Modifikation optischer Nichtlinearitäten in Silizium

Dissertation

zur Erlangung des

Doktorgrades der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)

der

Naturwissenschaftlichen Fakultät II - Chemie und Physik
der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg,

vorgelegt

von Herrn Dipl. - Phys. Clemens Schriever
geboren am 24.11.1981 in Münster

Gutachter

1: Jun.-Prof. Dr. Jörg Schilling, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg
2: PD Dr. Gerhard Seifert, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg
3: Prof. Dr. Manfred Eich, Technische Universität Hamburg-Harburg

Tag der Verteidigung 05.11.2013

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung **1**

2 Physikalische Grundlagen nichtlinearer optischer Effekte zweiter Ordnung **4**
2.1 Optische Nichtlinearität zweiter Ordnung $\left(\chi^{(2)}\right)$ 4
2.2 Frequenzverdopplung in Silizium 6

3 Allgemeine Verfahren zur Probenherstellung **11**
3.1 Herstellung verspannter Siliziumproben 11
3.2 Lithografieverfahren 13
3.3 Trockenätzverfahren zur Probenstrukturierung 16

4 Allgemeine Untersuchungsmethoden **22**
4.1 Verspannungsmessungen an strukturierten und unstrukturierten Proben 22
4.2 Messung von Frequenzverdopplungseffekten in Reflexion 27
4.3 Die Finite-Elemente-Methode 31

5 Einfluss von Verspannungen auf Frequenzverdopplungseffekte in unstrukturierten Siliziumproben **35**
5.1 Vorbetrachtungen 35
5.2 Zusammenhang zwischen Silizium-Kristallstruktur und $\chi^{(2)}$-Tensorkomponenten . 38
5.3 Einfluss der Verspannung auf die nichtlineare Suszeptibilität 41

6 Frequenzverdopplungseffekte in Silizium-Gitterstrukturen **47**
6.1 Herstellung periodischer Gitterstrukturen in Silizium 47
6.2 Verspannungscharakterisierung mittels HRXRD 49
6.3 Frequenzverdopplung in Silizium-Gitterstrukturen 54
6.4 Diskussion 56

7 Frequenzverdopplungseffekte in verspannten Silizium-Wellenleitern **62**
7.1 Herstellung verspannter Siliziumwellenleiter 62
7.2 Lineare Charakterisierung der Siliziumwellenleiter 65
7.3 Numerische Simulation verspannter Siliziumwellenleiter 66
7.4 Nichtlineare Transmissionsmessungen 68
7.5 Diskussion der Frequenzverdopplungseffekte 73
7.6 Zusammenfassung verspannungsinduzierte Frequenzverdopplungseffekte 76

8 Numerische Untersuchung lokal infiltrierter eindimensionaler Wellenleiter-Schlitz-Mikroresonatoren **77**
8.1 Prinzipien der Lichtausbreitung in photonischen Strukturen 77
8.2 Struktur- und Parameterdefinition 84
8.3 Simulationsergebnisse und Interpretation 88

8.4 Realisierungskonzept für eindimensionale Wellenleiter-Schlitz-Mikroresonatoren . 95
8.5 Anwendungsbeispiel bistabiles Verhalten 96

9 Zusammenfassung **98**

A Anhang **101**
A.1 Prozessparameter der Lithografieverfahren 101
A.2 Zusammenhang zwischen Dehnungs- und Biegeverspannung in einer dünnen Oxidschicht 102
A.3 Abschätzung des Messfehlers der in Reflexionsmessung bestimmten verspannungsinduzierten Suszeptibilitätserhöhung 103
A.4 Analyse von Propagationsverlusten in Wellenleitern mittels Fouriertransformation 104

B Abkürzungsverzeichnis **108**

Literaturverzeichnis **108**

Abbildungsverzeichnis **120**

Danksagungen **124**

Lebenslauf **126**

Eigene Veröffentlichungen und Vorträge **127**

Eidesstattliche Erklärung **129**

1 Einleitung

Die heutige Zeit wird oft als Zeitalter der Informationstechnologie bezeichnet, da deren Entwicklungen die industrielle Gesellschaft am stärksten beeinflusst haben. Informationsverarbeitende Systeme haben dabei jeden Bereich des menschlichen Lebens erobert, seien es der internetfähige Fernseher, das eigenständig parkende Auto oder komplexe medizinische Operationsinstrumente. Der Leistungsträger dieser Entwicklungen ist die Mikroelektronikindustrie, die immer komplexere und leistungsfähigere elektronische Bauteile entwickelt, um den wachsenden Anforderungen des Marktes gerecht zu werden. Ihre Arbeitsplattform ist dabei Silizium, welches sich als intrinsischer Halbleiter mit seinen speziellen elektrischen und mechanischen Eigenschaften besonders eignet. Außerdem ist es nahezu unbegrenzt verfügbar und somit ein sehr preisgünstiges Material.

Trotz der enormen technologischen Entwicklung seit der Erfindung des ersten Bipolartransistors (1947) [1] fällt es der Halbleiterindustrie zunehmend schwerer, das sich selbst gestellte MOOREsche Gesetz [2] zu erfüllen und die Komplexität der Schaltkreise alle zwei Jahre zu verdoppeln. Der Grund dafür ist, dass die derzeitige Technologie an physikalische Grenzen stößt. So ist ein Problem die begrenzte Geschwindigkeit der Ladungsträger, die für die Informationsübermittlung auf dem Computerchip sorgen. Einen möglichen Ausweg stellt hier die integrierte Optik dar, bei der die Informationsübertragung wesentlich schneller durch Lichtwellen erfolgt. Begründet durch die Entwicklung des Lasers durch Maiman *et al.* (1960) [3] hat dieses Forschungsgebiet seit 1969, dem Jahr, in dem das Konzept integrierter optischer Schaltungen erstmalig vorgestellt wurde [4], eine ähnlich starke Entwicklung erfahren wie das Feld der Mikroelektronik. Nachdem sich beide Felder etliche Jahre nebeneinander entwickelt haben, gibt es in jüngerer Zeit immer mehr wechselseitige Anknüpfungspunkte, die eine Zusammenarbeit beider Forschungsgebiete gefördert und zur Entwicklung optoelektronischer Bauteile geführt haben.

Auch für die integrierte Optik ist Silizium als Materialsystem von großem Interesse, da es neben dem bereits erwähnten geringen Preis auch optische Eigenschaften im Infrarotbereich aufweist, die es für integrierte optische Anwendungen attraktiv machen. Beispielsweise besitzt es einen hohen Brechungsindex, der es ermöglicht, sehr kompakte optische Strukturen zu realisieren. Ein weiterer Vorteil ist die Nutzung von Synergien im technologischen Bereich. So lässt sich die in der Mikroelektronik etablierte CMOS-Technologie (*engl. Complementary Metal Oxide Semiconductor*) ebenfalls für die Herstellung optischer Strukturen verwenden. In den letzten Jahren ist so ein beachtliches Repertoire an photonischen Bauteilen entstanden, das das Potential hat, mikroelektronische Schaltkreise zu ersetzen bzw. zu verbessern, wobei die Einführung des ersten kommerziell gefertigten photonischen Chips durch IBM (2010) einen Meilenstein in dieser Entwicklung darstellt [5].

Um jedoch photonische Chips herzustellen, die in ihrem Funktionsumfang ihren mikroelektronischen Gegenstücken ebenbürtig sind, gilt es, eine fundamentale Hürde zu überwinden. So fehlen in dem Kasten photonischer Werkzeuge aktive Bauelemente, die es erlauben, in Analogie zu elektronischen Transistoren Licht durch Licht zu beeinflussen. Gerade in Silizium können jedoch die dazu erforderlichen nichtlinearen optischen Eigenschaften nicht effektiv genutzt werden.

Dass Silizium als optisch aktives Material im nahen Infrarotbereich ungeeignet ist, lässt sich damit begründen, dass Effekte, die auf der nichtlinearen Suszeptibilität dritter Ordnung ($\chi^{(3)}$) beruhen, mit einer starken Zwei-Photonen-Absorption verbunden sind. Außerdem weist Silizium im Volumen keine dipolare optische Nichtlinearität zweiter Ordnung $\left(\chi^{(2)}\right)$ auf, die für

Frequenzkonversionseffekte oder den POCKELS-Effekt genutzt werden kann. Dies liegt daran, dass Silizium eine zentrosymmetrische Kristallstruktur besitzt und $\chi^{(2)}$-Volumeneffekte nur in *nicht*zentrosymmetrischen Medien auftreten können.

Bisher wurden daher zur Erzeugung von Schaltverhalten und Signalmodulation hauptsächlich Effekte wie Ladungsträgerinjektion bzw. -absaugung (*engl.: Carrier Injection / Depletion*) [6–8] verwendet. Dabei erfolgt die Modulation durch eine Änderung der Absorption, indem Ladungsträger in den Wellenleiter eingebracht bzw. abgesaugt werden. Da dieser Effekt damit wieder von der Geschwindigkeit der Ladungsträger abhängt, ist auch hier die Modulationsbandbreite eingeschränkt. Prinzipiell lässt sich auch der KERR-Effekt, der auf der nichtlinearen Suszeptibilität dritter Ordnung beruht, nutzen, um den Brechungsindex in speziellen Resonatorstrukturen zu ändern und dadurch deren Transmissionscharakteristik zu modulieren (bistabiles Schaltverhalten). Hierfür sind allerdings sehr hohe Anregungsintensitäten erforderlich, was, wie erwähnt, zu Zwei-Photonen-Absorption mit darauffolgender Absorption durch freie Ladungsträger führt. Daher ist hier die Modulationsgeschwindigkeit durch die Rekombinationsrate der freien Ladungsträger limitiert.

Grundidee und Ziele der Arbeit

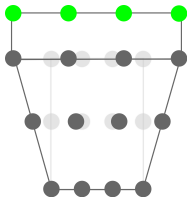


Abbildung 1.1: Schematische Darstellung einer inhomogen verzerrten Kristallstruktur. Durch den resultierenden Verzerrungsgradienten lässt sich die Zentrosymmetrie des Kristalls brechen.

Der Schwerpunkt dieser Arbeit liegt daher auf der Untersuchung von Methoden, die es ermöglichen, diese Hindernisse zu überwinden. Der Hauptteil behandelt die direkte Modifikation der nichtlinearen optischen Eigenschaften im Silizium und zielt auf die Erzeugung einer nichtlinearen Suszeptibilität zweiter Ordnung ($\chi^{(2)}$) ab. Dies soll durch einen Verzerrungsgradienten geschehen, der durch eine inhomogene Verzerrung des Siliziumkristalls mit Hilfe einer von außen eingebrachten Verspannung erzeugt wird. Die zugrundeliegende Idee ist, dass durch die inhomogene Verzerrung des Kristalls die Zentrosymmetrie des Kristallgitters gebrochen wird, die bisher das Auftreten der Suszeptibilität verhindert hat (siehe Abb. 1.1). Das Einbringen der Verzerrungen soll hier durch das Aufbringen verspannter Siliziumdioxid- bzw. Siliziumnitridschichten erfolgen. Diese Herangehensweise hat den Vorteil, dass das Silizium weiterhin mit den Verfahren der CMOS-Technologie bearbeitet werden kann. Das Einbringen von Verzerrungen wird in der Mikroelektronik bereits erfolgreich genutzt, um die Ladungsträgergeschwindigkeiten in Mikrochips zu erhöhen („Strained-Silicon"-Technologie) [9]. Auch im Bereich der linearen integrierten Optik wurden bereits Verspannungen eingesetzt, um beispielsweise Doppelbrechungseffekte [10] zu erzeugen oder die Konversionseffizienz von Raman-Konvertern zu erhöhen [11, 12]. Im Bereich nichtlinearer integrierter Bauelemente gibt es bisher nur wenige Untersuchungen. Den Anfang hat eine Veröffentlichung von Jacobsen et al. (2006) [13] gemacht, in der das Konzept eines elektro-optischen Modulators auf Basis eines verspannungsinduzierten Pockels-Effekt diskutiert wurde. Zwei erst kürzlich erschienene Publikationen befassen sich ebenfalls mit den nichtlinearen Eigenschaften in verspanntem Silizium. Chmielak *et al.* [14] diskutieren dabei ebenfalls den Pockels-Effekt in nitridbeschichteten Wellenleitern. Cazzanelli *et al.* [15] berichten von Frequenzverdopplungseffekten in mit Nitrid verspannten Wellenleitern. Allerdings sind die bislang veröffentlichten Ergebnisse und Interpretationen nicht widerspruchsfrei. So wird auch das Siliziumnitrid selbst [16] sowie die Grenzfläche von Nitrid und Silizium [17] für das zugrundeliegende $\chi^{(2)}$ verantwortlich gemacht. Es ist daher eine behutsame Analyse des komplexen Zusammenhangs zwischen Gitterverzerrungen und der Suszeptibilität zweiter Ordnung erforderlich.

Ziel im Hauptteil der Arbeit ist es daher, den Einfluss einer inhomogenen Verzerrung auf das $\chi^{(2)}$ im Silizium zu untersuchen. Darüber hinaus soll geklärt werden welche Auswirkungen die verspannenden Schichten selbst bzw. deren Grenzflächen auf die effektive Nichtlinearität haben, deren Stärke hier abgeschätzt werden soll. Zum Nachweis der nichtlinearen Suszeptibilität zweiter Ordnung wird hier der Frequenzverdopplungseffekt beobachtet, der durch das $\chi^{(2)}$ hervorgerufen wird. Dabei soll der Zusammenhang zwischen inhomogener Verspannung und $\chi^{(2)}$ zunächst an dem relativ einfachen System einer mit einem thermischen Oxid verspannten Siliziumprobe mit Hilfe von Reflexionsmessungen untersucht werden. Um die erforderlichen Messungen durchzuführen, wurde im Rahmen dieser Arbeit ein entsprechender Messplatz entwickelt und aufgebaut. Im Anschluss daran soll der Einfluss der Verzerrungen in Gitterstrukturen untersucht werden, um deren Auswirkungen in einem ausgedehnten Volumen zu bestimmen. Die zur Herstellung der Gitterstrukturen verwendeten Ätzrezepte wurden ebenfalls im Rahmen dieser Arbeit entwickelt. Darüber hinaus sollen verspannte Silizium-Wellenleiter mit Hilfe von Transmissionsmessungen untersucht werden. Die Parameter der dazu hergestellten Proben sind dabei so gewählt, dass eine Überprüfung der zuvor erwähnten Widersprüche möglich ist.

Der zweite in dieser Arbeit untersuchte Ansatz stellt eine Alternative zum zuvor vorgestellten Konzept dar. Er eignet sich dazu, $\chi^{(3)}$-Effekte in Siliziumbauteilen zu verstärken und gleichzeitig den Effekt der Zwei-Photonen-Absorption zu reduzieren. Dabei werden nicht die nichtlinearen optischen Eigenschaften des Siliziums direkt genutzt, sondern die eines optisch stark nichtlinearen Materials, das in Kontakt mit dem Siliziumbauteil gebracht wurde. Der einfachste Fall einer solchen „Hybridstruktur“ ist ein Wellenleiter, der von einem nichtlinearen Polymer umgeben ist [18]. Eine Weiterentwicklung dieser Struktur stellt ein Schlitzwellenleiter dar, bei dem zusätzlich zur Umgebung auch der Schlitz mit dem nichtlinearen Medium gefüllt wird [19]. Mit Hilfe solcher Strukturen lassen sich aktive Bauteile wie z.B. optische Modulatoren realisieren, die auf beschichteten Ringresonatorstrukturen basieren [20]. Der Vorteil bei diesem Ansatz ist, dass sich ein breites Spektrum von Materialien mit bereits bekannten optischen Eigenschaften verwenden lässt.

Ziel der Arbeit ist hier die Entwicklung einer Wellenleiterstruktur, die eine möglichst starke Interaktion des Lichts mit dem eingebrachten nichtlinearen Material auf möglichst kleinem Raum gewährleistet. Diese Struktur soll mit Hilfe numerischer Methoden entwickelt und ihre Anwendbarkeit als nichtlineares Bauteil untersucht werden.

Gliederung der Arbeit

Die Arbeit gliedert sich wie folgt: Zunächst werden die physikalischen Grundlagen des Effekts der Frequenzverdopplung beschrieben. Anschließend werden in Kapitel 3 die Methoden zur Herstellung der untersuchten Proben erläutert, wobei ein Schwerpunkt auf den in dieser Arbeit entwickelten Trockenätzverfahren liegt. Diesem schließt sich ein Kapitel über die am häufigsten in dieser Arbeit verwendeten experimentellen und numerischen Untersuchungsmethoden an. Daran anschließend werden die Ergebnisse der Reflexionsmessungen zur Untersuchung des Zusammenhangs zwischen aufgebrachter Verspannung und der induzierten Nichtlinearität in planaren Siliziumproben vorgestellt und diskutiert. Danach wird in Kapitel 6 der Einfluss eines größeren verspannten Volumens auf die Nichtlinearität diskutiert und notwendigerweise das Verfahren zur Messung von Frequenzverdopplungseffekten in Reflexion genauer analysiert. In Kapitel 7 wird die Frequenzverdopplung in verspannten Siliziumwellenleitern in Transmission untersucht, deren Ursprung analysiert und die in der Literatur auftretenden Widersprüche diskutiert. Zum Schluss wird in Kapitel 8 ein neuartiges Konzept einer photonischen Hybridstruktur vorgestellt und numerisch analysiert. Des Weiteren wird deren Anwendbarkeit als opto-optischer Schalter getestet.

2 Physikalische Grundlagen nichtlinearer optischer Effekte zweiter Ordnung

In diesem Kapitel wird eine Einführung in die physikalischen Grundlagen des Effektes der Frequenzverdopplung gegeben. Für ein besseres Verständnis der Untersuchungen in Kapitel 5 - 7 wird dieser zunächst allgemein erläutert und im Anschluss der Einfluss der Kristallstruktur von Silizium auf den Frequenzverdopplungseffekt diskutiert.

2.1 Optische Nichtlinearität zweiter Ordnung $\left(\chi^{(2)}\right)$

Beim Effekt der Frequenzverdopplung (*engl.: Second harmonic generation (SHG)*) handelt es sich um einen Prozess nichtlinearer Licht-Materie Wechselwirkung, bei dem Licht einer bestimmten Frequenz vom Material in Licht mit der doppelten Frequenz (die zweite Harmonische) umgewandelt wird. Die Stärke dieser Wechselwirkung wird durch die nichtlineare Suszeptibilität zweiter Ordnung $\chi^{(2)}$ beschrieben.

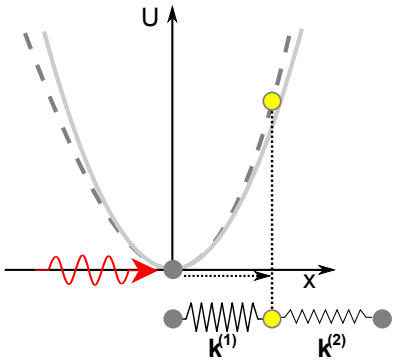


Abbildung 2.1: Potentielle Energie des Elektrons in einem zentrosymmetrischen Medium (durchgehende Linie) und einem nichtzentrosymmetrischen Medium (gestrichelte Linie.) Bei nichtlinearer Anregung (rot) eines Elektrons (gelb) wird dieses so stark ausgelenkt, dass neben der Wechselwirkung $k^{(1)}$ zwischen Elektron und zugehörigem Atom (grau) auch die Wechselwirkung $k^{(2)}$ mit den Nachbaratomen (grau) berücksichtigt werden muss.

Der Effekt der Frequenzverdopplung tritt in der Regel nur bei hohen Anregungsintensitäten auf. In diesem Fall lässt sich die Wechselwirkung zwischen Licht und Materie nicht mehr mit den Modellvorstellungen der linearen Optik beschreiben, bei der die Anregung der Elektronen im Festkörper mit dem Modell eines harmonischen Oszillators erklärt werden konnte. Auf Grund der starken Auslenkung der Elektronen ist es nun erforderlich, zusätzlich die Wechselwirkungen der Elektronen mit den elektronischen Potentialen weiter entfernter Atome zu berücksichtigen (siehe Abb. 2.1), die zur Ausbildung eines asymmetrischen Potentials führen können. Im Oszillatormodell wird zur Berücksichtigung nichtlinearer Effekte zweiter Ordnung die auf das angeregte Elektron wirkende Rückstellkraft F_R bezüglich der Auslenkung in eine Taylor-Reihe bis zum zweiten Glied entwickelt [21]:

$$F_{\mathrm{R}} = -(k^{(1)} + k^{(2)})x - a\,x^2 \ . \tag{2.1}$$

$k^{(1)}$ und $k^{(2)}$ entsprechen der „Federkonstante“ zwischen Elektron und Atom bzw. seinen weiter entfernten Nachbaratomen, a gibt die Stärke der Nichtlinearität an. Das resultierende elektronische Potential (Abb. 2.1) hat die folgende Form:

$$U = \underbrace{\frac{1}{2} m\,\omega_0^2\,x^2}_{\text{linear}} + \underbrace{\frac{1}{3} m\,\delta\,x^3}_{\text{nichtlinear}}. \tag{2.2}$$

Das δ ist hierbei ein Maß für die Stärke der nichtlinearen Wechselwirkung. Der nichtlineare zweite Term sorgt dafür, dass das Potential asymmetrisch bezüglich der Ruheposition des Elektrons ist. Solche Potentiale können nur in Materialien auftreten, die keine Inversionssymmetrie besitzen. Für Materialien mit Inversionssymmetrie wie z.B. Stoffe mit Diamantstruktur gilt $\delta = 0$. Analog zu Gl. 2.1 ergibt sich aus der Schwingungsgleichung für das angeregte Elektron [21] ein zusätzlicher Beitrag zur Polarisation, der quadratisch vom einfallenden elektrischen Feld abhängt:

$$\vec{P}^{(\mathrm{NL})}(t) = \chi^{(1)}\,\vec{E}(t) + \chi^{(2)}\,\vec{E}^2\,(t) \equiv \vec{P}^{(1)}(t) + \vec{P}^{(2)}(t)\ . \tag{2.3}$$

Unter der Annahme, dass das einfallende Feld harmonisch mit der Frequenz ω oszilliert:

$$\vec{E}(t) = E \sin\omega\,t, \tag{2.4}$$

lässt sich der Term zweiter Ordnung anschaulicher darstellen:

$$\vec{P}^{(2)}(t) = 2\,\chi^{(2)}\,E^2 \sin^2\omega t = \chi^{(2)}\,E^2 - \chi^{(2)}\,E^2 \cos 2\omega t\ . \tag{2.5}$$

Der erste Term in Gl. 2.5 beschreibt den Effekt der optischen Gleichrichtung, bei dem ein statisches elektrisches Feld erzeugt wird. Der zweite Term beschreibt den Effekt der Frequenzverdopplung, bei dem die Polarisation mit der doppelten Frequenz (2ω) der Fundamentalwelle schwingt. Um nun das frequenzverdoppelte elektrische Feld der zweiten Harmonischen zu erhalten, wird die nichtlineare Polarisation $\vec{P}^{(\mathrm{NL})}(t)$ als Quellterm in die nichtlineare Wellengleichung eingesetzt [21]:

$$\nabla^2\vec{E} - \frac{n_\omega^2}{c^2}\frac{\partial^2\vec{E}}{\partial t^2} = \frac{\partial^2\vec{P}^{(\mathrm{NL})}}{\partial t^2}\ , \tag{2.6}$$

wobei n_ω der frequenzabhängige Brechungsindex ist und c die Lichtgeschwindigkeit. Die Lösung von Gl. 2.6 liefert das von der Polarisation $\vec{P}^{(2)}(t)$ getriebene Feld, das mit der Frequenz 2ω oszilliert. Somit erlaubt der Frequenzverdopplungseffekt direkte Rückschlüsse auf das $\chi^{(2)}$ des untersuchten Materials.

Ähnliche Prozesse, die durch die Nichtlinearität zweiter Ordnung $\left(\chi^{(2)}\right)$ bestimmt werden, sind die Summenfrequenz-Erzeugung (*engl.: sum frequency generation (SFG)*) und die Differenzfrequenz-Erzeugung (*engl.: difference frequency generation (DFG)*). Bei diesen Prozessen besitzen die involvierten Photonen unterschiedliche Frequenzen ω_1 und ω_2 aus denen Licht der Frequenz $\omega_3 = \omega_1 + \omega_2$ (SFG) bzw. $\omega_3 = \omega_1 - \omega_2$ (DFG) erzeugt wird.

Im Folgenden wird die nichtlineare Suszeptibilität zweiter Ordnung $\chi^{(2)}$ näher betrachtet. Auf Grund der starken Auslenkung der Elektronen und der damit verbundenen Wechselwirkung mit benachbarten Atomen besitzt das $\chi^{(2)}$ eine starke Abhängigkeit von der Kristallstruktur des untersuchten Stoffes und wird in Form eines Tensors dritter Stufe dargestellt. Dieser besitzt im allgemeinen Fall 27 unabhängige Elemente, die die Komponenten der einfallenden elektrischen Felder mit den Komponenten der erzeugten nichtlinearen Polarisation verbinden:

$$P_i(2\omega) = \sum_{j,\,k} \chi_{ijk}^{(2)}(2\omega, \omega)\,E_j(\omega)\,E_k(\omega)\ . \tag{2.7}$$

Hierbei gilt i, j, $k = x$, y, z. In der Praxis lässt sich der $\chi^{(2)}$ Tensor jedoch häufig stark vereinfachen, wie hier im Fall der Erzeugung eines frequenzverdoppelten Signals. In diesem Fall sind

die Frequenzen der Felder E_j und E_k in Gl. 2.7 gleich und ihre Indizes können daher vertauscht werden, was dazu führt, dass viele Tensorkomponenten identisch sind. Dieser Umstand lässt sich nutzen, um den $\chi^{(2)}$ Tensor in einer kontrahierten (KLEINMAN) Notation [21] darzustellen, bei der die Indizes j und k durch den Index l ersetzt werden unter Berücksichtigung des folgenden Schemas:

jk:	11	22	33	23,32	31,13	12,21
l:	1	2	3	4	5	6

Damit verringert sich die Anzahl der unabhängigen Komponenten auf 18 und Gl. 2.7 lässt sich in Matrixform darstellen:

$$\begin{bmatrix} P_x(2\omega) \\ P_y(2\omega) \\ P_z(2\omega) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} & d_{14} & d_{15} & d_{16} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} & d_{24} & d_{25} & d_{26} \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} & d_{34} & d_{35} & d_{36} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} E_x(\omega)^2 \\ E_y(\omega)^2 \\ E_z(\omega)^2 \\ 2\,E_y(\omega)\,E_z(\omega) \\ 2\,E_x(\omega)\,E_z(\omega) \\ 2\,E_x(\omega)\,E_y(\omega) \end{bmatrix}, \tag{2.8}$$

wobei $d_{il} = 1/2\chi_{ijk}$ definiert ist.
Durch die Kristallsymmetrie des untersuchten Stoffs wird die Anzahl der Tensorkomponenten weiter reduziert. Dies wird erreicht, indem die Operatoren der Symmetriegruppe des jeweiligen Kristalls auf den $\chi^{(2)}$ Tensor angewandt werden [22]. Dieser muss unter den entsprechenden Transformationen invariant bleiben, was nur möglich ist, wenn bestimmte Tensorelemente identisch sind bzw. gleich Null gesetzt werden. Der Einfluss der Kristallsymmetrie des Siliziums auf den zugehörigen $\chi^{(2)}$ Tensor wird im Folgenden diskutiert.

2.2 Frequenzverdopplung in Silizium

Wie bereits in der Einleitung erwähnt, besitzt Silizium als Kristall mit Diamantstruktur zentrosymmetrische Struktureigenschaften. Daher sollte es, wie in Abschn. 2.1 beschrieben, keine dipolare Suszeptibilität zweiter Ordnung aufweisen und somit die Beobachtung von Frequenzverdopplungseffekten nicht möglich sein. Dennoch lässt sich durch eine Anregung mit hinreichend großer Intensität eine nichtlineare Polarisation induzieren, die wiederum ein frequenzverdoppeltes Signal hervorruft, das sich sowohl in Transmission als auch in Reflexion beobachten lässt. Ursache dieses stark von der Kristallorientierung des Siliziums abhängigen Signals sind zum einen Quadrupolbeiträge aus dem Innern des Kristalls sowie dipolare Beiträge der Oberfläche an der die Zentrosymmetrie lokal gebrochen wird. Im Folgenden werden diese Quellen des Frequenzverdopplungseffekts und der Einfluss der Kristallsymmetrie näher betrachtet.

Im Gegensatz zu *nicht* zentrosymmetrischen Materialien, bei denen der innere Beitrag auf Grund des größeren Wechselwirkungsvolumens das frequenzverdoppelte Signal dominiert [23], bestimmt im zentrosymmetrischen Material im Wesentlichen der Oberflächenbeitrag das Signal, da hier der Dipolbeitrag aus dem Kristallinneren fehlt. Im Fall einer mit nativem Oxid bedeckten Oberfläche sind beide Beiträge jedoch vergleichbar [24].

Die Hauptquelle des Oberflächenbeitrags zum frequenzverdoppelten Signal ist der in Abschn. 2.1 beschriebene Dipolbeitrag. Dieser tritt auf, da an der Grenzfläche die Zentrosymmetrie des Kristalls gebrochen wird[1]. Die induzierte Polarisation hat die Form:

$$P_i^{\mathrm{O,dp}}(2\omega) = \chi_{ijk}^{O,dp}\, E_j(\omega)\, E_k(\omega). \tag{2.9}$$

[1] Da hier auf einer Seite der Grenzfläche keine Siliziumatome vorhanden sind ergibt sich lokal ein asymmetrisches Potential.

Da im Innern des Siliziumkristalls die Zentrosymmetrie erhalten bleibt, tritt hier nur ein Quadrupolbeitrag auf, der durch einen Tensor vierter Stufe beschrieben werden kann:

$$P_i^{\mathrm{I,qp}}(2\omega) = \Gamma_{ijkl}\, E_j(\omega)\, \nabla_k E_l(\omega)\ . \tag{2.10}$$

Zur Vereinfachung kann Γ_{ijkl} für kubische Kristalle durch eine Anzahl phänomenologischer Konstanten $\delta, \beta, \gamma, \zeta$ ersetzt werden [23–26]. Gleichung 2.10 nimmt dann die folgende Form an:

$$\begin{aligned} P_i^{\mathrm{I,qp}}(2\omega) = &\underbrace{(\delta - \beta - 2\,\gamma)(\vec{E}\,\nabla)E_i}_{1.} + \underbrace{\beta\, E_i(\nabla\cdot\vec{E})}_{2.} + \ldots \\ &\cdots + \underbrace{\gamma\,\nabla_i(\vec{E}\cdot\vec{E})}_{3.} + \underbrace{\zeta\, E_i\,\nabla_i E_i}_{4.}\ . \end{aligned} \tag{2.11}$$

Diese Gleichung lässt sich weiter vereinfachen (Details: Ref. [25]). Für den Fall eines homogenen Mediums der für einkristallines Silizium zutrifft sind die ersten beiden Terme gleich Null. Für den in dieser Arbeit untersuchten Fall der Frequenzverdopplung in Reflexion, liefert der dritte Term in Gl. 2.11 einen isotropen Beitrag. Lediglich der vierte Term enthält eine Abhängigkeit des frequenzverdoppelten Signals von der Gitterorientierung des Kristalls.

Im Fall einer oxidierten Silizium Probe kann ein weiterer Beitrag der Oberfläche zum frequenzverdoppelten Signal auftreten. Hier kann sich durch die Oxidation eine Raumladungszone ausbilden, die ein starkes elektrostatisches Feld induziert. Mit diesem lässt sich ein Pseudo-$\chi^{(2)}$-Effekt erzeugen (*engl.: electric field induced second harmonic (EFISH)*) [27, 28], der jedoch durch die nichtlineare Suszeptibilität dritter Ordnung ($\chi^{(3)}$) beschrieben wird:

$$P_{\mathrm{EFISH},i}^{\mathrm{dp}}(2\omega) = \chi_{ijkz}^{(3)\mathrm{dp}}\, E_j(\omega)\, E_k(\omega)\, \vec{E}_0\ . \tag{2.12}$$

Dieser Effekt tritt vor allem bei stark dotiertem Silizium auf.

Quadrupol-Beitrag aus dem Kristallinneren

Um den Einfluss der Orientierung des Siliziumkristalls auf das in Reflexion gemessenen frequenzverdoppelte Signal zu bestimmen, wird zunächst der Quadrupolbeitrag aus dem Inneren des Siliziumkristalls betrachtet.

Um einen Zusammenhang zwischen der Kristallstruktur und dem frequenzverdoppelten Signal herzustellen, besteht der wesentliche Schritt darin, eine Transformationsvorschrift zu finden, die das Koordinatensystem des Siliziumkristalls mit dem Koordinatensystem der involvierten Strahlen verknüpft.

Zunächst ist es erforderlich eine Relation zwischen dem eingestrahlten elektrischen Feld $\vec{E}_0(\vec{r},t)$ und der nichtlinearen Polarisation $\vec{P}_0^{2\omega}(\vec{r},t)$ herzustellen. Bei $\vec{E}_0(\vec{r},t)$ handelt es sich um eine ebene Welle der Frequenz ω, die unter dem Winkel θ_0 auf die Siliziumoberfläche trifft (siehe Abb. 2.2). Das elektrische Feld lässt sich dabei als Superposition senkrecht und parallel

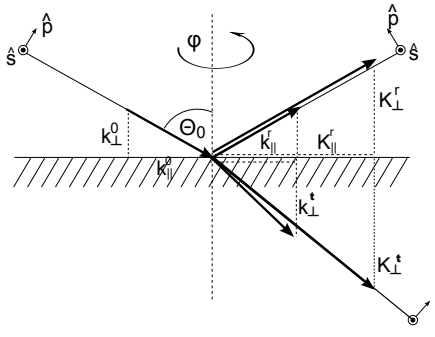


Abbildung 2.2: Schematische Darstellung des Strahlenverlaufs bei Frequenzverdopplung in Reflexion. Die Wellenvektoren der jeweiligen Wellen lassen sich in eine Komponente parallel ($k_\parallel$) und senkrecht ($k_\perp$) zur Probenoberfläche aufteilen. Hier entspricht k dem Wellenvektor des Fundamentalfeldes mit der Frequenz ω. K ist der Wellenvektor des frequenzverdoppelten Feldes (2ω). Die Normalenkomponenten skalieren mit dem Brechungsindex des jeweiligen Mediums bei der entsprechenden Frequenz.

polarisierter Komponenten darstellen:

$$\vec{E}_0 = E_{0,p}\,\hat{p} + E_{0,s}\,\hat{s}. \tag{2.13}$$

Es bietet sich an, sowohl für den einfallenden Strahl als auch für die induzierte Polarisation ein geeignetes Koordinatensystem zu wählen und diese mittels Matrixtransformationen ineinander zu überführen. Für den einfallenden Strahl werden dazu die Koordinatenachsen $\hat{s}, \hat{k}_\parallel$ und $\hat{z}$ verwendet, wobei $\hat{k}_\parallel$ parallel zur Probenoberfläche steht und $\hat{z}$ senkrecht. Die beiden Polarisationsrichtungen lassen sich somit wie folgt schreiben:

$$\hat{s} = \hat{k}_\parallel \times \hat{z} \quad \text{und} \quad \hat{p} = \frac{k_\parallel\,\hat{z} + k_\perp\,\hat{k}_\parallel}{\omega/c}. \tag{2.14}$$

Das Koordinatensystem $\mathrm{K}(\hat{x}', \hat{y}', \hat{z}')$ der Probe wird bezüglich $\mathrm{K}(\hat{x}'', \hat{y}'', \hat{z}'')$ dem Koordinatensystem der Kristallachsen der jeweiligen Orientierung definiert. Mit Hilfe der Matrix $\bar{D}$ lassen sich beide Koordinatensysteme ineinander transformieren. Für die Kristallrichtung (111) gilt z. B.:

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \bar{D}_{(111)} \begin{pmatrix} x'' \\ y'' \\ z'' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{2/3} & -1/\sqrt{6} & -1/\sqrt{6} \\ 0 & 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{3} & 1/\sqrt{3} & 1/\sqrt{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x'' \\ y'' \\ z'' \end{pmatrix}. \tag{2.15}$$

Um nun die Interaktion des einfallenden Strahls mit der nichtlinearen Suszeptibilität der Siliziumstruktur zu beschreiben, müssen die Achsen $(\hat{s}, \hat{k}_\parallel, \hat{z})$ und $(\hat{x}', \hat{y}', \hat{z}')$ ineinander transformiert werden. Da in beiden Systemen die z-Achse senkrecht zur Oberfläche definiert wurde, genügt die Einführung einer Rotation um den Azimutwinkel φ (siehe Abb. 2.2):

$$\begin{pmatrix} \hat{s} \\ \hat{k}_\parallel \\ \hat{z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin(\varphi) & -\cos(\varphi) & 0 \\ \cos(\varphi) & \sin(\varphi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{x}' \\ \hat{y}' \\ \hat{z}' \end{pmatrix}. \tag{2.16}$$

Da sich die beschriebenen Koordinatentransformationen nur auf den anisotropen Anteil in Gl. 2.11 auswirken, ist es sinnvoll, diesen Teil zunächst separat zu betrachten. Dazu wird der winkelabhängige Polarisationsanteil (Term 4) nach der Koordinatentransformation in die Wellengleichung (Gl. 2.6) eingesetzt [26]. Als Lösung derselben ergeben sich die resultierenden frequenzverdoppelten Felder. Weitere Umformungen liefern abhängig von der Kristallorientierung die folgenden phänomenologischen Zusammenhänge zwischen dem eingestrahlten elektrischen Feld und dem reflektierten frequenzverdoppelten Signal. Für (100) orientiertes Silizium ergibt sich:

$$E_{\mathrm{s,s}}^{(2\omega)} = K_\mathrm{s}\,\zeta\,b_{\mathrm{s,s}}^{(100)}\sin(4\,\varphi)\,E_\mathrm{s}^2 \tag{2.17}$$

$$E_{\mathrm{s,p}}^{(2\omega)} = K_\mathrm{s}\,\zeta\,b_{\mathrm{s,p}}^{(100)}\sin(4\,\varphi)\,E_\mathrm{p}^2 \tag{2.18}$$

$$E_{\mathrm{p,p}}^{(2\omega)} = K_\mathrm{p}\,\zeta\,\left(a_{\mathrm{p,p}}^{(100)} + c_{\mathrm{p,p}}^{(100)}\cos(4\,\varphi)\right)\,E_\mathrm{p}^2 \tag{2.19}$$

$$E_{\mathrm{p,s}}^{(2\omega)} = K_\mathrm{p}\,\zeta\,\left(a_{\mathrm{p,s}}^{(100)} - c_{\mathrm{p,s}}^{(100)}\cos(4\,\varphi)\right)\,E_\mathrm{s}^2. \tag{2.20}$$

Bei den Doppelindizes des frequenzverdoppelten Feldes steht der erste für die Polarisation des erzeugten Feldes, der zweite für die Polarisation des Anregungsstrahls. Die Koeffizienten $K_{\mathrm{s/p}}$, sowie a, b und c hängen von dem Einfallswinkel θ_0 ab. Für (111) orientiertes Silizium ergibt sich analog:

$$E_{\mathrm{s,s}}^{(2\omega)} = K_\mathrm{s}\,\zeta\,b_{\mathrm{s,s}}^{(111)}\sin(3\,\varphi)\,E_\mathrm{s}^2 \tag{2.21}$$

$$E_{\mathrm{s,p}}^{(2\omega)} = K_\mathrm{s}\,\zeta\,b_{\mathrm{s,p}}^{(111)}\sin(3\,\varphi)\,E_\mathrm{p}^2 \tag{2.22}$$

$$E_{\mathrm{p,p}}^{(2\omega)} = K_\mathrm{p}\,\zeta\,\left(a_{\mathrm{p,p}}^{(111)} + c_{\mathrm{p,p}}^{(111)}\cos(3\,\varphi)\right)\,E_\mathrm{p}^2 \tag{2.23}$$

$$E_{\mathrm{p,s}}^{(2\omega)} = K_\mathrm{p}\,\zeta\,\left(a_{\mathrm{p,s}}^{(111)} - c_{\mathrm{p,s}}^{(111)}\cos(3\,\varphi)\right)\,E_\mathrm{s}^2. \tag{2.24}$$

Zusätzlich zum winkelabhängigen Signal tritt noch das isotrope Signal des vorletzten Polarisationsterms in Gl. 2.11 auf. Dieses hat für beide Kristallorientierungen die gleiche Form [26]:

$$E_{\mathrm{s,s}}^{(2\omega)} = E_{\mathrm{s,p}}^{(2\omega)} = 0 \tag{2.25}$$

$$E_{\mathrm{p,p}}^{(2\omega)} = A\,\gamma\,E_{\mathrm{p}}^{2} \tag{2.26}$$

$$E_{\mathrm{p,s}}^{(2\omega)} = A\,\gamma\,E_{\mathrm{s}}^{2}\ . \tag{2.27}$$

Hier ist der Koeffizient A ebenfalls vom Einfallswinkel Θ_0 abhängig.

Dipol-Beitrag der Oberfläche

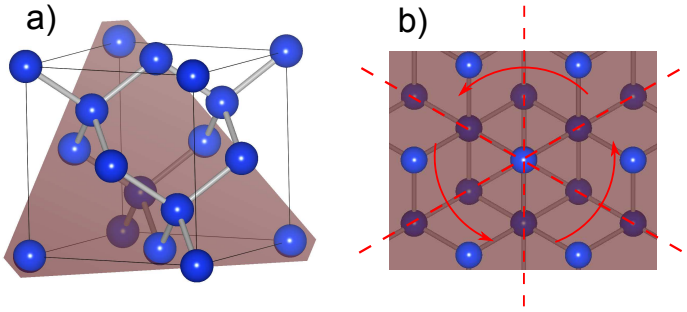


Abbildung 2.3: Kristallstruktur von Silizium a) Einheitszelle mit (111) Ebene (violett), b) Draufsicht auf die (111) orientierte Oberfläche. Die Kristallstruktur zeigt eine dreizählige Rotationsymmetrie (rote Pfeile) sowie drei Spiegelebenen (rot gestrichelt). Daher gehört sie zur Symmetriegruppe $C_{3,\mathrm{v}}$.

