascurabile rispetto a quella oscillante a  $\omega$ . Rimarrebbe quindi un termine a frequenza angolare  $\omega$  analogamente al caso in cui non sia presente il coefficiente al secondo ordine.

Esprimendo  $P_{NL}$  nella forma  $P_{NL}(\omega) = \epsilon_0 \Delta\chi E(\omega)$  e confrontando con  $\Delta\chi = (4d/\epsilon_0)E(0)$  è evidente che  $\delta\chi$  rappresenta la variazione della suscettibilità proporzionale al campo elettrico  $E(0)$ .

Differenziando l'espressione

$$n^2 = 1 + \chi \quad (2.66)$$

si ottiene

$$2n\Delta n = \Delta\chi \quad (2.67)$$

da cui

$$\Delta n = \frac{2d}{n\epsilon(0)} E(0) \quad (2.68)$$

Ad un campo elettrico  $E(0)$  costante, corrisponde dunque una variazione lineare dell'indice di rifrazione. La non linearità del mezzo, crea infatti un accoppiamento fra campo elettrico e campo ottico: un mezzo non lineare manifesta effetto elettro-ottico lineare.

## 2.6 Stress e strain in film sottili

Quando il film di nitruro viene depositato sulla struttura in Silicio, in entrambi i materiali si manifestano stress e strain. La distribuzione di queste grandezze dipende da molti fattori, tra cui la struttura dei due materiali e le condizioni a cui è avvenuta la deposizione. Lo spessore del nitruro dei nostri campioni (345 nm) è piccolo rispetto alle dimensioni del substrato. Questo permette di utilizzare alcune semplificazioni che si riportano in questo paragrafo.



In generale, quando un film viene depositato su un substrato, si manifesta uno stress detto **stress residuo**, perché presente anche senza l'applicazione di una forza esterna. Si assume che lo stress del film e del substrato, lungo la direzione verticale del film, siano trascurabili. Infatti il film può espandersi e contrarsi solo lungo direzioni parallele al substrato, dato che è vincolato al substrato e lo spessore del film è molto piccolo. Conseguentemente anche gli stress, normali o di taglio, diretti verticalmente, vengono trascurati. Questa condizione, in cui le dimensioni del problema si riducono a 2, è detta stato di stress in piano (**plane stress**). Si può inoltre dimostrare, con queste ipotesi, che anche gli stress di taglio sono trascurabili ( $\sigma_{xy} = \sigma_{yx} = 0$ ) [20]. Così il tensore di stress si riduce a:

$$\begin{pmatrix} \sigma_x & 0 \\ 0 & \sigma_y \end{pmatrix} \quad (2.69)$$

In condizioni di plane stress si può scrivere:

$$\begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \end{pmatrix} = \frac{E}{1-\nu^2} \begin{pmatrix} 1 & \nu \\ \nu & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_x \\ \epsilon_y \end{pmatrix} \quad (2.70)$$

con  $E$  e  $\nu$  i moduli di Young e Poisson calcolati lungo  $x$  ed  $y$ .

Per il silicio e per il nitruro di silicio, valgono  $\epsilon_x = \epsilon_y = \epsilon$  e  $\sigma_x = \sigma_y = \sigma$  e la (2.70) si riduce a :

$$\sigma = \left( \frac{E}{1-\nu} \right) \epsilon \quad (2.71)$$

Lo stress residuo ha due contributi: uno **intrinseco** e uno **estrinseco**.

Quando le cause sono fattori esterni, si parla di stress estrinseco. Lo stress dovuto al **mismatch termico** è la causa più comune. Questo si manifesta quando i materiali del substrato e del film, hanno differenti coefficienti di espansione termica e la temperatura di utilizzo è diversa da quella di deposizione. Sia  $\alpha$  il coefficiente di espansione termica:

$$\alpha = \frac{dl}{dT} \quad (2.72)$$

con  $l$  la lunghezza del campione in una direzione.

Dal momento che il substrato è molto più spesso del film, è lecito supporre che la variazione delle sue dimensioni non risentano della presenza del film:

$$s_{sub} = -\alpha_{Si} \Delta T \quad (2.73)$$

con  $\alpha_{sub}$  coefficiente di dilatazione termica del substrato. Il meno indica la contrazione, in relazione al fatto che la temperatura di utilizzo è minore a quella di deposizione.

Il film, aderendo al substrato, subisce la stessa contrazione:

$$s_{film} = -\alpha_{Si_3N_4} \Delta T \quad (2.74)$$

I coefficienti di espansione termica di silicio e nitruro di silicio sono [20]

$$\alpha_{Si} \sim 2.5 \cdot 10^{-6} K^{-1} \quad \alpha_{Si_3N_4} \sim 3 \cdot 10^{-6} K^{-1} \quad (2.75)$$

Lo stress residuo  $\sigma_{term}$  che si genera nel film è dovuto alla differenza fra lo strain del film cresciuto nel substrato e lo strain del film libero  $s_{free}$ :

$$s_{free} = -\alpha_{film} \Delta T \quad (2.76)$$

con  $\alpha_{sub}$  coefficiente di dilatazione termica del film.

Lo stress residuo  $\sigma_{term}$  in accordo a (2.71) e' dato da:

$$\sigma_{term} = \left( \frac{E}{1-\nu} \right) (s_{film} - s_{free}) = \frac{E}{1-\nu} (\alpha_{film} - \alpha_{sub}) \cdot \Delta T \quad (2.77)$$

Nel processo di crescita dei campioni analizzati, che sarà trattato nel capitolo 3, il nitruro di silicio è stato depositato a 780. Lo stress dovuto al mismatch termico, in accordo a (2.77) è:

$$\sigma_{term} \sim 75 MPa$$

Lo **stress intrinseco** e' legato alla differenza fra le strutture di Silicio e Nitruro di Silicio. Il contributo più grande allo stress residuo e' dato proprio dallo stress intrinseco. Infatti lo stress residuo nel nitruro e' dell'ordine di 1.2 *GPa* distante dai 75 *MPa* dovuti al contributo termico. Diverse grandezze contribuiscono alla formazione dello stress intrinseco: spessore del film, tipo di substrato, rate di crescita, temperatura e pressione dell'ambiente a cui avviene la crescita, presenza di impurità etc... Una piccola variazione di questi parametri può portare a grandi variazioni dello stress finale. Per questo, il controllo della natura dello stress (tensile o compressivo) e della sua grandezza risulta difficile.

## 2.7 Effetto foto-elastico

La deformazione del Silicio, indotta dallo strato di Nitruro, altera l'orientazione e l'intensità dei legami fra gli atomi che costituiscono il cristallo. La simmetria del cristallo si modifica, rendendo così possibile la presenza dell'effetto elettro-ottico. In questo paragrafo si descrive questo effetto, detto effetto foto-elastico, e si riporta il modello, detto Plane Strain Model, impiegato nelle simulazioni sulla birifrangenza, i cui risultato vengono riportati nel capitolo 5

In generale, le componenti  $\eta_{ij}$  diventano funzioni delle componenti di strain  $\varepsilon_{kl}$ :  $\eta_{ij} = \eta_{ij}(\varepsilon_{kl})$ . Questa dipendenza e' detta: **effetto fotoelastico**. Espandendo le funzioni in serie di Taylor in funzione delle componenti  $\varepsilon_{kl}$  ed arrestandosi al primo ordine si ha:

$$\eta_{ij}(\varepsilon_{kl}) \approx \eta_{ij}(0) + \sum_{kl} p_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (2.78)$$

con  $i, j, k, l = 1, 2, 3$  e  $p_{ijkl} = \partial\eta_{ij}/\partial\varepsilon_{kl}$  calcolati in  $\varepsilon_{kl} = 0$  che sono detti coefficienti del  **tensore fotoelastico** .

Poiché il tensore impermeabilità elettrica e il tensore di strain sono simmetrici: ( $\eta_{ij} = \eta_{ji}$ ) e ( $\varepsilon_{kl} = \varepsilon_{lk}$ ), il tensore fotoelastico deve essere invariante alla permutazione degli indici  $ij$  e  $kl$ . Le combinazioni di ogni coppia di indici  $ij$  e  $kl$  si riduce così a 6 elementi ciascuna. Di conseguenza  $p_{ijkl}$  ha  $6 \times 6$  componenti indipendenti. Si rinominano le coppie di indici  $ij$  e  $kl$  con due indici  $I$  e  $K$  come riportato in tabella (1).

Le simmetrie della struttura cristallina del mezzo riducono ulteriormente gli elementi indipendenti. Per il Silicio gli elementi indipendenti sono solo 3 [28]:

$$\begin{bmatrix} p_{11} & p_{12} & p_{12} & 0 & 0 & 0 \\ p_{12} & p_{11} & p_{12} & 0 & 0 & 0 \\ p_{12} & p_{12} & p_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & p_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & p_{44} \end{bmatrix}$$

Per il Silicio, la (2.78) (si veda ad esempio [38]) permette di esprimere gli indici di rifrazione  $n_i$  per onde polarizzate linearmente lungo l'asse  $i$ :

$$n_i - n_0 = -\frac{1}{2} n_0^3 p_{ij} \varepsilon_j \quad (2.79)$$

Per guide d'onda, le cui dimensioni lungo la direzione di propagazione sono molto più grandi rispetto a quelle della geometria del core, le componenti di taglio dello strain possono essere trascurate. Con questa approssimazione, le (2.79) possono essere riscritte in termini delle costanti stress-ottiche  $Z_1$  e  $Z_2$  [24]:

$$n_x - n_0 = -Z_1 \sigma_{xx} - Z_2 (\sigma_{yy} + \sigma_{zz}) \quad (2.80)$$

$$n_y - n_0 = -Z_1 \sigma_{yy} - Z_2 (\sigma_{xx} + \sigma_{zz}) \quad (2.81)$$

con  $n_0$  l'indice di rifrazione del materiale senza stress. Le costanti  $Z_1$  e  $Z_2$  sono legate al modulo di Young  $E$ , al modulo di Poisson  $\nu$  e ai coefficienti del tensore fotoelastico  $p_{11}$ ,  $p_{12}$  dalla relazione:

$$Z_1 = \frac{n_0^3}{2E} (p_{11} - 2\nu p_{12}) \quad (2.82)$$

$$Z_2 = \frac{n_0^3}{2E} (-\nu p_{11} + (1 - \nu) p_{12}) \quad (2.83)$$

Si riportano in tabella i valori di  $p_{11}$ ,  $p_{12}$  [8],  $n_0$ ,  $Z_1$  e  $Z_2$  del Silicio :

$p_{11}$	$p_{12}$	$n_0$	$Z_1$	$Z_2$
- 0.101	0.0094	3.476	$-17.13 \cdot 10^{-12} Pa^{-1}$	$5.51 \cdot 10^{-12} Pa^{-1}$

Le costanti  $p_{11}$  e  $p_{12}$  sono state misurate ad una lunghezza d'onda  $\lambda = 1,15\mu m$ .

La differenza fra i due indici di rifrazione  $n_x$  e  $n_y$ , detta **birifrangenza**, è data da:

$$n_y - n_x = (Z_2 - Z_1)(\sigma_x - \sigma_y) \quad (2.84)$$

Nel Plane Strain Model, modello utilizzato per le simulazioni riportate nel capitolo 5, si assume che, data la lunghezza della guida, lo strain lungo la direzione di propagazione sia trascurabile ( $\varepsilon_z = 0$ ). La relazione fra le componenti di strain e stress diventa:

$$\sigma_x = \frac{E}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)} [(1 - \nu)\varepsilon_x + \nu\varepsilon_y] + \sigma_x \text{ term} \quad (2.85)$$

$$\sigma_y = \frac{E}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)} [\nu\varepsilon_x + (1 - \nu)\varepsilon_y] + \sigma_y \text{ term} \quad (2.86)$$

$$\sigma_z = \nu(\sigma_x + \sigma_y) + \sigma_z \text{ term} \quad (2.87)$$

## 2.8 Simulazioni di stress, strain ed elettromagnetiche con il metodo degli elementi finiti

Per stimare lo stress e lo strain indotto da un film di nitruro stechiometrico, ad alto stress intrinseco, oltreché per simulare il comportamento elettromagnetico delle guide d'onda in silicio, sono state effettuate delle simulazioni con il software *Comsol Multiphysics 4.3b* in cui viene implementato metodo agli elementi finiti (*Finite Element Method FEM*).

Il FEM è un metodo numerico per la risoluzione di equazioni differenziali o integrali impiegato in diversi problemi fisici in cui le geometria analizzate sono complesse. Inizialmente questo metodo veniva utilizzato per problemi di tipo strutturale e poi su una vasta gamma di problemi fra qui quelli elettromagnetici. Alla base c'è una riformulazione delle equazioni differenziali che governano il problema in termini variazionali. In questo paragrafo si introducono le equazioni di partenza del problema in esame e si descrive il FEM per il calcolo di stress strain e grandezze elettromagnetiche delle strutture analizzate.

Nel caso della modellizzazione meccanica dello stress e strain, il metodo FEM si applica al seguente sistema di equazioni. Si consideri un solido elastico all'equilibrio. I campi stress, strain e spostamento sono legati dalle relazioni:

$$\mathbf{L}^T \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{F} = 0 \Rightarrow \sum_i \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} + F_j = 0 \quad (2.88)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{L}\mathbf{u} \Rightarrow s_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.89)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C}\boldsymbol{\varepsilon} \Rightarrow \sigma_{ij} = \sum_{kl} D_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (2.90)$$

con  $L$  definito in (2.11),  $S$  tensore di stiffness e  $F$  il campo delle forze per unita' di volume. Si aggiungono poi le condizioni al contorno che fissano lo spostamento  $\mathbf{u}$  e la forza  $\mathbf{F}$  sul bordo del dominio. Queste equazioni differenziali vanno soddisfatte in ogni punto del dominio (forma forte del problema differenziale). Il problema risulta complesso e soluzioni esatte esistono solo per casi particolari. Si utilizzano quindi dei metodi di calcolo che in maniera automatica siano in grado di fornire soluzioni approssimate.

Nel metodo FEM, su cui si basa il software *Comsol Multyphysics 4.3b*, utilizzato nelle simulazioni, viene effettuato il passaggio da una formulazione differenziale del problema in cui il campo incognito  $u$  è soluzione delle equazioni differenziali (2.88-2.89-2.90) ad una variazionale, in cui estremizza il funzionale **energia potenziale totale**:

Il funzionale **energia potenziale totale** è definito da :

$$\Phi(\mathbf{u}) = \frac{1}{2} \int_V \boldsymbol{\varepsilon}^T D \boldsymbol{\varepsilon} - \left( \int_V \mathbf{F}^T \mathbf{u} dV + \int_S \mathbf{f}^T \mathbf{u} dS \right) \quad (2.91)$$

Si può dimostrare (si veda ad esempio [4]) che il campo  $\mathbf{u}$  rende minimo il funzionale, soddisfacendo :

$$\delta \Phi(\mathbf{u}) = \int_V \boldsymbol{\sigma}^T \delta \boldsymbol{\varepsilon} - \left( \int_V \mathbf{F}^T \delta \mathbf{u} dV + \int_S \mathbf{f}^T \delta \mathbf{u} dS \right) = 0 \quad (2.92)$$

con  $\delta \mathbf{u}$  variazione di  $\mathbf{u}$  nulla sulla superficie  $S$  e  $\delta \boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{L} \delta \mathbf{u}$ .

Si cerca una soluzione nella forma

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \sum_i \mathbf{N}_i(\mathbf{x}) a_i \iff u_j(\mathbf{x}) = \sum_i \mathbf{N}_{ij}(\mathbf{x}) a_i \quad (2.93)$$

Le  $N_i$  sono dette funzioni di forma . Il campo di strain approssimato risulta:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{L}\mathbf{u} = \mathbf{L}\mathbf{N}\mathbf{a} = \mathbf{Q}\mathbf{a} \quad (2.94)$$

Con  $\mathbf{Q} = \mathbf{L}\mathbf{N}$ .

La (2.91) diventa:

$$\Phi(\mathbf{a}) = \frac{1}{2} \mathbf{a}^T \left( \int_V \mathbf{Q}^T D\mathbf{Q} \right) \mathbf{a} - \mathbf{a}^T \left( \int_V \mathbf{N}^T \mathbf{F} dV + \int_S \mathbf{N}^T \mathbf{f} dS \right) \quad (2.95)$$

definendo  $\mathbf{K} = \int_V \mathbf{Q}^T D\mathbf{Q}$  la **matrice di rigidezza** e  $\mathbf{P} = \int_V \mathbf{N}^T \mathbf{F} dV + \int_S \mathbf{N}^T \mathbf{f} dS$  la **vettore delle forze equivalenti**, si ha:

$$\Phi(\mathbf{a}) = \frac{1}{2} \mathbf{a}^T \mathbf{K} \mathbf{a} - \mathbf{a}^T \mathbf{P} \quad (2.96)$$

La condizione di stazionarietà si riduce alle seguenti equazioni algebriche :

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{a}} = \mathbf{K} \mathbf{a} - \mathbf{P} = 0 \iff \mathbf{K} \mathbf{a} = \mathbf{P} \quad (2.97)$$

Ricavato il vettore  $\mathbf{a}$ , si ottengono i campi spostamento  $\mathbf{u}$ , strain  $s$  e stress  $\sigma$  da (2.89-2.90)

Per geometrie complesse e irregolari, la scelta delle funzioni di forma risulta complicata. Nel metodo in esame si suddivide il dominio di integrazione in elementi d'area e di volume di dimensioni ridotte (*elementi finiti*) e si applica quanto descritto sopra a questi sottodomini. In questo caso il campo  $\mathbf{u}$  viene espresso come una combinazione lineare definita all'interno degli elementi finiti:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \sum_i \mathbf{N}_i(\mathbf{x}) U_n \quad (2.98)$$

gli  $U_n$  sono gli spostamenti di alcuni punti interni all'elemento finito e rappresentano i gradi di libertà dell'elemento.

Le variazioni risultano quindi:

$$\delta \mathbf{u}(\mathbf{x}) = \sum_i \mathbf{N}_i(\mathbf{x}) \delta U_n \quad (2.99)$$

$$\delta \epsilon(\mathbf{x}) = \sum_i \mathbf{B}_i(\mathbf{x}) \delta U_n \quad (2.100)$$

La scelta delle funzioni di forma  $\mathbf{N}_i$  è legata ad alcuni vincoli da rispettare per assicurare una convergenza della soluzione verso quella reale, rimpicciolendo gli elementi :

*Completezza del campo*: il campo deve poter riprodurre una deformazione costante all'interno di ogni elemento finito, nel limite in cui la sua dimensione vada a zero.

*Conformità dell'elemento*: i campi  $\mathbf{u}$  e  $\epsilon$  devono essere continui all'interno di ogni elemento finito e alla sua interfaccia. Per trattazione più generale del metodo agli elementi finiti si rimanda, ad esempio, a [6].

Nell'ambito dei problemi elettromagnetici il FEM risolve le equazioni di Maxwell in un mezzo di caratteristiche arbitrarie. Considerando un mezzo privo di

sorgenti e non magnetico in regime armonico, le equazioni di Maxwell si riducono sostanzialmente e [23]:

$$\nabla \times H = i\omega\epsilon(x, y, z)E(x, y, z) \quad (2.101)$$

$$\nabla \times E = -i\omega\mu_0 H(x, y, z) \quad (2.102)$$

Sostituendo la 2.101 nella 2.102, si ottiene la cosiddetta *Equazione rotore-rotore per il campo magnetico H*:

$$\nabla \times [\epsilon^{-1}\nabla \times H] - k_0^2 H = 0 \quad (2.103)$$

Analogamente al caso meccanico, è definito un operatore (funzionale) che viene quindi minimizzato nel metodo degli elementi finiti. Nel caso elettromagnetico, l'operatore minimizzato  $L'$  è dato:

$$L' = \nabla \times (\epsilon^{-1}\nabla \times) - k_0^2 \quad (2.104)$$

e l'equazione 2.103 diventa:

$$L'(H) = 0 \quad (2.105)$$

in cui la funzione incognita da determinare è il campo magnetico  $H(x, y, z)$  all'interno del dominio  $\Omega$ .

Nel metodo FEM applicato all'elettromagnetismo, la funzione incognita  $\psi$  è quindi data dal vettore campo magnetico  $H$ . In tale metodo, analogamente al caso utilizzato per studiare lo strain, la funzione  $\psi$  viene sviluppata in termini di una base  $\{\phi_i\}$  avente un numero finito di termini:  $\psi = \sum_1^n a_j \phi_j$ . Le funzioni  $\phi_j$  devono soddisfare le condizioni al contorno sulla superficie  $\mathcal{S}$ , mentre i coefficienti  $a_1 \cdots a_n$  sono incogniti, e vengono trovati imponendo che  $L'$  sia minimo. Essendo un minimo necessariamente anche un punto stazionario, l'annullamento delle derivate parziali rispetto ai parametri  $a_j$  conduce all'equazione matriciale

$$\left( \sum_{j=1}^n \langle \mathcal{L}\phi_i, \phi_j \rangle - \lambda \delta_{ij} \right) \cdot a_j = 0 \quad , \quad i = 1, n \quad (2.106)$$

supponendo che la base sia ortonormale. Il numero di funzioni della base, e quindi dei coefficienti  $a_i$ , viene aumentato fino a quando  $\lambda$  non converge ad un valore limite.

Tale metodo risolve agevolmente strutture semplici, in cui la geometria delle superfici al contorno non sia troppo complessa. Nel caso di strutture elettromagnetiche con geometrie molto irregolari è difficile trovare una base di funzioni che approssimi efficacemente il potenziale su tutta la regione di interesse. Nel metodo agli elementi finiti (FEM), quindi tale regione viene scomposta in molte zone, in genere triangolari o a forma di tetraedro, all'interno di ognuna delle

quali il potenziale viene sviluppato con una opportuna base di funzioni.

