UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS Instituto de Física Gleb Wataghin

Contraste na Microscopia Fototérmica de dispositivos semicondutores através da variação do comprimento de onda

LAURA RAMOS DE FREITAS

Tese apresentada ao Instituto de Física 'Gleb Wataghin', Universidade Estadual de Campinas, para obtenção do grau de Doutor em Física.

Orientador: Prof. Dr. Antonio Manoel Mansanares

Campinas Dezembro de 2005

iii

Eu devia estar contente Porque eu tenho um emprego Sou o dito cidadão respeitável E ganho 4000 cruzeiros por mês Eu devia estar sorrindo e orgulhoso Por ter finalmente vencido na vida Mas eu acho isso uma grande piada E um tanto quanto perigosa Eu devia estar contente Por ter conseguido tudo que eu quis Mas confesso abestalhado Que eu estou decepcionado Porque foi tão fácil conseguir Agora eu me pergunto: e daí? Eu tenho uma porção de coisas grandes pra conquistar E eu não posso ficar aí parado Ah, mas que sujeito chato sou eu Que não acha nada engraçado Macaco, praia, carro, jornal, tobogã Eu acho tudo isso um saco É você se olhar no espelho Se sentir um gradissísimo idiota Saber que é humano, rídiculo, limitado Que só usa 10% de sua cabeça animal Ou aceita, acredita Que é um doutor, padre ou policial Que está contribuindo com sua parte Para nosso belo quadro social Eu é que não me sento Num trono de um apartamento Com a boca escancarada cheia de dentes Esperando a morte chegar Porque longe das cercas enbandeiradas Que separam quintais No cume calmo do meu olho que vê Assenta a sombra sonora de um disco voador

Raul Seixas

Dedico este trabalho ao Luciano pelo amor, atenção e carinho.

Agradecimentos

Não foi tão fácil conseguir este título de doutora, mas graças ao apoio fundamental de certas pessoas em determinados momentos foi possível finalizar este trabalho com satisfação. Gostaria de usar este espaço pra tentar expressar minha gratidão por elas.

- Agradeço ao Antonio pela valiosa orientação;
- À Profa. Dra. Danièle Fournier por me acolher tão bem em seu laboratório e pelo inestimável aprendizado;
- Ao Gilles Tessier pelas discussões que enriqueceram tanto meu trabalho;
- Ao Marcos Pinentel, ao Saulo Finco, ao Carlos Roberto Mendes de Oliveira e, em especial, ao Wellington Mello pelo apoio na preparação e fornecimento das amostras do CenPRA;
- Ao Adeilton Oliveira e o Prof. Dr. Ioshi Dói pelo fornecimento de amostras do CCS;
- Ao pessoal do laboratório em Paris: Guillaume, Fred, Laurent, Michael e Florian pela acolhida e amizade e também à Nathalie;
- Ao pessoal do laboratório do CenPRA: André, Fábio, Pedro, Paola, Felix, Telles e Bata pelo apoio;
- Ao pessoal do laboratório do GFRM: Marcos Lázaro, Cassiano, André, Max, Rickson, Manoel, Marson e Wagner, pela convivência agradável, em especial à Dinah e ao Prof. Edson pelo apoio constante;
- Ao pessoal da Biblioteca pelo atendimento atencioso, em especial à Rita e à Dina;
- Às secretárias do DEQ pela simpatia;
- Ao pessoal da secretaria de pós graduação pela paciência;
- Ao Newton Frateschi e ao pessoal do LPD, Lisandra, Totó, Adenir e Márcia, pela experiência enriquecedora;
- Aos grandes amigos Físicos: Pila, Roma, Marta, Cínthia, Françoise, Cibelle, Daniela, Ana Luiza e Marcelo pelo exemplo e pela força;

- À Rejane por ser minha irmã de alma, mesmo sem ser irmã de sangue. Por mais que entenda de física nunca poderei explicar essa comunicação sem palavras que existe entre nós;
- À tia Solange por me adotar em Paris; A Tito, Bela e Isa pelo calor baiano durante o inverno francês; À Arnaud e Sandy por me mostrarem a cidade, o mundo deles;
- Aos amigos da Cité U: Fábio, Leonor, Fábio Fialho, Ricardo, Jeanine, Sandra e Diane, que se tornou uma grande amiga também em Campinas;
- À todos os meus amigos que me apoiaram de longe;
- Ao meu irmão João, que apesar das diferenças, sempre ficou ao meu lado. E à minha prima-irmã Andréa, que batalhou pra ganhar meu respeito, pois meu amor sempre teve. Você conseguiu, Déa!
- Aos meus pais, Célia e Cunha, pelo oportunidade de ser filha de pessoas tão interessantes, às vezes fica até difícil escolher entre tantas opções, vocês me ensinaram muito sobre tudo, mas acho que o aprendizado principal foi não se contentar com pouco. Fiquem tranquilos, vou continuar tentando aprender a ser cada vez mais feliz;
- Ao Luciano nem sei como agradecer, você foi demais superou todas as minhas expectativas. Você realmente me complementa;
- À Fapesp pelo apoio financeiro.

Resumo

A Microscopia Fototérmica de Reflexão vem sendo utilizada na investigação de dispositivos micro e opto-eletrônicos em operação, devido ao seu caráter não destrutivo e por não requerer contato com a superfície da amostra. Esta técnica se baseia na dependência da refletância da amostra com a temperatura, com o campo elétrico local, bem como com a densidade de portadores livres, que são, por sua vez, afetados por defeitos. Este fato torna esta técnica muito adequada para investigar defeitos em processos de fabricação e envelhecimento destas estruturas. Neste trabalho, apresentamos um estudo experimental e teórico sobre a resposta fototérmica em função do comprimento de onda do feixe de prova, para estruturas micro-eletrônicas estratificadas. As amostras consistiram basicamente de trilhas condutoras de silício policristalino de diversos chips. As medidas de termorefletância foram realizadas na faixa de comprimento de onda de 450nm até 750nm, sendo que as trilhas foram alimentadas sempre com corrente modulada, com três montagens experimentais diferentes. Um padrão oscilatório é observado na região espectral em que a camada superior é transparente. Essas oscilações são causadas pelas múltiplas reflexões nas interfaces. Utilizando um modelo termo-óptico, mostramos que as constantes (n e k), que dependem do comprimento de onda, assim como suas derivadas com relação à temperatura (dn/dT e dk/dT), influenciam fortemente o sinal de termo-refletância. A espessura óptica das camadas, principalmente determinadas pela parte real dos índices de refração, define o período de oscilação. Por outro lado, a parte imaginária estabelece o comprimento de onda em que as oscilações começam. Abaixo de um certo comprimento de onda, a luz de prova não penetra no material e a refletância da camada superficial domina o sinal.

Abstract

Photothermal microscopy has been used as a suitable technique for the investigation of micro- and opto-electronic devices in operating cycle, because of its non-contact and non-destructive character. This technique is based on the dependence of the sample reflectance with temperature and with local electric field, as well as with free carrier density, which are in their turn disturbed by defects. This fact makes this technique very useful for investigating defects in fabrication and aging processes of such structures. In the present work, we report an experimental and theoretical study of the thermoreflectance response as a function of the probe wavelength for layered microelectronics structures. The investigated samples consisted of polycrystalline silicon conducting tracks from various chips. Thermoreflectance measurements were carried out in the wavelength range from 450 to 750 nm with the tracks biased in modulated regime, with three different experimental setups. An oscillating pattern is observed in the spectral region where the upper layer is transparent. Such oscillations are due to the interference resulting from the multiple reflections at the interfaces. Using a thermo-optical model, we show that the optical constants (n and k) of the materials, which are wavelength dependents, as well as their temperature derivatives (dn/dT and dk/dT), strongly influence the thermoreflectance signal. The optical thicknesses of the layers, mainly determined by the real part of the refractive indexes, define the period of oscillation. On the other hand, the imaginary part of the refractive indexes establishes the cutoff wavelength of the oscillations. Below this cutoff wavelength, the probe light does not penetrate the material, and the upper surface reflectance dominates the signal.

xiv

Conteúdo

Ε	pígra	fe		iv			
D	Dedicatória vii						
A	Agradecimentos ix						
R	Resumo xi						
A	bstra	ct		xiii			
1	Intr	oduçã	o à caracterização fototérmica de semicondutores	1			
	1.1	Introd	ução	1			
	1.2	Teoria	da Refletância Modulada	3			
	1.3	Equaç	ões de difusão do Calor e de Portadores	6			
	1.4	Geraçã	ão e Recombinação de Portadores	7			
		1.4.1	Recombinação Indireta	9			
		1.4.2	Recombinação Direta	14			
		1.4.3	Recombinação Auger	15			
	1.5	Soluçõ	es das Equações de Difusão	18			
		1.5.1	Solução da equação de difusão de portadores em uma dimensão, para um meio homogêneo sem fontes	18			
		1.5.2	Solução da equação de difusão de portadores em três dimensões, com simetria azimutal (feixe gaussiano), para um meio homogêneo				
			sem fontes	20			
		1.5.3	Solução da equação de difusão de calor para um meio homogêneo,				
			com absorção superficial, em uma dimensão	23			
		1.5.4	Solução da equação de difusão do calor para um meio homogêneo, com absorção superficial, fonte gaussiana (simetria azimutal), em				
			três dimensões.	24			

	1.6 Caracterização de Semicondutores utilizando a Microscopia Foto		terização de Semicondutores utilizando a Microscopia Fototérmica de		
		Reflex	ão	27	
2	Mat	teriais	e Métodos	37	
	2.1	Descri	ção das amostras	37	
		2.1.1	Chips Fototérmica	37	
		2.1.2	Chip CCS	50	
	2.2 Descrição das Montagens Experimentais de Microscopia Fototérmi				
	Reflexão			ão	53
		2.2.1	Montagem com laser	53	
		2.2.2	Montagem com CCD 1	55	
		2.2.3	Amplificador síncrono (lock-in) digital	57	
		2.2.4	Montagem com CCD 2	59	
		2.2.5	Princípio da heterodinagem	61	
3	Apresentação e Discussão dos Resultados Experimentais 6				
	3.1 Result		ados Experimentais	63	
		3.1.1	Resultados obtidos nos Chips Fototérmica	63	
		3.1.2	Resultados obtidos no chip CCS	69	
	3.2 Modelo Teórico		74		
4	Con	ıclusõe	es e perspectivas	85	
A	Tra	nsform	ada de Hankel	87	
Bi	bliog	grafia		90	

Lista de Figuras

1.1	Esquema de geração e recombinação de portadores em um semicondutor .	4
1.2	Semicondutor em equilíbrio térmico	8
1.3	Processos de recombinação indireta no volume	9
1.4	Processos de recombinação indireta na superfície	12
1.5	Esquema da amostra de silício com interface de cobre $\ .\ .\ .\ .\ .\ .$	13
1.6	Sinal fototérmico em amostra de silício com interface de cobre $\ .\ .\ .\ .$	14
1.7	Esquema de recombinação radiativa.	15
1.8	Esquema de recombinação Auger	16
1.9	Sinal fototérmico em função da freqüência	17
1.10	Amplitude e fase da densidade de portadores para Si $\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots$	22
1.11	Amplitude e fase da distribuição de temperatura para Si $\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots$	26
1.12	Amplitude e fase de $\Delta R/R$ para Si $\ldots \ldots \ldots$	28
1.13	Medida em laser de InGaAs P/InP	30
1.14	Micrografia de transistor MOSFET	31
1.15	Mapas de $\Delta R/R$ em transistor MOSFET	31
1.16	Mapas de $\Delta R/R$ em transistor MOSFET	32
1.17	dR/dT em função do comprimento de onda $\hfill \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	33
2.1	Layout do chip Fototérmica 1	39
2.2	Layout de uma trilha de Poli-Si	40
2.3	Layout de trilhas de Poli-Si	40
2.4	Layout de trilha de Poli-Si variando a largura	41
2.5	Layout de trilha de Poli-Si com orifícios	42
2.6	Layout de trilha de Poli-Si em forma de cotovelo	42
2.7	Layout de trilhas de Poli-Si com dissipador térmico	43
2.8	Layout de diodos	44
2.9	Layout de transistores	44
2.10	Layout de inversores	45
2.11	Layout do chip Fototérmica 2	46
2.12	Layout de transistores pmos e nmos	47

2.13	Layout de uma trilha de Poli-Si	48
2.14	Layout dos diodos pn e np	48
2.15	Layout do chip Fototérmica 3	49
2.16	Micrografia do chip CCS	51
2.17	Perfil de resistor fabricado no CCS	51
2.18	Simulação da distribuição de temperatura em resistor de poli-Si	52
2.19	Esquema da montagem experimental da Microscopia Fototérmica de Re-	
	flexão	54
2.20	Esquema da montagem experimental de termo-refletância multiplexada	
	com luz branca e filtro	56
2.21	Princípio de funcionamento do amplificador síncrono digital	58
2.22	Esquema da montagem experimental de termo-refletância multiplexada	
	com LED	59
21	Regultado experimental para registância de policijício em 622.8pm	64
ง.1 วา	Resultado experimental para resistência de policifício em 622.8mm	65
ວ.⊿ ຊີຊ	A B / B para duas resistências de polissilície em função de comprimente de	00
ა.ა	$\Delta n/n$ para duas resistencias de ponssincio em função do comprimento de	66
3 /	Begultado experimental para registência de polissilício em 488nm	67
3.4 3.5	Resultado experimental para resistência de polissilício em 562nm	67
3.6	Corta transversal das trilhas de silício poli cristalino dos chips fototérmica	68
3.0	Espectro de reflevão do resistor CCS	60
3.8	Espectro de reflexão do substrato do chin CCS	70
3.9	Besultado experimental para resistência de polissilício em 650nm	71
3 10	AB/B para resistor de poli-Si em função do comprimento de onda	72
3 11	Comparação entre $dR/d\lambda \in \Delta R/R$ para resistor de poli-Si	73
3.12	$\Delta B/B$ para duas montagens em função do comprimento de onda	74
3 13	Besultado experimental de efeito Peltier	75
3 14	Esquema de modelo teórico	75
3 15	Dados de entrada do programa de simulação	77
3.16	Comparação entre a refletância medida e calculada para SiO_2 sobre Si	78
3.17	Comparação entre a refletância medida e calculada para trilha do chip CCS	80
3.18	Comparação entre $\Delta R/R$ e $(1/R)\partial R/\partial \lambda$ para trilha do chip CCS	81
3.19	Comparação entre $\Delta R/R$ e $(1/R)\partial R/\partial T$ para trilha do chip CCS	83
3.20	Comparação entre $(1/R)\partial R/\partial \lambda$ e $(1/R)\partial R/\partial T$ calculados para trilha do	
·	chip CCS	84

LISTA DE FIGURAS

Capítulo 1

Introdução à caracterização fototérmica de semicondutores

1.1 Introdução

Está previsto para o próximo ano a produção em massa de um microprocessador com 1,72 bilhões de dispositivos em $500mm^2$, sendo que as menores estruturas terão largura de 65nm. Atualmente este limite é 90nm. Um dipositivo ocupará então uma área média de $0, 29\mu m^2$. A miniaturização constante destes dispositivos gera questionamentos não só tecnológicos, mas também sobre problemas fundamentais, dentre os quais pode-se destacar o transporte do calor em estruturas com tamanho da ordem do livre caminho médio dos elétrons de Drude. Sendo assim é de vital importância para o esclarecimento destes pontos conhecer a temperatura nestes dispositivos. Além disso, a maioria dos defeitos está relacionada ao superaquecimento de algumas regiões do dispositivos, o que torna a medida da temperatura de grande interesse para o aprimoramento destes.

Existem várias técnicas utilizadas na caracterização de processos de fabricação e dos dispositivos semicondutores propriamente ditos. A maioria delas, no entanto, necessita de preparação, é destrutiva ou muito lenta para se tornar prática. Dentre as técnicas não destrutivas, as mais utilizadas são: a fotoluminescência [1] e o espalhamento Raman [2, 3]. Na fotoluminescência (PL), mede-se a luz emitida por um semicondutor de gap direto (o que exclui o silício) após este ter sido excitado com fótons de energia superior ao gap. Para obter uma medida da temperatura, é necessário fazer uma calibração para cada amostra. Ela não pode ser aplicada a metais (contatos) e o laser de excitação pode causar uma perturbação, mas permite atingir resolução espacial submicrométrica. Já no espalhamento Raman, mede-se os fônons criados (Stokes) e absorvidos (anti-Stokes) pela absorção de luz laser. Esta técnica possibilita uma medida absoluta da temperatura, o que

dificulta o mapeamento de regiões da amostra.

As técnicas fototérmicas também apresentam como vantagem o fato da amostra ser excitada por luz, o que não requer contato, limitando os danos aos causados por uma intensidade luminosa porventura muito grande, e possibilita, no caso de semicondutores, a medida simultânea de propriedades térmicas e eletrônicas. Algumas delas já foram utilizadas para caracterizar semicondutores: a fotoacústica [4, 5], em que se mede as variações de pressão geradas na câmara pela dilatação da camada que absorveu luz; a deflexão fototérmica [6], em que se mede as propriedades da amostra através da deflexão de um feixe de prova; a radiometria infravermelha [7], em que se mede a radiação de corpo negro emitida pelo material; e a reflexão fototérmica modulada [8], em que se mede a reflexão de um feixe de prova para obter as propriedades da amostra.

A Microscopia Fototérmica de Reflexão (MFR) [9] consiste em medir as variações na refletância da amostra causadas pela produção de portadores e de calor, devido à absorção de luz laser modulada, com uma resolução espacial sub-micrométrica (limitada pela difração da luz). Há maneiras de contornar este limite e visualizar partículas namométricas, por exemplo, introduzindo um prisma Wollaston para dividir o feixe de prova e recombinando o feixe através do padrão de interferência pode-se aumentar a resolução espacial da técnica [10]. Contudo neste trabalho utilizamos a técnica tradicional que tem o mesmo princípio da reflexão fototérmica modulada, mas um microscópio óptico é utilizado para focalizar o laser sobre a amostra. Este fato permite o estudo de falhas e defeitos de dispositivos em operação, e neste caso a própria corrente elétrica atua como fonte de calor e portadores.

Esta técnica ganha importância diante da miniaturização constante dos circuitos integrados, já que o escoamento de calor nestas estruturas é fundamental no desenvolvimento e confiabilidade dos dispositivos.

Existe uma outra família de técnicas com capacidades similares à Microscopia Fototérmica de Reflexão. Elas utilizam um microscópio de força atômica equipado com um sensor térmico (termopar [11, 12] ou termistor [13, 14]), para mapear a temperatura da amostra ou obter suas propriedades térmicas. Apesar de apresentarem resolução espacial melhor que a MFR, os mecanismos de transferência de calor entre a ponta do AFM e a amostra ainda não são bem compreendidos.

O objetivo deste trabalho é demonstrar a utilidade da Microscopia Fototérmica de Reflexão na caracterização de dispositivos semicondutores. Como veremos adiante, o coeficiente de reflexão, bem como sua derivada com relação à temperatura e à densidade de portadores, depende não só do material, mas também do comprimento de onda do feixe de prova. Variando o comprimento de onda, pode-se aumentar significativamente a sensibilidade do experimento. Além disso, os chips são, em geral, protegidos por uma camada transparente de passivação que causa interfência óptica, observando-se então máximos e mínimos na resposta fototérmica [15]. Foram utilizadas duas variações da técnica: a convencional, que utiliza um feixe laser (no GFRM-Unicamp) e outra mais recente, que utiliza LED's ou luz branca filtrada para iluminar uma região da amostra e uma câmera CCD como sensor (no Laboratoire d'Optique Physique-ESPCI).

Nas próximas seções, vamos descrever a teoria da refletância modulada em semicondutores, que é a base para a compreensão dos fenômenos envolvidos.

No capítulo 2, serão descritas as amostras e montagens experimentais utilizadas. No capítulo 3, apresentamos os resultados experimentais obtidos e um modelo teórico para descrevê-los. Por fim, o capítulo 4 traz as conclusões e perspectivas deste trabalho.

1.2 Teoria da Refletância Modulada

Num semicondutor, a absorção de luz com energia h ν acima do gap ocorre com transformação de cada fóton absorvido (considerando eficiência quântica igual a um) num par elétron-buraco. Tanto o elétron como o buraco relaxam rapidamente (tempo da ordem de ps em Si) para o fundo da banda de condução ou valência, respectivamente, liberando energia térmica. No caso da luz incidente ser modulada, esta liberação de energia será modulada na mesma freqüência, gerando uma onda térmica no material. O par elétronburaco se difunde na amostra até se recombinar (tempo da ordem de μ s para Si), mas antes desta recombinação ocorrer, foi gerada uma onda de plasma no material (Figura 1.1). Como o tempo de vida dos portadores é da mesma ordem das freqüências de modulação (MHz), pode-se medir as alterações causadas na refletância superficial da amostra pelas ondas térmicas e de plasma através da reflexão de um feixe de prova.

O fato é que, ao absorver luz laser modulada, ocorrem vários efeitos num semicondutor que afetam a refletância superficial da amostra. São estes: efeitos térmicos devido à recombinação dos portadores, efeito devido ao portador livre de Drude e eletrorefletância, já que os portadores fotogerados alteram o campo elétrico superficial.

O coeficiente de reflexão tem a seguinte forma para incidência normal:

$$R = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \tag{1.1}$$

onde n e k são as partes real e imaginária do índice de refração.

A contribuição térmica na variação da refletância tem a seguinte forma:



Figura 1.1: Esquema da geração, difusão e recombinação de portadores em um semicondutor. E_C é a energia de fundo da banda de condução, E_V da banda de valência e $h\nu$ a energia do fóton.

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{1}{R} \frac{dR}{dT} \Delta T \tag{1.2}$$

onde o coeficiente dR/dT depende do comprimento de onda da luz incidente (feixe de prova) e do material, enquanto ΔT é a variação da temperatura na superfície.

Derivando a equação 1.1 em relação à temperatura e aplicando uma pequena perturbação do tipo:

$$\Delta n + i\Delta k = \Delta T (dn/dT + idk/dT) \tag{1.3}$$

encontra-se a contribuição térmica para a refletância modulada:

$$\frac{\Delta R}{R} = \operatorname{Re}\left[\frac{4\Delta T}{(n+ik-1)(n+ik+1)}(dn/dT+idk/dT)\right]$$
(1.4)

onde os coeficientes dn/dT e dk/dT dependem do comprimento de onda e do material. A contribuição dos portadores tem a seguinte forma:

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{1}{R} \frac{dR}{dN} \Delta N \tag{1.5}$$

onde ΔN é a variação da densidade de portadores na superfície.

De maneira análoga, encontra-se a contribuição eletrônica para a refletância modulada:

$$\frac{\Delta R}{R} = \operatorname{Re}\left[\frac{4\Delta N}{(n+ik-1)(n+ik+1)}(dn/dN+idk/dN)\right]$$
(1.6)

onde os coeficientes dn/dN e dk/dN podem ser calculados através do modelo do elétron livre de Drude.

Neste modelo, os elétrons são considerados osciladores harmônicos, isto é, partículas presas a uma posição de equilíbrio por uma força restauradora e amortecidos por uma força proporcional à velocidade. No caso de elétrons livres, a força restauradora é nula. Desta maneira, encontramos:

$$\hat{K} - 1 = \frac{Ne^2/m\varepsilon_0}{-\omega^2 - i\gamma\omega}$$
(1.7)

onde K é a constante dielétrica do material, e é a carga do elétron, m sua massa e γ o inverso do tempo entre colisões.

Derivando esta expressão e separando a parte real da imaginária, obtém-se:

$$\frac{dn}{dN} = \frac{-\lambda^2 e^2}{2\pi nmc^2}$$

$$\frac{dk}{dN} = \frac{-k}{n} \frac{dn}{dN}$$
(1.8)

Substituindo estes valores na refletância (equação 1.6) e supondo que $k \ll n$ (o que é válido para a maioria dos semicondutores no visível), encontra-se a contribuição dos portadores:

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{-2\lambda^2 e^2 \Delta N}{\pi n (n^2 - 1)mc^2} \tag{1.9}$$

Note-se que esta contribuição é negativa.

Há ainda uma terceira contribuição devido à não-uniformidade espacial do índice de refração, que também pode ser obtida de maneira análoga:

$$\frac{\Delta R}{R} = \operatorname{Re}\left[\frac{4\langle N\rangle}{(n+ik-1)(n+ik+1)}(dn/dN+idk/dN)\right]$$
(1.10)

Pode-se calcular a média da densidade de portadores da seguinte maneira:

$$\langle N \rangle = -2iK \int dx N(x) \exp(2iKx)$$
 (1.11)

onde K é agora o vetor da onda eletromagnética: $K = (2\pi/\lambda)(n+ik)$.

Substituindo (1.8) e supondo que N(x) vai a zero além de $x = \delta$:

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{16\lambda n k e^2 N_1 \delta}{(n^2 - 1)mc^2} \tag{1.12}$$

onde N_1 é a média não ponderada de N(x).

Verifica-se que esta contribuição é positiva, ao contrário da dos portadores, apresentando também como diferença o fato de ser diretamente proporcional a k, a parte imaginária do índice de refração.

Utilizando os dados da tabela 1.1 para fazer uma comparação entre os dois termos, encontramos valores de $\Delta R/R$ da ordem de 1×10^{-4} . No entanto, a densidade utilizada para a contribuição de portadores foi de $1 \times 10^{18} cm^{-3}$, enquanto que para a contribuição devido à não-uniformidade do campo esta é de $1 \times 10^{20} cm^{-3}$, o que pode ocorrer se houver uma densidade alta $(1 \times 10^{14} cm^{-2})$ de armadilhas na superfície.

Conclui-se então que o termo devido à não-uniformidade do campo só será significa-

$e = 4,8 \times 10^{-10} esu$	n = 3, 9
$c = 3 \times 10^{10} m/s$	k = 0,025
$m = 1,36 \times 10^{-28}g$	$\delta = 1 \times 10^{-6} cm$
$\lambda = 6,33 \times 10^{-5} cm$	$N_1 = 1 \times 10^{20} cm^{-3}$
$\Delta N = 1 \times 10^{18} cm^{-3}$	$Arm = 1 \times 10^{14} cm^{-2}$

Tabela 1.1: Valores utilizados para calcular as contribuições eletrônicas de $\Delta R/R$. Dados retirados de [16]

tivo se k for grande ou se houver muitos defeitos superficiais.

A variação total da refletância em semicondutores é dada por (desconsiderando o efeito devido à não-uniformidade no índice de refração):

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial T} \Delta T + \frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial N} \Delta N \tag{1.13}$$

onde os coeficientes $\frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial T}$ e $\frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial N}$ dependem do comprimento de onda e do material.