Ähnlich wie der Quadrupolbeitrag aus dem Siliziuminnern soll im Folgenden die strukturelle Abhängigkeit des Dipolbeitrags der Oberfläche abgeleitet werden. Durch den Bruch der Zentrosymmetrie an der Kristalloberfläche lässt sich dort ein frequenzverdoppeltes Signal erzeugen, dessen tensorielle Eigenschaften durch die Symmetrie der Oberfläche beschrieben werden. Die Symmetriegruppe lässt sich aus einer Betrachtung der jeweiligen Oberfläche bestimmen. Im Fall einer (111)-orientierten Kristalloberfläche (Abb. 2.3) lassen sich unter Berücksichtigung mehrerer Kristallebenen eine dreizählige Rotationssymmetrie sowie drei Spiegelebenen erkennen. Daher wird er als zur Gruppe $C_{3,\mathrm{v}}$ gehörend klassifiziert. Da die einzelnen Komponenten des $\chi^{(2)}$ Tensors wie in Abschn. 2.1 beschrieben invariant gegenüber den Transformationen der jeweiligen Symmetriegruppe sein müssen, reduzieren sich die $\chi^{(2)}$ Tensoren zu:

$$\chi_{(100)}^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 & 0 \\ d_{31} & d_{31} & d_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{2.28}$$

für (100) orientiertes Silizium und für eine (111) orientierte Oberfläche zu:

$$\chi_{(111)}^{(2)} = \begin{pmatrix} d_{11} & -d_{11} & 0 & 0 & d_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 & -d_{11} \\ d_{31} & d_{31} & d_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{2.29}$$

Mittels der für die Kristalloberfläche charakteristischen $\chi^{(2)}$ Tensoren lassen sich auch hier, analog zum Quadrupolbeitrag, phänomenologische Formeln für die frequenzverdoppelten Felder herleiten [26]. Analog zu Gl. 2.21 - 2.24 ergibt sich für (111) orientiertes Silizium

$$E_{\mathrm{s,s}}^{(2\omega)} = K_{\mathrm{s}}\, b_{\mathrm{s,s}}^{(111)}\, d_{11}\sin(3\,\varphi)\, E_{\mathrm{s}}^{2} \tag{2.30}$$

$$E_{\mathrm{s,p}}^{(2\omega)} = K_{\mathrm{s}}\, b_{\mathrm{s,p}}^{(111)}\, d_{11}\ \sin(3\varphi)\, E_{\mathrm{p}}^{2} \tag{2.31}$$

$$\begin{aligned} E_{\mathrm{p,p}}^{(2\omega)} =& K_{\mathrm{p}} \left(a_{1_{\mathrm{p,p}}}^{(111)}\, d_{31} + a_{2_{\mathrm{p,p}}}^{(111)}\, d_{15} + a_{3_{\mathrm{p,p}}}^{(111)}\, d_{33} + \ldots \right. \\ & \left. \ldots + c_{\mathrm{p,p}}^{(111)}\, d_{11}\cos(3\,\varphi) \right) E_{\mathrm{p}}^{2} \end{aligned} \tag{2.32}$$

$$E_{\mathrm{p,s}}^{(2\omega)} = K_{\mathrm{p}} \left(a_{\mathrm{p,s}}^{(111)}\, d_{31} - c_{\mathrm{p,s}}^{(111)}\, d_{11}\cos(3\,\varphi) \right) E_{\mathrm{s}}^{2}. \tag{2.33}$$

Im Fall einer (100) orientierten Oberfläche ergeben sich folgende Felder:

$$E_{\mathrm{s,s}}^{(2\omega)} = E_{\mathrm{s,p}}^{(2\omega)} = 0, \tag{2.34}$$

$$E_{\mathrm{p,p}}^{(2\omega)} = (a_{1_{\mathrm{p,p}}}^{(100)}\, d_{31} + a_{2_{\mathrm{p,p}}}^{(100)}\, d_{15} + a_{3_{\mathrm{p,p}}}^{(100)}\, d_{33})\, E_{\mathrm{p}}^{2} \tag{2.35}$$

$$E_{\mathrm{p,s}}^{(2\omega)} = a_{1_{\mathrm{p,s}}}^{(100)}\, E_{\mathrm{s}}^{2}. \tag{2.36}$$

Es ist anzumerken, dass es auf Grund der ähnlichen Symmetrie des frequenzverdoppelten Signals von Oberfläche und Kristallinnerem in der Regel nicht möglich ist, beide Beiträge zu separieren [23, 26, 29]. Nur in Spezialfällen ist es für (100) und (110) orientierte Siliziumkristalle theoretisch möglich, beide Komponenten zu trennen [30].

3 Allgemeine Verfahren zur Probenherstellung

In diesem Kapitel werden die Verfahren beschrieben, die zur Herstellung der in Kapitel 5-7 untersuchten Proben eingesetzt wurden. Das Kapitel beginnt mit der Beschreibung der Verfahren zur Erzeugung verspannter Schichten. Hier wird zunächst das Verfahren der thermischen Oxidation behandelt. Im Anschluss wird das Prinzip der Gasphasenabscheidung beschrieben, mit dem die verspannten Nitridschichten der in Kapitel 7 untersuchten Proben hergestellt wurden. Danach wird ein Überblick über die in Kapitel 6 und 7 genutzten Lithografieverfahren gegeben, wobei der Schwerpunkt auf der Beschreibung der in Kapitel 6 verwendeten Laserinterferenzlithografie liegt. Zum Schluss wird das Prinzip des Trockenätzens erläutert, welches zur Strukturierung der in Kapitel 6 und 7 untersuchten Proben benutzt wurde, gefolgt von einer Übersicht über die dazu entwickelten Ätzrezepte.

3.1 Herstellung verspannter Siliziumproben

Erzeugung von Verspannungen durch thermische Feuchtoxidation

Beim Verfahren der thermischen Oxidation findet bei hohen Temperaturen ($T > 700°$ C) und unter der Zufuhr von Sauerstoff eine Umwandlung des Siliziums in Siliziumdioxid statt. Dieser Prozess tritt zwar auch bei Raumtemperatur auf, allerdings entsteht dabei nur eine Oxidschicht mit einer Dicke von wenigen Nanometern (natives Oxid). Die Dicke der thermisch erzeugten Oxidschicht wird im Wesentlichen durch die Prozesstemperatur und die Oxidationsdauer bestimmt [31]. Dabei führt eine höhere Temperatur zu einer größeren Wachstumsrate. Der hier genutzte Temperaturbereich umfasst dabei Werte zwischen 700° C und 1150° C. Niedrigere Temperaturen liefern unverhältnismäßig kleine Oxidationsraten[1], höhere Temperatur können zu einer Beschädigung des Ofens führen. Die Schichtdicke wächst zunächst linear mit der Oxidationszeit. Für längere Prozessdauern bzw. dickere Oxidschichten ($d > 30$ nm) nimmt die Wachstumsrate jedoch allmählich ab, da der Sauerstoff auf Grund der bereits gewachsenen Schicht schlechter an die Siliziumoberfläche gelangt [31]. Zur Berechnung der zu erzielenden Oxiddicke lässt sich das Deal-Grove-Modell verwenden [32], mit dem sehr exakte Aussagen zum Wachstum von Oxidschichten gemacht werden können.

Zur technischen Herstellung von thermischen Oxidschichten werden zwei verschiedene Methoden verwendet, die Feucht- und die Trockenoxidation. Bei der Letzteren erfolgt die Oxidation in einer reinen Sauerstoffatmosphäre, bei der Ersten in Wasserdampf. Um eine hohe Reinheit des Dampfes zu gewährleisten, erfolgt die Erzeugung durch Pyrolyse von Wasserstoff und Sauerstoff. Bei der Feuchtoxidation lassen sich bei gleichen Temperaturen höhere Wachstumsraten erzeugen, was damit erklärt wird, dass die H_2O-Moleküle besser zum Silizium diffundieren können als die O_2-Moleküle [33]. Des Weiteren weisen die per Feuchtoxidation hergestellten Schichten größere Verspannungen auf [34, 35].

Wie bereits erwähnt, lassen sich durch die thermische Oxidation verspannte Oxidschichten erzeugen, die wiederum Verspannungen in das darunter liegende Material übertragen. Für das

[1] Um eine 100 nm dicke Oxidschicht bei 700° C herzustellen muss die Prozessdauer beispielsweise 16 h betragen.

Auftreten der Verspannungen sind zwei unterschiedliche Mechanismen verantwortlich, die im Wesentlichen unabhängig voneinander wirken:

$$\sigma = \sigma_{\mathrm{th}} + \sigma_{\mathrm{int}}. \tag{3.1}$$

Die thermische Verspannung σ_{th} wird durch die unterschiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten $\Delta\alpha$ von Silizium ($\alpha_{\mathrm{Si}} = 2,5 \cdot 10^{-6}$ K^{-1}) und vom Oxid ($\alpha_{\mathrm{SiO_2}} = 0,5 \cdot 10^{-6}$ K^{-1}) hervorgerufen. Das Abkühlen der Probe von der Prozesstemperatur auf Raumtemperatur führt dabei zu ungleicher Kontraktion beider Materialien, was zur Entstehung der Verspannungen führt. Wegen

$$\sigma_{\mathrm{th}} = \frac{E}{1-\nu}\,\Delta\alpha\,\Delta T, \tag{3.2}$$

wobei E der YOUNG-Modul und ν die POISSON-Zahl sind [36], erzeugen höhere Temperaturunterschiede größere Verspannungen in der Oxidschicht. Diese sind Auf Grund des Verhältnisses der Ausdehnungskoeffizienten ($\alpha_{\mathrm{Si}} > \alpha_{\mathrm{SiO_2}}$) kompressiv ($\sigma_{\mathrm{th}} < 0$). Der Anteil der thermischen Verspannung an der Gesamtverspannung lässt sich durch einen Vergleich der Verspannungen bei Prozess- und bei Raumtemperatur bestimmen [37].

Der Anteil der intrinsischen Verspannung σ_{int} in Gl. 3.1 wird durch den Zuwachs des molaren Volumens beim Übergang von Si zu SiO_2 hervorgerufen. Dieses erhöht sich um 120%, was ebenfalls zu einer kompressiven Verspannung in der Oxidschicht führt [31]. Im Gegensatz zur thermischen Verspannung nimmt die intrinsische bei zunehmender Temperatur ab und lässt sich nur bis zu einer Temperatur von ca. 960° C feststellen[2] [34, 36, 39]. Ihr Verschwinden wird durch eine Verringerung der Viskosität des SiO_2 mit steigender Temperatur erklärt, wodurch dessen Struktur beweglicher wird und die Volumenzunahme durch eine Expansion senkrecht zur Probenoberfläche ausgeglichen werden kann. Mathematisch lässt sich dieser Vorgang mit Hilfe des Modells des viskosen Flusses (*engl.: viscous flow model*) [40] beschreiben.

Die intrinsische Verspannung wird neben der Temperatur auch durch die Verweildauer im Ofen bestimmt. So kommt es auf Grund der zuvor beschriebenen Fließbewegung bei einem längeren Verbleib der Probe unter Prozessbedingungen zu Verspannungsrelaxationen. Die Beschreibung der zeitabhängigen Relaxation erfolgt unter der Annahme, dass es sich beim SiO_2 um ein sogenanntes MAXWELL-Material handelt, also ein Material, das elastische und viskose Eigenschaften aufweist. Für die zeitabhängige intrinsische Verspannung eines solchen Materials gilt

$$\sigma_{\mathrm{int}}(t) = \sigma_0 \exp(-t/\tau). \tag{3.3}$$

Die Zeitkonstante τ wurde in Ref. [40] experimentell bestimmt und beträgt für T = 1000° C ca. 12 min und für T = 700° C über 200 Tage. Diese Zahlen verdeutlichen, warum die intrinsische Verspannung nur bei niedrigen Oxidationstemperaturen von Bedeutung ist.

Die Dicke der Oxidschicht hat in der Regel keinen Einfluss auf deren Verspannung [36]. Lediglich für dünne Schichten ($d < 50$ nm), die bei hohen Temperaturen ($T \geq 1000°$ C) hergestellt wurden, ergibt sich eine starke Erhöhung der kompressiven Verspannung [40] (siehe Inset Abb. 5.1).

Erzeugung verspannter Schichten durch Gasphasenabscheidung (PECVD)

Eine andere Möglichkeit zur Herstellung verspannter Schichten stellt die Gasphasenabscheidung (*engl.: Plasma enhanced chemical vapor deposition (PECVD)*) dar, mit der sich Siliziumnitridschichten (SiN) aus einem Gasplasma, bestehend aus Silan (SiH_4), Ammoniak (NH_3) und Stickstoff (N_2), abscheiden lassen. Diese Methode wurde verwendet, um die verspannten Nitridschichten der in Kapitel 7 untersuchten Wellenleiterproben herzustellen.

[2] Da die in älteren Publikationen beschriebene Oxidation in der Regel bei wesentlich höheren Temperaturen erfolgt ist, wurde lediglich die thermische Verspannung beobachtet [38].

Sie bietet die Möglichkeit, Schichten mit Verspannungen in einem weiteren Bereich zu erzeugen, als es mit dem Verfahren der thermischen Oxidation möglich ist. Die Verspannung wird dabei im Wesentlichen durch die Prozesstemperatur T und die Plasmafrequenz f bestimmt, wobei es bei einer Änderung der Prozesstemperatur leicht zu ungewollten Änderungen in der Schichtzusammensetzung kommen kann [41]. Daher wurde hier nur die Frequenz geändert.

Ähnlich wie bei der thermischen Oxidation besteht die Verspannung der Schicht aus einer Überlagerung einer thermischen Verspannungskomponente σ_{th} und einer intrinsischen σ_{int}, wobei hier nach Gl. 3.2 $\sigma_{\text{th}} > 0$ (gedehnt), da $\alpha_{\text{Si}} < \alpha_{\text{SiN}}$ ist. Die Verspannung σ_{int} wird sowohl durch die Temperatur als auch die Plasmafrequenz bestimmt. Für niedrige Temperaturen und Frequenzen ergeben sich kompressive Verspannungen. Das liegt daran, dass die Ionen im Plasma bei Frequenzen von $f \approx 100$ kHz im angelegten Wechselfeld beschleunigt werden und auf die wachsende Nitridschicht aufschlagen. Dies führt zur Implantation von Atomen und zum Aufbrechen von Si-N-Bindungen und sorgt somit für ein Ausdehnen der SiN-Schicht [42, 43]. Für höhere Temperaturen wird dieser Effekt jedoch abgeschwächt, da der entstandene Implantationsschaden thermisch ausheilen kann.

Bei hohen Plasmafrequenzen ($f = 13,56$ MHz) tritt der Implantationseffekt nicht auf, da die Ionen den Oszillationen des Felds nicht folgen können. In diesem Fall wird die Verspannung durch die temperaturabhängige Rate der Wasserstoffdesorption bestimmt. In der Regel ist diese geringer als die Rate, mit der der Wasserstoff (H_2) in die SiN-Schicht eingebaut wird, wodurch eine wasserstoffreiche Schicht entsteht. Bei hohen Temperaturen überwiegt jedoch die H_2-Desorption, was ein Schrumpfen der bereits aufgebrachten Schicht zur Folge hat. Dadurch wird die SiN-Schicht unter Zugspannung gesetzt [42].

Tabelle 3.1: Parameter des verwendeten PECVD-Abscheideprozesses

Gasfluss		Leistung	Kammerdruck	Temperatur	Frequenz	
SiH_4	NH_3				f_{HF}	f_{NF}
400 sccm	30 sccm	20 W	100 mTorr	300° C	13,56 MHz	100 kHz

Zur Herstellung der hier verwendeten Schichten wurde das Dual-Frequency-Verfahren verwendet [41, 44, 45], bei dem der Abscheideprozess abwechselnd mit hoher und niedriger Frequenz ausgeführt wurde. Dabei wird die resultierende Verspannung vom Arbeitszyklus (*engl.: Duty cycle*) Φ mit

$$\Phi = \frac{t_{\text{HF}} - t_{\text{NF}}}{t_{\text{HF}} + t_{\text{NF}}} \,, \tag{3.4}$$

bestimmt, wobei t_{HF} und t_{NF} der Dauer der Hochfrequenz- bzw. der Niederfrequenzanregung entspricht. Abbildung 7.2 (Kap. 7) zeigt die erzielten Verspannungen sowie die Abscheideraten für den in dieser Arbeit verwendeten Prozess, dessen Parameter in Tabelle 3.1 zusammengefasst sind.

3.2 Lithografieverfahren

Wie bereits am Anfang dieser Arbeit erwähnt, ist einer der Vorteile der Siliziumphotonik, dass die zur Herstellung von Bauelementen benötigten Verfahren in der Regel bereits in der Mikroelektronik verwendet werden. Dies gilt ebenfalls für die zur Definition der Strukturen verwendeten Lithografieverfahren. Diese lassen sich im Wesentlichen in Verfahren unterteilen, bei denen die Strukturen in einem Stück (parallel) mit Hilfe einer Maske aufgebracht werden sowie in Verfahren, bei denen die Strukturen einzeln (seriell) direkt auf die Probe geschrieben werden.

In der vorliegenden Arbeit wurden drei verschiedene Lithografieverfahren verwendet:
- die Kontakt-Fotolithografie,
- die Elektronenstrahllithografie sowie
- die Laserinterferenzlithografie.

Die ersten beiden Verfahren stellen Beispiele für die zuvor vorgenommene Unterteilung dar. Da sie in der Literatur ausführlich beschrieben werden, soll hier nur ein kurzer Vergleich ihrer Vor- und Nachteile erfolgen. Die weniger bekannte Laserinterferenzlithografie wird im nächsten Absatz genauer beschrieben.

Die Fotolithografie wurde für die Herstellung der Wellenleiterstrukturen (Kapitel 7) benutzt. Bei dem dabei verwendeten Gerät handelt es sich um Kontaktbelichter (MJB 3 UV 400) der Firma KARL SUSS. Mit diesem wurden die in eine Hartmaske geschriebenen Strukturen in den Lack auf der Probe transferiert. Der Vorteil dieser Methode besteht darin, dass sich innerhalb kurzer Zeit viele Proben mit identischen Strukturen herstellen lassen. Allerdings ist die Auflösung des Verfahrens begrenzt, so dass die minimalen Abmessungen der Strukturen ca. 1 μm betragen[3].

Im Vergleich dazu weist die Elektronenstrahllithografie eine wesentlich höhere Auflösung sowie eine größere Flexibilität bezüglich der Parameter der zu schreibenden Strukturen auf. Sie eignet sich daher bevorzugt zur Herstellung nanostrukturierter Bauelemente, bei denen eine Variation der Strukturparameter erforderlich ist. Bei der hier verwendeten Lithografieanlage handelt es sich um eine RAITH Pioneer mit einer Auflösung von 2 nm mit einer belichtbaren Gesamtfläche von 50×50 mm. Es ist jedoch auf Grund der geringen Schreibgeschwindigkeit nur möglich, kleine Bereiche (ca. 100×100 μm) zu beschreiben. Des Weiteren kommt es leicht zu einem Versatz zwischen den einzelnen zu belichtenden Schreibfeldern (*engl.: stitching error*), was zu Fehlern in größeren Bauelementen führen kann.

Laserinterferenzlithografie

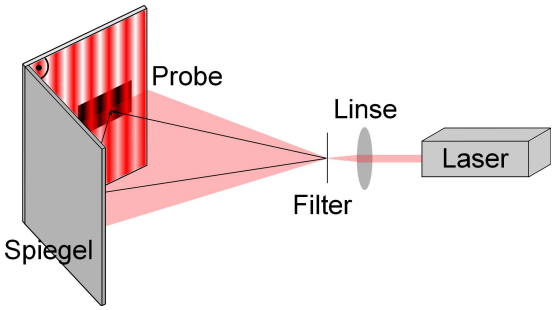
Eine gute Möglichkeit, um einfach und schnell große Bereiche mit periodischen Strukturen zu versehen, stellt das Verfahren der Laserinterferenzlithografie (LIL) [46, 47] dar. Dabei werden mit Fotolack beschichtete Proben mit einem Linieninterferenzmuster belichtet, wodurch sich periodische Streifenstrukturen mit minimalen Gitterkonstanten von bis zu $\lambda_{\mathrm{Laser}}/2$ herstellen lassen. In dieser Arbeit wurde dieses Verfahren zur Herstellung der in Kapitel 6 untersuchten Gitterstrukturen in Silizium verwendet. Das lithografische Schreiben erfolgte in den Laboren des MPI Halle durch Johannes de Boor. Um einen knappen Überblick über das Verfahren zu geben, wird das Grundprinzip anhand von Abb. 3.1 erklärt. Weitergehende Informationen finden sich in Ref. [47, 48].

Hauptbestandteil des Aufbaus ist ein Lloydsches Spiegel-Interferometer, das aus einem Spiegel und einem Probenhalter besteht, welche senkrecht zueinander positioniert sind. Beide befinden sich auf einem drehbaren Tisch und werden durch einen frequenzverdoppelten Argon-Ionen-Laser ($\lambda = 244$ nm), dessen Strahl mit Hilfe einer Linse aufgeweitet wurde, bestrahlt. Ein Teil des Lichts trifft dabei unter dem Winkel Θ, welcher durch die Drehung des Tisches eingestellt werden kann, direkt auf die Probe. Der andere Teil trifft zunächst auf den Spiegel und wird unter dem Winkel $-\Theta$ auf die Probe reflektiert. Beide Strahlen lassen sich als ebene Wellen betrachten, deren elektrische Felder folgendermaßen definiert sind:

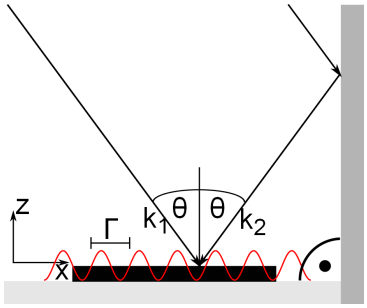
$$\vec{E}_1(\vec{r}) = E_{1,0}\,\vec{e}_1\,\exp(i\,\vec{k}_1\,\vec{r}) \tag{3.5}$$

$$\vec{E}_2(\vec{r}) = E_{2,0}\,\vec{e}_2\,\exp(i\,\vec{k}_2\,\vec{r} + i\,\Delta\Phi). \tag{3.6}$$

[3] Mit modernen optischen Lithografieverfahren wie der Deep UV-Lithografie sind noch höhere Auflösungen im Bereich von 100 nm möglich.



(a) Skizze des Aufbaus zur Laserinterferenzlithografie (LIL)



(b) Funktionsschema der Laserinterferenzlithografie

Abbildung 3.1: Das Grundprinzip der LIL besteht in der Überlagerung kohärenter Teilstrahlen zu einem Interferenzbild. Die Periodizität des so erzeugten Gitters lässt sich dabei durch Drehung des Probenhalters ändern.

Die Phasenverschiebung zwischen den beiden Wellen ist $\Delta\Phi$, $\vec{e}_1$ bzw. $\vec{e}_2$ sind die Einheitsvektoren der Polarisationsrichtungen[4]. Auf der Probenoberfläche ergibt sich somit eine periodisch modulierte Intensitätsverteilung,

$$I = \left|\vec{E}_1(\vec{r}) + \vec{E}_2(\vec{r})\right|^2 = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2}(\vec{e}_1 \cdot \vec{e}_2)\cos[(\vec{k}_1 - \vec{k}_2)\,\vec{r} + \Delta\Phi]. \tag{3.7}$$

Diese nach dem Prinzip der Holografie erzeugte Gitterstruktur besitzt eine Gitterkonstante Γ die durch die Periodenlänge der Intensitätsverteilung bestimmt ist:

$$\Gamma = \frac{2\,\pi}{|\vec{k}_1 - \vec{k}_2|} = \frac{\lambda}{2\,\sin\Theta}. \tag{3.8}$$

Da die Gitterkonstante Γ vom Winkel Θ abhängig ist, lässt sich die Periodizität des erzeugten Gitters durch die Drehung des Interferometers und somit der Änderung des Einfallswinkels einstellen. Aus Gl. 3.8 lässt sich auch die kleinste erzeugbare Gitterkonstante $\Gamma_{\min} = 244\text{ nm}/2 = 122\text{ nm}$ ableiten, die der Hälfte der Anregungswellenlänge entspricht. Kleinere Strukturen mit Abmessungen unter 50 nm lassen sich nur durch ein modifiziertes Verfahren mit Hilfe eines Lloydschen Immersions-Interferometers erzeugen [49].

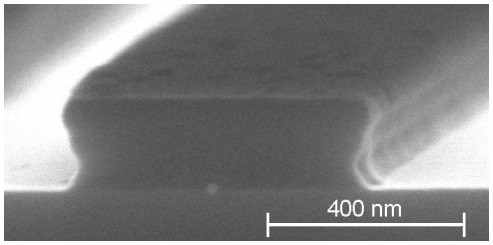


Abbildung 3.2: Elektronenmikroskopaufnahme eines mit Laserinterferenzlithografie hergestellten Lackstreifens auf Siliziumdioxid. Der Unterschnitt an den Kanten unterstützt den anschließenden Lift-Off-Prozess.

In Abb. 3.2 ist das Ergebnis eines solchen Lithografieschritts zu sehen. Der Lackstreifen ist 200 nm hoch und 630 nm breit. Die Gitterkonstante der Struktur beträgt $\Gamma = 1\ \mu$m. Bei dem Lack handelt sich um einen Negativlack (AR-N 4240). Dies bedeutet, dass belichtete Bereiche bei der Entwicklung erhalten bleiben und Unbelichtete abgelöst werden. Die Wände weisen einen Unterschnitt im Lack auf, der durch Reflexionen des eingestrahlten Lichts am Substrat bedingt ist. Durch die Interferenz mit dem einfallenden Licht bilden sich dabei stehende Lichtwellen in

[4] Die Polarisation des Lichts beeinflusst den Kontrast zwischen den hellen und dunklen Bereichen des Interferenzmusters und bestimmt somit, wie scharf das Intensitätsmuster in den Fotolack übertragen wird.

Normalenrichtung zur Oberfläche aus, die zu veränderten Belichtungsverhältnissen in Oberflächennähe führen. Allerdings ist dieser Unterschnitt hier sehr nützlich, da dies den anschließend durchgeführten Chrom Lift-Off Prozess begünstigt (siehe Abschn. 6.1). Eine Zusammenfassung der einzelnen Belichtungsschritte ist im Anhang in Tabelle A.2 zusammengestellt.

3.3 Trockenätzverfahren zur Probenstrukturierung

Trockenätzverfahren sind eine zentrale Technologie in der Herstellung mikroelektronischer Bauteile, da sie im Vergleich zu naßchemischen Ätzverfahren in der Lage sind, Strukturen mit hohem Aspektverhältnis zu erzeugen. In Kombination mit geeigneten Lithografieverfahren (Abschn. 3.2) lassen sich Strukturen mit Abmessungen im Nanometerbereich herstellen. Aus diesem Grund kommen Trockenätzverfahren auch im Bereich photonischer Bauelemente zum Einsatz.

In dieser Arbeit wurde ein Plasmaätzer der Firma Oxford Instruments mit entsprechend angepassten Prozessen verwendet. Bei dem Gerät handelt es sich um einen reaktiven Ionenätzer des Modells Plasmalab 100, der zusätzlich mit einer ICP Option zur Erzeugung eines induktiv gekoppelten Plasmas versehen ist. Es ist eine Clustermaschine mit automatischer Beladevorrichtung und zwei separaten Ätzkammern, bei der eine Kammer für Fluor- und die andere für Chlorchemie genutzt wird. Dies hat den Vorteil, dass eine wechselseitige Kontamination der Kammern durch das Fahren unterschiedlicher Ätzchemien vermieden werden kann. Die Fluorkammer wurde zum Strukturieren der Si, SiO_2 und SiN-Schichten verwendet, die Chlorkammer eignet sich zur Strukturierung von Chrom-Hartmasken. Die Funktion der Ätzkammer und die entsprechenden Ätzprozesse werden im Folgenden beschrieben.

Grundlagen des Plasmaätzens

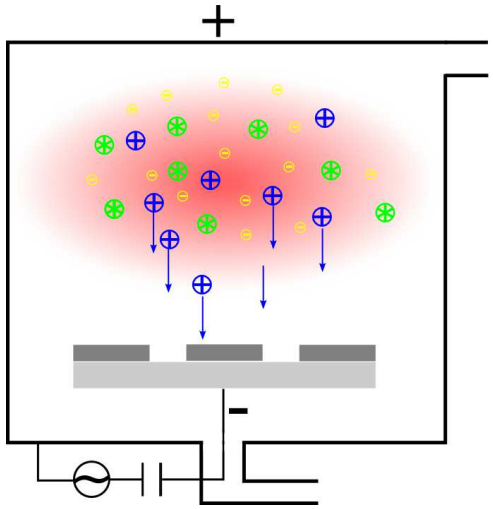
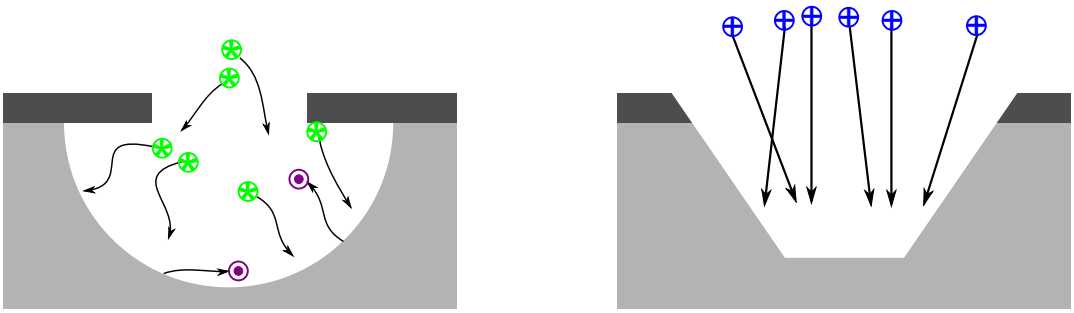


Abbildung 3.3: Schematische Darstellung eines Trockenätzprozesses. Durch das Anlegen eines hochfrequenten Feldes wird das Gas in der Prozesskammer ionisiert und bildet ein Plasma aus u.a. freien Elektronen (gelb), positiven Ionen (blau) und neutralen reaktiven Teilchen (grün). Durch eine kapazitive Kopplung bildet sich eine statische Spannung zwischen der Substratelektrode und dem Plasma, welche die positiven Ionen in Richtung Probe beschleunigt. Dadurch kommt es zu einem physischen Abtrag von Probenmaterial (physikalisches Ätzen). Die reaktiven Teilchen des Plasmas diffundieren zur Probenoberfläche und bilden dort flüchtige Verbindungen mit dem Probenmaterial (chemisches Ätzen).

Das Grundprinzip des reaktiven Ionenätzens (RIE) wird in Abb. 3.3 verdeutlicht. Es basiert auf der Ionisation eines Ätzgases durch das Anlegen eines hochfrequenten elektrischen Wechselfeldes. Die Unterlage des Substrats sowie die Wand der Ätzkammer bilden dabei die Elektroden. Das Wechselfeld führt zu einer Dissoziation der Moleküle des Ätzgases, wodurch in der Kammer eine reaktive Atmosphäre entsteht, die sich u.a. aus Elektronen, positiven und negativen Ionen sowie reaktiven und neutralen Teilchen zusammensetzt. Auf Grund der unterschiedlich hohen Beweglichkeit der Elektronen und Ionen im hochfrequenten Wechselfeld (13,56 MHz) kommt es zu einer Ladungstrennung, bei der die schnellen Elektronen abgesaugt werden und eine positiv geladene Wolke aus trägen Ionen zurückbleibt. In Kombination mit einer kapazitiven Schaltung baut sich dadurch eine Spannung zwischen der positiven Ionenwolke und der Substratelektrode



(a) Prinzip des chemischen Ätzens. Reaktive Teilchen (grün) diffundieren zur Oberfläche und ätzen diese isotrop. Dabei bilden sich flüchtige Verbindungen (z.B. SiF_4) (violett), die abgesaugt werden.

(b) Prinzip des physikalischen Ätzens. Beschleunigte Ionen (blau) treffen gerichtet auf die Probenoberfläche und tragen diese anisotrop ab. Die schrägen Seitenwände sind bedingt durch Stöße, die zu einer Ablenkung der Ionen führen.

Abbildung 3.4: Schematische Darstellung der beim reaktiven Ionenätzen auftretenden Ätzvorgänge.

auf, was dazu führt, dass die Ionen in Richtung Probenoberfläche beschleunigt werden. Zeitgleich diffundieren reaktive Atome zur Probenoberfläche und lagern sich dort an. Je nach Art der beteiligten Teilchen reagieren diese dort von selbst mit dem Probenmaterial (z.B. Fluorchemie), oder die chemische Reaktion wird durch die beim Ionenbeschuss freigesetzte Energie ausgelöst (z.B. Chlorchemie). Dabei bilden sich flüchtige Reaktionsprodukte, die aus der Kammer abgesaugt werden.Der resultierende Ätzvorgang lässt sich in zwei Anteile aufspalten. Er besteht zum einen aus einem chemischen Ätzschritt, welcher auf der chemischen Reaktion zwischen reaktiven Gasteilchen und dem Probenmaterial beruht. Auf Grund der Ungerichtetheit dieses Prozesses sind die so erzeugten Ätzprofile stark isotrop (Abb. 3.4 (a)). Auf der anderen Seite sorgt das Bombardement der Probenoberfläche durch positive Ionen für einen physikalischen Ätzanteil, der auf Grund der Gerichtetheit der Ionenbewegung stark anisotrop ist (Abb. 3.4 (b)).

Um möglichst kleine Strukturen wie photonische Wellenleiter mit hohem Aspektverhältnis und steilen Seitenwänden zu erzeugen, ist der Einsatz spezieller Ätzprozesse erforderlich [50]. Häufig wird hierfür der Bosch-Prozess [51] oder das sogenannte Cryo-Ätzen [52, 53] genutzt. Da diese nicht in der verwendeten Anlage benutzt werden können, wurde eine alternative Methode angewandt, das Ionengestützte-Ätzen[5] (*engl.: ion-assisted etching*). Diese Methode kombiniert die Möglichkeiten des chemischen und des physikalischen Ätzens (Abb. 3.5). Hierbei wird ausgenutzt, dass beim chemischen Ätzen nichtflüchtige Verbindungen entstehen können, welche den Ätzprozess behindern [54]. Dieser Umstand kann durch den Einsatz von polymerbildenden Gasen wie (C_4F_8) noch weiter verstärkt werden. Abhängig von der kinetischen Energie der erzeugten Ionen lässt sich die entstandene Passivierungsschicht aufbrechen, so dass ein Ätzen der Probe wieder möglich wird.

Je nach Beschleunigungsspannung ergeben sich für einen solchen Prozess drei unterschiedliche Prozessregime [55]. Bei einer zu geringen Beschleunigungsspannung findet nur eine Abscheidung von Polymeren statt, so dass ein Ätzen der Probe nicht möglich ist. Bei einer zu großen Beschleunigungsspannung kommt es zu physikalischem Sputterätzen, was zu keilförmigen Ätzprofilen führt (Abb. 3.4 (b)). Zwischen diesen beiden Bereichen befindet sich der Bereich, in dem sich das Wachstum der Passivierungsschicht und ihr Abtrag durch Ionenbeschuss im Gleichgewicht befinden. Dadurch wird die Polymerschicht auf horizontalen Flächen zerstört, bleibt jedoch an

[5] Manchmal wird das Ionengestützte-Ätzen auch als Ionen-Unterdrückerätzen (*engl.: ion-inhibitor etching*) bezeichnet, da der Ätzprozess durch Polymerbildung unterdrückt wird.

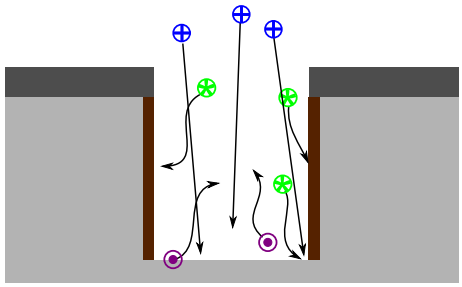


Abbildung 3.5: Prinzip des ionengestützten Ätzens. Durch die Wechselwirkungen zwischen Ätzgasen und Probenmaterial kommt es zur Bildung einer Polymerschicht (braun). Diese unterbindet den Vorgang des chemischen Ätzens (grün). Durch Ionenbeschuß (blau) lässt sich das Polymer lokal entfernen. Da es auf senkrechten Flächen schlecht abgetragen wird kommt es zu einem stark anisotropen Ätzvorgang.

vertikalen Strukturen, die von den gerichteten Ionen nicht so stark getroffen werden, erhalten und verhindert somit ein Unterätzen der Ätzmaske.

Neben der Wahl der Ätzgase beeinflussen diverse weitere Parameter das Ätzergebnis. Im Gegensatz zu festen Parametern wie der Reaktorgeometrie, Probengröße und Reinheit der Kammer lassen sich Parameter wie Druck, Gasfluß, eingekoppelte Leistung und Beschleunigungsspannung variieren, um optimale Ätzresultate zu erzielen. Dabei ist es wichtig zu berücksichtigen, dass sich die meisten Parameter gegenseitig beeinflussen und die Variation eines Parameters automatisch zu einer Änderung der anderen Parameter führen kann. So kann z.B. die Plasmadichte über eine Erhöhung der eingekoppelten HF-Leistung vergrößert werden, was allerdings ebenfalls zu einer Erhöhung der Beschleunigungsspannung der Ionen führt. Um diese beiden kritischen Parameter zu entkoppeln, besitzt die hier verwendete Anlage eine ICP-Option (*engl.: inductive coupled plasma*) [56, 57]. Mit dieser kann über eine zusätzliche Spule zur Erhöhung der Plasmadichte induktiv ein HF-Feld eingekoppelt werden, ohne gleichzeitig die Beschleunigungspannung zu vergrößern. Im Folgenden werden die wesentlichen Eigenschaften der am Plasmaätzer einstellbaren Parameter aufgelistet:

HF-Leistung: Die eingekoppelte Leistung bestimmt die Dichte des erzeugten Plasmas und somit die Dichte der zur Verfügung stehenden Radikale. Ebenfalls wird durch eine größere HF-Leistung die Zahl der positiven Ionen sowie der Elektronen erhöht, was zu einer größeren Beschleunigungsspannung führt und somit für einen erhöhten physikalischen Ätzanteil sorgt.

Kammerdruck: Der Kammerdruck beeinflusst im Wesentlichen die freie Weglänge der beschleunigten Ionen. Ein hoher Druck sorgt dabei für eine starke Streuung der Ionen und führt somit zu einer geringen Ätzrate und schrägen Seitenwänden. Bei einem Druck von ca. 10 mTorr treffen die Ionen auf Grund der großen freien Weglänge senkrecht auf die Probe, was zu einem anisotropen Ätzverhalten führt. Bei noch geringerem Druck nimmt wiederum die Zahl der zur Verfügung stehenden Reaktanden ab, was zu einer Verringerung der Ätzrate führt. Durch seinen Einfluss auf die Plasmadichte hat der Kammerdruck ebenfalls einen großen Einfluss auf die Beschleunigungsspannung.

Gasfluß: Der Gasfluß der einzelnen Ätzgase bestimmt die Zusammensetzung des Plasmas und somit wesentlich den Ablauf des Ätzprozesses. In den hier verwendeten Prozessen wird damit hauptsächlich das Verhältnis von isotropem Ätzen und Polymerbildung reguliert. Auf Grund der unterschiedlichen Ladung des Plasmas bei verschiedenen Gaszusammensetzungen beeinflusst der Gasfluß ebenfalls die Beschleunigungsspannung [58].

Beschleunigungspannung: Die Beschleunigungsspannung lässt sich nicht vorgeben, sondern sie stellt sich, beeinflusst von den zuvor beschriebenen Parametern, ein. Durch sie wird die kinetische Energie der auf der Probe auftreffenden Ionen und somit das entsprechende Ätzregime bestimmt. Durch die Ionenenergie wird außerdem die Selektivität des Ätzprozesses gegenüber der Fotomaske beeinflusst. Diese reagiert in der Regel sehr empfindlich auf den Ionenbeschuss.

ICP-Leistung: Die induktiv eingekoppelte Leistung beeinflusst hauptsächlich die Plasmadichte und erlaubt es auch bei niedrigen Drücken, ein Plasma mit einer hohen Dichte (d.h. hohem Ionisierungsgrad) zu erzeugen. Da die ICP-Leistung keinen Einfluss auf die Beschleunigungsspannung hat, bietet sie eine Möglichkeit, den Anteil des chemischen Ätzens unabhängig vom physikalischen Anteil zu beeinflussen.

Temperatur: Die Probentemperatur beeinflusst im Wesentlichen die Geschwindigkeit des chemischen Ätzen. So lässt sich durch das Kühlen der Probe der Effekt des isotropen Unterätzens der Maske reduzieren[6]. Zum anderen kann durch eine Erhöhung der Probentemperatur die Anlagerung bestimmter Reaktionsprodukte verhindert werden. Die Probentemperatur wird über die Temperatur des wasserdurchströmten Probenhalters reguliert. Um den thermischen Kontakt zwischen beiden zu gewährleisten, wird die Probe auf dem Halter festgeklemmt und von der Rückseite mit Helium angeströmt. Diese Technik nennt sich deshalb auch Helium-Rückseiten-Kühlung (*engl.: Helium backside cooling*).

Ätzrezepte zur Probenstrukturierung

Das Ätzen der in dieser Arbeit verwendeten oxidierten Proben erfolgte in zwei Schritten mit jeweils einem Ätzrezept für die Siliziumdioxidschicht und einem für die Siliziumschicht. Im Vergleich zu Verfahren, bei denen beide Schichten mit dem selben Rezept geätzt werden [58], können bei diesem Vorgehen die Parameter beider Ätzprozesse unabhängig voneinander an das jeweilige Material angepasst werden. Auf Grund der hohen Selektivität der Prozesse gegenüber dem jeweils anderen Material lassen sich die einzelnen Schichten definiert ätzen, wobei die nächste Schicht als Ätzstopp dient. Um entsprechende Prozesse zur präzisen Herstellung photonischer Bauelemente nutzen zu können, müssen diese einige weitere Anforderungen erfüllen. So ist es wichtig, dass der Ätzvorgang stark anisotrop verläuft, so dass sich steile Seitenwände ausbilden und ein Unterätzen der Maske vermieden wird. Dies gewährleistet eine hohe Maßhaltigkeit des Bauelements sowie geringe optische Verluste auf Grund glatter Seitenwände.

Zum Ätzen von Siliziumverbindungen eignen sich fluorhaltige Gase, da sich bei der chemischen Reaktion zwischen Silizium und Fluor Siliziumtetrafluorid (SiF_4) bildet, welches flüchtig ist und sich deshalb leicht absaugen lässt. Fluorbasierte Ätzprozesse haben außerdem den Vorteil, dass sowohl die Gase als auch die Reaktionsprodukte ungiftig sind. Häufig verwendete Gase sind CF_4, CHF_3 und C_4F_8. Sie sind für das ionengestützte Ätzen besonders geeignet, da der im Gas enthaltene Kohlenstoff die Polymerbildung unterstützt. Durch die Auswahl des Gases lässt sich in einem gewissen Maße auch das Verhältnis zwischen chemischem Ätzen und Polymerbildung einstellen. So liefert CF_4 wenig Kohlenstoff (C : F = 1 : 4) zur Polymerbildung und durch den hohen Fluoranteil einen starken Anteil zum chemischen Ätzen. Im Vergleich dazu besitzt C_4F_8 (Octafluorcyclobutan) einen doppelt so großen Anteil an Kohlenstoff (C : F = 1 : 2).