Un parametro elettromagnetico importante per le guide d'onda, utilizzato nelle simulazioni, è dato dall'indice di rifrazione efficace  $n_{eff}$

L'indice di rifrazione efficace  $n_{eff}$  è un parametro adimensionale di un modo sostenuto dalla guida. I modi sono distribuzioni di campo elettrico e magnetico utilizzati per descrivere la radiazione in propagazione in guide d'onda. Si può dimostrare, si veda ad esempio [5], che esistono soluzioni nella forma:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \propto e^{i(\omega t - \beta z)} \quad (2.107)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) \propto e^{i(\omega t - \beta z)} \quad (2.108)$$

con  $z$  la direzione di propagazione e  $\beta$  detta **costante di propagazione**. L'indice di rifrazione efficace  $n_{eff}$  è definito dalla relazione

$$\beta = k_0 \cdot n_{eff} \quad (2.109)$$

con  $k_0 = 2\pi/\lambda_0$  e  $\lambda_0$  la lunghezza d'onda della radiazione.

Per il calcolo dell'indice efficace, si è utilizzato quindi il metodo agli elementi finiti applicato alle equazioni di Maxwell con le condizioni al contorno imposte dalla struttura della guida, che risolve fornisco, oltre al campo magnetico  $\mathbf{H}$  e al campo elettrico  $\mathbf{E}$ , anche la costante di propagazione  $\beta$ , da cui si può ricavare l'indice di rifrazione efficace  $n_{eff}$ .



## Capitolo 3

# Processo di microfabbricazione

In questo capitolo si descrive il flusso di processo tecnologico per la realizzazione delle strutture sulle quali sono state effettuate le misure di strain. Tutti i passi tecnologici sono tipici dell'ormai consolidata tecnologia planare del silicio [35]. I campioni sono stati realizzati presso l'Istituto di Microelettronica e Microsistemi dell'Area della Ricerca di Bologna. Tutti i processi che vengono descritti sono stati effettuati in Camera Bianca (Clean room), un ambiente con livello di contaminazione controllato.

Il flusso di processo utilizzato, visto in sezione, per la fabbricazione delle strutture, è schematizzato in figura 3.1.

Il substrato di partenza è un wafer di silicio monocristallino spesso  $500 \mu m$  singolo lucidato di tipo p, con orientazione cristallografica  $\langle 100 \rangle$  e resistività compresa tra  $1$  e  $5 \Omega \cdot cm$  (figura 3.1.1).

Un sottile film di ossido di silicio a bassa temperatura (*LTO* – Low Temperature Oxide) spesso  $500 nm$  è stato depositato per LPCVD (Low Pressure Chemical Vapor Deposition). Il processo di deposizione avviene per pirolisi, a  $420 \text{ }^\circ C$ , di una miscela di Silano ( $SiH_4$ ) e ossigeno molecolare ( $O_2$ ) utilizzati come gas precursori di silicio e ossigeno rispettivamente (figura 3.1.2).

Il passo successivo è un processo fotolitografico (figura 3.1.3). Con il termine *fotolitografia* si intende una serie di passi tecnologici che hanno come risultato il trasferimento di una geometria dalla maschera ad un substrato. Il processo consiste nei seguenti passi principali:

- Deposizione di un materiale fotosensibile
- Trattamento termico: *Soft Bake*
- Esposizione

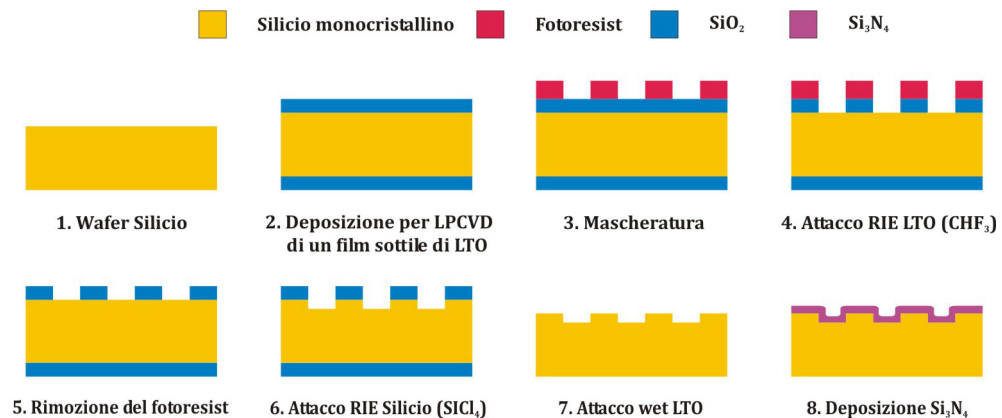


Figura 3.1: Processo tecnologico per la fabbricazione delle strutture ridge

- Sviluppo
- Trattamento termico: *Hard Bake*

Nel primo step si depone in fase vapore un sottile strato di Esametildisilazano (HMDS) detto primer, che modifica la bagnabilità della superficie del wafer rendendola idrofobica. In seguito si depone un materiale fotosensibile chiamato fotoresist (PR) che è composto sostanzialmente da una resina polimerica fotosensibile, un elemento catalizzatore che ne accentua la reattività chimica alla radiazione ultravioletta ed un solvente organico che ne controlla la viscosità. La deposizione del PR sul substrato è stata fatta per versamento, ponendo circa 4 ml di materiale sulla superficie del wafer. Al fine di ottenere un film di spessore uniforme e controllato sull'intera superficie, il wafer è posto su speciali centrifughe, dette spinner. Lo spessore finale è controllato dalla viscosità del PR, dal tempo e dalla velocità di rotazione. In questo processo è stato utilizzato il PR tipo HPR-504 (prodotto dalla Fujifilm). La velocità di spinning a 5000 rpm per 30 secondi garantisce uno spessore del film di circa 1080 nm.

Il wafer subisce un trattamento termico a 105 °C per 60 secondi detto Soft Bake per eliminare parte del solvente contenuto nel PR. Questo step permette sia di aumentare l'adesione del PR alla superficie sia di diminuire lo stress, che potrebbe causare rotture del film sottile.

Nel passo successivo, l'esposizione, il wafer è posto all'interno di una macchina detta allineatrice, in cui una maschera è messa in contatto con la superficie del wafer. Una maschera fotolitografica è costituita da un materiale trasparente alla radiazione UV (normalmente sono realizzate in sodalime o quarzo) in cui le geometrie da trasferire sono costituite da strutture opache alla radiazione (Cromo).

Scopo di questa fase del processo fotolitografico è trasferire la geometria di una maschera sulla superficie del wafer con una opportuna risoluzione. Per

risoluzione si intende la dimensione della più piccola geometria che è possibile replicare su un substrato. In prima approssimazione tale dimensione dipende dalla lunghezza d'onda della radiazione UV che si utilizza per impressionare il fotoresist e dallo spessore del PR utilizzato. Per lo spessore e lunghezze d'onda utilizzate in questo processo, la minima dimensione replicabile è circa 1250 nm.

Il PR è esposto ad una radiazione nel vicino UV (Near-UV) per un tempo necessario affinché la radiazione alteri la composizione chimica del materiale fotosensibile, rendendo la regione esposta solubile in un particolare solvente chiamato developer (normalmente utilizzato sottoforma di soluzione acquosa detta soluzione di sviluppo). L'immersione del wafer in questa soluzione (70 secondi per l'HPR-504) eliminerà il PR che ha ricevuto la dose di radiazione UV lasciando intatta la parte non esposta alla luce.

Il PR subisce un ulteriormente trattamento termico su hot-plate per 60 secondi a 105 °C chiamato HardBake che elimina tracce di umidità dovute al lavaggio dopo lo sviluppo e stabilizza il PR rendendolo sufficientemente resistente per i successivi passi tecnologici.

Per la realizzazione delle strutture TEM è stata utilizzata una maschera in sodalime, costituita da matrici di linee (ridge) di differente dimensione, spaziatura e orientazione, come visibile in figura (3.2)(destra). La maschera è suddivisa in die, superfici quadrate, visibili in figura(3.2)(sinistra). Ad ogni die corrisponde una matrice identificata da una combinazione di una lettera e 2 numeri. Le lettere H e V indicano l'orientazione verticale (H) ed orizzontale (O) delle ridge rispetto al lato piatto del wafer, mentre i due numeri indicano rispettivamente la larghezza e la distanza fra le linee. Le lettere P indicano invece die con strutture che non vengono prese in considerazione in questo lavoro. Si è deciso di utilizzare questa maschera per le seguenti motivazioni: la geometria delle linee è assimilabile a quella delle guide d'onda. Inoltre, le spaziature delle matrici superiori ad 1  $\mu m$  fanno sì che la deposizione del nitrato su una linea non risenta della presenza delle altre linee. Se avessimo usato spaziature maggiori di quelle delle matrici in esame, invece, si sarebbero avuti problemi nel individuare con il fascio elettronico, utilizzato nella tecnica CBED descritta nel capitolo 4, le varie ridge da analizzare.

Nelle figura (3.3) e nella figura (3.4) sono riportate immagini ottiche dei wafer dopo il processo di mascheratura.

La rimozione selettiva dell'ossido LTO (figura 3.1.4) non protetto dal fotoresist è stata eseguita mediante un processo di attacco di tipo dry, che fa uso di una macchina ad alto vuoto chiamata RIE (Reactive Ion Etcher) ed impiega il Freon 22 ( $CHF_3$ ) come gas reattivo.

Schematicamente un RIE (figura 3.5) è costituito da una camera in quarzo (o alluminio anodizzato) in cui sono presenti due elettrodi paralleli di opportuna dimensione, mantenuta ad una pressione molto bassa ( $10^{-3} - 10^{-5} mTorr$ ) mediante l'ausilio di un sistema di pompe. Quando nel reattore è introdotta una quantità di gas o miscela di gas (nota) e si applica una tensione ad alta frequenza (tradizionalmente 13.56 MHz) tra gli elettrodi, si forma il plasma: un gas parzialmente ionizzato composto da ioni, elettroni e specie neutre, sia

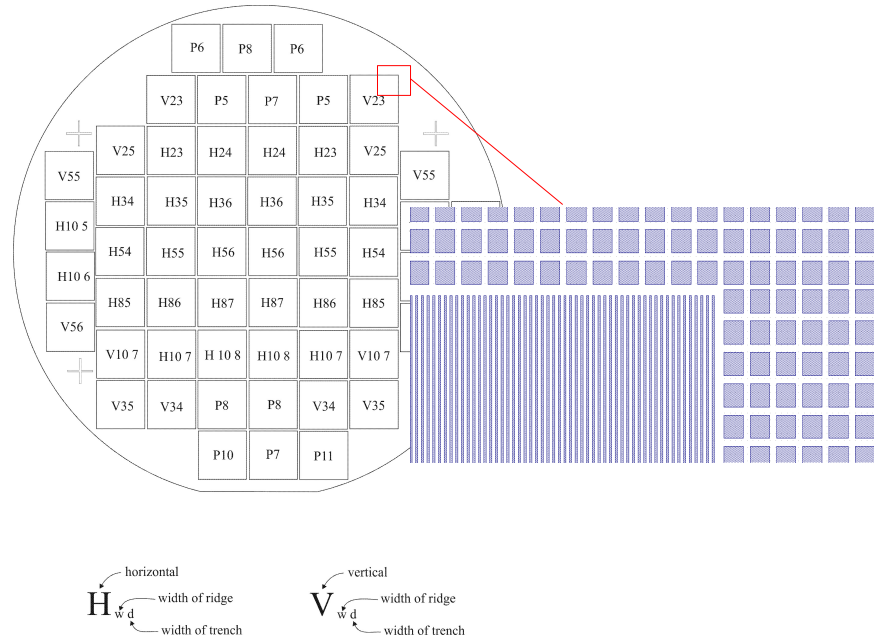


Figura 3.2: Layout della maschera usata per la realizzazione delle strutture

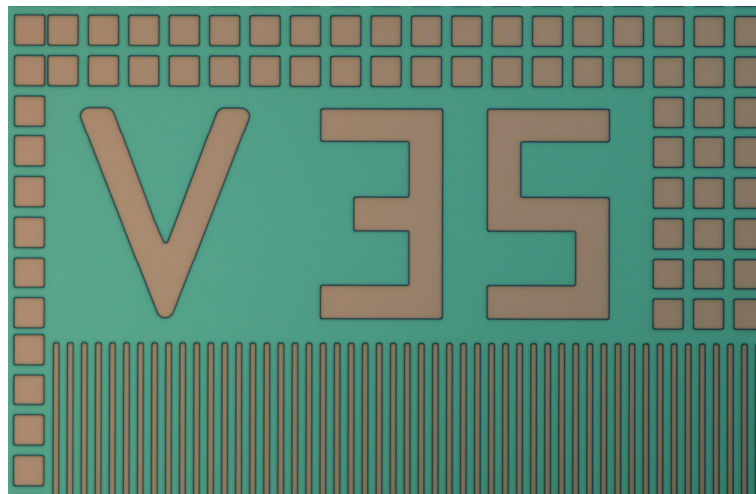


Figura 3.3: Immagine al microscopio ottico del bordo di un die tipo  $V_{35}$  in seguito alla mascheratura. In verde l'ossido di silicio, in marrone chiaro il fotorezist.

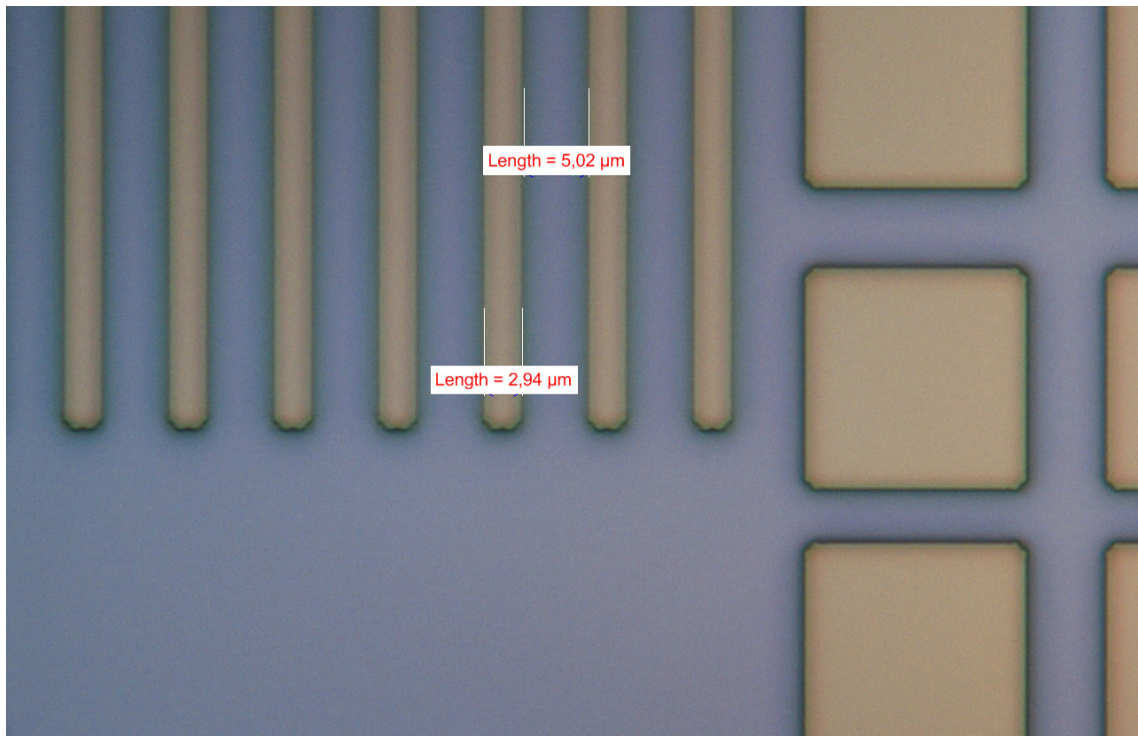


Figura 3.4: Immagine al microscopio ottico di un particolare del die tipo  $V_{35}$  con misure di larghezza, dopo la mascheratura. In viola l'ossido di silicio, in chiaro il fotoresist

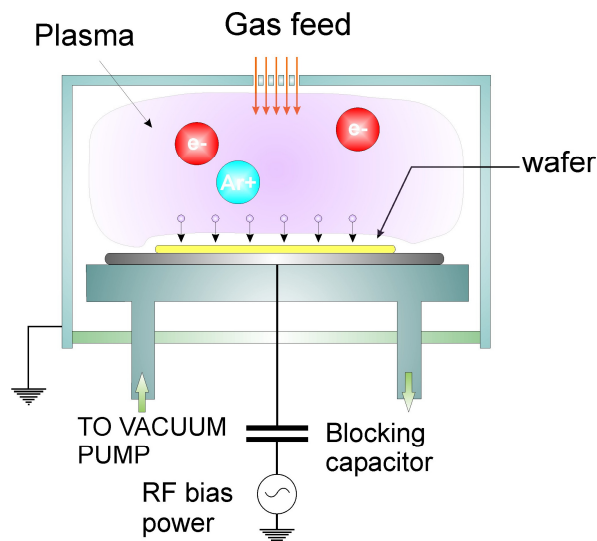


Figura 3.5: Rappresentazione schematica di un sistema RIE

nello stato fondamentale che in quello eccitato. Tra gli elettrodi ed il plasma (che è sempre ad un potenziale più alto rispetto agli elettrodi) nasce una differenza di potenziale che aumenta al diminuire dell'area degli elettrodi, per cui gli ioni positivi, accelerati dal campo, colpiscono perpendicolarmente la superficie del substrato. Al fine di aumentare l'energia del flusso ionico, il substrato da processare è posto sull'elettrodo di area inferiore.

Un attacco RIE, figura 3.6, può procedere per sputtering fisico, reazione chimica o meccanismi assistiti da ioni. Durante lo sputtering il substrato è rimosso attraverso un processo puramente fisico, quindi gli ioni che incidono sul materiale per riuscire a rimuoverlo devono possedere un'alta energia. Questo tipo di attacco non può essere selettivo e inoltre induce danno nel substrato, tuttavia è molto direzionale. All'estremo opposto troviamo l'attacco chimico, in cui le specie in fase gassosa reagiscono con la superficie in accordo con la chimica elementare. Per esempio l'atomo di F attacca il Si. Il solo fattore fondamentale in attacco RIE è la volatilità del prodotto di reazione. Se così non fosse, si depositerebbero sulla superficie del wafer alterando sensibilmente la qualità del processo. Nel caso di attacco al silicio con atomi di F (si parla in questo caso di plasma a base Fluoro, come nel caso in esame in cui si utilizza il  $\text{CHF}_3$ ) si forma  $\text{SiF}_4$  in fase gassosa altamente volatile (per la temperatura e pressione presenti nella camera di reazione). Per questa tipologia di attacco questo caso il plasma serve solo a rendere disponibili gli atomi di F, che si formano in plasmii in seguito a collisioni fra gli elettroni energetici e le molecole di gas. Questo tipo di attacco è selettivo, ma non direzionale, cioè è isotropo.

Tra i due estremi esistono processi di attacco al plasma che impiegato entrambi i fenomeni (sputtering e chimico) e che possono essere più sbilanciati

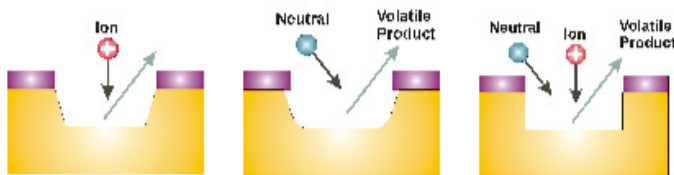


Figura 3.6: Rappresentazione dei metodi di attacco al plasma: sputtering (sinistra), chimico (centro), assistito da ioni (destra)

verso una direzione piuttosto che nell'altra. Un esempio è il processo di attacco all'ossido di silicio come nel caso in esame: un flusso ionico di fluoro ad alta energia rompe il legame Si-O (sputtering) permettendo all'ossigeno gassoso di allontanarsi dalla superficie e rendendo disponibile un atomo di silicio superficiale in grado di legarsi con lo ione/radicale fluoro per formare il composto  $\text{SiF}_4$  (volatile).

Nelle figure (3.7 3.9 3.8) si riportano le immagini del campione, al microscopio ottico in seguito alla rimozione dell'ossido.

Nella figura 3.1.5 il fotoresist, utilizzato come maschera per la definizione dell'LTO, è rimosso dalla superficie del wafer mediante un plasma asher che impiega un plasma in ossigeno a microonde.

Nello step successivo, (figura 3.1.6) si realizzano le ridge in silicio mediante attacco RIE, utilizzando l'ossido come maschera di protezione. In questo caso si utilizza un plasma al cloro (utilizzando il gas  $\text{SiCl}_4$  come precursore). La scelta del cloro è motivata dal fatto che il processo di attacco, come nel caso dell'attacco RIE dell'LTO, ha sia una componente fisica che chimica e ciò permette di avere un buon controllo della profondità di attacco e pareti laterali delle ridge prossime alla verticalità. Come spiegato in precedenza, utilizzando in alternativa un plasma al fluoro non avremmo ottenuto una buona verticalità delle pareti laterali a causa della natura chimica della cinetica del processo di attacco. Inoltre la scelta dell'ossido di silicio come strato maschera invece di utilizzare direttamente il fotoresist (che avrebbe ridotto sensibilmente il tempo di processo) è motivata dal fatto che la chimica al cloro è piuttosto aggressiva nei confronti dei materiali organici come il PR e ciò avrebbe inciso sulla qualità della ridge stessa.