Para silício em 670nm, temos:

$$\frac{1}{R}\frac{\partial R}{\partial T} = 1,5 \times 10^{-4} K^{-1}$$
$$\frac{1}{R}\frac{\partial R}{\partial N} = -1,0 \times 10^{-22} cm^{-3}$$

Ou seja, para $\Delta N = 1 \times 10^{18} cm^{-3}$ e uma variação de temperatura da ordem de 1K, os dois coeficientes têm a mesma ordem de grandeza. Nos resta calcular Δ T e Δ N, e para isto utilizaremos as equações de difusão do calor e de portadores, apresentadas na próxima seção.

1.3 Equações de difusão do Calor e de Portadores

A equação de difusão de portadores, na ausência de campo elétrico, é dada por:

$$\frac{\partial n\left(\vec{r},t\right)}{\partial t} = D\nabla^2 n(\vec{r},t) - \frac{n}{\tau} + \Phi(\vec{r},t)$$
(1.14)

onde n é a função que descreve a densidade de portadores, D é a difusividade eletrônica ambipolar, t é o tempo de vida do portador e Φ é o termo de geração de portadores[17]. O segundo termo do lado direito da equação representa a taxa de recombinação dos portadores e é, portanto, um termo de sorvedouro. Assim percebe-se a analogia desta equação com a de difusão do calor, dada por:

$$\frac{\partial T(\vec{r},t)}{\partial t} = \alpha \nabla^2 T(\vec{r},t) + \alpha \frac{S(\vec{r},t)}{K}$$
(1.15)

onde T é a função que descreve a distribuição de temperatura, α é a difusividade térmica ($\alpha = \frac{K}{\rho c}$, sendo ρ a densidade do material e c seu calor específico), K é a condutividade térmica e S é um termo de fonte ou sorvedouro. Comparando as duas equações, nota-se que S engloba o segundo e o terceiro termos da equação 1.14.

Vamos discutir melhor a geração e a recombinação de portadores, já que estes processos influenciam as equações de difusão.

1.4 Geração e Recombinação de Portadores

Vamos analisar um semicondutor em equilíbrio térmico (Figura 1.2). Neste caso, vale a relação:

$$n_0 p_0 = n_i^2 (1.16)$$

onde n_0 é a densidade de elétrons na banda de condução, p_0 a densidade de buracos na banda de valência e n_i é a densidade de elétrons para um semicondutor intrínseco (nãodopado), sendo que neste material a densidade de elétrons é igual à de buracos, p_i [18, 19]

Este equilíbrio é dinâmico, ou seja, os portadores estão sendo gerados e se recombinando continuamente, contudo a taxa de geração é igual à taxa de recombinação. Esta taxa é proporcional ao produto das densidades de elétrons e buracos:

$$G_0 = Bn_0 p_0 = Bn_i^2 \tag{1.17}$$

onde B é a constante de proporcionalidade.

Cada fóton com energia superior ao *gap* se transforma em um par elétron-buraco. Estes portadores relaxam para o fundo da banda num tempo da ordem de picossegundos, se difundem no material até se recombinarem num tempo que é tipicamente de microsegundos para o Si. Então, na presença de luz, há um excedente n e p de elétrons e buracos, respectivamente. E n é igual a p, já que são criados pares elétron-buraco. Nesta situação, a taxa de geração é dada por:



Figura 1.2: Semicondutor em equilíbrio térmico.

$$G_0 + G = Bn'p' = B(n_0 + n)(p_0 + p)$$
(1.18)

Subtraindo a equação 1.17 da 1.18, encontramos a taxa extra de geração G:

$$G = B(n'p' - n_i^2) = B(n_0p + p_0n + np)$$
(1.19)

Para um semicondutor dopado tipo p, p_0 é muito maior que n_0 , e para uma injeção fraca, em que n e p são muito menores que p_0 , esta taxa fica reduzida a:

$$G = Bp_0 n \tag{1.20}$$

No regime estacionário, a taxa de geração se iguala à de recombinação e esta última é dada por:

$$U = -\frac{dn}{dt} = Bp_0 n(t) \tag{1.21}$$

Podemos encontrar a solução para esta equação:

$$n = n(0) \exp(-t/\tau) \tag{1.22}$$

onde t é o tempo de vida dos elétrons, definido por:

$$\tau = -n / \frac{dn}{dt} = \frac{n}{U} \tag{1.23}$$

Para determinar o tempo de vida, precisamos encontrar B, uma constante que depende dos diversos processos de recombinação que podem ocorrer num semicondutor, enumerados a seguir:

- 1. Recombinação via armadilhas ou estados de superfície (Shockley-Read-Hall)
- 2. Recombinação direta banda a banda (emissão de um fóton de energia igual à do gap)
- 3. Recombinação via colisões entre portadores para grandes densidades (Auger)

Vamos estudar detalhadamente cada um dos três tipos de recombinação e analisar as situações de injeção forte e fraca.

1.4.1 Recombinação Indireta

Este tipo de recombinação, denominada Shockley-Read-Hall [20, 21], pode ocorrer no volume ou na superfície através de estados de armadilhas.

Recombinação indireta no volume

No volume, defeitos e impurezas criam estados de energia discretos no meio da banda proibida e os portadores podem utilizar estes estados para se recombinar indiretamente.

A Figura 1.3 ilustra os possíveis processos: (a) a captura de um elétron pelo estado de armadilha, (b) a emissão de um elétron pelo estado de armadilha, (c) a captura de um buraco pelo estado de armadilha, que é equivalente à emissão de um elétron para a banda de valência, e (d) a emissão de um buraco pelo estado de armadilha, que, por sua vez, é equivalente à captura de um elétron da banda de valência.



Figura 1.3: Processos de recombinação indireta no volume: (a) captura de um elétron, (b) emissão de um elétron, (c) captura de um buraco e (d) emissão de um buraco.

Cada processo terá uma probabilidade proporcional às densidades dos portadores ou estados envolvidos. N_T é a densidade total de estados de armadilhas, n_T é a densidade

de estados de armadilhas ocupados por um elétron e p_T é a densidade de estados de armadilhas ocupados por buracos.

Assim, a probabilidade de ocorrer a captura de um elétron da banda de condução por um estado de armadilha é proporcional à densidade de elétrons na banda de condução n' e à densidade de estados de armadilhas ocupados por um buraco (vazio) p_T .

$$\left. \frac{\partial n'}{\partial t} \right|_{(a)} = -c_n p_T n' \tag{1.24}$$

onde c_n é a constante de proporcionalidade da captura de um elétron.

Já a probabilidade de ocorrer a emissão de um elétron do estado de armadilha para a banda de condução é proporcional à densidade de estados de armadilhas ocupados por um elétron n_T e pelos estados disponíveis na banda de condução. Como, entretanto, vamos considerar o fato de que sempre haverá um estado disponível, este fator não será limitante.

$$\left. \frac{\partial n'}{\partial t} \right|_{(b)} = -e_n n_T \tag{1.25}$$

onde e_n é a constante de proporcionalidade da emissão de um elétron.

Analogamente, podemos encontrar a probabilidade de captura de um buraco por um estado de armadilha:

$$\left. \frac{\partial n'}{\partial t} \right|_{(c)} = -c_p n_T p' \tag{1.26}$$

E também a probabilidade de emissão de um buraco:

$$\left. \frac{\partial n'}{\partial t} \right|_{(d)} = -e_p p_T \tag{1.27}$$

onde c_p e e_p são as constantes de proporcionalidade da captura e emissão, respectivamente, de um buraco.

Podemos, então, encontrar a taxa de recombinação de elétrons e de buracos, que é a captura menos a emissão:

$$U_n = -\frac{\partial n'}{\partial t} = c_n p_T n' - e_n n_T \tag{1.28}$$

$$U_p = -\frac{\partial p'}{\partial t} = c_p n_T p' - e_p p_T \tag{1.29}$$

No equilíbrio, cada processo fundamental se anula, ou seja:

$$U_n = U_p = 0 \tag{1.30}$$

Desta maneira, podemos encontrar os coeficientes de probabilidade de emissão de elétrons e de buracos no equilíbrio, $e_{n0} e e_{p0}$.

$$e_{n0} = \frac{c_{n0}p_{T0}n_0}{n_{T0}} = c_{n0}n_1 \tag{1.31}$$

Seção 1.4 Geração e Recombinação de Portadores

$$e_{p0} = \frac{c_{p0}n_{T0}p_0}{p_{T0}} = c_{p0}p_1 \tag{1.32}$$

onde definimos $n_1 \in p_1$.

Vamos supor que estes coeficientes de emissão mantém seus valores de equilíbrio mesmo fora dele. Substituímos as equações 1.31 e 1.32 em 1.28 e 1.29, respectivamente.

$$U_n = -\frac{\partial n'}{\partial t} = c_n (p_T n' - n_1 n_T)$$
(1.33)

$$U_p = -\frac{\partial p'}{\partial t} = c_p (n_T p' - p_1 p_T)$$
(1.34)

No regime estacionário, ou seja, em que a densidade de estados de armadilhas ocupados por elétrons não varia no tempo, vale a seguinte relação:

$$\frac{dn_T}{dt} = -\frac{\partial n'}{\partial t} + \frac{\partial p'}{\partial t} = U_n - U_p = 0$$
(1.35)

Utilizando a igualdade $N_T = n_T + p_T$, encontra-se a densidade de armadilhas ocupadas por elétrons, n_T :

$$n_T = \frac{c_n N_T n' - c_p N_T p_1}{c_n (n_1 + n') + c_p (p_1 + p')}$$
(1.36)

Substituindo n_T e lembrando que $n_1p_1 = n_0p_0 = n_i^2$, obtém-se, finalmente, a taxa de recombinação indireta:

$$U = U_n = U_p = \frac{n'p' - n_i^2}{\frac{1}{c_p N_T}(n' + n_1) + \frac{1}{c_n N_T}(p' + p_1)}$$
(1.37)

Os coeficientes $c_p N_T$ e $c_n N_T$ representam a probabilidade de recombinação dos portadores, buracos e elétrons, respectivamente, com unidade de 1/s. Define-se, então, o tempo de vida dos portadores como sendo o inverso destes coeficientes:

$$\frac{1}{c_p N_T} \equiv \tau_p; \frac{1}{c_n N_T} \equiv \tau_n \tag{1.38}$$

Notamos que, neste caso, o tempo de vida dos portadores é independente da densidade dos mesmos e dependente da densidade total de estados de armadilha.

Agora, vamos comparar as situações de injeção forte e fraca.

Para um semicondutor dopado tipo p, a injeção é dita fraca quando o número de portadores fotogerados n e p, n = p, é bem menor que a densidade de portadores majoritários p_0 . A taxa de recombinação U, encontrada anteriormente, tem a seguinte forma:

$$U = \frac{n_0 p + p_0 n + n p}{\tau_p (n + n_0 + n_1) + \tau_n (p + p_0 + p_1)}$$
(1.39)

Neste caso, pode-se aproximar $p + p_0 + p_1$ por p_0 e desprezar os termos muito menores que p_0 , e então a taxa U se reduz a:

$$U \cong \frac{n}{\tau_n} \tag{1.40}$$

Verifica-se que esta taxa depende apenas do tempo de vida dos portadores minoritários. No caso de um semicondutor dopado tipo n, o que vale para os elétrons no semicondutor tipo p, vale para os buracos.

A injeção de portadores é dita forte quando o número de portadores fotogerados n e p é muito maior que a densidade de portadores majoritários. Neste caso, podemos dizer que $p + p_0 + p_1 = n + n_0 + n_1$ e desprezamos os termos muito menores que o produto np, então a taxa de recombinação assume a seguinte forma:

$$U = \frac{n}{\tau_p + \tau_n} \tag{1.41}$$

Note-se que esta taxa depende do tempo de vida dos elétrons e buracos. Para o Si, o tempo de vida dos elétrons é da ordem de $10^{-6}s$, enquanto o tempo de vida dos buracos é da ordem de $10^{-4}s$.

Recombinação indireta na superfície

Na superfície, a ruptura da simetria do cristal cria estados quânticos. Estes estados estão distribuídos uniformemente na banda proibida. No entanto, vamos considerá-los discretos (Figura 1.4), para poder utilizar a taxa de recombinação encontrada anteriormente, introduzindo um índice s para registrar que a densidade total de armadilhas N_T é superficial (cm^{-2}) , nesta situação.

$$U_s = \frac{n'_s p'_s - n_i^2}{\frac{1}{c_{ps} N_{Ts}} (n'_s + n_{1s}) + \frac{1}{c_{ns} N_{Ts}} (p'_s + p_{1s})}$$
(1.42)



Figura 1.4: Processos de recombinação indireta na superfície: (a) captura de um elétron ou buraco (b) emissão de um elétron ou buraco.

Neste caso, os coeficientes $c_{ps}N_{Ts}$ e $c_{ns}N_{Ts}$ representam a probabilidade de recombinação dos portadores, buracos e elétrons, respectivamente, com unidade de cm/s. Definimos então uma velocidade de recombinação superficial, que é análoga ao inverso do tempo de vida no volume.

$$c_{ps}N_{Ts}(cm/s) \equiv v_p; c_{ns}N_{Ts}(cm/s) \equiv v_n \tag{1.43}$$

A expressão aqui obtida não é uma definição exata da velocidade de recombinação superficial, entretanto este é um parâmetro fenomenológico muito utilizado para caracterizar a qualidade de superfícies e interfaces.

Vamos apresentar um exemplo de como este tipo de recombinação pode afetar o sinal fototérmico. Foram realizadas medidas [22] em uma amostra de silício com uma interface de cobre (*copper-decorated grain boundary*) e uma inclinação de 4 graus na metade da amostra (Figura 1.5).



Figura 1.5: Esquema da amostra de silício com uma interface de cobre (*copper-decorated grain boundary*) com uma inclinação de 4^0 , retirado de [22].

A Figura 1.6 apresenta o que se chama mapa térmico: medidas fototérmicas (amplitude e fase) para uma determinada área (para uma melhor descrição de como são obtidas ver o ítem 2.2.1 do Capítulo 2). Neste caso, a varredura em x e y foi feita passando da região sem interface de cobre para a que foi submetida a este tratamento. Notamos que, para esta freqüência de modulação (1MHz), na fronteira de uma região para a outra, há um mínimo na amplitude e uma mudança de 180 graus na fase. Isto ocorre porque, quando não há a interface de cobre, os portadores se difundem no material e a onda de plasma domina o sinal. Quando há a interface, os portadores se recombinam praticamente na superfície e toda a energia é transferida para a onda térmica. Esta hipótese é confirmada pela mudança de 180 graus na fase, que ocorre visto que as duas componentes do sinal têm sinais opostos, portanto é justamente a competição entre as duas componentes que causa o mínimo na amplitude.



Figura 1.6: Amplitude (a) e fase (b) do sinal fototérmico (f=1MHz) em silício com fronteira de cobre. Área varrida $20\mu m^2$ (5 em x e 4 em y).

1.4.2 Recombinação Direta

Este tipo de recombinação, também chamado de recombinação radiativa, consiste num par elétron-buraco que se recombina, gerando um fóton de energia $h\nu$ igual à do gap (Figura 1.7).

A taxa desta recombinação tem a seguinte forma (equação 1.19):

$$U_r = B(n'p' - n_i^2) \tag{1.44}$$

Na injeção fraca, o tempo de vida de um semicondutor do tipo p se reduz a:

$$\tau_r \cong \frac{n}{Bp_0 n} = \frac{1}{Bp_0} \tag{1.45}$$



Figura 1.7: Esquema de recombinação radiativa.

Para o silício a 300K, o coeficiente B é de $2 \times 10^{-15} cm^3/s$, o que leva a um tempo de vida de 4,6h para uma amostra intrínseca. Para uma amostra dopada ($p_0 = 1 \times 10^{17}$), este tempo cai para 2500 μs , mas mesmo assim é muito grande, se comparado ao tempo de vida da recombinação indireta.

No caso de injeção forte, o tempo de vida assume a seguinte forma:

$$\tau_r \cong \frac{1}{Bn} \tag{1.46}$$

No entanto, se a injeção for suficientemente forte para haver competição com a recombinação radiativa, um outro tipo de recombinação chamada Auger dominará o processo.

1.4.3 Recombinação Auger

Este tipo de recombinação envolve três portadores: a energia da recombinação de um par elétron-buraco é transferida para um terceiro portador, através de uma colisão. Posteriormente, este portador decairá para o fundo da banda, liberando energia térmica. A Figura 1.8 ilustra este processo.

Este processo pode envolver dois elétrons e um buraco ou dois buracos e um elétron, duas situações análogas. Em ambos os casos, a probabilidade será proporcional à quantidade de buracos na banda de valência e à quantidade de elétrons na banda de condução



Figura 1.8: Esquema de recombinação Auger envolvendo dois elétrons e um buraco.

ao quadrado, já que envolve dois portadores deste tipo:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\gamma pnn \tag{1.47}$$

onde γ é a constante de proporcionalidade e tem unidade de cm^6/s .

A taxa de recombinação é dada por:

$$U_n = -\frac{\partial n}{\partial t} = \gamma p n n \tag{1.48}$$

O tempo de vida é, por definição:

$$\tau \equiv \frac{p}{U}; \tau_{auger} \equiv \frac{1}{\gamma n^2} \tag{1.49}$$

Nota-se que o tempo de vida Auger depende da densidade de portadores de uma maneira não linear e que é inversamente proporcional ao quadrado desta. Assim, a probabilidade deste tipo de recombinação ocorrer para baixas densidades de portadores é desprezível.

A Figura 1.9 [23] traz um exemplo de como este tipo de recombinação pode afetar o sinal fototérmico.

Observa-se que as amplitudes das curvas de 55 e 75mW têm o mesmo comportamento e que a fase se encontra próxima de 180 graus, já a curva de amplitude de 275mW apresenta um mínimo e a fase passa de um valor próximo de 0 graus para um valor próximo de 180 graus, indicando uma mudança de regime. Este fato pode ser explicado da seguinte



Figura 1.9: Amplitude (a) e fase (b) do sinal fototérmico em função da freqüência para diferentes potências de luz incidente (P=275mW, 75mW e 55mW), Extraída da Ref. [23].

maneira: à medida que a intensidade de portadores aumenta, o tempo de vida Auger diminui, de modo a se tornar muito pequeno, se comparado ao período de modulação das freqüências mais baixas, no caso 1kHz. Toda a energia é transferida para a onda térmica e, portanto, esta componente é predominante no sinal fototérmico. Quando a freqüência de modulação aumenta, este tempo de vida passa a ser comparável ou maior que o período de modulação e a onda de plasma domina o sinal fototérmico. Nas duas curvas de potência mais baixa, para esta faixa de freqüências, a componente de plasma é dominante.

Vimos então que podem ocorrer três tipos de recombinação e que cada processo tem o seu tempo de vida característico. Podemos encontrar um tempo de vida efetivo somando as probabilidades de recombinação de cada processo que ocorre simultaneamente numa dada situação física:

$$\frac{1}{\tau_{ef}} = \frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2} + \frac{1}{\tau_3} + \dots$$
(1.50)

Entretanto, vimos que, no caso do silício (semicondutor de *gap* indireto), para baixas intensidades de luz, a recombinação indireta é a mais provável e que, para altas intensidades de luz, o processo dominante será o Auger.

Tendo estudado os processos de recombinação, podemos voltar às equações de difusão do calor e de portadores.
1.5 Soluções das Equações de Difusão

Equação de Difusão de Portadores

Voltando à equação de difusão 1.14:

$$\frac{\partial n\left(\vec{r},t\right)}{\partial t} = D\nabla^2 n(\vec{r},t) - \frac{n}{\tau} + \Phi(\vec{r},t)$$

onde sabemos agora que o termo de recombinação de portadores supõe baixas potências de excitação, já que é correspondente à recombinação indireta (Shockely-Read-Hall) em um semicondutor do tipo p.

A seguir, a equação de difusão de portadores 1.14 será resolvida para dois casos (uni e tridimensional), considerando sempre a absorção superficial, ou seja, que não há fontes no volume. No caso do silício, esta é uma aproximação bastante razoável, visto que seu coeficiente de absorção óptica é muito grande na região da luz visível.

1.5.1 Solução da equação de difusão de portadores em uma dimensão, para um meio homogêneo sem fontes.

O laplaciano em uma dimensão é simplesmente d^2/dz^2 . Com estas restrições (uma dimensão e ausência de fontes), a equação torna-se:

$$\frac{\partial n(z,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n(z,t)}{\partial z^2} - \frac{n(z,t)}{\tau}$$
(1.51)

Impondo uma dependência temporal harmônica do tipo $n(z,t) = n(z)e^{j\omega t}$, onde $\omega = 2\pi f$ e f é a freqüência de modulação, temos:

$$\frac{\partial n(z,t)}{\partial t} = j\omega n(z)e^{j\omega t}$$

Voltando à equação 1.51:

$$j\omega n = D\frac{\partial^2 n}{\partial z^2} - \frac{n}{\tau}$$

Rearrumando os termos:

$$\frac{\partial^2 n}{\partial z^2} - \frac{(1+j\omega\tau)}{D\tau}n = 0$$

Definindo o vetor da onda de plasma $\xi = \sqrt{\frac{1+j\omega\tau}{D\tau}}$, encontramos:

$$\frac{\partial^2 n}{\partial z^2} - \xi^2 n = 0 \tag{1.52}$$

cuja solução é dada por:

$$n = Ae^{\xi z} + Be^{-\xi z}$$

Para encontrar os coeficientes A e B, vamos aplicar as condições de contorno:

1. Meio semi-infinito:

$$n(z \to \infty) = 0$$

o que implica A = 0

2. Injeção de portadores na superfície (z = 0):

$$\left. D \left. \frac{dn}{dz} \right|_{z=0} = S_L n - F$$

em que S_L é a velocidade de recombinação superficial e F é o fluxo de fótons, ou seja, $F = I/h\nu$, onde I é a intensidade do feixe bomba, h é a constante de Planck e ν a freqüência da onda luminosa, supondo a eficiência quântica igual a 1 (cada fóton gera um portador). Se a superfície for bem polida, pode-se desprezar S_L . Desta forma:

$$D \left. \frac{dn}{dz} \right|_{z=0} = -F$$
$$DB(-\xi) = -F$$
$$B = \frac{F}{D\xi}$$

Finalmente, encontramos a densidade de portadores:

$$n(z) = \frac{I}{h\nu} \frac{1}{D\xi} e^{-\xi z}$$
(1.53)

Tomando o limite de altas freqüências ($\omega \tau >> 1$), considerando τ da ordem de microssegundos (o limite inferior de f é da ordem de 10⁶ Hz), o vetor da onda de plasma se reduz a:

$$\xi = \sqrt{\frac{j\omega}{D}} = \frac{1+j}{\mu_p}$$

em que $\mu_p = \sqrt{\frac{D}{\pi f}}$ é o comprimento de difusão de portadores.

Substituindo na equação 1.53:

$$n(z) = \frac{I}{h\nu} \frac{\mu_p}{\sqrt{2D}} e^{-\frac{z}{\mu_p}} e^{-j(\frac{z}{\mu_p} + \frac{\pi}{4})}$$
(1.54)

Neste limite, nota-se que a fase decai linearmente com o inverso do comprimento de difusão de portadores, exatamente como acontece com a distribuição de temperatura para uma dimensão (veremos na próxima seção), sendo o comprimento de difusão térmica $\mu = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi f}}$ análogo ao de portadores.

1.5.2 Solução da equação de difusão de portadores em três dimensões, com simetria azimutal (feixe gaussiano), para um meio homogêneo sem fontes

Neste caso, a equação 1.14 se reduz a:

$$\frac{\partial n\left(\vec{r},t\right)}{\partial t} = D\nabla^2 n(\vec{r},t) - \frac{n(\vec{r},t)}{\tau}$$
(1.55)

Assumindo mais uma vez uma dependência temporal harmônica, onde $\omega = 2\pi f$ e f é a freqüência de modulação da radiação incidente, temos:

$$n(\vec{r},t) = n(\vec{r})e^{j\omega t}; \frac{\partial n(\vec{r},t)}{\partial t} = j\omega n(\vec{r})e^{j\omega t}$$

Substituindo na equação 1.55:

$$j\omega n = D\nabla^2 n - \frac{n}{\tau}$$

Para, por fim, obter:

$$\nabla^2 n - \xi^2 n = 0 \tag{1.56}$$

em que $\xi = \sqrt{\frac{1+j\omega\tau}{D\tau}}$ é o vetor da onda de plasma.

Como o problema tem simetria azimutal, pode-se fazer a tranformada de Hankel (apêndice A) para facilitar os cálculos, eliminando-se assim a dependência em r. Encontrada a solução de Hankel, basta fazer a transformada inversa para obter a solução desejada.

A equação transformada tem a seguinta forma:

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2}\tilde{n}(\beta,z) - m^2\tilde{n}(\beta,z) = 0$$
(1.57)

em que $m^2=p^2+\xi^2$ e $p=2\pi\beta$ e cuja solução é:

$$\tilde{n}(p,z) = A(p)e^{mz} + B(p)e^{-mz}$$

Para encontrar as constantes A e B, as seguintes condições de contorno são utilizadas:

1. Meio semi-infinito:

$$\tilde{n}(z \to \infty) = 0$$

o que implica A = 0

2. Depósito de energia em z = 0 (absorção superficial), com feixe gaussiano: $I(r) = I_0 e^{-(\frac{r}{a})^2}$, onde *a* é o raio do feixe. A transformada de Hankel da intensidade é dada por $\tilde{I}(p) = I_0 \frac{a^2}{2} e^{-(\frac{pa}{2})^2}$, temos então:

$$D \left. \frac{d\tilde{n}}{dz} \right|_{z=0} = S_L \tilde{n} - \tilde{F}$$

Supondo que a superfície é polida, pode -se desprezar $S_L \tilde{n}$ e encontra-se:

$$D \left. \frac{d\tilde{n}}{dz} \right|_{z=0} = -\tilde{F}$$
$$D(-m)B = -\tilde{F}$$
$$B = \frac{\tilde{F}}{Dm}$$

No entanto:

$$\tilde{F} = \frac{\tilde{I}}{h\nu} = \frac{P_0}{h\nu 2\pi} e^{-(\frac{pa}{2})^2}$$

Então :

$$B = \frac{P_0}{h\nu 2\pi Dm} e^{-(\frac{pa}{2})^2}$$

Finalmente, podemos escrever a solução de Hankel:

$$\tilde{n}(p,z) = \frac{P_0}{h\nu 2\pi D} \frac{e^{-\frac{p^2 a^2}{4}}}{m} e^{-mz}$$
(1.58)

Executando a transformada inversa, chega-se à solução desejada:

$$n(r,z) = \frac{P_0}{h\nu 2\pi D} \int_0^\infty p dp J_0(pr) \frac{e^{-(\frac{pa}{2})^2}}{m} e^{-mz}$$
(1.59)

Contudo, só nos interessa a solução na superfície, pois o feixe de prova será refletido por esta:

$$n(r, z = 0) = \frac{P_0}{h\nu 2\pi D} \int_0^\infty p dp J_0(pr) \frac{e^{-(\frac{pa}{2})^2}}{m}$$
(1.60)

em que $m^2 = p^2 + \xi^2$ e $\xi = \sqrt{\frac{1+j\omega\tau}{D\tau}}$.