(a) Strukturformel von Octafluorcyclobutan (C_4F_8) (b) Strukturformel von Schwefelhexafluorid (SF_6)

Abbildung 3.6: Strukturformeln der verwendeten Ätzgase.

[6] Ein extremes Beispiel für den Effekt der Probenkühlung stellt das zuvor erwähnte Cryoätzen dar. Bei diesem Prozess wird die Probentemperatur so weit abgesenkt, dass sich senkrechte Strukturen von mehreren Mikrometern Tiefe erzeugen lassen.

Im Plasma werden die ringförmigen Moleküle (Abb. 3.6 (a)) leicht aufgebrochen, so dass sich die entstehenden Ketten zu langen Polymersträngen verbinden können [59]. Aus diesem Grund wurde C_4F_8 in den hier vorgestellten Ätzprozessen verwendet.

Ätzen von Siliziumdioxidstrukturen

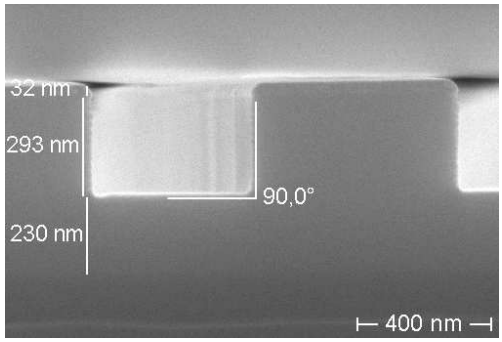


Abbildung 3.7: REM Aufnahme einer geätzten Siliziumdioxidstruktur. Zur Strukturierung wurde eine ca. 30 nm dicke Chrommaske verwendet. Die 293 nm hohe Oxidstruktur zeigt senkrechte Seitenwände, die im Winkel von 90° zu den Schichtgrenzen stehen. Die darunter befindliche 230 nm dicke Siliziumschicht dient als Ätzstopp, was an dem flachen Profil im Graben zu erkennen ist.

Zum Ätzen der Siliziumdioxidstrukturen (SiO_2) wurde dem C_4F_8-Gas Sauerstoff beigemischt. Durch die Änderung des Sauerstoffanteils im Plasma lässt sich in erster Linie die Dicke der auf dem Substrat abgeschiedenen Passivierungsschicht regulieren. Bei einem geringen Sauerstoffanteil ($5-7$ %) wird die Bildung einer passivierenden Polymerschicht unterdrückt, indem die ungesättigten CF_x Verbindungen mit dem Sauerstoff reagieren und somit nicht mehr zur Polymerbildung zur Verfügung stehen [60, 61]. Bei einem höheren Sauerstoffanteil (>7 %) wächst eine $Si_xO_yF_z$ Passivierungsschicht, die den Ablauf des Ätzprozesses dominiert. Die Dicke dieser Schicht steuert den Zugang der Reaktanden zur Probenoberfläche und somit die Ätzgeschwindigkeit des Prozesses [62]. Auf Grund der unterschiedlichen Dicke der Passivierungsschicht auf Si ($5-6$ nm) und SiO_2 (1 nm) lassen sich hohe Selektivitäten gegenüber Silizium erreichen [62, 63]. Abbildung 3.7 zeigt beispielhaft das Ätzprofil eines solchen Prozesses, dessen Ätzrezept in Tabelle 3.2 zusammengefasst ist. Als Grundlage für die Wahl der Parameter des SiO_2-Ätzrezeptes diente Ref. [64].

Tabelle 3.2: Ätzparameter für das nanostrukturierte Ätzen von SiO_2

C_4F_8-Fluss [sccm]	O_2-Fluss [sccm]	Kammerdruck [mTorr]	HF-Leistung [W]	ICP-Leistung [W]	Beschleunigungsspannung [V]	Ätzrate [nm/min]
40	15	6	105	2500	100	184

Diese Werte stellten sich als sehr geeignete Parameter heraus. Lediglich der Kammerdruck sowie die HF-Leistung mussten angepasst werden. Wie in Abb. 3.7 gezeigt, erfüllt der Prozess alle Anforderungen hinsichtlich Selektivität und Kantensteilheit, die für die Herstellung photonischer Strukturen zu stellen sind.

Ätzen von Siliziumstrukturen

Zur Strukturierung der Siliziumschichten wurde ein Gasgemisch aus C_4F_8 und Schwefelhexafluorid (SF_6) (Abb. 3.6 (b)) genutzt. Auf Grund des hohen Fluoranteils des SF_6 führt die Verwendung dieses Gases zu einem stark isotropen Ätzvorgang, welcher zu schrägen Seitenwänden und einem starken Unterätzen der Maske führt [60]. Um dies zu verhindern, ist eine entsprechend dicke Polymerschicht auf den Seitenwänden erforderlich, was das Verhältnis zwischen SF_6- und C_4F_8-Gasfluss zum wichtigsten Parameter dieses Prozesses macht [65]. Als Ausgangspunkt für

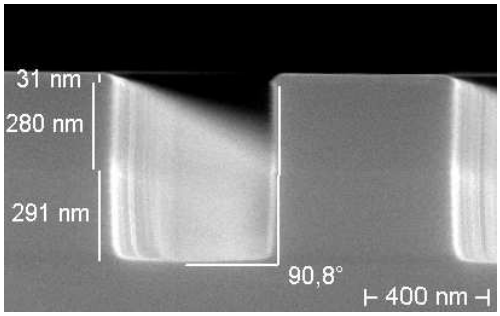


Abbildung 3.8: REM Aufnahme eines geätzten Siliziumdioxid-Silizium Schichtsystems. Zunächst wurde die 280 nm dicke Siliziumdioxidschicht mit den in Tabelle 3.2 aufgeführten Parametern strukturiert. Anschließend erfolgte die Strukturierung der 290 nm dicken Siliziumschicht, wobei wiederum eine hohe Kantensteilheit von ca. 91° erzielt wurde. Als Ätzstopp diente die darunter liegende Siliziumdioxidschicht. Als Maske wurde hier ebenfalls eine 30 nm dicke Chromschicht verwendet.

Tabelle 3.3: Ätzparameter für das nanostrukturierte Ätzen von Silizium

C_4F_8-Fluss [sccm]	SF_6-Fluss [sccm]	Kammerdruck [mTorr]	HF-Leistung [W]	ICP-Leistung [W]	Beschleunigungsspannung [V]	Ätzrate [nm/min]
50	15	6	30	1200	75	120

die zu optimierenden Prozessparameter wurde Ref. [66] genutzt. Anschließend wurden die Parameter schrittweise einzeln optimiert, um Strukturen mit möglichst steilen Seitenwänden und geringem Unterätzen der Maske zu erzeugen. Hierzu wurde der Anteil des chemischen Ätzens durch Verringern des SF_6-Flusses reduziert und der physikalische Ätzanteil durch Absenken des Kammerdrucks erhöht. Die entsprechenden Parameter sind in Tabelle 3.3 zusammengefasst. Das Resultat des Ätzprozesses ist in Abb. 3.8 am Beispiel eines Siliziumdioxid-Siliziumschichtsystems dargestellt. Analog zum Siliziumdioxid-Ätzprozess zeichnet sich das Siliziumätzen ebenfalls durch eine hohe Kantensteilheit und eine hohe Selektivität bezüglich des Siliziums aus. Des Weiteren zeigt die Abbildung, dass der Siliziumätzschritt keine Auswirkungen auf das zuvor strukturierte Oxid hat, so dass beide Prozesse unabhängig voneinander ausgeführt werden können.

Ätzen von Siliziumnitridstrukturen

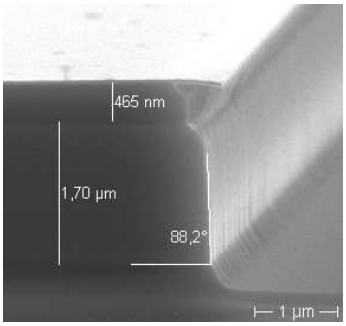


Abbildung 3.9: REM Aufnahme eines geätzten nitridbeschichteten Siliziumwellenleiters. Beide Schichten (SiN 465 nm / Si 1,7 μm) wurden in einem Ätzschritt strukturiert. Dabei kommt es auf Grund der großen Ätzdauer zu einem Unterätzen der Siliziumnitridschicht. Des Weiteren wird auch die Chrommaske angegriffen, weshalb hier eine 60 nm dicke Schicht verwendet wurde.

Zum Ätzen der in Kapitel 7 verwendeten Siliziumnitridschichten wurde eine abgewandelte Form des Siliziumrezepts verwendet. Dabei wurde der SF_6-Fluss auf 10 sccm verringert und die HF-Leistung auf 42 W erhöht, wodurch sich eine Beschleunigungsspannung von 96 V ergab. Die Ätzraten von SiN und Si sind nahezu identisch, so dass bei der Herstellung der Wellenleiterstrukturen für die nichtlinearen Transmissionsmessungen sowohl die Nitridschicht als auch das Silizium mit dem gleichen Rezept in einem Schritt geätzt wurden. Wie sich aus Abb. 3.9 entnehmen lässt, kommt es dabei zu einem Unterätzen der Nitridschicht. Dies liegt daran, dass auf Grund der großen Ätztiefe von über 2 μm und der entsprechend langen Ätzzeit (ca. 16 min) das zuerst geätzte SiN verstärkt angegriffen wird. Außerdem ist das durch PECVD abgeschiedene SiN wesentlich weniger ätzresistent als z.B. das stöchiometrische Si_3N_4.

4 Allgemeine Untersuchungsmethoden

Im vorliegenden Kapitel werden die wesentlichen Methoden zur Charakterisierung der in Kapitel 5-7 untersuchten Proben beschrieben. Ein Schwerpunkt liegt dabei auf der Bestimmung der Verspannungen in den auf den Proben aufgebrachten Beschichtungen sowie der Analyse der dadurch im Silizium hervorgerufenen Verzerrungen. Die Waferbiegungsanalyse wurde dabei für alle in dieser Arbeit untersuchten Proben zur Bestimmung der Verspannungen in den aufgebrachten Schichten genutzt. Zur Bestimmung der in Kap. 6 untersuchten Siliziumgitter wurde das Verfahren der hochaufgelösten Röntgenbeugung (HRXRD) verwendet. Im Anschluss wird die Methode zur Bestimmung des frequenzverdoppelten Signals in verspanntem Silizium in Reflexion vorgestellt, die in Kap. 5 und 6 verwendet wurde. Zum Schluss erfolgt die Beschreibung der Finite-Elemente-Methode, die zur Simulation von Verspannungszuständen und der Lichtausbreitung in Wellenleitern genutzt wurde.

4.1 Verspannungsmessungen an strukturierten und unstrukturierten Proben

Die immer stärkere Miniaturisierung elektronischer Schaltkreise hat das Risiko des verspannungsbedingten Bauteilversagens stark erhöht. Aus diesem Grund wurden für die Mikroelektronik verschiedenste Messverfahren für die Charakterisierung der Verspannungen in mikrostrukturierten Bauelementen sowie in dünnen Schichten entwickelt. Die Waferbiegemethode stellt dabei die Standardmethode zur Untersuchung der Verspannungen in auf Wafern abgeschiedenen Dünnschichten dar. Dies liegt vor allem daran, dass sie sich zur serienmäßigen Untersuchung ganzer Wafer eignet womit sie ein wichtiges Kontrollinstrument bei Abscheideprozessen ist. Auch Röntgenmethoden eignen sich auf Grund ihrer Sensitivität gegenüber Verschiebungen in Kristallgittern hervorragend zur Charakterisierung von Verspannungen. Besonders die Grazing Incidence Methode wird zur tiefenabhängigen Untersuchung von Verspannungen verwendet [67]. Hier wurde allerdings die Methode der hochaufgelösten Röntgenbeugung verwendet, mit deren Hilfe sich die Verspannungen in periodischen Strukturen untersuchen lassen.

Waferbiegungsanalyse zur Bestimmung von Schichtverspannungen

Um die Verspannungen in den Schichten zu bestimmen, die zur Verzerrung des Siliziums auf die Proben aufgebracht wurden, wurde in dieser Arbeit die Waferbiegemethode (*engl.: Wafer bow measurement*) verwendet. Diese Methode, die auf der STONEY - Gleichung (Gl. 4.5) basiert, eignet sich besonders zur Bestimmung von Verspannungen in dünnen Schichten auf Substratwafern. Das Grundprinzip besteht dabei darin, dass ein Teil der erzeugten Verspannung in eine elastische Verbiegung des Wafers umgewandelt wird (siehe Abb. 4.1). Die Verteilung der Verspannungen in der Probe soll hier kurz erläutert werden, da dies für die spätere Interpretation der Messergebnisse (Kapitel. 5) von Bedeutung ist.

Entsprechend Abb. 4.1 lässt sich die Verspannungsverteilung in einem einseitig beschichteten Wafer durch das Superpositionsprinzip beschreiben, das in Ref. [68] detailliert beschrieben wird. Danach lässt sich die Gesamtverspannung als eine Überlagerung einer reinen Dehnungs-

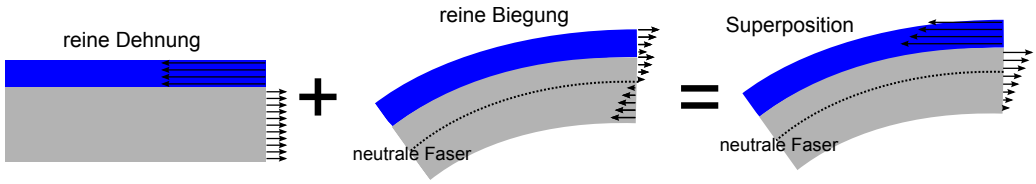


Abbildung 4.1: Schematische Darstellung der Superposition von Dehnungs- und Biegeverspannung in einem Zweischichtmodell. Die Pfeile veranschaulichen dabei den Verlauf der Verspannung innerhalb der Probe.

verspannung σ_{D} und einer reinen Biegeverspannung σ_{B} der Probe auffassen. Erstere stellt sich im Gleichgewicht der axialen Dehnung der verspannten Schicht (V) und dem Substrat (Si) ein und ist homogen in der jeweiligen Schicht verteilt [68]:

$$\sigma_{\mathrm{V,D}} = -\frac{d_{\mathrm{Si}}\, E_{\mathrm{V}}\, E_{\mathrm{Si}}}{d_{\mathrm{V}}\, E_{\mathrm{V}} + d_{\mathrm{Si}}\, E_{\mathrm{Si}}}(\alpha_{\mathrm{Si}} - \alpha_{\mathrm{V}})\, \Delta T, \quad \sigma_{\mathrm{Si,D}} = \frac{d_{\mathrm{V}}\, E_{\mathrm{V}}\, E_{\mathrm{Si}}}{d_{\mathrm{V}}\, E_{\mathrm{V}} + d_{\mathrm{Si}}\, E_{\mathrm{Si}}}(\alpha_{\mathrm{Si}} - \alpha_{\mathrm{V}})\Delta T. \tag{4.1}$$

Hier entspricht E dem jeweiligen Elastizitätsmodul[1], d der Dicke des Substrats bzw. der aufgebrachten Schicht, α dem thermischen Ausdehnungskoeffizienten und ΔT der Differenz zwischen aktueller und Prozesstemperatur. Bei den betrachteten Verspannungen handelt es sich um biaxiale Verspannungen, d.h. ihre Stärke ist in der Probenebene in alle Richtungen gleich. Aus diesem Grund kann hier auf die Angabe von richtungsabhängigen Indizes verzichtet werden. Es ist anzumerken, dass in Gl. 4.1 lediglich die thermische Verspannung betrachtet wird. Die zusätzliche Berücksichtigung der in Abschn. 3.1 erwähnten intrinsischen Verspannung führt hier nur zu einer Änderung des Betrags der Verspannung. Da keine qualitative Änderung der Verspannungsverteilung stattfindet, muss sie in den nachfolgenden Herleitungen nicht explizit berücksichtigt werden. Aus Gl. 4.1 lässt sich das Verhältnis der Dehnungsverspannung in Schicht und Substrat in Abhängigkeit der jeweiligen Dicken ableiten:

$$\frac{\sigma_{\mathrm{V,D}}}{\sigma_{\mathrm{Si,D}}} = -\frac{d_{\mathrm{Si}}}{d_{\mathrm{V}}}. \tag{4.2}$$

Für eine dünne Schicht auf einem dicken Substrat bedeutet dies, dass die Verspannung im Substrat wesentlich geringer ist als in der Schicht, da das massive Substrat eine Relaxation der verspannten Schicht verhindert.

Der Beitrag der Biegung wird durch das Biegemoment hervorgerufen, das durch die unterschiedlich starke Ausdehnung der aufgebrachten Schicht und dem Substrat induziert wird. Die dadurch erzeugte Verspannung ändert sich linear entlang der Oberflächennormalen (siehe Abb. 4.1) und weist einen Stetigkeitssprung an der Grenzfläche zwischen Schicht und Substrat auf. Da die Verspannung an Probenober- und -unterseite in entgegengesetzter Richtung wirkt, kommt es innerhalb der Probe zu einem Vorzeichenwechsel. Die Linie, an der dies auftritt, wird als neutrale Faser bezeichnet, bezüglich der die Biegemomente wirken. Die Biegeverspannung lässt sich in Abhängigkeit des Biegeradius r angeben [68]:

$$\sigma_{\mathrm{V,B}}(z) = E_{\mathrm{V}} \cdot \frac{z - z_0}{r}, \quad \text{bzw.} \quad \sigma_{\mathrm{Si,B}}(z) = E_{\mathrm{Si}} \cdot \frac{z - z_0}{r}. \tag{4.3}$$

Hierbei beschreibt z_0 die Position der neutralen Faser und z die Position der betrachteten Verspannung. Da die Probe durch die dünne Schicht nur wenig verbogen wird, ist die Biegeverspannung entsprechend gering. Der Großteil der bei der Abscheidung erzeugten Verspannung befindet

[1] Der Elastizitäts- oder YOUNG-Modul E gibt das Verhältnis zwischen Verspannug σ und der resultierenden Verzerrung ϵ des Materials an ($\sigma = E\epsilon$). Typische Werte sind $E_{\mathrm{Si}} = 180$ GPa, $E_{\mathrm{SiN}} = 390$ GPa und $E_{\mathrm{SiO_2}} = 95$ GPa [68].

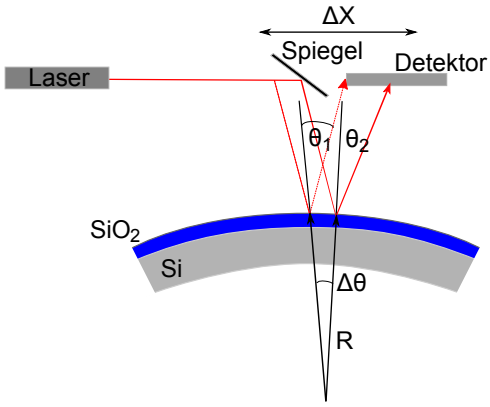


Abbildung 4.2: Schematische Darstellung der Waferbiegungsanalyse. Die Probe wird mit Hilfe eines verfahrbaren Laserstrahls gescannt und dabei die Änderung des Reflexionswinkels $\Delta\Theta$ zwischen zwei Positionen ΔX bestimmt. Mit dem Verhältnis $\Delta\Theta/\Delta X$ lässt sich der Biegeradius des Wafers abschätzen. Mit Hilfe der STONEY-Formel (Gl. 4.5) kann daraus die Verspannung der auf dem Wafer befindlichen Schicht bestimmt werden.

sich somit in Form einer Dehnungsverspannung in der Schicht und nur ein vernachlässigbarer Teil der Verspannung wird in das Volumen des mehrere 100 μm dicken Siliziums übertragen oder führt zu einer Verbiegung des Wafers. Dies lässt sich am Beispiel eines 500 μm dicken Siliziumwafers mit einer 100 nm dicken Oxidschicht veranschaulichen. Unter der Annahme, dass eine Verspannung von $\sigma_\mathrm{D} = -300$ MPa gemessen wurde, ergibt sich die Dehnungsverspannung im Substrat zu $\sigma_\mathrm{D} = +0,06$ MPa. Die maximalen Biegeverspannungen an der Schichtoberkante bzw. Substratunterkante betragen jeweils $\sigma_\mathrm{B} = +0,051$ MPa bzw. $\sigma_\mathrm{B} = -0,097$ MPa.

Durch Gl. 4.3 wird verdeutlicht, wie aus der Kenntnis des Biegeradius auf die Biegeverspannung des Wafers geschlossen werden kann. Aus der Biegeverspannung lässt sich dann auch die dominante Dehnungsverspannung in der aufgebrachten Schicht bestimmen. Beide sind über die Relation

$$\sigma_{\mathrm{V,B}}(z) \approx -6\frac{E_\mathrm{V}}{E_\mathrm{Si}}\frac{\sigma_\mathrm{Si,D}\,d_\mathrm{V}}{d_\mathrm{Si}^2}\cdot(z-z_0) \tag{4.4}$$

miteinander verknüpft[2].

Experimentell wird der Biegeradius durch die Ablenkung eines reflektierten Laserstrahls bestimmt (siehe Abb. 4.2). Dabei wird der Strahl mit Hilfe eines beweglichen Spiegels über die Probe gefahren. Mit einem ortsauflösenden Detektor lässt sich so die Änderung des Ablenkwinkels $\Delta\Theta$ in Abhängigkeit von der Änderung der Strahlposition auf der Probe (ΔX) bestimmen. Im Fall einer geringen Waferbiegung und somit einer kleinen Änderung des Ablenkwinkels gilt $1/R = \frac{\Delta\Theta}{\Delta X}$, wobei R der Biegeradius des Wafers ist. Da auch unverspannte Siliziumwafer herstellungsbedingte Verbiegungen aufweisen können, ist es erforderlich, die Biegeradien vor und nach der Beschichtung zu bestimmen. Hierzu wurde das Messgerät FLX-2320 der Firma TENCOR genutzt. Es funktioniert nach dem zuvor beschriebenen Prinzip und erlaubt die Messung der Waferbiegung an ganzen Wafern. Diese werden mit Hilfe eines Positionierringes in einer definierten Position fixiert, wobei der Wafer auf drei Auflagepunkten ruht. Dies garantiert möglichst gleiche Messbedingungen vor und nach der Beschichtung. Zur Erhöhung der Messgenauigkeit wurde die mittlere Verspannung aus jeweils mindestens vier Messungen bestimmt, bei denen der Wafer um jeweils 90° gedreht wurde. Zur Bestimmung der Verspannung in der aufgebrachten Schicht wird die STONEY-Formel verwendet, deren Herleitung in Ref. [69] beschrieben ist:

$$\sigma_\mathrm{Schicht} = \frac{E_\mathrm{Si}}{(1-\nu_\mathrm{Si})}\frac{d_\mathrm{Si}^2}{6\,d_\mathrm{V}}\cdot\left(\frac{1}{R}-\frac{1}{R_0}\right). \tag{4.5}$$

Hierbei ist E_Si der YOUNG-Modul des Siliziumsubstrats und ν_Si gibt das entsprechende POISSON-Verhältnis[3] an. Die Dicke des Substrats wird durch d_Si berücksichtigt, R und R_0 entsprechen dem Biegeradius des verspannten bzw. unverspannten Wafers.

[2] Die Herleitung des Zusammenhangs in Gl. 4.4 ist im Anhang Abschn. A.2 beschrieben.

[3] Das POISSON-Verhältnis bzw. die Querkontraktionszahl ν gibt das negative Verhältnis der Dickenänderung einer Probe zur mit ihr einhergehenden verspannungsinduzierten Längenänderung an. Typische Werte sind $\nu_{\mathrm{SiO_2}} = 0.18$, $\nu_\mathrm{SiN} = 0.26$ und $\nu_\mathrm{Si} = 0.22$ [68].

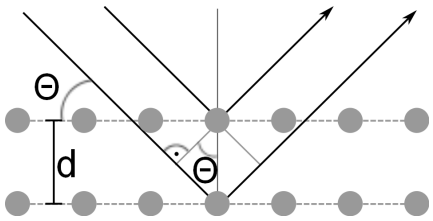


Abbildung 4.3: Schematische Darstellung des Prinzips der Röntgenbeugung. Die Röntgenstrahlen werden an parallelen Netzebenen im Kristall gebeugt. Um eine konstruktive Überlagerung zu erzeugen, muss der Gangunterschied ($2d \sin\Theta$) der Strahlen ein Vielfaches der Wellenlänge der Strahlung betragen.

Zur Bestimmung der Dicke der verspannten Schicht d_V wurde die Probenoberfläche mittels Ellipsometer vermessen und die Schichtdicke an mehreren Positionen des Wafers bestimmt. Für die Berechnung der Verspannung wurde anschließend ein gemittelter Wert verwendet. Die Unsicherheiten bei der Bestimmung von σ_Schicht werden im Wesentlichen durch Probeninhomogenitäten und die Positionierung des Wafers in der Haltevorrichtung bestimmt. Auf eine ausführliche Fehlerbestimmung wurde hier verzichtet und als Messtoleranzen die aus den Mehrfachmessungen ermittelten Standardabweichungen verwendet.

Hochaufgelöste Röntgenbeugung (HRXRD) zur Charakterisierung strukturierter Proben

Im Gegensatz zur Waferbiegemethode, mit der die Verspannung einer auf das Silizium aufgebrachten Schicht bestimmt werden kann, lassen sich mit der nun vorgestellten Röntgenmethode auch Informationen über die dadurch induzierten Verspannungen in dem darunterliegenden periodisch strukturierten Silizium gewinnen. Die Verwendung von Röntgenstrahlen ist ein geeignetes Mittel zur zerstörungsfreien Charakterisierung verschiedenster Arten von Stoffen. Dabei zeichnet sich die Röntgenstrahlung dadurch aus, dass die Wellenlänge der verwendeten elektromagnetischen Strahlung im Angström-Bereich liegt und somit an der elektronischen Struktur der Festkörper gebeugt wird. Dies erlaubt es beispielsweise, Verzerrungen auf der atomaren Gitterebene eines Kristalls nachzuweisen. Je nach Wellenlänge, Stoffzusammensetzung und Messgeometrie ergibt sich eine Vielzahl unterschiedlicher Anwendungsmöglichkeiten, wobei dieser Abschnitt lediglich den Fall der BRAGGbeugung an einer Kristallstruktur behandelt.

Das Grundprinzip der BRAGGbeugung besteht darin, dass die in das Material eindringenden Röntgenstrahlen an den Gitterebenen des Kristalls reflektiert werden (siehe Abb. 4.3) und sich bei Erfüllung der BRAGGbedingung

$$2\,d\,\sin\Theta = m\,\lambda, \quad m = 1, 2, 3, ..., \tag{4.6}$$

konstruktiv überlagern. Hier entspricht d dem Netzebenenabstand, Θ dem Winkel zwischen dem einfallenden Strahl und der Netzebene und λ der Wellenlänge des Röntgenlichts. Da nur monochromatische Röntgenstrahlung verwendet wird, ergibt sich für jede Netzebene eine diskrete Anzahl von Reflexen, aus denen sich Rückschlüsse auf den jeweiligen Netzebenenabstand und somit auch auf die Gitterkonstante des Kristalls ziehen lassen. Da sich eine Verzerrung des Kristalls in einer Verschiebung der Gitteratome widerspiegelt, ist es mit Hilfe der BRAGGbeugung prinzipiell auch möglich, Verzerrungen und die damit verbundenen Verspannungen zu bestimmen.

Zunächst soll jedoch näher auf das Prinzip der Röntgenbeugung an einem unverspannten Kristallgitter eingegangen werden. Wie bereits erwähnt, ergibt sich für die verschiedenen Einfalls- und Austrittswinkel eine diskrete Anzahl an Winkeln, für die Reflexe auftreten können. Diese treten als Punkte im reziproken Gitter auf, das sich mit Hilfe einer EWALDkonstruktion anschaulich beschreiben lässt (siehe Abb. 4.4). Darin sind die Wellenvektoren des einfallenden ($\vec{K}_\mathrm{e}$) und des gebeugten Strahls ($\vec{K}_\mathrm{a}$) eingezeichnet. Da es sich hier um einen elastischen Streuprozess handelt, bleibt der Betrag des Wellenvektors gleich, so dass $K = \left|\vec{K}_\mathrm{e}\right| = \left|\vec{K}_\mathrm{a}\right| = 2\pi/\lambda$ gilt. Der

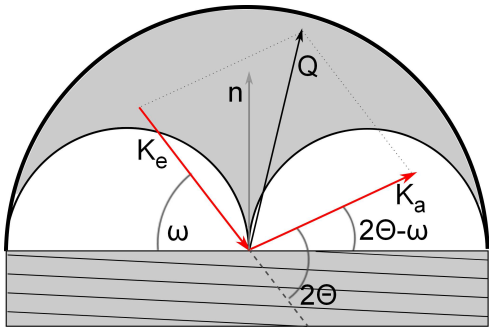


Abbildung 4.4: Skizze der Röntgenbeugung in komplanarer Messgeometrie ($Q_y = 0$). Der Differenzvektor $\vec{Q}$ liegt stets innerhalb der EWALDschen Ausbreitungskugel ($R = 4\pi/\lambda$). Nur im Fall von BRAGGbeugung ($\vec{Q}$ liegt im grauen Bereich) lässt sich ein Signal in Reflexion messen. Durch Verkippen der Probe (ω) und Verfahren des Detektors (2Θ) lassen sich prinzipiell alle Q-Werte im Bereich der BRAGGbeugung anfahren. Auf diese Weise lassen sich reziproke Gitterkarten (*Reciprocal-Space-Maps*) erzeugen.

Einfluss des Beugungswinkels und damit nach Gl. 4.6 des Netzebenenabstandes spiegelt sich in der Differenz ($\vec{Q} = \vec{K}_a - \vec{K}_e$) beider Vektoren wider. Im Fall einer BRAGGmessgeometrie liegt der Aufpunkt von $\vec{Q}$ im grauen Bereich der EWALD-Halbkugel mit dem Radius $R = 4\pi/\lambda$.[4]

In dieser Arbeit wurde das Verfahren zur hochaufgelösten Weitwinkelbeugung (*engl.: High Resolution X-ray Diffraction (HRXRD)*) verwendet, mit dem die Verzerrung der Gitterstruktur durch eine Verbreiterung des Streureflexes nachgewiesen werden kann [70]. Diese wird durch die lokale Störung des periodischen Gitters verursacht. Des Weiteren können bei der Untersuchung periodisch strukturierter Proben zusätzliche Beugungseffekte auftreten. Um diese Effekte zu beobachten, bietet es sich an, eine Karte des reziproken Gitters (*engl.: Reciprocal-Space-Map*) aufzunehmen (siehe Abb. 6.4 (a)), bei der die Röntgenstreuung im Winkelbereich um einen Reflex des Gitters herum gemessen wird. Die Gitterkarte erhält man durch Variation von Q_x und Q_z, welche durch Verkippung der Probe und Rotation des Detektors um den Probenmittelpunkt erfolgen kann (siehe Abb. 4.4). Eine gleichzeitige Änderung von ω und 2Θ im Verhältnis 1:2 entspricht einer Variation des Betrages von $\vec{Q}$, wobei dessen Richtung konstant bleibt (ω–2Θ–Scan). Bei einer reinen Änderung des Einfallswinkels ω hingegen bleibt der Betrag von Q gleich, dafür ändert sich hier die Richtung des Vektors (Radialer Scan). Aus der auf diese Weise gewonnenen Intensitätsverteilung lässt sich die reziproke Gitterkarte konstruieren. In Abhängigkeit von ω und 2Θ ergibt sich für $\vec{Q}$:

$$\vec{Q} = \frac{2\,\pi}{\lambda} \begin{pmatrix} \cos(2\,\Theta - \omega) - \cos\omega \\ 0 \\ \sin(2\,\Theta - \omega) + \sin\omega \end{pmatrix}. \tag{4.7}$$

Der zur Messung der *Reciprocal-Space-Maps* verwendete Aufbau ist in Abb. 4.5 schematisch dargestellt. Es handelt sich hierbei um ein D8 Röntgendiffraktometer der Firma BRUKER AXS. Die Messungen wurden in der Fachgruppe „Nanostrukturierte Materialien“ an der MLU durchgeführt.

Im Folgenden werden die wesentlichen Merkmale des Geräts zusammengefasst. Die Strahlenquelle des Diffraktometers ist ein Kupfer $K_{\alpha 1}$-Strahler mit einer charakteristischen Wellenlänge

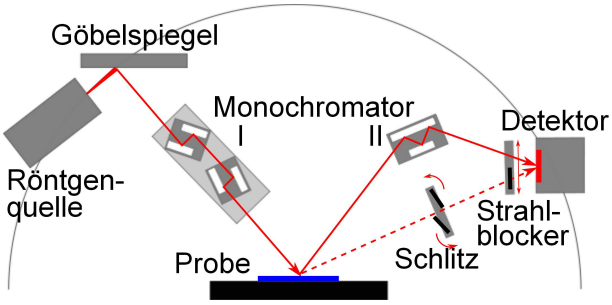


Abbildung 4.5: Strahlengang im verwendeten Röntgendiffraktometer (D8 von BRUKER AXS). Über einen Göbelspiegel und einen Vierfach-Monochromator wird der parallelisierte Röntgenstrahl auf die Probe gelenkt. Das reflektierte Signal wird wahlweise nach Passieren eines verstellbaren Spalts (hohe Intensität) oder des Pathfinder Moduls (hohe Auflösung) vom Szintillationsdetektor registriert.

[4] Bei geeigneter Kombination von $\vec{K}_e$ und $\vec{K}_a$ ist es auch möglich, $\vec{Q}$ in die weißen Halbkreise zu verschieben. Diese werden als LAUE-Zone bezeichnet und sind nur für den Fall der Transmission oder der rückseitigen Bestrahlung der Proben erreichbar.

Abbildung 4.6: Schematische Darstellung zur transversalen Kohärenz der Röntgenstrahlung aus einer Quelle der Länge d im Abstand s.

von $\lambda = 1,5406$ Å. Der emittierte Primärstrahl trifft als Parallelstrahl auf die Probe, wobei er zunächst an einem Göbelspiegel reflektiert wird und anschließend einen vierfach-Monochromator passiert. Der Göbelspiegel dient dazu, den divergenten Strahl zu kollimieren, was zu einer Erhöhung der Intensität des Primärstrahls führt. Der Monochromator beschränkt den Spektralbereich des Strahls zusätzlich. Für hochaufgelöste Messungen wird der gebeugte Strahl unter Zuhilfenahme eines Pathfinder Moduls detektiert. Dabei handelt es sich um einen Dreifach-Monochromator, ähnlich dem im Eingangsstrahl. Die starke Einschränkung des Spektralbereichs ermöglicht es, die benötigte hohe Winkelauflösung zu gewährleisten. Alternativ kann der gebeugte Strahl auch durch einen Spalt variabler Breite geführt werden. Dies verringert zwar die Winkelauflösung, liefert jedoch höhere Intensitäten am Detektor. Dieser ist in beiden Fällen ein Szintillationsdetektor.

Da mit Hilfe der Röntgenbeugung periodische Strukturen untersucht werden sollen, ist damit zu rechnen, dass geätzte periodische Strukturen wie Oberflächengitter ebenfalls Beugungseffekte hervorrufen. Um abzuschätzen, wie viele Gitterperioden einen Beitrag zum Beugungsbild leisten können, ist es erforderlich, eine Abschätzung der Kohärenzlänge der Röntgenstrahlung vorzunehmen [71]. Hierbei ist vor allem die transversale Kohärenz von Bedeutung, die bestimmt, über wie viele Gitterzähne das Licht phasenrichtig gebeugt wird. Unter transversaler Kohärenzlänge versteht man die Entfernung, in der sich die Phase zwischen zwei Wellenfronten mit gleicher Wellenlänge senkrecht zur Ausbreitungsrichtung um π verschoben hat (Abb. 4.6). Ursache für die begrenzte Kohärenzlänge L_T ist hierbei die Ausdehnung der Quelle. Geht man davon aus, dass die zuvor erwähnten Wellenfronten ihren Ursprung in den Endpunkten einer linienförmigen Quelle der Länge d haben, so interferieren beide in einer Entfernung s auf der Probe. Dabei schließen beide Wellenfronten einen Winkel von $\theta = d/s$ ein. Zur Erfüllung der Kohärenzbedingung gilt außerdem $\theta = \lambda/(2L_\mathrm{T})$. Daraus lässt sich die transversale Kohärenzlänge

$$L_\mathrm{T} = \frac{\lambda}{2}\frac{s}{d} \tag{4.8}$$

ableiten. Für die in dieser Arbeit verwendete Konfiguration gilt $s = 520$ mm, $d = 0,04$ mm und $\lambda = 1,54$ Å. Damit ergibt sich eine transversale Kohärenzlänge von $L_T = 1,001$ μm. Der kohärent beleuchtete Bereich auf der Probe ist jedoch größer, da das Licht nicht senkrecht, sondern unter einem Winkel von $\alpha_\mathrm{e} = 14,221°$ auf die Probe trifft. Die Breite des kohärent ausgeleuchteten Bereichs ergibt sich damit zu $B_\mathrm{Koh} = L_\mathrm{T}/\sin\alpha_\mathrm{e} = 4,0074$ μm.

4.2 Messung von Frequenzverdopplungseffekten in Reflexion

Zur Untersuchung des Einflusses von Verspannungen auf den Effekt der Frequenzverdopplung in Silizium wurde das 2ω-Signal in Reflexion vermessen. Dazu wurde ein entsprechender Messplatz konstruiert und aufgebaut, der im Folgenden beschrieben wird. Dabei wird auf die Funktionsweise des Aufbaus und seine Besonderheiten bezüglich der Justage eingegangen, die bei der Konstruktion zu berücksichtigen waren. Eine schematische Darstellung der Messvorrichtung ist in Abb. 4.7 zu sehen. Auf der linken Seite ist das Lasersystem dargestellt, das zur Erzeugung des zur Anregung genutzten Fundamentalstrahls verwendet wurde. Das Lasersystem besteht aus vier Komponenten. Der kontinuierlich strahlende Nd:YVO_4-Laser („Millenia“) mit einer Leistung von 5 W und einer Wellenlänge von 532 nm pumpt den Titan-Saphir-Laser („Tsunami“). Dieser

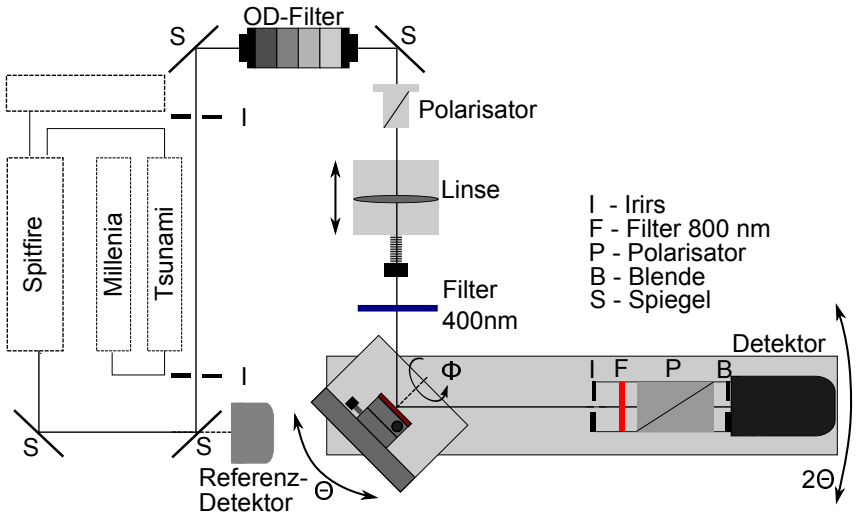


Abbildung 4.7: Schematische Darstellung des zur Untersuchung der Frequenzverdopplung in Silizium verwendeten Messaufbaus. Links ist das zur Strahlerzeugung genutzte Lasersystem dargestellt. Der Anregungsstrahl wird nach Durchlaufen eines Filterrades (OD-Filter), eines Polarisators, einer Linse und eines Farbfilters auf die Probe gelenkt. Der erzeugte frequenzverdoppelte Strahl wird dann nach Durchlaufen eines Interferenzfilters, der die Wellenlängenanteile des Anregungsstrahls herausfiltert, und eines drehbaren Polarisators mit Hilfe eines Siliziumdetektors gemessen.

erzeugt 80 fs lange Laserpulse mit einer Repetitionsrate von 82 MHz und einer Wellenlänge von 800 nm. Um die Leistung des Anregungsstrahls zu erhöhen, wird dieser durch einen regenerativen Verstärker („Spitfire“) verstärkt. Dieser wird mit einem Nd:YLF-Laser mit einer Wellenlänge von 527 nm gepumpt. Die Leistung von 10 W wird dabei durch 200 ns lange Pulse mit einer Repititionsrate von 1 kHz übertragen. Der vom regenerativen Verstärker ausgesandte p-polarisierte Anregungsstrahl mit einer mittleren Leistung von 430 mW und einer Wellenlänge von 800 nm besitzt eine temporale Pulslänge von 150 fs bei einer Repetitionsrate von 1 kHz.