I tre wafer sono stati sottoposti ad attacco RIE per tempi diversi in modo da

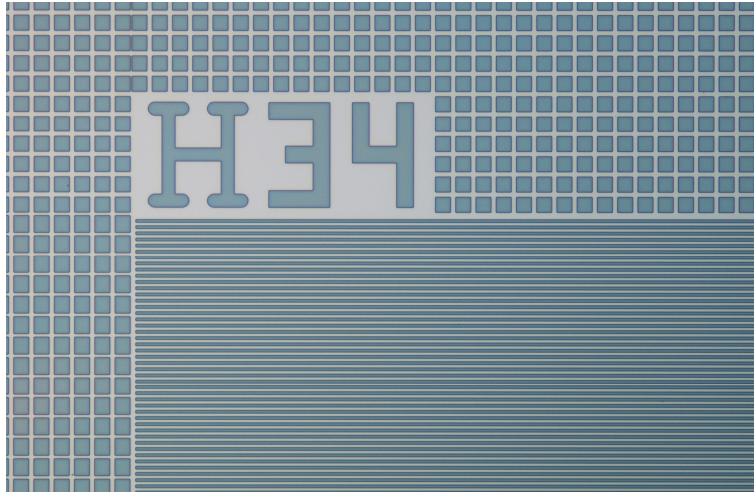


Figura 3.7: Immagine al microscopio ottico del bordo di un die di tipo  $H_{34}$  dopo la rimozione selettiva dell'ossido, tramite attacco RIE. In verde il fotoresist, con sotto l'ossido, il silicio è la regione più chiara



Figura 3.8: Immagine al microscopio ottico del bordo di un die di tipo  $H_{23}$  dopo la rimozione selettiva dell'ossido, tramite attacco RIE. In verde il fotoresist con sotto l'ossido, la superficie più chiara è il silicio.



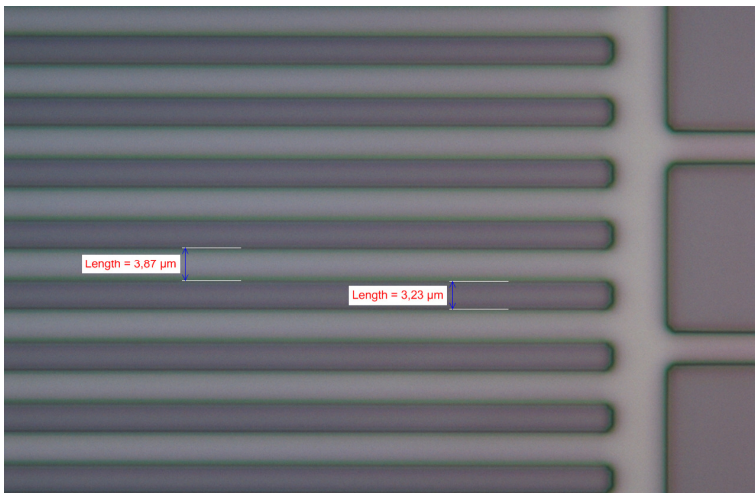


Figura 3.9: Immagine al microscopio ottico di un particolare del die di tipo  $H_{34}$  con misure della larghezza delle linee e della spaziatura dopo la rimozione dell'ossido tramite attacco RIE.

ottenere differenti altezze delle ridge. In tabella si riportano i tempi di attacco dei tre wafer processati:

	TEM1	TEM2	TEM3
Tempo di attacco	270 s	540 s	360 s

Dopo la realizzazione della matrice di ridge, l'LTO di maschera viene completamente rimosso mediante una soluzione acquosa a base di Acido Fluoridrico (HF) diluito al 7% (figura 3.1.7).

Nella figura 3.11 e nella figura 3.12 sono riportate alcune immagini ottiche dei campioni dopo la rimozione dell'ossido di maschera.

Si riportano in tabella le altezze delle ridge dei 3 wafer, misurate mediante profilometro meccanico :

	TEM1	TEM2	TEM3
Altezza misurata al centro delle ridge	325 nm	700 nm	450 nm
Altezza misurata al bordo delle ridge	333 nm	/	462 nm

Successivamente vengono rimosse le contaminazioni superficiali organiche (residui di fotoresist) e metalliche derivanti ad esempio dagli strumenti utilizzati per la manipolazione del campione o dalla presenza degli operatori all'interno della clean room ( in particolare sodio). La rimozione di queste particelle è molto importante per processi microelettronici, infatti l'eventuale presenza di particelle organiche durante processi ad alta temperatura, come nel caso della deposizione del nitrato di silicio, crea dei residui carboniosi. Residui metallici, invece, possono creare delle trappole ad alta mobilità nel gap del silicio e contaminare le apparecchiature creando dei problemi ai processi successivi.



Figura 3.10: Immagine al microscopio ottico del bordo di un die con matrici  $V_{34}$  dopo la rimozione selettiva del silicio tramite attacco RIE. In verde l'ossido e la regione più chiara il silicio.



Figura 3.11: Immagine al microscopio ottico del bordo di un die di tipo  $H_{23}$  dopo la rimozione dell'ossido.

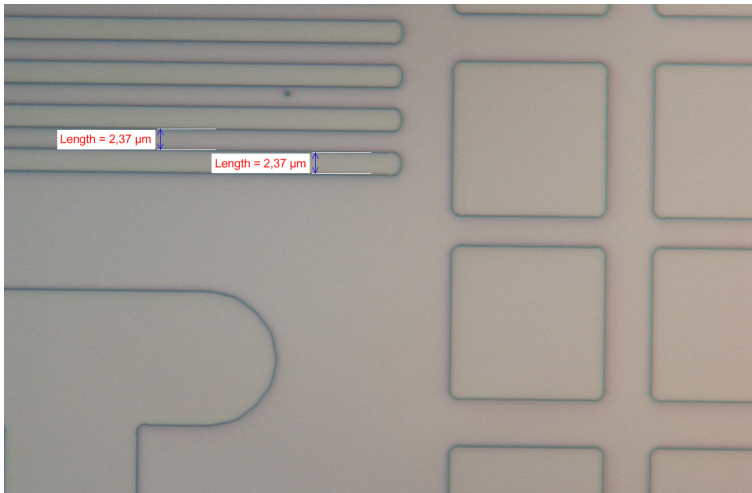


Figura 3.12: Immagine al microscopio ottico di un particolare del die di tipo  $H_{23}$  con misure della larghezza delle ridges in silicio e della spaziatura dopo la rimozione dell'ossido.

Le contaminazioni superficiali sono rimosse mediante un'opportuna sequenza di soluzioni acquose acide-basiche. In particolare le contaminazioni organiche sono eliminate mediante una soluzione di  $H_2SO_4$  e  $H_2O_2$  in rapporto 1:1 (soluzione Piranha). La combinazione del perossido con l'acido forte è esotermica e raggiunge una temperatura di circa  $110\text{ }^\circ\text{C}$  in pochi secondi. La soluzione favorisce anche la crescita di un sottile film di ossido di silicio (spesso pochi nanometri) che ingloba eventuali particelle. L'ossido è poi rimosso mediante una soluzione diluita di HF. Successivamente i substrati subiscono un trattamento in una soluzione di  $H_2O:H_2O_2:NH_4OH$  (5 : 1 : 0.06) a  $75\text{ }^\circ\text{C}$  che favorisce la rimozione di contaminazioni organiche e di alcuni metalli quali il rame ed il ferro (chiamata RCA1) ed a seguire in una soluzione di  $H_2O:H_2O_2:HCl$  (5 : 1 : 1) a  $75\text{ }^\circ\text{C}$  che elimina altri metalli, eventualmente presenti in superficie, grazie all'effetto di gettering del cloro (RCA2).

Nell'ultimo step, figura 3.1.8 è stato depositato per LPCVD un film sottile di nitruro di silicio stechiometrico ( $Si_3N_4$ ). Come nel caso della deposizione dell'ossido di silicio, il processo avviene per pirolisi ( $780\text{ }^\circ\text{C}$ ) di una miscela di gas (nella fattispecie Diclorosilano  $SiCl_2H_2$  e ammoniaca  $NH_3$ ). Lo spessore del film (345 nm) di  $Si_3N_4$  è stato misurato mediante spettrofotometro.

Nella figure 3.13)- 3.14 si riportano immagini ottiche del campione dopo la deposizione del nitruro.

Dal confronto figura(3.14) con la figura (3.12), è evidente come lo spessore del nitruro abbia incrementato la larghezza delle righe. La visione planare mediante microscopio ottico non permette invece di ottenere informazioni sull'omogeneità ed isotropia della deposizione del nitruro. Queste informazioni possono essere



Figura 3.13: Immagine al microscopio ottico del bordo di un die di tipo  $V_{23}$  in seguito alla deposizione del nitruro

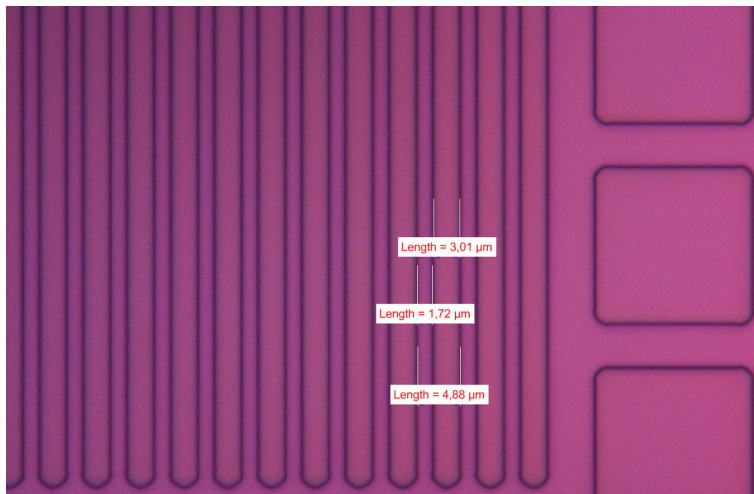


Figura 3.14: Immagine al microscopio ottico di un particolare del die di tipo  $V_{23}$  in seguito alla deposizione del nitruro

ottenute tramite immagini in sezione, le immagini STEM riportate nella sezione 4.4.



## Capitolo 4

# Misure TEM

In questo lavoro si è studiata la distribuzione dello strain in strutture in Silicio, indotto dalla deposizione di uno strato di nitrato di silicio. Le misure di strain sono state effettuate mediante la tecnica: diffrazione elettronica a raggio convergente (*Convergent Beam Electron Diffraction CBED*) che è una tecnica di microscopia a trasmissione elettronica. Per questo si descrivono i principi fisici della microscopia a trasmissione elettronica necessari all'analisi della tecnica CBED e delle incertezze associate alla misura.

### 4.1 La tecnica TEM (Transmission Electron Microscopy)

La **microscopia elettronica in trasmissione**, (*Transmission Electron Microscopy*) è una tecnica di indagine in cui un fascio di elettroni viene diretto verso un campione di spessore nanometrico. Dall'analisi degli elettroni trasmessi, questa tecnica permette di ottenere informazioni sulla struttura e composizione del campione. La risoluzione di un microscopio  $\rho$ , definita come la minima distanza fra due dettagli separabili, nella teoria della formazione delle immagini di Abbe, è legata alla lunghezza d'onda del fascio  $\lambda$  e apertura numerica  $\alpha$  da:

$$\rho = \frac{0.61\lambda}{\sin \alpha} \quad (4.1)$$

In microscopia ottica la risoluzione è limitata dalla lunghezza d'onda della radiazione utilizzata, che nel visibile varia da  $410nm$  a  $660nm$ .

I raggi X e i raggi  $\gamma$ , hanno da una parte lunghezze d'onda inferiori, rispettivamente ( $1pm - 10nm$ ) e ( $< 1pm$ ), ma le lenti che si utilizzano per focalizzare il fascio hanno un'alta apertura numerica.

Gli elettroni, invece, in accordo con la relazione di De-Broglie, hanno una lunghezza d'onda data da:

$$\lambda = h/mv \quad (4.2)$$

con  $h$  costante di Planck,  $m$  e  $v$  la massa e velocità relativistiche.

In un microscopio elettronico a trasmissione, gli elettroni accelerati a velocità prossime a quella della luce,  $v = 0,3c - 0,9c$ , hanno una piccola lunghezza d'onda:  $\lambda = 4pm - 0,8pm$ , mentre le lenti permettono di ottenere un'apertura numerica:  $\alpha \sim 0,5$ . La risoluzione risulta dell'ordine dell'  $\text{Å}$ . La massima apertura ottenibile è limitata dalle aberrazioni delle lenti elettromagnetiche. Risoluzioni sub-Angstroem sono ottenibili in moderni microscopi dotati di correttore di aberrazioni.

### Diffusione elettronica

L'hamiltoniana di un elettrone del fascio, trascurando l'interazione fra gli elettroni stessi, è data da:

$$\nabla^2\Psi(\mathbf{r}) + \frac{8\pi^2me}{h^2}[E + V(\mathbf{r})] = 0 \quad (4.3)$$

Con  $E$  l'energia totale dell'elettrone, e  $V(\mathbf{r})$  il potenziale cristallino del campione. La (4.3) può essere espressa in forma integrale ottenendo l'*equazione di diffusione*:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \exp[-2\pi i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})] + \frac{8\pi^2me}{h^2} \int_V V(\mathbf{r}')\Psi(\mathbf{r}') \frac{\exp[-2\pi i\mathbf{k}|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|]}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dv' \quad (4.4)$$

In questa forma si nota come la presenza di un potenziale faccia sì che all'onda piana, si sommino onde sferiche centrate nei volumetti del campione con ampiezza proporzionale al potenziale stesso.

Nell'approssimazione di Born si assume che gli elettroni interagiscano solo una volta col campione. Questa assunzione, accettabile per campioni sottili e con un potenziale cristallino debole, è detta **condizione cinematica**. Introduciamo:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{r})^0 + \Psi(\mathbf{r})^1 \quad (4.5)$$

con  $\Psi(\mathbf{r})^0 = \exp[-2\pi i(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r})]$  autostato dell'hamiltoniana libera.

$\Psi(\mathbf{r})$  soddisfa:

$$\Psi(\mathbf{r})^1 = \frac{2\pi me}{h^2} \frac{\exp[2\pi i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})]}{r} \int_V V(\mathbf{r}') 2\pi i[\mathbf{u} \cdot \mathbf{r}'] dv' \quad (4.6)$$

con  $\mathbf{u} = \mathbf{k}_0 - \mathbf{k}$  detto **vettore di scattering** ed è stato assunto che la funzione d'onda all'interno dell'integrale in (4.4) è la particella libera. Si nota che l'onda diffusa con vettore d'onda  $\mathbf{k}$  ha un'ampiezza proporzionale a

$$B(\mathbf{U}) = \int_V V(\mathbf{r}') \exp[2\pi i\mathbf{u} \cdot \mathbf{r}'] dv' \quad (4.7)$$



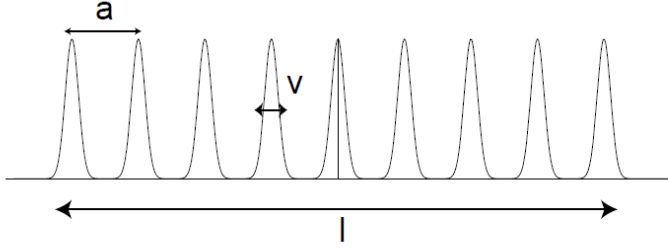


Figura 4.1: Potenziale cristallino

la trasformata di Fourier del potenziale cristallino.

Esprimendo il potenziale cristallino in termini del potenziale atomico  $V_a(\mathbf{r})$ , della funzione  $L(\mathbf{r})$  con la periodicità del reticolo cristallino e la funzione  $E(\mathbf{r})$  uguale ad 1 nell'estensione del campione e nulla altrove, si ha:

$$V(\mathbf{r}) = [V_a * L](\mathbf{r}) \cdot E(\mathbf{r}) \quad (4.8)$$

Per le proprietà della trasformata di Fourier :

$$B(\mathbf{u}) = \mathcal{F}[V(\mathbf{r})](\mathbf{u}) = [\mathcal{F}V_a(\mathbf{u}) \cdot \mathcal{F}L(\mathbf{u})] * \mathcal{F}E(\mathbf{u}) \quad (4.9)$$

Sia  $v$  il parametro dell'estensione spaziale del potenziale atomico,  $a$  la distanza fra gli elementi del reticolo e  $l$  l'estensione del campione, figura 4.2. Considerando il caso unidimensionale, con :

$$V_a(x) = \exp[-(x/v)^2] \rightarrow \tilde{V}_a(u) = \sqrt{\pi}v \exp[-(xv)^2] \quad (4.10)$$

$$L(x) = \sum_n \delta(x - na) \rightarrow \tilde{L}(u) = \sum_n \delta(u - n/a) \quad (4.11)$$

$$\tilde{E}(u) = \frac{\sin \pi u}{\pi l} \quad (4.12)$$

Il pattern presenta dei picchi regolari per  $u = n/a$  con una larghezza data da:  $1/l$ , controllata quindi dall'estensione del campione. L'estensione nello spazio reciproco dell'intensità diffusa, è limitata dall'estensione del potenziale atomico mediante il fattore  $1/v$ . L'involuppo è dato da  $E(u)$ .

Generalizzando a 3 dimensioni, cio' significa che il fascio di elettroni diretto verso il campione, ha una figura di diffrazione, detta anche di diffrazione, data l'analogia formale, con massimi di intensità in corrispondenza dei vettori d'onda  $\mathbf{k}$  definiti da:

$$\mathbf{k}_0 - \mathbf{k} = 1/a \quad (4.13)$$

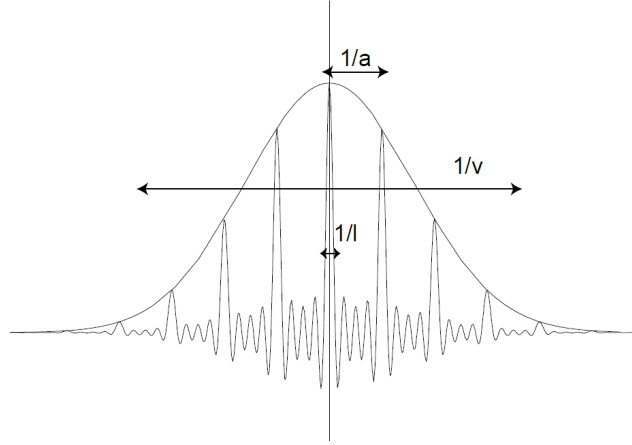


Figura 4.2: Trasformata di Fourier del potenziale cristallino

Esprimendo il potenziale  $V(\mathbf{r})$  in termini dei potenziali atomici  $V_a(\mathbf{r})$ :

$$V(\mathbf{r}) = \sum_a V_a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a) \quad (4.14)$$

la 4.6 diventa:

$$B(\mathbf{U}) = \int_V \sum_a V_a \exp[2\pi i[\mathbf{u} \cdot \mathbf{r}']] dv' \quad (4.15)$$

. Scambiando la somma con gli integrali si ottiene

$$B(\mathbf{U}) = \sum_a f_a^B(\mathbf{u}) \exp[2\pi i(\mathbf{u} \cdot \mathbf{r}'_a)] \quad (4.16)$$

con  $f_a^B(\mathbf{u})$  detto: *fattore di diffusione atomico* nell'approssimazione di Born definito da:

$$f_a^B(\mathbf{u}) = \int_V V_a(\mathbf{r}) \exp[2\pi i(\mathbf{u} \cdot \mathbf{r}')] \quad (4.17)$$

In questa forma, ogni atomo appare come un centro di diffusione di onde sferiche con un contributo proporzionale al fattore di diffusione atomico e fase  $2\pi i(\mathbf{u} \cdot \mathbf{r}'_a)$ . Nell'approssimazione utilizzata si è anche fatta l'ipotesi che gli atomi possiedano simmetria sferica. La diffrazione si verifica quando le onde diffuse dalle celle hanno un phase shift  $\theta$  dato da:

$$\theta = 2\pi(\mathbf{u} \cdot \mathbf{r}'_a) = 2\pi n \rightarrow \mathbf{u} \cdot \mathbf{r}'_a = n \quad (4.18)$$

Questa condizione implica che affinché ci sia interferenza costruttiva,  $\mathbf{u}$  deve essere un vettore del reticolo reciproco del campione:

$$\mathbf{k}_0 - \mathbf{k} = \mathbf{G} \quad (4.19)$$

Questa condizione è detta: legge di Laue. La legge di Laue è equivalente alla **legge di Bragg**, in accordo alla quale un fascio con lunghezza d'onda  $\lambda$  diretto su una famiglia di piani con distanza interplanare  $d$ , con angolo  $\theta$  genera interferenza costruttiva nella direzione  $\theta' = \theta$  se vale la seguente condizione:

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad (4.20)$$

### Costruzione di Ewald

Per individuare i vettori d'onda  $\mathbf{k}$  che soddisfano la condizione di Laue, si può ricorrere ad un metodo geometrico ideato da Ewald. I vettori del reticolo reciproco  $\mathbf{G}$  vengono rappresentati con dei punti. La sfera, detta sfera di Ewald, rappresenta la differenza  $\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}$ . I punti del reticolo reciproco appartenenti alla sfera individuano i vettori  $\mathbf{k}$  che generano diffrazione. In accordo a quanto detto i picchi di diffrazione hanno una certa estensione legata alla dimensione del campione. Così è possibile rilassare la condizione di Laue, figura 4.3 :

$$\mathbf{u} = \mathbf{k}_0 - \mathbf{k} = \mathbf{G} + \mathbf{s}_h \quad (4.21)$$

con  $\mathbf{s}_h$  definito : parametro di deviazione o errore di eccitazione.

La linea ZOLZ ( zero order Laue Zone) è il pattern che contiene i punti di intersezione della sfera di Ewald con i vettori ortogonali al vettore  $\mathbf{r}$  parallelo alla direzione d'incidenza del fascio:  $\mathbf{u} \cdot \mathbf{r}$ . Le linee HOLZ ( high order Laue Zone) di ordine  $n$  sono invece i pattern di intersezione con i vettori  $\mathbf{u}$  per cui:  $\mathbf{u} \cdot \mathbf{r} = n$ . In base all'energia degli elettroni, alla orientazione e convergenza del fascio, la sfera varia le sue dimensioni e ruota rispetto al reticolo, intersecando punti diversi che danno luogo a pattern di diffrazioni differenti.

Il raggio della sfera vale infatti

$$R = |k| = 2\pi/\lambda = 2mv/h \quad (4.22)$$

aumentando l'energia del fascio, il raggio della sfera aumenta intersecando più punti. Nel caso in cui il fascio abbia un angolo di convergenza, vi sono più direzioni d'incidenza e quindi più sfere di Ewald, passanti per l'origine del reticolo reciproco, che possono intersecare anche vettori di zone di Laue di ordine superiori HOLZ.