No limite de altas freqüências ($\omega \tau >> 1$), $\xi = \sqrt{\frac{j\omega}{D}} = \frac{1+j}{\mu_p} e \mu_p = \sqrt{\frac{D}{\pi f}}$, que é análogo ao caso da temperatura. Portanto, assim como a distribuição de temperatura, a fase da densidade de portadores decai linearmente com $1/\mu_p$, para pontos distantes da fonte. Sendo assim, variando a distância à fonte, podemos obter facilmente a difusividade eletrônica.



Figura 1.10: Gráfico da amplitude (a) e fase (b) da densidade de portadores (por mW de potência absorvida) em função da distância à fonte, em três freqüências, para o silício $(D = 16, 5cm^2/s, a = 0, 5\mu m)$.

A partir da solução da equação de difusão de portadores, foi feito um programa computacional para simulá-la. Esses valores de Δn (apresentados na Figura 1.10) são válidos para o caso de absorção superficial, baixas intensidades de excitação, altas freqüências de modulação e superfícies bem polidas.

Equação de Difusão de calor

Voltando à equação de difusão 1.15:

$$\frac{\partial T(\vec{r},t)}{\partial t} = \alpha \nabla^2 T(\vec{r},t) + \alpha \frac{S(\vec{r},t)}{K}$$

A seguir, a equação de difusão de calor 1.15 será resolvida para dois casos (uni e tridimensional), considerando sempre a absorção superficial, ou seja, que não há fontes de calor no volume. Esta hipótese é válida para altas freqüências de modulação, já que, neste caso, não haverá recombinação de portadores no volume, o que permite desacoplar as duas equações de difusão.

1.5.3 Solução da equação de difusão de calor para um meio homogêneo, com absorção superficial, em uma dimensão.

Nestas condições, a equação de difusão de calor se torna:

$$\frac{1}{\alpha}\frac{\partial T(z,t)}{\partial t} - \frac{\partial^2 T(z,t)}{\partial z^2} = 0$$
(1.61)

Supondo uma dependência temporal harmônica do tipo $e^{j\omega t}$, onde f é a freqüência de modulação da radiação incidente e $\omega = 2\pi f$:

$$T(z,t) = T(z)e^{j\omega t}$$

Substituindo na equação 1.61:

$$\frac{j\omega}{\alpha}T(z)e^{j\omega t} = e^{j\omega t}\frac{d^2T(z)}{dz^2}$$

Definindo o vetor da onda térmica $\sigma = \sqrt{\frac{j\omega}{\alpha}}$, encontramos:

$$\frac{d^2 T(z)}{dz^2} = \sigma^2 T(z)$$
 (1.62)

cuja solução é dada por:

$$T(z) = Ae^{\sigma z} + Be^{-\sigma z}$$

em que $\sigma = (1 + j)/\mu$ e μ é o comprimento de difusão térmica, dado por:

$$\mu = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi f}}$$

Considerando as condições de contorno:

1. Meio semi-infinito (espessura da amostra \gg comprimento de difusão térmica):

$$T(z \to \infty) = 0$$

o que implica A = 0

2. Depósito de energia com intensidade I_0 em z = 0 (absorção superficial):

$$I_0 = -K \left. \frac{dT}{dz} \right|_{z=0} = K\sigma B \Rightarrow B = \frac{I_0}{K\sigma}$$

Finalmente, pode-se escrever a distribuição de temperatura

$$T(z) = \frac{I_0}{K\sigma} e^{-\sigma z} \tag{1.63}$$

Em função do comprimento de difusão térmica:

$$T(z) = \frac{I_0 \mu}{\sqrt{2}K} e^{\frac{-z}{\mu}} e^{j(-\frac{z}{\mu} - \frac{\pi}{4})}$$

Na superfície:

$$T(z=0) = \frac{I_0 \mu}{\sqrt{2}K} e^{-j\frac{\pi}{4}} = \frac{I_0}{\sqrt{2}K} \sqrt{\frac{\alpha}{\pi f}} e^{-j\frac{\pi}{4}}$$

cuja amplitude é proporcional ao inverso da raiz quadrada da freqüência de modulação.

1.5.4 Solução da equação de difusão do calor para um meio homogêneo, com absorção superficial, fonte gaussiana (simetria azimutal), em três dimensões.

Como já visto, a equação de difusão térmica com dependência temporal harmônica é :

$$\nabla^2 T(r,\theta,z) = \sigma^2 T(r,\theta,z) \tag{1.64}$$

em que $\sigma = (1+j)/\mu$ e μ é o comprimento de difusão térmica.

Devido à simetria azimutal do problema $(T(r, \theta, z) = T(r, z))$, aplica-se a transformada

de Hankel (Apêndice A), reduzindo o problema a uma dimensão.

Desta maneira, obtém-se a equação transformada:

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2}\tau(p,z) - m^2\tau(p,z) = 0 \tag{1.65}$$

onde $m^2 = p^2 + \sigma^2$ e cuja solução pode ser escrita como:

$$\tau(p,z) = A(p)e^{mz} + B(p)e^{-mz}$$

Aplicando as condições de contorno:

1. Meio semi-infinito $(z \in [0, \infty])$:

$$T(z \to \infty) = 0$$

o que implica A = 0

2. Depósito de energia térmica em z = 0 (absorção superficial), com distribuição gaussiana: $I(r) = I_0 e^{-(\frac{r}{a})^2}$, onde *a* é o raio do feixe, e continuidade do fluxo de energia na direção z, em z = 0:

$$I(r) = -K \left. \frac{\partial}{\partial z} T(r, z) \right|_{z=0}$$

onde K é a condutividade térmica do material.

Vimos que a transformada de Hankel da intensidade é dada por:

$$\tilde{I}(p) = I_0 \frac{a^2}{2} e^{-(\frac{pa}{2})^2}$$

Logo:

$$I_0 \frac{a^2}{2} e^{-\left(\frac{pa}{2}\right)^2} = -K \left. \frac{\partial}{\partial z} T(p, z) \right|_{z=0} = KmB(p)$$

Fazendo a transformada inversa e escrevendo em função de potência e não da intensidade:

$$T(r,z) = \frac{P_0}{2\pi K} \int_0^\infty p dp J_0(pr) \frac{e^{-(\frac{pa}{2})^2}}{m} e^{-mz}$$

Na superfície da amostra:

$$T(r, z = 0) = \frac{P_0}{2\pi K} \int_0^\infty p dp J_0(pr) \frac{e^{-(\frac{pa}{2})^2}}{m}$$
(1.66)



Figura 1.11: Gráfico da amplitude (a) e fase (b) da distribuição de temperatura (por mW de potência absorvida) em função da distância à fonte, em três freqüências, para o silício $(\alpha = 0, 9cm^2/s)$. Raio do feixe de excitação igual a $0, 5\mu m$.

em que $m^2 = p^2 + 2j/\mu^2$.

Encontrada a expressão para a temperatura, pôde-se fazer um programa omputacional para calcular esta função na superfície da amostra, em relação à distância ao centro do feixe. Estes resultados são exibidos na Figura 1.11.

A partir destes dados de $\Delta n \in \Delta T$, que são números complexos, pode-se obter $\Delta R/R$ através da relação: $\frac{\Delta R}{R} = \frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial n} \Delta n + \frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial T} \Delta T$, bastando para tanto saber os coeficientes $\frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial n} \in \frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial t}$ (que dependem do comprimento de onda do feixe de prova).

Para o silício em 670 nm, temos:

$$\frac{1}{R}\frac{\partial R}{\partial n} = -1, 0 \times 10^{-22} cm^3$$
$$\frac{1}{R}\frac{\partial R}{\partial T} \approx 1, 0 \times 10^{-4} K^{-1}$$

Calculamos a razão entre eles: $b = \frac{\partial R_{\partial n}}{\partial R_{\partial T}} = 6,67 \times 10^{-19} K cm^3$. A Figura 1.12 traz os resultados de $\Delta R/R$ para 100kHz, 1MHz e 5MHz.

No gráfico da fase, foram incluídas retas que representam a inclinação da onda de plasma pura, em que observamos, a partir de uma certa distância, a coincidência das duas curvas e a diminuição desta distância à medida que aumentamos a freqüência. Este fato ocorre porque a difusividade térmica do silício é praticamente vinte vezes menor que a eletrônica. Ou seja, à medida que nos afastamos da fonte, a onda térmica é mais fortemente atenuada que a de plasma. Quando aumentamos a freqüência, o tempo de vida fica cada vez maior se comparado ao período de modulação, e a onda de plasma passa a dominar o sinal em distâncias cada vez menores. Ou seja, para obter a difusividade eletrônica no silício, basta medir a inclinação de fase em função da posição para grandes distâncias da fonte [24].

1.6 Caracterização de Semicondutores utilizando a Microscopia Fototérmica de Reflexão

Até aqui, vimos exemplos de como determinar a difusividade eletrônica e de como o tempo de vida e a velocidade de recombinação superficial podem influenciar o sinal fototérmico. Vejamos agora mais alguns exemplos da aplicação da Microscopia Fototérmica de Reflexão na caracterização de dispositivos semicondutores. Nestes casos, a onda térmica é gerada pela passagem de corrente elétrica pelo dipositivo, ao invés de ser gerada pela absorção óptica, como consideramos anteriormente.

Em 1994, Mansanares et al[25] utilizaram a Microscopia Fototérmica para investigar lasers de InGaAsP/InP. As grandes diferenças nas propriedades térmicas do InP e do



Figura 1.12: Gráfico da amplitude (a) e fase (b) de $\Delta R/R$ (por mW de potência absorvida) em função da distância à fonte em três freqüências para o silício. Raio do feixe de excitação igual a $0, 5\mu m$.

InGaAsP acarretaram o confinamento do calor que foi observado. Eles demonstraram também que há pouca recombinação não radiativa nas facetas dos lasers. Além disso, observou-se o efeito chamado *knife-edge*, que ocorre nas bordas. Como a amostra está sendo aquecida periodicamente, ela também se dilata e se contrai na mesma freqüência. Quando o feixe de prova atinge a borda, parte dele será ou não refletida devido a esta oscilação, gerando uma outra componente do sinal proporcional à expansão térmica da amostra, o que permite até medir a dilatação da mesma. A Figura 1.13 (a) traz o resultado da medida e na 1.13 (b) são separadas as duas componentes do sinal, o que permitiu estimar o deslocamento da borda em 1.4 angstrons.

Em 1996, Voigt et al[26] obtiveram imagens da distribuição de corrente elétrica num resistor. Além disso, eles perceberam que, variando a freqüência de modulação, ou seja, variando o comprimento de difusão térmica, pode-se alterar a geometria da onda térmica que se propaga para o subtrato. Se a largura da trilha for maior que o comprimento de difusão térmica, obtém-se uma onda plana e no caso contrário teremos uma onda cilíndrica. Pode-se ainda obter ondas esféricas com dobras na trilha, já que, neste caso, temos densidades de corrente altamente localizadas, o que equivale a fontes de calor pontuais.

Em 1997, Batista et al[27] estudaram o comportamento de transistores de efeito de campo. A Figura 1.14 traz a foto ampliada de um transistor MOSFET de $30\mu m \times 35\mu m$.

Foram caracterizadas diversas situações de operação, no intuito de avaliar que situações permitiriam a observação de defeitos criados através de descargas eletrostáticas. Estas situações de operação são descritas abaixo.

Nas medidas mostradas a seguir, a área varrida foi de $40 \mu m \times 40 \mu m$ e o sinal modulado utilizado para estimular o dispositivo tem a seguinte forma:

$$V = \frac{V_0}{2} \left[1 + sen(2\pi ft) \right]$$
$$V_0 = 8V, f = 100 kHz$$

A Figura 1.15 (a) traz o mapa de $\Delta R/R$ do transistor, com V_G modulado (tensão na porta) e V_D (tensão no dreno) nula. Neste caso, não há corrente circulando no circuito. Observa-se um sinal uniforme em toda a área da porta. Não há corrente, mas a tensão na porta polariza o transistor, criando um efeito de eletrorefletância na superfície (como descrito na seção 1.2, terceira componente). A 1.15 (b) traz a situação inversa, V_G nulo e V_D modulado. Nesta situação, também não há corrente no circuito. Verifica-se um sinal maior próximo ao dreno. Os portadores fotogerados pelo feixe de prova são atraídos pelo potencial e aí se recombinam. Verifica-se que a amplitude do sinal depende da intensidade do feixe de prova.

A 1.16 (a) traz o mapa de $\Delta R/R$ do transistor, com V_G modulado e $V_D = 8,0V$. Neste caso, há corrente circulando no circuito. Como o canal é pinçado, a resistência



Figura 1.13: (a) Amplitude (linha cheia) e fase (linha tracejada) do sinal fototérmico (b) Componente DC do sinal (linha cheia) e amplitude da componente de expansão térmica (linha tracejada). Freqüência de modulação de 40kHz, retiradas de [25].



Figura 1.14: Micrografia de transistor MOSFET mostrando seus terminais: (1) substrato, (2) fonte, (3) porta e (4) dreno, retirada de [27].



Figura 1.15: Mapas de $\Delta R/R$ em transistor MOSFET: (a) V_G modulado e V_D nulo, sinal máximo (branco)= 1,4 × 10⁻⁴; (b) V_G nulo e V_D modulado, sinal máximo (branco)= 13×10^{-4} . Área varrida $40 \mu m \times 40 \mu m$, retirada de [27].

nesta região é maior. Observa-se então um sinal maior na região do dreno devido ao aquecimento por efeito Joule.



Figura 1.16: Mapas de $\Delta R/R$ em transistor MOSFET (a) V_G modulado e $V_D = 8,0V$ (b) mesma situação após descarga eletrostática. Área varrida $40\mu m \times 40\mu m$, retirada de [27]. Pode-se ver um maior aquecimento na parte inferior, próxima ao dreno (*pinch-off* do canal). Acima em (b), um defeito criado por descarga eletrostática.

A Figura 1.16 (b) traz o mesmo tipo de mapa para o dispositivo, após uma descarga eletrostática. Verifica-se que, além da região aquecida próxima ao dreno, há um máximo de sinal próximo à fonte, indicando que houve um rompimento do óxido naquela região, que permitiu a passagem de corrente naquele ponto.

Em 1999, Grauby et al[28] apresentaram um novo método de medida. Eles substituiram o laser de prova e o fotodiodo por um *LED (ligth-emitting diode)* e uma câmera *CCD (charge coupled device)*. Esta variação da técnica permite a obtenção da imagem completa de uma só vez, como uma fotografia térmica da amostra, diferente da varredura realizada ponto a ponto, que consome muito mais tempo. A velocidade máxima de aquisição de imagens pela câmera é atingida em dezenas de Hz, o que limita muito a freqüência de modulação. Para realizar medidas em alta freqüência, é necessário modular a corrente do led de um valor ligeiramente diferente da alimentação do circuito e medir o batimento entre estes dois sinais (método heterodino). A desvantagem deste método é que a sensibilidade é da ordem de duas vezes menor que a montagem com o laser. Mesmo assim, por meio deste método foi possível observar o aquecimento Joule de resistores de silício policristalino, bem como o efeito Peltier.

A partir de 2000, Batista et al[29] passaram a estudar a interferência optotérmica que ocorre em estruturas estratificadas, com o intuito de obter um aumento de contraste nas medidas fototérmicas. Os dispositivos semicondutores são em geral recobertos por uma camada transparente de passivação (de óxido ou nitreto de silício), sendo que parte do feixe de prova é refletida nesta interface e interfere com a porção refletida no semicondutor. Além disso, a reflexão na interface dispositivo/passivação é alterada pela variação de temperatura na mesma, daí o termo interferência optotérmica. Eles realizaram medidas em células solares e, através de um modelo teórico, foram capazes de determinar que a variação no sinal era causada principalmente pela mudança na espessura da camada de adesivo, que fica entre o dispositivo e a cobertura de vidro.

Em 2001, também em busca de um aumento no contraste, Batista et al[30] variaram o comprimento de onda do feixe de prova, já que o coeficiente dR/dT depende do mesmo. A Figura 1.17 traz um gráfico de dR/dT em função do comprimento de onda para o ouro e o silício. Observa-se que em 670nm (comprimento de onda utilizado anteriormente) este coeficiente é bem próximo de zero e que é possível ganhar uma ordem de grandeza utilizando um comprimento mais próximo do azul.



Figura 1.17: dR/dT em função do comprimento de onda do feixe de prova, linha cheia ouro e círculos silício, retirado de [30].

Além disso, a mudança de sinal do coeficiente com o comprimento de onda pode aumentar o contraste em situações em que se atravessa uma região contendo materiais distintos. Se o sinal de dR/dT for contrário, o que ocorre para determinados comprimentos de onda, a interface entre os dois materiais fica melhor definida através de um mínimo na amplitude e uma mudança de 180 graus na fase.

No caso de amostras estratificadas, devido aos efeitos de interferência, ocorrem vários máximos e mínimos em dR/dT. E a escolha do comprimento de onda adequado é fundamental para a realização das medidas.

Também em 2001, Tessier et al [31] utilizaram leds com diferentes comprimentos de onda para medir um resistor de nitreto de cromo sobre substrato de arseneto de gálio recoberto com uma camada de passivação de nitreto de silício. Eles identificaram os comprimentos de onda mais adequados para visualizar o aquecimento dos diferentes materiais, o resistor, o substrato e o eletrodo de ouro. Além disso, acoplaram um termopar para realizar uma calibração do experimento e obter a temperatura absoluta em cada material.

Em 2003, o mesmo grupo [32] acoplou uma grade de difração ao microscópio e, utilizando luz branca, foi capaz de obter o espetro de reflexão e do coeficiente dR/dT em apenas uma aquisição. Desta maneira, facilitaram a tarefa de encontrar o comprimento de onda adequado para medir cada material. Eles elaboraram ainda um modelo teórico capaz de descrever os resultados experimentais obtidos para ouro e arseneto de gálio recobertos por nitreto de silício.

Ainda em 2003, Tessier et al[33] propuseram um novo método de medida baseado na absorção de radiação UV pela camada de passivação. Esta camada absorve abaixo de 280nm, ou seja, utilizando comprimentos na região ultravioleta, mede-se apenas a temperatura desta camada que depende do calor gerado no circuito, visto que não existem fontes de calor nela própria. Elimina-se assim o efeito da interferência óptica. Outra vantagem apresentada por esta montagem é o aumento da resolução espacial, já que esta é limitada pela difração (a resolução é da ordem do comprimento de onda). O comprimento de onda utilizado é de 240nm e é obtido através de um laser de Ti:Safira triplicado.

Também em 2003, Dietzel et al[34] realizaram medidas duplamente moduladas. Normalmente, utiliza-se apenas corrente elétrica alternada para excitar dispositivos semicondutores. Neste caso, além dessa modulação, um feixe laser modulado na mesma frequência da corrente também foi utilizado para excitar a amostra com detecção em harmônicos superiores (2f e 4f). Esta aplicação da técnica se mostrou bastante útil para visualizar áreas com diferentes implantações (dopagens), o que não é possível com a técnica convencional. Outra possibilidade é usar diferentes frequências de excitação óptica e elétrica e realizar a detecção na soma ou na diferença entre as frequências.

Após este panorama sobre a utilização da Microscopia Fototérmica de Reflexão na caracterização de dispositivos semicondutores, pode-se entender a inserção do presente trabalho no contexto atual do campo de pesquisa. A proposta é dar continuidade ao trabalho iniciado por Batista no GFRM da Unicamp e, colaborando com o grupo francês de Tessier, comparar dois métodos de medida (com e sem câmera CCD) e melhorar os modelos teóricos já desenvolvidos por eles. Neste sentido, Batista [15] calculou a interferência causada pela variação contínua da espessura da camada de passivação (cunha) dos dispositivos, enquanto Tessier faz um cálculo em função do comprimento de onda, considerando apenas três camadas, enquanto nós utilizamos quatro. A originalidade deste trabalho está em propor um explicação para a conexão entre dR/dT e dR/d λ . Do ponto de vista experimental, percebeu-se que, em medidas preliminares, a complexidade dos chips comerciais dificultava a compreensão do sinal fototérmico destas estruturas. Por este motivo, um chip foi especialmente desenvolvido para este trabalho em colaboração com o Centro de Pesquisa Renato Archer (CenPRA). Apesar disso, encontramos dificuldades na caracterização deste chip, o que levou à utilização de um chip ainda mais simples, fabricado no Centro de Componentes Semicondutores (CCS) da Unicamp, para o qual foi possível aplicar com sucesso o modelo teórico.

Capítulo 2

Materiais e Métodos

2.1 Descrição das amostras

2.1.1 Chips Fototérmica

Os chips comerciais vêem se tornando cada vez mais complexos: maior número de camadas, maior compactação. As medidas fototérmicas envolvem parâmetros ópticos e térmicos que mudam a cada camada. Disso decorrem as dificuldades encontradas na interpretação de medidas preliminares realizadas em chips comerciais. Decidiu-se, então, projetar e fabricar uma série de chips de teste, mais simples que os comerciais, especialmente desenvolvida para as medidas fototérmicas. Para tanto, aproveitou-se a possibilidade surgida com a colaboração estabelecida com o CenPRA (Centro de Pesquisas Renato Archer). As amostras desenvolvidas nesta parceria estão descritas abaixo.

Chip Fototérmica 1

O projeto dos chips foi realizado em colaboração com a DCSH (Divisão de Concepção de Sistemas de Hardware), chefiada pelo Dr. Saulo Finco, e a DAPE (Divisão de Qualificação e Análise de Produtos Eletrônicos), chefiada por Marcos Pimentel, ambas do CenPRA, utilizando-se a infra-estrutura computacional existente neste centro. O projeto do chip é desenvolvido no Brasil, com a ferramenta computacional Mentor Grafics, e enviado para fabricação na AMS (Austria Mikro System), na Áustria.

O primeiro passo é definir a tecnologia de fabricação do chip. O seu preço é dado pelo tamanho da menor estrutura possível e do número de camadas. Escolheu-se a mais barata dentre as oferecidas pelo fabricante, conhecida como $0,8\mu m$ CYE. Esta dispõe de sete camadas com diferentes espessuras, assim denominadas: Poly1 $(0,42\mu m)$, Poly2 $(0,27\mu m)$, Met1 $(0,60\mu m)$, Met2 $(1,0\mu m)$, n+ $(0,40\mu m)$, n $(3,5\mu m)$ e p+ $(0,40\mu m)$. Poly significa silício policristalino, Met refere-se a metal, que, no caso, é o alumínio, n+ é o silício n fortemente dopado, n o silício n pouco dopado e p+ é o silício p fortemente dopado. O substrato é de silício p pouco dopado. A tecnologia é chamada de $0,8\mu m$, pois as menores estruturas possíveis têm esta dimensão (apenas com a camada de Poly1 é possível obtê-las).

Em seguida, foi necessário definir o esquema do chip e que tipos de estruturas ele conteria. Optou-se por fazer uma matriz de linhas e colunas ligadas aos *pads*, incluindo-se uma estrutura em cada cruzamento. Assim, ao alimentar apenas uma linha e uma coluna teríamos acesso a cada um dos dispositivos. Desta maneira, é possível fazer um grande número de estruturas (576 estruturas para 48 pinos) e assim otimizar o aproveitamento da área do chip, já que o preço deste é proporcional à área. Decidido isto, o próximo passo foi definir que estruturas gostaríamos de estudar. Foram escolhidas quatro linhas de trabalho:

- 1. Estudo da interferência optotérmica, através de estruturas com propriedades ópticas e térmicas diferentes;
- 2. Estudo de defeitos, simulando defeitos em estruturas simples;
- 3. Estudo de fontes e distribuição do calor;
- 4. Análise de componentes ativos isolados.

Nesta tese nos concentramos na linha 1, fato este que ficará evidente do Capítulo 3. A Figura 2.1 exibe o layout do chip que foi batizado de Fototérmica 1.

A área do chip é de aproximadamente $9mm^2$, e foi financiado pelo Programa Multi-Usuário (PMU) da Fapesp, coordenado pelo Professor Jacobus Swart do Centro de Componentes Semicondutores (CCS) da Unicamp.

Seguindo a linha 1, projetamos resistores (trilhas) mantendo o comprimento de $50\mu m$ e variando a largura de 0,8, 1,6, 2,0, 4,0, 8,0, 10,0 e $20\mu m$, para todas as camadas. Preocupamo-nos em fazer os contatos bem grandes, para diminuir a resistência e a influência dos mesmos. A Figura 2.2 ilustra um exemplo deste tipo de estrutura.

Fizemos também resistores em paralelo, ou seja, trilhas de diversas larguras ligadas ao mesmo potencial (Figura 2.3). Desta maneira, apesar da corrente em cada um ser diferente, já que a resistência é diferente para cada espessura, a densidade de corrente é a mesma em todas as trilhas.

Estas estruturas mencionadas acima foram repetidas no chip e recobertas com Met1 ou Met2, visto que nos chips comerciais acontece de uma trilha passar por cima de uma estrutura de interesse e nós gostaríamos de estudar a influência que este fato pode ter nas medidas de Microscopia Fototérmica.



Figura 2.1: Layout do chip Fototérmica 1.



Figura 2.2: Layout de uma trilha de Poly1 de $0,8\mu m$ de largura e $50\mu m$ de comprimento. Azul escuro corresponde ao polissilício e azul claro ao alumínio.



Figura 2.3: Layout de trilhas de Poly1 de $50\mu m$ de comprimento e com larguras de 0,8, 1,6, 4,0 e $8\mu m$. Azul escuro corresponde ao polissilício e azul claro ao alumínio.

Projetamos ainda resistores em série, ou seja, trilhas de diferentes larguras ligadas entre si, pois, neste caso, a corrente se mantém constante, porém a densidade de corrente é alterada. Fizemos dois tipos de interface, mostrados na Figura 2.4, para observar a



Figura 2.4: Layout de trilha de Poly1 com larguras de 1,6, 0,8 e 1, $6\mu m$ e comprimento total de $50\mu m$. Azul escuro corresponde ao polissilício e azul claro ao alumínio.

influência das mesmas.

Seguindo a linha 2, projetamos trilhas com orifícios de diferentes tamanhos e formatos (Figura 2.5), para observar a distribuição do calor em volta deles. Fizemos também trilhas com pares de orifícios.

Já na linha 3, fizemos trilhas em forma de cotovelo (Figura 2.6), pois, neste caso, teríamos uma fonte de calor pontual para a onda térmica que se propaga para o substrato. Fizemos também trilhas muito estreitas $(0, 8\mu m)$, que podem funcionar como uma fonte linear, e trilhas muito largas $(20\mu m)$, que podem funcionar como uma fonte plana [26]. Desta maneira, podemos estudar a propagação do calor para diversas geometrias da fonte.