Dieser wird über Spiegel zum Messaufbau (rechts in Abb. 4.7) geleitet und dort mit Hilfe von zwei Irisblenden einjustiert. Im Aufbau durchläuft der Strahl zunächst einen verstellbaren Neutraldichtefilter, mit dem die Intensität des Strahls reguliert werden kann. Anschließend passiert er einen parallel eingestellten Glan-Thompson-Polarisator, der sich auf Grund seiner hohen Zerstörschwelle besonders für hohe Strahlintensitäten eignet. Dieser entfernt senkrecht polarisierte Komponenten des elektrischen Feldes, die möglicherweise durch eine Drehung der Polarisation beim Umlenken des Anregungsstrahls entstehen können. Anschließend wird der Strahl mit einer Linse (Brennweite $f = 31,5$ cm) fokussiert. Die Probe befindet sich 1,5 cm vor dem Fokus im Strahl, wodurch ein ausreichend großer Bereich der Oberfläche ($\varnothing \approx 100$ μm) angeregt wird, um den lokalen Einfluss von Probeninhomogenitäten zu minimieren. Da sich gezeigt hat, dass der Anregungsstrahl durch die Wechselwirkung mit den verschiedenen vorgeschalteten optischen Bauteilen bereits einen geringen Anteil an frequenzverdoppeltem Signal mitführt, passiert er vor dem Auftreffen auf die Probe einen Farbfilter, der die Lichtanteile mit einer Wellenlänge um 400 nm entfernt. Nach dem Auftreffen auf die Oberfläche der Siliziumprobe werden der reflektierte Anregungsstrahl und das im Silizium erzeugte frequenzverdoppelte Signal ($\lambda = 400$ nm) in den Tubus des angeschlossenen Detektors geleitet. Darin befindet sich ein Interferenzfilter, der für eine Wellenlänge von 405±10 nm transparent ist und somit im Strahl enthaltene Anteile der Anregungswellenlänge herausfiltert. Die Polarisation des Strahls lässt sich anschließend mit einem drehbaren Polarisationsfilter auswählen und wird vom sich anschließenden Detektor registriert. Bei dem Detektor handelt es sich um einen Photoelektronenvervielfacher der Firma

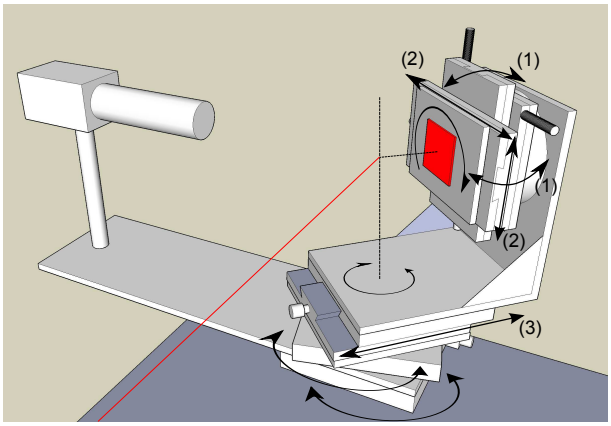


Abbildung 4.8: Aufbau der Probenhalterung zur Messung des Effekts der Frequenzverdopplung in Reflexion. Einfalls- und Austrittswinkel werden durch Rotation der Probe und des Detektorarms variiert. Probe (rot) und Anregungsstrahl (rot) müssen so eingestellt sein, dass der Strahl die Probe im Schnittpunkt der beiden Drehachsen (Einfalls-/Austrittswinkel und Probenrotation) trifft. Dazu lässt sich die Probe verschieben (3). Des Weiteren muss die Probenoberfläche senkrecht zur Rotationsachse stehen, was durch eine Verkippung der Probe erreicht werden kann (1).

Thorlabs (PMM01). Dieser eignet sich besonders für einen Spektralbereich von $280 - 630$ nm und ist somit unempfindlich für den ohnehin stark gedämpften Anregungsstrahl.

Spezielle Anforderungen

Eine große Herausforderung bei der Messung von Frequenzverdopplungseffekten in Reflexion ist die Positionierung der Probe im Strahlengang. Besonders bei den in dieser Arbeit durchgeführten winkelabhängigen Messungen, bei denen die Probe um ihre Oberflächennormale (Azimutalrotation) gedreht wird, ist es wichtig, dass die Probenoberfläche senkrecht zur Drehachse steht. Eine Verkippung der Probe führt bei der Rotation zu einer leichten Veränderung von Ein- und Austrittswinkel. Dies hat zur Folge, dass sich die Position des reflektierten Strahls auf dem Detektor verschiebt oder ganz an diesem vorbei gelenkt wird, was zu einer Verfälschung des gemessenen Signals führt. Des Weiteren muss gewährleistet sein, dass der einfallende Strahl stets auf den Schnittpunkt von Rotationsachse und Probenoberfläche trifft. Andernfalls würde er bei einer Rotation der Probe auf deren Oberfläche umher wandern, was das winkelabhängige Signal beim Vorhandensein von Probeninhomogenitäten verfälscht.

Neben der Rotation der Probe um den Azimutalwinkel φ lässt sich auch der Einfallswinkel Θ des Anregungsstrahls ändern, was durch eine entsprechende Drehung der Probe erreicht wird. Dabei ist es wichtig, dass die Drehachse in der Ebene der Oberfläche liegt. Andernfalls würde sich bei einer Änderung des Einfallswinkels der Abstand zwischen Probe und Linse ändern, was zu einer Änderung der Größe der bestrahlten Oberfläche und zu einer Verfälschung der Intensität des Messsignals führen würde. Weiterhin hätte dies ebenfalls ein Wandern des Anregungsstrahls auf der Probe zur Folge. Neben der Drehung der Probe zur Änderung des Einfallswinkels muss zur Detektion des Messsignals der Detektor entsprechend dem geänderten Reflexionswinkel um die gleiche Achse gedreht werden.

Justage des Aufbaus

Eine schematische Darstellung des zur optimalen Positionierung der Probe verwendeten Probenhalters ist in Abb. 4.8 abgebildet. Um die Probe optimal für die Messungen auszurichten ist es wichtig, die Justage der einzelnen Parameter in der korrekten Reihenfolge vorzunehmen.

1. Zunächst ist die Probenoberfläche senkrecht zur Drehachse um den Azimutalwinkel φ auszurichten, um ein Taumeln des reflektierten Signals zu vermeiden. Dazu wird auf einem Schirm die Position des reflektierten Anregungsstrahls für $\varphi = 0°$ und $\varphi = 180°$ markiert. Anschließend wird der Strahl durch Verkippen der Probe und mittels der Schrauben (siehe Abb. 4.8 (1)) auf die Mittelposition zwischen beiden Punkten justiert. Dieser Vorgang wird wiederholt, bis die Probe senkrecht zur Drehachse steht und sich somit die Position des Reflexes nicht mehr verändert.

2. Als nächstes ist zu gewährleisten, dass der Anregungsstrahl im Schnittpunkt von Probenoberfläche und Azimutaldrehachse auftrifft. Dazu wurden die Proben mit einer 30 μm großen Markierung versehen. Auf diese wird der Anregungsstrahl bei senkrechtem Einfall justiert und anschließend die Probe um $\Delta\varphi = 180°$ gedreht. Der Anregungsstrahl und die Probenmarkierung werden nun zu gleichen Teilen zueinander verschoben (Abb. 4.8 (2)), so dass der Strahl wieder auf die Markierung trifft. Dieses Vorgehen wird iterativ wiederholt, bis sich Strahl und Probenmarkierung auf dem Schnittpunkt von Drehachse und Probenoberfläche befinden.
3. Durch die Änderung des Strahls im vorhergehenden Schritt fällt dieser nicht mehr senkrecht auf die Probe und muss daher entsprechend nachjustiert werden. Dies erfolgt durch eine Verkippung der letzten beiden Spiegel im Strahlengang, wodurch ein senkrechter Strahleinfall bei einem gleichzeitigen Auftreffen auf der Probenmarkierung erreicht wird.
4. Abschließend ist sicherzustellen, dass die Probenoberfläche und die Drehachse zur Änderung des Einfallswinkels eine Schnittlinie besitzen. Dazu lässt sich die Probe entlang ihrer Oberflächennormalen verschieben (Abb. 4.8 (3)). Die Probe wird so verschoben, dass bei einer Änderung von Ein- und entsprechendem Austrittswinkel der Reflex des Anregungsstrahls stets die gleiche Position auf dem Detektor trifft[5].

Um das gemessene Signal von Störsignalen zu trennen, wurde der Detektor über eine *Sample-and-Hold*-Box ausgelesen. Dieses Gerät misst den Signalverlauf des Detektors und speichert dabei das maximal anliegende Detektorsignal. Da die Box an den 1 kHz - Referenztakt des Anregungslasers gekoppelt ist, werden nur Signale gemessen, die zeitlich mit dem Anregungspuls korrelieren. Eine an den Referenztakt gekoppelte Verzögerung gibt dann an den Messrechner das Signal zum Auslesen des gespeicherten Messwerts. Dieses Messverfahren ermöglicht eine störungsarme Signalmessung, da vom Detektor gemessene Impulse, die nicht gleichzeitig mit dem Laserpuls auftreten, nicht von der *Sample-and-Hold*-Box aufgenommen werden. Um die Genauigkeit der Messung weiter zu erhöhen, wurden für jeden Messpunkt 2000 Messwerte aufgenommen und anschließend der Mittelwert gebildet.

Zusätzlich zum Detektor für das frequenzverdoppelte Signal wurde noch ein Referenzdetektor zur Messung des Anregungssignals verwendet. Dadurch lassen sich durch Normierung des frequenzverdoppelten Signals auf das Quadrat des Signals des Referenzdetektors mögliche Schwankungen in der Intensität des Anregungslasers herausrechnen[6].

Strahldivergenz

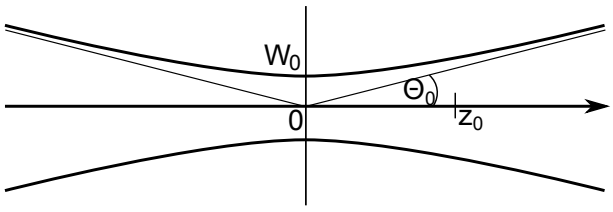
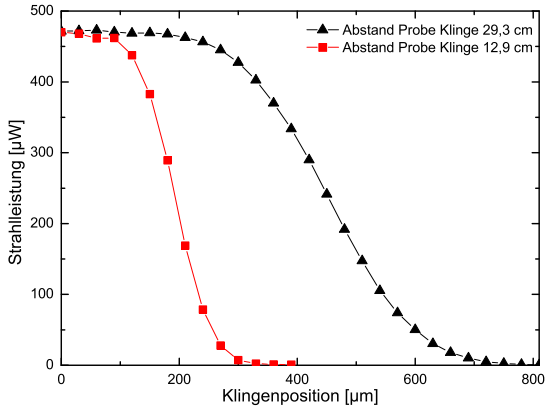


Abbildung 4.9: Breite eines Gaussstrahls in Abhängigkeit der Strahlposition. Der Kegel mit dem Radius w enthält 86% der Strahlintensität. Der minimale Radius wird mit w_0 angegeben. z_0 wird als Rayleighlänge bzw. Fokustiefe ($2z_0$) bezeichnet. An dieser Position beträgt der Strahlradius $\sqrt{2}\,w_0$. Θ_0 gibt die Hälfte des Winkels an, mit dem der Strahl divergiert.

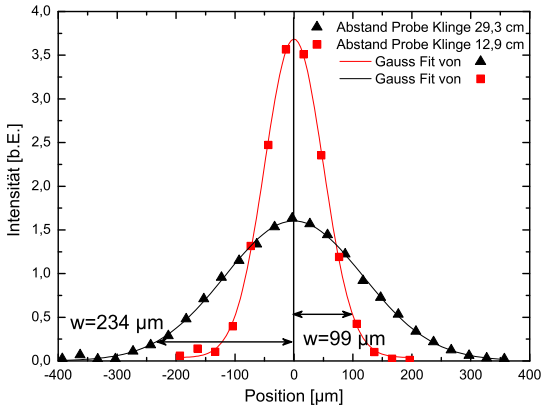
Da, wie in Abschn. 2.2 erwähnt, der Effekt der Frequenzverdopplung stark von den strukturellen Eigenschaften des Siliziums abhängt, ist es wichtig eine hinreichend genaue Winkelauflösung zu gewährleisten. Das ist vor allem für den Azimutalwinkel von Bedeutung, da das frequenzverdoppelte Signal stark von selbigem abhängt. Aus diesem Grund wurde der Divergenzwinkel Θ_0 (siehe Abb. 4.9) des Anregungsstrahls bestimmt, welcher angibt, wie groß der Winkelbereich

[5] Dazu wird der Tubus vor dem Detektor entfernt und die geschlossene Blende (Abb. 4.7) zur Positionsbestimmung genutzt.

[6] Es hat sich allerdings herausgestellt, dass die Schwankungen in der Laserintensität zu gering sind, um signifikante Auswirkungen auf das frequenzverdoppelte Signal zu haben.



(a) Leistung des Anregungsstrahls in Abhängigkeit von der Klingenposition.



(b) Die Ableitung des Strahlprofils ergibt das gaussförmige Intensitätsprofil des Anregungsstrahls.

Abbildung 4.10: Bestimmung des Profils des Anregungsstrahls mit der Klingenmethode.

des einfallenden Lichts ist. Hierzu wurde zunächst der Radius $w(z)$ des reflektierten Anregungsstrahls mit der Klingenmethode (*engl.: moving edge*) bestimmt. Dazu wurde die Leistung des Anregungsstrahls gemessen während eine Rasierklinge schrittweise in den Strahl gefahren wurde und diesen blockierte (siehe Abb. 4.10 (a)). Da es sich bei dieser Messung um eine Art rückwärtige Integration über das Strahlprofil handelt, kann mittels numerischer Ableitung das Profil des Strahls an der jeweiligen Position bestimmt werden (Abb. 4.10 (b)). Durch Anfitten eines Gaussprofils lässt sich der Strahlradius bestimmen in dem sich 86% der Strahlleistung befinden. Aus dem so bestimmten Strahlradius w lassen sich der Radius des Strahls im Fokus w_0 und die Rayleighlänge z_0 bestimmen, die den Gaussstrahl charakterisieren (siehe Abb. 4.9). Mit diesen lässt sich der Strahlradius w am Ort z berechnen [72]:

$$w(z) = w_0 \left[1 + \left(\frac{z}{z_0}\right)^2\right]^{1/2}. \tag{4.9}$$

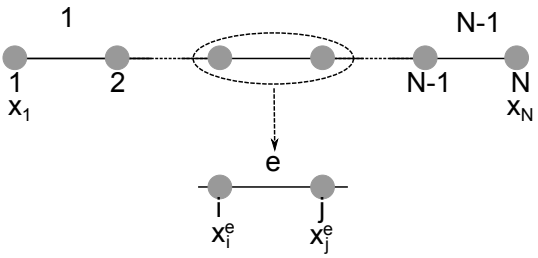
Wie aus Abb. 4.9 ersichtlich ist der Divergenzwinkel des Strahls für $z \gg z_0$ am größten. Mit dieser Annahme lässt sich Gl. 4.9 schreiben als:

$$w(z) \approx \frac{w_0}{z_0}\, z \equiv \Theta_0\, z \quad \text{bzw.} \quad \Theta_0 = \frac{w(z)}{z}. \tag{4.10}$$

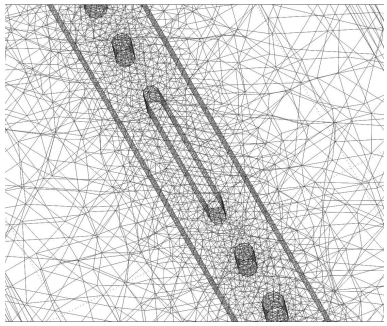
Damit ergibt sich für beide Messungen (Abb. 4.9) ein Divergenzwinkel von $\Theta_0 = 0,05°$. Die Divergenz des Anregungswinkels ist somit vernachlässigbar klein, so dass ein „Verschmieren“ des winkelabhängigen Signals ausgeschlossen werden kann.

4.3 Die Finite-Elemente-Methode

Die Finite-Elemente-Methode (FEM) ist ein Verfahren zur numerischen Lösung partieller Differentialgleichungen. Da dieses Verfahren für verschiedenste Arten partieller Differentialgleichungen genutzt werden kann, wird es auf vielen Gebieten vor allem in den Ingenieurwissenschaften genutzt. Die Rechenmethode basiert im Wesentlichen auf einer Diskretisierung des Simulationsgebiets durch eine Vielzahl von Gitterelementen (Abb. 4.11 (b)), wobei die Eigenschaften der untersuchten Größe (z.B. das elektromagnetische Feld) auf jedem Abschnitt durch eine endliche (*finite*) Anzahl von Parametern beschrieben werden können.



(a) Schematische Darstellung der Diskretisierung des Simulationsgebiets durch N Gitterelemente. Mehrere Gitterelemente werden zu Segmenten e zusammengefasst, auf denen die zu lösende Differentialgleichung aufgestellt wird.



(b) Gitter eines dreidimensionalen FEM Modells, erstellt mit COMSOL Multiphysics. Das Gitter weist eine feinere Auflösung in Bereichen mit hohem Brechungsindex auf, da das propagierende Feld dort eine geringere Wellenlänge aufweist.

Abbildung 4.11: Veranschaulichung des Prinzips der Finite-Elemente-Methode.

Im Folgenden wird die Methode anhand der Wellengleichung für das elektrische Feld im Vakuum näher beschrieben.

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 E}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 E}{\partial x^2} = 0. \tag{4.11}$$

Neben der Erfüllung der Wellengleichung (Gl. 4.11) soll das elektrische Feld zusätzlich, je nach Wahl der Randbedingungen, einer DIRICHLET Bedingung $E(x=0) = E_0$ oder einer NEUMANN Bedingung $\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}\big|_{x=L} = 0$ genügen. Der Einfachheit halber wird dabei das eindimensionale Problem betrachtet und zusätzlich die Zeitabhängigkeit, durch den Separationsansatz $E(x,t) = E(x)e^{-i\omega t}$ für zeitharmonische Probleme, abgespalten, wodurch sich aus Gl. 4.11

$$\frac{\omega^2}{c^2}E - \frac{\partial^2 E}{\partial x^2} = 0 \tag{4.12}$$

ergibt. Zunächst wird zur Lösung dieser Gleichung das Simulationsgebiet in einzelne Segmente aufgeteilt, was im eindimensionalen Fall kurzen Liniensegmenten entspricht (siehe Abb. 4.11 (a)). Zu jedem Segment e gehören im Fall linearer Elemente zwei Knoten j ($j = 1,2$). Da die Differentialgleichung für jedes Segment aufgestellt werden soll, bietet es sich an, eine lokale Notation der Koordinaten einzuführen. Hierbei steht x_j^e / x_i^e für die Position j bzw. i im Segment e. Unter der Annahme, dass $E(x)$ im betrachteten Segment eine lineare Funktion ist, werden zur Beschreibung von $E^e(x)$ lediglich die Funktionswerte von $E_1^e = E^e(x_1^e)$ und $E_2^e = E^e(x_2^e)$ benötigt. Die Werte zwischen x_1^e und x_2^e lassen sich dann mit Hilfe von Basisfunktionen $\Phi_j^e(x)$ interpolieren:

$$E^e(x) = \sum_{j=1}^{2} E_j^e \cdot \Phi_j^e(x). \tag{4.13}$$

Die $\Phi_j^e(x)$ sind lineare Funktionen für die gilt $\Phi_j^e(x_j^e) = 1$ und $\Phi_j^e(x_i^e) = 0$ für $j \neq i$. Zur numerischen Lösung von Gl. 4.12 wird das Problem zunächst separat auf den einzelnen Segmenten betrachtet, wobei die Felder innerhalb des jeweiligen Segments als lineare Überlagerung der Feldanteile auf den Knoten des Segments dargestellt werden (Gl. 4.13).

Um Gl. 4.12 in ein numerisch lösbares Gleichungssystem zu überführen, lässt sich die GALERKIN-Methode [73] (Methode des gewichteten Residuums) anwenden. Das Residuum r mit

$$r = \frac{\omega^2}{c^2}E - \frac{\partial^2 E}{\partial x^2}. \tag{4.14}$$

ist ein Maß für die Abweichung der numerischen Näherung von der tatsächlichen Lösung. Es ist das Ziel der Galerkin-Methode, das Residuum zu minimieren. Als Gewichtungsfunktionen dienen die Basisfunktionen. Die Anzahl ihrer Parameter entspricht dabei der Anzahl der Freiheitsgrade des Modells. Mit Hilfe der Basisfunktionen lässt sich das Residuum für jeden Knoten eines jeden Segments angeben:

$$\begin{aligned} R_i^e &= \int_{x_1^e}^{x_2^e} \Phi_i^e(x)\, r(x)\mathrm{dx} \\ &= \int_{x_1^e}^{x_2^e} \left(\frac{\omega^2}{c^2} \Phi_i^e(x)\, E(x) + \frac{\mathrm{d}\Phi_i^e(x)}{\mathrm{d}x} \frac{\mathrm{d}E(x)}{\mathrm{d}x} \right) \mathrm{dx} - \Phi_i^e(x) \frac{\mathrm{d}E(x)}{\mathrm{d}x} \Big|_{x_1^e}^{x_2^e}, i = 1, 2. \end{aligned} \tag{4.15}$$

Mit Hilfe von Gl. 4.13 lässt sich Gl. 4.15 für das Segment e durch dessen Basisfunktionen darstellen:

$$R_i^e = \sum_{j=1}^{2} E_j^e \underbrace{\int_{x_1^e}^{x_2^e} \left(\frac{\omega^2}{c^2} \Phi_i^e(x)\, \Phi_j^e(x) + \frac{\mathrm{d}\Phi_i^e(x)}{\mathrm{d}x} \frac{\mathrm{d}\Phi_j^e(x)}{\mathrm{d}x} \right) \mathrm{dx}}_{K_{ij}^e} - \underbrace{\Phi_i^e(x) \frac{\mathrm{d}E(x)}{\mathrm{d}x} \Big|_{x_1^e}^{x_2^e}}_{g_i^e}, \quad i = 1, 2. \tag{4.16}$$

Gleichung 4.16 lässt sich in Matrixform schreiben:

$$\vec{R}^e = \mathbf{K}^e\, \vec{E}^e - \vec{g^e}, \tag{4.17}$$

wobei $\vec{E}^e = \begin{pmatrix} E_1^e \\ E_2^e \end{pmatrix}$ ist.
Ausgehend von Gl. 4.17 lässt sich nun, durch die Summation über alle Segmente (N-1), das Gleichungssystem für das komplette Rechengebiet angeben:

$$\vec{R} = \sum_{e=1}^{N-1} \vec{R^e} = \mathbf{K}\, \vec{E} - \vec{g} = 0. \tag{4.18}$$

Im nächsten Schritt wird das Gleichungssystem entsprechend Gl. 4.18 aufgestellt, die einzelnen Segmente miteinander verknüpft sowie die Randbedingungen eingefügt. Dies wird am Beispiel eines 1D Gitters mit 3 Segmenten, d.h. 4 Knoten gezeigt, analog zu Abb. 4.11 (a). In diesem Fall hat das Produkt $\mathbf{K}\vec{E}$ folgende Form:

$$\mathbf{K}\vec{E} = \begin{pmatrix} K_{11}^1 & K_{12}^1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ K_{21}^1 & K_{22}^1 & K_{11}^2 & K_{12}^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & K_{21}^2 & K_{22}^2 & K_{11}^3 & K_{12}^3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & K_{21}^3 & K_{22}^3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_1^1 \\ E_2^1 \\ E_1^2 \\ E_2^2 \\ E_1^3 \\ E_2^3 \end{pmatrix}. \tag{4.19}$$

Da das Gleichungssystem in Gl. 4.19 noch überbestimmt ist, werden zunächst die sich überschneidenden Knotenpunkte miteinander verknüpft. Dazu ist es von Vorteil, das elektrische Feld in globalen Koordinaten darzustellen, da es die Doppelbezeichnung einzelner Knotenpunkte beseitigt. Zwischen lokalen und globalen Feldkomponenten gelten folgende Beziehungen:

$$\left.\begin{aligned} E_1^1 &= E_1 \\ E_2^1 = E_1^2 &= E_2 \\ E_2^2 = E_1^3 &= E_3 \\ E_2^3 &= E_4 \end{aligned}\right\} \Longrightarrow \begin{pmatrix} E_1^1 \\ E_2^1 \\ E_1^2 \\ E_2^2 \\ E_1^3 \\ E_2^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \\ E_4 \end{pmatrix}. \tag{4.20}$$

Durch Multiplikation von **K** mit der Transformationsmatrix lässt sich die Zahl der zu bestimmenden E_i verringern und Gl. 4.19 erhält die Form:

$$\mathbf{K}\vec{E} = \begin{pmatrix} K_{11}^1 & K_{12}^1 & 0 & 0 \\ K_{21}^1 & K_{22}^1 + K_{11}^2 & K_{12}^2 & 0 \\ 0 & K_{21}^2 & K_{22}^2 + K_{11}^3 & K_{12}^3 \\ 0 & 0 & K_{21}^3 & K_{22}^3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \\ E_4 \end{pmatrix}. \tag{4.21}$$

Die Verknüpfung der g_i^e erfolgt analog zum vorhergehenden Schritt. Somit ergibt sich[7]:

$$\vec{g} = \sum_{e=1}^{3} g^e = \begin{pmatrix} -\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}\big|_{x=x_1} \\ 0 \\ 0 \\ \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}\big|_{x=x_2} \end{pmatrix}. \tag{4.22}$$

Nachdem nun die Gleichungen der einzelnen Segmente verknüpft wurden, gilt es, die gegebenen Randbedingungen zu berücksichtigen. Die DIRICHLET Bedingung $E(x = 0) = E_0$ entspricht $E_1 = E_0$ und lässt sich in Gl. 4.21 durch $K_{11} = 1$ und $K_{ij} = 0$ für $j > 1$ berücksichtigen. Des Weiteren lässt sich die NEUMANN Randbedingung $\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}\big|_{x=L} = 0$ durch $g_N = 0$ implementieren. Durch Symmetrisieren des Gleichungssystems ergibt sich somit die endgültige Form

$$\begin{pmatrix} K_{22} & K_{23} & K_{24} \\ K_{32} & K_{33} & K_{34} \\ K_{42} & K_{43} & K_{43} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_2 \\ E_3 \\ E_4 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} K_{21}\,E_0 \\ K_{31}\,E_0 \\ K_{42}\,E_0 \end{pmatrix} = 0, \tag{4.23}$$

die nun numerisch gelöst werden kann. Die Lösung des Gleichungssystems (Gl. 4.23) erfolgt durch auf die jeweilige Aufgabenstellung zugeschnittene Lösungsalgorithmen (*engl.: Solver*). In der hier verwendeten Arbeit wurden im Wesentlichen zwei verschiedene Algorithmen verwendet; ein direkter *Solver* und ein Eigenwert-*Solver*. Ersterer ist dafür geeignet die Feldverteilung einer elektromagnetischen Welle, die mit einer definierten Wellenlänge durch das Rechenmodell propagiert, zu bestimmen. Im Fall resonanter Strukturen, in denen sich für bestimmte Wellenlängen stehende Wellen ausbilden, lässt sich der Eigenwert-*Solver* zur Bestimmung der noch unbekannten Resonanzmoden einsetzen. Bei dieser Eigenmodenanalyse entfällt der Quellterm E_0 in Gl. 4.23 und die zuvor reelle Frequenz des elektromagnetischen Feldes ω (Gl. 4.12) wird durch eine komplexe Eigenfrequenz $\tilde{\omega}$ ersetzt, die es mit Hilfe des Eigenwert-*Solvers* zu bestimmen gilt. Aus den komplexen Eigenwerten lassen sich Informationen zur Wellenlänge und Dämpfung der Moden extrahieren. Der Imaginärteil gibt dabei die Frequenz ω der Mode an, der Realteil deren Abklingverhalten γ. Aus beiden Werten lässt sich die Güte des Resonators (Gl. 8.2) bestimmen:

$$Q = \frac{\mathrm{Im}(\tilde{\omega})}{2\,\mathrm{Re}(\tilde{\omega})} = \frac{\omega}{2\,|\gamma|}. \tag{4.24}$$

Für eine detailliertere Darstellung der FEM-Methode sei auf Ref. [74] verwiesen.

Die Berechnung der in dieser Arbeit vorgestellten Modelle erfolgte durch den Einsatz der kommerziellen Software COMSOL Multiphysics [75]. Diese Software bietet die Möglichkeit, Differentialgleichungen unterschiedlichen Typs zu kombinieren und mit Hilfe der FEM-Methode auf ein und demselben Gitter zu lösen. In diesem Fall wurden das Zusatzmodul „RF-Module“, das auf die Lösung der MAXWELL-Gleichungen ausgelegt ist, und das „Structural Mechanics Module“, das für die Behandlung mechanischer Probleme ausgelegt ist, genutzt. Da in den Simulationen häufig verschiedene Parameter variiert werden mussten, erfolgten Modellerstellung, -berechnung und -auswertung oftmals skriptgesteuert unter Zuhilfenahme des Softwarepaketes MATLAB [76].

[7] Im allgemeinen Fall mit $N-1$ Gittersegmenten gilt $g^e = 0$ für $e \neq 1, N$.

5 Einfluss von Verspannungen auf Frequenzverdopplungseffekte in unstrukturierten Siliziumproben

In diesem Kapitel werden die Untersuchungen zum Einfluss von in Silizium erzeugten Verspannungen auf die nichtlineare Suszeptibilität zweiter Ordnung ($\chi^{(2)}$) mit Hilfe von Reflexionsmessungen beschrieben. Wie bereits in Abschn. 2.2 erwähnt wurde, besitzt Silizium auf Grund seiner Symmetrieeigenschaften keine dipolare Suszeptibilität zweiter Ordnung im Volumenmaterial. Durch das Einbringen inhomogener Verspannungen kann die Symmetrie des Materials jedoch gebrochen werden, so dass sich prinzipiell entsprechende nichtlineare optische Eigenschaften induzieren lassen sollten.

Im Folgenden werden zunächst die Eigenschaften der verwendeten Proben zusammengefasst und die Auswahl der bei den Messungen verwendeten Parameter begründet. Anschließend wird anhand der Messungen der Zusammenhang zwischen der Kristallstruktur und den Tensorkomponenten des $\chi^{(2)}$ herausgearbeitet, um ein Verständnis für die Ursache des frequenzverdoppelten Signals zu entwickeln. Davon ausgehend wird dann der Einfluss der Verspannung auf die nichtlineare Suszeptibilität untersucht und abschließend ihr Ursprung diskutiert.
Teile der hier vorgestellten Ergebnisse wurden vom Autor in Ref. [77–80] veröffentlicht.

5.1 Vorbetrachtungen

Bei den untersuchten Proben handelt es sich um Bruchstücke herkömmlicher einkristalliner Siliziumwafer der Firma SILCHEM. Sie weisen eine Dicke von 460 μm auf und besitzen einen hohen spezifischen Widerstand von 10 Ω·cm (B-dotiert), wodurch von Dotieratomen verursachte, unerwünschte Effekte wie die Ausbildung einer Raumladungszone an der Grenzfläche vermieden werden.

Um eine inhomogene Verspannung in die Probenstücke zu induzieren, wurde eine verspannte Siliziumdioxidschicht mittels thermischer Oxidation aufgebracht. Dazu wurde das Verfahren der Feuchtoxidation verwendet, das zu höheren Verspannungen führt. Die Oxidation erfolgte am Max-Planck-Institut für Mikrostrukturphysik mit einem Rohrofen der Firma TEMPRESS. Eine Übersicht über die auf diese Art hergestellten Proben liefert Tabelle 5.1. Die Abhängigkeit der Schichtverspannung von der Prozesstemperatur ist in Abb. 5.1 dargestellt. Es lässt sich erkennen, dass für dickere Schichten mit zunehmender Prozesstemperatur die erzeugte Verspannung abnimmt. Dies entspricht dem Verhalten, wie es nach dem in Abschn. 3.1 beschriebenen Modell des viskosen Flusses zu erwarten ist. Um Proben mit höheren Verspannungen herzustellen, wurden zwei Proben (B7, B9) mit einer lediglich 15 nm dicken Oxidschicht bei Temperaturen von $T \geq 1000$°C hergestellt (Inset Abb. 5.1). Diese Schichten besitzen eine besonders hohe Verspannung von $\sigma \approx -700$ MPa (vgl. Ref. [40]).

Zur Bestimmung der Verspannung in der aufgebrachten Oxidschicht wurde die Waferbiegemethode verwendet. Hierbei wird vor der Vereinzelung der Probenstücke der Biegeradius des Probenwafers vor und nach der Oxidation bestimmt. Entsprechend Abschn. 4.1 lässt sich daraus die Verspannung der Oxidschicht ermitteln. Da bei der Oxidation sowohl auf der Vorder- als auch

Probe	d_{Ox} [nm]	σ_{Ox} [MPa]	T_{Ox} [°C]
B1	110	-419 ± 15	800
B2	216	-416 ± 16	800
B3	129	-333 ± 18	1050
B4	209	-327 ± 8	1050
B5	147	-288 ± 12	1110
B6	222	-315 ± 16	1110
B7	13	-715 ± 69	1100
B8	225	-327 ± 11	1100
B9	11	-617 ± 90	1000
B10	110	-492 ± 15	700

Tabelle 5.1: Zusammenfassung der Parameter der thermisch oxidierten Proben.

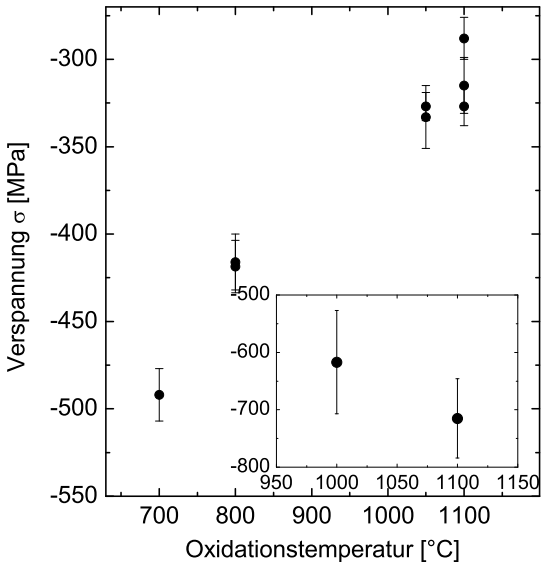


Abbildung 5.1: Durch thermische Oxidation erzeugte Verspannungen in der Oxidschicht in Abhängigkeit von der Prozesstemperatur.

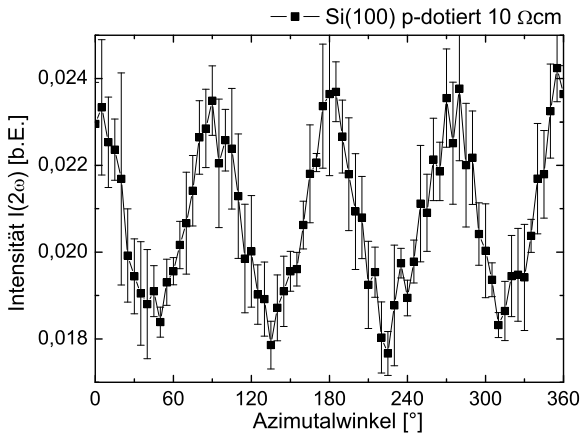
auf der Rückseite der Probe eine Oxidschicht entsteht, wurde vor der Biegungsmessung zunächst die Oxidschicht der Rückseite mit Flusssäure (HF) abgelöst[1]. Die ermittelten Verspannungswerte sind ebenfalls in Tabelle 5.1 zusammengefasst.

Einer der wichtigsten Parameter für das frequenzverdoppelte Signal in Reflexion ist die Orientierung der untersuchten Probenoberfläche. Sie bestimmt wesentlich, wie gut sich der Einfluss der Verspannung auf das frequenzverdoppelte Signal bestimmen lässt. Der Grund dafür ist, dass abhängig von der Orientierung unterschiedlich starke Tensorkomponenten zum Signal beitragen.

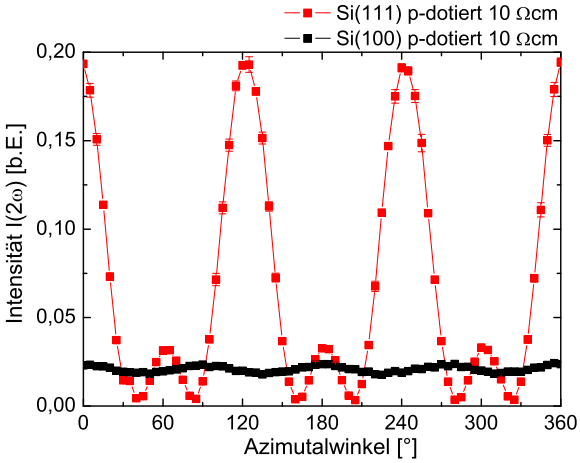
Typischerweise bietet es sich an, Proben mit einer (100)-orientierten Oberfläche zu verwenden. Die entsprechenden Wafer werden am häufigsten verwendet und sind somit am besten verfügbar. In Abb. 5.2 (a) ist das frequenzverdoppelte Signal einer solchen Probe in Abhängigkeit des Drehwinkels um die Oberflächennormale dargestellt. Es weist eine vierfache Rotationssymmetrie auf, die charakteristisch für die (100)-orientierte Oberfläche eines kubisch flächenzentrierten Kristalls ist. Allerdings ist das Signal relativ schwach im Verhältnis zu den Messunsicherheiten, wie die Fehlerbalken belegen. Betrachtet man die in Abschn. 2.2 erläuterten Gl. 2.34 - 2.36, die das frequenzverdoppelte Signal einer solchen Oberfläche beschreiben, offenbart sich ein weiterer Nachteil der (100)-orientierten Probe. Die dipolaren Beiträge zum frequenzverdoppelten Signal ergeben für ein p-polarisierte Signal lediglich einen winkelunabhängigen Beitrag und verschwinden für ein s-polarisiertes Signal gänzlich. Aus Symmetriegründen führt der in die Tiefe gerichtete Verzerrungsgradient ebenfalls zu einer isotropen Veränderung des Signals, was sich schlecht von einem messtechnisch bedingten Offset unterscheiden lässt.

Aus diesem Grund wurden in dieser Arbeit Siliziumproben mit (111)-orientierter Oberfläche untersucht. Hier liefert die Oberfläche in Reflexion ein anisotropes Signal, das bei P-P-Polarisation entsprechend Gl. 2.32 eine dreizählige Rotationssymmetrie aufweist (Abb. 5.2 (b)). Es ist zu bemerken, dass bei der Messung die frequenzverdoppelte *Intensität* gemessen wird, was einer Quadratur des elektrischen Feldes in Gl. 2.32 entspricht. Bei einer rein anisotropen Suszepti-

[1] Andernfalls kompensieren sich die entgegengesetzten Biegespannungen beider Seiten, was eine Biegung des Wafers verhindert.



(a) Frequenzverdoppeltes Signal einer Siliziumprobe mit (100)-orientierter Oberfläche in P-P-Konfiguration. Die vierzählige Symmetrie beruht auf dem Quadrupolbeitrag des Volumens und ist charakteristisch für die Kristallorientierung. Die nichtlineare Suzeptibilität der Oberfläche liefert nur einen isotropen Beitrag (vgl. Gl. 2.35). Die großen Fehlerbalken ergeben sich aus den Intensitätsschwankungen zwischen zwei Messungen.



(b) Vergleich der frequenzverdoppelten Signale einer (100)-orientierten (schwarz) und (111)-orientierten Siliziumprobe. Die Dreizähligkeit des reflektierten p-polarisierten Signals ist charakteristisch für eine (111)-Oberfläche. Der Kontrast zwischen maximaler und minimaler Intensität ist bei der (111)-orientierten Probe wesentlich größer. Das starke Signal sorgt für geringe relative Intensitätsschwankungen zwischen den einzelnen Messungen.

Abbildung 5.2: Vergleich der frequenzverdoppelten Intensitäten von Siliziumproben mit (100)- bzw. (111)-orientierter Oberfläche unter gleichen Messbedinungen.

bilität (analog zur S-S-Polarisation in Gl. 2.30) würde dies eine sechszählige Rotationssymmetrie hervorrufen, da negative Feldbeiträge durch die Quadratur „hochgeklappt“ werden. Hier führt jedoch ein isotroper Offset zu einer gleichmäßigen Verschiebung des elektrischen Feldes, so dass positive und negative Komponenten unterschiedlich große absolute Beiträge liefern. Der Vergleich mit dem entsprechenden Signal einer (100)-orientierten Probe zeigt einen wesentlich stärkeren Kontrast im Signalverlauf. Da das Verhältnis zwischen den großen und kleinen Intensitätsmaxima durch die Tensorkomponenten der nichtlinearen Suszeptibilität bestimmt wird, ist es hier nun möglich, den Einfluss der Verspannung auf verschiedene Komponenten des $\chi^{(2)}$-Tensors zu untersuchen.

Verwendete Messkonfiguration

Die Durchführung der Messungen erfolgte mit dem in Abschn. 4.2 näher beschriebenen Reflexionsaufbau. Ein vereinfachtes Schema der Messmethode ist in Abb. 5.3 dargestellt. Die Anregung

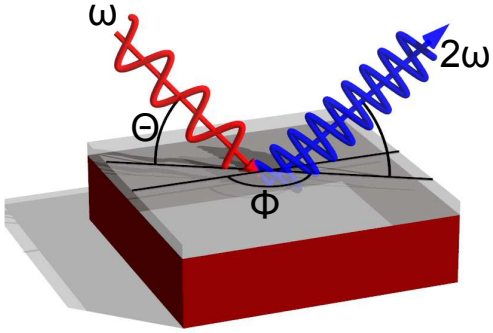


Abbildung 5.3: Schema zur Messung von Frequenzverdopplungseffekten in verspanntem Silizium in Reflexion. Der p-polarisierte Anregungsstrahl mit einer Wellenlänge λ=800 nm trifft unter einem Winkel Θ=45° auf die Probe. Die p-polarisierten Anteile des frequenzverdoppelten Signals (λ=400 nm) werden ebenfalls unter einem Winkel von Θ=45° detektiert. Durch Drehung der Probe um die Oberflächennormale (Φ) lässt sich der Einfluss der Gitterstruktur auf das Signal untersuchen.

erfolgte bei allen Messungen mit einer Wellenlänge von λ=800 nm, wobei der Strahl parallel zur Einfallsebene polarisiert war (P-Polarisation). Der Anregungsstrahl traf in einem Winkel Θ=45° auf die Probenoberfläche. Dementsprechend wurde das frequenzverdoppelte Signal mit einer Wellenlänge von λ=400 nm unter einem Austrittswinkel von Θ=45° detektiert. Dabei wurden ebenfalls die parallel polarisierten Feldanteile untersucht.

Die P-P-Messkonfiguration wurde gewählt, da in diesem Fall die im Silizium angeregten Dipole teilweise in Richtung der Oberflächennormalen oszillieren. Im Fall eines s-polarisierten Anregungsstrahls würde die Anregung der Dipole parallel zur Probenoberfläche erfolgen. Da zu erwarten ist, dass die induzierte Verspannung parallel zur Oberfläche homogen ist und lediglich in Normalenrichtung einen Gradienten aufweist, ist davon auszugehen, dass die P-P-Messkonfiguration sensibler gegenüber diesen Verspannungseinflüssen ist.

5.2 Zusammenhang zwischen Silizium-Kristallstruktur und $\chi^{(2)}$-Tensorkomponenten

Um die Auswirkungen von Verspannungen auf die Tensorstruktur der nichtlinearen Suszeptibilität $\chi^{(2)}$ zu verstehen, ist es erforderlich, zunächst ein Verständnis für den Zusammenhang zwischen den einzelnen Tensorkomponenten und der Gitterstruktur des Silizium zu entwickeln. Einen wesentlichen Beitrag dazu liefert der von van Driel *et al.* [26, 29] entwickelte Ansatz einer phänomenologischen Beschreibung des Frequenzverdopplungseffekts in Abhängigkeit des $\chi^{(2)}$-Tensors (siehe Abschn. 2.2). Dieser liefert eine mathematische Erklärung des Zusammenhangs zwischen dem gemessenen Signal und den Tensorkomponenten des Materials. Allerdings fehlt eine anschauliche Verknüpfung des Tensors mit den Bindungsverhältnissen im Kristall. Deshalb soll hier nun in Anlehnung an das *„Simplified bond-hyperpolarizability model“* (SBHM) [81] zunächst ein Zusammenhang zwischen der Winkelverteilung des gemessenen frequenzverdoppelten Signals und der Gitterstruktur hergestellt werden. Daraus lassen sich dann auch Rückschlüsse auf die Abhängigkeiten zwischen der Ladungsverteilung und den $\chi^{(2)}$-Komponenten ziehen.