## 4.2 Il microscopio TEM

In un microscopio elettronico a trasmissione, rappresentato schematicamente in figura 4.4, gli elettroni vengono estratti da una sorgente e accelerati lungo l'asse ottico, dai cannoni elettronici. In un cannone elettronico le sorgenti emettono

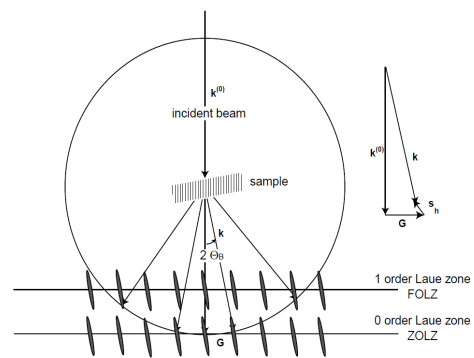


Figura 4.3: Sfera di Ewald con parametro di deviazione Zona di Laue di Ordine Zero (ZOLZ) e Zona di Laue di ordine Uno (FOLZ).

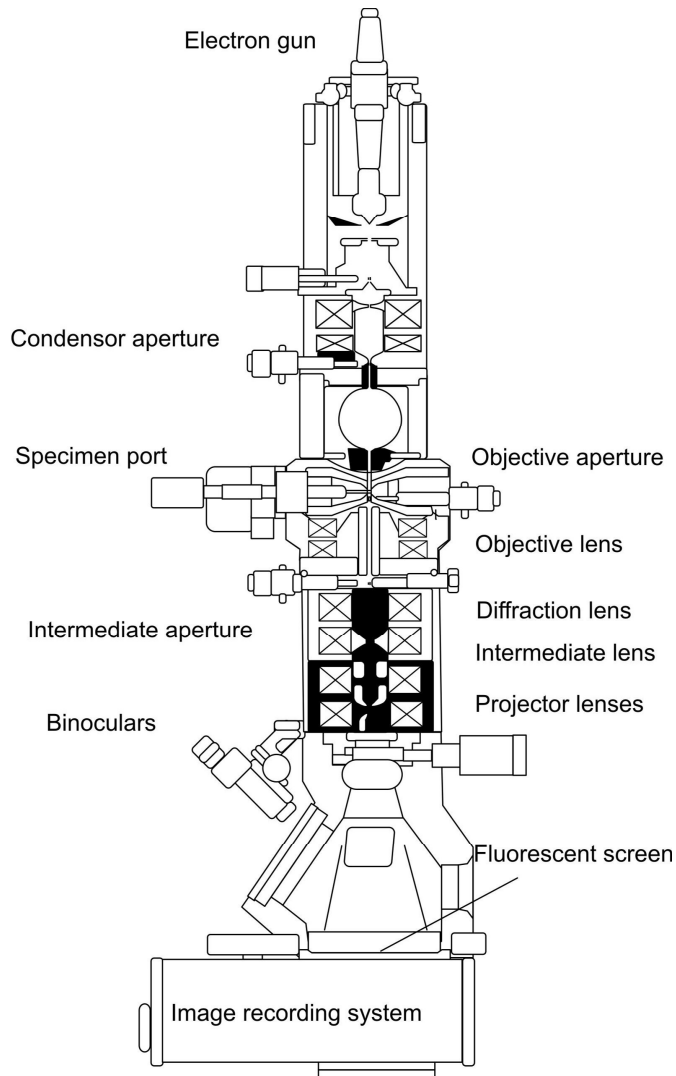


Figura 4.4: Rappresentazione schematica di un microscopio elettronico a trasmissione

elettroni per effetto di campo o per effetto termoionico. Nel primo caso il fascio ottenuto ha elevata intensità e collimazione (brillanza), e viene direttamente immesso nell'apparato ottico. Nel secondo caso, invece, gli elettroni vanno focalizzati lungo l'asse ottico, con un diaframma elettrostatico, detto cilindro di Wenheit, lungo l'asse ottico. Una serie di lenti condensatrici permettono di variare l'intensità, le dimensioni del fascio e le modalità di incidenza sul campione. Il campione viene inserito nel portacampione che può ruotare in due direzioni tra loro ortogonali. La lente obiettivo posta sotto il campione, che focalizza l'immagine, determina l'iniziale ingrandimento e produce l'immagine di diffrazione. Il diaframma dell'obiettivo permette di selezionare uno o più fasci che costituiscono la figura di diffrazione. Se si opera in campo chiaro si seleziona il fascio trasmesso, se in campo scuro uno dei fasci diffratti, mentre per ottenere immagini in alta risoluzione più fasci vengono fatti interferire. La lente successiva (detta intermedia) coniuga il proprio piano immagine col piano immagine dell'obiettivo (in modalità immagine) o con il piano focale posteriore (in modalità diffrazione). In entrambi i casi l'immagine che si proietta nel piano immagine della lente intermedia, una volta ingrandita da un'altra serie di lenti (proiettori), viene proiettata su uno schermo fluorescente o altro dispositivo di rivelazione (telecamera, lastre fotosensibili,...).

### 4.3 Misure di strain tramite diffrazione elettronica a fascio convergente

La **diffrazione elettronica a raggio convergente**, (*Convergent Beam Electron Diffraction, CBED*) è una delle tecniche più potenti per lo studio delle strutture cristalline quando viene richiesta un'elevata risoluzione spaziale. Essa permette infatti di analizzare le simmetrie o la posizione degli atomi all'interno delle celle, di un campione cristallino. Questa metodologia, già nota per l'effetto della convergenza del fascio nella diffrazione X di cristalli (linee di Kossel-Mollenstedt), ha cominciato ad essere utilizzata per la caratterizzazione strutturale nel TEM solo a partire dagli anni '70. Questa tecnica viene anche utilizzata per la misura dello strain in cristalli. Ci sono diverse tecniche per misurare lo strain di film sottili cresciuti su substrati, ad esempio diffrazione da raggi X, spettrometria a backscattering di Rutherford, spettrometria Raman. La risoluzione spaziale di queste tecniche solo ora, grazie alla luce di sincrotrone e ion microbeam, ha raggiunto le dimensioni micrometriche. La tecnica del CBED può raggiungere una risoluzione sub-micrometrica. Nello specifico questa tecnica permette di rilevare strain in un cristallo dell'ordine di 100 microstrain con una risoluzione spaziale nanometrica. La risoluzione è limitata infatti dalle dimensioni del fascio, ed in questa modalità, con sorgenti ad effetto di campo, il diametro minimo del fascio è dell'ordine di  $1nm$ . E' possibile quindi ottenere una mappa in 2D della distribuzione dello strain.

Dirigendo un fascio di elettroni parallelamente all'asse ottico del microscopio,

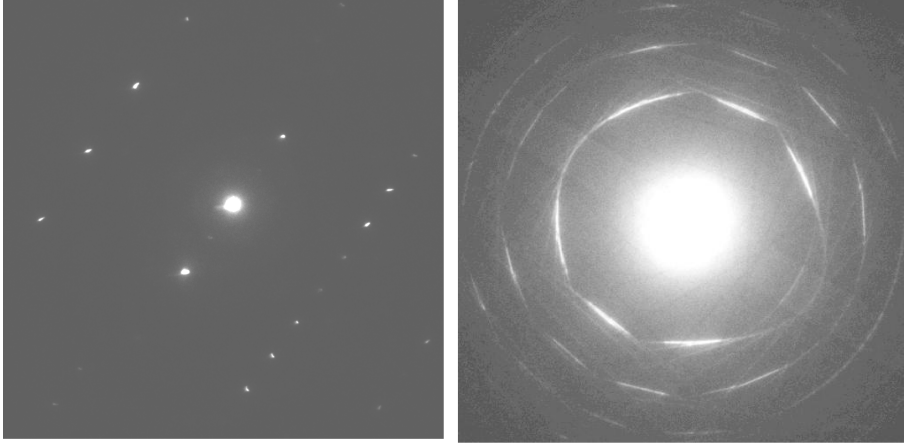


Figura 4.5: Tipiche figure di diffrazione elettronica: fascio elettronico parallelo (sinistra); fascio convergente (CBED)(destra). Le immagini si riferiscono ad un cristallo di silicio. Il fascio di elettroni è nella direzione cristallografica  $\langle 230 \rangle$ . Il potenziale di accelerazione è  $200 \text{ kV}$ .

nel piano focale posteriore della lente obiettivo si forma un pattern di diffrazione a spot in cui ad ogni punto corrisponde un vettore del reticolo reciproco che soddisfa la condizione di Laue, figura 4.5(sinistra). Se invece il fascio è convergente, la figura di diffrazione contiene dei dischi di dimensione dipendente dall'angolo di semi-convergenza e dalla distanza focale 4.5(destra).

Al centro del disco, sotto determinati parametri di esposizione, si osservano delle righe più scure, figura 4.6:

Queste righe permettono lo studio dello strain. Ad energie elevate la sfera di Ewald ha un raggio  $r$  grande rispetto alle distanze  $g$  fra i vettori del reticolo reciproco. Ad esempio con elettroni a voltaggi di  $100 \text{ kV}$  il raggio è di  $270 \text{ nm}^{-1}$ , mentre  $g$  è dell'ordine di qualche nm.

Così, con il fascio parallelo, nel pattern avremo molti punti appartenenti solo alla ZOLZ. I piani che danno origine a questa diffrazione, sono tutti paralleli al fascio, così si possono ottenere informazioni solamente in 2 dimensioni. Nel CBED, per angoli grandi, la sfera può intersecare anche punti appartenenti a high order Laue zones. Questi punti corrispondono a piani che hanno anche componenti ortogonali rispetto alla direzione del fascio. Con questa tecnica si ottengono quindi informazioni in 3 dimensioni sul campione.

La posizione di queste righe dipende quindi dai parametri reticolari del cristallo.

Consideriamo una deformazione isotropa del campione che porta ad una variazione della distanza interplanare  $d_{hkl}$ . Differenziando la legge di Bragg si ricava:

$$\frac{\Delta a}{a} \propto \frac{\Delta E}{E} \propto -\frac{\Delta \theta}{\theta} \quad (4.23)$$

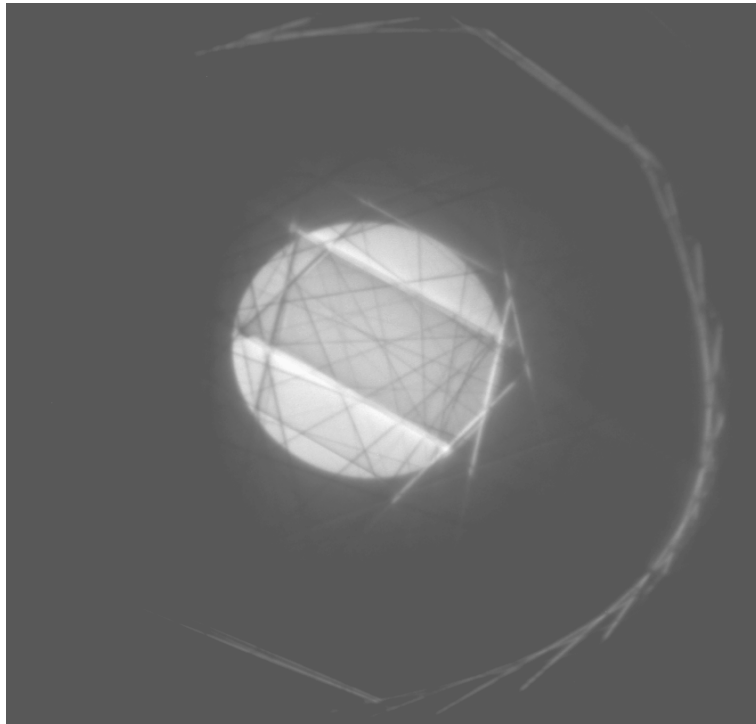


Figura 4.6: Stesso pattern di diffrazione della figura 4.5(destra), ad altri parametri di esposizione.



con a il parametro di cella e E l'energia del fascio. Si vede che una variazione del parametro reticolare porta ad una variazione dell'angolo di bragg  $\theta$ . Dal momento che le HOLZ sono prodotte da alti angoli di scattering, la sensibilità nella misura dello strain è elevata. Dalla (4.23) si vede anche che una piccola variazione dell'energia o incertezza, quindi del voltaggio, porti ad una variazione di  $\theta$  quindi dell'immagine di diffrazione. Per questo, si effettua preliminarmente un'acquisizione dell'immagine in una zona che ci si aspetta essere non stressata, e la si confronta con quella simulata sulla stessa struttura, a vari voltaggi di prova. Si sceglie poi il voltaggio effettivo, in accordo ad un criterio di minimizzazione di  $\chi^2$ . Queste operazioni vengono effettuate dal software Anlysis di SIS. Si assume poi che questo valore rimanga inalterato anche nelle zone stressate. In realtà ciò è accettabile solo in condizione di diffrazione cinematica. Nel caso di regime dinamico gli scattering multipli portano ad una variazione di questo parametro, modificando l'energia dell'elettrone. Pertanto l'applicabilità della teoria cinematica va verificata nell'orientazione cristallografica scelta per l'analisi. Per fare ciò si esegue una simulazione dinamica di un campione dello stesso materiale e si controlla che le linee HOLZ che si intende considerare, a varie orientazioni del fascio, sono rettilinee e non cambiano posizione con lo spessore del campione. Ad esempio, per il Silicio, il fascio a  $200kV$ , orientato in direzione  $\langle 230 \rangle$  rispetto al campione, assicura un regime cinematico. Per questo, in campioni in Silicio, si usa prevalentemente questa orientazione, figura 4.7.

Inizialmente tramite il software Analysis di SIS , vengono misurate le distanze fra determinate linee HOLZ del campione. Questo programma ,una volta impostati i dati sul tipo di struttura e l'orientazione cristallografica, individua le linee e misura le distanze fra le intersezioni, figura 4.8.

Vengono confrontate le distanze misurate con quelle simulate dal software con il voltaggio effettivo ottenuto dallo step precedente, variando i valori dei parametri reticolari. Si ricavano, con il criterio di minimizzazione del  $\chi^2$ , i sei parametri di cella e, con le ( 2.29,2.30, 2.31, 2.32, 2.33, 2.34) il tensore di strain.

Spesso, l'incertezza sulle linee di HOLZ porta a diverse combinazioni dei parametri di cella che soddisfano il criterio di minimizzazione . Per questo sono necessari dei dati aggiuntivi. La simmetria del campione può ridurre i parametri indipendenti da determinare. Consideriamo,ad esempio, la struttura , detta Shallow Trench Isolation (STI) , riportata in figura 4.9.

E' chiaro che l'asse X e l'asse Y cristallini [100] [010] sono equivalenti. Infatti la loro orientazione rispetto alle pareti ed eventuali sorgenti di stress è la stessa. Ad esempio rispetto alla direzione di assottigliamento, [110], formano entrambi un angolo di  $\pi/4$ . Questi ci permette di assumere:

$$a_x = a_y \quad (4.24)$$

$$\alpha = \pi - \beta \quad (4.25)$$

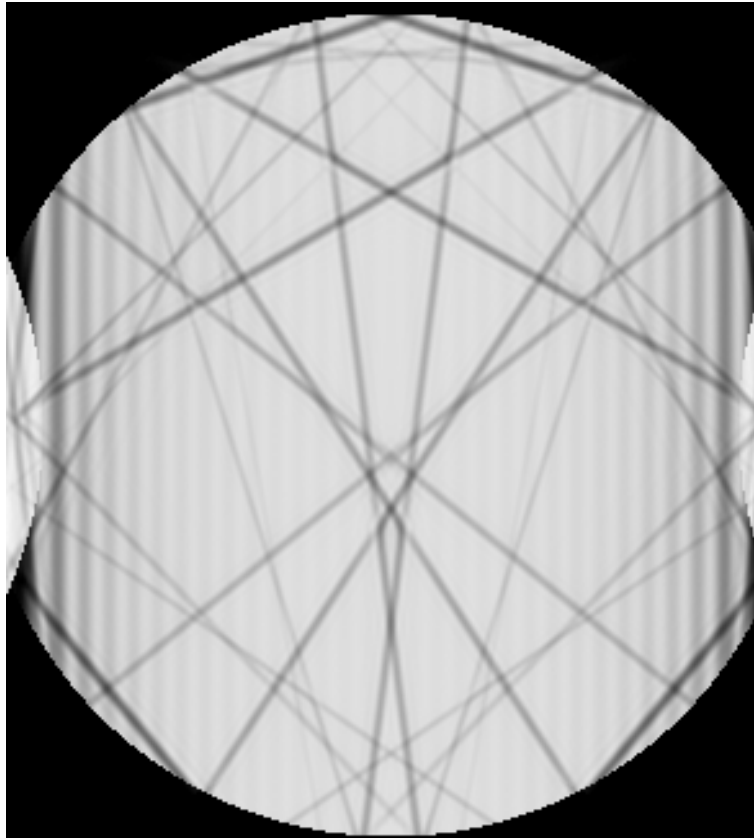


Figura 4.7: Simulazione dinamica di un pattern CBED di un campione in silicio, con orientazione del fascio  $\langle 230 \rangle$  ed voltaggio di accelerazione di  $200\text{kV}$

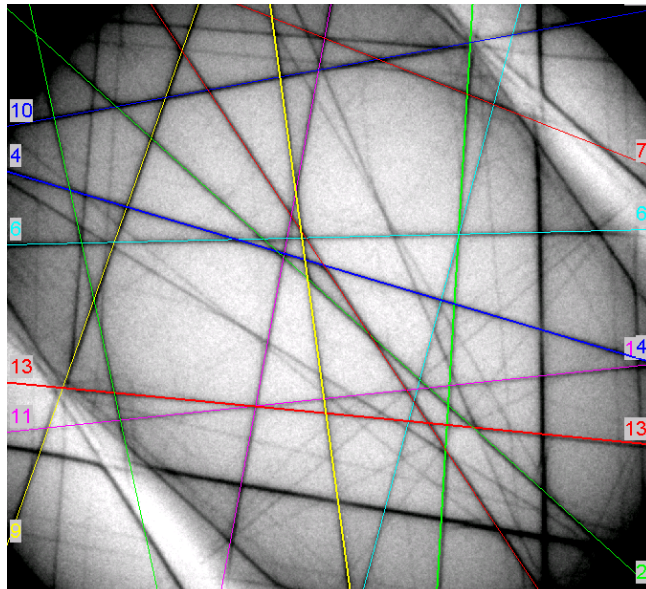


Figura 4.8: Pattern CBED di un campione di silicio non deformato, con fascio orientato nella direzione  $\langle 230 \rangle$  a  $200 \text{ kV}$ . Le linee HOLZ, rilevate dal software *Analysis* sono sovrapposte alle linee sperimentali.

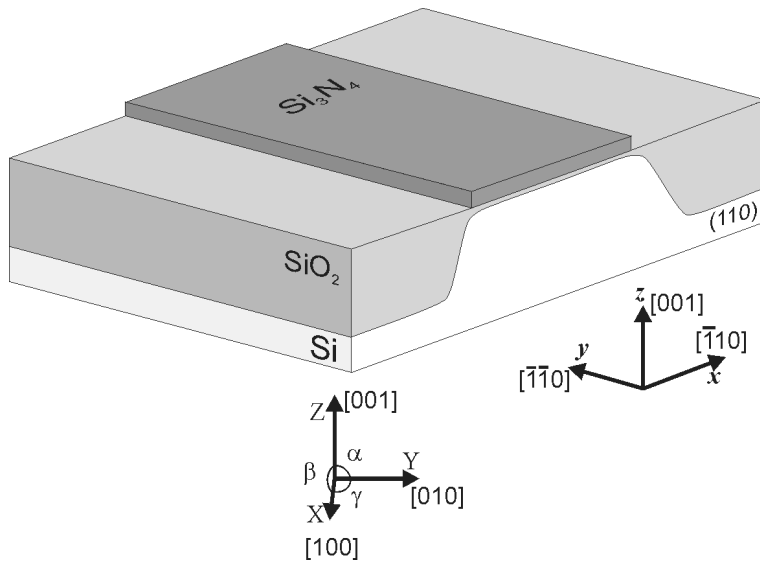


Figura 4.9: Rappresentazione schematica di una struttura STI, con l'orientazione degli assi del cristallo (X,Y,Z) rispetto agli assi di riferimento del campione (x,y,z).

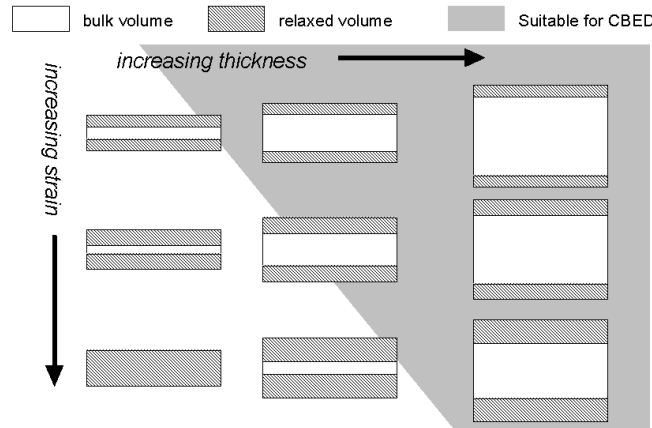


Figura 4.10: Rappresentazione delle regioni, analizzate tramite CBED, con i volumi di rilassamento, in funzione dello strain e dello spessore del campione.

Queste considerazioni valgono anche per la nostra struttura e sono state utilizzate nel calcolo dei parametri.