Ainda na linha 3, criamos trilhas de Poly1, Met1 e Met2 acopladas a dissipadores de calor de diferentes materiais: apenas Metl 1, Met1 + Met2, Poly1 + Met1 + Met2, sub + Met1 + Met2, de mesmo tamanho (comprimento de $10\mu m$ e largura de $5\mu m$), Figura 2.7.

Na linha 4, projetamos diodos, transistores e inversores. Com a tecnologia utilizada, pode-se fazer três tipos de diodos parasitas, chamados PD, ND e NWD (Figura 2.8). O PD tem uma junção p+n-, o ND uma junção p-(substrato)n+ e o NWD, por sua vez, possui uma junção p-(substrato)n-. Como não podemos alimentar o chip com tensões negativas (elas são barradas pelos *pads*), colocamos dois diodos em cada quadrado, um p e um n, e a ligação entre eles ligada à coluna da esquerda, sendo que o outro terminal



Figura 2.5: Layout de trilha de Poly1 com largura de $4,0\mu m$ e comprimento total de $50\mu m$, com orifícios de $1,0\mu m \times 1,0\mu m$, $2,0\mu m \times 1,0\mu m$ e $1,0\mu m \times 1,0\mu m$. Azul escuro corresponde ao polissilício e azul claro ao alumínio.



Figura 2.6: Layout de trilha de Poly1 com largura de $1, 6\mu m$ e comprimento de $50\mu m$ em forma de cotovelo. Azul escuro corresponde ao polissilício e azul claro ao alumínio.



Figura 2.7: Layout de trilhas de Poly1 com largura de 1, $6\mu m$ e comprimento de $50\mu m$, com dissipador térmico de diversos materiais (Met1, Met1+Met2, Poly1+Met1+Met2, sub+Met1+Met2) de comprimento igual a $10\mu m$ e largura igual a $5\mu m$. As trilhas são espaçadas de $10\mu m$ entre bordas. Azul escuro corresponde ao polissilício e azul claro ao alumínio.

do diodo foi ligado à linha mais próxima. Controlando estes três potenciais, podemos polarizar um diodo reversamente e outro diretamente, o que permite alimentar cada um separadamente. O tamanho dos diodos variou de 5 a $20\mu m$. Fizemos também diodos encobertos por Met2.

Os transistores necessitam, em geral, de quatro terminais para serem alimentados, mas, como o substrato já é aterrado, necessitamos apenas de três terminais. Dependendo da polaridade (p ou n), ligamos um dos terminais em VDD=5V ou em VSS=0V, o outro na coluna da esquerda e a porta (gate) à linha mais próxima. Visto que há dois terminais livres em cada transistor pode-se alimentá-los separadamente. As dimensões dos transistores (Figura 2.9) variaram de 0,8 a $20\mu m$.

Fizemos também inversores com os transistores p e n desenhados por nós (Figura 2.10 a) e inversores padrões da tecnologia utilizada (Figura 2.10 b e c). Nela não há um transistor equivalente ao do chip Smart Power (utilizado nas medidas preliminares), mas colocamos todos os quatro tipos disponíveis. Para isolar os inversores, a entrada destes foi conectada à coluna da esquerda e a saída conectada a um capacitor de 1pF e a dois resistores de 260 Ω (Figura 2.10a). Apenas a saída de um inversor foi conectada à linha mais próxima.



Figura 2.8: Layout dos diodos (a) ND e PD (b) NWD e PD.



Figura 2.9: Layout de transistores (a) pmos (b) nmos.



Figura 2.10: Layout de inversores (a) com transistores p e n projetados mostrando o capacitor e os resistores na saída, (b) inversor padrão menos complexo, (c) inversor padrão mais complexo.

Chip Fototérmica 2

Como essa idéia do chip matriz (Fototérmica 1) não havia sido testada anteriormente, ao invés de 24 linhas, preenchemos apenas 18 linhas (projetamos cerca de 400 estruturas) e acoplamos um pequeno chip ao Fototérmica 1, chamado Fototérmica 2 (Figura 2.11), contendo estruturas isoladas, sendo um *pad* de entrada e outro de saída para cada uma delas. São 15 estruturas no total, sendo trilhas de Poly1 e Poly2, diodos e transistores grandes.

As estruturas são:

- 1. Transistor pmos descoberto com $l=20\mu m$ e w $=20\mu m$ (Figura 2.12a)
- 2. Transistor nmos descoberto com $l=20\mu m$ e w $=20\mu m$ (Figura 2.12b)
- 3. Transistor pmos descoberto com $l=10\mu m$ e w $=10\mu m$
- 4. Transistor nmos descoberto com $l=10\mu m$ e w $=10\mu m$
- 5. Trilha de Poly1 descoberta com $l=50\mu m$ e w $=4\mu m$
- 6. Trilha de Poly1 descoberta com $l=50\mu m$ e w $=8\mu m$
- 7. Cotovelo de Poly1 descoberto com $l=50\mu m$ e w $=4\mu m$



Figura 2.11: Layout do chip Fototérmica 2.

- 8. Trilha de Poly2 descoberta com $l=50 \mu m$ e w $=4 \mu m$ (Figura 2.13)
- 9. Trilha de Poly2 descoberta com l= $50 \mu m$ e w = $8 \mu m$
- 10. Diodo PD descoberto com $l=20\mu m$ e w $=20\mu m$ (Figura 2.14a)

- 11. Diodo ND descoberto com $l=20\mu m$ e w $=20\mu m$ (Figura 2.14b)
- 12. Diodo NWD descoberto com $l=20\mu m$ e w $=20\mu m$ (Figura 2.14c)
- 13. Diodo PD descoberto com $l=10\mu m$ e w $=10\mu m$
- 14. Diodo ND descoberto com $l=10\mu m$ e w $=10\mu m$
- 15. Diodo NWD descoberto com $l=10\mu m$ e w $=10\mu m$

A estrutura 2 foi conectada incorretamente e por isso não pode ser alimentada. As Figuras 2.12 a 2.14 mostram os detalhes do *layout* das estruturas de teste.



Figura 2.12: Layout de transistores (a) pmos, estrutura 1 do chip Fototérmica 2 e (b) nmos, estrutura 2 do chip Fototérmica 2.

Chip Fototérmica 3

Após a submissão do projeto do chip, através de simulações, percebeu-se que o chip Fototérmica 1 não funcionaria como esperado. Constatamos que, ao alimentar apenas uma linha e uma coluna, não estávamos estimulando apenas um dispositivo. Analisando então o diagrama esquemático do chip, percebemos que realmente havia caminhos alternativos para a corrente. Decidiu-se, então, ampliar o chip Fototérmica 2, incluindo resistores de todas as camadas. Este novo chip foi batizado de Fototérmica 3 (Figura 2.15) e contém 25 estruturas no total.

As estruturas são:



Figura 2.13: Layout de uma trilha de Poly2 de $4\mu m$ de largura e $50\mu m$ de comprimento, estrutura 8 do chip Fototérmica 2. Azul escuro corresponde ao polissilício e azul claro ao alumínio.



Figura 2.14: Layout dos diodos (a) PD (b) ND e (c) NWD, estruturas 10, 11 e 12 do chip Fototérmica 2, respectivamente.

- 1. Transistor pmos descoberto com $l=20\mu m$ e w $=20\mu m$ (Figura 2.12a)
- 2. Transistor nmos descoberto com $l=20\mu m$ e w $=20\mu m$ (Figura 2.12b)
- 3. Transistor pmos descoberto com $l=10\mu m$ e w $=10\mu m$
- 4. Transistor nmos descoberto com $l=10\mu m$ e w $=10\mu m$
- 5. Trilha de Poly1 descoberta com $l=50 \mu m$ e w $=4 \mu m$



Figura 2.15: Layout do chip Fototérmica 3.

- 6. Trilha de Poly1 descoberta com $l=50 \mu m$ e w $=8 \mu m$
- 7. Trilha de Poly1 coberta por Met1 com $l=50\mu m$ e w $=8\mu m$
- 8. Cotovelo de Poly1 descoberto com $l=50\mu m$ e w $=4\mu m$
- 9. Trilha de Poly2 descoberta com $l=50\mu m$ e w $=4\mu m$ (Figura 2.13)
- 10. Trilha de Poly2 descoberta com l= $50 \mu m$ e w = $8 \mu m$
- 11. Trilha de Poly2 coberta por Met1 com $l=50\mu m$ e w $=8\mu m$

12.	Trilha de Si p+ descoberta com l= $50 \mu m$ e w = $4 \mu m$
13.	Trilha de Si p+ descoberta com l=50 μm e w =8 μm
14.	Trilha de Si n+ descoberta com l=50 μm e w =4 μm
15.	Trilha de Si n+ descoberta com l=50 μm e w =8 μm
16.	Trilha de Si n descoberta com l=50 μm e w ${=}5\mu m$
17.	Trilha de Si n descoberta com l=50 μm e w $=\!\!10\mu m$
18.	Trilha de Met 1 descoberta com l=50 μm e w ${=}4\mu m$
19.	Trilha de Met 2 descoberta com l=50 μm e w ${=}4\mu m$
20.	Diodo PD descoberto com l=20 μm e w =20 μm (Figura 2.14a)
21.	Diodo ND descoberto com l=20 μm e w =20 μm (Figura 2.14b)
22.	Diodo NWD descoberto com l=20 μm e w =20 μm (Figura 2.14c)
23.	Diodo PD descoberto com l=10 μm e w =10 μm
24.	Diodo ND descoberto com l=10 μm e w =10 μm
25.	Diodo NWD descoberto com l= $10 \mu m$ e w = $10 \mu m$

Das 25 estruturas do chip 3, 15 são as contidas no 2, tendo sido acrescentadas trilhas de silício e metal, bem como trilhas de silício policristalino recobertas por metal.

2.1.2 Chip CCS

Este chip contém resistores de silício policristalino com largura de $20\mu m$ e diversos comprimentos: 200, 400 e $1000\mu m$. Todo o processo de fabricação do chip é realizado no Centro de Componentes Semicondutores da Unicamp (CCS). Visto que os valores de resistência variam com a temperatura, o intuito é utilizá-los como termômetros, e por este motivo, várias simulações foram realizadas pelo aluno de doutorado Adeilton C. de Oliveira, orientado pelo professor Ioshiaki Doi, do CCS. No entanto, medir a temperatura nos resistores não é uma tarefa fácil, daí a utilidade das medidas fototérmicas nessas amostras. A Figura 2.16 mostra uma imagem da amostra, bem como um corte vertical da mesma.

A camada de silício policristalino tem $1, 6\mu m$ de espessura e consiste em Si-n forte-



Figura 2.16: (a) Micrografia do chip CCS mostrando um resistor[35], (b) Corte vertical de um resistor.

mente dopado (1×10^{20} átomos/ cm^3), a camada de óxido de silício tem 0, $5\mu m$ de espessura e o substrato é um *wafer* de Si-n.

A Figura 2.17 traz o perfil de uma trilha de silício policristalino obtido com per-



Figura 2.17: Perfil de resistor fabricado no CCS.

filômetro Dektak 5. Observa-se que a base tem $25\mu m$ de largura, enquanto o topo tem aproximadamente $9\mu m$.

Na Figura 2.18 são mostradas as simulações de distribuição de temperatura nos resistores, com tensão aplicada de 1 V e temperatura ambiente de $25^{0}C$, obtida através do programa FlexPDE (realizada pelo doutorando Adeilton C. de Oliveira).



Figura 2.18: Simulação da distribuição de temperatura em vista superior com corte (a) no poli-Si, (b) na interface substrato-SiO2, (c) em vista transversal e (d) fluxo de calor no dispositivo de poli-Si com camada isolante de SiO2. Retirada de [35].

Observa-se que a temperatura é maior no centro do resistor e menor nas extremidades,

bordas e interface com camada de óxido de silício.

2.2 Descrição das Montagens Experimentais de Microscopia Fototérmica de Reflexão

2.2.1 Montagem com laser

Nesta técnica, o campo de temperatura gerado pela absorção de luz laser modulada é sondado através da variação na refletância da amostra, já que o índice de refração varia com a temperatura. O sinal obtido é proporcional à variação da refletância da amostra, na forma seguinte:

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial T} \Delta T \tag{2.1}$$

onde $\frac{\partial R}{\partial T}$ é um coeficiente que depende do material e do comprimento de onda.

A montagem experimental utilizada na Unicamp está esquematizada na figura (2.19). Para excitar a amostra, utilizamos um gerador de função (PHILIPS, mod.PM5139), que fornece também a referência para o amplificador síncrono (*lock-in*).

Um laser diodo (10mW-670nm), contínuo, é geralmente utilizado como feixe de prova. Este feixe passa por um cubo separador de polarização, atravessa um espelho de banda passante dielétrico (dicróico) e passa por uma lâmina de quarto de onda, antes de penetrar no tubo fotográfico do microscópio (Olympus, mod. BHMJ UMA) e incidir na superfície da amostra. No retorno, ele passa novamente pela lâmina de quarto de onda e é desviado pelo cubo separador de polarização (como ele passou duas vezes pela lâmina de quarto de onda, a direção de sua polarização foi alterada em 90 graus), para um segundo fotodiodo (de sinal) rápido de Si (New Focus, mod. 1801, DC a 125MHz). Este sinal é enviado para o amplificador *lock-in*.

As linhas de um laser de Ar^+ (LEXEL, mod. 95) também foram utilizadas como feixe de prova. Este laser dispõe dos seguintes comprimentos de onda: 457,9, 476,5, 488,0, 496,5, 501,7 e 514,5 nm. A linha de 514,5 nm é a que apresenta maior potência, seguida da linha de 488,0 nm. Elas são refletidas pelo espelho dicróico, entrando no tubo fotográfico do microscópio óptico de reflexão, que focaliza o feixe sobre a superfície da amostra.

O microscópio tem cinco objetivas, o que permite alterar o diâmetro dos feixes na amostra. O raio do feixe é dado pelo limite de difração:

$$a = \frac{1.22\lambda}{2N.A.} \tag{2.2}$$

onde λ é o comprimento de onda do feixe e N.A. é a abertura numérica da objetiva.

Esta expressão só é válida para uma onda plana e, por este motivo, uma filtragem


Figura 2.19: Esquema da montagem experimental da Microscopia Fototérmica de Reflexão.

espacial é feita na entrada do microscópio.

Para a linha de 514,5nm do laser de Argônio, podemos variar o raio de acordo com a tabela 2.1.

aumento	N.A.	$a(\mu m)$
$5 \times$	$0,\!10$	3,14
$10 \times$	$0,\!25$	$1,\!25$
$20 \times$	$0,\!40$	0,785
$50 \times$	0,60	0,523
$50 \times$	$0,\!75$	0,418

Tabela 2.1: Raio do feixe de prova (514,5 nm) para cada objetiva

Um sistema de translação x-y (Microcontrole, mod.ITL09.2, resolução de 0, 1 μm passoa-passo) é utilizado para movimentar a amostra. Este sistema é controlado por um microcomputador, que, além de ler o *lock-in* e armazenar a amplitude e a fase, lê ainda a parte DC do sinal proveniente do fotodiodo de sinal, pois este é proporcional à refletância estática da amostra (no comprimento de onda do feixe de prova). Um conversor analógicodigital (STD, mod. AD850) é responsável pela leitura do *lock-in* e do fotodiodo. Uma placa controladora GPIB/IEEE liga o computador ao sistema de translação, ao conversor e ao gerador de áudio.

O sinal AC é proprocional à variação da refletância ΔR , enquanto o sinal DC é proporcional à refletância estática da amostra R (temperatura ambiente).

O experimento básico consiste em varrer a posição do feixe na amostra, podendose obter, desta maneira, o que chamamos de mapa térmico, pois mapeia-se regiões da amostra com temperatura e/ou propriedades térmicas distintas, para uma determinada frequência de modulação da corrente de alimentação e comprimento de onda do feixe de prova. O tempo de aquisição típico é de meia hora, podendo ser ainda maior dependendo do tamanho e da resolução desejados.

O limite desta técnica é dado pelo ruído de fótons. A relação sinal/ruído cresce com \sqrt{N} , onde N é o número de fotóns que atinge a superfície do fotodiodo. Este valor é aproximadamente 10^{-7} em $\Delta R/R$, supondo-se que 1mW chegue ao fotodiodo. Na prática, ruídos eletrônicos podem ser maiores que o ruído de fótons (da ordem de 10^{-6}), ou seja, a Microscopia Fototérmica de Reflexão permite medir variações de uma parte em um milhão na refletância da amostra.

2.2.2 Montagem com CCD 1

Esta montagem (Figura 2.22, disponível na ESPCI) consiste, basicamente, de um microscópio comercial, uma câmera CCD (charge coupled device, DALSA CA D1) e, para iluminar a amostra, uma uma fonte de luz branca (Olympus BH2-HLSH de 12V e 1000W) acoplada a um filtro LVF (Linear Variable Filter) da Edmund, que permite selecionar o comprimento de onda continuamente. Alguns nanômetros no comprimento de onda podem significar uma grande diferença em dR/dT, daí a vantagem desta montagem, que não permite entretanto a realização de medidas em alta freqüência. A Figura 2.20 mostra o esquema.

O principio de funcionamento é muito simples, sendo o dispositivo alimentado por um sinal modulado na freqüência F, sua superfície é uniformemente iluminada, e a variação na reflexão desta luz, causada pela variação de temperatura, será captada pela câmera CCD, que por sua vez é alimentada por um sinal de freqüência 4F. Com operações matemáticas simples entre 4 imagens defasadas de 90 graus, podemos obter a amplitude e a fase do



Figura 2.20: Esquema da montagem experimental de termo-refletância multiplexada com luz branca e filtro.

sinal [36], operações estas que serão descritas em detalhe na próxima seção. Para medir a fase absoluta do sinal, é necessário utilizar geradores (um para alimentar a amostra e outro para alimentar a câmera) que possam ser sincronizados, tendo sido utilizados, no caso, dois geradores Agilent 33502.

Esse sinal é armazenado em um microcomputador, que realiza as operações e apresenta os resultados de amplitude, fase e sinal DC. Para melhorar a relação sinal/ruído, faz-se uma acumulação de imagens. A duração de todo este processo é de apenas alguns minutos. A desvantagem é que se perdem duas ordens de grandeza na sensibilidade do experimento.

Para garantir que a superfície seja perpendicular à iluminação, utiliza-se uma lente Mirau, que funciona como um espectrômetro de Michelson, e através do número e da posição das franjas de interferência, pode-se alinhar a superfície em alguns minutos.

Além disso, a câmera CCD, neste caso, é bastante sensível. Cada um de seus pixels pode acumular até 250.000 elétrons (5 vezes mais que a próxima), ou seja, aproximada-

mente 250.000 fótons. A relação sinal/ruído é maior para esta câmera, porém ainda é bem menor que para a montagem do fotodiodo. Para contornar este fato, faz-se uma acumulação de 1000 imagens, o que leva apenas alguns minutos e melhora a relação sinal/ruído. De qualquer maneira, a montagem com laser é 100 vezes mais sensível. O sensor desta câmera contém 1024×1024 pixels, lembrando que, a área captada por cada pixel vai depender da objetiva utilizada no microscópio (tabela 2.2). Assim, a resolução espacial é melhor para esta câmera, devido ao maior número de pixels. Para esta câmera, a frequência máxima de aquisição de imagens é de 30Hz.

objetiva	área (μm^2)
$5 \times$	$3,\!24$
$10 \times$	0,774
$20 \times$	$0,\!0625$
$50 \times$	$0,\!0625$
$100 \times$	$0,\!0064$

Tabela 2.2: Tamanho do pixel da câmera Dalsa para cada objetiva do microscópio

2.2.3 Amplificador síncrono (lock-in) digital

A questão que se coloca neste ponto é a determinação da amplitude e da fase do sinal obtido através da câmera CCD. É necessário simular um amplicador síncrono (*lock-in*), ou seja, encontrar uma maneira de amplificar o sinal apenas na frequência de modulação da corrente e medir a defasagem deste sinal com relação a uma referência. Para isto vamos considerar um sinal senoidal e dividí-lo em quatro partes (Figura 2.21).

A integral de cada uma das partes é dada por:

$$S_1 = \int_0^\tau Asen(\omega t + \phi) = \frac{A}{\omega} \left[\cos(\phi) - \cos(\omega \tau + \phi) \right]$$
(2.3)

onde A é a amplitude do sinal, ω é a frequência angular de modulação, T o período de modulação e ϕ uma fase arbitrária.

$$S_2 = \int_{T/4}^{T/4+\tau} Asen(\omega t + \phi) = \frac{A}{\omega} \left[sen(\omega \tau + \phi) - sen(\phi)\right]$$
(2.4)

$$S_3 = \int_{T/2}^{T/2+\tau} Asen(\omega t + \phi) = \frac{A}{\omega} \left[cos(\omega \tau + \phi) - cos(\phi) \right]$$
(2.5)



Figura 2.21: Princípio de funcionamento do amplificador síncrono digital.

$$S_4 = \int_{3T/4}^{3T/4+\tau} Asen(\omega t + \phi) = \frac{A}{\omega} [sen(\phi) - sen(\omega \tau + \phi)]$$
(2.6)

Fazendo a subtração entre estes termos:

$$S_1 - S_3 = -\frac{2A}{\omega} \left[\cos(\omega \tau + \phi) - \cos(\phi) \right]$$
(2.7)

$$S_2 - S_4 = \frac{2A}{\omega} \left[sen(\omega\tau + \phi) - sen(\phi) \right]$$
(2.8)

Tomando o limite $\omega \tau \to 0 ~(\tau \ll T),$ estas diferenças se tornam:

$$S_1 - S_3 = 2A\tau sen(\phi) \tag{2.9}$$

$$S_2 - S_4 = 2A\tau \cos(\phi) \tag{2.10}$$

Com isto, podemos encontrar a amplitude A e a fase ϕ do sinal através de:

$$A = \frac{1}{2\tau} \sqrt{\left(S_1 - S_3\right)^2 + \left(S_2 - S_4\right)^2} \tag{2.11}$$

$$tg(\phi) = \frac{sen(\phi)}{\cos(\phi)} = \frac{S_1 - S_3}{S_2 - S_4}$$
(2.12)

Por outro lado, se a integração é feita para $\tau = T/4$, tanto a amplitude como a fase podem ser obtidas de forma similar. Neste caso, a fase fica deslocada de $\pi/4rad$, o que deve ser levado em conta no processamento dos dados.

2.2.4 Montagem com CCD 2

Esta montagem (Figura 2.22, também disponível na ESPCI) é quase idêntica à anterior. A diferença entre elas consiste, basicamente, na substituição da luz branca por um LED (light emiting diode).



Figura 2.22: Esquema da montagem experimental de termo-refletância multiplexada com LED.

A velocidade máxima de aquisição de imagens pela câmera (PCO PixelFly) é atingida

aos 40Hz, ou seja, a freqüência máxima de alimentação do circuito é de 10Hz. Para realizar medidas em alta freqüência, é necessário modular a corrente do led numa frequência ligeiramente diferente da alimentação do circuito e medir o batimento entre estes dois sinais [28], o que é chamado de heterodinagem. Infelizmente, não houve tempo hábil para realizar medidas desta maneira. Contudo, este princípio será descrito em detalhes na próxima seção.

Para variar o comprimento de onda nesta montagem, troca-se o led, já que existem vários disponíveis. Os utilizados estão descritos na tabela abaixo. Uma peça simples comporta 5 LED's, permitindo variar o comprimento de onda facilmente.

$\lambda(nm)$	Potencia(mcd)
450	2000
525	4500
590	5000
603	2000
637	2500
645	3500
660	3000
670	2500

Tabela 2.3: Comprimento de onda e potência dos LEDs utilizados

A resolução espacial da técnica nesta montagem é dada pelo número de pixels e pela objetiva do microscópio. O sensor desta câmera contém 640×480 pixels, a área captada por cada pixel vai depender da objetiva utilizada no microscópio. A tabela 2.4 ilustra estes valores:

objetiva	área (μm^2)
$5 \times$	$11,\!3$
$10 \times$	$2,\!66$
$20 \times$	$0,\!40$
$50 \times$	0,21
$100 \times$	0,025

Tabela 2.4: Tamanho da área coberta por um pixel da câmera PixelFly para cada objetiva do microscópio.

2.2.5 Princípio da heterodinagem

Ao alimentar o circuito com uma corrente senoidal modulada na frequência ω_1 (alta, da ordem de kHz ou MHz), podemos supor que a variação da temperatura terá a seguinte forma:

$$T(t) = T_0 + \Delta T sen \omega_1 t \tag{2.13}$$

onde T_0 é a temperatura ambiente.

A variação na refletância causada pela modulação de temperatura, por sua vez, é dada por:

$$R(t) = R_0 + \Delta R sen \omega_1 t \tag{2.14}$$

onde R_0 é a refletância estática da amostra.

Ao alimentar o LED com uma corrente senoidal modulada na frequência ω_2 (também alta, da ordem de kHz ou MHz) de forma que a diferença entre ω_1 e ω_2 não ultrapasse os 10 Hz (limite da camêra), a intensidade do feixe de prova assumirá a seguinte forma:

$$I(t) = I_0 sen\omega_2 t \tag{2.15}$$

A intensidade refletida pela amostra pode ser obtida multiplicando-se a equação 2.14 pela 2.15:

$$I_R(t) = R(t)I(t) = R_0 I_0 sen \omega_2 t + \Delta R I_0 sen \omega_1 t sen \omega_2 t$$
(2.16)

Como:

$$sen\omega_1 tsen\omega_2 t = \frac{1}{2} [\cos(\omega_1 - \omega_2)t - \cos(\omega_1 + \omega_2)t]$$

$$(2.17)$$

Temos que:

$$I_R(t) = R_0 I_0 sen\omega_2 t + \frac{\Delta R I_0}{2} [\cos(\Delta \omega t)] - \frac{\Delta R I_0}{2} [\cos(\omega_1 + \omega_2)t]$$
(2.18)

onde $\Delta \omega$ é a diferença entre $\omega_1 \in \omega_2$.

Nota-se que o segundo termo da equação 2.18 é diretamente proporcional a ΔR e se encontra numa frequência de modulação baixa (dada pela diferença entre as frequências do circuito e do LED) e pode então ser captado pela câmera CCD, utilizando-se do esquema do *lock-in* digital, para obter amplitude e fase.

Capítulo 3

Apresentação e Discussão dos Resultados Experimentais

3.1 Resultados Experimentais

No capítulo anterior, as montagens experimentais utilizadas foram descritas em detalhe. A metodologia adotada para a realização das medidas constou da fixação de uma freqüência de modulação e da realização do experimento em um determinado comprimento de onda, repetindo-se este procedimento para vários comprimentos de onda. Desta maneira, pudemos investigar a interferência opto-térmica.

Com a montagem com laser, utilizamos freqüências de centenas de kHz. Já com as montagens com CCD, a maior freqüência utilizada foi de 10Hz.