Um die Orientierung der kovalenten Bindungen innerhalb der Siliziumprobe zu bestimmen, wurde diese mit Hilfe der Röntgendiffraktometrie untersucht (siehe Abschn. 4.1). Auf diese Weise kann die Ausrichtung der drei rückwärtsgerichteten Bindungen (*engl.: back bonds*) der tetraedrischen (111)-Einheitszelle bestimmt werden. Da die senkrecht zu den Bindungen stehenden $<1\bar{1}\bar{1}>$, $<\bar{1}1\bar{1}>$ bzw. $<\bar{1}\bar{1}1>$ Ebenen nicht in Reflexion angeregt werden können, wurden stattdessen die Reflexe der <224>, <242> und <422> Ebenen bestimmt (siehe Abb. 5.4). Dazu wurde der Röntgenstrahl unter einem Winkel von $\omega = 65,905°$ auf die Probe gelenkt und der

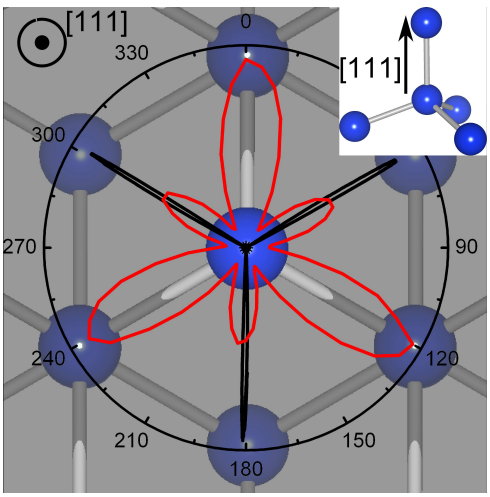
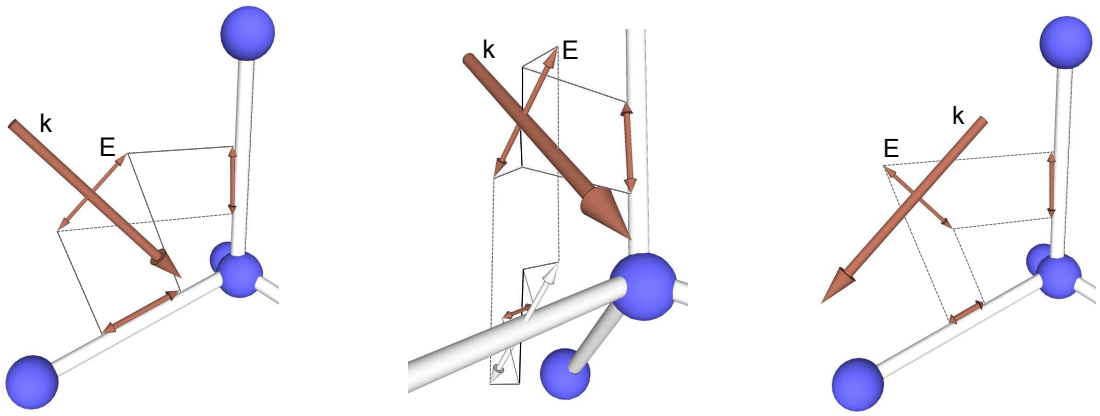


Abbildung 5.4: Überlagerung der Röntgenessungen (schwarz) sowie des frequenzverdoppelten Signals (rot) mit der Diamant-Kristallstruktur der (111)-orientierten Siliziumoberfläche. Der Röntgenstrahl, der unter einem Winkel $\omega = 65,905°$ auf die Probe trifft, erzeugt Reflexe an (224) Netzebenen und eignet sich somit zur Bestimmung der Probenorientierung. Damit lassen sich als Ursache der Intensitätsmaxima die drei schräg nach unten gerichteten Siliziumbindungen (Inset) zuordnen.



(a) $\varphi = 0°$ **(b)** $\varphi = 90°$ **(c)** $\varphi = 180°$

Abbildung 5.5: Anregungseffizienz der Bindungsdipole in Abhängigkeit des Azimutalwinkels φ (vgl. Abb. 5.4) zwischen dem Anregungsstrahl und den Bindungen im Siliziumkristall. Im Fall $\varphi = 0°$ trifft der Anregungsstrahl steil auf die rückwärtsgerichten Bindungen. Dadurch schwingt das elektrische Feld nahezu parallel zu den Bindungen, wodurch die Anregungseffizienz maximiert wird (a). Bei $\varphi = 90°$ ist die Anregungseffizienz minimal, da das elektrische Feld nahezu senkrecht zu den rückwärtigen Bindungen schwingt (b). Für $\varphi = 180°$ erhöht sich die Effizienz wieder, da das E-Feld wieder in einer Ebene mit der Bindung schwingt (c).

Bragg-reflektierte Strahl bei einem Winkel von $\alpha_a = 22,115°$ detektiert. Durch Rotation der Probe um die Oberflächennormale wurden die einzelnen Ebenen in den Strahlengang gedreht und die Position der Reflexe detektiert. Aus der Kenntnis der entsprechenden Winkelpositionen wurden dann die Richtungen der um 45° zu den <224> Ebenen gedrehten Bindungen bestimmt.

Im Anschluss wurde das frequenzverdoppelte Signal in Abhängigkeit des Azimutalwinkels aufgenommen und mit den aus der Röntgenmessung gewonnen Daten überlagert. Ein Vergleich mit der Gitterstruktur (siehe Abb. 5.4) zeigt eine Korrelation der Maxima des frequenzverdoppelten Signals mit den rückwärtsgerichteten Bindungen des Kristalls. Die großen Intensitätsmaxima treten dabei auf, wenn der einfallende Strahl in einer Ebene mit den Bindungen liegt und diese unter einem steilen Winkel trifft. In diesem Fall schwingt das p-polarisierte elektrische Feld in etwa parallel zur Bindung (siehe Abb. 5.5 (a)).

Zusätzlich wird auch die senkrecht zur (111)-Oberfläche stehende Bindung angeregt. Auf Grund der Rotationssymmetrie dieser Bindung ist die Effizienz dieser Anregung aber winkelunabhängig. Sie liefert lediglich einen isotropen Beitrag zum frequenzverdoppelten Signal, der wiederum ein Offset des erzeugten Gesamtfeldes hervorruft. Somit besteht das detektierte winkelabhängige Signal aus einer kohärenten Überlagerung des im Wesentlichen anisotropen Beitrags der rückwärtsgerichteten Bindungen, verstärkt durch den isotropen Beitrag der aufwärts gerichteten Bindung.

Im Fall der kleinen Intensitätsmaxima liegt der einfallende Strahl ebenfalls in einer Ebene mit den Bindungen. Allerdings ist nun der Winkel zwischen der rückwärts gerichteten Bindung und dem elektrischen Feld größer, so dass die Anregung der Bindungsdipole weniger effizient erfolgt (siehe Abb. 5.5 (c)). Es ist zu beachten, dass das unter diesem Einfallswinkel von den rückwärtsgerichteten Bindungen erzeugte Feld eine negative Amplitude relativ zum isotropen Feld aufweist [82]. Die Gesamtintensität wird daher auch dadurch kleiner, dass der isotrope und der anisotrope Beitrag sich unter diesem Winkel teilweise kompensieren.

Für den Fall, dass der einfallende Strahl quer zu einer der rückwärtigen Bindungen auftrifft, ist die Anregungseffizienz minimal, da das elektrische Feld nahezu orthogonal zu den Bindungen schwingt (siehe Abb. 5.5 (b)). Der Umstand, dass die rückwärtigen Bindungen um einen Win-

	$E(2\omega)$	$E(\omega)_1$	$E(\omega)_2$
d_{11}	⟷	⟷	⟷
d_{31}	↕	⟷	⟷
d_{15}	⟷ ⟷	⟷ ↕	↕ ⟷
d_{33}	↕	↕	↕

Tabelle 5.2: Übersicht über die $\chi^{(2)}$-Komponenten in KLEINMAN-Notation sowie die Schwingungsrichtung der beteiligten Felder bezüglich der (111)-orientierten Oberfläche.

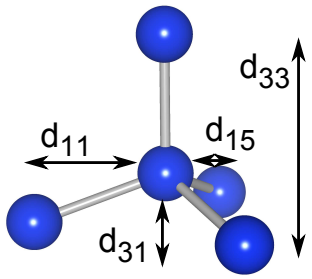


Abbildung 5.6: Verknüpfung der $\chi^{(2)}$-Komponenten mit den Bindungen des Siliziumkristalls. Die Pfeile zeigen die Schwingungsrichtung des jeweiligen Polarisationsanteils an.

kel von 19,47° zur Oberfläche verkippt sind, sorgt jedoch für eine relativ schwache Anregung derselben.

Die Korrelation des frequenzverdoppelten Signals mit den kovalenten Bindungen des Siliziumgitters zeigt, dass die nichtlinearen Eigenschaften zweiter Ordnung durch die Oszillationen der Bindungselektronen zwischen den Atomen bestimmt werden. Dies belegt experimentell die für die Entwicklung des SBH-Modells aus Symmetriebetrachtungen abgeleitete Annahme [81]. In diesem Modell werden den einzelnen Bindungen in der Silizium-Einheitszelle nichtlineare Hyperpolarisierbarkeiten zugewiesen und daraus Formeln zur Beschreibung des beobachtbaren Signals abgeleitet.

Die im hier verwendeten phänomenologischen Modell nach van Driel *et al.* [26] auftretenden Tensorkomponenten hingegen sind bezüglich der Schwingungsrichtungen der interagierenden elektrischen Felder definiert. Dennoch lassen sich diese Komponenten bestimmten Bindungen zuordnen, was eine spätere Interpretation des Verspannungseinflusses erleichtert. Die für den Fall eines p-p-polarisierten Signals zu betrachtenden Tensorkomponenten sind in Tabelle 5.2 zusammengefasst. Sie alle treten in Gl. 2.32 auf, die hier in vereinfachter Form wiedergegeben wird:

$$I(2\omega) \propto \left(a(d_{31}, d_{15}, d_{33}) + c(d_{11}) \cos 3\,\varphi\right)^2 I_0^2 \ . \tag{5.1}$$

Tabelle 5.2 veranschaulicht die Bedeutung der jeweiligen Indizes bezüglich der Schwingungsrichtungen der wechselwirkenden Felder. Mit Hilfe der obigen Überlegungen lassen sich die einzelnen Tensorkomponenten den verschiedenen Bindungen der Einheitszelle zuweisen, was in Abb. 5.6 grafisch dargestellt wird.

Am einfachsten gestaltet sich die Zuordnung von d_{11}. Dieses Element ist mit den horizontalen Schwingungsanteilen der rückwärts gerichteten Bindungen verbunden, da alle beteiligten Feldanteile parallel zur Probenoberfläche schwingen. Der Einfluss der aufwärts gerichteten Bindung wird vollständig durch das Element d_{33} beschrieben, da es nur durch vertikale Feldkomponenten angeregt werden kann und auch nur solche emittieren kann. Es ist zu berücksichtigen, dass d_{33} auch Einflüsse der rückwärtigen Bindungen enthält, da durch deren Verkippung relativ zur Oberfläche dort auch vertikale Schwingungsanteile angeregt werden können. Es ist jedoch zu erwarten, dass dieser Beitrag klein im Verhältnis zum Beitrag der Aufwärtsbindung ist. Neben dem d_{33}-Element liefert d_{31} einen weiteren isotropen Beitrag zum frequenzverdoppelten Signal. Da die Anregung hier durch parallel zur Oberfläche schwingende Felder erfolgt, können nur die rückwärts gerichteten Bindungen mit dieser Komponente verknüpft werden. Die Tensorkomponente d_{15} wird ebenfalls durch die rückwärts gerichteten Bindungen beschrieben. Der Grund ist wie bei

d_{11} die Tatsache, dass nur die rückwärtigen Bindungen ein parallel zu Oberfläche schwingendes Feld emittieren können.

5.3 Einfluss der Verspannung auf die nichtlineare Suszeptibilität

Um nun den Einfluss der Verspannung auf die Nichtlinearität der Probe nachzuweisen, wurde das frequenzverdoppelte Signal der mittels thermischem Oxid verspannten Proben untersucht, wobei die in Abschn. 5.1 beschriebene Messkonfiguration verwendet wurde. Aus den so gewonnenen winkelabhängigen Messungen wurden die nichtlineare Koeffizienten a und c aus Gl. 5.1 bestimmt. Dies erfolgte durch einen nichtlinearen Fit von Gl. 5.1 an die Messdaten, wie in Abb. 5.7 exemplarisch dargestellt. Die Implementierung des Anpassungsmodells erfolgte mit Hilfe der Soft-

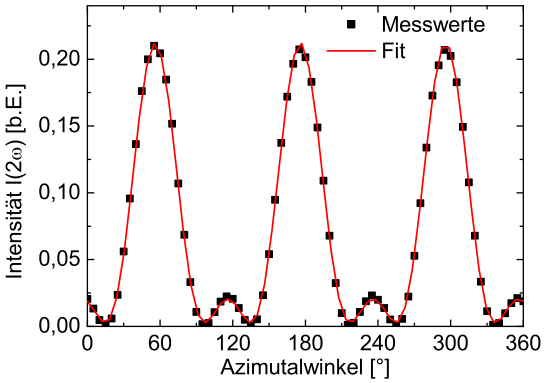
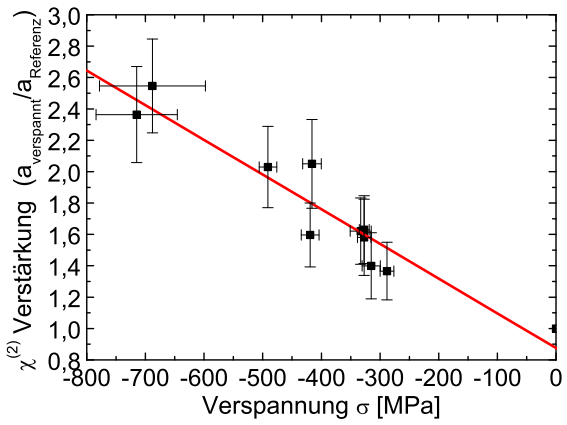


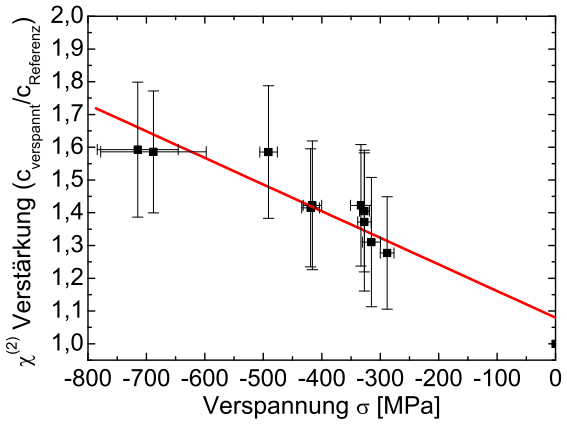
Abbildung 5.7: Bestimmung der nichtlinearen Koeffizienten a und c. Dazu wurde Gl. 5.1 mittels des Levenberg-Marquardt-Algorithmus an die gemessenen Daten angepasst. Die Unsicherheit in der Bestimmung der Koeffizienten ist kleiner als 1%.

ware OriginPro 7.5 (OriginLab) unter Verwendung eines Levenberg-Marquardt-Algorithmus. Damit konnte der Anpassungsfehler für die nichtlinearen Koeffizienten in der Regel nach zehn Iterationen auf unter 1% gesenkt werden. Um den Einfluss der Verspannung auf die nichtlinearen Koeffizienten zu ermitteln, wurden diese ins Verhältnis zu denen gesetzt, die an einer lediglich mit nativem Oxid bedeckten unverspannten Probe bestimmt wurden.

Abbildung 5.8 zeigt die relative Verstärkung der nichtlinearen Koeffizienten a und c in Abhängigkeit von der Verspannung der Oxidschicht. Letztere kann als Maß für die Verspannung im



(a) Isotroper Beitrag zur nichtlinearen Suszeptibilität



(b) Anisotroper Beitrag zur nichtlinearen Suszeptibilität

Abbildung 5.8: Verstärkung der nichtlinearen Suszeptibilität bezüglich der Komponenten a und c (Gl. 5.1) in Abhängigkeit der aufgebrachten Verspannung. Der Fit (rote Linie) zeigt eine lineare Abhängigkeit in Übereinstimmung mit dem sp^3-Orbital Modell [35]. Der Einfluss der Verspannung auf den isotropen Koeffizienten ist offensichtlich stärker als der auf den anisotropen Koeffizienten.

Silizium angesehen werden, da beide linear miteinander verknüpft sind. Die eingezeichneten Fehlerbalken wurden einzeln für jeden Datenpunkt bestimmt. Sie werden im Anhang A.3 detailliert diskutiert. Die wesentlichen Ursachen für den Fehler der $\chi^{(2)}$-Verstärkung sind Inhomogenitäten im Probenmaterial und Schwankungen im Messsignal. Da diese Fehlerquellen sowohl für die verspannte als auch für die Referenzprobe auftreten, erhöht sich der entsprechende Gesamtfehler für die nichtlinearen Koeffizienten.

Aus der Verteilung der Datenpunkte lässt sich in beiden Fällen ein proportionaler Zusammenhang erkennen, wobei der isotrope Koeffizient a stärker von der Verspannung beeinflusst wird als der anisotrope Koeffizient c. Für eine Verspannung von Null besitzt die gefittete Gerade einen Wert von nahezu eins, was bedeutet, dass in diesem Fall keine Verstärkung der Nichtlinearität auftritt. Dies zeigt, dass die amorphe Oxidschicht selbst keine Nichtlinearität zweiter Ordnung aufweist, was ansonsten zu einem linearen Versatz der Geraden geführt hätte.

Ursprung der Verspannung

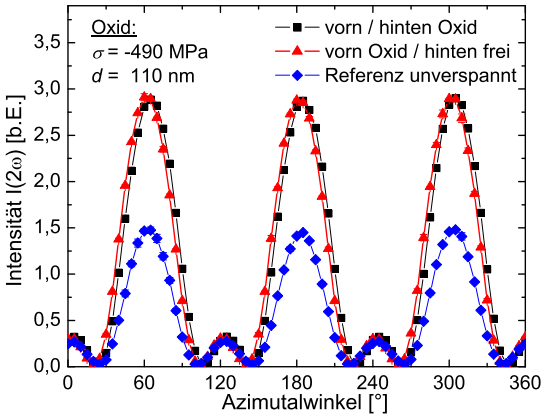


Abbildung 5.9: Vergleich des frequenzverdoppelten Signals einer unbeschichteten Referenzprobe, einer beidseitig und einer einseitig oxidierten Probe. Letztere Probe weist eine Verbiegung auf. Die beidseitig beschichtete Probe ist unverbogen, da sich die Biegemomente auf Vorder- und Rückseite kompensieren. Da das Signal dieser Probe nicht im Bereich der Referenz liegt, sondern auf Höhe der verspannten Probe, kann eine durch die Verbiegung erzeugte Verspannung als Ursache für die Signalerhöhung ausgeschlossen werden.

Als Ursprung der Verspannung lässt sich intuitiv die mittels der Waferbiegemethode messbare Verbiegung des Siliziumwafers ausmachen, die zu den in Abb. 4.1 (Abschn. 4.1) dargestellten Verspannungen führt. Diese führen zu einem linearen Verspannungsgradienten über die gesamte Dicke des Substrats. Berechnet man jedoch die Verspannung, die sich im Silizium nahe der Si-SiO_2 Grenzfläche (Annahme: $\sigma_{\mathrm{Oxid}} = -300$ MPa) ausbildet, so ergeben sich nur marginale Verspannungswerte sowohl für die Biegung ($\sigma_{\mathrm{B}} = 0{,}005$ MPa) als auch für die reine Dehnung ($\sigma_{\mathrm{D}} = 0{,}06$ MPa). Der resultierende Verspannungsgradient sollte damit zu klein sein, um ein signifikantes $\chi^{(2)}$ zu induzieren.

Diese Vermutung wurde überprüft, indem drei verschiedene Proben verglichen wurden. Eine unverspannte Referenzprobe, eine verspannte Probe mit einer 110 nm dicken Oxidschicht ($\sigma_{\mathrm{Oxid}} = -490$ MPa) auf der Probenoberseite und eine Probe mit identisch starken und dicken Oxidschichten auf Vorder- und Rückseite. Die letztere Probe weist dabei keine Verbiegung auf, da sich die erzeugten Biegemomente kompensieren. Abbildung 5.9 zeigt die winkelabhängigen Intensitäten des frequenzverdoppelten Signals. Wie zu erkennen ist, liegt das Signal der biegungskompensierten Probe nicht auf Höhe des Signals der Referenzprobe, sondern entspricht in seiner Intensität dem der verbogenen Probe. Dies belegt die Vermutung, dass die durch die Waferbiegung induzierte Verspannung nicht die Ursache für das verstärkte Signal ist.

Eine erste Untersuchung der Silizium-Oxid-Grenzfläche hinsichtlich möglicher Verspannungen im Silizium erfolgte 1989 durch Fitch *et al.* [83]. Mit Hilfe der Photoreflexionsspektroskopie (*engl.: photoreflectance spectroscopy*) konnten sie eine hydrostatische Verzerrung im Silizium identifizieren, die bis zu einer Tiefe von ca. 10 nm auftritt. Eine Bestätigung der Messungen erfolgte durch Nguyen *et al.* [84], mittels hochaufgelöster spektraler Ellipsometrie (*engl.: high*

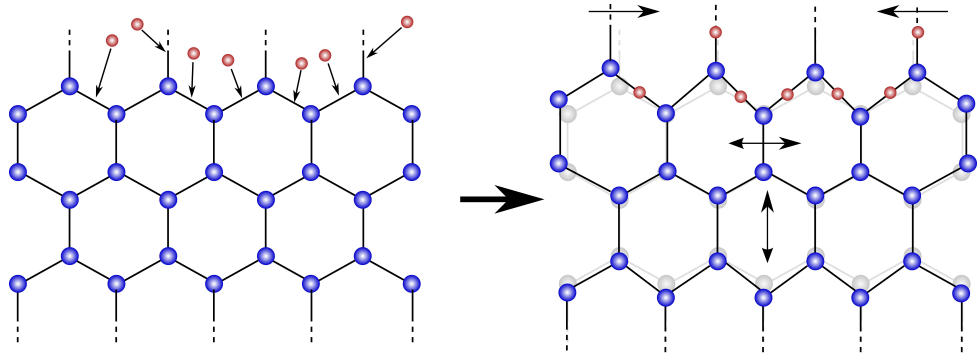


Abbildung 5.10: Schematische Darstellung der Ausbildung einer verspannten Siliziumschicht durch thermische Oxidation. Durch den Einbau der Sauerstoffatome (rot) zwischen den Siliziumatomen (blau) kommt es zu einer Volumenzunahme im entstandenen Oxid und somit zu einer kompressiven Verspannung. Dies führt auch zu einer lokalen Verzerrung des darunter liegenden Siliziumgitters, dass auf Grund des Auseinanderziehens der Bindungen parallel und senkrecht zur Grenzfläche unter Zugspannung steht [83, 86].

accuracy spectroscopic ellipsometry). Dabei stellten sie fest, dass der verspannte Bereich trotz der Verspannug seine strukturellen Eigenschaften beibehält. Bezüglich der Art und Stärke der Verspannung gleichen die Aussagen denen von Fitch *et al.* mit dem Unterschied, dass hier lediglich eine Eindringtiefe von ca. 2 nm ermittelt wurde. Einen weiteren Hinweis auf eine verspannte Siliziumschicht nahe der Si/SiO_2-Grenzfläche liefern Ionenstreuexperimente (*engl.: medium energy ion scattering spectroscopy*) in Ref. [85].

In neueren Untersuchungen wurden bevorzugt Röntgenmethoden in Kombination mit entsprechenden Streumodellen verwendet um die Si-SiO_2-Grenzschicht zu untersuchen. So beobachten Hasegawa *et al.* [87] mit Hilfe von Grazing-Incidence Messungen Änderungen der Abstände der 311-Netzebenen von 0,1% in einem Tiefenbereich von bis zu 30 nm. Auch Emoto *et al.* [88] beobachten diese Verschiebung an polykristallinem Silizium, das mittels asymmetrischer Röntgenbeugung untersucht wurde. Daraus schließen sie auf einen exponentiell abfallenden Verspannungsgradienten in einer Schichtdicke von 10 nm. Bei dem verspannten Bereich, der ursächlich ist für die verspannungsinduzierten Frequenzverdopplungseffekte, handelt es sich also um eine dünne verzerrte Schicht, die für eine Anpassung des Siliziumgitters an das vergrößerte molare Volumen des thermischen Oxids sorgt. Frequenzverdopplungsexperimente von Daum *et al.* [89] unterstützen diese Interpretation. Abbildung 5.10 zeigt schematisch die Entstehung einer solchen Schicht, in Anlehnung an ein Modell von Yashiro *et al.* [86, 90]. Die kompressive Verspannung im Oxid sorgt dabei für eine Zugspannung sowohl parallel, als auch senkrecht zur Grenzfläche.

Diskussion

Die in Abb. 5.8 festgestellte Proportionalität zwischen der induzierten Verspannung und der Verstärkung der Nichtlinearität bestätigt erstmalig experimentell die Vorhersage eines analytischen Modells von Govorkov *et al.* [35, 91], welches 1989 entwickelt wurde und dessen Aussagen bisher nur durch einen ähnlichen theoretischen Ansatz von Huang [92] gestützt werden konnten. In dem sp^3-Orbital Modell für diamantartige Kristallstrukturen wird die nichtlineare Suszeptibilität $\chi^{(2)}$ mit Hilfe eines Hamiltonoperators berechnet, der die Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Atomorbitalen der Siliziumatome berücksichtigt. Mit Hilfe eines angepassten Terms für die Elektron-Phonon-Wechselwirkung lässt sich der Einfluss einer eingebrachten Verspannung be-

rechnen. Dazu wurde angenommen, dass das aufgebrachte Oxid eine biaxiale Verspannung induziert, die im Silizium exponentiell mit dem Abstand zur Silizium-Oxid Grenzfläche abnimmt:

$$\sigma(z) = \sigma_0 \exp(-z/d), \tag{5.2}$$

wobei σ_0 die Verspannung an der Grenzfläche zum Oxid ist und d eine charakteristische Abklingtiefe der Verspannung, die in der Größenordnung von 10 nm liegt [88]. Für die verspannungsinduzierte Nichtlinearität ergibt sich in Übereinstimmung mit den vorliegenden Daten der lineare Zusammenhang:

$$\chi^{(2)}_{\mathrm{def}} \propto \frac{\sigma_0}{d}. \tag{5.3}$$

Die experimentell gewonnen Erkenntnisse werden indirekt ebenfalls durch Messungen in Ref. [92] gestützt. Dort wurden die nichtlinearen Koeffizienten einer (111) orientierten Siliziumprobe in Abhängigkeit von der Dicke der aufgebrachten Oxidschicht untersucht. Dabei wurde für die untersuchten Dicken im Bereich von $0-20$ nm ein exponentieller Zusammenhang festgestellt. Wie bereits in Abschn. 3.1 besprochen, ist die Verspannung in dünnen Siliziumdioxidschichten abhängig von der jeweiligen Dicke. Diesbezüglich wurde für die zuvor erwähnten Schichtdicken ebenfalls ein exponentieller Zusammenhang zwischen der Verspannung und der Oxiddicke festgestellt [93]. Die Dickenabhängigkeit der nichtlinearen Koeffizienten in Ref. [92] lässt sich damit als Verspannungsabhängigkeit derselben interpretieren, wobei ein linearer Zusammenhang zwischen eingebrachter Verspannung und den nichtlinearen Koeffizienten besteht, wie es auch hier festgestellt wurde.

Der Umstand, dass der Verspannungseinfluss zu einer stärkeren Erhöhung des isotropen Koeffizienten a im Vergleich zum anisotropen Koeffizienten c führt, kann mit Hilfe des in Abschn. 5.2 entwickelten Anschauungsmodell der $\chi^{(2)}$-Tensorkomponenten erklärt werden. So lassen sich die in a enthaltenden Komponenten d_{31} und d_{33} mit Dipolschwingungen parallel zur Oberflächennormalen in Verbindung bringen, wohingegen die in c enthaltene Komponente d_{11} mit parallel zur Oberfläche schwingenden Dipolen verknüpft werden kann. Betrachtet man nun die Verspannungsverteilung im Silizium, so ist aus den Biegungsmessungen bekannt, dass die eingebrachten Verspannungen biaxial und somit parallel zur Oberfläche homogen verteilt sind. Nach Gl. 5.2 ist außerdem davon auszugehen, dass die Verspannung exponentiell mit zunehmendem Abstand zur Si-SiO_2-Grenzfläche abnimmt. Da das verspannungsinduzierte $\chi^{(2)}$ vom Gradienten der Verspannung abhängt, ist es verständlich, dass die entlang des Gradienten schwingenden Dipole stärker von selbigem beeinflusst werden als die in einem homogen verzerrten Potential schwingenden.

Mögliche Verfälschungen des frequenzverdoppelten Signals

Abschließend sollen zwei mögliche Einflüsse diskutiert werden, die zu einer Verfälschung der ermittelten SHG Verstärkung führen könnten. Der eine betrifft den sogenannten EFISH-Effekt (siehe Abschn. 2.2) bei dem es zur Ausbildung einer Raumladungszone an der Si-SiO_2-Grenzfläche kommt. In dieser können sich, bedingt durch das eingestrahlte Licht, starke statische Felder ausbilden die dazu führen, dass ein Pseudo-$\chi^{(2)}$-Effekt auftritt. Dieser basiert auf der nichtlinearen Suszeptibilität dritter Ordnung $\chi^{(3)}$ in Kombination mit dem statischen Feld und kann als verspannungsinduzierter Effekt fehlinterpretiert werden. Allerdings lässt sich der EFISH-Effekt leicht mit einer zeitabhängigen Messung des frequenzverdoppelten Signals nachweisen [27]. Da sich das statische Feld in der Raumladungszone relativ langsam ausbildet, lässt sich dies an einem zeitabhängigen Anstieg des gemessenen Signals ablesen. Ein solcher Effekt wurde jedoch nicht an den untersuchten Proben festgestellt[2]. Ein weiterer Grund, der gegen das Auftreten eines solchen Effekts spricht ist die niedrige Dotierkonzentration des verwendeten Siliziums

[2]Im Gegensatz dazu wurde bei ersten Untersuchungen an stärker dotierten Proben eine zeitabhängige Intensitätserhöhung wie in Ref. [27] beschrieben beobachtet.

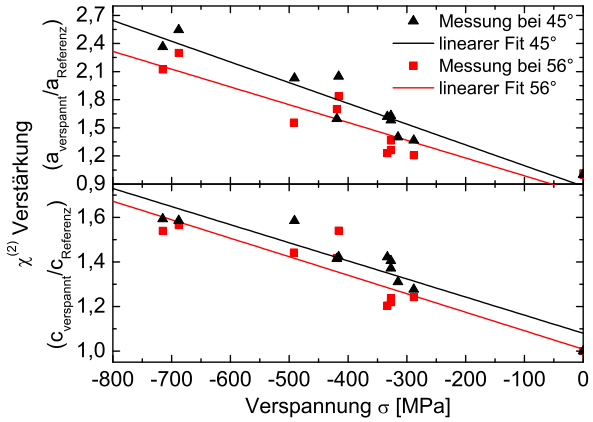


Abbildung 5.11: Verspannungsabhängigkeit der nichtlinearen Koeffizienten a und c gemessen unter dem Brewsterwinkel ($\Theta = 56°$) im Vergleich zur Messung bei $\Theta = 45°$. Bei Anregung unter dem Brewsterwinkel sind Mehrfachreflexionen in der Siliziumdioxidschicht prinzipiell ausgeschlossen. Beide Messungen zeigen die gleiche lineare Abhängigkeit wie zuvor beobachtet.

($N_D \approx 1,5 \cdot 10^{15}\mathrm{cm}^3$). Der EFISH-Effekt ist in der Regel erst bei deutlich höheren Konzentrationen zu beobachten [28].

Eine weitere Möglichkeit der Verfälschung des frequenzverdoppelten Signals ist der in Ref. [94, 95] erwähnte Einfluss von Mehrfachreflexionen. Dieser führt zu einer oxiddickenabhängigen Veränderung des frequenzverdoppelten Signals. Die Ursache ist, dass das von der Siliziumoberfläche reflektierte Licht je nach Wellenlänge, Einstrahlwinkel und Oxiddicke mehrfach in der Oxidschicht reflektiert werden kann wodurch zusätzliche frequenzverdoppelte Feldanteile erzeugt werden. Dieser Effekt scheint hier jedoch keinen nennenswerten Einfluss zu haben. So ist die Verstärkung des frequenzverdoppelten Signals gleichartig verspannter Proben mit unterschiedlicher Oxiddicke im Rahmen der Messgenauigkeit von dieser unabhängig. Auch zeigt sich in Abb. 5.8, dass die Messwerte aller Proben trotz unterschiedlicher Schichtdicke auf einer Geraden liegen. Um den Einfluss von Mehrfachreflexionen explizit auszuschließen, wurde für einige Proben mit unterschiedlicher Oxiddicke der Verspannungseinfluss auf die nichtlinearen Koeffizienten in einer Messung unter dem Brewsterwinkel ($\Theta = 56°$) bestimmt. Beim Einstrahlen unter dem Brewsterwinkel trifft das am Silizium reflektierte p-polarisierte Licht ebenfalls unter dem Brewsterwinkel auf die Grenzfläche von SiO_2 und Luft. Da es dort nun nicht mehr reflektiert werden kann, tritt auch keine Mehrfachreflexion mehr auf und eine entsprechender Einfluss der Schichtdicke kann ausgeschlossen werden. Abbildung 5.11 zeigt, dass sich für beide nichtlineare Koeffizienten kein wesentlicher Unterschied ergibt und die lineare Abhängigkeit von der Verspannung weiterhin beobachtbar ist.

Es ist anzumerken, dass in Ref. [94, 95] lediglich für den Fall eines s-s- sowie s-p-polarisierten Signals eine Übereinstimmung mit dem Modell der Mehrfachreflexion gefunden werden konnte, nicht für den hier untersuchten Fall eines p-p-polarisierten Signals. Da in keiner anderen Publikation, in der dielektrisch beschichtete Siliziumproben untersucht wurden eine Schichtdickenabhängigkeit beobachtet wurde, ist zu vermuten, dass es sich hierbei um einen Effekt handelt, der nur unter bestimmten Bedingungen auftritt, die hier nicht erfüllt sind.

Abschlussbetrachtungen

Die in diesem Kapitel vorgestellten Untersuchungen demonstrieren, wie mit Hilfe von Verspannungen die nichtlinearen optischen Eigenschaften zweiter Ordnung in Silizium verstärkt werden können. Dabei wurde durch die Ergebnisse erstmalig ein experimenteller Zusammenhang zwischen der nichtlinearen Suszeptibilität $\chi^{(2)}$ und der eingebrachten Verspannung hergestellt, wodurch die theoretischen Vorhersagen von Govorkov *et al.* [35] und Huang [92] bestätigt werden konnten. Neben dem qualitativen Vergleich mit der Literatur soll zum Schluss die experimentell bestimmte Verstärkung der nichtlinearen Koeffizienten quantitativ mit Werten aus anderen Untersuchungen verglichen werden. Die entsprechenden Daten sind in Tabelle 5.3 zusammengefasst. Es zeigt sich, dass die experimentell ermittelte Verstärkung in der gleichen Größenordnung

Tabelle 5.3: Vergleich von aus der Literatur extrahierten Werten für die verspannungsinduzierte Verstärkung der $\chi^{(2)}$-Tensorkomponenten

Phänomenologische Formel	Orientierung	Verspannung [GPa]	Verstärkung Suszeptibilität	$\chi^{(2)}_{\mathrm{rel}}/\sigma_0$ [1/GPa]	Ref.
$I_{\mathrm{ps}} = \lvert a_{\mathrm{ps}} + c_{\mathrm{ps}} \cos 3\phi\rvert^2 I_0^2$	(111)	-1.7	$c^{\mathrm{rel}}_{\mathrm{ps}}(d_{11}) = 2.34$	-0.79	[92]
$I_{\mathrm{ss}} = \lvert b_{\mathrm{ss}} \sin 3\phi\rvert^2 I_0^2$			$b^{\mathrm{rel}}_{\mathrm{ss}}(d_{11}) = 2.5$	-0.88	
$I_{\mathrm{sp}} = \lvert a_{\mathrm{sp}} \sin 4\phi\rvert^2 I_0^2$	(100)	-	$a^{\mathrm{rel}}_{\mathrm{sp}}(d_{11}) = 1.9$	-	[96]
$I_{\mathrm{pp}} = \lvert a_{\mathrm{pp}} + c_{\mathrm{pp}} \cos 3\phi\rvert^2 I_0^2$	(111)	-0.69	$a^{\mathrm{rel}}_{\mathrm{pp}}(d_{31}, d_{15}, d_{33}) = 2.55$	-2.21	diese
			$c^{\mathrm{rel}}_{\mathrm{pp}}(d_{11}) = 1.6$	-0.81	Arbeit

liegt wie die aus der Literatur ermittelten Werte, obwohl diese unter anderen Messbedingungen bestimmt wurden. Ein geeigneteres Vergleichskriterium ist jedoch das Verhältnis der $\chi^{(2)}$-Verstärkung zur entsprechenden Verspannung. Dieses zeigt eine hohe Übereinstimmung für die Fälle, in denen die nichtlinearen Koeffizienten von d_{11} abhängen.

Als Ursprung des verstärkten Signals konnte eine dünne verspannte Siliziumschicht mit einer Dicke von ca. 5 nm identifiziert werden. Die Eindringtiefe der Verspannung ist somit stark limitiert, was daran liegt, dass die dünne Oxidschicht auf Grund des dicken Substrats nicht relaxieren und somit nur lokal Verzerrungen im Siliziumgitter nahe der Grenzfläche hervorrufen kann. Eine Möglichkeit, den verspannten Bereich zu vergrößern, besteht darin, die Probenoberfläche gitterförmig zu strukturieren. Dadurch kann die Oxidschicht teilweise in die freien Bereiche relaxieren, was zu großräumigeren Verzerrungen im Silizium führt. Das im Vergleich zur planaren Probe stark vergrößerte Verspannungsvolumen könnte dann wesentlich größere Beiträge zum frequenzverdoppelten Signal liefern. Dies soll nun im folgenden Kapitel näher untersucht werden.

6 Frequenzverdopplungseffekte in Silizium-Gitterstrukturen

Im Gegensatz zum vorherigen Kapitel, in dem das von einer sehr dünnen verspannten Siliziumschicht erzeugte frequenzverdoppelte Signal untersucht wurde, soll in diesem Kapitel der Einfluss eines größeren verspannten Bereichs bestimmt werden. Dazu wurden die oxidierten Siliziumproben großflächig mit einem gleichmäßigen Gittermuster strukturiert. Dadurch kann das Material besser relaxieren und die zuvor im Oxid konzentrierte Verspannung ins Silizium eindringen (Abb. 6.1).

Im Folgenden wird zunächst die Herstellung der untersuchten Gitterproben beschrieben. Im Anschluss werden die ins Silizium induzierten Verspannungen mittels hochaufgelöster Röntgenbeugung (Abschn. 4.1) charakterisiert. Danach werden die nichtlinearen optischen Eigenschaften der Gitterstrukturen mittels Frequenzverdopplungsmessungen analog zu Kapitel 5 analysiert. In der anknüpfenden Diskussion werden die Ergebnisse der nichtlinearen Messungen mit Hilfe eines einfachen phänomenologischen Modells erklärt und der Einfluss der Verspannung auf das gemessene Signal erörtert.
Teile der hier vorgestellten Ergebnisse wurden vom Autor in Ref. [97] veröffentlicht.

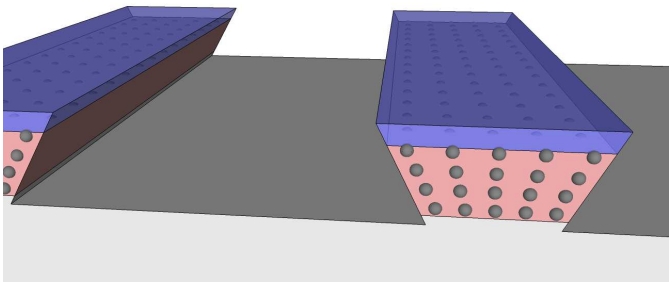


Abbildung 6.1: Schematische Darstellung der Verspannungsrelaxation in verspannten Silizium-Gitterstrukturen. Hier kann sich das Oxid (blau) teilweise in den freien Bereich ausdehnen, wodurch der darunterliegende Siliziumzahn ebenfalls gedehnt wird. Es ist zu erwarten, dass der verspannte Bereich (rot) wesentlich größer ist als im unstrukturierten Fall.