Riducendo lo spessore del campione, nel caso in questione fino a qualche decina di micron, è necessario prendere in considerazione lo stress di rilassamento. Lo stress nei pressi della superficie è diverso dallo stress nel volume interno del campione. Questo è dovuto alla differente configurazione strutturale degli atomi o delle molecole nei pressi della superficie rispetto a quelli interni, detti di bulk. Così c'è una certa parte di campione, in cui lo stress varia fino a raggiungere il valore bulk all'interno, figura 4.10. Nell'analisi di strain tramite CBED, una distribuzione dello stress non omogenea, lungo la direzione del fascio, genera rumore nel pattern di diffrazione. Così, se il volume con stress di rilassamento è comparabile con quello bulk, il rapporto segnale-rumore può non essere sufficiente per un'analisi. Inoltre, la dimensione del volume di rilassamento cresce all'aumentare dello stress. Così, ci si aspetta che un campione estremamente sottile produrrà una buona immagine di diffrazione se il gradiente dello strain lungo la direzione del fascio è molto piccola.

La qualità dell'immagine rappresenta quindi un'informazione importante: se è buona, questo significa che il rilassamento nella direzione di assottigliamento è trascurabile. Questa assunzione è detta **Plane Strain Approximation**, figura 4.11.

Questa approssimazione riduce ulteriormente i parametri di cella indipendenti. Infatti considerare trascurabile  $\Delta a_y$  implica:

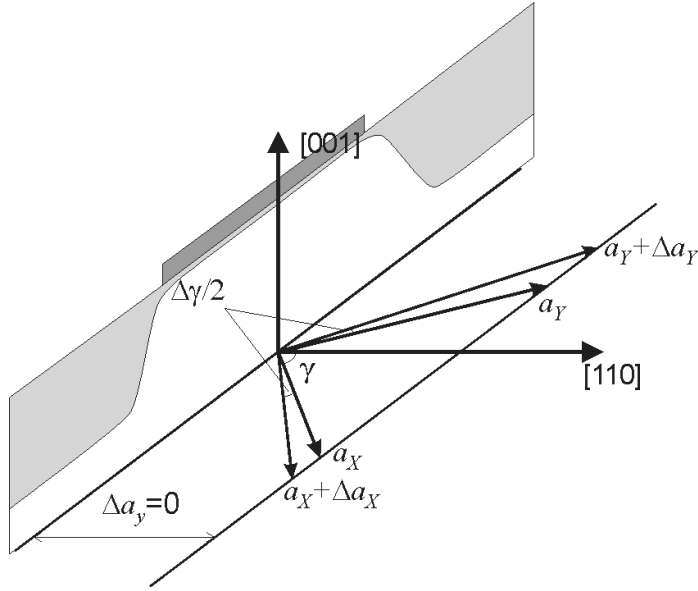


Figura 4.11: Correlazione fra  $\varepsilon_{xx}(=\varepsilon_{yy})$  e  $\delta\gamma$  in accordo alla Plane Strain Approximation.

$$\Delta a_y \sim 0 \Rightarrow \frac{\Delta a_X}{a_X} = \frac{\Delta a_Y}{a_Y} = \frac{\Delta\gamma/2}{1 - \Delta\gamma/2} \sim \Delta\gamma/2 \quad (4.26)$$

## Incertezza associata alla misura di strain tramite CBED

Come accennato nella sezione precedente, durante la fase preliminare della misura, si effettua un confronto fra l'immagine ottenuta dall'analisi di una zona che ci si aspetta essere non stressata e quella simulata. Per fare una stima dell'incertezza da associare alle misure, nell'impossibilità di misurare campioni standard, si fa riferimento a misure di strain effettuate su figure di diffrazione CBED ottenute tramite simulazione dinamica di strutture a deformazione nota in silicio, che nello stato bulk non sono stressati. I valori misurati sono stati inferiori a  $300\mu\varepsilon$ . Non potendo effettuare uno studio sistematico su un numero elevato dei nostri campioni che potrebbero portare ad una riduzione di questa incertezza, si associa alla misura l'errore di  $300\mu\varepsilon$ .

In realtà, questa incertezza non prende in considerazione altri fattori che possono alterare la misura. Innanzitutto non si tiene conto dei processi specifici a cui è sottoposto il campione. Infatti, alcuni processi, come quelli che prevedono l'utilizzo di fasci ionici ad alto angolo di incidenza per l'assottigliamento, ad esempio, generano la presenza sul campione di strati amorfi alterandone quindi

la struttura. Inoltre stress grandi in campioni con spessori ridotti generano rilassamento, come descritto nella sezione precedente. Questo rilassamento, oltre a peggiorare il rapporto tra segnale e rumore come descritto nella sezione precedente, può diminuire apprezzabilmente lo strain del campione. Così, quando lo strain da rilevare è elevato, quello effettivamente misurato può essere inferiore a quello del campione bulk, dando luogo quindi ad un errore sistematico che sottostima il valore della deformazione.

## Preparazione dei campioni

Il campione da analizzare al TEM deve avere le dimensioni adeguate innanzitutto a permettere l'attraversamento del fascio elettronico. Lo spessore è dell'ordine di 200 nm. Deve essere allo stesso tempo meccanicamente robusto, così da poter essere spostato e ruotato all'interno della macchina e coeso per evitare rischi di frammentazioni. Inoltre le dimensioni e le uniformità dei bordi devono garantire un perfetto alloggiamento nel portacampioni per evitare derive (contatto elettrico, termico e meccanico) durante l'osservazione.

Inizialmente si seleziona la zona del campione da analizzare. Nel nostro caso si estraggono i die dalla maschera, tramite clivaggio. Questa tecnica induce delle fratture lungo piani più predisposti alla rottura di altri in seguito alla struttura e all'orientazione del campione, detti appunto di clivaggio. Le fratture sono state indotte facendo pressione con un pinza, in corrispondenza dei bordi delle righe che separano i die.

Il campione viene incollato a diversi supporti, in Silicio, fino ad ottenere uno spessore prossimo a 3 mm. Si usa della colla ipossidica bicomponente per alte temperature. Il campione ed i supporti usati, subiscono dei lavaggi a caldo ed in ultrasuoni, in soluzioni ad acetone per rimuovere impurità e migliorare la presa della colla. Tramite una morsa si fa pressione sul campione per assicurare l'adesione della colla e ridurre lo spessore.

Il campione, incollato ai supporti, viene poi tagliato in fette con uno spessore di 2 mm con una sega a lama diamantata. Quattro fette vengono poi fissate ad un disco di vetro lucido mediante cera, tutte orientate allo stesso modo, figura 4.12.

Un'indentatura tramite trapano ad ultrasuoni permette di ottenere dalle fette i dischetti finali, del diametro di 3 mm. Si esegue poi la lappatura, ossia l'assottigliamento del campione e levigatura. Questa operazione viene eseguita pressando il campione su dischi abrasivi in rotazione. La granulometria dei dischi utilizzati varia. La dimensione dei grani del primo disco è di 20  $\mu\text{m}$ , mentre per l'ultimo è di 10  $\mu\text{m}$ . L'orientazione del disco di supporto è tale che prima la superficie da analizzare e poi il substrato, entrino in contatto la superficie abrasiva.

Un'immagine del campione, al microscopio ottico, a questa fase della preparazione viene riportata in figura 4.13:

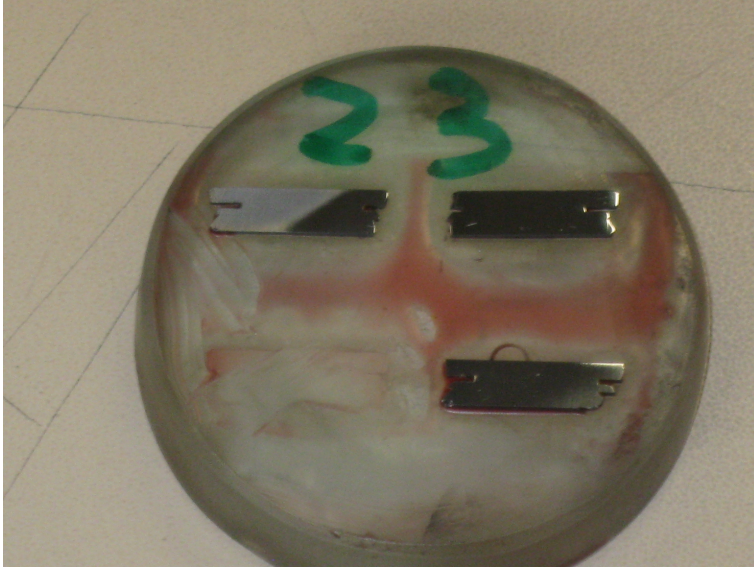


Figura 4.12: Le fette del campione fissate al disco mediante cera.

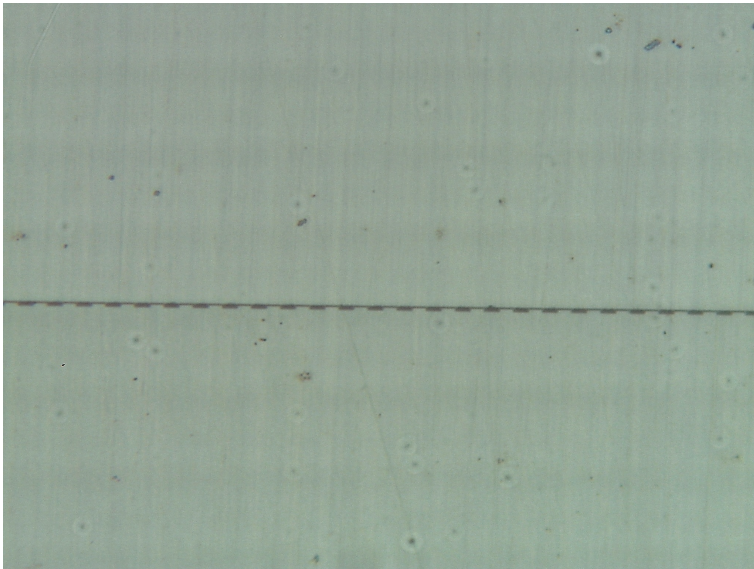


Figura 4.13: Immagine al microscopio ottico del campione dopo la levigature. In nero la colla fra le ridge del campione, in basso e il supporto in silicio.

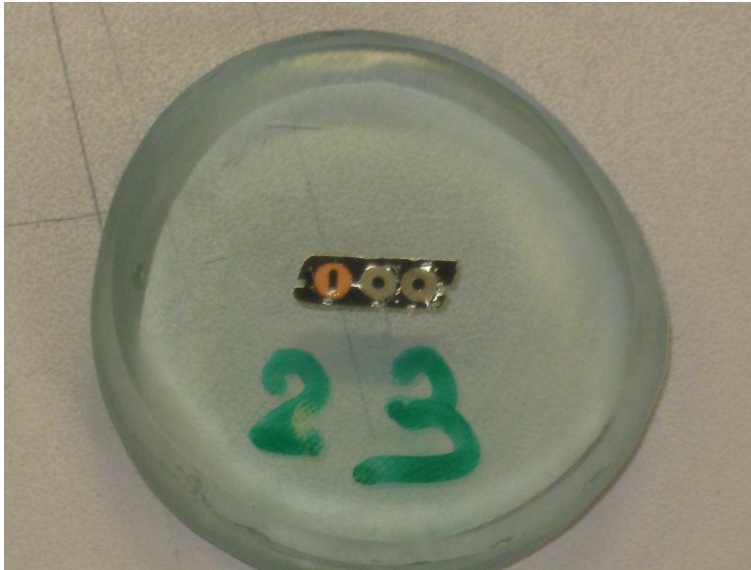


Figura 4.14: Immagine del campione dopo l'applicazione dei dischetti.

Una volta raggiunto lo spessore di  $20 \mu m$ , il campione viene lucidato con liquidi abrasivi, per rimuovere i solchi rimasti, che riducono le difformità a meno di un  $1 \mu m$ . Segue una fase di lavaggio in soluzione ad acetone. Vengono poi applicati sul campione dei dischetti, con un vuoto al centro, di diametro  $3 \text{ mm}$ , figura 4.14.

Nell'ultima fase, il campione viene ulteriormente assottigliato tramite fascio ionico. In questa tecnica ioni di Argon vengono accelerati da una differenza di potenziale nei due cannoni e diretti verso il campione. Nella prima fase, il fascio viene diretto da entrambi i cannoni sul campione a basso angolo ed a bassa intensità per completare la fase di lucidatura. Durante l'assottigliamento finale, invece, i cannoni del fascio vengono accesi e spenti alternatamente in modo tale che il fascio acceso incida sempre dal substrato verso la superficie. In questa fase, nei punti in cui viene diretto il fascio, si crea un buco nel campione. Dal foro, lo spessore cresce in modo continuo fino ai  $20 \mu m$  del bordo. Si riportano nelle figura 4.15 e nella figura 4.16, le immagini schematiche dell'applicazione del fascio ionico.

Infine vengono rimossi eventuali strati rideposti durante l'assottigliamento e danno superficiale con una rotazione a basso angolo di incidenza e a bassa tensione.

#### 4.4 Immagini STEM e CBED dei campioni

La scanning transmission electron microscopy è un'altra tecnica realizzata con il microscopio a trasmissione. Il fascio, una volta collimato sul campione con le



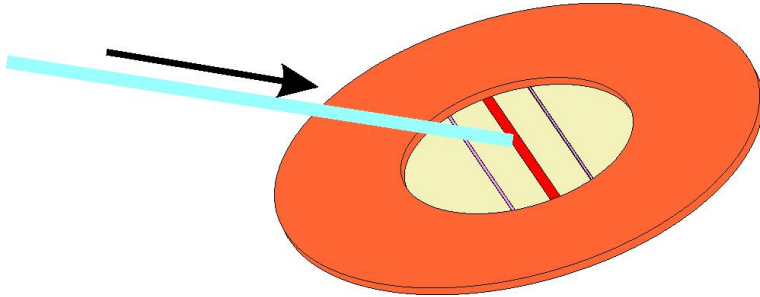


Figura 4.15: Rappresentazione schematica del fascio ionico incidente sulle strutture del campione.

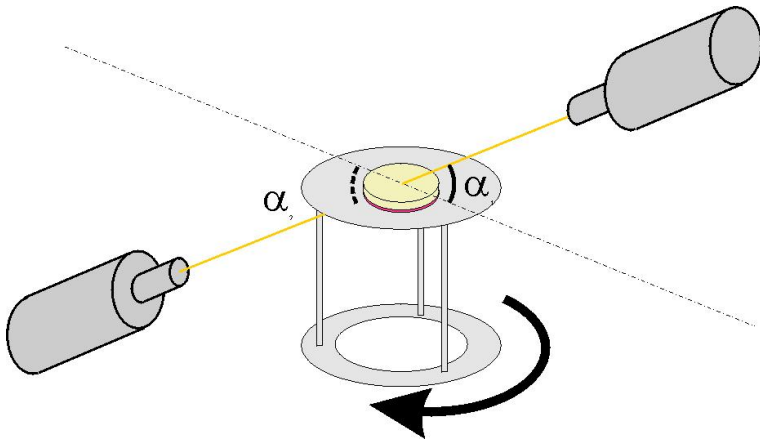


Figura 4.16: Rappresentazione schematica dell'utilizzo dei due cannoni ionici.

lenti condensatrici, viene spostato ed indirizzato sulla superficie, con passo nanometrico, effettuando una scansione. Il segnale trasmesso viene raccolto da un rivelatore elettronico amplificato ed utilizzato per la generazione di un'immagine per punti successivi. In base al tipo di rivelatore si possono effettuare analisi differenti. Le immagini dei campioni sono state acquisite con un rivelatore anulare ad alto angolo. In questa modalità gli elettroni raccolti sono incoerenti e sono minimizzati i contributi della diffrazione. L'intensità è proporzionale al fattore di diffusione quindi al potenziale atomico medio. Questo permette di ottenere una mappa 2d del campione in scala di grigio, in cui il contrasto è legato al differente numero atomico medio fra i punti del campione analizzati. La risoluzione dell'immagine è limitata solamente dalla dimensione del fascio, dal momento che non vengono utilizzate lenti obiettivo.

Nelle figure (4.17 4.18 4.19 ) si riportano le immagini STEM delle ridge del die corrispondente alla matrice  $V_{23}$  della maschera descritta nella sezione ??.

Nelle figure (4.20 4.21 4.22 ) si riportano le immagini STEM delle ridge del die corrispondente alla matrice  $V_{25}$  della maschera descritta nella sezione ??.

Nelle immagini, come descritto nella sezione, alla gradazione di grigio corrispondono differenti materiali. Al bianco corrisponde il nitrato di silicio, al nero la colla, al grigio il silicio. Nella figura 4.17 si evidenziano delle ombreggiature in corrispondenza delle spaziature. Queste figure sono create dal fascio ionico che trovando in corrispondenza delle spaziature una quantità di colla maggiore rispetto alle altre parti, incide maggiormente il campione. Si osserva che il nitrato ha aderito perfettamente al campione anche in zone delicate come i vertici delle ridge. Infatti, come si osserva nelle figure ( 4.19 4.20 4.22), le pareti non delle ridge non sono dritte ma sono delle curve concave verso l'interno. Questa forma è legata alla cinetica di crescita. Quando lo spessore del nitrato è grande, come in questo caso (  $345\text{ nm}$ ) il film potrebbe rompere il campione o staccarsi in alcuni punti dal materiale. In questo caso, invece, il campione non ha subito nessuno di questi danni. Da queste figure si nota anche la forma particolare del nitrato in prossimità dei vertici della ridge.

Nelle figure ( 4.23 4.24) sono riportate, a titolo di esempio, 2 immagini CBED di due punti del campione, ad altezza  $165\text{ nm}$  dal fondo della ridge in prossimità, rispettivamente, della parete destra e sinistra.

Si osserva come alcuni punti di intersezione delle HOLZ, descritte nella sezione 4.3, corrispondenti ai vari piani cristallini, siano spostati da un punto all'altro del campione. Questo spostamento è legato, come descritto nella sezione, allo strain presente nel campione.