Considerando que tanto os LED's como a lâmpada não emitem a mesma potência para cada comprimento de onda, dividimos sempre a amplitude pelo sinal DC ($\Delta R/R$) para possibilitar a comparação das medidas.

Já para a montagem com fotodiodo, a potência luminosa utilizada na superfície da amostra foi de alguns miliwats, para o laser de Ar^+ , e de dezenas de microwats, para o diodo laser.

Realizamos medidas em alguns chips: fototérmica 2, fototérmica 3 e CCS. Estes resultados serão relatados a seguir.

3.1.1 Resultados obtidos nos Chips Fototérmica

Chip Fototérmica 2

Com o intuito de encontrar o comprimento de onda ideal para estas medidas, ou seja, o comprimento de onda para o qual o sinal fototérmico é maximizado, realizou-se, na ESPCI,

o espectro das trilhas de silício policristalino. Para isto, iluminamos a amostra com luz branca e posicionamos um espectrômetro (AvaSpec 1024) na ocular do microscópio. Para obter diretamente o espectro de reflexão, é realizada uma medida sobre um espelho de alumínio, o que fornece o espectro da lâmpada. Este será então o espectro de referência que o programa Avasoft utiliza para calcular o espetro de reflexão.

Este estudo espectral descrito anteriormente foi realizado para as estruturas 5 (Poly1) e 8 (Poly2) do chip Fototérmica 2. Ambas são trilhas de polissilício, mas têm espessuras diferentes, $0, 42\pm 0, 03\mu m$ e $0, 27\pm 0, 02\mu m$ respectivamente. Observava-se que os máximos de sinal coincidiam com os máximos ou mínimos dR/d λ . Por este motivo, os comprimentos de onda candidatos a ótimo (extremos de dR/d λ) foram diferentes em cada caso: 525, 536, 578, 593, 609, 640, 646 e 659nm, para a estrutura 5, e 545,5, 563, 580, 602,5, 692 e, 709nm, para a estrutura 8. Fizemos medidas nestes comprimentos e também medidas em comprimentos de onda disponíveis no GFRM, em Campinas (488, 514,5, 632,8 e 670nm), para permitir a comparação entre os dois métodos de medida. As Figuras 3.1 e 3.2 apresentam os resultados obtidos para as estruturas 5 (Poly1) e 8 (Poly2) em 632,8 nm, utilizando a montagem com CCD 1.



Figura 3.1: (a)Amplitude do sinal de termo-refletância em u.a. (b) Fase do sinal de termo-refletância em graus. Área de $135\mu m \times 135\mu m$, amplitude de 2V e freqüência de modulação de 1,0 Hz, comprimento de onda 632,8 nm, lente 50X. Estrutura 5.

Um fato interessante pode ser aqui observado: enquanto a fase muda de 180 graus ao trocar de camada, a fase do sinal no substrato continua a mesma. Lembremos que as camadas de poli-Si têm espessuras diferentes, a primeira $0,42\mu m$ e a segunda $0,27\mu m$, e,



Figura 3.2: (a)Amplitude do sinal de termo-refletância em u.a. (b) Fase do sinal termorefletância em graus. Área de $135\mu m \times 135\mu m$, amplitude de 2V e freqüência de modulação de 1,0 Hz, comprimento de onda 632,8 nm, lente 50X. Estrutura 8.

além disso, a camada de óxido de silício sobre estas camadas também é diferente, daí resultando a diferença espectral. O comprimento de onda ótimo encontrado para a camada de Poly1 foi de 593nm, enquanto que para a camada de Poly2, foi de 545nm.

A Figura 3.3 ilustra $\Delta R/R$, normalizado pelo valor em 623,8nm, obtido para as duas resistências em função do comprimento de onda em 1Hz.

Foram também realizadas medidas em 5,0 Hz e verificou-se que $\Delta R/R$ é um pouco menor na resistência que na medida em 1Hz.

A porta dos transistores é composta pela camada de Poly1. Realizamos medidas nos transistores no comprimento de onda ótimo para o Poly1 e não obtivemos sinal. Observamos então que a coloração dos transistores era diferente das resistências e fizemos o espectro, constatando a diferença. Mesmo realizando medidas no comprimento de onda ótimo para o transistor, o sinal obtido foi muito pequeno. É sabido que o sinal fototérmico em transistores MOS (com gate de poli-silício) é cerca de duas ordens de grandeza menor que em trilhas de poli-silício [37]. A menor sensibilidade da montagem com a CCD está provavelmente limitando a detecção do sinal nos transistores.



Figura 3.3: $\Delta R/R$ normalizado em função do comprimento de onda para as trilhas de poly1(círculos) e poly2 (quadrados) para frequência de 1Hz.

Chip Fototérmica 3

Como não foi possível realizar o estudo espectral no chip Fototémica 3⁻¹, fizemos medidas nas estruturas 5 (Poly1) e 9 (Poly2), que são equivalentes às estruturas estudadas no chip Fototérmica 2, repetindo os comprimentos de onda utilizados anteriormente.

A Figura 3.4 apresenta uma medida na estrutura 5 em 488nm. Surpreendentemente, os resultados obtidos nesse e nos outros comprimentos de onda analisados (514, 532, 545, 562, 580, 592, 602, 633, 648, 670, 692nm) foram bastante diferentes dos obtidos com o chip Fototémica 2. $\Delta R/R$ manteve-se praticamente constante, em torno de 3, 5 × 10⁻³, com exceção da medida em 562nm, cujo sinal foi de 1, 5 × 10⁻³. Neste comprimento de onda, pode-se visualizar o aquecimento do substrato, também verificado com a estrutura 9, fato ilustrado na Figura 3.5.

A Figura 3.6 apresenta um corte transversal das trilhas de silício poli-cristalino, mostrando a disposição de cada camada destas estruturas. A tabela 3.1 traz a espessura média de cada camada, bem como sua variação, para as trilhas de Poly1 e Poly2. As variações de cada camada somadas causam a diferença na resposta fototérmica, já que esta é influenciada pela interferência óptica e as camadas superiores ao silício poli-cristalino

¹Durante a estadia na ESPCI, a lente do espectômetro foi danificada e não foi consertada a tempo.



Figura 3.4: (a)Amplitude do sinal de termo-refletância em u.a. (b) Fase do sinal termorefletância em graus. Área de $135\mu m \times 135\mu m$, amplitude de 2V e freqüência de modulação de 1,0 Hz, comprimento de onda 488 nm, lente 50X. Estrutura 5.



Figura 3.5: (a)Amplitude do sinal de termo-refletância em u.a. (b) Fase do sinal termorefletância em graus. Área de $135\mu m \times 135\mu m$, amplitude de 2V e freqüência de modulação de 1,0 Hz, comprimento de onda 562 nm, lente 50X. Estrutura 9.

são transparentes na faixa de comprimento de onda estudada.

Devido a essas variações, que são inerentes ao processo de fabricação, cada estrutura de cada chip poderá apresentar uma resposta fototérmica diferente, o que torna necessário o estudo espectral para encontrar o comprimento de onda ideal para as medidas. Outra possibilidade é desenvolver um programa de simulação para tentar encontrar o compri-



Figura 3.6: Corte transversal das trilhas de silício poli-cristalino dos chips fototérmica. (1) nitreto de silício, (2) óxido de silício, (3) silício poli-cristalino, (4) óxido de silício e (5) substrato Si-p.

Camada	Poly1	Poly2
Si_3N_4	$1,0\pm0,1\mu m$	$1,0\pm0,1\mu m$
SiO_2	$1,7\pm0,3\mu m$	$1,65\pm0,3\mu m$
Poli - Si	$0,42\pm0,03\mu m$	$0,27\pm0,02\mu m$
SiO_2	$0,54\pm0,04\mu m$	$0,55\pm0,05\mu m$

Tabela 3.1: Espessura de cada camada nas trilhas de silício policristalino dos chips fototérmica. Dados fornecidos pelo fabricante AMS.

mento de onda ideal sem a necessidade do estudo espectral. No entanto, vemos que mesmo estas estruturas, que são as mais simples dos chips fototérmica, contêm muitas camadas. Além disso, as propriedades térmicas e ópticas não são divulgadas pelo fabricante, por serem consideradas segredo industrial. Diante destes fatos, é praticamente impossível desenvolver um programa de simulação confiável, o que nos levou a estudar um chip com estruturas ainda mais simples. Neste caso foi possível desenvolver um modelo teórico e, em consequência, um programa de simulação que é apresentado na seção 3.2.

3.1.2 Resultados obtidos no chip CCS

Inicialmente tentamos fazer medidas com a montagem com CCD 2 na menor resistência (a de 200 μm de comprimento), utilizando todos os led's disponíveis (Tabela 2.3), mas não obtivemos sinal nem mesmo para a maior voltagem fornecida pelo gerador Agilent (5V). Como veremos a seguir, este fato ocorreu devido à limitação no comprimeto de onda, problema que foi solucionado utilizando a montagem 1 que permite variar λ continuamente.

Com o intuito de encontrar o comprimento de onda ideal para estas medidas, realizouse o espectro da amostra mostrado na Figura 3.7. Para isto, utilizamos o mesmo procedimento descrito na seção anterior.



Figura 3.7: Espectro de reflexão do resistor CCS.

A camada de Si policristalino é semitransparente, o que causa interferência entre o feixe refletido na interface poli-Si/ar e os refletidos nas interfaces inferiores (ver Figura 2.16) e por este motivo, observamos oscilações no espectro. Note-se que estas oscilações são atenuadas para pequenos comprimentos de onda, tornando o coeficiente de reflexão mais suave nesta região, o que indica uma maior absorção pelo polissilício.

Foi feito também o espectro do substrato (Figura 3.8), no qual podemos notar algumas oscilações causadas pela fina camada de óxido de silício. A espessura do óxido é de 0,5 μm e podemos observar um mínimo por volta de 620nm e dois máximos por volta de 520

e 780nm. Esta mesma forma pode ser observada como envelope na Figura 3.7, devido ao fato de que, mesmo quando obtivemos o espectro da resistência, grande parte da luz coletada pelo espectrômetro é proveniente do substrato.



Figura 3.8: Espectro de reflexão do substrato do chip CCS.

Empiricamente, sabe-se que a derivada do coeficiente de reflexão com relação à temperatura (dR/dT) se assemelha à devivada do mesmo com relação ao comprimento de onda (dR/d λ) e por este motivo, sabe-se que o comprimento de onda ótimo encontra-se próximo à meia altura entre os máximos e mínimos do espectro de reflexão.

Realizamos medidas com a montagem 1 nos seguintes comprimentos de onda: 596, 604, 615, 626, 640, 650, 665, 676, 705 e 725 nm. Utilizando uma onda quadrada a 7,5 Hz com 3V de amplitude, obtivemos sinal em todos os comprimentos de onda citados. Contudo, o maior valor de $\Delta R/R$ foi obtido para 650nm, resultado apresentado na Figura 3.9.

Comparando com a simulação (Figura 2.18, página 52), constata-se que o resultado é coerente, ou seja, que a temperatura é maior no centro da trilha e vai decaindo até as bordas. No resultado experimental observa-se que a temperatura diminui no contato com o metal, pois este funciona como um escoador de calor. No entanto, os *pad's* não



Figura 3.9: (a) Componente DC do sinal de termo-refletância (b) Amplitude do sinal de termo-refletância em u.a. (c) Fase do sinal termo-refletância em graus, verde = zero (d) $\Delta R/R$, $S_{max} = 0,028$. Área de $70\mu m \times 70\mu m$, freqüência de modulação de 10Hz, comprimento de onda 650nm, lente $100 \times$.

foram levados em consideração na simulação. A Figura 3.10 mostra os valores médios de $\Delta R/R$ (numa região de $1\mu m^2$ sobre a trilha) para o menor resistor do chip CCS, para cada comprimento de onda estudado.

A Figura 3.11 apresenta uma comparação entre $dR/d\lambda$ e $\Delta R/R$. $dR/d\lambda$ foi obtido derivando-se numericamente o espectro de reflexão e os pontos experimentais foram normalizados pelo valor desta curva em 650nm. Observa-se uma boa concordância entre a curva e os valores experimentais.

Foram realizadas medidas também nos comprimentos de onda ótimos possíveis para o substrato: 570 e 680nm. No entanto, para estes comprimentos de onda, o valor do sinal na resistência ainda é muito alto, o que dificulta a visualização da propagação do



Figura 3.10: $\Delta R/R$ para resistor de poli-Si em função do comprimento de onda. Freqüência de modulação de 7,5 Hz.

calor para o substrato. Este efeito só pode ser observado através do gráfico da fase (não mostrado), já que a amplitude é fortemente atenuada.

Tendo encontrado o comprimento de onda adequado, realizou-se medidas nesta amostra com a montagem com CCD 2. Modificando a corrente de alimentação do LED, podese modificar ligeiramente o comprimento de onda, sendo então possível obter-se 650nm com o LED de 645. Como, entretanto, a potência aumenta, podendo saturar a câmera, adicionam-se filtros para contornar a situação. Mesmo desta maneira, só conseguimos visualizar o aquecimento desta resistência aumentando a amplitude de modulação para 10V.

Também foram realizadas medidas com a montagem do GFRM nesta amostra. Nesta série, a frequência de modulação foi de 100kHz e a tensão de alimentação de 10V, utilizando a lente de $20 \times$. A Figura 3.12 ilustra estes resultados, comparados com os obtidos anteriormente.

Observa-se que o sinal obtido no intervalo de 596-725nm é uma ordem de grandeza maior que o obtido com linhas do laser de argônio. Isto acontece provavelmente porque a trilha absorve uma maior quantidade de luz à medida que o comprimento de onda decresce. Note-se que os valores de 665 e 670 nm são da mesma ordem de grandeza, apesar



Figura 3.11: Comparação entre $dR/d\lambda \in \Delta R/R$ para resistor de poli-Si.

de terem sido obtidos em condições experimentais bastante diferentes.

Efeito Peltier

Em geral, utilizamos uma onda quadrada para alimentar os dispositivos, o que gera uma componente devido ao aquecimento Joule na freqüência de modulação. Era essa componente que vínhamos medindo até agora. No entanto, ao utilizar uma onda senoidal, o efeito Joule manifesta-se apenas no segundo harmônico (2F), já que depende da corrente ao quadrado e desta maneira pode-se visualizar o efeito Peltier em F. Este efeito é o recíproco ao efeito Seebeck e ambos são chamados efeitos termo-elétricos [38], ele ocorre nas junções entre materiais, já que a passagem de corrente elétrica causa uma diferença de temperatura nestes locais.

Foram realizadas medidas com a menor resistência do chip CCS, utilizando como alimentação uma onda senoidal, com 6V de amplitude e frequência de 1 Hz. A Figura 3.13 ilustra o resultado obtido para 650nm.

A amplitude deste sinal é muito menor que a do efeito Joule, mas podemos observá-lo nitidamente no gráfico de fase (Figura 3.13b). Uma extremidade do resistor apresenta fase



Figura 3.12: Valores absolutos de $\Delta R/R$ obtidos no GFRM (círculos abertos) e na ESPCI (círculos fechados) em função do comprimento de onda. Os valores foram normalizados para uma corrente de 10 mA. Em destaque, as medidas de 665nm e 670nm obtidas com montagens e condições experimentais diferentes.

de 90 graus, enquanto que na outra a fase é de -90 graus, ou seja, uma diferença de 180 graus. A fase do efeito Joule, de uma extremidade à outra, era zero para este comprimento de onda. O efeito Peltier é reversível, bastando inverter o sentindo da corrente para inverter a temperatura das extremidades, fato que foi verificado em nosso experimento. Estes dois dados aliados confirmam que se trata efetivamente do efeito Peltier.

3.2 Modelo Teórico

Para melhor compreender a interferência opto-térmica, desenvolvemos um modelo teórico que levasse em consideração as reflexões nas múltiplas interfaces e a influência da temperatura neste processo para o chip do CCS.

Sendo assim, o modelo téorico desenvolvido para analisar a resposta de termo-refletância é baseado na modulação térmica da refletância que resulta das múltiplas reflexões do feixe



Figura 3.13: (a) Amplitude do sinal de termo-refletância em u.a. (b) Fase do sinal termorefletância em graus. Área de $135\mu m \times 135\mu m$, freqüência de modulação de 10Hz, onda senoidal, comprimento de onda 650nm, lente $50 \times$.

de prova numa estrutura estratificada. Esta modulação se dá em virtude da dependência, em relação à temperatura, dos índices de refração dos materiais, bem como da variação de espessura de cada camada, causada pela expansão térmica.



Figura 3.14: Esquema de modelo teórico envolvendo 4 camadas.

Foi desenvolvido um programa de simulação para calcular o espectro de reflexão, no qual as entradas são os índices de refração (para cada comprimento de onda) e a espessura das camadas intermediárias (consideramos o ar e o substrato semi-infinitos).

Primeiramente, tentamos reproduzir o espectro de reflexão, sem influência da temperatura, para o substrato recoberto por sílica e para a estrutura completa (duas camadas sobre o substrato). O modelo leva em consideração quatro meios: ar, silício policristalino, sílica e o substrato de silício (ar e substrato semi-infinitos), como no chip do CCS (Figura 3.14). Por questões de simplificação, o índice de refração do ar foi fixado ($n_1 = 1$, para todo o intervalo de comprimento de onda) e considerado independente da temperatura. Os índices de refração (n e k) para o silício foram obtidos das referências [39, 40], sendo que para o silício policristalino e para o óxido de silício foram utilizadas medidas elipsométricas realizadas na ESPCI, de 500nm a 800nm de 1 em 1 nm (valores interpolados). Os valores de n variaram de 4,2 a 3,7 para o silício policristalino, enquanto k variou de 0,13(500nm) a 0,006(800nm). Para o silício cristalino, n varia de 4,3 a 3,7, enquanto k vai de 0,023 a 0,006. Os valores de n para o óxido de silício idecresceram de 1,462 para 1,453, obedecendo à fórmula de Cauchy [41]. A Figura 3.15 ilustra estes dados.

A refletância do sistema de quatro meios foi calculada para incidência normal, R, é dada por:

$$R = \hat{r}^* \hat{r} \tag{3.1}$$

onde r é o coeficiente de reflexão de Fresnel, dado pela razão entre a amplitude do campo elétrico refletido E'_1 e a incidente E_1 (como assumimos incidência normal, as polarizações s, perpendicular, e p, paralela, são equivalentes. Na realidade, foi utilizada luz circularmente polarizada na montagem com laser e não polarizada com a câmera CCD):

$$\hat{r} = \frac{E_1'}{E_1} \tag{3.2}$$

O campo elétrico incidente e refletido no meio 1 está relacionado ao transmitido no meio 4 (E_4) através da equação matricial abaixo[42]:

$$\begin{pmatrix} E_1 \\ E'_1 \end{pmatrix} = C_1 C_2 C_3 \begin{pmatrix} E_4 \\ 0 \end{pmatrix}$$
(3.3)

onde C é a matriz que representa cada interface dada por:

$$C_{m} = \frac{1}{t_{m,m+1}} \begin{pmatrix} e^{-\frac{i}{2}\beta_{m}} & r_{m,m+1}e^{-\frac{i}{2}\beta_{m}} \\ r_{m,m+1}e^{\frac{i}{2}\beta_{m}} & e^{\frac{i}{2}\beta_{m}} \end{pmatrix}$$
(3.4)

onde $r_{m,m+1}$ é o coeficiente de reflexão de Fresnel na interface entre os meios m e m + 1, dado por:

$$r_{m,m+1} = \frac{n_m - n_{m+1}}{n_m + n_{m+1}}$$



Figura 3.15: (a) Parte real (n) e (b) imaginária (k) dos índices de refração do silício cristalino (linha cheia), policristalino (linha tracejada) e da sílica (linha pontilhada).

 $t_{m,m+1}$ é o coeficiente de transmissão de Fresnel na interface entre os meios m e m + 1, dado por:

$$t_{m,m+1} = \frac{2n_m}{n_m + n_{m+1}}$$

e
 β é a fase da onda eletromagnética introduzida pela camada
m, dada por:

$$\beta_m = \frac{4\pi d_m n_m}{\lambda}$$

onde n_m é o índice de refração complexo do meio m e d_m a espessura do mesmo e λ é o comprimento de onda da luz incidente no vácuo (ar).



Figura 3.16: Comparação entre a refletância medida (círculos abertos) e calculada para SiO_2 sobre substrato de Si para três espessuras, 525nm (linha tracejada), 530nm (linha cheia) e 535nm (linha pontilhada).

A Figura 3.16 apresenta a comparação entre o espectro de reflexão medido e o calculado para o substrato recoberto por sílica. A espessura nominal é de $0, 5\mu m$, mostramos os valores calculados para 525, 530 e 535 nm, pois nessa faixa encontramos maior proximidade com os resultados experimentais (círculos abertos) e observa-se que a curva de 530nm (linha cheia) é a que melhor se ajusta aos dados. Como não foi utilizado nenhum fator de ajuste, a proximidade entre o experimento e os cálculos é muito satisfatória.

Da mesma maneira, a refletância da estrutura completa, incluindo a trilha de polisilício (1600nm de espessura nominal), foi calculada e é mostrada na Figura 3.17 (linha tracejada). A alta frequência espacial, observada anteriormente no resultado experimental obtido na trilha, está claramente presente na curva numérica. O número correto de picos e suas posições são determinados pela espessura da camada de silício policristalino. Com a espessura de 1600nm, obtivemos o melhor acordo entre teoria e experimento. Observa-se também que a amplitude das oscilações diminue para comprimentos de onda pequenos. A distância entre a curva teórica e a experimental é devida ao fato de que a refletância medida é uma média entre as reflexões ocorridas na trilha e no substrato adjacente (coberto por SiO_2). Isto ocorre porque a óptica do espetrômetro coleta luz de uma região maior que a área da trilha, mesmo utilizando a lente de $100 \times$. Portanto, para comparar com o experimento, é necessário estimar a proporção entre as duas contribuições e aplicá-la sobre a curva numérica. A proporção estimada entre as áreas da trilha e do substrato sob inspeção do espectrômetro é 20% e 80%, respectivamente. Tendo feito isto, obtivemos a curva cheia, que concorda muito bem com o experimento. O acordo quantitativo é bem razoável, considerando outros apectos não-ideais como: a borda da trilha, a não-uniformidade da espessura da camada, os valores das constantes ópticas, a incidência oblíqua do feixe de prova, etc.

Uma vez feita a modelagem da refletância, o próximo passo é adicionar o efeito da temperatura. Isto deve ser feito exclusivamente na trilha, ou seja, sem considerar perturbações advindas da vizinhança, já que os dados de termo-refletância ($\Delta R/R$) foram coletados apenas no centro do resistor. Todas as montagens experimentais envolvidas possuem resolução submicrométrica, permitindo escolher o sinal de uma determinada região central da trilha. Portanto, a refletância da camada de silício policristalino necessita ser recalculada, introduzindo-se a modulação causada pela temperatura.

Segundo a equação 1.2, sabe-se que a dependência de $\Delta R/R$ com o comprimento de onda é devida ao coeficiente da refletância $(1/R)(\partial R/\partial T)$. Para computar este coeficiente, a refletância foi calculada na temperatura ambiente T, como foi apresentado anteriormente, e então recalculada na temperatura $T + \Delta T$. A razão $\Delta R/\Delta T$ se iguala à derivada $\partial R/\partial T$ no limite de pequenos valores de ΔT :

$$\frac{\partial R}{\partial T} = \frac{\Delta R}{\Delta T} = \frac{R(T + \Delta T) - R(T)}{\Delta T}$$
(3.5)

A refletância $R(T + \Delta T)$ foi calculada utilizando valores de $\hat{n}_m(T + \Delta T)$ e $d_m(T + \Delta T)$ dados por:

$$\hat{n}_m(T + \Delta T) = \hat{n}_m(T) + \frac{\partial \hat{n}_m}{\partial T} \Delta T$$
(3.6)

$$d_m(T + \Delta T) = d_m(T) \left(1 + \alpha_{Tm} \Delta T\right) \tag{3.7}$$



Figura 3.17: Comparação entre a refletância medida (círculos abertos) e calculada (linha tracejada) para trilha de silício policristalino, a linha pontilhada é a curva calculada para SiO_2 sobre substrato de Si e a curva cheia é a combinação entre as calculadas que mais se aproxima dos dados experimentais (20% trilha e 80% substrato).

Nas equações acima $(\partial \hat{n}_m/\partial T) = (\partial n_m/\partial T + i\partial k_m/\partial T)$ é o coeficiente de temperatura do índice de refração complexo, e α_{T_m} o coeficiente de expansão térmica do material m. Os valores de $(\partial n/\partial T)$ e $(\partial k/\partial T)$ para o silício cristalino foram encontrados nas referências [43, 39, 40, 44], e como não encontramos os valores para o silício policristalino, foram utilizados os dados citados anteriormente. Eles variam de $(\partial n/\partial T) = 2,9 \times 10^{-4} K^{-1}$ e $(\partial k/\partial T) = 2,2 \times 10^{-4} K^{-1}$ em 500nm, para $(\partial n/\partial T) \cong (\partial k/\partial T) = 6,1 \times 10^{-5} K^{-1}$ em 800nm. Já o valor do coeficiente de expansão térmica utilizado para o polisilício foi $\alpha_T = 2,6 \times 10^{-6} K^{-1}$ [45]. Os cálculos foram estendidos até 450nm para cobrir a faixa de medidas realizadas com as linhas do laser de argônio.

Em todos os cálculos, a variação da temperatura foi considerada uniforme em todas as interfaces, ou seja, o gradiente de temperatura foi negligenciado. Lembremos que a fonte de calor está localizada na camada de silício policristalino. Abaixo desta camada, a amplitude da oscilação de temperatura (onda térmica) decresce aproximadamente com o fator $e^{-d/\mu}$, onde d é a distância da trilha (fonte de calor) e μ é o comprimento de difusão térmica (vide Capítulo 1). Os valores de μ , segundo a literatura [46], são:



Figura 3.18: Comparação entre $\Delta R/R$ medido com laser (círculos abertos) e com câmera CCD (círculos fechados) e $(1/R)\partial R/\partial \lambda$ para trilha de silício policristalino.

 $\mu_{Si}(100 \, kHz) = 16 \, \mu m$ e $\mu_{SiO_2}(100 \, kHz) = 1, 6 \, \mu m$, que são suficientemente grandes quando comparados às espessuras das camadas, garantindo portanto a pertinência da suposição de temperatura uniforme.

A Figura 3.19 (a) ilustra a curva calculada para $\Delta R/\Delta T$. Assim como nas medidas de termorefletância, ela apresenta um padrão oscilatório que é atenuado em comprimentos de onda pequenos. Já a Figura 3.19 (b) apresenta o coeficiente $(1/R)\partial R/\partial T$ com os dados experimentais de $\Delta R/R$ normalizados, de maneira a otimizar o ajuste com a curva calculada. Note que $\Delta R/R$ e $(1/R)\partial R \partial T$ estão conectados através da variação de temperatura ΔT (equação 1.2), e assim o valor de ΔT foi ajustado para encontrar o melhor acordo entre teoria e experimento.