6.1 Herstellung periodischer Gitterstrukturen in Silizium

Um den Einfluss von Verspannungen auf die nichtlineare Suszeptibilität $\chi^{(2)}$ in einem größeren Volumen zu untersuchen, wurden verspannte und unverspannte (111)-orientierte Siliziumstücke mit einer periodischen Gitterstruktur versehen. Für die verspannten Proben wurde zunächst wie im vorherigen Kapitel ein kompletter Wafer mittels thermischer Oxidation (Abschn. 3.1) beschichtet. Die dabei erzeugte Schicht wurde dann mittels Waferbiegeanalyse (Abschn. 4.1) charakterisiert. Für die hier verwendeten SiO_2-Schichten wurde eine Dicke von ca. 110 nm und eine Verspannung von $\sigma = -450$ MPa festgestellt. Zusätzlich zu den oxidierten Proben wurden unbeschichtete (unverspannte) Siliziumproben prozessiert, die als Referenzproben verwendet wurden. Die zur Strukturierung der Proben notwendigen Schritte sind in Abb. 6.2 zusammengefasst und werden im Folgenden näher erläutert. Bei der Herstellung der Referenzproben entfallen die Schritte (a) und (g). Zunächst wurde die Probe mit Fotolack beschichtet, mittels Laserinterferenzlithografie (Abschn. 3.2) strukturiert und dann entwickelt. Vor der anschließenden Chrombeschichtung wurde die Probe mit einem Plasmaprozess gereinigt. Dadurch wurden Lackreste,

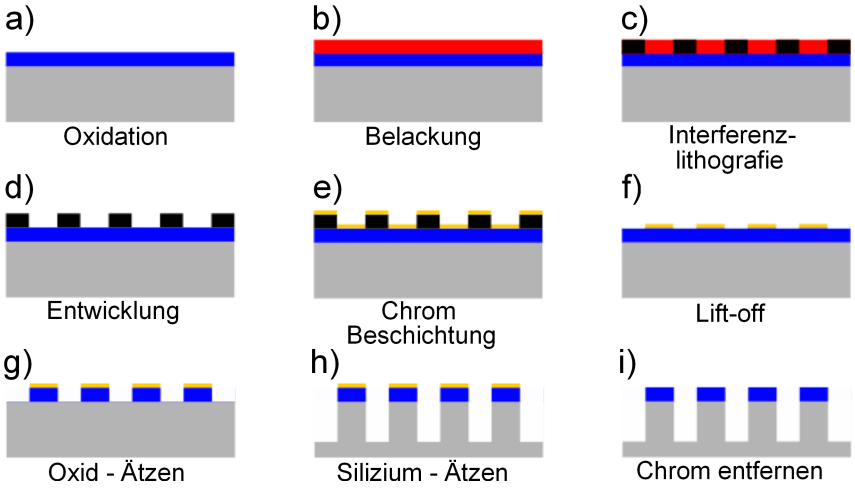
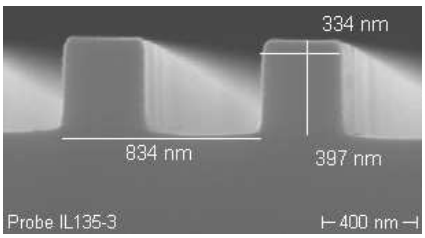


Abbildung 6.2: Übersicht über die Prozessschritte zur Herstellung strukturierter Proben. Schritt (a) ist in Abschn. 3.1, Schritte (b)-(d) in Abschn. 3.2 und Schritte (g) und (h) in Abschn. 3.3 näher erläutert. Eine zusammenfassende Beschreibung der übrigen Schritte erfolgt im vorliegenden Kapitel.

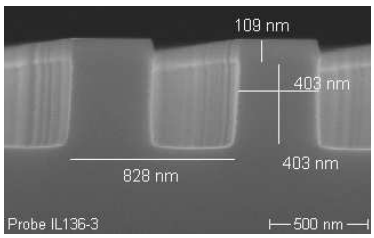
die während der Entwicklung nicht abgelöst wurden, vom Silizium entfernt. Dies ist wichtig, damit bei der anschließenden Chromabscheidung das Chrom direkt auf dem Silizium haften kann. Zur Reinigung wurde ein (4:1) N_2/O_2-Plasma (160 sccm) bei einer Leistung von 120 W und einem Kammerdruck von ca. 0,1 Torr verwendet. Die Prozessdauer wurde auf 30 s begrenzt, um die Lackstege nicht unnötig abzutragen.

Die Beschichtung mit Chrom erfolgte mittels Elektronenstrahlverdampfung eines Chrom-Targets. Da die Verdampfung im Hochvakuum stattfand, kam es zu einer gerichteten Beschichtung der Probe, so dass nur die Oberflächen, nicht aber die Seitenwände der Lackstege bedeckt wurden[1]. Die Dicke der Chromschicht betrug 30 nm. Sie ist damit dick genug, um Inselbildung bei der Abscheidung zu verhindern und gleichzeitig dünn genug, um beim anschließenden Lift-Off-Prozess glatte Kanten zu erzeugen.

Für den Lift-Off wurde die Probe zusammen mit Removerflüssigkeit (Allresist AR300-70) ins Ultraschallbad gegeben. Der Remover greift an den vom Chrom unbedeckten Seitenwänden den Lack an und löst ihn auf. Dadurch wurde auch die darauf befindliche Chromschicht entfernt. Lack- und Chromreste wurden mit Isopropanol und Aceton abgespült und die Probe mit Stickstoff getrocknet. Danach wurden Oxid und Silizium mit den in Abschn. 3.3 beschriebenen Ätzrezepten strukturiert.



(a) Unverspannte (111)-Silizium Probe IL135-3



(b) Verspannte Probe IL136-3 mit einer 109 nm dicken Oxidschicht

Abbildung 6.3: Elektronenmikroskopaufnahmen der untersuchten Proben.

[1] Der bei der Belichtung erzeugte Unterschnitt im Lack (siehe Abschn. 3.2) hilft hier zusätzlich, eine Beschichtung der Seitenflächen mit Chrom zu verhindern.

Bevor nun das Chrom von der fertigen Probe entfernt werden konnte, musste die Probe zunächst in einem Sauerstoffplasma intensiv gereinigt werden[2]. Dabei wird die dünne Polymerschicht abgelöst, die sich während des Ätzvorgangs über die Probe gelegt hat. Dieser Schritt ist erforderlich, da sonst die Lösung zum Entfernen des Chroms nicht zum selbigen vordringen kann. Zum Entfernen des Chroms wurde eine Lösung aus Ammoniumcer(IV)-nitrat und Perchlorsäure verwendet[3]. Beispiele der fertigen Gitterproben sind in Abb. 6.3 dargestellt.

6.2 Verspannungscharakterisierung mittels HRXRD

Um Informationen über die Verspannungsverteilung in den Gitterzähnen zu erhalten, wurden Untersuchungen der Gitterstruktur mittels der in Abschn. 4.1 beschriebenen HRXRD-Methode durchgeführt. Die dabei gewonnenen Gitterkarten (*engl.: Reciprocal-Space-Maps*) enthalten Informationen über die Verteilung der Verspannung in den Gitterzähnen. Um diese zu analysieren, wird der Ansatz der Vorwärtsmodellierung genutzt. Dabei wird zunächst aus Anfangsannahmen mit Hilfe einer FEM-Simulation (Abschn. 4.3) die Verspannungsverteilung in einem Zahn berechnet. Anschließend werden die ermittelten Informationen über die resultierende Verschiebung der Gitteratome zur numerischen Berechnung der Röntgenbeugung am Modellgitter verwendet. Die numerisch bestimmte *Reciprocal-Space-Map* lässt sich dann mit dem Messergebnis vergleichen. Dass diese Methode geeignet ist, um Rückschlüsse auf die Verspannungseigenschaften von Strukturen im Nanometerbereich zu ziehen, wurde bereits in der Dissertation von Hanke [71] gezeigt. Dort wurden Silizium-Germanium-Inseln auf ihre Verspannungseigenschaften untersucht. Hier wird diese Methode auf den Fall periodischer Strukturen angewendet.

Zunächst wurde die Referenzprobe (Abb. 6.3 (a)) untersucht. Dafür wurde der symmetrische (111)-Reflex gemessen, bei dem die x-Komponente des Differenzvektors $\vec{Q}$ verschwindet[5]. Der entsprechende Einfallswinkel beträgt dabei $\Theta = 14,221°$. In der *Reciprocal-Space-Map* der Referenzprobe in Abb. 6.4 (a) ist die gemessene Streuintensität logarithmisch dargestellt. In der Mitte der *Reciprocal Space Map* ($Q_\mathrm{x} = 0$ Å^{-1}; $Q_\mathrm{z} = 2,004$ Å^{-1}) zeigt sich der starke (111)-Reflex des unstrukturierten Substrats. Zusätzlich dazu treten in horizontaler Richtung vertikale Streifen mit gleichem Abstand auf, deren Intensität nach außen hin abnimmt. Bei genauerer Betrachtung lässt sich feststellen, dass die Intensität nicht monoton abfällt, sondern moduliert ist, wobei sich Streifen höherer und niedrigerer Intensität abwechseln. Zumindest für die drei stärksten mittigen Streifen lässt sich auch eine Modulation der Intensität in z-Richtung erkennen, die allerdings rasch abklingt. Um die Ursache der Beobachtungen zu verstehen, ist es hilfreich, die gemessene Gitterkarte numerisch durch eine Simulation der Beugungseffekte zu modellieren.

Modellierung der Reciprocal Space Maps

Die Beugung von Röntgenstrahlen lässt sich durch zwei verschiedene Theorien beschreiben, die kinematische und die dynamische Streutheorie. Den wesentlichen Unterschied zwischen beiden stellt die Vereinfachung des Streuprozesses in der kinematischen Theorie dar. Hier wird die Mehrfachstreuung der Röntgenquanten im Kristall sowie die lokalen Eigenschaften der Streuzentren

[2] Die Reinigung erfolgte mit einem Niederfrequenz-Plasmaätzer (f=44 kHz) der Firma Diener. Zur Reinigung wurde ein Sauerstoffffluss von 160 sccm, bei einem Kammerdruck von 0,1 Torr und einer LF-Leistung von 300 W, verwendet. Für die Prozessdauer hat sich eine Zeit von 5 min als ausreichend erwiesen.

[3] Zur Herstellung der Lösung zum Chromätzen wurden 1,09 gr Ammoniumcer(IV)-nitrat, 0,36 ml Perchlorsäure und 8,377 ml Wasser verwendet.

[4] Bei dem schräg verlaufenden Reflex in der gemessenen Gitterkarte handelt es sich um ein gerätebedingtes Artefakt (Analysatorstreak).

[5] Allgemein werden Röntgenreflexe in symmetrische und asymmetrische Reflexe unterteilt [70]. Da im Fall symmetrischer Reflexe die x-Komponente der Wellenvektoren der einfallenden und gebeugten Welle gleich ist, gilt $Q_\mathrm{x} = 0$ Å^{-1}.

vernachlässigt. Zwar versagt die kinematische Theorie bei unendlich ausgedehnten Kristallstrukturen, für hinreichend kleine Strukturen, wie die hier untersuchten Gitter, lässt sie sich jedoch nutzen [71]. Nach Ref. [98] ist die Amplitude der gestreuten Röntgenstrahlung gegeben durch:

$$A = \int \rho(\vec{r}) \exp\left(i\,\vec{Q}\,\vec{r}\right) dV. \tag{6.1}$$

Hierbei ist $\rho(\vec{r})$ die lokale Elektronendichte am Ort $\vec{r}$. Durch die verspannungsinduzierte Verschiebung $\vec{u}(\vec{r})$ der Kristallstruktur verschiebt sich ebenfalls die lokale Elektronendichte, so dass

$$\rho(\vec{r})^{\mathrm{def}} = \rho(\vec{r} - \vec{u}(\vec{r})) \quad \text{bzw.} \quad \rho(\vec{r} + \vec{u}(\vec{r}))^{\mathrm{def}} = \rho(\vec{r}) \tag{6.2}$$

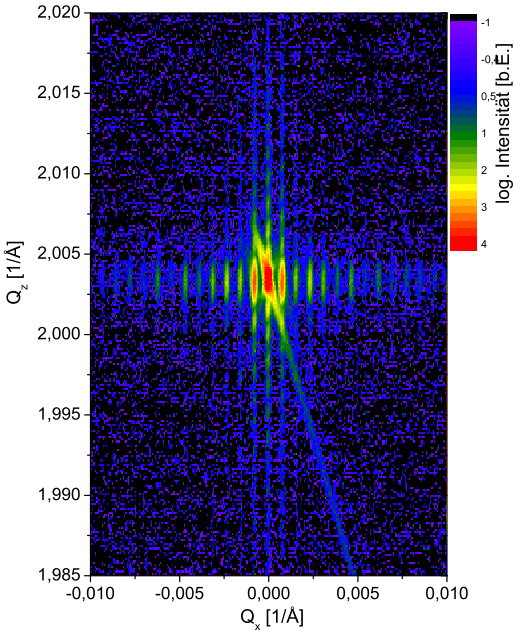
gilt. Durch Einsetzen von $\rho(\vec{r})^{\mathrm{def}}$ in Gl. 6.1 und eine anschließende Koordinatentransformation entsprechend Gl. 6.2 ergibt sich unter Berücksichtigung der verspannungsinduzierten Gitterverschiebung der folgende Ausdruck für die Streuamplitude:

$$A = \int \rho(\vec{r}) \exp\left(i\,\vec{Q}\;(\vec{r} + \vec{u}(\vec{r}))\right) dV. \tag{6.3}$$

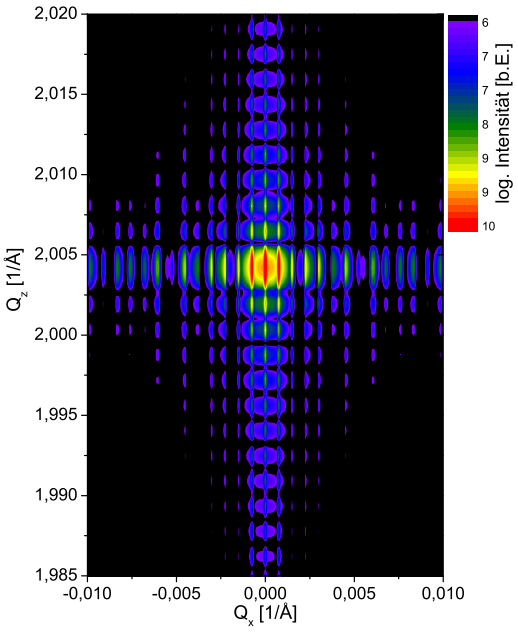
Um die numerische Behandlung von Gl. 6.3 zu vereinfachen, lässt sich die Struktur in Superzellen unterteilen und das Integral in zwei Summen aufteilen:

$$A_{\mathrm{Zahn}} = \sum_i \sum_j \rho(\vec{r}_i + \vec{r}_j')\;\exp\left(i\,\vec{Q}\;\left(\vec{r}_i + \vec{r}_j' + \vec{u}(\vec{r}_i + \vec{r}_j')\right)\right). \tag{6.4}$$

Der Ort der Superzelle wird dabei durch $\vec{r}_i$ angegeben, $\vec{r}_j'$ bestimmt die Position der einzelnen Atome darin. Da es sich bei den Proben um einkristallines Silizium handelt, bei dem die Elektronendichteverteilung außer durch die Verspannung nicht weiter beeinflusst wird, kann angenommen



(a) Experimentell bestimmte *Reciprocal Space Map* der unverspannten Referenzprobe.



(b) Simulierte *Reciprocal Space Map* der unverspannten Referenzprobe

Abbildung 6.4: Vergleich der gemessenen und simulierten *Reciprocal Space Maps* des (111)-Reflexes der unverspannten Referenzprobe IL135-3. Der Vergleich weist eine hohe Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment auf.[4]

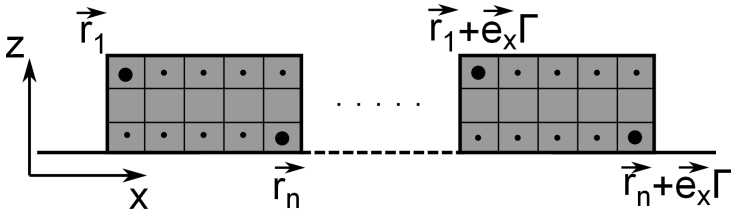


Abbildung 6.5: Skizze zur Nummerierung der zur Röntgenbeugung beitragenden Einheitszellen im Fall der Beugung an mehreren Gitterzähnen.

werden, dass jede Zelle die gleiche Elektronendichteverteilung besitzt, d.h. $\rho(\vec{r}_i+\vec{r}_j') = \rho(\vec{r}_j')$ [71]. Da davon auszugehen ist, dass die induzierten Verformungen sehr klein sind, können die Änderungen innerhalb einer einzelnen Superzelle vernachlässigt werden, so dass $\vec{u}(\vec{r}_i + \vec{r}_j') \approx \vec{u}(\vec{r}_i)$ gilt. Damit lässt sich die Formel zur Bestimmung der Streuamplitude in die Form bringen, in der sie auch im numerischen Modell verwendet wird:

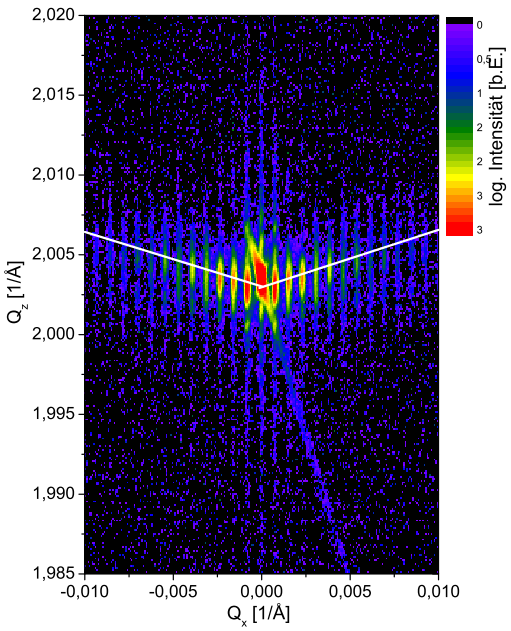
$$A_{\text{Zahn}} = \sum_i \underbrace{\sum_j \rho \, \exp\left(i\,\vec{Q}\,\vec{r}_j'\right)}_{F} \, \exp\left(i\,\vec{Q}\,\left(\vec{r}_i + \vec{u}(\vec{r}_i)\right)\right). \tag{6.5}$$

Der Einfluss der einzelnen Superzelle spiegelt sich hier in Form eines Strukturfaktors F wider, der lediglich zu einer Skalierung des berechneten Signals führt. Für die Berechnung der *Reciprocal Space Map* wurden die Einheitszellen so gewählt, dass sie jeweils $10 \times 10 \times 10$ Gitteratome umfassen. Dies ermöglicht es, die Gitterstruktur möglichst exakt zu beschreiben und gewährleistet gleichzeitig akzeptable Rechenzeiten. Der Strukturfaktor wurde der Einfachheit halber auf $F = 1$ gesetzt.

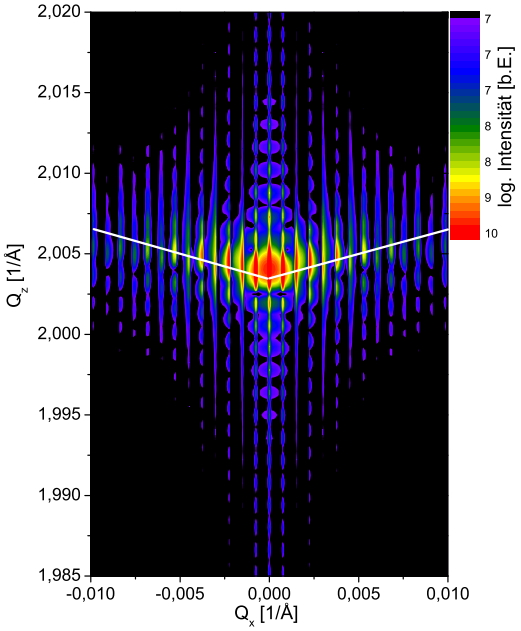
Mit Gl. 6.5 ist es nun möglich die *Reciprocal Space Map* eines Zahns des Gitters zu berechnen. Da das überlagerte Signal benachbarter Zähne ebenfalls zu Interferenz führt, ist es erforderlich, in der Streuamplitude den Einfluss mehrerer Zähne zu berücksichtigen. Dies lässt sich durch eine Summation über alle Phasenterme der Einheitszellen ($\vec{r}_1$ bis $\vec{r}_n$) der Gitterzähne erreichen (siehe Abb. 6.5), wobei sich die äquivalenten Koordinaten der verschiedenen Zähne in ihrer x-Komponente um ein Vielfaches der Gitterkonstante Γ unterscheiden. Für die Gesamtstreuamplitude A_{Gesamt} gilt daher:

$$\begin{aligned} A_{\text{Gesamt}} &= e^{i\,\vec{Q}\,(\vec{r}_1+\vec{u}(\vec{r}_1))} + \cdots + e^{i\,\vec{Q}\,(\vec{r}_n+\vec{u}(\vec{r}_n))} + e^{i\,\vec{Q}\,(\vec{r}_1+\vec{u}(\vec{r}_1)+\vec{e}_x\,\Gamma)} + \cdots + e^{i\,\vec{Q}\,(\vec{r}_n+\vec{u}(\vec{r}_n)+\vec{e}_x\,\Gamma)} + \cdots \\ &\quad \cdots + e^{i\,\vec{Q}\,(\vec{r}_1+\vec{u}(\vec{r}_1)+\vec{e}_x N\,\Gamma)} + \cdots + e^{i\,\vec{Q}\,(\vec{r}_n+\vec{u}(\vec{r}_n)+\vec{e}_x N\,\Gamma)} \qquad (6.6) \\ &= \underbrace{\sum_i^n e^{i\,\vec{Q}\,(\vec{r}_i+\vec{u}(\vec{r}_i))}}_{A_{\text{Zahn}}} \cdot \left(1 + e^{i\,Q_x\,\Gamma} + \cdots + e^{i\,Q_x N\,\Gamma}\right) \qquad (6.7) \\ &= A_{\text{Zahn}} \cdot \underbrace{\sum_{g=0}^{N} e^{i\,Q_x\,g\,\Gamma}}_{G} = A_{\text{Zahn}} \cdot \frac{e^{i\,Q_x\,\Gamma\,(N+1)} - 1}{e^{i\,Q_x\,\Gamma\,N} - 1}\,. \qquad (6.8) \end{aligned}$$

Gleichung 6.8 zeigt, dass sich die Streuamplitude A_{Gesamt} aus einer Überlagerung der Streuamplitude eines einzelnen Zahns (vgl. Gl. 6.5) mit einem Phasenfaktor G ergibt, wobei G den Einfluss des Gesamtgitters berücksichtigt, der von der Gitterkonstante Γ und der Anzahl der interferierenden Zähne bestimmt wird. Wie in Abschn. 4.1 angegeben, besitzt der kohärent beleuchtete Bereich auf der Probe eine Breite von ca. 4 μm. Da die Gitterkonstante der untersuchten Proben ca. 830 nm beträgt, wurden zum Vergleich mit den experimentellen Werten *Reciprocal Space Maps* für eine Struktur mit fünf Gitterperioden berechnet. Die berechnete *Reciprocal Space Map* der unverspannten Probe ist in Abb. 6.4 (b) dargestellt.



(a) Experimentell ermittelte *Reciprocal Space Map* der verspannten Probe.



(b) Simulierte *Reciprocal Space Map* der verspannten Probe .

Abbildung 6.6: Vergleich der gemessenen und simulierten *Reciprocal Space Maps* des (111)-Reflexes der verspannten Probe IL136-3. Die weißen Linien zeigen die verspannungsbedingte Verschiebung der Beugungsstreifen auf.

Vergleich von Experiment und Modell

Der Vergleich der numerisch bestimmten Gitterkarten mit den experimentell ermittelten zeigt gute Übereinstimmung zwischen beiden (Abb. 6.4 (a)), was die Richtigkeit der im Modell gemachten Annahmen belegt. Durch die Variation der Modellparameter lassen sich die verschiedenen Einflüsse auf die Beugungsintensität näher bestimmen. So hängt die in Q_z-Richtung auftretende Intensitätsmodulation von der Höhe der Zähne ab. Analog wird die Modulation in Q_x-Richtung von der Breite des Zahns beeinflusst, wobei ein schmalerer Zahn breitere Beugungsmaxima erzeugt. Ein einzelner Zahn liefert dabei eine Intensitätsverteilung, die der Beugung an einem zweidimensionalen Spalt mit den Abmessungen des Zahnquerschnitts entspricht. Zusätzlich wird in Q_x-Richtung das Beugungsbild des Zahns von der Interferenz der verschiedenen Zähne überlagert (Term G in Gl. 6.8), die auf Grund der größeren Gitterkonstante eine geringere Periodizität im reziproken Raum besitzen. Daher lässt sich aus dem Abstand der einzelnen Intensitätsmaxima in Q_x-Richtung die Gitterkonstante der Probe ablesen. Die Überlagerung der Beugung am einzelnen Zahn und die Beugung an mehreren Zähnen (Gl. 6.8) erklärt auch die zuvor beschriebene Intensitätsmodulation der Maxima in Q_x-Richtung. Die Anzahl der an der Beugung beteiligten Zähne beeinflusst hierbei die Breite der einzelnen Maxima.

Nachdem anhand der unverspannten Struktur die Funktionalität des numerischen Modells belegt werden konnte, lässt sich das Modell nun auf den Fall einer verspannten Gitterstruktur (Abb. 6.3 (b)) anwenden. Dazu wurde Probe IL136-3 untersucht, die eine kompressive Verspannung von $\sigma = -450$ MPa aufweist. Die entsprechende *Reciprocal Space Map* ist in Abb. 6.6 (a) dargestellt. Der Einfluss der Verspannung zeigt sich hier in einer Verschiebung der Intensitätsmaxima in Q_z-Richtung, was zu einer konkaven Verbiegung der Beugungsstreifen führt (weiße Linien in Abb. 6.6). Diese ist charakteristisch für die durch eine kompressive Verspannung indu-

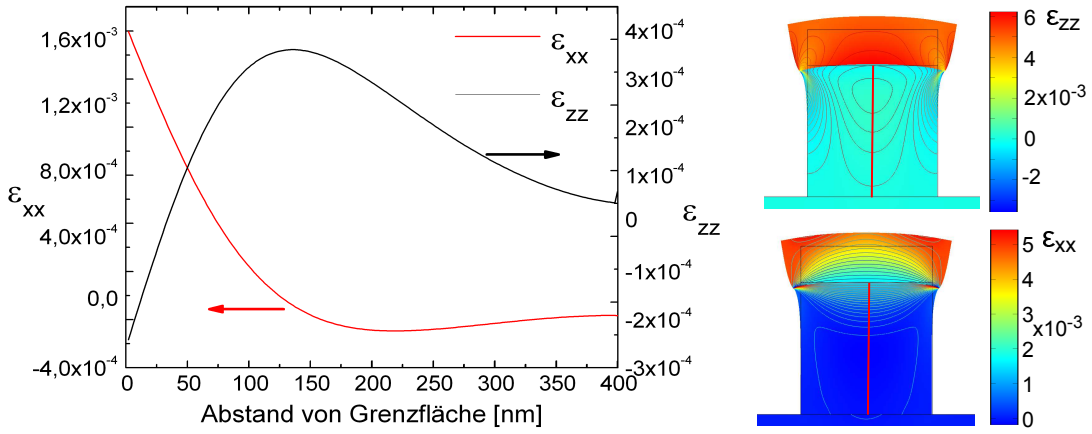


Abbildung 6.7: Dehnungsverlauf im für die Simulation der reziproken Gitterkarte (Abb. 6.6 (b))verwendeten FEM-Modell (entlang der roten Linie rechts). Rechts ist qualitativ die Dehnung ϵ_{xx} bzw. ϵ_{zz} dargestellt. Die verspannungsinduzierte Deformation ist stark übertrieben ($\times 60$) dargestellt.

zierte Verzerrung des Kristalls (vgl. Ref. [70]). Da es sich bei dem untersuchten Reflex um einen symmetrischen Reflex handelt, spiegelt sich darin nur die Änderung des Netzebenenabstandes in z-Richtung wider, was einer Verzerrung des Kristalls (ϵ_{zz}) in dieser Richtung entspricht. Obwohl die Verspannung in der aufgebrachten Oxidschicht in horizontaler Richtung wirkt, kommt es im Silizium auch zu einer Dehnung in vertikaler (z-)Richtung. Dies wird zum einen durch die in elastischen Materialien auftretende Querkontraktion bedingt. Zum anderen führt die verspannungsbedingte Deformation der Siliziumzähne (vgl. Abb. 6.7) zu einer inhomogenen Verteilung der Dehnungskomponenten.

Analog zur unverspannten Struktur lässt sich auch hier die *Reciprocal Space Map* mit Hilfe von Gl. 6.8 berechnen, wobei nun die Verzerrung des Gitters $\vec{u}(\vec{r})$ zu berücksichtigen ist. Das Resultat ist in Abb. 6.6 dargestellt und zeigt wiederum eine hohe Übereinstimmung mit der experimentellen Gitterkarte. Die Werte für die Verschiebung der Gitterpunkte wurden mittels FEM-Simulation mit COMSOL Multiphysics ermittelt[6], wobei als Modellparameter die Werte aus den Elektronenmikroskopaufnahmen und der Waferbiegungsmessung übernommen wurden. Zur Überprüfung der Richtigkeit der mittels Waferbiegung gemessenen Verspannung in der Oxidschicht wurde diese im FEM-Modell variiert und das entsprechende Beugungsbild mit dem experimentell bestimmten verglichen. Dabei hat sich gezeigt, dass für die gemessene Verspannung von $\sigma = -450$ MPa die größte Übereinstimmung erzielt wird.

In Abb. 6.7 ist der Dehnungsverlauf des Modells für ϵ_{xx} und ϵ_{zz} dargestellt. Da die aufgebrachte Verspannung hauptsächlich in x-Richtung wirkt, ist die ϵ_{xx}-Komponente im Silizium wesentlich stärker als ϵ_{zz}. Das Vorzeichen von ϵ_{xx} ist dabei positiv, da das kompressiv verspannte Oxid das darunter liegende Material auseinander zieht. Links im Bild ist der Dehnungsverlauf in der Probenmitte entlang der z-Richtung dargestellt. Die dominante Komponente ϵ_{xx} klingt über eine Tiefe von ca. 150 nm auf Null ab, so dass dieser Bereich einen signifikanten Verspannungsgradienten aufweist, dem eine verspannungsinduzierte Nichtlinearität zugewiesen werden kann.

Die Dehnung ϵ_{zz} ist zunächst negativ und besitzt nach einem Nulldurchgang ein Maximum in einer Tiefe von ca. 150 nm. Ab dort klingt sie auf Null ab. Dieses Verhalten lässt sich am Besten anhand der rechts in Abb. 6.7 dargestellten Verspannungsverteilung verstehen. Wie dort überspitzt dargestellt ist, kommt es zu einer Aufwölbung der Oxidschicht, was zu einer Verbiegung

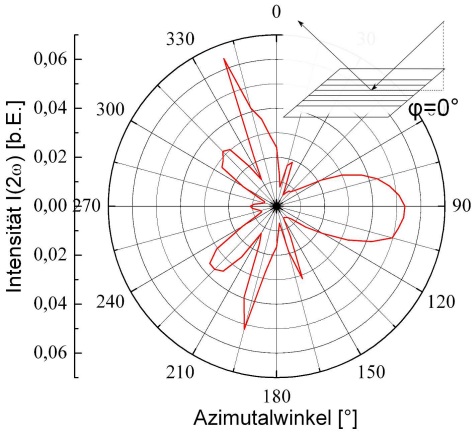
[6] Bei der FEM-Simulation wurde das Modell eines ebenen Verzerrungszustandes verwendet [99], das sich für Probleme eignet, bei denen sich die Verspannung in einer Raumrichtung nicht ändert. Als mechanische Parameter für das Oxid und das Silizium wurden verwendet: $E_{\mathrm{Si}} = 170$ GPa, $E_{\mathrm{SiO_2}} = 70$ GPa, $\nu_{\mathrm{Si}} = 0,22$ und $\nu_{\mathrm{SiO_2}} = 0,17$.

des darunterliegenden Siliziums führt. Betrachtet man das System Oxid / obere Siliziumschicht ($d_{\mathrm{Si}} \approx 40$ nm) als eine Art Bimetallstreifen, so führt die Aufwölbung des Oxids zu einer lokalen Stauchung des direkt darunter befindlichen Siliziums, was negativen Dehnungswerten entspricht. Da die obere Siliziumschicht mit dem unteren Teil des Zahns verbunden ist, kommt es dort zu einem Auseinanderziehen des Materials in z-Richtung, was einer positiven Dehnung entspricht. Die Übereinstimmung der mittels Streutheorie berechneten Daten mit denen der Röntgenmessung bestätigt die Richtigkeit der Simulation.

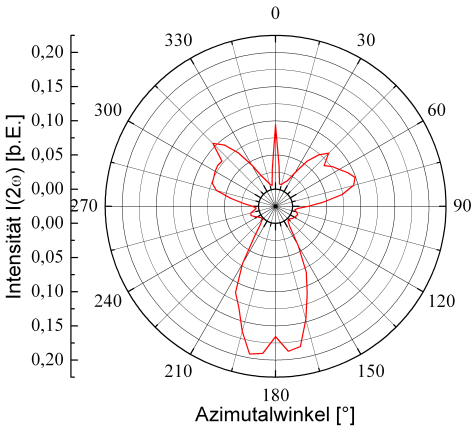
Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass die Strukturierung der verspannten Siliziumproben zu einer stark vergrößerten verspannten Schicht führt, deren Verzerrung mit der Tiefe von ca. 0,16% auf Null abfällt. Auf Grund des damit verbundenen Verspannungsgradienten ist davon auszugehen, dass nur diese Schicht eine verspannungsinduzierte Nichtlinearität besitzen kann. Diese soll im nächsten Abschnitt untersucht werden.

6.3 Frequenzverdopplung in Silizium-Gitterstrukturen

Im vorhergehenden Abschnitt konnte gezeigt werden, dass sich durch das Einbringen einer lateralen Strukturierung tatsächlich wesentlich größere inhomogen verzerrte Bereiche im Silizium erzeugen lassen als es für planare Proben möglich ist. Nun sollen diese Proben analog zu den unstrukturierten Proben hinsichtlich ihrer nichtlinearen optischen Eigenschaften zweiter Ordnung untersucht werden. Die Messung des frequenzverdoppelten Signals erfolgte dabei analog zu Abschn. 5.1 in Reflexion, in einer p-p-Strahlkonfiguration unter einem Einstrahlwinkel von $\Theta = 45°$. Die untersuchte Probe wurde ebenfalls um ihre Normalenachse gedreht, wobei der Azimutalwinkel $\varphi = 0°$ stets so gewählt wurde, dass der einfallende Strahl entlang der Streifenrichtung des Gitters läuft. Die entsprechenden Intensitätsverläufe sind in Abb. 6.8 für eine unverspannte (a) und eine verspannte Gitterstruktur (b) dargestellt. Es ist anzumerken, dass bei der Herstellung des Liniengitters der verspannten Probe (Abb. 6.8 (b)) die Siliziumprobe um 90°



(a) Frequenzverdoppeltes Signal einer unverspannten Siliziumprobe mit Liniengitter.



(b) Frequenzverdoppeltes Signal einer mit thermischem Oxid verspannten Siliziumprobe mit Liniengitter. Der Siliziumkristall ist im Vergleich zu (a) um 90° gedreht.

Abbildung 6.8: Frequenzverdoppeltes Signal einer verspannten sowie einer unverspannten Siliziumprobe mit periodischer Linienstruktur. Das Signal weist eine stark veränderte Winkelabhängigkeit auf, die mit Beugungseffekten am Liniengitter erklärt werden kann. Der Azimutalwinkel φ wurde stets so gewählt, wie in Inset (a) dargestellt.

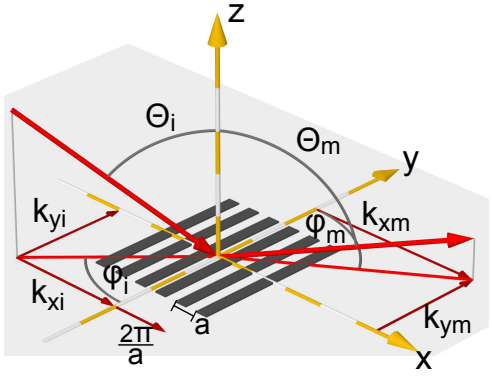


Abbildung 6.9: Schematische Darstellung der Beugung an einem Streifengitter. Die in die Gitterebene projizierten Wellenvektoren lassen sich in Komponenten parallel und senkrecht zum Gitter zerlegen (k_y und k_x). Die Parallelkomponenten des einfallenden und des gebeugten Strahls müssen dabei gleich sein. Die Komponenten senkrecht zum Gitter können sich um ein ganzzahliges Vielfaches m des Gittervektors $2\pi/a$ unterscheiden.

gedreht war, so dass die großen Intensitätsmaxima des 2ω-Signals gegenüber der unverspannten Probe (Abb. 6.8 (a)) ebenfalls um 90° gedreht auftreten.

Beide Grafiken zeigen ein frequenzverdoppeltes Signal, dessen Abhängigkeit vom Azimutalwinkel sich stark von dem Signal einer unstrukturierten Oberfläche unterscheidet. So ist statt der bisherigen Dreizähligkeit nur noch eine annähernde Spiegelsymmetrie zu erkennen. Auch reagiert das Signal je nach Winkelbereich wesentlich empfindlicher gegenüber kleinen Änderungen in der Einstrahlrichtung. Es ist offensichtlich, dass das modifizierte Signal in einem Zusammenhang mit der eingeführten Strukturierung steht.

Um das gemessene Signal hinsichtlich möglicher Verspannungseinflüsse analysieren zu können, ist es daher zunächst erforderlich, den Einfluss der Strukturierung zu separieren. Da die periodischen Linienstrukturen mit einem Linienabstand im Bereich der verwendeten Wellenlängen ein Beugungsgitter darstellen, ist davon auszugehen, dass das detektierte Signal durch Beugungseffekte verändert wurde. So können je nach Einfalls- und Azimutalwinkel unterschiedliche Beugungsordnungen angeregt werden, wodurch der Anteil des direkt reflektierten Lichts beeinflusst wird. Die Winkel der anregbaren Beugungsordnungen lassen sich mit Hilfe von Gittergleichungen [100] bestimmen. Da im vorliegenden Fall die Anregung nicht nur senkrecht bzw. parallel zu den Gitterlinien erfolgte, ist hier analog zu Ref. [101] eine allgemeinere Form der Gittergleichung zu nutzen. Diese lässt sich ausgehend von den in die Ebene des Gitters projizierten Komponenten des Wellenvektors bestimmen (siehe Abb. 6.9), für die gilt:

$$k_{\mathrm{xi}} + m\frac{2\pi}{a} = k_{\mathrm{xm}} \quad \text{sowie} \quad k_{\mathrm{yi}} = k_{\mathrm{ym}}. \tag{6.9}$$

In Abhängigkeit von Θ und φ ergibt sich dann

$$\frac{2\pi}{\lambda}\sin\Theta_{\mathrm{i}}\sin\varphi_{\mathrm{i}} + m\frac{2\pi}{a} = \frac{2\pi}{\lambda}\sin\Theta_m\sin\varphi_m\ , \tag{6.10}$$

$$\frac{2\pi}{\lambda}\sin\Theta_{\mathrm{i}}\cos\varphi_{\mathrm{i}} = \frac{2\pi}{\lambda}\sin\Theta_m\cos\varphi_m\ . \tag{6.11}$$

Die Variablen Θ_m und φ_m geben hierbei den Austritts- und Azimutalwinkel der m-ten Beugungsordnung an. Aus Gleichungen 6.10 und 6.11 lassen sich Ausdrücke für Θ_m und φ_m bestimmen[7]:

$$\sin^2\Theta_m = \sin^2\Theta_{\mathrm{i}} + 2\,m\,\lambda/a\sin\Theta_{\mathrm{i}}\sin\varphi_{\mathrm{i}} + m^2\,\lambda^2/a^2 \tag{6.12}$$

$$\tan\varphi_m = \frac{\sin\Theta_{\mathrm{i}}\,\sin\varphi_{\mathrm{i}} + m\,\lambda/a}{\sin\Theta_{\mathrm{i}}\,\cos\varphi_{\mathrm{i}}}. \tag{6.13}$$

Mit Hilfe dieser Gleichungen lassen sich nun nicht nur die Beugungswinkel berechnen, sondern auch die Anzahl der anregbaren Beugungsordnungen bestimmen.

[7] Um Θ_m zu ermitteln, wird die Summe $k_{\mathrm{xm}}^2 + k_{\mathrm{ym}}^2$ gebildet. Zur Bestimmung von φ_m werden Gl. 6.10 und 6.11 nach der jeweiligen Winkelfunktion von φ_m umgestellt und durch einander dividiert.

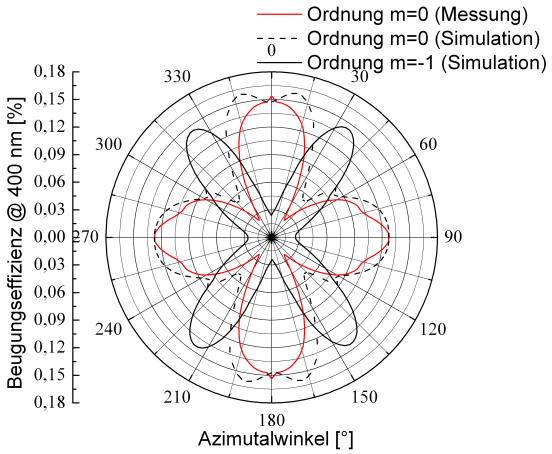


Abbildung 6.10: Vergleich der experimentell und numerisch bestimmten Beugungseffizienzen für die in Abb. 6.8 (a) vorgestellte unverspannte Probe. Die Beugungseffizienzen nullter Ordnungen weisen eine gute Übereinstimmung auf. Die Abweichungen lassen sich mit der ungenauen Kenntnis der exakten Probenparameter erklären. Die Beugungseffizienzen weisen eine zweizählige Rotationssymmetrie auf, die durch die Linienstruktur des Gitters bedingt ist. Zur Glättung des Signals wurde über äquivalente Winkelbereiche gemittelt.

Experimentell können die höheren Beugungsordnungen jedoch nicht bestimmt werden. Dies liegt daran, dass sich bei der verwendeten Messkonfiguration der ein- und ausfallende Strahl in einer Ebene befinden müssen. In der Regel gilt jedoch $\varphi_\mathrm{i} \neq \varphi_m$ für $m \neq 0$, so dass dies nicht der Fall ist. Abbildung 6.10 zeigt die Beugungseffizienz nullter Ordnung bei einer Anregungswellenlänge von 400 nm für den Fall der unverspannten Probe, deren frequenzverdoppeltes Signal in Abb. 6.8 (a) dargestellt wurde. Der Intensitätsverlauf weist eine zweizählige Rotationssymmetrie sowie zwei Spiegelebenen auf, was gerade der Symmetrie des Streifengitters entspricht. Die Modulation des Signals in Abhängigkeit vom Azimutalwinkel ergibt sich dadurch, dass sich für unterschiedliche Einstrahlrichtungen die Beugungseffizienz in andere Ordnungen ändert. Zwar können diese wie erwähnt nicht experimentell erfasst werden, numerisch lassen sich die entsprechenden Beugungseffizienzen jedoch berechnen. In Abb. 6.10 ist zusätzlich die berechnete Effizienz der nullten und minus ersten Beugungsordnung abgebildet. Die Berechnung der Beugungseffizienzen erfolgte mit der Fourier-Modalen-Methode (FMM), die in Ref. [102, 103] näher beschrieben ist. Die Effizienzen minus erster Ordnung weisen gerade für die Winkel Maxima auf, bei denen die Effizienz der nullten Ordnung ein Minimum besitzt (Wood Anomalie [104]). Dies zeigt sich in Abb. 6.10 besonders deutlich, da in diesem Fall die Gitterkonstante $\Gamma = 800$ nm beträgt, wodurch nach Gl. 6.12 nur sehr wenige Beugungsordnungen angeregt werden können. Dementsprechend enthält die minus erste Beugungsordnung einen Großteil des nicht direkt reflektierten Lichts.