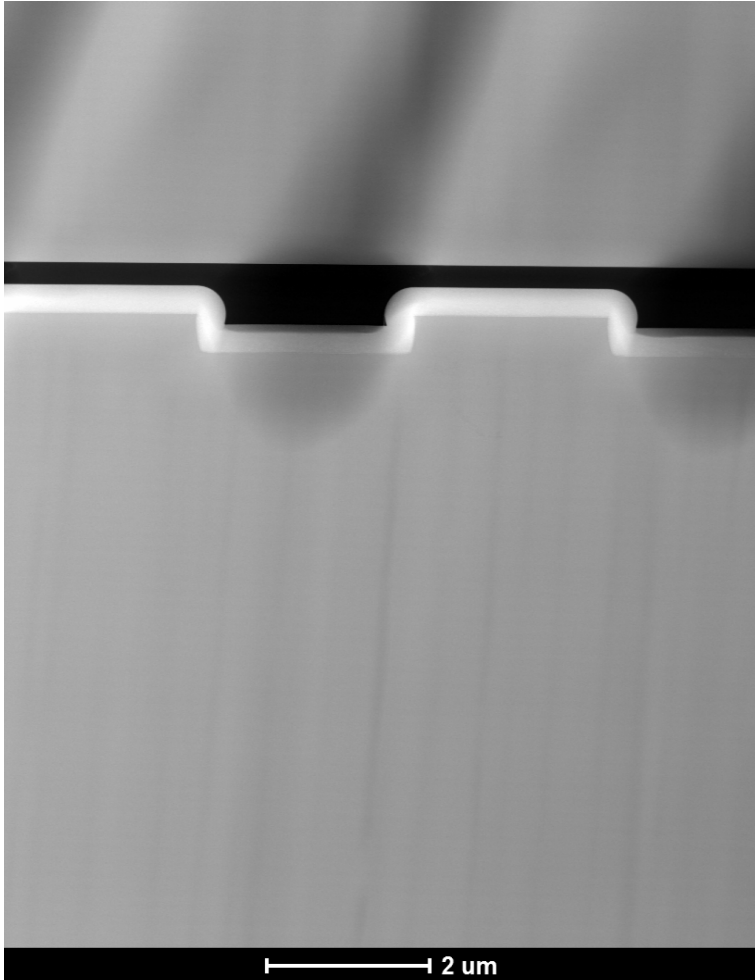


Figura 4.17: Immagini STEM di 2 ridge della matrice  $V_{23}$



Figura 4.18: Immagine STEM di una ridge della matrice  $V_{23}$

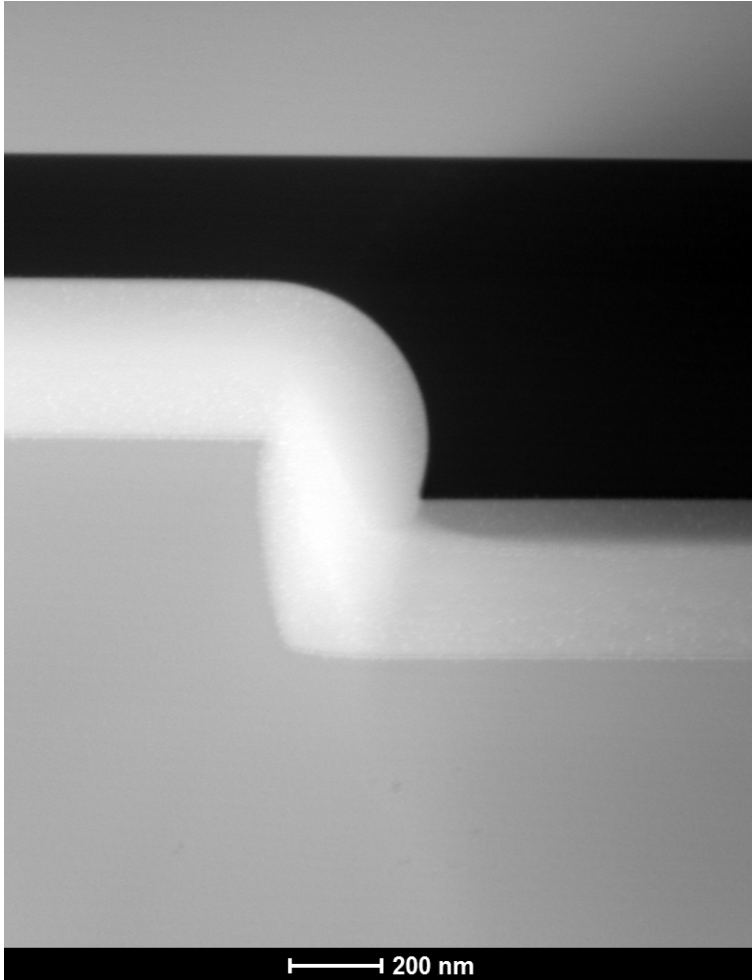


Figura 4.19: Immagine STEM di una vertice della ridge riportata in figura 4.18

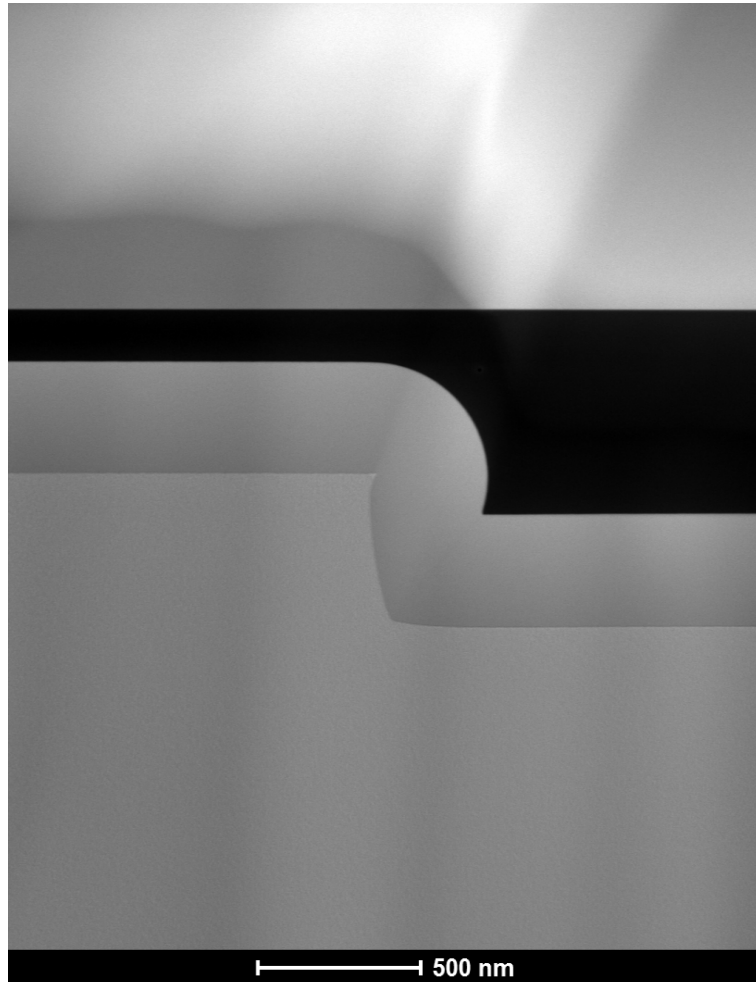


Figura 4.20: Esempio d'uso delle opzioni

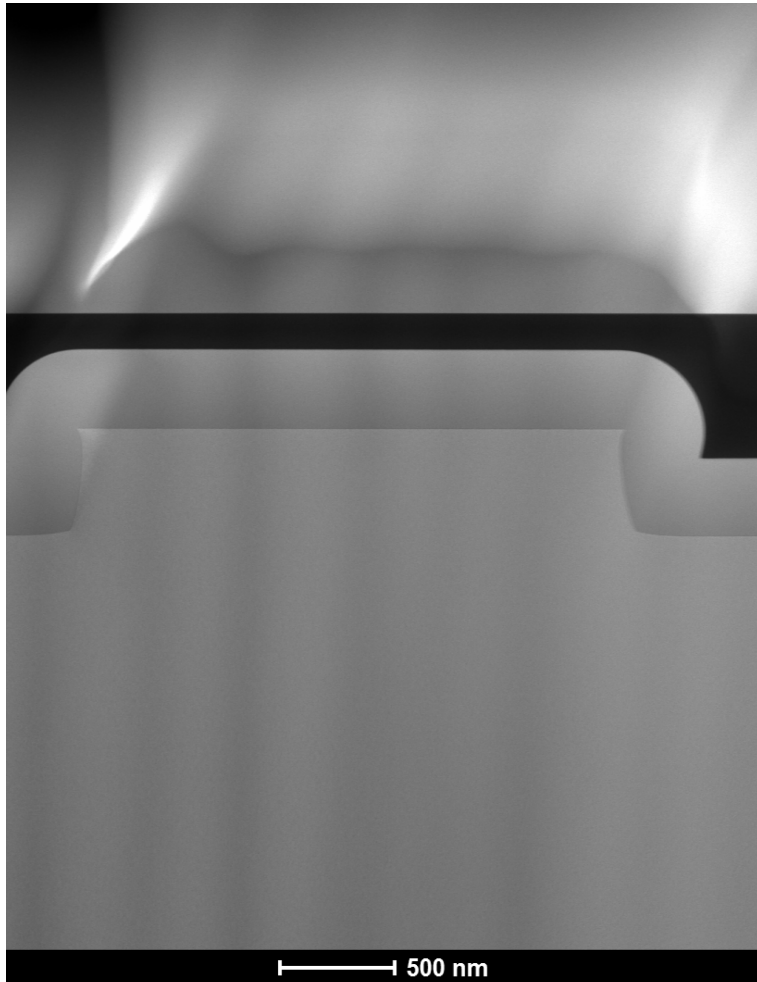


Figura 4.21: Esempio d'uso delle opzioni



Figura 4.22: Esempio d'uso delle opzioni



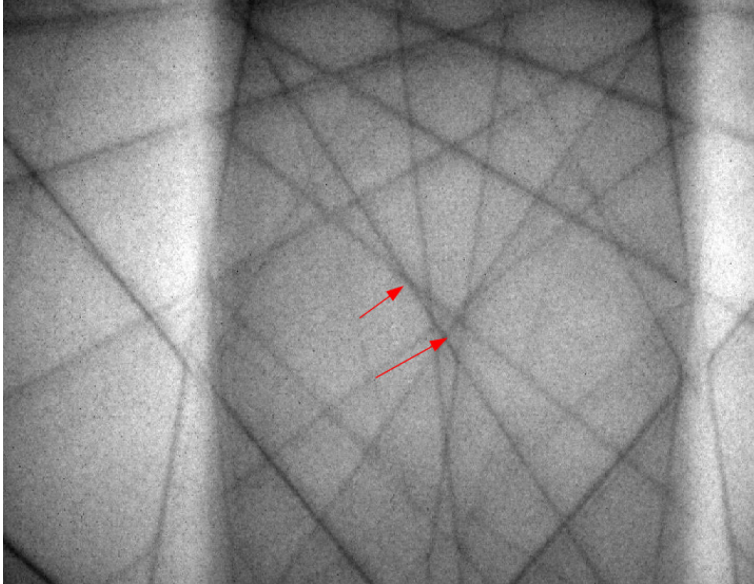


Figura 4.23: Esempio d'uso delle opzioni

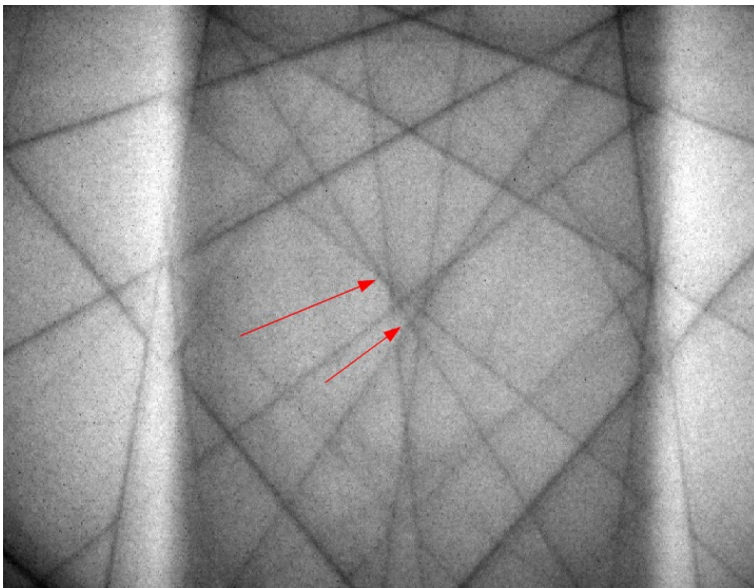


Figura 4.24: Esempio d'uso delle opzioni



## Capitolo 5

# Analisi dello strain e proprietà opto-elettroniche

In questa sezione si riportano i risultati delle simulazioni di strain effettuate con il programma COMSOL Multiphysics 4.3b in cui si è utilizzato il metodo agli elementi finiti descritto nella sezione (2.8) e le misure di strain effettuate tramite diffrazione elettronica a fascio convergente (CBED), tecnica illustrata nel capitolo 4. Lo scopo è estrapolare dal confronto fra questi dati delle informazioni riguardo l'applicabilità di questa tecnica innovativa per la misura di strain su questo tipo di strutture. Se infatti la misure di strain tramite CBED è una tecnica già nota in microelettronica [1], la sua applicazione per strutture come quelle microfabbricate non dispone al momento di numerose applicazioni, soprattutto in presenza di film ad altro stress intrinseco. Questo confronto si rivela inoltre utile per testare l'affidabilità e l'accuratezza del modello utilizzato per simulare le deformazioni indotte da nitruro in previsione di un suo utilizzo per analisi di dispositivi ottici in silicio.

### 5.1 Analisi di strain

Nella figure 5.1-5.2 è riportata le geometria utilizzata per le simulazioni.

La geometria scelta è quella che meglio si adatta alla forma delle strutture realizzate. Le immagini dei campioni 4.17 4.19 sono state ottenute tramite Scanning Transmission Electron Microscopy (STEM), tecnica descritta nella sezione 4.4. Le pareti dei campioni effettivamente realizzati non sono perfettamente ortogonali al substrato e il  $\text{Si}_3\text{N}_4$  presenta dei rigonfiamenti, detti *step coverage*, in corrispondenza dei vertici delle strutture (ridge), come osservato nella sezione 4.4. I valori misurati mediante STEM ed utilizzati nell'analisi seguente, sono:  $h_1 = 20 \mu\text{m}$ ,  $h_2 = 465 \text{ nm}$ ,  $h_3 = 345 \text{ nm}$ ,  $w_1 = 100 \mu\text{m}$ ,  $w_2 = 2.32 \mu\text{m}$ ,  $\theta = 83$ .

I valori  $h_2$ ,  $h_3$ ,  $w_2$  e  $\theta$  sono ottenuti delle suddette immagini del campione, utilizzando il software *TEM Imaging Analysis* che permette di effettuare delle

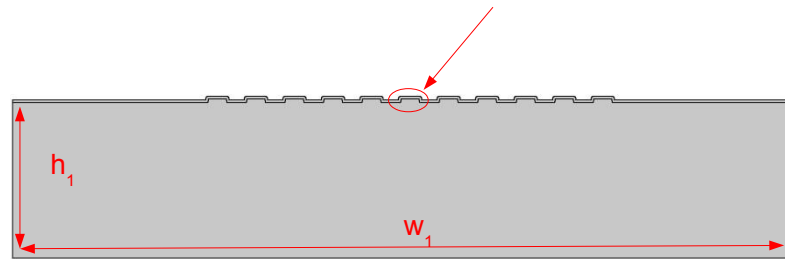


Figura 5.1: Geometria della sezione utilizzata nelle simulazioni. È indicata con la freccia la ridge ingrandita in figura 5.2

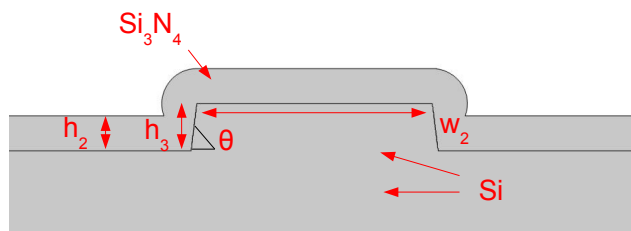


Figura 5.2: Geometria di una ridge utilizzata nelle simulazioni

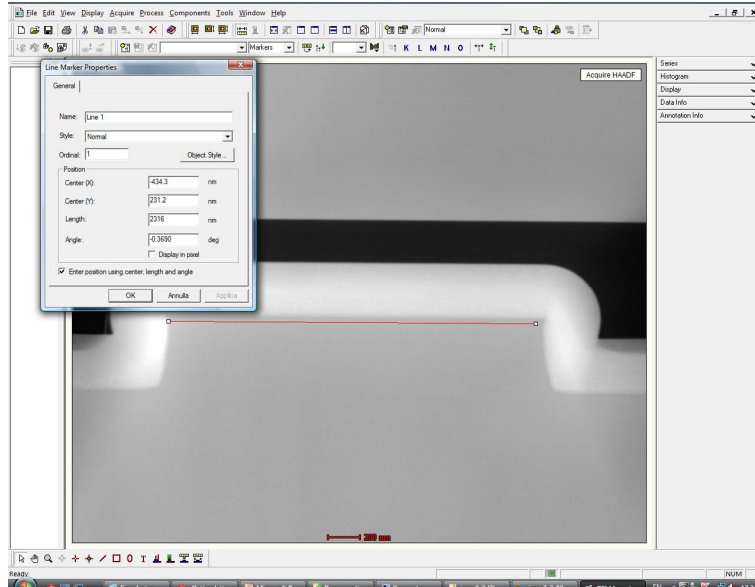


Figura 5.3: Misura della larghezza del dente effettuata tramite il software TEM Imaging Analysis

misure sulle immagini STEM. Si riporta nella figura (5.3), come esempio, la misura della larghezza di una ridge effettuata per un campione microfabbricato.

Le costanti elastiche del nitruro utilizzate sono  $E = 270\text{MPa}$  e  $\nu = 0.27$  [20]. Per il silicio si è usato il tensore di stiffness (2.22) con le costanti elastiche date dalle espressioni (2.26-2.27-2.28) poiché le strutture, come descritto nella sezione 2.2, sono state realizzate con questa orientazione cristallografica.

Nelle figura (??) è rappresentata la distribuzione del modulo dello spostamento  $\mathbf{u}$ , (si veda eq. 2.3) detto **spostamento totale**.

Negli assi  $x$  e  $y$  sono riportate le coordinate della sezione trasversale delle guide in  $\mu\text{m}$ , il colore relativo indica il modulo dello spostamento ( $\mu\text{m}$ ). Amplificando numericamente la deformazione simulata di un fattore 100 (non mostrato in figura), si può osservare che la presenza del film di nitruro di silicio deforma la struttura espandendo la ridge in direzione orizzontale, e riducendone l'altezza. È presente una deformazione rilevabile anche a distanze superiori ad un  $1\ \mu\text{m}$  al di sotto del film.

Nelle figure 5.5 5.6 5.7 si riporta la distribuzione, nella sezione, delle componenti di strain  $\varepsilon_{xx}$ ,  $\varepsilon_{xz}$ ,  $\varepsilon_{zz}$  ottenute nelle simulazioni.

Le deformazioni mostrano degli andamenti peculiari per i campioni microfabbricati. Per le componenti  $\varepsilon_{xx}$  e  $\varepsilon_{zz}$ , l'intensità della deformazione è massima in prossimità delle pareti verticali della ridge in silicio: si raggiungono valori di  $\varepsilon_{xx} \sim 2.2\ \text{m}\varepsilon$  e  $\varepsilon_{zz} \sim -2.3\ \text{m}\varepsilon$ . In prossimità della parete orizzontale, invece,

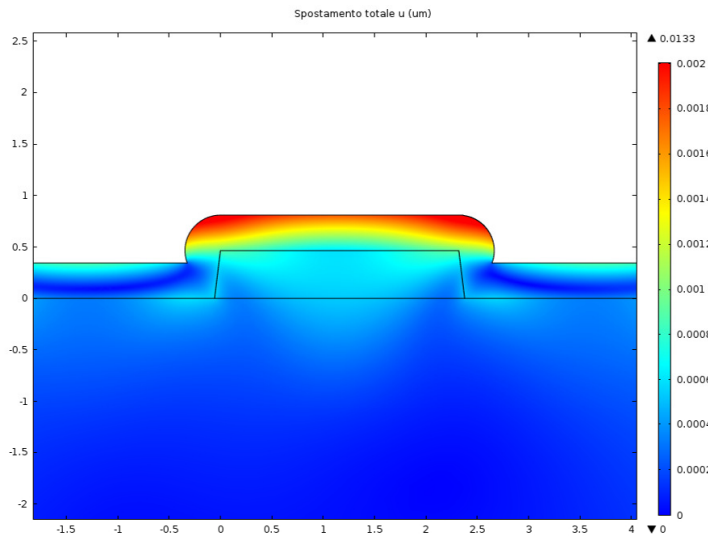


Figura 5.4: Distribuzione dello spostamento totale ottenuta tramite simulazione. La figura in nero rappresenta la forma originaria della struttura

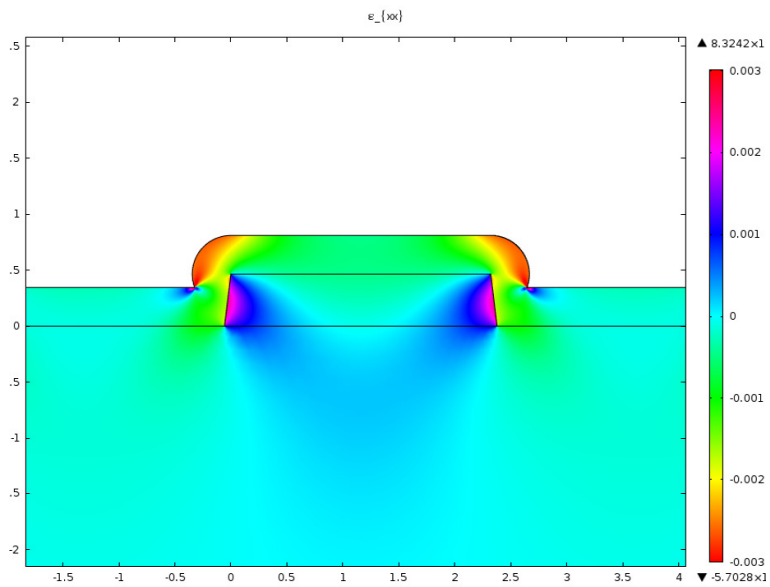


Figura 5.5: Distribuzione della componente  $\varepsilon_{xx}$

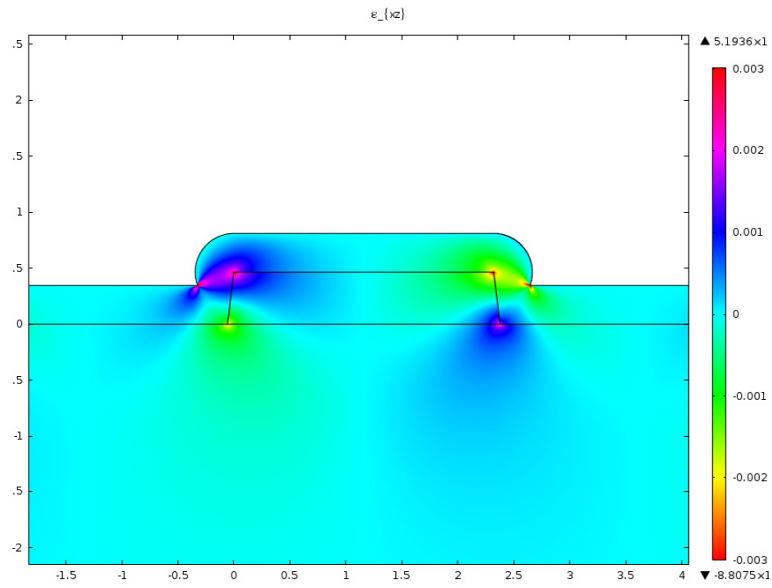


Figura 5.6: Distribuzione della componente  $\epsilon_{xz}$

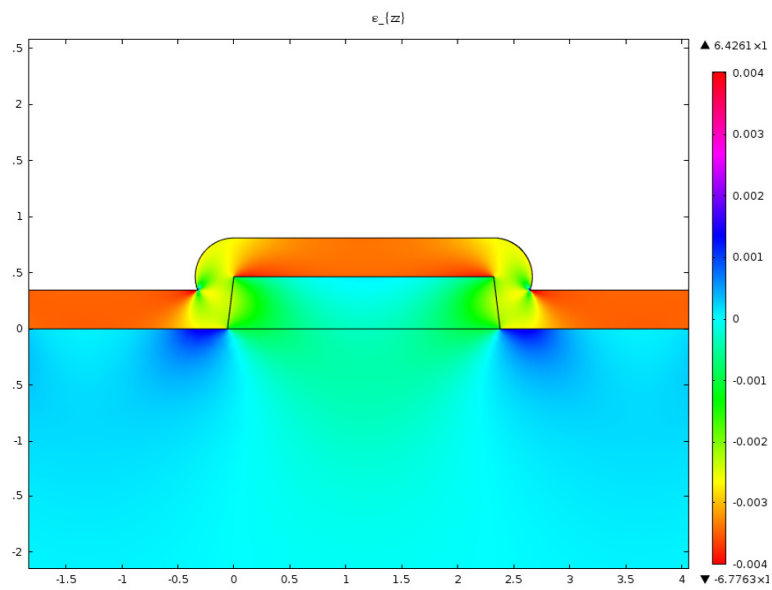


Figura 5.7: Distribuzione della componente  $\epsilon_{zz}$



le deformazioni sono più basse, rispettivamente di uno e due ordini di grandezza:  $\varepsilon_{xx} \sim -0.44 m\varepsilon$  e  $\varepsilon_{zz} \sim 0.035 m\varepsilon$ . Le distribuzioni delle deformazioni risultano inoltre simmetriche in direzione orizzontale rispetto al centro della ridge. Per la componente  $\varepsilon_{xz}$ , invece, la deformazione è massima nei vertici della ridge dove assume i valori  $\varepsilon_{xz} \sim 1.8 m\varepsilon$  e  $\varepsilon_{xz} \sim -1.8 m\varepsilon$  e diminuisce in maniera continua spostandosi verso il centro del dente. Si nota che la deformazione, per le componenti  $\varepsilon_{xz}$  e  $\varepsilon_{zz}$  non subisce discontinuità passando dal Silicio al Nitruro di Silicio. La componente  $\varepsilon_{xx}$  cambia invece di segno: è compressiva ( $\varepsilon_{xx} < 0$ ) nel Nitruro e tensile ( $\varepsilon_{xx} > 0$ ) nel Silicio.