Observa-se que, apesar das simplificações do modelo (incidência normal, temperatura uniforme) e dos erros inerentes aos parâmetros empregados (índices de refração e suas derivadas com relação à temperatura, espessuras, coeficiente de expansão térmica), a teoria descreve muito bem os dados experimentais. A curva calculada indica, entretanto, que os máximos do sinal de termorefletância não coincidem com os máximos de $(-1/R)\partial R/\partial \lambda$ (Figura 3.18), como se imaginava anteriomente. Na realidade, os máximos calculados encontram-se em comprimentos de onda levemente maiores, e desta forma os pontos medidos não coincidem com os picos da curva calculada. Em outras palavras, a escolha do comprimento de onda do feixe de prova pode ser feita de forma a melhorar ainda mais a resposta fototérmica.

Por questões de comparação, a curva teórica calculada de $(-1/R)(dR/d\lambda)$ é mostrada na Figura 3.20, juntamente com (1/R)(dR/dT), onde pode-se perceber o deslocamento citado acima. A conexão entre (dR/dT) e $(dR/d\lambda)$ é devida ao fato de que o aumento da temperatura resulta num aumento do caminho óptico $(n_i d_i)$ nas camadas superiores. Visto que os picos de interferência são determinados pela razão $(n_i d_i/\lambda)$, não é difícil notar que um aumento do caminho óptico tem um efeito similar ao de uma diminuição no comprimento de onda λ . Consequentemente, existe um comportamento análogo entre (dR/dT) e $(-dR/d\lambda)$, entretanto pequenas discrepâncias vêm de diferenças distintas na dependência com a fase $\hat{\beta}$, com $(n_i d_i)$ e com λ , bem como do fato de que os próprios índices de refração influenciam a refletância através dos coeficientes de Fresnel \hat{r} e \hat{t} .

Por fim, pode-se dizer que o sinal de termorefletância em estruturas e componentes microeletrônicos é fortemente dependente do comprimento de onda do feixe de prova, especialmente quando a parte superior é parcial ou totalmente transparente. Neste caso, a interferência óptica, que é termicamente modulada, tem um papel decisivo na resposta fototérmica. A escolha apropriada do comprimento de onda do feixe de prova pode aumentar significativamente a sensibilidade da técnica. No caso estudado acima, a camada de silício policristalino definiu o padrão de interferência, ou seja, a frequência espacial foi definida pela espessura óptica e a forte absorção deste material em comprimentos de onda curtos impôs a atenuação do padrão oscilatório e a perda de sensibilidade nesta faixa de comprimento de onda, como observado nos experimentos.



Figura 3.19: (a) $\Delta R/\Delta T$ calculado em função do comprimento de onda (b) Comparação entre $\Delta R/R$ medido com laser (círculos abertos) e com câmera CCD (círculos fechados) e $(1/R)\partial R/\partial T$ para trilha de silício policristalino.



Figura 3.20: $(-1/R)\partial R/\partial \lambda$ calculado em função do comprimento de onda (linha tracejada) e $(1/R)\partial R \partial T$ (linha cheia) para trilha de silício policristalino.

Capítulo 4

Conclusões e perspectivas

No primeito capítulo, foi mostrado um panorama geral das técnicas fototérmicas empregadas na caracterização de dispositivos semicondutores, destacando-se os aspectos teóricos da absorção de luz modulada por um semicondutor e comparando-se com exemplos experimentais. A Microscopia Fototérmica de Reflexão tem a vantagem de não necessitar de contato, de realizar esta caracterização localmente e de possibilitar o aumento da sensibilidade, variando-se o comprimento de onda do feixe de prova.

No segundo capítulo, detalhamos as amostras utilizadas, inclusive o projeto de um chip desenvolvido especialmente para este trabalho, bem como as montagens experimentais, explicitando as diferenças (vantagens e desvantagens) entre cada uma delas.

No terceiro capítulo, apresentamos os resultados experimentais obtidos na série de chips 'fototérmica' e no chip produzido pelo CCS. Para este último, foi desenvolvido um modelo teórico baseado em múltiplas reflexões que, apesar das aproximações, descreve muito bem os resultados experimentais.

Enfim, neste trabalho apresentamos os resultados experimentais e numéricos do sinal de termo-refletância em função do comprimento de onda do feixe de prova para estruturas microeletônicas. Os experimentos foram realizados em dois esquemas experimentais, chamados de CCD e laser, varrendo de 450nm a 750nm, aproximadamente. Utilizando um modelo termo-óptico, mostramos que as constantes ópticas dos materiais, que dependem do comprimento de onda, assim como suas derivadas com relação à temperatura (dn/dT) e dk/dT, influenciam fortemente o sinal de termorefletância. Um padrão oscilatório é observado na região em que a camada superior é transparente, que ocorre devido à interferência causada pelas múltiplas reflexões nas interfaces. O caminho óptico destas camadas, determinado, principalmente, pela parte real do índice de refração, define o período das oscilações. Por outro lado, a parte imaginária do índice determina a região do espectro onde ocorrerão essas oscilações. Abaixo de um certo comprimento de onda, a luz de prova não penetra no material e o sinal é dominado pela camada superior. Como perspectiva a partir da realização deste trabalho, fica a extensão do modelo para as camadas de silício policristalino dos chips fototérmica, num primeiro momento. No entanto, esta série de chips permite ainda o estudo de interferência opto-térmica de estruturas de outros materiais, bem como outras linhas de pesquisa: o estudo de defeitos; de fontes e distribuição de calor e de componentes ativos (sugeridas no Capítulo 2).

Por fim, mostrou-se que esta técnica pode ser aplicada para monitorar processos de fabricação e/ou de tratamento de semicondutores, alertando-se para o fato de que, para estruturas com muitas camadas, é necessário conhecer as propriedades ópticas e térmicas das mesmas ou realizar um estudo prévio para encontrar condições de trabalho ideais.

Apêndice A

Transformada de Hankel

A transformada de Hankel [47] é uma transformação análoga à de Fourier, para problemas com simetria cilíndrica, definida por

$$\tilde{T}(p,z) = \int_{0}^{\infty} r J_0(pr) T(r,z) dr$$
(A.1)

onde J_0 é a função de Bessel de ordem zero.

A transformação inversa é dada por

$$T(r,z) = \int_{0}^{\infty} p J_0(pr) \tilde{T}(p,z) dp$$
(A.2)

A equação de difusão em coordenadas cilíndicas para um meio sem fontes de calor (equação homogênea), tem a seguinte forma

$$\nabla^2 T(r, \theta, z) = \sigma^2 T(r, \theta, z) \tag{A.3}$$

No entanto, se o problema tem simetria cilíndrica, a distribuição de temperatura não depende de θ .

$$T(r, \theta, z) = T(r, z)$$

O laplaciano em coordenadas cilíndricas tem a seguinte forma

$$\nabla^2 T(r,\theta,z) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}$$

Mas, fazendo uso, mais uma vez, da simetria cilíndrica

$$\nabla^2 T(r,z) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}$$

Utilizando-se A.2, a derivada parcial da temperatura com relação a r é

$$\frac{\partial T}{\partial r} = \int_{0}^{\infty} p dp \tilde{T}(p, z) \frac{d}{dr} J_{0}(pr)$$

Aplicando a regra da cadeia, obtemos

$$\frac{d}{dr}J_0(pr) = pJ_0'(pr)$$

mas a derivada da função de Bessel de ordem zero pode ser escrita como [48]

$$J_0'(x) = -J_1(x)$$

 $\mathbf{Portanto}$

$$\frac{d}{dr}J_0(pr) = -pJ_1(pr)$$

Encontramos então

$$\frac{\partial T}{\partial r} = \int_{0}^{\infty} (-p)pdp\tilde{T}(p,z)J_{1}(pr)$$

Necessita-se também de

$$\frac{\partial}{\partial r}(r\frac{\partial T}{\partial r}) = \int_{0}^{\infty} (-p)pdp\tilde{T}(p,z)\frac{d}{dr}(rJ_{1}(pr))$$

Tomando-se a derivada do produto e novamente a regra da cadeia

$$\frac{d}{dr}(rJ_1(pr)) = J_1(pr) + pJ_1'(pr)$$

Utilizando relações conhecidas para as funções de Bessel [48]

$$J_1'(x) = J_0(x) - \frac{1}{x}J_1(x)$$

Logo

$$\frac{d}{dr}(rJ_1(pr)) = prJ_0(pr)$$

Desta maneira, encontramos o termo dependente de r do laplaciano da equação de difusão

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\frac{\partial T}{\partial r}) = \int_{0}^{\infty} [-(p)^{2}]pdp\tilde{T}(p,z)J_{0}(pr)$$

e sabendo que

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2}T = \int_0^\infty pdp J_0(pr) \frac{\partial^2}{\partial z^2} \tilde{T}(p,z)$$

Podemos voltar, finalmente, à equação de difusão

$$\int_{0}^{\infty} p dp J_0(pr) \left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} \tilde{T}(p,z) - (p^2 + \sigma^2) \tilde{T}(p,z)\right] = 0$$
(A.4)

Encontramos a equação de difusão para a transformada de Hankel da temperatura

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} \tilde{T}(p,z) = m^2 \tilde{T}(p,z) \tag{A.5}$$

onde $m = \sqrt{p^2 + \sigma^2}$.

Esta é a equação de difusão para a transformada de Hankel da temperatura, que é idêntica à equação real unidimensional, substituindo m por σ . Sua solução tem, então uma forma análoga

$$\tilde{T}(p,z) = A(p)e^{mz} + B(p)e^{-mz}$$

As condições de contorno podem ser transformadas facilmente, pois não dependem de r, e assim resolve-se a equação transformada de maneira análoga à da equação real. É necessário, apenas, transformar o fluxo de calor incidente da condição de absorção superficial. Para um feixe laser gaussiano, ele é dado por

$$\Phi = I(r) = I_0 e^{-\left(\frac{r}{a}\right)^2}$$

onde a é o raio do feixe.

A transfomada da intensidade é dada por [48]

$$\tilde{\Phi} = \int_{0}^{\infty} r dr J_0(pr) I(r) = \frac{I_0 \pi a^2}{2\pi} e^{-\frac{p^2 a^2}{4}}$$

Para escrever em função da potência

$$P_0 = \iint I(r)d^2\vec{r} = I_0 \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\infty} r dr e^{-(\frac{r}{a})^2} = \pi a^2 I_0$$

Encontramos assim o fluxo transformado

$$\tilde{\Phi} = \frac{P_0}{2\pi} e^{-\frac{p^2 a^2}{4}}$$

Para um único meio semi-infinito, considerando absorção superficial, a solução trasformada é dada por:

$$\tilde{T}(p,z) = \frac{P_0 e^{-\frac{p^2 a^2}{4}}}{2\pi k} e^{-mz}$$
Bibliografia

- A. Bouhelier, M. R. Beversluis, and L. Novotny *Appl. Phys. Lett.*, vol. 83, no. 24, p. 5041, 2003.
- [2] A. Bouhelier, M. Beversluis, A. Hartschuh, and L. Novotny *Phys. Rev. Lett.*, vol. 90, no. 1, p. 3903, 2003.
- [3] A. Hartschuh, E. J. Sanchez, X. S. Xie, and L. Novotny Phys. Rev. Lett., vol. 90, no. 9, p. 5503, 2003.
- [4] A. P. Neto, H. Vargas, N. F. Leite, and L. C. M. Miranda *Phys. Rev. B*, vol. 40, p. 3924, 1989.
- [5] A. P. Neto, H. Vargas, N. F. Leite, and L. C. M. Miranda Phys. Rev. B, vol. 41, p. 9971, 1990.
- [6] J. Opsal, A. Rosencwaig, and D. L. Willenborg Appl. Opt., vol. 22, no. 20, p. 3169, 1983.
- [7] A. Mandelis Solid-State Electron., vol. 42, p. 1, 1998.
- [8] A. Rosenwaig, J. Opsal, W. L. Smith, and D. L. Willenborg Appl. Phys. Lett., vol. 43, p. 1013, 1983.
- [9] J. Opsal, M. W. Taylor, W. L. Smith, and A. Rosenwaig J. Appl. Phys., vol. 61, p. 240, 1986.
- [10] D. Boyer, P. Tamarat, A. Maali, B. Lounis, and M. Orrit Science., vol. 297, p. 1160, 2002.
- [11] C. Williams and H. Wickramasinghe Appl. Phys. Lett., vol. 49, no. 23, p. 1587, 1986.
- [12] A. Majumdar, J. Carrejo, and J. Lai Appl. Phys. Lett., vol. 62, no. 20, p. 2501, 1993.
- [13] M. Lederman, D. Richardson, and H. C. Tong *IEEE Trans. Mag.*, vol. 33, no. 5, p. 2923, 1997.

- [14] G. Mills, J. Weaver, G. Harris, W. Chen, J. Carrejo, L. Johnson, and B. Rogers Ultramicroscopy, vol. 80, no. 1, p. 7, 1999.
- [15] J. A. Batista, Detecção de defeitos em estruturas semicondutoras através da Microscopia Fototérmica de Reflexão: a interferência optotérmica e o aumento de contraste. PhD thesis, IFGW- Unicamp, 2001.
- [16] A. Rosencwaig, Photoacoustics and Photoacoustic Spectroscopy. Jonh Wiley and Sons, 1980.
- [17] S. M. Sze, *Physics of Semiconductor Devices*. Wiley-Interscience, 1969.
- [18] B. C. Forget, Caractérisation des proprietés de transport électronique du silicium par des méthodes photothermiques. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie, 1993.
- [19] J. I. Pankove, *Optical Processes in Semiconductors*. Dover Publications, 1975.
- [20] W. Shockley and W. T. R. Jr. Phys. Rev., vol. 87, p. 835, 1952.
- [21] R. N. Hall Phys. Rev., vol. 87, p. 228, 1952.
- [22] L. I. Inglehart, A. Broniatowski, D. Fournier, A. C. Boccara, and F. Lepoutre Appl. Phys. Lett., vol. 56, no. 18, p. 1749, 1990.
- [23] B. Forget, D. Fournier, and V. E. Gusev Appl. Phys. Lett., vol. 61, no. 19, p. 2341, 1992.
- [24] B. C. Forget, I. Barbereau, and D. Fournier Appl. Phys. Lett., vol. 69, no. 8, p. 1107, 1996.
- [25] A. M. Mansanares, J. P. Roger, D. Fournier, and A. C. Boccara Appl. Phys. Lett., vol. 64, no. 1, p. 4, 1994.
- [26] P. Voigt, J. Hartmann, and M. Reichling J. Appl. Phys., vol. 80, no. 4, p. 2013, 1996.
- [27] J. A. Batista, A. M. Mansanares, E. C. da Silva, and D. Fournier J. Appl. Phys., vol. 82, no. 1, p. 423, 1997.
- [28] S. Grauby, B. C. Forget, S. Holé, and D. Fournier *Rev. Sci. Instrum.*, vol. 70, no. 9, p. 3603, 1999.
- [29] J. A. Batista, A. M. Mansanares, E. C. da Silva, C. C. Vaz, and L. C. M. Miranda J. Appl. Phys., vol. 88, no. 9, p. 5079, 2000.

- [30] J. A. Batista, D. Takeuti, A. M. Mansanares, and E. C. da Silva Analytical Sciences, vol. 17, p. s73, 2001.
- [31] G. Tessier, S. Holé, and D. Fournier Appl. Phys. Lett., vol. 78, no. 16, p. 2267, 2001.
- [32] G. Tessier, G. Jerosolimski, S. Holé, D. Fournier, and C. Filloy Rev. Sci. Instrum., vol. 74, no. 1, p. 495, 2003.
- [33] G. Tessier, S. Holé, and D. Fournier Opt. Lett., vol. 28, no. 11, p. 875, 2003.
- [34] D. Dietzel, B. K. Bein, and J. Pelzl J. Appl. Phys., vol. 93, no. 11, p. 9043, 2003.
- [35] A. C. de Oliveira Jr., Desenvolvimento de micro-aquecedores compatíveis com tecnologias de microeletrônica para aplicação em transdutores térmicos. PhD thesis, FEEC-Unicamp, 2003.
- [36] G. Busse, D. Wu, and W. Karpen J. Appl. Phys., vol. 71, no. 8, p. 3962, 1992.
- [37] L. R. de Freitas, A. M. Mansanares, E. C. da Silva, M. B. C. Pimentel, S. E. Filho, and J. A. Batista J. Appl. Phys., vol. 97, no. 9, p. 5079, 2005.
- [38] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, Solid State Physics. HRW International Editions, 1976.
- [39] G. E. J. Jr. and F. A. Modine Phys. Rev. B, vol. 27, no. 12, p. 7466, 1983.
- [40] G. E. J. Jr. and F. A. Modine J. Appl. Phys., vol. 76, no. 6, p. 3758, 1994.
- [41] M. Born and E. Wolf, *Principles of Optics*. Cambridge University Press, 2003.
- [42] J. R. Reitz and F. J. Millford, Foundaments of electromagnetic theory. Addison-Wesley, 1960.
- [43] A. M. Mansanares, Optical detection of photothermal phenomena in operating electronic devices: temperature and defects imaging, vol. 4 of Progress in Photothermal and Photoacoustic Science and Technology, ch. 3, p. 103. SPIE Optical Engineering Press, 2000.
- [44] A. Borghesi, P. Bottazzi, G. Guizzetti, L. Nosenzo, and A. Stella Solid State. Commun., vol. 60, no. 10, p. 807, 1986.
- [45] R. B. Roberts J. Phys. D: Appl. Phys., vol. 14, p. L163, 1983.
- [46] S. Grauby, G. Tessier, V. Rachet, S. Holé, and D. Fournier Anal. Sci., vol. 17, p. S67, 2001.

- [47] R. Petit, L'outil mathématique. MASSON, 1991.
- [48] M. Abramowitz and I. A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions. Dover Publications, 1968.

Sensitivity enhancement in thermoreflectance microscopy of semiconductor devices using suitable probe wavelengths

L. R. de Freitas, E. C. da Silva, and A. M. Mansanares^{a)} Instituto de Fisica Gleb Wataghin, Universidade Estadual de Campinas, Unicamp, Cx.P. 6165, 13083-970, Campinas, São Paulo, Brazil

G. Tessier and D. Fournier

Laboratoire d'Instrumentation, Université Pierre et Marie Curie (UPMC), Unité Propre de Recherche (UPR) A0005 du Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS), Ecole Supérieure de Physique et de Chimie Industrielles de la Ville de Paris (ESPCI), 10 rue Vauquelin, 75005 Paris, France

(Received 14 February 2005; accepted 3 August 2005; published online 20 September 2005)

In this paper we present an experimental and theoretical study of the thermoreflectance response as a function of the probe wavelength for layered microelectronics structures. The investigated sample consists of a polycrystalline silicon conducting track grown on a SiO₂-coated Si substrate. Thermoreflectance measurements were carried out in the wavelength range from 450 to 750 nm with the track biased in modulated regime. An oscillating pattern is observed in the spectral region where the upper layer is transparent. Such oscillations are due to the interference resulting from the multiple reflections at the interfaces. Using a thermo-optical model, we show that the optical constants (*n* and *k*) of the materials, which are wavelength dependent, as well as their temperature derivatives (dn/dT and dk/dT), strongly influence the thermoreflectance signal. The optical thicknesses of the layers, mainly determined by the real part of the refractive indices, define the period of oscillation. On the other hand, the imaginary part of the refractive indices establishes the cutoff wavelength of the oscillations. Below this cutoff wavelength, the probe light does not penetrate the material and the upper-surface reflectance dominates the signal. © 2005 American Institute of Physics. [DOI: 10.1063/1.2043231]

I. INTRODUCTION

Thermoreflectance microscopy has been used during the last decade as a suitable technique for the investigation of micro- and opto-electronic devices in operating cycle.^{1–16} It allows the determination of both heat source distribution and heat propagation properties within specific regions of micrometer devices. The technique is also useful for detecting and imaging defects. Besides the temperature field, it is also sensitive to local electric field,¹ as well as to free-carrier density, which are in their turn disturbed by defects. The noncontact and nondestructive character of the technique is one of its main advantages. It enables aging tests, which are a necessary step in the development of electronic devices, as well as progressive and repetitive treatments such as the application of voltage pulses intended to simulate electrostatic discharge damaging.²

The technique has been applied in the investigation of operating telecommunication diode lasers,^{3–6} transistors,^{7–9} interconnects,^{10,11} and solar cells.¹² Sensitivity and spatial resolution ensures the capability of the technique to sense temperature profile variation due to both structural differences and local surface/subsurface defects at micrometer and, in some cases, even at submicrometer scales. In some applications, however, the sensitivity drops down due to the material's optothermal properties. In this case, the choice of

appropriate experimental conditions, such as specific probe wavelength, is crucial to preserve the signal-to-noise ratio and guarantee reliable measurements.

In this paper we present a systematic study of the dependence of the thermoreflectance response with the probe wavelength for a layered structure consisting of a conducting track made on a Si substrate. The conducting track and substrate are isolated by a silicon oxide layer. Thermoreflectance measurements were carried out in the wavelength range from 450 to 750 nm with the polycrystalline silicon track biased in the modulated regime (ac voltage applied to the track pads). Using a thermo-optical model, we show that the optical constants (n and k) of the materials, which are wavelength dependent, as well as their temperature derivatives (dn/dT and dk/dT), strongly influence the thermoreflectance signal (see Ref. 17 for thermal and wavelength modulation spectroscopies). An oscillating pattern is observed in the spectral region where the upper layer is transparent. Such oscillations are due to the interference resulting from the multiple reflections at the interfaces. The optical thicknesses of the layers determine the period of oscillation.

A remarkable aspect of these oscillations is the fact that, when scanning the sample surface, one can pass from a situation where the reflectance increases to another where the reflectance decreases with temperature, depending on the thicknesses of the layers and on the materials of each region. The signal phase is then shifted by 180° from one case to another, and therefore a superb contrast between a selected part of the structure and its neighborhood can be achieved.

^{a)}Electronic mail: manoel@ifi.unicamp.br



FIG. 1. Block diagram of the combined arrangement: focused laser and CCD camera setups.

II. EXPERIMENT

We used two experimental setups, namely, the visible charge-coupled device (CCD) camera setup, $^{14-16}$ which uses a lamp to produce the probe light and stores the whole thermal image in a snapshot, and the focused laser setup, ⁸ which uses several laser lines as probe and stores the thermal image by scanning the sample surface. The two experimental setups are depicted in the block diagram of Fig. 1.

In the CCD technique, the sample is continuously illuminated by a white light that passes through an interference filter (linear variable filter), which allows specific wavelength tuning in the visible region (the range used in this work, with this setup, was 500-800 nm). A function generator supplies a modulated voltage to the sample at a fixed frequency f and a second generator provides a signal to the camera, synchronized with the former, at four times the fixed frequency (4f). The CCD camera acquires a series of four different images, each one integrated over one-fourth of the period of the heating modulation. In this way, through simple math one obtains the amplitude and phase of the thermoreflectance signal.¹⁸ To improve the signal-to-noise ratio, accumulation of these images is done. The CCD image is composed of 1024×1024 pixels. Each pixel corresponds to 88 \times 88 nm when using a 100 \times objective, so the whole image in this case is 90 \times 90 μ m. The modulation frequency is limited in this arrangement to 7.5 Hz (which is the frequency used in the measurements presented below), since the maximum CCD frame rate is 30 Hz.

In the focused laser setup, a probe-laser beam is focused on the sample surface. The spot diameter is about 1.0 μ m (50× objective with numerical aperture (NA)=0.75). The beam is reflected back by the surface of the sample and deviated to a Si photodiode (monodetector) by using a $\lambda/4$ plate combined with a polarizing beam splitter cube. The output signal from the Si detector is lock-in analyzed (reference in-phase with the generator driving voltage). The sample is mounted on an x-y translation stage of step size of 0.1 μ m in order to scan the probe beam on its surface. The probe-laser wavelengths used in this work are those of Ar⁺ laser lines (457.9, 476.5, 488.0, 496.5, 501.7, and 514.5 nm) and 670 nm coming from a diode laser. The modulation frequency in this arrangement can vary from 1.0 kHz to a few megahertz. The results presented below were obtained at 100 kHz.

The modulated voltage applied to the sample has the form $V(t) = (V_0/2)[1 + \sin(2\pi ft)]$, with $V_0 = 5.0$ V in all the measurements. The reflected probe beam, in both arrangements, is intensity modulated at frequency f, since the sample"s reflectance (R) is a function of temperature T, which is modulated as well due to the current flow and voltage modulations. For the particular waveform of the applied voltage above, there is joule dissipation at the frequency f and at 2f as well. Only the f component was captured by the lock-in. The ac output signal from the CCD (or from the Si detector) is normalized by its dc component, giving the experimental values of $\Delta R/R$:

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{S_{\rm ac}}{S_{\rm dc}} = \frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial T} \Delta T.$$
(1)

Photogenerated carriers can also contribute to the reflectance change. In our case, the probe beam does penetrate the polycrystalline silicon layer, eventually reaching the Si substrate, being then completely absorbed. Photocarriers in the substrate do not oscillate at frequency f, since the probe beam is not modulated. On the other hand, photocarriers created within the polycrystalline silicon layer are driven by the applied voltage and may contribute to the signal.⁷ Such a contribution is, however, negligible in our case, since the signal amplitude follows a quadratic dependence on V_0 (not shown), which ensures that the main mechanism of signal generation is the joule effect.

In the case of the focused laser setup, the probe beam intensity at the detector is of the order of $10^{-4}-10^{-5}$ W, which gives a signal-to-noise ratio of roughly $10^6/\sqrt{\text{Hz}}$, high enough to comfortably detect the features of the thermore-flectance signal in microelectronics structures. Typical responses of biased devices are in the range of $10^{-3}-10^{-5}$ in $\Delta R/R$.¹³ However, in the case of the CCD camera, the signal-to-noise ratio is at least two orders of magnitude smaller for a single acquisition. In this case, the accumulation of images is necessary. Usually a few hundred images are enough to reach a comfortable signal-to-noise ratio.

The main advantages of the CCD technique are the faster data acquisition (13 s for 400 images at 30 Hz) and the easy tuning ability obtained by using the linear variable interference filter. On the other hand, the focused laser technique has the capability of performing measurements in high modulation frequencies using simple homodyne detection and presents higher sensitivity.

Besides thermoreflectance measurements ($\Delta R/R$), we also performed measurements of the reflectance *R* as a function of the wavelength in the range of 500–800 nm using a spectrophotometer coupled to the eyepiece of the microscope. In this case the sample was illuminated with white light and the reflected beam was dispersed by the spectrophotometer. The measurement of the sample reflectance served as support for the modeling of the thermoreflectance problem, as presented below.







FIG. 2. (a) Photomicrograph of the conducting track, (b) schematics of the cross section of the sample, and (c) profile of the track showing its height and width.