6.4 Diskussion

Da das 2ω-Signal im vorliegenden Fall durch die Beugungseigenschaften des Gitters beeinflusst wird, ist es hier nicht ohne Weiteres möglich, auf den Einfluss der Verspannung im Siliziumgitter zu schließen. Es ist zunächst erforderlich, beide Einflüsse zu trennen. Dazu wird im Folgenden ein Modell entwickelt, das den Effekt des Gitters, nicht jedoch den Einfluss der Volumenverspannung berücksichtigt. Dieser lässt sich in einem anschließenden Vergleich von Messung und Modell feststellen.

Faltungsmodell zur Beschreibung der Frequenzverdopplung am Gitter

Um ein Verständnis für den Einfluss der Gitterstruktur auf das frequenzverdoppelte Signal (Abb. 6.8) zu entwickeln, lässt sich von folgender Überlegung ausgehen. Die Symmetrie des Signals der ungestörten Oberfläche beruht auf den atomaren Bindungsverhältnissen im Kristall. Diese sollten auch durch die Gitterstruktur, bis auf die Bereiche direkt an den Kanten der Gitterlinien, nicht verändert werden. Es ist daher davon auszugehen, dass auch in der Gitterstruktur lokal ein frequenzverdoppeltes Signal mit dreizähliger Symmetrie erzeugt wird. Das abgestrahlte

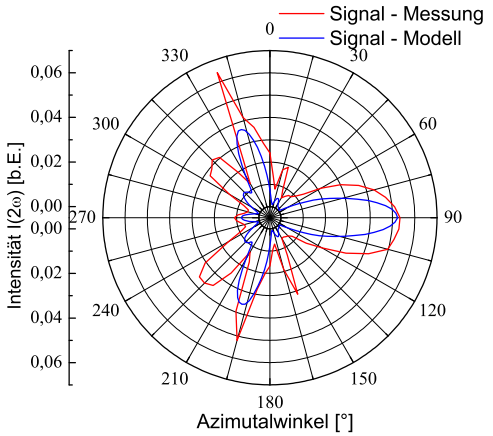
Licht erfährt jedoch im Fernfeld auf Grund der Gitterstruktur nur für die erlaubten Beugungsordnungen eine konstruktive Überlagerung der lokalen Felder. Daher ist zu vermuten, dass die Symmetrie des gemessenen Signals aus einer Überlagerung der lokalen und globalen Symmetrien besteht. Dies lässt sich überprüfen, indem das frequenzverdoppelte Signal einer ungestörten Probe mit der Beugungseffizienz des Gitters gefaltet wird. Hier wurde die für eine Wellenlänge von 400 nm bestimmte Beugungseffizienz verwendet.

Dass im Fall von Frequenzverdopplung die Beugungseigenschaften des detektierten Signals von der Wellenlänge des frequenzverdoppelten Lichts dominiert werden, lässt sich mit Hilfe der Gittergleichung verstehen. Für den einfachen Fall des Lichteinfalls quer zu den Gitterlinien ($\varphi = 90°$) vereinfacht sich Gl. 6.10 zu

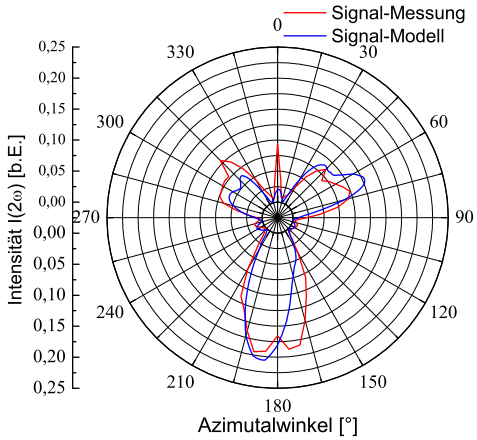
$$a\,(\sin\Theta_m - \sin\Theta_\mathrm{i}) = m\,\lambda\ . \tag{6.14}$$

Die linke Seite beschreibt dabei die Gangunterschiede, die beim gebeugten und beim einfallenden Strahl auftreten. Beide sind unabhängig von der jeweiligen Wellenlänge des Strahls. Die Bedingung für konstruktive Interferenz ist, dass der Gesamtgangunterschied am Ort der Detektion einem ganzzahligen Vielfachen der dort auftreffenden Wellenlänge entspricht. Die Beugungsordnungen werden daher nur durch die Wellenlänge des frequenzverdoppelten Signals bestimmt, der Anregungsstrahl sorgt lediglich für eine wellenlängenunabhängige Phasenverschiebung.

Abbildung 6.11 zeigt den Vergleich des Messsignals mit dem berechneten Signal des Faltungsmodells für die in Abb. 6.8 gezeigten Messungen. Es lässt sich erkennen, dass das Modell alle charakteristischen Merkmale des Messsignals hinreichend gut wiedergibt. Eine ähnlich gute Übereinstimmung konnte auch für alle anderen untersuchten Strukturen beobachtet werden. Noch signifikanter ist die Übereinstimmung zwischen der Beugungseffizienz und dem frequenzverdoppelten Signal im Fall eines (100) orientierten Siliziumgitters. Da das lokal erzeugte frequenzverdoppelte Signal im Wesentlichen isotrop ist und nur eine relativ schwache winkelabhängige Modulation aufweist, wird die Form des frequenzverdoppelten Signals von den Beugungseigenschaften des Gitters bestimmt. Dies lässt den Schluss zu, dass die Faltung der winkelabhängigen



(a) Vergleich von gemessener und modellierter Intensität des frequenzverdoppelten Signals für eine unverspannte Probe. Als Referenz für das Modell wurde das 2ω-Signal einer unstrukturierten Si-Probe verwendet.



(b) Vergleich von gemessener und modellierter Intensität des frequenzverdoppelten Signals für eine verspannte Probe. Als Referenz für das Modell wurde das 2ω-Signal einer unstrukturierten unter identischen Bedingungen oxidierten Si-Probe verwendet.

Abbildung 6.11: Vergleich der frequenzverdoppelten Intensität mit der nach Gl. 6.17 berechneten Intensität des Faltungsmodells. In beiden Fällen ergibt sich eine gute Übereinstimmung zwischen Messung und Modell. Ein zusätzlicher Einfluss der Verspannung im Gitter ist daher nicht nachweisbar.

Beugungseffizienz mit dem frequenzverdoppelten Signal einer ungestörten Struktur ein grobes aber dennoch geeignetes Modell liefert, mit dem die Auswirkungen des Gittereffekts unabhängig vom Einfluss vorhandener Verspannungen betrachtet werden können.

Für einen objektiven Vergleich der gemessenen Intensitäten mit denen des Faltungsmodells wird für das Modell ein geeignetes Referenzsignal benötigt. Dazu wird für das Modell der unverspannten Probe das 2ω-Signal einer unstrukturierten und unverspannten Referenz verwendet. Anhand der unverspannten Probe lässt sich dann die nachfolgende Berechnungsvorschrift überprüfen. Für diese wird angenommen, dass sowohl bei der strukturierten als auch bei der unstrukturierten Probe nur der Teil des in der Probe erzeugten Lichts $I_{\mathrm{SHG}}^{\mathrm{total}}$ gemessen wird, der in die nullte Beugungsordnung emittiert wird[8]:

$$I_{\mathrm{SHG,unstr}}^{\mathrm{mess}} = I_{\mathrm{SHG}}^{\mathrm{total}} \cdot \eta_{\mathrm{Refl}}(400\ \mathrm{nm}), \tag{6.15}$$

$$I_{\mathrm{SHG,Gitter}}^{\mathrm{mess}} = I_{\mathrm{SHG}}^{\mathrm{total}} \cdot \eta_{\mathrm{Gitter}}(400\ \mathrm{nm})\ . \tag{6.16}$$

Bezüglich des Referenzsignals der unstrukturierten Probe ergibt sich somit für das frequenzverdoppelte Signal des Modells:

$$I_{\mathrm{SHG,Gitter}}^{\mathrm{Modell}} = I_{\mathrm{SHG,unstr}}^{\mathrm{mess}} \cdot \frac{\eta_{\mathrm{Gitter}}(400\ \mathrm{nm})}{\eta_{\mathrm{Refl}}(400\ \mathrm{nm})}\ . \tag{6.17}$$

Anhand des in Abb. 6.11 (a) dargestellten Vergleichs lässt sich erkennen, dass sich zwischen den Intensitäten von Messung und Modell eine gute Übereinstimmung ergibt, was die Gültigkeit von Gl. 6.17 bestätigt. So sind die Abweichungen für die großen Maxima nur gering, für das Maximum bei einem Winkel von $\varphi = 90°$ stimmen die Intensitätswerte sogar überein.

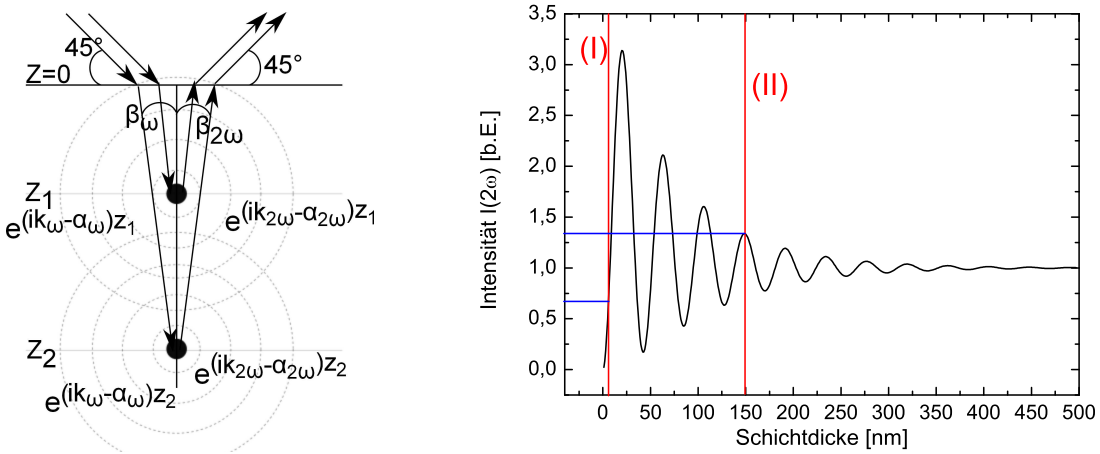
Für den Fall der verspannten Probe (Abb. 6.11 (b)) wurde als Referenz das 2ω-Signal einer unstrukturierten Probe verwendet, die mit einer zur strukturierten Probe identischen Oxidschicht versehen wurde. Damit werden alle vom Oxid hervorgerufenen Einflüsse berücksichtigt, so dass Abweichungen zwischen Modell und Messung auf die Verspannungen im Siliziumzahn zurückgeführt werden können. Es zeigt sich jedoch in Abb. 6.11 (b), dass keine Abweichungen zu beobachten sind. Die Intensitäten zeigen hier wiederum ein hohes Maß an Übereinstimmung, so dass ein direkter Einfluss der Verspannung im Siliziumzahn auf das frequenzverdoppelte Signal nicht nachgewiesen werden kann.

Analyse des Frequenzverdopplungseffekts in Reflexion

Die Feststellung, dass die im Siliziumstreifen vorhandene Verspannungsverteilung keinen Einfluss auf die frequenzverdoppelnden Eigenschaften des Siliziums hat, ist in sofern verwunderlich als dass sie kürzlich publizierten Erkenntnissen widerspricht. So wurden von Cazzanelli *et al.* [15] Frequenzverdopplungsexperimente an mit Siliziumnitrid verspannten Wellenleitern in Transmission durchgeführt. Dabei wurde eine signifikante Verstärkung der $\chi^{(2)}$-Werte von bis zu 40 pm/V gemessen. Einen ähnlichen Einfluss der Verspannung auf das $\chi^{(2)}$ in Silizium haben Chmielak *et al.* [14] bei Untersuchungen des elektrooptischen Effekts an verspannten Wellenleitern festgestellt.

Für die Diskrepanz zu den vorliegenden Untersuchungen lassen sich zwei mögliche Erklärungen finden. Eine mögliche Ursache besteht in den unterschiedlichen verwendeten Materialsystemen. So wurde in Ref. [14, 15] stets Siliziumnitrid zum Erzeugen der Verspannungen verwendet und nicht wie im vorliegenden Fall thermisches Oxid. Da kürzliche Untersuchungen [17] gezeigt haben, dass es an den SiN/Si-Grenzschichten zu effizienten Frequenzverdopplungseffekten kommen kann, könnte dies anstelle der Verspannung die Ursache für die starken $\chi^{(2)}$ Effekte sein. Dafür spricht auch, dass Chmielak *et al.* [14] mit ortsaufgelösten Differenzfrequenzmessungen

[8] Für die unstrukturierte Probe entspricht die Beugungseffizienz η gerade der Reflektivität der Probe.



(a) Schematische Darstellung des Gangunterschiedes zwischen in verschiedenen Tiefen z erzeugten Anteilen des frequenzverdoppelten Signals.

(b) Abhängigkeit der in Reflexion abgestrahlten frequenzverdoppelten Intensität von der Dicke des optisch nichtlinearen Bereichs. Dabei entspricht (I) der Dicke der verspannten Schicht einer unstrukturierten Probe, (II) der einer strukturierten Probe. Die blauen Linien geben die Intensität des 2ω-Signals unter der Annahme $\chi^{(2)} = 1$ für die jeweilige Schichtdicke an.

Abbildung 6.12: Analyse der Phasenbeziehungen bei Frequenzverdopplung in Reflexion.

zeigen konnten, dass die stärkste nichtlineare Wechselwirkung in der Nähe der Nitrid-Silizium Grenzschicht auftritt. Vergleichbar starke Grenzflächeneffekte sind von Oxid-Silizium Grenzflächen nicht bekannt.

Eine weitere Erklärung für den Unterschied zwischen den vorliegenden Daten und den Ergebnissen in Ref. [14, 15] ist, dass die hier verwendete Reflexions-Messkonfiguration nicht sensitiv genug gegenüber der tieferliegenden Verspannungsverteilung ist. Um diese Möglichkeit zu analysieren, wird im Folgenden eine Abschätzung der in Reflexion erzeugten frequenzverdoppelten Intensität vorgenommen. Dabei sind zusätzliche Faktoren zu berücksichtigen, die bisher im Fall der unstrukturierten Probe vernachlässigt werden konnten. Da die Dicke der potentiellen optisch nichtlinearen Schicht nun wesentlich größer ist, sind nun die unterschiedlichen Ausbreitungsgeschwindigkeiten der Anregungs- und frequenzverdoppelten Welle sowie die Phasendifferenzen der in unterschiedlichen Tiefen entstehenden frequenzverdoppelten Lichtanteile zu berücksichtigen. Die resultierenden Gangunterschiede und Interferenzen zwischen den verschiedenen 2ω-Teilstrahlen aus verschiedenen Tiefen bestimmen die in Reflexion abgestrahlte Intensität. Zusätzlich ist auf Grund des vergrößerten Wechselwirkungsvolumens die Absorption des Lichts im Material zu berücksichtigen. Dies hat zur Folge, dass das in tieferen Schichten erzeugte Signal einen geringeren Beitrag zur abgestrahlten reflektierten Gesamtintensität liefert. Abbildung 6.12 (a) gibt einen schematischen Überblick über die auftretende Phasenverschiebung sowie die Dämpfung, die dem in der Tiefe z erzeugten Signal widerfährt. Für das elektrische Feld des Anregungsstrahls ergibt sich in der Tiefe z:

$$E(\omega) = E_0(\omega)\, e^{i\, k_\omega\, l}\, e^{-\alpha_\omega\, l} = E_0(\omega) \exp\left(i\, \frac{k_\omega}{\cos\beta_\omega}\, z \right) \exp\left(-\frac{\alpha_\omega}{\cos\beta_\omega}\, z \right) , \tag{6.18}$$

wobei α_ω der Absorptionskoeffizient des Pumplichts im Silizium ist. Hier wurde berücksichtigt, dass das Licht unter einem Einfallswinkel von 45° auf die Probe trifft, wodurch sich der im Mate-

rial zurückgelegte Weg l im Vergleich zum senkrechten Einfall verlängert[9]. In der Tiefe z erzeugt das Licht des Anregungsstrahls über den bereits erwähnten Zusammenhang $E_0(2\omega) = \chi^{(2)}\, E(\omega)^2$ das frequenzverdoppelte Feld. Hierbei wird eine Abschwächung des Pumpstrahls durch den Energieübertrag in das 2ω-Feld (*engl. pump depletion*) vernachlässigt. Das 2ω-Feld hat nach Durchlaufen der Strecke z zurück an die Oberfläche die Form :

$$E(2\omega) = E_0(2\omega)\, \exp\left(i\frac{k_{2\omega}}{\cos\beta_{2\omega}}z\right)\, \exp\left(-\frac{\alpha_{2\omega}}{\cos\beta_{2\omega}}z\right)\,. \tag{6.19}$$

Um nun die von der Oberfläche abgestrahlte Gesamtintensität zu bestimmen, muss über alle Beiträge zum frequenzverdoppelten Signal bis zu einer Tiefe d integriert werden. Dabei beschreibt d die Ausdehnung des optisch nichtlinearen Bereichs, also des Bereichs in dem ein signifikanter Verspannungsgradient auftritt. Für das abgestrahlte Feld ergibt sich:

$$\begin{aligned} E_{\text{ges}} &= \int_0^d E_0(\omega)^2\, \chi^{(2)} \left[\exp\left[\left(i\,\frac{k_\omega}{\cos\beta_\omega} - \frac{\alpha_\omega}{\cos\beta_\omega}\right) z\right]\right]^2 \exp\left[\left(i\,\frac{k_{2\omega}}{\cos\beta_{2\omega}} - \frac{\alpha_{2\omega}}{\cos\beta_{2\omega}}\right) z\right] \mathrm{d}z \\ &= \frac{E_0(\omega)^2\, \chi^{(2)}}{i\,K-\alpha} e^{(i\,K-\alpha)\,z}\Bigg|_0^d = \frac{E_0(\omega)^2 \chi^{(2)}}{i\,K-\alpha}\left(e^{(i\,K-\alpha)\,d} - 1\right)\,, \end{aligned} \tag{6.20}$$

wobei $K = 2k_\omega/\cos\beta_\omega + k_{2\omega}/\cos\beta_{2\omega}$ und $\alpha = 2\alpha_\omega/\cos\beta_\omega + \alpha_{2\omega}/\cos\beta_{2\omega}$ ist. Die abgestrahlte Intensität bestimmt sich dann aus dem Betragsquadrat des Gesamtfeldes:

$$I = E_{\text{ges}} \cdot E_{\text{ges}}^* = \left(\chi^{(2)}\right)^2 \gamma \left(e^{-2\,\alpha\,d} - 2\,e^{-\alpha\,d}\cos K\,d + 1\right)\,, \tag{6.21}$$

wobei $\gamma = E_0^2/K^2 + \alpha^2$ gilt. Die nach Gl. 6.21 ermittelte Intensität ist in Abb. 6.12 (b) in Abhängigkeit von der Dicke der nichtlinearen Schicht dargestellt[10]. Sie zeigt eine um eins oszillierende Intensität, die mit zunehmender Tiefe abklingt. Das Besondere ist hier, dass es sich bei der abklingenden Intensität nicht um den Teilbetrag aus der entsprechenden Tiefe handelt, sondern um die in Reflexion emittierte Gesamtintensität. Das heißt, eine dickere optisch nichtlineare Schicht kann ein geringeres Signal in Reflexion liefern als eine dünne Schicht geeigneter Dicke. Der Grund ist der Oszillationsterm in Gl. 6.21. Ohne ihn würde das Signal mit zunehmender Schichtdicke bis zu einem Grenzwert anwachsen. Noch dickere Schichten würden auf Grund der Absorption keinen weiteren Beitrag liefern.

Der Gangunterschied zwischen den Beiträgen aus den verschiedenen Tiefen führt dazu, dass sich bis zu einer Schichtdicke (ca. 10 nm) die Beiträge konstruktiv überlagern. Wird die nichtlineare Schicht dicker (ca. 40 nm), so sorgen die zusätzlichen Beiträge jedoch für eine destruktive Überlagerung wodurch sich das reflektierte Signal verringert, obwohl die insgesamt beitragende Schicht größer wird. Abbildung 6.12 (b) hilft zu verstehen, warum es problematisch ist den Einfluss von Verspannungen in größeren Tiefen auf das frequenzverdoppelte Signal mit einer Reflexionsmessung zu bestimmen.

Möchte man nun die Intensitäten für den Fall einer unstrukturierten verspannten Probe (analog Kap. 5) und den einer strukturierten verspannten Probe vergleichen, so betragen die Dicken der verspannten Schichten jeweils ca. 5 nm bzw. 150 nm (siehe Abb. 6.7)[11]. Es wird

[9] Auf Grund des hohen Brechungsindexkontrastes zwischen Luft und Silizium ist der Unterschied zwischen z und l nur marginal. Nach dem Brechungsgesetz ergibt sich $\beta_\omega = 11,0°$ ($\cos\beta_\omega = 0,98$) und $\beta_{2\omega} = 7,3°$ ($\cos\beta_{2\omega} = 0,99$), mit $n_\omega = 3,694$ und $n_{2\omega} = 5,564$ [105].

[10] Für die Berechnung wurden $\alpha_\omega = 1,03 \cdot 10^{-4}\text{nm}^{-1}$ und $\alpha_{2\omega} = 1,21 \cdot 10^{-2}\text{nm}^{-1}$ sowie für $k_{\omega/2\omega} = 2\pi n_{\omega/2\omega}/\lambda_{\omega/2\omega}$ wurden $n_\omega = 3,694$ und $n_{2\omega} = 5,564$ verwendet [105].

[11] Die Schichtdicke von 5 nm wurde aus den in Abschn. 5.3 zitierten Literaturwerten abgeschätzt. Abbildung 6.7 zeigt, dass sich der stärkste Verspannungsgradient innerhalb der Gitterstruktur über einen Bereich bis 150 nm unterhalb der Oberfläche ausdehnt. Es wurde der Einfachheit halber angenommen, das das resultierende $\chi^{(2)}$ innerhalb der Schicht homogen ist.

angenommen, dass in beiden Schichten auf Grund des auftretenden Verspannungsgradienten eine nichtlineare Suszeptibilität $\chi^{(2)}$ induziert wird. An einer Beispielrechnung bei der zwei Schichten mit gleich starkem $\chi^{(2)}$ betrachtet werden, lässt sich erkennen, dass die dickere Schicht nur ein unwesentlich stärkeres 2ω-Signal liefert. Für das Verhältnis der nach Gl. 6.21 berechneten Intensitäten ergibt sich $I_{150}/I_5 = 1,34/0,68 = 1,97$. Das bedeutet, dass, obwohl die verspannte Schicht im Gitter 30 mal so dick ist wie die der unstrukturierten Probe, das Signal trotzdem nur um einen Faktor von zwei verstärkt wird.

Tatsächlich wird das $\chi^{(2)}$ für strukturierte und unstrukturierte Proben unterschiedlich groß sein. Da es bisher noch keine Theorie über den Zusammenhang zwischen Verspannungsgradient und $\chi^{(2)}$ im Volumenmaterial gibt, wird hier analog zum sp^3-Orbital-Modell (Kap. 5) eine proportionale Abhängigkeit impliziert. Bei der unstrukturierten Probe entspricht die Verspannung, die an der Grenzfläche im Silizium auftritt, der in der aufgebrachten Oxidschicht [83]. Für die strukturierte Probe wird der Einfachheit halber die gleiche Verspannung nahe der Grenzfläche angenommen. Tatsächlich fällt sie jedoch geringer aus (vgl. Abb. 6.7). Da die Verspannung im einen Fall über eine Tiefe von 5 nm, im anderen Fall über 150 nm abklingt, ist davon auszugehen, dass der resultierende Verspannungsgradient in der unstrukturierten Probe um den Faktor 30 größer ist als bei der unstrukturierten Probe und das Gleiche daher auch für die nichtlinearen Suszeptibilitäten ($\chi^{(2)}_{\mathrm{unstr}} \approx 30 \times \chi^{(2)}_{\mathrm{str}}$ bzw. $\chi^{(2)}_{\mathrm{str}} \approx 0,033 \times \chi^{(2)}_{\mathrm{unstr}}$) gelten sollte. Nutzt man diese Annahme in Verbindung mit Gl. 6.21, so ergibt sich für das Verhältnis der 2ω-Intensitäten der beiden Proben:

$$\frac{I_{\mathrm{str}}}{I_{\mathrm{unstr}}} = \frac{1}{30^2}\frac{1,34}{0,68} = 0,003 \ . \tag{6.22}$$

Hieraus lässt sich ablesen, dass das zu erwartende frequenzverdoppelte Signal aus dem Volumenbeitrag der strukturierten Probe drei Größenordnungen kleiner ist als das Signal der unstrukturierten Probe. Dies erklärt, warum der Einfluss der Verspannung im Signal der Gitterprobe mit der hier verwendeten Messmethode nicht zu erkennen war.

Die hier vorgestellten Messungen in Reflexionsgeometrie geben daher keine Antwort, ob der Verspannungsgradient in einer strukturierten Siliziumprobe ausreicht, um ein Volumen-$\chi^{(2)}$ im Silizium zu erzeugen, wie es von Cazzanelli *et al.* [15] und Chmielak *et al.* [14] berichtet wurde. Oder ob die Ursache der Nichtlinearität auf einer nichtlinearen Wechselwirkung mit der Nitrid-Deckschicht beruht, wie sie in beiden Arbeiten verwendet wurde. Eine Klärung dieser Frage soll nun im anschließenden Kapitel anhand von Transmissionsmessungen an thermisch oxidierten sowie Nitrid-beschichteten Wellenleitern erfolgen. Zur Modellierung der Verspannungsverteilung in den Wellenleitern bietet sich die hier verwendete FEM-Methode an, deren Zuverlässigkeit durch den Vergleich mit Röntgenmessungen belegt werden konnte.

7 Frequenzverdopplungseffekte in verspannten Silizium-Wellenleitern

Wie sich im vorherigen Kapitel herausgestellt hatte, ist die bisher verwendete Reflexionsmethode ungeeignet, um in einem ausgedehnten Volumen den Einfluss von Verspannungen auf die Nichtlinearität $\chi^{(2)}$ zu untersuchen. Daher wird dieser Zusammenhang im vorliegenden Kapitel mit Hilfe von Transmissionsmessungen an inhomogen verspannten Siliziumwellenleitern untersucht. Es soll überprüft werden, ob der im Vergleich zu einer unstrukturierten verspannten Probe (siehe Kapitel 5) geringe Verspannungsgradient ausreicht, um eine messbare Verstärkung des Frequenzverdopplungseffekts in den untersuchten Wellenleitern hervorzurufen. Es wurden zwar entsprechende Untersuchungen an mit Siliziumnitridschichten verspannten Wellenleitern durchgeführt [15] und auch ein elektrooptischer Effekt wurde an ähnlichen Strukturen beobachtet [14]. Es ist jedoch in beiden Fällen fraglich, ob die beobachteten Effekte tatsächlich auf dem Einfluss von inhomogenen Verspannungen im Volumen beruhen oder ob sie möglicherweise durch die Präsenz der Nitridschicht bzw. -grenzfläche bedingt sind. Entsprechende Frequenzverdopplungseffekte an Silizium-Nitrid-Grenzflächen sowie im Nitrid selbst wurden bereits beobachtet [16, 106]. Aus diesem Grund wird zusätzlich zum Verspannungseinfluss die Auswirkung einer Nitridschicht auf das frequenzverdoppelte Signal untersucht. Weiterhin sollen die in Ref. [15] vorgestellten Messungen an Nitrid-verspannten Wellenleitern reproduziert werden.

Im Folgenden wird zunächst die Herstellung der untersuchten Proben beschrieben und ihre optische Qualität bestimmt. Zur Analyse der in den Wellenleitern vorherrschenden Verspannungsverteilung wird diese danach mittels Finite-Elemente Simulationen berechnet. Im Anschluss daran erfolgt ihre Charakterisierung hinsichtlich der nichtlinearen optischen Eigenschaften. Abschließend werden, ausgehend von den zuvor gewonnen Erkenntnissen, die Ursachen der Frequenzverdopplungseffekte diskutiert.

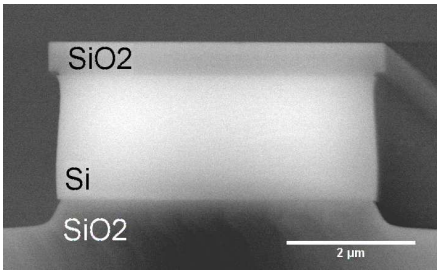
7.1 Herstellung verspannter Siliziumwellenleiter

Zur Beantwortung der oben aufgezeigten Fragestellungen wurde eine Reihe Proben entwickelt, deren Herstellung hier beschrieben wird. Es handelt sich hierbei um Streifenwellenleiter die auf dem SOI-Materialsystem[1] mit einer (001) orientierten Siliziumschicht basieren. Auf Grund des Brechungsindexkontrastes zwischen dem Wellenleiter und seiner Umgebung kommt es zu einer Führung des Lichts in den 2 μm hohen Wellenleitern bedingt durch interne Totalreflexion. Das 2 μm dicke Oxid, auf dem die Wellenleiter ruhen, sorgt dabei für eine optische Entkopplung vom Substrat.

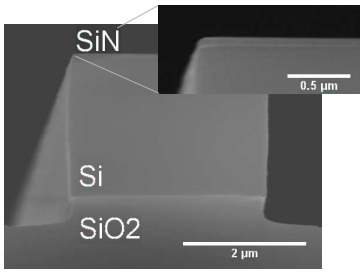
Herstellungsschritte

Die Verspannungen wurden zum einen durch eine thermische Oxidschicht, zum anderen auch durch verspannte Siliziumnitridschichten erzeugt. Die mit SiN verspannten Wellenleiter wurden

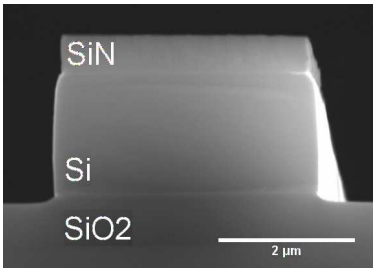
[1] SOI (*engl.: Silicon-on-insulator*) bezeichnet ein Dreischichtsystem bestehend aus einer dünnen Siliziumschicht („Devicelayer“) auf einer „vergrabenen“ Siliziumdioxid Schicht („BOX“, *engl.: burried oxide*). Beide befinden sich auf dem Substrat („Handle“).



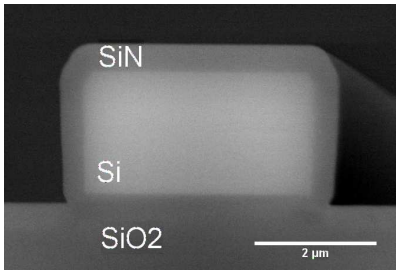
(a) Wellenleiter mit 500 nm SiO_2-Deckschicht



(b) Wellenleiter mit 50 nm SiN-Deckschicht



(c) Wellenleiter mit 500 nm SiN-Deckschicht



(d) Wellenleiter mit 500 nm SiN ummantelt

Abbildung 7.1: Elektronenmikroskopaufnahmen der verschiedenen untersuchten Probentypen.

dabei auf zwei verschiedene Weisen hergestellt. Im einen Fall wurde zuerst die Nitridschicht auf das Silizium aufgebracht und anschließend der Wellenleiter hergestellt. Im anderen Fall wurde zuerst der Wellenleiter geätzt und im Anschluss die verspannte Schicht aufgebracht. Damit ergeben sich zwei Arten Proben, eine komplett bedeckte Probe und eine Probe die nur auf dem Wellenleiter eine Deckschicht besitzt (Abb. 7.1 (c) und (d)). Im Fall der mit Oxid verspannten Wellenleiter wurde nur eine Art Probe mit einer Deckschicht hergestellt.

Um die Wellenleiter herzustellen, wurden die Proben zunächst mit einer 60 nm dicken Chromschicht als Hartmaske besputtert. Anschließend wurde eine 2 μm dicke Lackschicht aufgetragen, in die die Wellenleiter mittels Fotolithografie geschrieben wurden. Die bei der Lithografie verwendeten Parameter sind im Anhang A.1 zusammengefasst. Danach wurden die Proben wie bereits in Abschn. 6.1 beschrieben für 1 min mit Luftplasma behandelt, um unerwünschte Lackreste zu entfernen. Mit einem 40 s langen Naßätzschritt (Honeywell Chrome-Etch) wurde dann die Maske ins Chrom übertragen. Um die Lackmaske im Anschluss komplett zu entfernen wurden die Proben für 5 min bei 40°C in ein Ultraschallbad mit Remover (AR300-70) gegeben, mit Aceton und Isopropanol abgespült und für 5 min im Sauerstoffplasma gereinigt.

Nach der Vorbereitung wurden die Proben dann mit den in Abschn. 3.3 beschriebenen Ätzprozessen strukturiert. Die bereits mit SiN beschichteten Proben wurden dabei komplett in einem Schritt geätzt. Die mit Oxid beschichteten Proben wurden zuerst mit einem SiO_2- und anschließend mit einem Siliziumätzprozess strukturiert. Nach dem Ätzen wurden die Proben analog zu Abschn. 6.1 gereinigt und das Chrom entfernt. Die noch unbeschichteten Proben wurden dann im Anschluss mit einer Nitridschicht versehen. Die Deposition der Schichten mit Dicken von 50 nm bis 500 nm erfolgte mittels plasmagestützter Gasphasenabscheidung (PECVD) (vgl. Abschn. 3.1). Um die dabei erzeugten Verspannungen zu beeinflussen, wurde der Arbeitszyklus Φ des Prozesses (Gl. 3.4) variiert. Dazu wurde zuvor die Abhängigkeit der Verspannung von Φ für die verwendeten Prozessparameter empirisch bestimmt (Abb. 7.2).

Nach abgeschlossener Prozessierung wurden die 2 cm langen Wellenleiter zu 2 mm langen Stücken vereinzelt. Auf Grund der sich daraus ergebenden ungünstigen Abmessungen der einzelnen Chips von 20×2 mm wurde ein Brechverfahren entwickelt, mit dem sich auch bei sehr

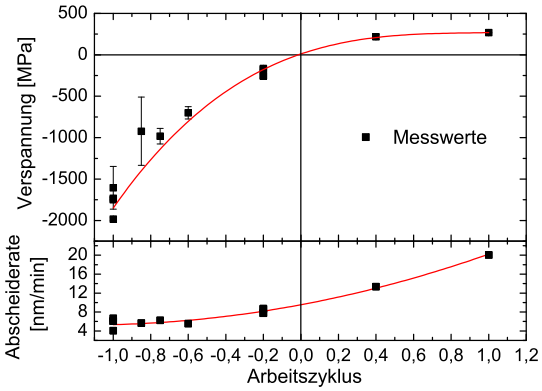


Abbildung 7.2: Schichtverspannungen und Abscheideraten des verwendeten PECVD-Prozesses in Abhängigkeit des Arbeitszykluses.

schmalen und langen Strukturen gerade Bruchkanten erzeugen lassen. Dabei wurde die Rückseite der Probe mit einem Schneidlaser leicht angeritzt und an den Kanten tiefer eingeschnitten. Mit einem speziellen Brechwerkzeug ließen sich dann die Proben entlang der vorgeschnittenen Kanten brechen. Die dabei entstehenden Kanten weisen eine hohe optische Qualität auf, wie die Messungen in Abschn. 7.2 belegen.

Nach dem Vereinzeln wurden die Proben abschließend mit Piranha-Lösung[2] sowie Aceton und Isopropanol gereinigt.

Probenübersicht

Eine Übersicht über die verschiedenen Probentypen ist in Abb. 7.1 dargestellt. Zur besseren Übersicht werden die Proben nun mit einer Bezeichnung versehen und ihre Bedeutung für das Experiment kurz erläutert.

Referenz: Als Referenz wurde eine Probe (`SiRef`) mit unbeschichteten Wellenleitern verwendet, auf die lediglich ein geringer Verspannungseinfluss durch die darunter liegende Oxidschicht ausgeübt wird.

Verspannungseinfluss: Zur Untersuchung des reinen Verspannungseinflusses auf die nichtlinearen optischen Eigenschaften der Wellenleiter wurde eine Probe (`SiO2`) thermisch oxidiert und erhielt dadurch eine 500 nm dicke, obere Oxidschicht ($\sigma_{\mathrm{Ox}} = -300$ MPa) (siehe Abb. 7.1 (a)).

Einfluss der Nitridschicht: Um den möglichen Einfluss einer aufgebrachten Siliziumnitridschicht auf den Frequenzverdopplungseffekt zu bestimmen, wurden die Wellenleiter einer Probe (`SiNO`) mit einer dünnen ca. 50 nm dicken quasi unverspannten Nitridschicht ($\sigma_{\mathrm{SiN}} = -7$ MPa) ummantelt (ähnlich Abb. 7.1 (b)). Der Verspannungseinfluss der Deckschicht kann dabei als vernachlässigbar angesehen werden.

Verspannungseinfluss der Nitridschicht: Um auch in den Nitrid-beschichteten Proben den Einfluss der Verspannung zu untersuchen wurden Proben mit unterschiedlich stark verspannten Deckschichten vermessen (vgl. Abb. 7.1 (b) und (c)). Die Deckschichten der Proben wiesen dabei die folgenden Parameter auf: `SiN1` ($\sigma_{\mathrm{SiN}} = 226$ MPa, $d_{\mathrm{SiN}} = 500$ nm), `SiN2` ($\sigma_{\mathrm{SiN}} = -880$ MPa, $d_{\mathrm{SiN}} = 50$ nm), `SiN3` ($\sigma_{\mathrm{SiN}} = 1,25$ GPa, $d_{\mathrm{SiN}} = 150$ nm)[3]. Außerdem wurde noch eine komplett ummantelte Probe `SiNC` (vgl. Abb. 7.1 (d)) mit einer Schichtdicke von 500 nm ($\sigma_{\mathrm{SiN}} = 226$ MPa) untersucht.

Die angegebenen Verspannungen wurden mit der Waferbiegemethode (Abschn. 4.1) an unstrukturierten Wafern bestimmt, die mit einer identischen Beschichtung versehen wurden. Da die untersuchten Proben im Rahmen dieser Arbeit selbst hergestellt wurden, ist es zunächst erforderlich, ihre linearen Transmissionseigenschaften zu charakterisieren. Daraus lassen sich die

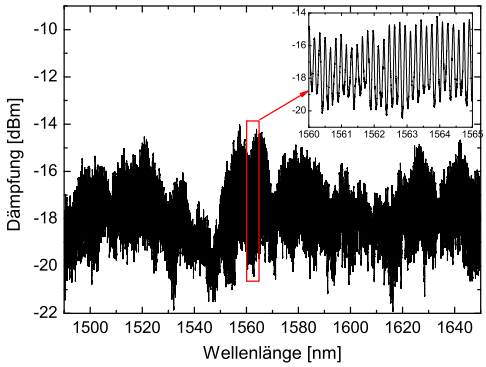
[2] Die Piranha-Lösung wird aus Wasserstoffperoxid (H_2O_2) und Schwefelsäure (H_2SO_4) im Verhältnis (1:4) hergestellt.

[3] Die Probe `SiN3` wurde von der Arbeitsgruppe Prof. Pavesis gefertigt.

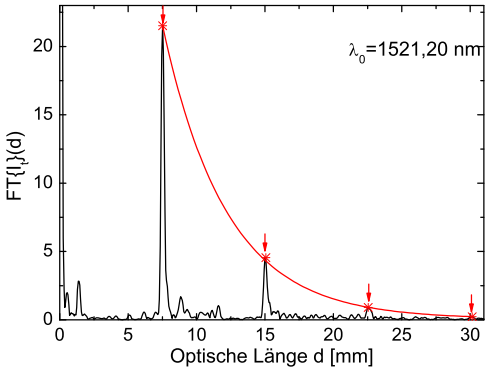
Propagationsverluste bestimmen und somit feststellen, ob die Proben qualitativ an die in Ref. [15] verwendeten Wellenleiter heranreichen und somit für die nichtlinearen Transmissionsexperimente geeignet sind.

7.2 Lineare Charakterisierung der Siliziumwellenleiter

Die Wellenleiter wurden in einem fasergekoppelten Transmissionsaufbau mit Hilfe eines durchstimmbaren Lasers in einem Wellenlängenbereich von $1490 - 1650$ nm mit einer Auflösung von 1 pm in TE-Polarisation vermessen. Eine schematische Beschreibung des Aufbaus befindet sich in Abschn. A.4. Abbildung 7.3 (a) zeigt exemplarisch das Transmissionsspektrum eines 4 μm breiten mit SiO_2 bedeckten Wellenleiters. Das Spektrum weist für gewisse Wellenlängenbereiche Transmissionseinbrüche auf. Diese lassen sich mit Modensprüngen erklären, bei denen Moden höherer Ordnung angeregt werden. Dies kann passieren, da die Abmessungen des Wellenleiters im Vergleich zur Anregungswellenlänge groß sind und somit Multimoden-Transmission erlauben. Die aus Abb. 7.3 (a) abzulesenden Dämpfungswerte erklären sich aus den Verlusten im Messaufbau, den Ein- und Auskoppelverlusten an den Endfacetten des Wellenleiters sowie dessen Propagationsverlusten im Innern. Die Verluste im Messaufbau lassen sich durch eine Transmissionsmessung ohne Probe abschätzen. Sie betragen im Mittel -10 dB. Zur Bestimmung der Propagationsverluste wurde die in Abschn. A.4 beschriebene Fouriermethode verwendet. Abbildung 7.3 (b) zeigt exemplarisch das fouriertransformierte Signal eines 25 nm breiten spektralen Abschnitts der Transmission um die zentrale Wellenlänge λ_0. Die Propagationsverluste wurden für die verschiedenen Wellenlängenbereiche zum einen aus dem Verhältnis der Peaks bei $L = 15$ mm und $L = 7,5$ mm berechnet sowie zusätzlich aus dem exponentiellen Abklingverhalten der Peaks. Zur Berechnung der Absorptionskoeffizienten entsprechend Gl. A.11 bzw. A.16 wurden $R = 0,3$ und $L = 2,18$ mm verwendet. Die resultierenden Propagationsverluste sind für die jeweiligen Wellenlängenbereiche in Abb. 7.4 dargestellt. Aus ihnen lässt sich ein mittlerer Absorptionskoeffizient von $\alpha = 0,4$ dB/mm bestimmen. Die auftretenden Schwankungen der Werte lassen sich mit den zuvor erwähnten Modensprüngen erklären. Diese spiegeln sich ebenfalls mit einem signifikanten



(a) Transmissionsspektrum eines 4 μm breiten, mit SiO_2 beschichteten Wellenleiters. Im Inset lassen sich die Fabry-Pérot Oszillationen erkennen.