## 5.2 Confronto con misure TEM

Per verificare l'accuratezza dei metodi simulativi impiegati e supportare i risultati della misure TEM con un modello cristallografico che descriva lo strain, oltre che per verificare l'accuratezza dei metodi simulativi impiegati, è stato effettuato un confronto tra valori stimati e misure di strain.

Nelle figure 5.8, 5.9, 5.10, 5.11 si riportano gli andamenti delle componenti  $\varepsilon_{xz}$  e  $\varepsilon_{zz}$  a diverse altezze dal bordo inferiore della ridge in silicio, ottenute mediante misure effettuate con il metodo CBED e simulazione. Per le misure CBED, si sono analizzate le ridge del die corrispondente alla matrice  $H_{23}$  della maschera riportata nella figura 3.2. Alla matrice  $H_{23}$ , come descritto nel capitolo 4, corrispondono ridge larghe  $2 \mu m$  con spaziatura di  $3 \mu m$ . Sono state scelte queste dimensioni perché la larghezza della guida è quella più piccola fra le matrici della maschera disponibili, e quindi quella che si avvicina di più alle dimensioni delle guide d'onda impiegate nella Silicon Photonics e simulate nelle sezioni seguenti. Anche la spaziatura scelta è quella più piccola fra le matrici della maschera. Sono state effettuate simulazioni di strain, con la geometria riportata nelle figure (5.1 - 5.2), a differenti distanze fra le ridge e si sono evidenziate variazioni relative, rispetto al caso di guida singola, superiori al 5 % anche per  $40 \mu m$  di distanza fra le ridge. Dato che il valore massimo della spaziatura per le matrici è  $10 \mu m$ , con la maschera utilizzata non sarebbe stato possibile simulare il caso di guida singola, valido per le guide d'onda. Stante questa limitazione, si è scelto di utilizzare la spaziatura minore, per studiare l'effetto della presenza di diverse strutture, sulla distribuzione prodotta dallo strato di nitruro.

L'incertezza associata alla misura è di  $300 \mu\varepsilon$  come illustrato nella sezione 4.3. Dalle figure (5.8 - 5.9 - 5.10 - 5.11), si evidenzia che la dipendenza spaziale delle componenti di strain  $\varepsilon_{xz}$  e  $\varepsilon_{zz}$  misurate alle due profondità di  $300nm$  e  $400nm$  mostrano lo stesso andamento di quelle ottenute nella simulazione.

Si rileva invece una discrepanza fra i valori misurati e quelli ottenuti nelle simulazioni, principalmente per i valori di  $\varepsilon_{zz}$ . In questo caso i valori misurati risultano più bassi, in modulo, di quelli simulati. Si ritiene che ciò sia legato alla sottostima di un errore sistematico nella misura; difatti, come illustrato nella sezione 4.3, quando lo strain bulk è grande, se si riduce di molto lo spessore del

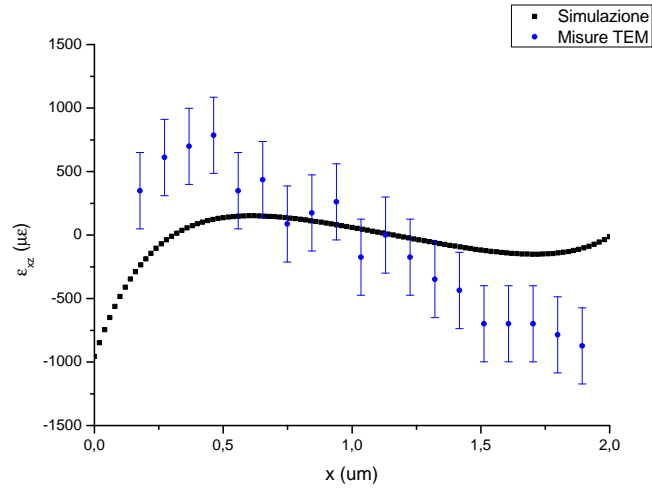


Figura 5.8: Valori della componente  $\varepsilon_{xz}$  ad un'altezza di  $65 \text{ nm}$  dal fondo della ridge

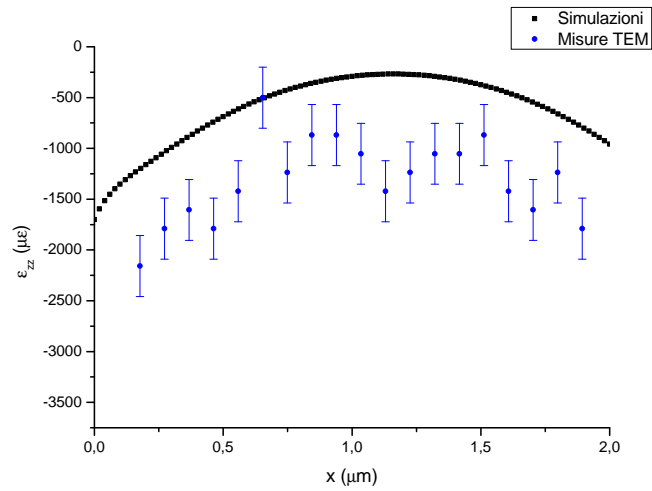


Figura 5.9: Valori della componente  $\varepsilon_{zz}$  ad un'altezza di  $65 \text{ nm}$  dal fondo della ridge

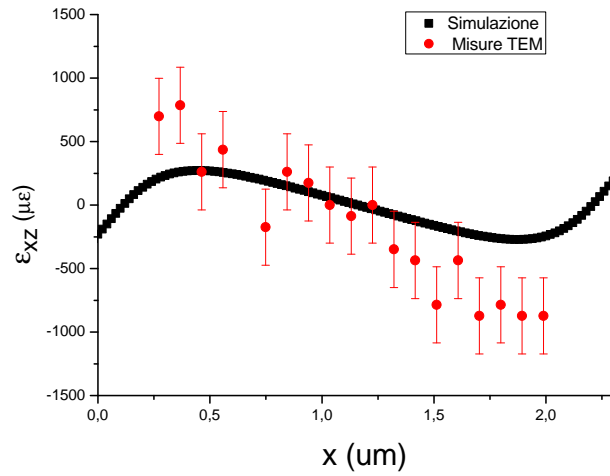


Figura 5.10: Valori della componente  $\varepsilon_{xz}$  ad un'altezza di 165 nm dal fondo della ridge

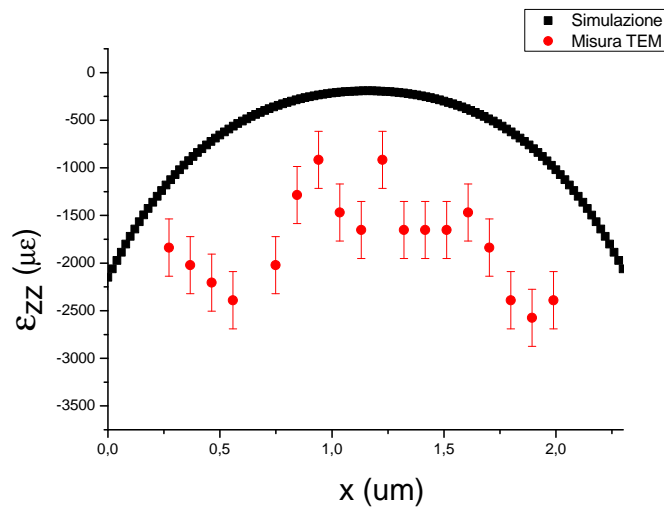


Figura 5.11: Valori della componente  $\varepsilon_{zz}$  ad un'altezza di 165 nm dal fondo della ridge

campione (riduzione necessaria per effettuare le misure CBED in questo caso a 250 nm), si può verificare un rilassamento di stress e quindi una diminuzione delle deformazione. Questo effetto sembra essere il più significativo per spiegare la misura di valori di strain misurati, più bassi rispetto alle stime della simulazione.

Difatti, considerando il rilassamento dovuto alla riduzione dello spessore del campione, tale effetto sarà maggiore per maggiori valori di strain assoluti, e quindi la discrepanza misure CBED-simulazioni sarà accentuata per parametri  $\varepsilon_{ij}$  che presentano strain più elevati. Nel caso specifico, per  $\varepsilon_{zz}$ , i cui valori assoluti sono superiori a  $200\mu\varepsilon$  alle profondità in esame, la discrepanza è significativa ed è maggiore a 300 nm di profondità dove lo strain assoluto è maggiore rispetto ai 400 nm.

Per le componenti  $\varepsilon_{xx}$ , invece, i cui valori assoluti alle profondità analizzate non superano i  $200\mu\varepsilon$ , la discrepanza è minore. Soprattutto per valori attorno allo zero, in cui idealmente non vi è rilassamento si ha un ottimo accordo fra misure e simulazioni.

Si sono inoltre effettuate simulazioni di strain variando alcuni parametri dei materiali e più specificatamente le costanti elastiche del  $\text{Si}_3\text{N}_4$ . Rispetto all'analisi riportata prima, è stato scelto un nuovo set di costanti elastiche, tipico dei materiali:  $E = 250 \text{ GPa}$  e  $\nu = 0.23$ . Si è simulato il silicio con l'orientazione del sistema di riferimento cubico, con il tensore di compliance dato da 2.22 e le costanti elastiche date da: (2.23 – 2.24 – 2.25). Infine si è simulato il silicio assimilandolo ad un materiale isotropo, con le costanti date dalle espressioni  $E = 170 \text{ GPa}$  e  $\nu = 0.28$ . Rispetto alle misure TEM, la discrepanza dei valori ottenuti non subisce rilevanti variazioni rispetto alle simulazioni effettuate con i dati originali, confermando le previsioni sul comportamento dello strain all'interfaccia  $\text{Si}/\text{Si}_3\text{N}_4$ , anche in considerazione delle variabilità delle costanti del materiale (come si osserva dalla molteplicità di dati sulle costanti presenti in letteratura).

Nelle figure ( 5.12 – 5.13 ) si riportano i valori di  $\varepsilon_{xx}$  e  $\varepsilon_{zz}$  in cui, nel primo caso si sono variate le costanti elastiche del nitrato di silicio e nel secondo caso si è variata l'orientazione del Silicio e si è assimilato il silicio a materiale isotropo.

Da tutte queste analisi, anche considerando variazioni dei parametri dei materiali in oggetto nei range tipici, il metodo agli elementi finiti utilizzato per la simulazione di distribuzione delle deformazioni nelle strutture in esame presenta un buon accordo con le misure sperimentali, affidabile, prevedendo il giusto andamento della distribuzione delle componenti di strain  $\varepsilon_{xx}$  e  $\varepsilon_{zz}$  alle profondità considerate e valori, per quanto discusso sopra, in accordo quantitativo con i dati sperimentali.

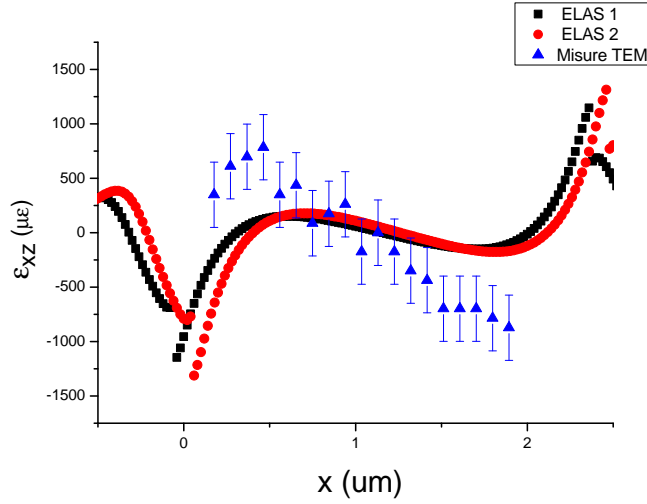


Figura 5.12: Confronto fra  $\epsilon_{xz}$  a  $0.065 \text{ nm}$  di profondità misurati e ottenuti nelle simulazioni utilizzando le costanti elastiche per il Nitruro di Silicio di  $E = 270 \text{ MPa}$  e  $\nu = 0.27$  (ELAS1) e  $E = 250 \text{ GPa}$  e  $\nu = 0.23$  (ELAS2)

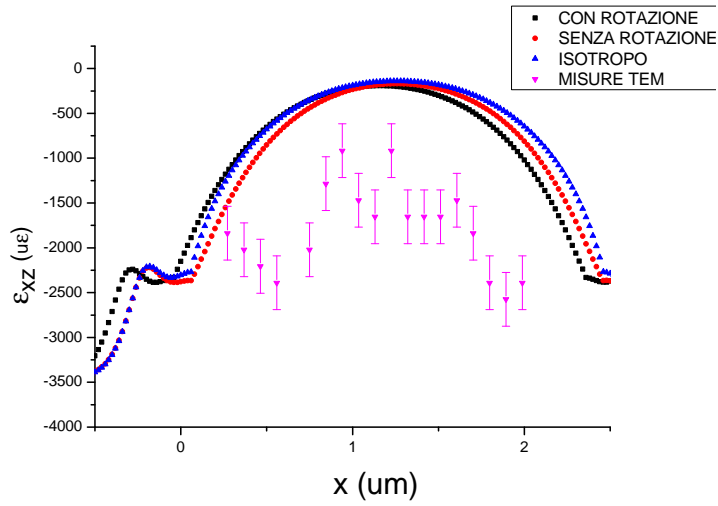


Figura 5.13: Confronto fra  $\epsilon_{zz}$  a  $0.165 \text{ nm}$  di profondità misurati e ottenuti nelle simulazioni utilizzando con Silicio anisotropo con 2 orientazioni e isotropo

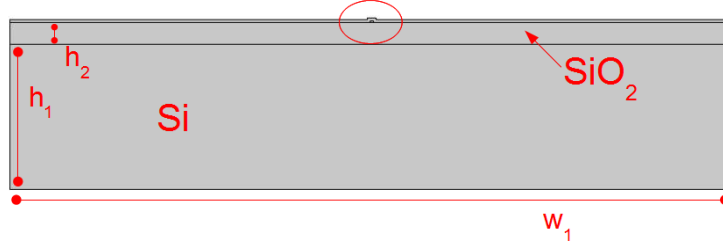


Figura 5.14: Geometria utilizzata per le simulazioni di birifrangenza e dell'indice di rifrazione. Nel cerchio il particolare riportato in figura 5.15

### 5.3 Birifrangenza e indice di rifrazione efficace

In questa sezione si riportano i risultati delle simulazioni di birifrangenza e dell'indice di rifrazione in guide d'onda in silicio su substrato SOI, descritte nel capitolo 2 effettuate con il programma COMSOL Multiphysics 4.3b.

Lo scopo è prevedere in che misura lo stress indotto da uno strato di  $\text{Si}_3\text{N}_4$ , depositato sul core in silicio, sia in grado di modificarne le proprietà elettromagnetiche, delle guide d'onda, in particolar modo alle lunghezze d'onda d'interesse per la Silicon Photonics e le comunicazioni (vicino infrarosso,  $1000 - 1600 \text{ nm}$  circa). La geometria utilizzata viene riportata nelle figure (5.14 - 5.15)

Il core in Silicio ha una forma trapezoidale come per la ridge utilizzata nelle simulazioni della sezione precedente. Ci si aspetta, infatti, che i processi di fabbricazione delle guide portino ad una inclinazione delle pareti paragonabile a quelle ottenuta nei campioni realizzati (capitolo 3). Non sono riprodotti, invece, in questa geometria, i rigonfiamenti in corrispondenza dei vertici del core. Infatti, si ipotizza che, date le dimensioni della struttura in esame, inferiori rispetto a quelle delle ridge utilizzate nelle simulazioni della sezione precedente, le superfici offerte alla deposizione del nitruro non siano sufficientemente ampie per la formazione di questi rigonfiamenti.

Le dimensioni di guida simulate sono:  $w_1 = 100 \mu\text{m}$ ,  $w_2 = 450 \text{ nm}$ ,  $h_1 = 3 \mu\text{m}$ ,  $h_2 = 20 \mu\text{m}$ . Per  $h_4$  sono stati utilizzati 8 valori fra  $50 \text{ nm}$  e  $400 \text{ nm}$ . Per  $\alpha$  i valori sono:  $75^\circ$ ,  $80^\circ$ ,  $85^\circ$ ,  $90^\circ$ . Le dimensioni del core sono quelle tipicamente utilizzate per la fabbricazione di guide d'onda.

La scelta delle dimensioni è legata al numero di modi sostenuti dalla guida (si veda ad esempio [23]). Con le dimensioni utilizzate la guida d'onda esibisce un comportamento monomodale alle lunghezze d'onda d'interesse. Come descritto nella sezione (2.8), l'indice di rifrazione efficace  $n$  è un parametro adimensionale di un modo sostenuto dalla guida. I modi sono distribuzioni di campo elettrico e magnetico utilizzati per descrivere la radiazione in propagazione in guide d'onda. Si può dimostrare, si veda ad esempio [5], che cercando soluzioni nella forma:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \propto e^{i(\omega t - \beta z)} \quad (5.1)$$

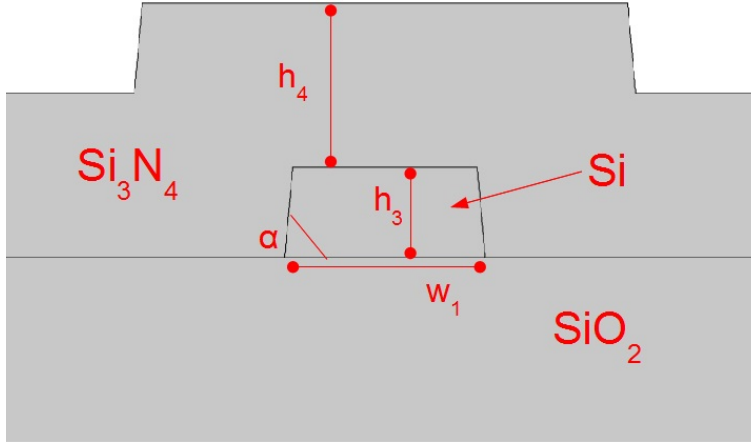


Figura 5.15: Ingrandimento del particolare della figura 5.14

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) \propto e^{i(\omega t - \beta z)} \quad (5.2)$$

con  $z$  la direzione di propagazione e  $\beta$  detta **costante di propagazione**. L'indice di rifrazione efficace  $n_{eff}$  è definito dalla relazione

$$\beta = k_0 \cdot n_{eff} \quad (5.3)$$

con  $k_0 = 2\pi/\lambda_0$  e  $\lambda_0$  la lunghezza d'onda della radiazione. Per la simulazione dello strain si è usato lo stesso modello delle simulazioni della sezione precedente. Per l'ossido di silicio si sono usate le costanti elastiche:  $E = 70 \text{ GPa}$  e  $\nu = 0.17$ . Per il calcolo della birifrangenza si è utilizzato il Plane Strain Model descritto nella sezione 2.7. Per il calcolo dell'indice efficace, si è utilizzato il metodo agli elementi finiti applicato alle equazioni di Maxwell con le condizioni al contorno imposte dalla struttura della guida, per la descrizione dettagliata di questo metodo si veda ad esempio [5] o la discussione nella sezione 2.8.

Nella figura 5.16 è riportato il valore della birifrangenza mediato sulla superficie del core, al variare dell'altezza dello strato di nitruro di silicio  $h_4$  e dell'inclinazione delle pareti  $\alpha$ .

Nella figura 5.16 si nota innanzitutto che la birifrangenza cresce all'aumentare dello spessore del  $\text{Si}_3\text{N}_4$ . Aumentando infatti la quantità di nitruro deposta, cresce anche la deformazione indotta e l'asimmetria del silicio di cui la birifrangenza è un indicatore, come descritto nella sezione 2.3. L'andamento inizia a manifestare una saturazione per  $h$  superiore a  $300 \text{ nm}$ . Questo farebbe supporre che oltre un certo spessore, gli effetti della deposizione di nitruro si assestano.

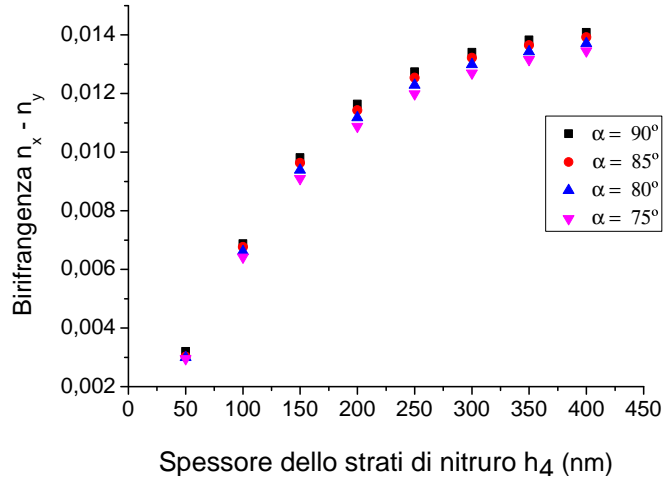


Figura 5.16: Risultati simulativi dei parametri di birifrangenza  $n_x - n_y$  mediata sulla superficie del core, in funzione dello spessore del nitruo di silicio  $h$  e valori di inclinazione delle pareti delle guide  $\alpha$ .