Several samples with distinct conducting tracks (geometry, thickness, material) were investigated. The results described below were obtained on a polycrystalline silicon track grown on a crystalline *n*-Si substrate. The track is 1.6 μ m thick, 25 μ m wide, and 200 μ m long, and it is isolated from the substrate by a 0.5- μ m SiO₂ layer. The polycrystalline silicon layer is made of phosphorous-doped (10²⁰ atoms/cm³) silicon. Figure 2 shows a photomicrograph of the track [Fig. 2(a), lateral contacts are made of Al], the schematics of the cross section of the sample [Fig. 2(b)], and the measurement of the height and width of the track performed with a profilometer [Fig. 2(c)].



FIG. 3. Reflectance as a function of the wavelength measured on the substrate coated with the SiO₂ layer (open circles) and calculated reflectance for three values of the SiO₂ thickness (d_3) .

III. RESULTS

Figure 3 shows the reflectance *R* as a function of the wavelength (open circles), measured on the substrate coated with the SiO₂ layer, i.e., far from the conducting track. The interference pattern observed is caused by the combination of the reflected rays at the air/SiO₂ and SiO₂/Si substrate interfaces. The lines (dashed, solid, and dotted) represent the calculated reflectance for distinct values of the SiO₂ thickness. Detailed discussion is found in Sec. IV.

Figure 4(a) presents the same measurement obtained on the polycrystalline silicon track (open circles). It can be seen that, besides the low spatial frequency pattern observed in Fig. 3 (envelope), there is also a higher spatial frequency pattern that is related to the additional polycrystalline silicon layer, as will be discussed in Sec. IV. It is also observed that the high-frequency oscillation almost disappears for smaller wavelengths. The reason is that the polycrystalline silicon becomes absorbing at short wavelengths, thus extinguishing the multiple reflections at the inner interfaces (polycrystalline silicon/SiO₂ and SiO₂/Si substrate).

A whole optical image, obtained through the reflectance of the sample under illumination with $\lambda = 650$ nm, using the CCD camera setup, is presented in Fig. 5(a). In this image one can see a zoom of Fig. 2(a), with the difference that here the illumination is done with monochromatic light. Therefore, the bright/dark levels of Fig. 5(a) represent the reflectance of the distinct regions of the sample at 650 nm. One can observe the high reflectance of the Al contact at the left side, the middle level reflectance of the conducting track, and the lower reflectance level of the SiO₂-covered substrate. A thermoreflectance image $(\Delta R/R)$, obtained using 650 nm as probe wavelength, is shown in Fig. 5(b). In this image one can clearly see the heated polycrystalline silicon track (bright). It must be noticed that the Al contact presents a very low level of thermoreflectance signal amplitude (dark), which results from the lower temperature changes, due to the higher thermal and electrical conductivities of Al, besides the larger width of the contact. Nevertheless, the temperature coefficient of the reflectance also influences the contrast between the Al contact and the polycrystalline silicon track. The observed differences in brightness between the upper



FIG. 4. (a) Reflectance as a function of the wavelength measured on the polycrystalline silicon track (open circles), calculated reflectance of the whole structure including the conducting track (1600-nm thick, dashed-dotted curve), and calculated average reflectance (20% track-80% coated substrate, solid line). The dashed curve represents the calculated reflectance for the coated substrate (same as in Fig. 3 for d_3 =530 nm), (b) calculated reflectance of the whole structure (solid line), and corrected experimental points resulting in the reflectance coming exclusively from the track (20% track-80% coated substrate, open circles).

and the lower parts of the Al pad must be caused by the nonuniformity of the pad thickness (slanted surface). Care was taken of the sample alignment. A Mirau lens was used to ensure that the substrate surface was actually perpendicular to the incident probe light beam.

Figure 6 presents the thermoreflectance signal, $\Delta R/R$, on the center of the polycrystalline silicon track (averaged over a 1.0- μ m-diameter spot), for several wavelengths, namely,



FIG. 5. (a) Optical image of the conducting track obtained through the reflectance of the sample under illumination with 650 nm, obtained using the CCD camera setup; (b) CCD camera thermoreflectance image ($\Delta R/R$) obtained using 650 nm as probe wavelength. Dark means zero and bright means maximum signal amplitude ($\Delta R/R=2.4 \times 10^{-2}$). Scanned area is 70 \times 70 μ m².



FIG. 6. Experimental values of $\Delta R/R$ for several probe wavelengths (circles), and minus the derivative of the experimental reflectance of the conducting track (raw data) with respect to the wavelength.

all the laser lines listed above (focused laser setup, open circles) and at 596, 604, 615, 626, 639, 650, 665, 676, 705, and 725 nm (CCD camera setup, closed circles). Negative and positive values of $\Delta R/R$ are used to represent in-phase and 180° out-of-phase thermoreflectance signal. The choice of the wavelengths in the CCD camera setup was made using the derivative of the reflectance of the conducting track with respect to the wavelength. Around the maximum of the derivative (absolute value) it is expected that the thermoreflectance is also a maximum, since one of the effects of increasing temperature is to change the optical path inside each layer, thus shifting the interference pattern. Furthermore, the optical spectra of the materials usually present a redshift with increasing temperature, besides the broadening of their bands.¹⁷ The numerical derivative of the measured reflectance of the conducting track [open circles in Fig. 4(a)] is plotted in Fig. 6 (solid line) to evidence its maximum-value wavelengths, at which the thermoreflectance measurements were performed.

From $\Delta R/R$ measurements of Fig. 6 one can see that the thermoreflectance response is significantly enhanced above 600 nm and a net oscillating pattern is observed at higher wavelengths. This oscillating pattern is closely connected to the interference oscillations observed in the reflectance spectrum as we will see in the theoretical model below.

IV. THEORETICAL MODEL AND DISCUSSION

The theoretical model we developed to analyze the thermoreflectance response is based on the thermal modulation of the reflectance that results from the multiple reflections of the probe beam in the layered structure. This modulation comes from the temperature dependence of the refractive indices of the materials, as well as from the thickness variation due to thermal expansion. In all the calculations, the temperature variation was considered uniform throughout all the interfaces, i.e., temperature gradient was neglected. Let us remind that the heat source is located within the polycrystalline silicon track. Beneath the track, the oscillating temperature amplitude decreases roughly with the factor $e^{-d/\mu}$, where d is the distance from the track (heat source) and μ is the thermal diffusion length.¹¹ The values for μ using literature data¹¹ are $\mu_{Si}(100 \text{ kHz}) = 16 \ \mu\text{m}$ and $\mu_{SiO_2}(100 \text{ kHz})$

TABLE I. Optical constants and their temperature derivatives at 500 and 800 nm, and the thermal-expansion coefficient for crystalline silicon, polycrystalline silicon, and silicon oxide.

Material	п	k	dn/dT (10 ⁻⁴ K ⁻¹)	dk/dT (10 ⁻⁴ K ⁻¹)	α_T (10 ⁻⁶ K ⁻¹)
Si at 500 nm	4.3 ^{a,b}	0.023	2.9 ^{a-c}	2.2	
Si at 800 nm	3.7	0.006	0.61	0.61	
Poly-Si at 500 nm	4.2 ^d	0.13			2.6 ^e
Poly-Si at 800 nm	3.7	0.006			
SiO ₂ at 500 nm	1.462^{f}		0.13 ^g		0.55 ^h
SiO ₂ at 800 nm	1.453				
^a Reference 19.	^e Reference 26.				
^b Reference 20.	^f Reference 23.				
^c Reference 21.	^g Reference 25.				
^d Reference 22.	^h Reference 27.				

=1.6 μ m, which are large enough when compared to the layer thicknesses, thus ensuring the pertinence of the uniform temperature assumption.

Therefore, a first attempt was to describe the reflectance behavior as a function of the wavelength for both the SiO₂-coated substrate and for the whole structure (two layers on the substrate). Indeed, the model consisted of four media: medium 1: air; medium 2: polycrystalline silicon layer; medium 3: SiO₂ layer; and medium 4: Si substrate. For simplicity the refractive index of air was fixed $(n_1=1 \text{ for the whole})$ wavelength range) and considered temperature independent. The refractive indices (n and k) for silicon (polycrystalline) track and crystalline substrate), and (n) for the silicon oxide layer, were taken from Refs. 19 and 20, 22, and 23, for each wavelength in the 500-800-nm range (interpolated values). Values of *n* ranged from 4.2 to 3.7 for polycrystalline silicon, while k values ranged from 0.13 to 0.006 when going from 500 to 800 nm. For crystalline silicon, n varies from 4.3 to 3.7 over the same wavelength range, while k goes from 0.023 to 0.006. The values of n for SiO₂ decrease from 1.462 to 1.453, following the Cauchy equation.²⁴ See Table I for a summary of the input data for calculations.

The reflectance of the four-media system was calculated considering the multiple reflections of a beam under normal incidence. The reflectance R is given by

$$R = \hat{r}^* \hat{r},\tag{2}$$

where \hat{r} is the reflection Fresnel coefficient given by the ratio between the reflected (E'_{1s}) and the incident (E_{1s}) electricfield amplitudes (we assumed normal incidence, so *s* and *p* polarizations are equivalent; actually, circularly polarized laser light and nonpolarized white light were used):

$$\hat{r} = \frac{E_{1s}'}{E_{1s}}.$$
(3)

Incident, reflected, and transmitted (E_{4s}) electric fields are related by the matrix equation below:²⁴

$$\begin{pmatrix} E_{1s} \\ E'_{1s} \end{pmatrix} = C_1 C_2 C_3 \begin{pmatrix} E_{4s} \\ 0 \end{pmatrix},$$
 (4)

$$C_{i} = \frac{1}{\hat{t}_{i,i+1}} \begin{pmatrix} e^{-i\hat{\beta}_{i}/2} & \hat{r}_{i,i+1}e^{-i\hat{\beta}_{i}/2} \\ \hat{r}_{i,i+1}e^{i\hat{\beta}_{i}/2} & e^{i\hat{\beta}_{i}/2} \end{pmatrix}$$
(5)

and $\hat{r}_{i,i+1}$ and $\hat{t}_{i,i+1}$ are the reflection and transmission Fresnel coefficients at the interface between media *i* and (*i*+1) for *s* polarization,²⁴ while $\hat{\beta}_i = 4\pi \hat{n}_i d_i / \lambda$ is the complex phase shift introduced by layer *i*, with $\hat{\beta}_1 = 1$. Here, $\hat{n}_i = (n_i + ik_i)$ is the complex refractive index of medium *i*, d_i is the thickness of layer *i*, and λ is the wavelength of the incident beam in air (vacuum).

As mentioned above, Fig. 3 presents the calculated reflectance for the Si substrate coated with a SiO₂ layer. The nominal thickness of the silicon oxide layer is 0.5 μ m, and the calculation made for three values of the thickness d_3 (525, 530, and 535 nm) is shown in Fig. 3. One can see that the value of 530 nm best fits the experimental data. It must be noticed that both measured and calculated data are raw, no adjusting factors were employed. The agreement between experiment and calculation is quite satisfactory.

In the same way, the reflectance of the whole structure, including the polycrystalline silicon conducting track (1600 nm thick), was calculated and is plotted in Fig. 4(a)(dashed-dotted curve). The high spatial frequency previously observed in the experimental data obtained on the conducting track is clearly present in the calculated curve. The correct number of peaks and their positions are determined by the thickness of the polycrystalline silicon layer. Indeed, the best agreement with experiment is achieved for d_2 =1600 nm. It is also remarked that the amplitude of the oscillations decreases at small wavelengths, and it is enveloped by the reflectance of the coated substrate, as expected. The disagreement with the measurement arises from the fact that the measured reflectance results from an average of the reflections that occur on the conducting track and on the surrounding substrate (coated with SiO₂). This comes out because the collecting optics of the spectrophotometer inspects a region that is larger than the track area. Therefore, in order to compare with the experiment, the calculated reflectance also must be averaged in the same way. An estimated proportion between track and substrate areas under inspection by the spectrophotometer is 20%-80%. Doing such averaging one obtains the solid line of Fig. 4(a), which qualitatively agrees quite well with experiment. The quantitative agreement is also reasonable considering other nonideal aspects such as track edge, nonuniformity of layer thickness, literature values used for the optical constants, non-normal incidence of the probe light beam, etc.

Once the reflectance modeling was accomplished, the next step is to add the effect of temperature modulation. This must be done exclusively on the conducting track, i.e., without considering the disturbance coming from the surroundings, as discussed above, since the thermoreflectance data were collected only on the center of the track. Let us remember that the CCD camera, as well as the focused laser optics, has submicrometric resolution, allowing picking the thermoreflectance signal in a small region at the center of track. Therefore, the reflectance curve that must be modulated by temperature in further calculations is the one represented in

where

Downloaded 04 Nov 2005 to 143.106.18.93. Redistribution subject to AIP license or copyright, see http://jap.aip.org/jap/copyright.jsp

Fig. 4(a) by the dashed-dotted line. This curve is plotted again in Fig. 4(b) with the experimental points properly corrected. This correction is in fact the reverse operation performed with the theoretical data of Fig. 4(a), i.e., the substrate contribution to the experimental data was taken off. So, experimental and theoretical plots of Fig. 4(b) represent the reflectance of the four-media structure.

From Eq. (1) one can see that the dependence of $\Delta R/R$ with the wavelength comes from the temperature coefficient of the reflectance, $(1/R)(\partial R/\partial T)$. In order to compute this coefficient, the reflectance was calculated at ambient temperature *T* as presented above, and then recalculated at the temperature $(T + \Delta T)$. The ratio $(\Delta R/\Delta T)$ equals the derivative $(\partial R/\partial T)$ in the limit of small values of ΔT :

$$\frac{\partial R}{\partial T} = \frac{\Delta R}{\Delta T} = \frac{R(T + \Delta T) - R(T)}{\Delta T}.$$
(6)

The reflectance $R(T+\Delta T)$ was calculated using values of $\hat{n}_i(T+\Delta T)$ and $d_i(T+\Delta T)$ given by

$$\hat{n}_i(T + \Delta T) = \hat{n}_i(T) + \frac{\partial \hat{n}_i}{\partial T} \Delta T, \qquad (7)$$

$$d_i(T + \Delta T) = d_i(T)(1 + \alpha_{Ti}\Delta T).$$
(8)

In the above equations $(\partial \hat{n}_i/\partial T) = (\partial n_i/\partial T + i\partial k_i/\partial T)$ is the complex temperature coefficient of the refractive index and α_{Ti} is the thermal expansion coefficient of material *i*. The values of $(\partial n/\partial T)$ and $(\partial k/\partial T)$ for crystalline silicon were taken from Refs. 13 and 19–21. The same values were used for polycrystalline silicon. They ranged from $(\partial n/\partial T)=2.9 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1}$ and $(\partial k/\partial T)=2.2 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1}$ at 500 nm to $(\partial n/\partial T) \cong (\partial k/\partial T)=6.1 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$ at 800 nm. For silicon oxide, $(\partial n/\partial T)$ is almost constant in the wavelength range and equal to $1.3 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$.²⁵ The values of the thermal expansion coefficients of polycrystalline silicon and silicon oxide used were $2.6 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ (Ref. 26) and $5.5 \times 10^{-7} \text{ K}^{-1}$,²⁷ respectively (see Table I). Indeed, the calculation was expanded down to 450 nm to cover the measurements done using the laser lines.

Figure 7(a) shows the calculated curve of $\Delta R/\Delta T$. As in the case of the thermoreflectance measurements, it presents the oscillating pattern that is attenuated at small wavelengths. Figure 7(b) displays the coefficient $(1/R)(\Delta R/\Delta T)$ with the experimental data for the thermoreflectance $\Delta R/R$, properly normalized to best fit the calculated curve. Notice that $\Delta R/R$ and $(1/R)(\Delta R/\Delta T)$ are connected by the temperature variation ΔT [see Eq. (1)], so ΔT value was adjusted to find the best agreement between theory and experiment.

As one can see, theory and experiment present a very good accord, despite the simplifications in the model (normal incidence, uniform temperature) and inherent errors in the employed parameters (refractive indices and their temperature derivatives, thickness, thermal-expansion coefficients). The calculated curve shows, however, that the maxima of the thermoreflectance signal do not coincide with the maxima of $(dR/d\lambda)$, as guessed during measurements (see Fig. 6). In fact, the calculated maxima are slightly shifted to longer wavelengths, so the measured points do not fall precisely on



FIG. 7. (a) Calculated values of $\Delta R / \Delta T$ as a function of the wavelength; (b) calculated coefficient $(1/R)(\Delta R / \Delta T)$ (solid line) and experimental data for the thermoreflectance $\Delta R / R$ (circles), properly normalized to best fit the calculated curve.

the peaks of the calculated curve. In other words, the choice of the probe wavelengths could be done in such a way that would result in even more enhanced responses.

For the sake of comparison, the theoretical calculation of $(-1/R)(dR/d\lambda)$ is plotted in Fig. 8 with the curve for $(1/R)(\Delta R/\Delta T)$, where one can see the cited wavelength shift. The connection between $(\partial R/\partial T)$ and $(dR/d\lambda)$ arises from the fact that augmenting the temperature results in an increase of the optical path $(n_i d_i)$ within the polycrystalline silicon and silicon oxide layers. Since the interference peaks are determined by the ratio of $(n_i d_i/\lambda)$, it is easy to see that an augmentation of the optical path has an effect similar to that of a decrease in the wavelength λ . Consequently, there is



FIG. 8. Theoretical calculation of $(-1/R)(dR/d\lambda)$ (dashed line) and $(1/R) \times (\Delta R/\Delta T)$ (solid line), as functions of the wavelength.

an analogous behavior of $(\partial R/\partial T)$ and $(-dR/d\lambda)$, although slight differences come out from the distinct dependences of the phase shift, $\hat{\beta}$, on $n_i d_i$ and on λ , as well as from the fact that the refractive indices themselves influence the reflectance through the Fresnel coefficients \hat{r} and \hat{t} .

Finally, one can say that the thermoreflectance signal in microelectronics structures and devices is strongly dependent on the probe wavelength, especially when the upper layers are transparent to the probe light. Optical interference, which is thermally modulated, plays a decisive role in the thermoreflectance response. The appropriate choice of the probe wavelength may strongly enhance the sensitivity of the technique. In the present case, the polycrystalline silicon layer defined the interference pattern, i.e., the spatial frequency was established by the track optical thickness, and the stronger optical absorption of this material at smaller wavelengths imposed the attenuation in the oscillating pattern and the loss of sensitivity in this wavelength range, as observed in the experiments.

V. CONCLUSIONS

In this paper we presented both experimental results and theoretical calculations of the dependence of the thermoreflectance response with the probe wavelength for a layered microelectronics structure. Experiments were carried out using two distinct arrangements, namely, the CCD camera and the focused laser setups, covering the spectral range from roughly 450 to 750 nm. Using a thermo-optical model, we showed that the optical constants of the materials, which are wavelength dependent, as well as their temperature derivatives (dn/dT and dk/dT), strongly influence the thermoreflectance signal. An oscillating pattern is observed in the spectral region where the upper layer is transparent. Such oscillations are due to the interference resulting from the multiple reflections at the interfaces. The optical thicknesses of the layers, mainly determined by the real part of the refractive indices, define the period of oscillation. On the other hand, the imaginary part of the refractive indices establishes the cutoff wavelength of the oscillations. Below this cutoff wavelength, the probe light does not penetrate the material and the upper surface reflectance dominates the signal.

ACKNOWLEDGMENTS

The authors thank A. C. de Oliveira and Professor I. Doi from Centro de Componentes Semicondutores (CCS), Unicamp, for sample preparation. The Brazilian agencies FAPESP, CNPq, and FAEP-Unicamp are also acknowledged for financial support.

- ¹J. A. Batista, A. M. Mansanares, E. C. da Silva, and D. Fournier, J. Appl. Phys. **82**, 423 (1997).
- ²L. R. de Freitas, E. C. da Silva, A. M. Mansanares, M. B. C. Pimentel, S. Eleutério Filho, and J. A. Batista, J. Appl. Phys. **97**, 104510 (2005).
- ³P. W. Epperlein, Jpn. J. Appl. Phys., Part 1 **32**, 5514 (1993).
- ⁴A. M. Mansanares, D. Fournier, and A. C. Boccara, Electron. Lett. **29**, 2045 (1993).
- ⁵A. M. Mansanares, J. P. Roger, D. Fournier, and A. C. Boccara, Appl. Phys. Lett. **64**, 4 (1994).
- ⁶L. C. O. Dacal, A. M. Mansanares, and E. C. da Silva, J. Appl. Phys. **84**, 3491 (1998).
- ⁷A. Mandelis, A. Williams, and E. K. M. Siu, J. Appl. Phys. **63**, 92 (1988).
- ⁸J. A. Batista, D. Takeuti, A. M. Mansanares, and E. C. da Silva, Anal. Sci. **17**, S73 (2001).
- ⁹D. Dietzel, H. Roecken, C. Crell, B. K. Bein, and J. Pelzl, Anal. Sci. **17**, S70 (2001).
- ¹⁰P. Voigt, J. Hartmann, and M. Reichling, J. Appl. Phys. **80**, 2013 (1996).
- ¹¹S. Grauby, G. Tessier, V. Rachet, S. Hole, and D. Fournier, Anal. Sci. 17, S67 (2001).
- ¹²J. A. Batista, A. M. Mansanares, E. C. da Silva, C. C. Vaz, and L. C. M. Miranda, J. Appl. Phys. 88, 5079 (2000).
- ¹³A. M. Mansanares, in *Semiconductors and Electronic Materials*, Progress in Photothermal and Photoacoustic Science and Technology Series Vol. IV, edited by A. Mandelis and P. Hess (SPIE Optical Engineering, Bellingham, 2000), Ch. 3, pp. 75–110.
- ¹⁴S. Grauby, B. C. Forget, S. Holé, and D. Fournier, Rev. Sci. Instrum. **70**, 3603 (1999).
- ¹⁵G. Tessier, S. Holé, and D. Fournier, Appl. Phys. Lett. **78**, 2267 (2001).
- ¹⁶G. Tessier, G. Jerosolimski, S. Hole, D. Fournier, and C. Filloy, Rev. Sci. Instrum. **74**, 495 (2003).
- ¹⁷B. Batz, in *Modulation Techniques*, Semiconductors and Semimetals Series Vol. 9, edited by R. K. Willardson and Albert C. Beer (Academic, New York, 1972).
- ¹⁸G. Busse, D. Wu, and W. Karpen, J. Appl. Phys. **71**, 3962 (1992).
- ¹⁹G. E. Jellison, Jr. and F. A. Modine, Phys. Rev. B **27**, 7466 (1983).
- ²⁰G. E. Jellison, Jr. and F. A. Modine, J. Appl. Phys. **76**, 3758 (1994).
- ²¹A. Borghesi, P. Bottazzi, G. Guizzetti, L. Nosenzo, and A. Stella, Solid State Commun. **60**, 807 (1986).
- ²²Ellipsometric measurements made on polycrystalline silicon layer on Si substrate.
- $^{23}\text{Ellipsometric}$ measurements made on SiO_2 layer on Si substrate.
- ²⁴J. R. Reitz, F. J. Milford, and R. W. Christy, *Foundations of Electromag-netic Theory*, 3rd ed. (Addison-Wesley, Massachusetts, 1980).
- ²⁵T. Toyoda and M. Yabe, J. Phys. D **16**, L97 (1983).
- ²⁶R. B. Roberts, J. Phys. D **14**, L163 (1981).
- ²⁷G. K. White, J. Phys. D **6**, 2070 (1973).

Thermoreflectance microscopy applied to the study of electrostatic discharge degradation in metal-oxide-semiconductor field-effect transistors

L. R. de Freitas, E. C. da Silva, and A. M. Mansanares^{a)}

Instituto de Física Gleb Wataghin, Universidade Estadual de Campinas, Unicamp, Cx.P. 6165, 13083-970, Campinas, São Paulo, Brazil

M. B. C. Pimentel and S. Eleutério Filho

Centro de Pesquisa Renato Archer, CenPRA, 13082-120, Campinas, São Paulo, Brazil

J. A. Batista

Departamento de Física, Universidade Federal do Maranhão, UFMA, Av. dos Portugueses, s/n, 65085-580, São Luís, Maranhão, Brazil

(Received 4 January 2005; accepted 15 March 2005; published online 9 May 2005)

We investigated the effect of electrostatic discharge on *n*-channel metal-oxide-semiconductor field-effect transistors using the thermoreflectance microscopy. The gate terminals of the transistors were submitted to electrostatic pulses on a zap system that respects the human body model. The pulse intensity varied from 40 to 140 V in a cumulative sequence. Electrical characterization showed that the transistor threshold voltage was no longer positive for pulses of 110 V and higher. No significant changes in the thermoreflectance maps were observed in these cases. For pulses of 140 V a large leakage current appeared, and the thermoreflectance maps revealed strong peaks (localized spot) associated with the induced damage. © 2005 American Institute of Physics. [DOI: 10.1063/1.1904727]

I. INTRODUCTION

Electrostatic discharge (ESD) is a common mechanism of degradation in metal-oxide-semiconductor field-effect transistors (MOSFETs).^{1,2} The nature of the degradation is usually dielectric disruption in the oxide layer, with the production of cracks which establish short circuit between gate and substrate. In this situation the device fails and often presents diode behavior. Electrostatic discharge is a main problem in several steps of manufacturing, packaging, and use of chips. The kinetics of this mechanism of degradation is, however, not well established. The conventional methods of investigation of the degradation process are based upon the electrical characteristics of the device. Measurements of the threshold voltage and of the leakage current allow monitoring the degradation process during tests. These measurements account on the whole damage caused in the structure, but do not reveal the spatial distribution of such damage. Scanning electron microscopy may be employed to find out the position of the defect. In this case the device must be sliced, as defects often extend underneath the surface. Such method thus requires hard sample preparation and becomes destructive.

An alternative nondestructive method, which can be used to follow the kinetics of degradation with spatial resolution, is the thermoreflectance microscopy technique. It has proved to be a useful tool in the determination of the temperature field of operating optoelectronic and microelectronic devices,³ such as telecommunication diode lasers,^{4–7} transistors,^{8–10} interconnects,^{11,12} and solar cells.¹³ Its sensitivity (roughly 10^{-6} in $\Delta R/R$), conjugated to its spatial resolution (<1.0 μ m), ensures the capability to detect temperature profile variation due to both structural differences and local surface/subsurface defects in the micrometer, and in some cases even in submicrometer scales. The nondestructive character of the technique enables aging tests, a necessary step in the development of electronic devices, as well as progressive and repetitive treatments such as voltage pulses application intended for simulation of electrostatic discharge.

In this work the thermoreflectance microscopy was used in the investigation of the effect of ESD on a set of *n*-channel MOSFET structures. The gate terminals of the transistors were submitted to ESD pulses on a zap system that respects the human body model (HBM).^{14,15} Both electrical parameters and thermoreflectance maps were used to monitor the degradation of the structures. Distinct levels of contrast were obtained in the maps, both in amplitude and phase, depending upon the bias/voltage modulation employed.