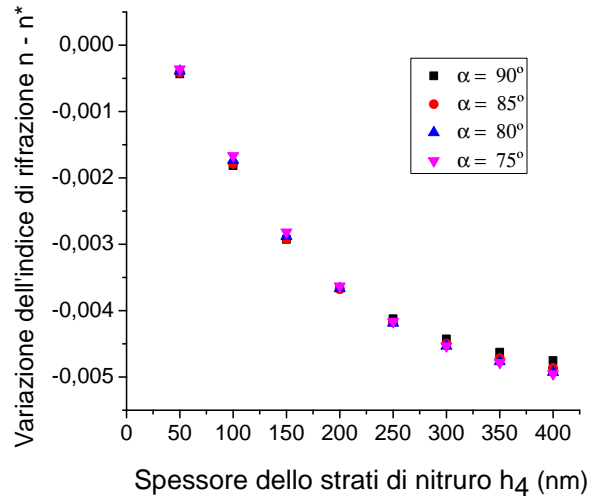


Figura 5.17: Variazione dell'indice di rifrazione efficace ( $\Delta n = n - n^*$ ) tra la guida deformata ( $n^*$ ) e non deformata ( $n$ ) mediata sulla superficie del core, per diversi valori dello spessore del nitruo di silicio  $h$  e di inclinazione delle pareti delle guide  $\alpha$



Ciò è spiegabile considerando che al crescere dello spessore del film, il  $\text{Si}_3\text{N}_4$  deposto in prossimità della superficie del core, che agisce effettivamente sul silicio deformandolo, raggiunge una condizione assimilabile allo stato di bulk in cui non risente degli effetti di una variazione di spessore. Inoltre, quando lo spessore del nitruro raggiunge valori elevati superiori a  $500 \text{ nm}$ , con delle differenze in base alla stechiometria, il campione è estremamente fragile e tende a curvarsi a causa dell'elevato stress intrinseco del film di  $\text{Si}_3\text{N}_4$ . Tale valore limite non viene, quindi, di solito superato nei processi di fabbricazione.

Si nota inoltre che la birifrangenza aumenta leggermente al crescere dell'inclinazione delle pareti. È lecito supporre che all'aumentare dell'inclinazione delle pareti, aumenti anche l'asimmetria della deformazione, poiché lo strato di nitruro agisce in maniera differente ad altezze diverse. Questo effetto risulta più evidente per elevati spessori di nitruro. Non si rilevano invece variazioni notevoli di birifrangenza per differenti valori di  $\alpha$  in corrispondenza di spessori di nitruro piccoli, in quanto gli effetti della deformazione sono più bassi ed una variazione della loro asimmetria in seguito alla modifica delle inclinazione delle pareti, sono trascurabili.

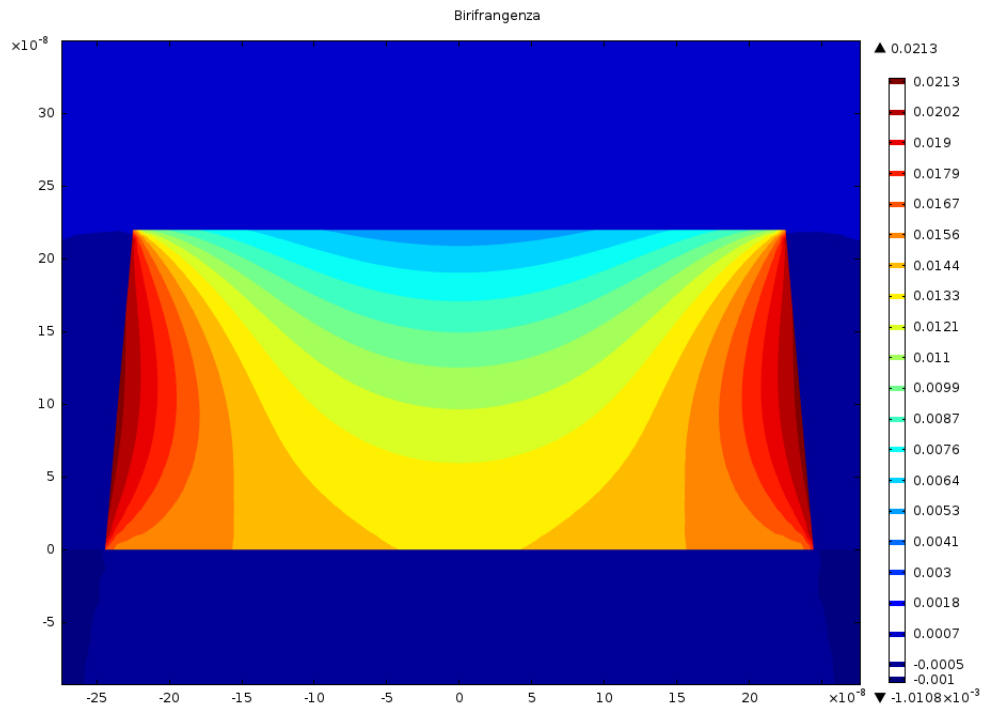
In figura 5.17 è riportato il valore della differenza fra gli indici di rifrazione efficace ( $\Delta n = n - n^*$ ) del modo guidato TE per la guida non deformata (indice efficace  $n$ ) e deformata (indice efficace  $n^*$ ), al variare dell'altezza dello strato di nitruro di silicio  $h_4$  e dell'inclinazione delle pareti  $\alpha$ . Anche per la variazione dell'indice di rifrazione  $\Delta n$  per il modo TE [23], figura (5.17), si nota un aumento dell'effetto al crescere dello spessore del nitruro che inizia ad arrestarsi per spessori superiori a  $300 \text{ nm}$ . Quindi anche l'indice di rifrazione efficace è interessato dal fenomeno di saturazione per larghi spessore di  $\text{Si}_3\text{N}_4$ , analogamente alla birifrangenza.

$\Delta n$  varia inoltre per differenti inclinazioni delle pareti. Questa dipendenza è significativa anche a spessori di nitruro piccoli, già a  $50 \text{ nm}$ . Si può notare come per bassi spessori, la differenza ( $n - n^*$ ) sia leggermente maggiore per angoli maggiori, mentre per spessori grandi questa dipendenza si inverte. Per spessori superiori a  $250 \text{ nm}$ , infatti,  $\Delta n$  è massimo in corrispondenza di  $\theta = 75^\circ$ .

Dall'analisi numerica svolta, i valori mediati sulla superficie del core, della birifrangenza  $n_x - n_y$  e variazione dell'indice di rifrazione efficace del modo guidato TE  $\Delta n$  raggiungono i valori di:  $n_x - n_y = 0.014$  e  $\Delta n = -5 \cdot 10^{-3}$  per lo spessore di  $400 \text{ nm}$ . Si è inoltre notato che queste due grandezze sono estremamente sensibili allo spessore  $h$  e all'inclinazione delle pareti del core delle guide d'onda  $\alpha$ . Per  $\alpha = 90^\circ$ , ad esempio, la birifrangenza passa da  $n_x - n_y \sim 0.007$  per lo spessore  $h = 100 \text{ nm}$  a  $n_x - n_y \sim 0.011$  per  $h = 200 \text{ nm}$ .

In figura qui sotto si riporta la distribuzione della birifrangenza sulla sezione della guida per  $h = 350 \text{ nm}$  e  $\theta = 85^\circ$ . Questi sono i valori dello spessore e dell'inclinazione delle pareti più vicini a quelli di una guida reale. Infatti, come descritto sopra, valori superiori di spessore di nitruro possono creare dei proble-

mi di fragilità alle strutture, mentre l'inclinazione di  $85^\circ$  riproduce l'inclinazione che si ottiene con questi processi di realizzazione.



Si nota innanzitutto che la birifrangenza è positiva su tutta la superficie del core e raggiunge valori assoluti superiori a 0,02. Si nota inoltre che i valori più grandi si raggiungono vicino alle superfici laterali,  $n_x - n_y \sim 0.0213$  e che spostandosi verso il centro, la birifrangenza cala fino a raggiungere valori di  $n_x - n_y \sim 0.0120$  sui  $100 \text{ nm}$  di altezza, rimanendo comunque nello stesso ordine di grandezza. Nei pressi della superficie verticale, invece, i valori della birifrangenza sono più bassi, inferiori a 0.0053, ed aumentano spostandosi verso il centro avvicinandosi verso il centro. Si nota come la birifrangenza abbia una distribuzione simile a quelle delle componenti  $\varepsilon_{xx}$  e  $\varepsilon_{zz}$  ottenute nelle simulazioni riportate nella sezione precedenti. L'ampiezza delle escursioni, paragonabili a quelle utilizzate in materiali birifrangenti tipici della fotonica, lasciano credere che la tecnologia del silicio deformato (strained silicon)

# Conclusioni

In questo lavoro sono state studiate le deformazioni indotte sul reticolo cristallino di silicio dalla deposizione di un film sottile in  $Si_3N_4$  (nitruro di silicio) su strutture micrometriche, nello specifico costituite da ridge microfabbricate in silicio. La deformazione indotta sulle ridge in silicio è stata quantificata mediante simulazioni e misure mediante microscopia TEM. Le misure effettuate indicano che la deformazione reticolare nei pressi dell'interfaccia  $Si/Si_3N_4$  è in grado di rompere la simmetria del cristallo consentendo in tal modo comparsa di effetti ottici ed opto-elettronici assenti nel silicio non deformato, come la birifrangenza e l'effetto Pockels (effetto elettro-ottico).

Specificatamente sono state realizzate delle matrici di linee in silicio di varie larghezze ( $2\ \mu m$ ,  $3\ \mu m$ ,  $5\ \mu m$ ,  $8\ \mu m$ ,  $10\ \mu m$ ) e spaziature ( $3\ \mu m$ ,  $4\ \mu m$ ,  $5\ \mu m$ ,  $6\ \mu m$ ,  $7\ \mu m$ ,  $8\ \mu m$ ). I campioni microfabbricati non hanno manifestato difetti meccanici che avrebbero potuto pregiudicarne la caratterizzazione e la deposizione del  $Si_3N_4$  sulle superfici delle ridge è riuscita senza problemi di adesione, nonostante l'elevato stress intrinseco del film. La qualità della fabbricazione dei dispositivi in esame costituisce un'evidenza importante dell'efficienza della tecnologia già nota nell'industria microelettronica e per la fabbricazione di MEMS (Micro Electro-Mechanical Systems).

Per caratterizzare lo strain è stata impiegata la tecnica Convergent Beam Electron Diffraction (CBED) realizzabile al microscopio ottico in trasmissione (TEM) che permette di ottenere una scansione di strain con una risoluzione spaziale nanometrica ed una sensibilità fino a  $100\ \mu\varepsilon$ . L'utilizzo della CBED per la misura di strain su questo tipo di dispositivi è una tecnica innovativa. Le misure sono state effettuate a  $65\ nm$  e  $165\ nm$  dal bordo inferiore della ridge ottenendo i seguenti risultati: per le componenti di strain  $\varepsilon_{zz}$  con z la direzione ortogonale al piano delle linee, si raggiungono i valori massimi di  $(-2.2 \pm 0.3)\ m\varepsilon$  e  $(-2.4 \pm 0.3)\ m\varepsilon$  alle due profondità in esame. Per le componenti  $\varepsilon_{xz}$  con x la direzione della larghezza della ridge, i valori ottenuti sono compresi fra  $(0.7 \pm 0.3)\ m\varepsilon$  e  $(-0.9 \pm 0.3)\ m\varepsilon$  all'altezza di  $65\ nm$  e di  $(0.7 \pm 0.3)\ m\varepsilon$  e  $(-0.9 \pm 0.3)\ m\varepsilon$  a  $165\ nm$ . Il fatto che deformazioni di quest'ordine di grandezza siano in grado di indurre effetti non-lineari ed elettro-ottici significativi in guide d'onda realizzate su substrato SOI conferma che tale tecnologia possa essere impiegata nella realizzazione di dispositivi elettro-ottici in silicio.

L'efficacia della tecnica CBED per tale tipo di analisi è stata evidenziata rilevando deformazioni e allo stesso tempo sono stati messi in luce i limiti legati all'accuratezza del metodo e ad errori sistematici. In particolare, è stata osservata una sottostima dello strain misurato rispetto al valore atteso dalle simulazioni, per la componente del tensore  $\varepsilon_{zz}$  che presenta elevati valori di strain assoluto. Ciò è sostanzialmente legato al fenomeno di rilassamento dello strain, osservato a causa del piccolo spessore ( $250 \text{ nm}$ ) del campione preparato per l'analisi CBED. Questi errori derivanti dalla metodologia della preparazione del campione sono comunque superabili mediante caratterizzazione sistematica su larghi set di campioni con diverse modalità di preparazione.

È stato quindi effettuato un confronto quantitativo fra lo strain misurato con la tecnica CBED e quello stimato utilizzando un metodo simulativo basato sugli elementi finiti (FEM). Il confronto è stato effettuato per fornire un supporto alle misure di strain con un modello che descrivesse la deformazione reticolare oltre che per verificare l'accuratezza del metodo sviluppato.

Nella verifica il metodo FEM ha mostrato di poter riprodurre gli andamenti delle componenti di strain analizzate in corrispondenza di diverse profondità su tutta la larghezza del campione. Si è inoltre osservato che le discrepanze sono probabilmente riconducibili ai limiti della tecnica CBED. È stato quindi applicato il metodo FEM per simulare le proprietà ottiche in guide fabbricate su SOI utilizzando il modello *Plane Strain Model*. Nello specifico sono state studiate guide d'onda con core  $450 \text{ nm} \times 200 \text{ nm}$  con differenti inclinazioni delle pareti ( $75^\circ$ ,  $80^\circ$ ,  $85^\circ$ ,  $90^\circ$ ) in cui viene indotta deformazione tramite deposizione di nitruro di silicio con spessore  $h$  variabile (da  $50 \text{ nm}$  a  $400 \text{ nm}$ ). Si è messo in evidenza che la birifrangenza e l'indice di rifrazione efficace del modo guidato subiscono variazioni rilevanti rispetto al caso non deformato. Dall'analisi numerica svolta, i valori mediati sulla superficie del core, della birifrangenza  $n_x - n_y$  e variazione dell'indice di rifrazione efficace  $\Delta n$  del modo guidato TE raggiungono i valori di:  $n_x - n_y = 0.014$  e  $\Delta n = -5 \cdot 10^{-3}$  per lo spessore di  $400 \text{ nm}$ . Si è inoltre notato che queste due grandezze sono estremamente sensibili allo spessore  $h$  e all'inclinazione delle pareti del core delle guide d'onda  $\alpha$ . Per  $\alpha = 90^\circ$ , ad esempio, la birifrangenza passa da  $n_x - n_y \sim 0.007$  per lo spessore  $h = 100 \text{ nm}$  a  $n_x - n_y \sim 0.011$  per  $h = 200 \text{ nm}$ .

Questi risultati, originati da stime simulate e misure sperimentali, indicano valori significativi di strain indotto sul reticolo cristallino del silicio e lasciano supporre che un progresso nelle tecniche utilizzate per la realizzazione di questo tipo di dispositivi, possa offrire la possibilità di controllare e modificare gli effetti indotti dalla deformazione. Ciò aprirebbe la strada ad un utilizzo del silicio deformato nella realizzazione di dispositivi ottici ed elettro-ottici in cui questi effetti vengono sfruttati, ad esempio modulatori, filtri e switch (interruttori) ottici.

# Bibliografia

- [1] A Armigliato et al. «Application of convergent beam electron diffraction to two-dimensional strain mapping in silicon devices». In: *Applied physics letters* 82.13 (2003), pp. 2172–2174.
- [2] A Armigliato et al. «Strain characterisation of shallow trench isolation structures on a nanometer scale by convergent beam electron diffraction». In: *Materials Science in Semiconductor Processing* 4.1 (2001), pp. 97–99.
- [3] N.W. Ashcroft e N.D. Mermin. *Solid state physics*. Science: Physics. Saunders College, 1976. ISBN: 9780030839931.
- [4] R. Baldacci. *Scienza delle costruzioni: Fondamenti di meccanica dei solidi*. v. 1. Unione Tipografico-Editrice Torinese, 1970.
- [5] P. Bassi, G. Bellanca e G. Tartarini. *Propagazione ottica libera e guidata*. Manuali e antologie. CLUEB, 1999.
- [6] K.J. Bathe. *Finite Element Procedures*. Prentice Hall, 2006. ISBN: 9780979004902.
- [7] Alan F Benner et al. «Exploitation of optical interconnects in future server architectures». In: *IBM Journal of Research and Development* 49.4.5 (2005), pp. 755–775.
- [8] David K Biegelsen. «Photoelastic tensor of silicon and the volume dependence of the average gap». In: *Physical Review Letters* 32.21 (1974), p. 1196.
- [9] L\_ T Canham. «Silicon quantum wire array fabrication by electrochemical and chemical dissolution of wafers». In: *Applied Physics Letters* 57 (1990), p. 1046.
- [10] M Cazzanelli et al. «Second-harmonic generation in silicon waveguides strained by silicon nitride». In: *Nature Materials* 11.2 (2011), pp. 148–154.
- [11] Bartos Chmielak et al. «Pockels effect based fully integrated, strained silicon electro-optic modulator». In: *Optics Express* 19.18 (2011), pp. 17212–17219.
- [12] N.A.C. Cressie. *Statistics for spatial data*. Wiley series in probability and mathematical statistics: Applied probability and statistics. J. Wiley, 1993. ISBN: 9780471002550.

- 
- [13] SHAOQI Feng et al. «Silicon photonics: from a microresonator perspective». In: *Laser & Photonics Reviews* 6.2 (2012), pp. 145–177.
- [14] M. Gad-el-Hak. *MEMS: Design and Fabrication*. Mechanical and Aerospace Engineering Series. Taylor & Francis, 2010. ISBN: 9781420036565.
- [15] C. Giacovazzo. *Fundamentals of Crystallography*. IUCr texts on crystallography. Oxford University Press, 2002. ISBN: 9780198509585.
- [16] Marius Grundmann. *The physics of semiconductors: an introduction including devices and nanophysics*. Springer, 2006.
- [17] Matthew A Hopcroft, William D Nix e Thomas W Kenny. «What is the Young’s Modulus of Silicon?» In: *Microelectromechanical Systems, Journal of* 19.2 (2010), pp. 229–238.
- [18] M Huang. «Stress effects on the performance of optical waveguides». In: *International Journal of Solids and Structures* 40.7 (2003), pp. 1615–1632.
- [19] Rune S Jacobsen et al. «Strained silicon as a new electro-optic material». In: *Nature* 441.7090 (2006), pp. 199–202.
- [20] J. Laconte, D. Flandre e J.P. Raskin. *Micromachined Thin-Film Sensors for SOI-CMOS Co-Integration*. Springer.
- [21] L.D. Landau, E.M. Lifshitz e Kosevitch. *Theory of Elasticity*. Course of theoretical physics. Butterworth-Heinemann, 1986.
- [22] J Leuthold, C Koos e W Freude. «Nonlinear silicon photonics». In: *Nature Photonics* 4.8 (2010), pp. 535–544.
- [23] G. Lifante. *Integrated Photonics: Fundamentals*. Wiley, 2003.
- [24] D.J. Lockwood e L. Pavesi. *Silicon Photonics II: Components and Integration*. Silicon Photonics. Springer, 2010. ISBN: 9783642105067.
- [25] A.S. Nowick. *Crystal Properties Via Group Theory*. Cambridge University Press, 2005. ISBN: 9780521022316.
- [26] KAZUNOBU Ota et al. «Novel locally strained channel technique for high performance 55nm CMOS». In: *Electron Devices Meeting, 2002. IEDM’02. International*. IEEE. 2002, pp. 27–30.
- [27] P Pintus, Ming-Chun Tien e John E Bowers. «Design of magneto-optical ring isolator on SOI based on the finite-element method». In: *Photonics Technology Letters, IEEE* 23.22 (2011), pp. 1670–1672.
- [28] B.E.A. Saleh e M.C. Teich. *Fundamentals of Photonics*. Wiley Series in Pure and Applied Optics. Wiley, 2013. ISBN: 9781118585818.
- [29] Vincent Senez et al. «Strain determination in silicon microstructures by combined convergent beam electron diffraction, process simulation, and micro-Raman spectroscopy». In: *Journal of applied physics* 94.9 (2003), pp. 5574–5583.
- [30] Charles S Smith. «Piezoresistance effect in germanium and silicon». In: *Physical review* 94.1 (1954), p. 42.

- [31] Y Sun, SE Thompson e T Nishida. «Physics of strain effects in semiconductors and metal-oxide-semiconductor field-effect transistors». In: *Journal of Applied Physics* 101.10 (2007), pp. 104503–104503.
- [32] P Temple-Boyer et al. «Residual stress in low pressure chemical vapor deposition SiN films deposited from silane and ammonia». In: *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films* 16 (1998), p. 2003.
- [33] Scott Thompson et al. «A 90 nm logic technology featuring 50 nm strained silicon channel transistors, 7 layers of Cu interconnects, low k ILD, and 1  $\mu^2$  SRAMcell». In: *Electron Devices Meeting, 2002. IEDM'02. International*. IEEE. 2002, pp. 61–64.
- [34] Ming-Chun Tien et al. *Silicon ring isolators with bonded nonreciprocal magneto-optic garnets*. 2011.
- [35] S. Wolf e R.N. Tauber. *Silicon Processing for the Vlsi Era: Process Technology*. Silicon Processing for the VLSI Era. Lattice Press, 2000. ISBN: 9780961672164.
- [36] JJ Wortman e RA Evans. «Young's modulus, shear modulus, and Poisson's ratio in silicon and germanium». In: *Journal of Applied Physics* 36 (1965), p. 153.
- [37] D-X Xu et al. «Eliminating the birefringence in silicon-on-insulator ridge waveguides by use of cladding stress». In: *Optics letters* 29.20 (2004), pp. 2384–2386.
- [38] J. Xu e R. Stroud. *Acousto-optic devices: principles, design, and applications*. Wiley series in pure and applied optics. Wiley, 1992. ISBN: 9780471616382.
- [39] B F Yang et al. «Recent progress and challenges in enabling embedded Si: C technology». In: *ECS Transactions* 16.10 (2008), pp. 317–323.
- [40] Bin Frank Yang e Ming Cai. «Advanced strain engineering for state-of-the-art nanoscale CMOS technology». In: *Science China Information Sciences* 54.5 (2011), pp. 946–958.