II. EXPERIMENT

The block diagram of the experimental arrangement for thermoreflectance measurements is presented in Fig. 1(a). A probe beam, coming from a 670-nm laser diode, enters a commercial microscope through its photograph eyepiece and is focused on the sample surface after passing the objective. The spot diameter is about 1.0 μ m [50× objective, numerical aperture (NA)=0.75]. The beam is reflected back by the surface of the sample and deviated to a Si photodiode by using a $\lambda/4$ plate combined with a polarizing beam splitter cube. The sample is mounted on an *x*-*y* translation stage with a step size of 0.1 μ m in order to scan the probe beam on the sample surface. The required measuring time for a typical data acquisition (1000 point image) is 10–20 min.

^{a)}Electronic mail: manoel@ifi.unicamp.br





(b)

FIG. 1. (a) Block diagram of the experimental arrangement for thermoreflectance measurements; (b) photomicrography of transistor, showing the 20×20 - μ m² gate area, drain (D), gate (G), and source (S) terminals.

The modulated voltage applied to the sample has the form: $V(t) = (V_0/2)$ [1+sin(2 πft)], with $V_0 = 5.0$ V and f varying from a hundred kilohertz to a few megahertz. The modulation frequency is chosen to make the time of heat propagation from one point to another in the investigated area not negligible when compared to the period (1/f). If this condition is satisfied one can explore the signal phase distribution besides the signal amplitude, in order to determine the heat sources location.

The reflected probe beam is intensity modulated at frequency f, since the sample's reflectance (R) is a function of temperature T, and of the carrier density N (surface potential), which are modulated as well due to the current flow and electric-field modulations. The output signal from the Si detector is lock in analyzed (reference in phase with the ac driving voltage) and its dc component is used to normalize the lock-in signal, giving the experimental values of $\Delta R/R$,

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{S_{\text{lock-in}}}{S_{\text{dc}}} = \frac{1}{R} \sum_{i} \frac{\partial R}{\partial X_{i}} \Delta X_{i} \quad \text{with } X_{i} = T, N.$$
(1)

The probe beam intensity at the detector is of the order of 10^{-4} W, which gives a shot noise of roughly $10^{-7}/\sqrt{\text{Hz}}$. Mechanical noise in the apparatus drops its sensitivity in $\Delta R/R$ to $10^{-6}/\sqrt{\text{Hz}}$, which is still high enough to comfortably detect the features of the thermoreflectance signal in microelectronic structures. Typical responses of biased devices are in the range of $10^{-5}-10^{-3}$ in $\Delta R/R$.⁸

Recently, the replacement of the monodetector (Si photodiode) by a charge-coupled device (CCD) camera was proposed.¹² In this configuration, the whole sample is illuminated by the probe light and the thermoreflectance image is acquired in a sequence of four snapshots. However, the signal-to-noise ratio is at least two orders of magnitude smaller than that of the probe laser and monodetector. A form of compensation is the use of appropriate probe light wavelengths, as proposed in Ref. 9. The temperature coefficient of the reflectance in layered structures, $\partial R / \partial T$, is strongly dependent on the wavelength. Thus, an appropriate choice of the wavelength can improve the sensitivity by one or two orders of magnitude.¹⁶ Furthermore, the use of small wavelengths (blue, violet) improves the resolution of the technique, thus rendering comfortable the inspection of submicron devices.

The electrical characterization consisted of measurements of the drain-source current $I_{\rm DS}$ as a function of the gate-source voltage $V_{\rm GS}$ for fixed drain-source voltage ($V_{\rm DS}$ = 0.05 V). From these curves, the transconductance, $\Delta I_{\rm DS}/\Delta V_{\rm GS}$, is obtained, and hence the threshold voltage. Besides, the leakage current (gate-body current $I_{\rm GB}$) is measured as a function of the gate-body voltage $V_{\rm GB}$ (drain and source terminals floating).

A set of five *n*-channel MOSFET structures was investigated. The gate $(20 \times 20 \ \mu\text{m}^2, 0.8 - \mu\text{m}$ technology) was made by deposition of Al-doped polycrystalline silicon on a 30-nm-thick SiO₂ layer, which was grown on *p*-type Si substrate. Figure 1(b) shows a photomicrography of one of the devices. During measurements, body and source terminals were kept at ground. The drain and gate ones were properly configured, depending upon the measurement. In some cases the gate potential was modulated and the drain one was kept constant (V_D =0 or 5.0 V). For others, the drain potential was modulated instead of the gate one, which was kept constant (V_G =0 or 5.0 V). The scanned area was 30×25 μ m² comprising the gate surface. In some measurements the probe beam was attenuated by neutral density filter to 16% of its full power.

Electrical characteristics and thermoreflectance maps were obtained for all the samples before any voltage treatment (reference data). The devices were submitted to ESD pulses on a zap system that respects the human body model.^{14,15} Pulses of 100-ns duration and variable voltages were applied on the gate terminal keeping the drain grounded, and with source and body terminals floating. The intensity of the first pulse was 40 V, and the subsequent ones were increased by steps of 10 V. After each pulse an electrical characterization was made. If any significant change was observed in the threshold voltage or in the leakage current, thermoreflectance measurements were performed. Then, the last pulse was repeated and the whole process continued.

Downloaded 19 Jun 2005 to 143.106.18.93. Redistribution subject to AIP license or copyright, see http://jap.aip.org/jap/copyright.jsp



FIG. 2. Thermoreflectance maps (signal amplitude) obtained by scanning the probe beam on the gate of the device before treatment (reference maps). The scanned area is $30 \times 25 \ \mu m^2$. Dark means zero while bright means maximum signal. (a) $V_{\rm G}$ modulated and $V_{\rm D}=0$, $(\Delta R/R)_{\rm max}=4.5 \times 10^{-5}$; (b) $V_{\rm D}$ modulated and $V_{\rm G}=0$, $(\Delta R/R)_{\rm max}=6.6 \times 10^{-4}$; (c) $V_{\rm G}$ modulated and $V_{\rm G}=5.0 \ V$, $(\Delta R/R)_{\rm max}=2.9 \times 10^{-4}$; (d) $V_{\rm D}$ modulated and $V_{\rm G}=5.0 \ V$, $(\Delta R/R)_{\rm max}=6.8 \times 10^{-4}$.

III. RESULTS AND DISCUSSION

Figure 2 shows a set of maps of the amplitude of $\Delta R/R$ obtained when scanning the gate surface of one of the devices, before the application of the ESD pulses (all the measurements shown in the following refer to the same transistor). In Figs. 2(a) and 2(c) $V_{\rm G}$ was modulated while in Figs. 2(b) and 2(d) $V_{\rm D}$ was modulated. $V_{\rm D}$ was kept at ground in Fig. 2(a) and $V_{\rm D}$ =5.0 V in Fig. 2(c). The same was applied for Figs. 2(b) and 2(d) concerning $V_{\rm G}$. As one can see, the amplitude signal distribution is quite influenced by the way the device is biased and modulated. A comprehensive analysis of these images is presented in Ref. 8.

In few words, one can say that the signal source for the situation of Fig. 2(a) is the modulation of the channel creation through the charge accumulation at the oxidesemiconductor interface, and we call this signal component as electroreflectance signal. In the case of Fig. 2(b), since $V_{\rm G}$ is zero, the device does not exhibit a channel, and the role of the modulated drain-source voltage is to drive carriers that were photoinjected by the probe beam. Most part of the probe beam is reflected back at the air-polycrystalline silicon interface, but there is a part of the beam that is transmitted through the gate and the SiO₂ layer, reaching the substrate. At each interface the beam is partially reflected back, the final transmitted part being absorbed by the silicon substrate. This absorption generates free carriers, which are able to move in the presence of any electrical field, as such originated by the application of $V_{\rm D}$ voltage. In such a situation a heat source appears at the reverse biased drain junction, caused by the release of energy of the accelerated carriers. Therefore, the obtained map of Fig. 2(b) reveals such a strong temperature variation near the drain, which drops down as one go away in the source direction.

Figure 2(c) represents the case of Fig. 2(a) on which a drain-source current is superimposed because of the nonzero



FIG. 3. (a) Drain-source current as a function of gate-source potential before (solid line) and after ESD pulses (110-V pulse: dashed line; 140-V pulse: dotted line); (b) transconductance curves; (c) leakage current after the 140-V ESD pulse as a function of gate-body voltage.

value of $V_{\rm D}$. There is, therefore, a Joule effect that causes temperature increase all over the channel. This temperature variation is higher at the drain side because of the pinch off of the channel, which makes the electrical resistance per unit length higher near the drain. Finally, the map of Fig. 2(d) results from the superposition of the effect observed in Fig. 2(b) and the Joule effect. For this kind of modulation, when the probe beam intensity is lowered until the photoinjected carrier component becomes negligible, i.e., 16% of full probe intensity in our measurements, the Joule effect component is isolated (map not shown). The four maps depicted above will be considered as reference maps.

As described in Sec. II, the threshold voltage was determined and the leakage current was measured along the essays. Figure 3 shows the results of the electrical characterization of the device of Fig. 2, before and after ESD pulses application. In Fig. 3(a) one can see I_{DS} vs V_{GS} curves, and in



FIG. 4. Thermoreflectance maps (signal amplitude) obtained by scanning the probe beam on the gate of the device after the 140-V ESD pulse (same experimental conditions of Fig. 2). (a) $(\Delta R/R)_{max} = 2.5 \times 10^{-3}$; (b) $(\Delta R/R)_{max} = 7.7 \times 10^{-4}$; (c) $(\Delta R/R)_{max} = 6.1 \times 10^{-4}$; (d) $(\Delta R/R)_{max} = 2.0 \times 10^{-3}$.

Fig. 3(b) the transconductance is shown. From the maximum of the transconductance curves, the threshold voltage is obtained by extrapolating the tangent of $I_{\rm DS}$ vs $V_{\rm GS}$ until it crosses the V_{GS} axis. Before ESD pulses, the threshold voltage thus determined was 1.04 V. After the 100-V pulse this voltage decreased to 0.61 V (curves not shown), and after the 110-V pulse this threshold was no longer positive [dashed curve in Fig. 3(b)]. This result indicates that, after a given intensity, the applied pulses produced a permanent channel. It can be confirmed by the nonzero I_{DS} for $V_{GS}=0$ in Fig. 3(a). Despite this important change in the structure, the modulation of the channel creation and of the current, imposed by the modulated potentials during thermoreflectance measurements, seems to remain unaffected. This conclusion comes from the fact that no significant differences were observed in the thermoreflectance maps at this stage.

After the 140-V pulse the transconductance curve was drastically changed [dotted curve in Fig. 3(b)]. Moreover, the drain-source current becomes negative for $V_{\rm G}$ greater than 4.0 V [dotted curve in Fig. 3(a)]. At this point, the leakage current $I_{\rm GB}$, which remained of the order of nanoamperes until the 140-V pulse, became significantly larger. Its behavior is shown in Fig. 3(c) as a function of $V_{\rm GB}$. These results indicate that a dielectric disruption took place at the oxide layer.

The thermoreflectance maps obtained after the 140-V pulse also presented dramatic changes, as one can see in Fig. 4 [the sequence (a)–(d) in Fig. 4 respects the same experimental conditions of Fig. 2]. From these maps one can see that there are strong peaks at the upper part of the drain side of the gate, indicating the location of the damage produced by ESD. Particular attention must be attached on Fig. 4(a), for which the maximum amplitude is $\Delta R/R=2.5 \times 10^{-3}$, which should be compared to $\Delta R/R=4.5 \times 10^{-5}$ from Fig. 2(a). In other words, the peak in the electroreflectance signal is about 60 times higher than the signal amplitude before damage. This strong contrast must be compared to the low

optical contrast observed in the photomicrography of the device, after the pulse of 140 V, in which a small mark appears at the upper side of the drain. The reason for such a huge electroreflectance signal around the defect is the fact that the local charge density becomes strongly disturbed by the current flow from the gate to the substrate. When the gate potential is modulated, this leakage current is also modulated, and the local characteristics of the channel are completely changed. Since the leakage current is not negligible, a contribution coming from the Joule effect is superimposed to the electrical effect. The signal phase remains almost constant, around zero, in the whole scanned area (same behavior of reference map).

Figure 4(b) presents the signal coming mainly from the photoinjected carriers, which generate heat at the reversed drain junction. The signal amplitude distribution, in this case, remains almost the same of Fig. 2(b), becoming a bit higher around the defect. This increase must be caused by the Joule effect associated with the current from the drain to the gate (leakage current), which is grounded in this measurement. The Joule effect in this case is in phase with the modulated voltage V_D , and the overall shape of the amplitude distribution is not too much altered. The phase drops towards the source, as in the case of the corresponding reference map.

From Fig. 4(c) one can see three main features: first, the Joule signal, far from the defect, is preserved-similar to the case of Fig. 2(c); second, the strong peak around the defect observed in Fig. 4(a) is also present, shifted a little to the source side, and not so intense; and third, a 180-deg signal phase shift near the defect, at the drain side, appears. This can be easily observed in the dashed curve of Fig. 5(a), which presents also the amplitude along a line crossing the defect, from the drain to the source. This phase shift accounts to a minimum in the amplitude see the lobe between the drain and defect in the map of Fig. 4(c), and also the solid line in Fig. 5(a)]. This change of sign of the signal near the drain is related to the Joule component, since the current flow from the drain to the gate must be out of phase with respect to that from the gate to the source ($V_{\rm D}$ =5.0 V, $V_{\rm S}$ =0, and $V_{\rm G}$ modulated from zero to 5.0 V). The effect of the 180-deg phase shift, besides creating the minimum in the amplitude, makes the maximum to migrate to the right [source side—compare with Fig. 4(a)].

Finally, when comparing Fig. 4(d) with Fig. 2(d) one can observe a remarkable difference. The well-distributed hot line at the drain side found before degradation gives place to a strong peak around the defect. The peak intensity is roughly three times the maximum found in Fig. 2(d). The phase map is also distorted (not shown). The signal phase decreases when one moves far from the defect. It seems, therefore, that the signal source is, in this case, a thermal one, as in the case of Fig. 2(d). The constant gate potential, somewhat transmitted through the crack, seems to attract the photoinjected carriers, restricting the spatial distribution of relaxation to the defect zone. Furthermore, heat generation due to the Joule effect also contributes in the same way. Since the gate potential is fixed at 5.0 V, the modulation of both effects described above is out of phase with respect to the drain voltage $V_{\rm D}$, i.e., carriers are attracted to the defect



FIG. 5. Thermoreflectance curves (amplitude: solid lines, and phase: dashed lines) across the defect of Fig. 4, from the drain (position=5 μ m) to the source (position=25 μ m). (a) Experimental conditions: same as Fig. 4(c); (b) experimental conditions: same as Fig. 4(d).

when $V_{\rm D}$ is minimum, as well as the leakage current is maximum when $V_{\rm D}$ is minimum. This fact shifts the signal phase of 180 deg [dashed line in Fig. 5(b)], so the value of the phase near the defect is 180 deg instead of zero, as observed in the reference measurement.

IV. CONCLUSIONS

In conclusion, the high sensitivity of the thermoreflectance microscopy in detecting ESD degradation in MOSFET structures was demonstrated. The electroreflectance contribution to the signal was found to be the more sensitive, giving the highest contrast in the measured maps. The distinct types of images after degradation were compared to those obtained before ESD pulses and an interpretation for the image changes was presented.

The thermoreflectance contrast was found to be two orders of magnitude higher than the optical contrast. The technique does not require special preparation of the sample, making its application easy and fast. The nondestructive character of the technique allows monitoring progressive sample treatment, as aging tests and cumulative electrostatic discharge pulses discussed in this paper.

ACKNOWLEDGMENTS

Authors acknowledge the Brazilian agencies FAPESP, CNPq, and FAEP-Unicamp for financial support.

- ¹N. K. Clark, K. Parat, T. J. Maloney, and Y. Kim, J. Electrost. **38**, 113 (1996).
- ²S. Voldman, J. Never, S. Holmes, and J. Adkisson, Microelectron. Reliab. 38, 145 (1998).
- ³A. M. Mansanares, in *Semiconductors and Electronic Materials*, Progress in Photothermal and Photoacoustic Science and Technology Series Vol. IV, edited by A. Mandelis and P. Hess (SPIE Optical Engineering Press, Bellingham, Washington, USA, 2000), Chap. 3, pp. 75–110.
- ⁴P. W. Epperlein, Jpn. J. Appl. Phys., Part 1 **32**, 5514 (1993).
- ⁵A. M. Mansanares, D. Fournier, and A. C. Boccara, Electron. Lett. **29**, 2045 (1993).
- ⁶A. M. Mansanares, J. P. Roger, D. Fournier, and A. C. Boccara, Appl. Phys. Lett. **64**, 4 (1994).
- ⁷L. C. O. Dacal, A. M. Mansanares, and E. C. da Silva, J. Appl. Phys. **84**, 3491 (1998).
- ⁸J. A. Batista, A. M. Mansanares, E. C. da Silva, and D. Fournier, J. Appl. Phys. **82**, 423 (1997).
- ⁹J. A. Batista, D. Takeuti, A. M. Mansanares, and E. C. da Silva, Anal. Sci. **17**, S73 (2001).
- ¹⁰D. Dietzel, H. Roecken, C. Crell, B. K. Bein, and J. Pelzl, Anal. Sci. 17, S70 (2001).
- P. Voigt, J. Hartmann, and M. Reichling, J. Appl. Phys. 80, 2013 (1996).
 S. Grauby, G. Tessier, V. Rachet, S. Hole, and D. Fournier, Anal. Sci. 17,
- S67 (2001). ¹³J. A. Batista, A. M. Mansanares, E. C. da Silva, C. C. Vaz, and L. C. M.
- J. A. Batista, A. M. Mansanares, E. C. da Shiva, C. C. vaz, and L. C. M. Miranda, J. Appl. Phys. **88**, 5079 (2000).
- ¹⁴G. T. Dangelmayer, ESD Program Management: A Realistic Approach to Continuous Measurable Improvement in Static Control, 2nd ed. (Kluwer Academic Publishers, Norwell, MA, 1999).
- ¹⁵ESD STM5.1-2001—ESD Association Standard Test Method for Electrostatic Discharge Sensitivity Testing—Human Body Model (HBM)— Component Level, Electrostatic Discharge Association, 2001.
- ¹⁶L. R. de Freitas, A. M. Mansanares, E. C. da Silva, M. C. B. Pimentel, S. Finco, G. Tessier, and D. Founier (unpublished).

Thermoreflectance measurements on test microelectronic devices at several probe wavelengths: Comparison between CCD and focused laser techniques

L.R. de Freitas¹, A.M. Mansanares¹, E.C. da Silva¹, M.C.B. Pimentel², S. Finco², G. Tessier³ and D. Fournier³

 ¹Instituto de Física "Gleb Wataghin", Universidade Estadual de Campinas, Unicamp, Cx. P. 6165, 13083-970, Campinas, São Paulo, Brazil
 ²Centro de Pesquisa Renato Archer, CenPRA, 13082-120, Campinas, São Paulo, Brazil
 ³Laboratoire d'Instrumentation, UPMC, UPRA 0005 du CNRS, 10 rue Vauquelin, 75005 Paris, France

Abstract. In this paper we present thermoreflectance measurements on polycrystalline silicon conducting tracks for several wavelengths of the probe beam. Two distinct experimental setup were employed, namely, the CCD camera setup and the focused laser setup. It is shown that the thermoreflectance signal behavior is closely related to the derivative of the optical reflectance with respect to the wavelength.

1. INTRODUCTION

Heating of microelectronic devices is a major cause for failure. The thermoreflectance microscopy provides a temperature distribution map of the operating device with high resolution [1, 2]. However, such devices are composed of several layers and thermoreflectance signals depend strongly on the optical and thermal properties of the materials and on the probe wavelength. Moreover, transparent layers such as those used for passivation or electrical isolation, cause interference fringes, rendering necessary a spectral study. By varying the wavelength one can pass from a maximum to a minimum of the thermoreflectance signal, as it will be demonstrated below. Therefore, it is essential to find the ideal wavelength to investigate each component.

In order to investigate the wavelength dependence of the thermoreflectance signal, a chip was specially developed containing structures such as resistors and MOSFET's. Similar structures were implemented with different materials. These structures were investigated using two experimental setups, namely, the visible CCD camera setup [3, 4], which uses a lamp to produce the probe light and stores the whole thermal image in a snap shot, and the focused laser setup [2], which uses several laser lines as probe and stores the thermal image by scanning the sample surface. The main advantages of the CCD technique are the faster data acquisition and the easy tunability obtained by using a linear variable interference filter. On the other hand, the focused laser technique has the capability of performing measurements in high modulation frequencies using homodyne detection, besides its higher sensitivity.

2. EXPERIMENTAL

The measurements presented in this paper were done on a 1.6 μ m thick and 20 μ m wide polycrystalline-silicon conducting track on a silicon substrate. Between the track and the substrate there is a 0.5 μ m SiO₂ isolating layer. Photothermal Reflectance measurements were performed on the

track under fixed current amplitude and frequency. The probe wavelength was changed by using several Ar^+ laser lines and a 670 nm diode laser, or by using white lamp and filter in the CCD technique. The focused laser is about 1.0 µm diameter on the sample surface, and the CCD image is composed by 1000 x 1000 pixels. The single photodetector signal is lock-in analyzed in the case of the focused laser technique. On the other hand, the CCD camera acquires series of four different images, each one integrated over one-fourth of the period of the heating modulation. A proper combination of these images gives the amplitude and phase of the thermoreflectance signal.

3. RESULTS AND DISCUSSION

Figure 1 shows the optical (a) and thermal images (b and c) of the polycrystalline-silicon track connected to a Al terminal (left side), as obtained using the CCD setup operating at 650 nm. The current through the resistor was modulated from zero to 10 mA at 10 Hz. For such a low modulation frequency, the temperature distribution is quite close to that of the DC regime, i.e., there is no considerable attenuation from the heat source to the probed surface. As one can see from Fig. 1(b), the heat sources are distributed along the track. The maximum value of $\Delta R/R$ (bright region) is 2.4 x 10⁻², and the phase has the value of zero on the track and is not well defined (noise phase) on the substrate.



Figure 1. (a) Optical image, (b) $\Delta R/R$ amplitude and (c) phase (deg). Area = 70 μ m × 70 μ m, f = 10 Hz, λ = 650nm

Seeking for the probe wavelength response of the thermoreflectance signal, the optical reflectance spectrum of the track structure was measured in the range from 500 to 800 nm, which is shown in Fig. 2(a). As one can see, there are maxima and minima related to the constructive and destructive interferences caused by the reflections in the track interfaces and oxide layers interfaces. The temperature increase caused by Joule dissipation promotes both the refractive indexes variation and expansion of the layers in the structure. Therefore, the optical path differences between reflections occurring at distinct interfaces are shifted with temperature. Both the temperature coefficient of the refractive index, dn/dT, and the thermal expansion coefficient, α_T , are positive for the materials and the employed wavelengths. Thus, the optical path difference, nd (d being the thickness of a given layer), increases with temperature, the interference peaks being shifted to longer wavelengths (red shift). Hence, the overall behavior of dR/dT for the structure is closely related to (minus) the derivative of the reflectance with respect to the wavelength, dR/d λ .

Figure 2(b) shows the curve dR/d λ , numerically obtained from curve of Fig. 2(a) and the measured values of Δ R/R, which are proportional to dR/dT, as obtained from measurements similar to that of Fig. 1 at several wavelengths. An appropriate normalization of Δ R/R was done to allow its plot in the same graph view of dR/d λ . As it can be seen, the thermoreflectance signal follows quite closely the oscillations of dR/d λ , thus confirming the basis of the reflectance modulation.



Figure 2. (a) Optical reflectance spectrum of the track structure; (b) Derivative of the reflectance with respect to the wavelength (continuous curve) and normalized values of $\Delta R/R$ (closed circles) as measured by the CCD technique at several wavelengths.

Measurements using the focused laser technique were performed on the same sample at the modulation frequency of 100 kHz for a peak current of 25 mA. Several line-scans were made across the track width. The Ar⁺ laser lines at 457.9, 476.5, 488.0, 496.5, 501.7, 514.5 nm and the 670 nm laser diode were used. Figure 3 shows the values of $\Delta R/R$ for these measurements (open circles), added to those obtained with the CCD technique (closed circles). As one can see, the thermoreflectance signal for the Ar⁺ laser lines is at least one order of magnitude lower than the observed in the range 596-725 nm. The main raison for this must be related to the fact that the interference peaks becomes less and less pronounced as the wavelength decreases, rendering the reflectance curve smooth. It has to be observed that the absolute values of $\Delta R/R$ at 665 nm (CCD) and 670 nm (focused laser) are of the same order of magnitude.

A final consideration is that at high modulation frequencies, the temperatures at the distinct interfaces are not the same, resulting in differentiated reflectance modulation at these interfaces. Then, the resulting interference pattern will be modulated in a distinct way than it was in the DC regime limit (CCD camera measurements), as clearly demonstrated in Ref. 2. However, at 100 kHz the thermal diffusion length for silicon is about 15 μ m, large enough to ensure a quite uniform temperature distribution within the upper structure.



Figure 3. Absolute values of Δ R/R as obtained by the focused laser (open circles) and CCD (closed circles) techniques as a function of wavelengths. The values were normalized to a current of 10 mA. The measurements at 665 and 670 nm, performed with distinct setups, are highlighted in the dashed circle.

4. CONCLUSIONS

In this paper we showed that the thermoreflectance signal of microelectronic structures is strongly dependent on the probe wavelength. Such dependence remains on the fact that reflectance in the multilayer structures involves interferences between rays coming from distinct interfaces. These interferences results in oscillating pattern for the reflectance. Such a pattern is shifted by temperature increase, and as a consequence, the thermoreflectance signal is strongly enhanced around the wavelengths were dR/d λ have maximum magnitude. Besides the interference effects, when there is an absorption band of the material close to the probe wavelength, the temperature coefficient of the reflectance, dR/dT, can experience significant changes as a function of wavelength. Finally, a good agreement between the two techniques was observed for 665 mn and 670 nm probe wavelengths.

Acknowledgments

FAPESP, CNPq and FAEP-Unicamp supported this work.

References

- [1] J. A. Batista, A. M. Mansanares, E.C. da Silva and D. Fournier, J. Appl. Phys. 82 (1997), 423.
- [2] J. A. Batista, A. M. Mansanares, E. C. da Silva, C.C. Vaz and L. C. M. Miranda, J. Appl. Phys. 88 (2000) 5079.
- [3] S. Grauby, B. C. Forget, S. Holé, D. Fournier, Rev. Sci. Instrum. 70 (1999) 3603.
- [4] G. Tessier, S. Holé, D. Fournier, Appl. Phys. Lett. 78 (2001) 2267.