(b) Fouriertransformiertes Transmissionssignal eines 25 nm breiten um λ_0 konzentrierten Wellenlängenbereichs.

Abbildung 7.3: Analyse der Propagationsverluste am Beispiel eines Wellenleiters 4 μm breiten Wellenleiters. Diese lassen sich aus dem Verhältnis der Peakhöhen (Pfeile in (b)) bzw. dem exponentiellen Abklingverhalten der Fabry-Pérot Resonanzen bestimmen.

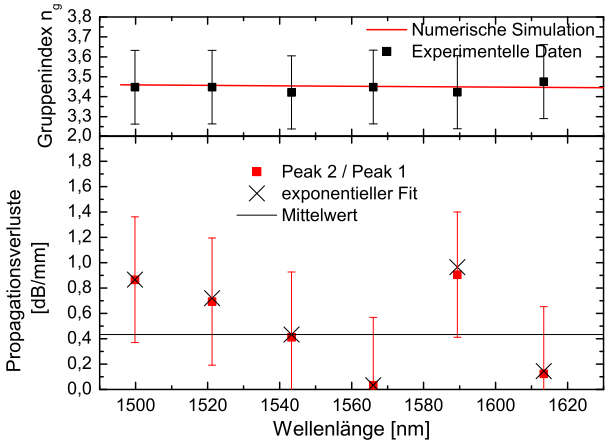


Abbildung 7.4: Verteilung der aus dem Transmissionsspektrum (Abb. 7.3 (a)) bestimmten Propagationsverluste. Die Schwankungen der ermittelten Werte lassen sich mit Modensprüngen während der Messung erklären. Oben ist der Vergleich zwischen dem experimentell bestimmten Gruppenindex ($n_g = L_{Opt}/L$) und dem numerisch berechneten dargestellt. Diese zeigen eine gute Übereinstimmung. Das kann als Indikator für eine korrekt bestimmte Wellenleiterlänge angesehen werden.

Beitrag im Messfehler wider[4]. Allgemein sind die ermittelten Propagationsverluste höher als die in Ref. [15] ($1-3$ dB/cm) angegebenen. Vor allem die komplett ummantelten Proben weisen hohe Verluste von $\alpha = 1-2$ dB/mm auf. Dies liegt vermutlich daran, dass der Brechungsindexkontrast zwischen Wellenleiter und Umgebung geringer ist und das Licht leicht in der Nitridschicht neben den Wellenleitern geführt werden kann. Da die Wellenleiter jedoch nur ca. 2 mm lang sind, haben die Propagationsverluste keinen allzu starken Einfluss auf die Gesamtdämpfung des Signals[5].

Wesentlich größere Verluste treten bei der Ein- und Auskopplung des Lichts auf. Sie setzen sich aus den Gesamtverlusten abzüglich der Propagationsverluste und der Verluste im Messaufbau zusammen und betragen hier jeweils $-3,2$ dB. Hier zeigt sich die Qualität der in Abschn. 7.1 beschriebenen Brechmethode. Die Koppelverluste sind deutlich geringer als die der in Ref. [15] verwendeten Proben (ca. -7 dB/Facette) und liegen nur knapp über dem Wert der minimalen Koppelverluste von -3 dB („Fresnel reflection loss“). Die entwickelte Vereinzelungsmethode ist somit sehr gut geeignet kurze Wellenleiter mit Facetten von hoher optischer Qualität herzustellen. Insgesamt sind die an den Wellenleitern auftretenden Verluste gering genug, um die Proben für die nichtlinearen Transmissionsmessungen zu verwenden.

7.3 Numerische Simulation verspannter Siliziumwellenleiter

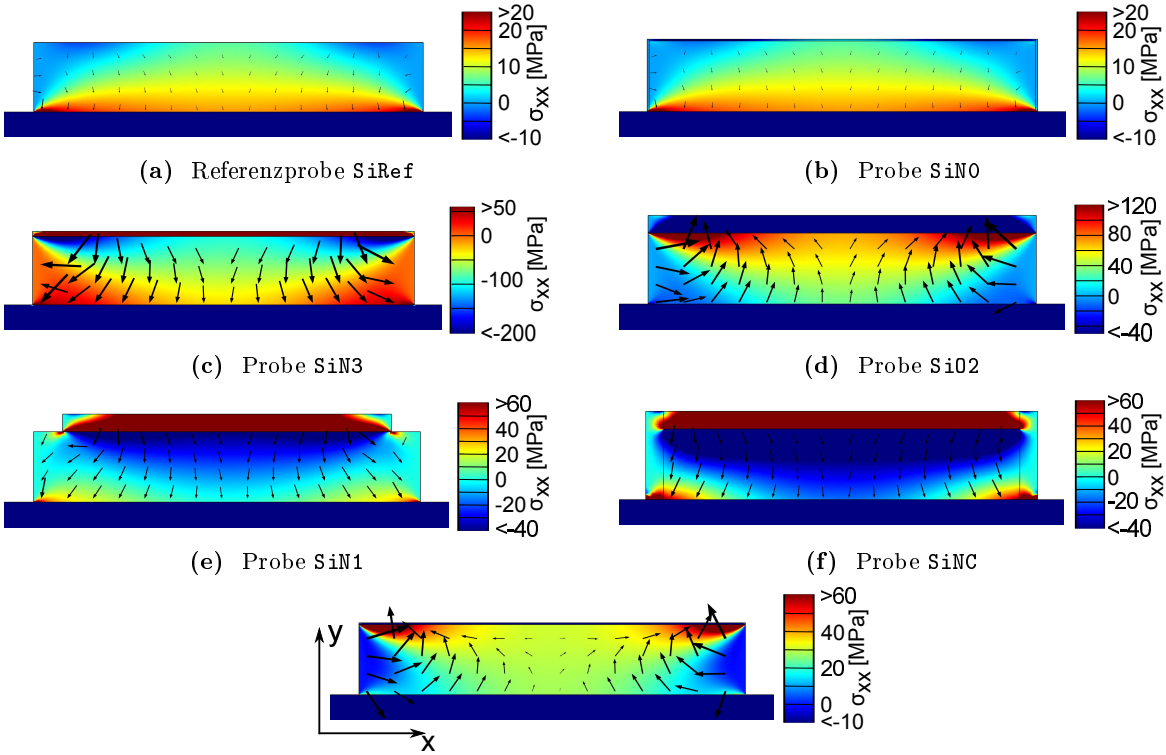
Um die untersuchten Proben hinsichtlich ihrer nichtlinearen Eigenschaften vergleichen zu können, ist es wichtig, auch ihre Verspannungseigenschaften zu bestimmen. Da während dieser Arbeit nicht die Möglichkeit bestand, die Verspannung in den einzelnen Wellenleitern direkt zu vermessen[6], wurde deren Verteilung im Wellenleiter numerisch untersucht. Dazu wurde das bewährte Verspannungsmodell aus Abschn. 6.2 an die hier verwendeten Parameter angepasst. Abbildung 7.5 gibt einen Überblick über die Verspannungsverteilung in den verschiedenen untersuchten Proben. Die Abmessungen der Wellenleiterstrukturen entsprechen denen der vermessenen 10 μm breiten und 2 μm hohen Strukturen.

Ein Vergleich der Verspannungen in x-Richtung in der Referenzprobe `SiRef` (Abb. 7.5 (a)) und Probe `SiNO` (Abb. 7.5 (b)) bestätigt die anfängliche Annahme, dass die geringe Verspannung der aufgebrachten Schicht keinen nennenswerten Einfluss auf die Verspannungsverteilung im Silizium hat. Diese wird lediglich durch die im darunterliegenden Oxid vorherrschende Verspannung ($\sigma = -300$ MPa) beeinflusst. Diese Verspannungen, die durch den Herstellungsprozess der SOI-Wafer bedingt sind, wurden auch in Ref. [107] mit Mikro-Raman Messungen im Silizium

[4] Eine ausführliche Herleitung des Fehlers des Absorptionskoeffizienten findet sich im Anhang A.4.

[5] Ein Vergleich der Gesamtpropagationsverluste der hier untersuchten Wellenleiter mit den in Ref. [15] untersuchten, 10 mm langen Wellenleitern ergibt in beiden Fällen Werte in der gleichen Größenordnung.

[6] Die Anwendung der HRXRD-Methode (Abschn. 4.1) eignet sich hier nicht.



(a) Referenzprobe `SiRef` (b) Probe `SiN0`

(c) Probe `SiN3` (d) Probe `SiO2`

(e) Probe `SiN1` (f) Probe `SiNC`

(g) Probe `SiN2`

Abbildung 7.5: Simulierte Verspannungsverteilung über den Querschnitt der verschiedenen Wellenleiter mit einer Breite von 10 μm. Zusätzlich ist der daraus resultierende Verspannungsgradient dargestellt (schwarze Pfeile).

nachgewiesen. Die qualitative Verteilung der Verspannung stimmt dabei mit der hier berechneten überein.

Wie bereits zuvor erwähnt, ist die Verspannung allein aus Symmetriegründen nicht ausschlaggebend für die induzierte Nichtlinearität, sondern vor allem der Grad an Inhomogenität in ihrer Verteilung. Aus diesem Grund ist der Gradient der Verspannung (Pfeile in Abb. 7.5) eine geeignetere Vergleichsgröße. Da die Verspannungen in `SiRef` und `SiN0` nur sehr gering sind, ist der resultierende Gradient ebenfalls klein.

Anders verhält es sich hingegen bei der in Abb. 7.5 (c) dargestellten Verspannungsverteilung. Auf Grund der größeren Dicke und höheren Verspannung der Deckschicht wird der Wellenleiter hier wesentlich stärker verzerrt. Dies ist vor allem in den äußeren Bereichen zu sehen, wo die Verspannung in der aufgebrachten Schicht besser relaxieren kann. In der Mitte des Wellenleiters ist der Gradient geringer. Dies liegt zum einen daran, dass die Verspannungen hier eher homogen in x-Richtung verteilt sind. Außerdem kann der Mittelteil der Deckschicht nicht so gut relaxieren, da er von den Rändern der Schicht fixiert wird. Für noch breitere Wellenleiter nimmt die ins Silizium induzierte Verspannung weiter ab und nähert sich damit dem Grenzfall einer unstrukturierten Probe, in der das darunter liegende Material kaum verspannt wird (vgl. Abschn. 4.1). Umgekehrt weisen schmalere Wellenleiter einen höheren Verspannungsgradienten auf.

Vergleicht man die Proben `SiN3` und `SiO2` (Abb. 7.5 (d)), lässt sich erkennen, dass die Gradienten in entgegengesetzte Richtungen weisen. Dies ist durch die unterschiedlichen Vorzeichen der aufgebrachten Verspannungen bedingt. Im Fall der Probe `SiO2` ist die Deckschicht auf Grund des vergrößerten molaren Volumens des Oxids komprimiert, was zu einem Auseinanderziehen des Siliziums führt. In Probe `SiN3` hingegen steht die Deckschicht unter Zugspannung, was ei-

ne kompressive Verspannung im Silizium hervorruft. Der resultierende Gradient wird hierbei noch vergrößert, da die untere Oxidschicht an der Unterseite des Wellenleiters eine Zugspannung induziert.

Um ein Maß für die Gesamtstärke des Verspannungsgradienten in einer Probe zu erhalten, wird der Gesamtgradient Σ definiert, als Integral über alle lokalen Verspannungsgradienten innerhalb eines Probenquerschnitts[7]. Da der genaue Zusammenhang zwischen den lokalen Verspannungsgradienten und der resultierenden Nichtlinearität noch nicht bekannt ist, wurde hier vereinfachend davon ausgegangen, dass lediglich der Betrag des Gradienten einen Einfluss auf das induzierte $\chi^{(2)}$ hat. Daher wurde Σ wie folgt berechnet:

$$\Sigma = \int \left|\frac{\mathrm{d}\,\sigma_{\mathrm{xx}}}{\mathrm{dx}}\right| + \left|\frac{\mathrm{d}\,\sigma_{\mathrm{xx}}}{\mathrm{dy}}\right| + \left|\frac{\mathrm{d}\,\sigma_{\mathrm{yy}}}{\mathrm{dx}}\right| + \left|\frac{\mathrm{d}\,\sigma_{\mathrm{yy}}}{\mathrm{dy}}\right| + \left|\frac{\mathrm{d}\,\sigma_{\mathrm{xy}}}{\mathrm{dx}}\right| + \left|\frac{\mathrm{d}\,\sigma_{\mathrm{xy}}}{\mathrm{dy}}\right| \mathrm{dA}, \tag{7.1}$$

σ_{xx} und σ_{yy} entsprechen dabei den Verspannungskomponenten in die jeweilige Richtung, σ_{xy} entspricht der auftretenden Scherspannung. Da der Wellenleiter in z-Richtung (Propagationsrichtung) als unendlich ausgedehnt angenommen werden kann und somit analog zu einer unstrukturierten Probe in dieser Richtung keine Verzerrungen ins Silizium induziert werden, lässt sich das Modell eines ebenen Verzerrungszustandes verwenden [99]. Demzufolge sind alle Verspannungskomponenten mit z-Anteilen gleich Null und müssen in Gl. 7.1 nicht berücksichtigt werden.

Die rechte Spalte von Tabelle 7.2 gibt eine Übersicht über die Gesamtgradienten der untersuchten Proben. Dort zeigt ein Vergleich der Proben `SiN1` und `SiNC` (Abb. 7.5 (e) und (f)), dass eine Komplettummantlung des Wellenleiters, wie sie in Ref. [14] verwendet wurde, keine Erhöhung des Gesamtgradienten hervorruft. Im vorliegenden Fall ist der Gradient sogar deutlich kleiner, was sich damit erklären lässt, dass die zusätzliche Beschichtung zu einer gleichmäßigeren Verteilung der Verspannungen in der Probe führt.

Die Analyse des Verspannungsgradienten in Probe `SiN2` zeigt, dass diese trotz der geringen Dicke der Nitridschicht eine stark inhomogene Verzerrung aufweist. Der Gradient der Verspannung ist hier vor allem in den Randbereichen besonders stark, da die hohen Verspannungen im Nitrid dort besser relaxieren können. Die Tatsache, dass der Gesamtgradient Σ ungefähr genauso groß ist wie der der Probe `SiN1`, macht diese Proben für einen Vergleich ihrer nichtlinearen Eigenschaften interessant. Da die Verspannungen in beiden Proben unterschiedliche Vorzeichen besitzen und eine unterschiedliche Verteilung aufweisen, lässt sich untersuchen, ob die Richtung des Verspannungsgradienten einen Einfluss auf die induzierte Nichtlinearität besitzt.

7.4 Nichtlineare Transmissionsmessungen

Die Transmissionsmessungen an den in Kapitel 7 untersuchten Siliziumwellenleitern erfolgte in Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe von Prof. Pavesi an der Universität von Trient (Italien).

Das Lasersystem, mit dem der verwendete Anregungsstrahl erzeugt wird, ähnelt dem in Abschn. 4.2 beschriebenen. Ausgangspunkt ist ein Titan-Saphir Laser der Firma Spectra Physics („Tsunami“) mit einer Repetitionsrate von 80 MHz, einer temporalen Pulsbreite von $\Delta\tau = 40$ fs und einer Wellenlänge von $\lambda = 800$ nm. Die Leistung des Anregungsstrahl wird mit Hilfe eines regenerativen Verstärkers (Spectra Physics „Spitfire“) erhöht, wobei sich die Repetitionsrate auf 1 kHz reduziert. Mittels eines optisch-parametrischen Verstärkers („TOPAS C“ von Light Conversion) lässt sich nun eine Anregungswellenlänge im Wellenlängenbereich von $\lambda = 1100 - 2600$ nm einstellen. Für Anregungswellenlängen im Bereich von $\lambda = 2100$ nm ergeben sich dabei mittlere Strahlintensitäten von $\bar{P} \approx 150$ mW, bei einer Pulsdauer von $\Delta\tau = 100$ fs und einer Repetitionsrate von 1 kHz.

[7] Da hier Proben mit gleichem Querschnitt verglichen wurden, wurde auf eine Division des Gesamtgradienten durch die Querschnittsfläche verzichtet.

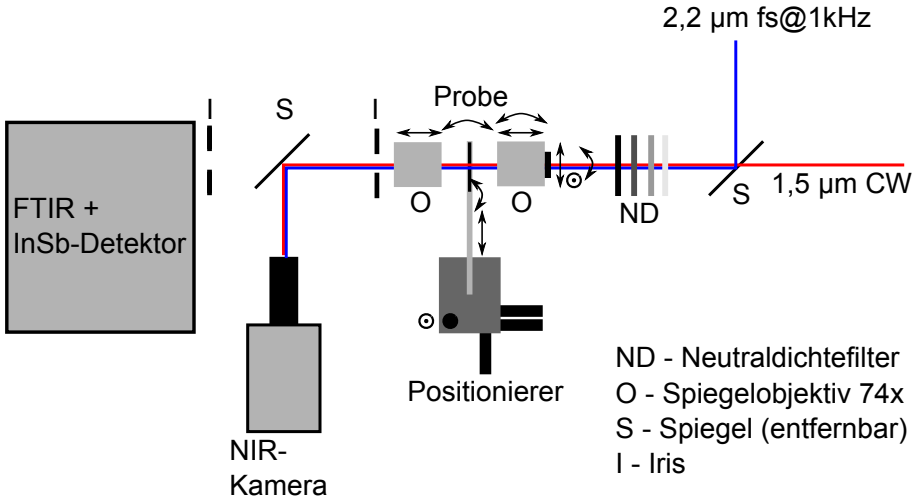
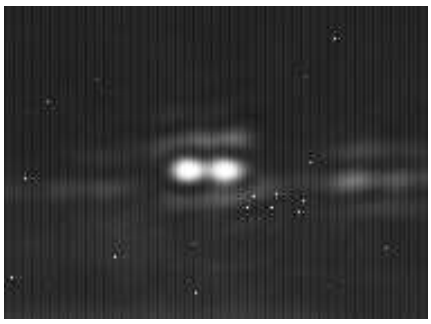


Abbildung 7.6: Skizze des Aufbaus zur Messung von Frequenzverdopplungseffekten in Wellenleitern in Justagekonfiguration. Die Justage des Ein- bzw. Auskoppelobjektivs erfogt zunächst mit Hilfe einer Laserdiode (λ= 1,5 μm), wobei der auf der Probenrückseite austretende Strahl mit einer Infrarotkamera beobachtet werden kann. Das Spiegelobjektiv auf der Einkoppelseite lässt sich dabei in alle drei Raumrichtungen verschieben, sowie kippen und drehen. Das Objektiv auf der Auskoppelseite ist fest justiert, damit der weitere Strahlengang in den Detektor nicht verstellt wird. Lediglich die Position des Fokus ist fest. Alle anderen zur Justage notwendigen Bewegungen können mit der Probe ausgeführt werden. Die Feinjustage erfolgt anschließend mit dem Strahl des Pumplasers.

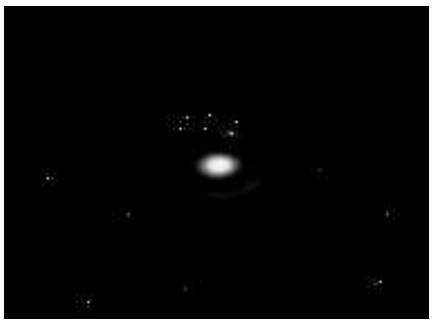
Justage

Um nun die nichtlinearen Eigenschaften der Siliziumwellenleiter zu untersuchen, muss zunächst der Anregungsstrahl in den Wellenleiter eingekoppelt werden. Das grundlegende Prinzip besteht dabei darin, den Anregungsstrahl durch die Probe und die Objektive zu leiten, ohne bei der Justage den Strahlengang hinter dem Auskoppelobjektiv zu ändern. Dies ist erforderlich, um stets gleiche Eintrittsbedingungen in das Spektrometer gewährleisten zu können. Zur Ein- bzw. Auskopplung des Lichts werden goldbeschichtete Spiegelobjektive mit einer 74-fachen Vergrößerung verwendet, die zunächst einjustiert werden müssen. Die zur Justage verwendete Konfiguration des Aufbaus ist in Abb. 7.6 dargestellt.

Zur Vorjustage des Messaufbaus wird eine Laserdiode mit einer Wellenlänge von $\lambda = 1,5\ \mu$m verwendet. Ihr Strahl wird durch das Einkoppelobjektiv auf die Probe geleitet und das auf der Rückseite der Probe austretende Licht über einen entfernbaren Spiegel auf eine Infrarotkamera mit variablem Fokus gelenkt. Da, wie erwähnt, der ausgekoppelte Strahl später unter stets gleichen Bedingungen in den Detektor geleitet werden soll, lässt sich am Auskoppelobjektiv lediglich die Position des Fokus verschieben. Stattdessen werden die Probe und das Einkoppelobjektiv mit Hilfe von Mikrometerschrauben passend justiert. Dazu lässt sich der Positionierarm, auf dem die Probe ruht, in der Höhe und senkrecht zur Ausrichtung der Wellenleiter verschieben, was die Einkopplung in verschiedene Wellenleiter ermöglicht. Zusätzlich lässt sich die Probe kippen und drehen, um den optimalen Winkel zum Auskoppelobjektiv einzustellen. Das Einkoppelobjektiv, das wie sein Gegenstück mit einem sechs-achsigen Positioniersystem (Thorlabs „Nanomax“) justiert wird, lässt sich in alle drei Raumrichtungen verschieben. Zusätzlich kann das Objektiv analog zur Probe gedreht und gekippt werden. Die Optimierung der Einkopplung erfolgt iterativ durch Anpassung der zur Verfügung stehenden Parameter, wobei sich das Resultat mit Hilfe des Kamerabildes, auf dem die Rückseite der Probe abgebildet ist, zeitgleich überprüfen lässt. Da bei verbesserter Kopplung das Bild auf der Kamera leicht übersättigt, lässt sich der Anregungsstrahl mit Hilfe reflektiver Neutraldichtefilter schrittweise abschwächen. Die Einkopplung des



(a) Beispiel eines schlecht einjustierten Anregungsstrahls. Es wird noch Licht durch das Substrat sowie die angrenzenden SiN-Schichten geleitet. Außerdem wird nicht die Grundmode angeregt.



(b) Beispiel eines optimal einjustierten Anregungsstrahls. Es wird lediglich Licht von der im Wellenleiter angeregten Grundmode detektiert. Bei weißen Punkten handelt es sich um defekte Pixel der Kamera.

Abbildung 7.7: Beispiele für gut und schlecht justierte Wellenleiter

Justagestrahls wird solange optimiert, bis lediglich die Grundmode eines einzigen Wellenleiters angeregt wird (siehe Abb.7.7). Zusätzlich lässt sich der Bereich des ausgekoppelten Lichts durch eine Iris auf der Rückseite des Auskoppelobjektivs beschneiden, um unerwünschte Beiträge von anderen Wellenleitern bzw. dem Substrat auszuschließen. Dies war jedoch für die hier untersuchten Proben nicht erforderlich, da auch für sehr hohe Strahlintensitäten kein Licht außerhalb des angeregten Wellenleiters registriert werden konnte. Nach erfolgreicher Vorjustage wird der Anregungsstrahl des fs-Lasers über einen entfernbaren Spiegel eingekoppelt und mit Hilfe eines IR-Targets auf das Einkoppelobjektiv justiert. Da die Leistung des gepulsten Lasers wesentlich höher ist als die des Justagelasers, lässt sich nur ein stark abgeschwächter Strahl zur Justage verwenden. Da die IR-Kamera für den nahen Infrarotbereich ausgelegt ist, wird zunächst eine Pumpwellenlänge von λ=1,7 μm eingestellt und diese dann schrittweise erhöht.

Nach erfolgter Feinjustage wird der Umlenkspiegel hinter dem Auskoppelobjektiv entfernt, so dass der ausgekoppelte Strahl auf den Eingang des Spektrometers trifft. Der korrekte Strahlengang lässt sich dabei mit Hilfe einer verschließbaren Iris vor der Eintrittsöffnung überprüfen. Bei dem Spektrometer handelt es sich um ein Fourier-Transformations-Infrarotspektrometer (FTIR) der Firma Bruker („Vertex 70v“) mit einem angeschlossenen Indium-Antimon (InSb) Detektor, der sowohl für die Detektion des frequenzverdoppelten Signals als auch des Anregungssignals geeignet ist. Das in das Spektrometer eingestrahlte Licht wird über einen parabolischen Eingangsspiegel durch das Interferometer zum Detektor geleitet. Um einen optimalen Strahlengang im Spektrometer zu gewährleisten, ist es erforderlich, den Eingangsspiegel möglichst homogen zu beleuchten. Dazu wird ein Teleskop in den Strahlengang zwischen Auskoppelobjektiv und Eintrittsöffnung gebracht (siehe Abb. 7.8), das für eine Anpassung der Blendenzahlen von Auskoppelobjektiv und Eingangsspiegel sorgt. Zur optimalen Positionierung des Teleskops wird während der Justage das Signal der Anregungswellenlänge gemessen und auf den maximal erreichbaren Wert optimiert. Nach abgeschlossener Justage des Aufbaus erfolgt die gleichzeitige Messung von Anregungs- und frequenzverdoppeltem Signal im FTIR, wobei sich die Spektren aus einer Mittelung über 1000 Einzelmessungen zusammensetzen.

Messergebnisse

Die Untersuchung der Wellenleiter erfolgte mit einem TE-polarisierten (P-Polarisation) Anregungsstrahl in der Regel bei einer Wellenlänge von 2,2 μm. Auf Grund des breiten Detektionsbereichs von FT-IR Spektrometer und Detektor konnten dabei das transmittierte Anregungssignal

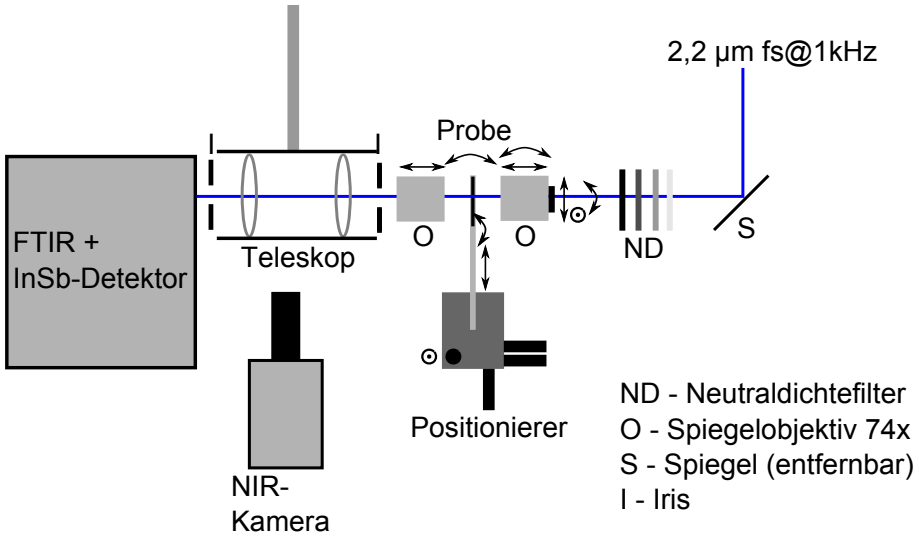


Abbildung 7.8: Skizze des Aufbaus zur Messung von Frequenzverdopplungseffekten in Wellenleitern in Messkonfiguration. Das aus dem Wellenleiter austretende Licht wird mit Hilfe eines Teleskops in das Spektrometer (BRUKER 70v) eingekoppelt. Das Teleskop dient der Anpassung der Blendenzahlen des Auskoppelobjektivs und des Parabolspiegels im Spektrometer und sorgt damit effektiv für eine Verstärkung des detektierten Signals. Dieses wird mittels Fourier-Transformations-Infrarotspektrometer (FTIR) und angeschlossenem Indium-Antimon (InSb) Detektor gemessen.

und das dazugehörige frequenzverdoppelte Signal bei einer Wellenlänge von 1,1 μm gleichzeitig beobachtet werden. Abbildung 7.9 zeigt beispielhaft das Spektrum eines 10 μm breiten Wellenleiters der Probe `SiO2`, aus dem sich die Konversionseffizienz des Wellenleiters als Maß der Nichtlinearität bestimmen lässt. Durch Variation der Anregungswellenlänge lässt sich der für den Frequenzverdopplungseffekt typische lineare Zusammenhang zwischen Anregungs- und frequenzverdoppelter Wellenlänge beobachten (Abb. 7.9, Inset II). Dabei sind die Abweichungen von der Geraden $f(x) = 0,5 \cdot x$ im Wesentlichen durch die beschränkte Auflösung des Spektrometers (ca. 3 nm) bedingt.

Da eine exakte Bestimmung der Anregungsintensität im Wellenleiter nicht möglich war, wurde anstelle eines absoluten $\chi^{(2)}$-Wertes die relative Konversionseffizienz η bestimmt, als Maß für die Effizienz der Umwandlung des Anregungslichts in frequenzverdoppeltes Licht. Dabei wurde auf Grund der relativ geringen zu erwartenden Nichtlinearität angenommen, dass der An-

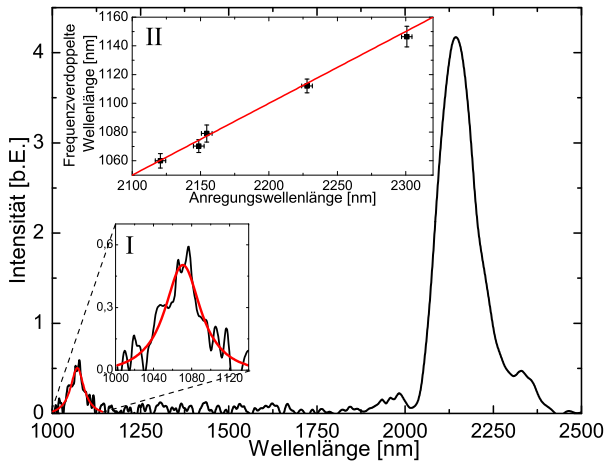


Abbildung 7.9: Experimentell bestimmtes Transmissionsspektrum eines 10 μm breiten Wellenleiters der Probe `SiO2`. Zu sehen sind die Transmissionspeaks bei der Anregungswellenlänge ($\lambda = 2,14$ μm) sowie der Wellenlänge ($\lambda = 1,07$ μm) des frequenzverdoppelten Signals. Um den Fehler bei der Bestimmung der Intensität des frequenzverdoppelten Signals zu minimieren wurde eine Lorentzkurve an das Spektrum angepasst (Inset I). Inset II zeigt die lineare Abhängigkeit zwischen beiden Wellenlängen als charakteristisches Merkmal des Frequenzverdopplungseffekts.

regungsstrahl durch den Konversionsprozess nicht gedämpft wird (*engl.: pump depletion*). Die Konversionseffizienz bestimmt sich somit aus dem Verhältnis der transmittierten Intensität des frequenzverdoppelten Signals zur Intensität der Anregungswelle. Dies erlaubt einen Vergleich der Nichtlinearitäten der verschiedenen untersuchten Wellenleiter. Da der Effekt der Frequenzverdopplung quadratisch von der Anregungsintensität abhängt, wurde diese bei der Berechnung der Konversionseffizienz ebenfalls quadratisch berücksichtigt. Damit ergibt sich als relative Konversionseffizienz

$$\eta = \frac{I_{2\omega}}{I_{\omega}^2} \ . \tag{7.2}$$

Bei den Intensitäten in Gl. 7.2 wurde der verstärkende Einfluss des Teleskops herausgerechnet[8]. Da das frequenzverdoppelte Signal teilweise sehr schwach war, wurde zur besseren Analyse des Signals eine Lorentzfunktion an den gemessenen Peak angepasst (siehe Abb. 7.9 Inset I) und daraus dessen spektrale Position sowie Höhe bestimmt.

Bei der Untersuchung der Konversionseffizienz der verschiedenen Proben hinsichtlich des Einflusses der Probenbreite hat sich herausgestellt, dass die Konversionseffizienz der breitesten 10 μm breiten Wellenleiter größer ist als die der schmaleren Wellenleiter (vgl. Tabelle 7.1). Dies steht in Übereinstimmung mit den Untersuchungen in Ref. [15], wobei die Ursache hierfür bisher unklar war. Eine möglichen Ursache für dieses Verhalten wird in Abschn. 7.5 diskutiert. Zur Untersuchung des Verspannungseinflusses bzw. des Einflusses der aufgebrachten Nitridschicht wurden im Folgenden die Effizienzen der 10 μm breiten Wellenleiter verglichen. Diese sind zusammen mit dem berechneten Verspannungsgradienten (siehe Abschn. 7.3) in Tabelle 7.2 zusammengefasst. Die angegebenen Fehler entsprechen dabei der Standardabweichung, die sich aus den Messungen an den verschiedenen gleichartigen Wellenleitern[9] ergibt.

Um zumindest eine grobe Abschätzung für die hier beobachteten Nichtlinearitäten anzugeben, lässt sich die Konversionseffizienz der Probe `SiN3` mit dem $\chi^{(2)}$ einer Probe in Ref. [15] gleich setzen, welche die gleichen Parameter besitzt[10]. Für die Probe `SiN3` ergibt sich $\eta = 1,2 \stackrel{\wedge}{=} \chi^{(2)} \approx 40$ pm/V. Die Nichtlinearität würde damit in der gleichen Größenordnung wie $LiNbO_3$ ($\chi^{(2)}_{322} = -60$ pm/V [21]) liegen. Der Vergleich ist jedoch sehr ungenau, da der Vergleichswert in Ref. [15] einen Fehler von 75 % aufweist. Außerdem wurde bei der Bestimmung des $\chi^{(2)}$ nur die Phasenbeziehung zwischen den Grundmoden der Anregung und des 2ω-Feldes berücksichtigt. Wie sich später zeigen wird, ist diese Annahme vermutlich nicht korrekt. Für die anderen Proben sind die aus dem Vergleich mit Probe `SiN3` bestimmten $\chi^{(2)}$-Werte in Tabelle 7.2 zusammengefasst.

Tabelle 7.1: Vergleich der Konversionseffizienz η der verschiedenen Wellenleiter für die Breiten 4 μm und 10 μm

Probe	`SiO2`	`SiNO`	`SiN1`	`SiN2`	`SiNC`
Konversionseffizienz η $[\frac{\text{(b.E.)}}{\text{(b.E.)}^2}]$ eines 10 μm breiten Wellenleiters	$0,5 \pm 0,2$	$0,6 \pm 0,2$	$1,0 \pm 0,3$	$1,0 \pm 0,1$	$0,8 \pm 0,1$
Konversionseffizienz η $[\frac{\text{(b.E.)}}{\text{(b.E.)}^2}]$ eines 4 μm breiten Wellenleiters	$0,4 \pm 0,1$	$0,4 \pm 0,2$	$0,7 \pm 0,1$	$0,8 \pm 0,1$	$0,6 \pm 0,2$

[8] Durch den Einbau des Teleskops zwischen Probe und Spektrometer (siehe Abschn. 7.4) wird das Licht effizienter ins Spektrometer eingekoppelt, was einer Verstärkung des Signals gleichkommt. Auf Grund von Ungenauigkeiten beim Wiedereinbau des Teleskops nach einem Probenwechsel kann es zu Schwankungen des Verstärkungsfaktors kommen. Um die Messungen vergleichbar zu halten, wurden für die Bestimmung der Konversionseffizienzen η die in Gl. 7.2 verwendeten Intensitäten durch den jeweiligen Verstärkungsfaktor dividiert.

[9] Je nach Zustand der Probe wurden drei bis sechs Wellenleiter mit identischen Parametern untersucht.

[10] Beide Proben besitzen eine vergleichbare Beschichtung sowie Probenquerschnitt. Allerdings ist die Vergleichsprobe 1 cm lang und wurde mit einem ns-Laser vermessen.

Tabelle 7.2: Übersicht über die Konversionseffizienzen η und die Gesamtverspannungsgradienten Σ der verschiedenen 10 μm breiten Wellenleiter. Die Werte für $\chi^{(2)}$ stellen eine grobe Abschätzung dar.

Probe	aufgebrachte Verspannung [MPa]	Schicht-dicke [nm]	Konversionseffizienz η $[\frac{\text{(b.E.)}}{\text{(b.E.)}^2}]$	$\chi^{(2)}$ $[\frac{\text{pm}}{\text{V}}]$	Gesamt-gradient Σ [N/m]
SiRef	-	-	$< 0,3 \pm 0,1$	<10	436
SiO2	-300	500	$0,5 \pm 0,2$	17	3197
SiN0	-7	50	$0,6 \pm 0,2$	20	383
SiN1	226	500	$1,0 \pm 0,3$	33	1535
SiN2	-880	50	$1,0 \pm 0,1$	33	1559
SiN3	1250	150	$1,2 \pm 0,3$	40	4504
SiNC	226	500	$0,8 \pm 0,1$	27	821

7.5 Diskussion der Frequenzverdopplungseffekte

Im Folgenden sollen nun die experimentell bestimmten Konversionseffizienzen η der verschiedenen Proben mit deren numerisch berechneten mechanischen Eigenschaften verglichen und die daraus folgenden Konsequenzen diskutiert werden.

Einfluss einer verspannten Oxidschicht

Da bei einer thermisch aufgebrachten Oxidschicht, anders als beim Nitrid, keine signifikanten Frequenzverdopplungseffekte im Volumen bzw. an deren Grenzfläche beobachtet wurden, eignet sich ein Vergleich der Konversionseffizienzen der Referenzprobe SiRef und der Probe SiO2, um eine Aussage über die Verspannungsabhängigkeit der Nichtlinearität $\chi^{(2)}$ treffen zu können. Da die Probe SiRef nur ein schwaches frequenzverdoppeltes Signal liefert, lässt sich hier nur eine obere Grenze für die Konversionseffizienz bestimmen. Als Quelle für das Signal lassen sich die Seitenflächen des Wellenleiters ausmachen, da dort die Kristallsymmetrie des Siliziums gebrochen ist. Wie in Abschn. 2.2 erwähnt, hängt das dort generierte Signal vom Abschluss der Grenzflächen ab. Im Fall von Probe SiRef sind alle äußeren Flächen mit einer nativen Oxidschicht bedeckt, womit der Einfluss der Probenoberfläche vergleichbar ist mit dem in Probe SiO2, da auch hier alle Flächen Oxid-Silizium Grenzflächen sind. Da auch die durch das Substrat (BOX) eingebrachten schwachen Verspannungen in beiden Proben gleich sind, werden Änderungen des frequenzverdoppelten Signals allein durch die vom aufgebrachten Oxid induzierten Verspannungen beeinflusst. Der Vergleich der Konversionseffizienzen in Abhängigkeit vom Gesamtverspannungsgradienten Σ ist in Abb. 7.10 zusammen mit den anderen Daten aus Tabelle 7.2 grafisch dargestellt. Dieser macht eine Erhöhung der Konversionseffizienz sichtbar, die dem signifikanten Verspannungsgradienten in Probe SiO2 zugeordnet werden kann. Damit konnte gezeigt werden, dass durch die in den Wellenleiter induzierte Verspannung tatsächlich ein Volumen-$\chi^{(2)}$ erzeugt wird und dieser Effekt auch in anderen Materialsystemen als in Nitrid-Silizium zu beobachten ist.

Einfluss einer verspannten Siliziumnitridschicht

Um zu evaluieren, ob der in Ref. [14] und [15] berichtete Verstärkungseffekt des $\chi^{(2)}$ allein auf der Verspannung beruht, werden nun die nitridbeschichteten Proben zur Auswertung hinzugezogen.

Ein Vergleich von Probe SiRef und der mit einer dünnen unverspannten SiN-Schicht versehenen Probe SiN0 ergibt bereits einen deutlichen Unterschied der Konversionseffizienz (Abb. 7.10). Diese erhöht sich von $\eta < 0,3$ um ungefähr den Faktor 2 auf $\eta = 0,6$ für die Probe SiN0. Da

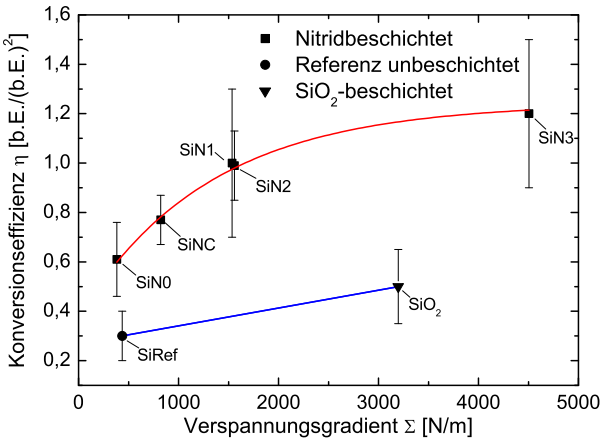


Abbildung 7.10: Zusammenhang zwischen der Konversionseffizienz des Frequenzverdopplungseffekts η und dem in der Probe vorherrschenden integrierten Verspannungsgradienten Σ für die untersuchten 10 μm breiten Wellenleiter. Sowohl der Vergleich von Probe `SiRef` und `SiO2` (blau) sowie der Nitrid beschichteten Proben (rot) weist auf eine Abhängigkeit der Konversionseffizienz von Σ hin. Die eingezeichneten Linien dienen lediglich der Orientierung.

die Verspannungsverteilung und der daraus resultierende Gradient nahezu identisch sind, kann hier ein Verspannungseinfluss ausgeschlossen werden. Dies lässt den Schluss zu, dass bereits die Nitridschicht oder aber die Si-SiN-Grenzfläche für eine deutliche Erhöhung des Frequenzverdopplungseffekts sorgt. Diese Erkenntnis stimmt mit Aussagen in Ref. [106] überein, in denen das Nitrid selbst für die dort beobachteten Frequenzverdopplungseffekte verantwortlich gemacht wird.

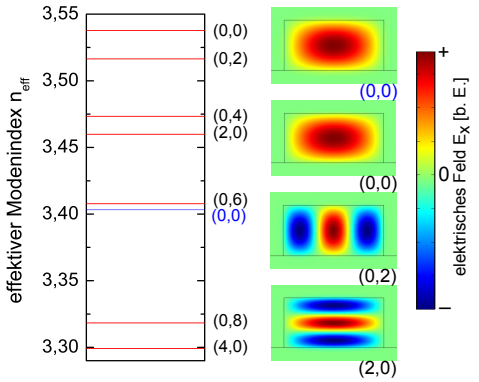
Es ist anzumerken, dass die Ursache für das Auftreten dieser $\chi^{(2)}$-Effekte im Nitrid nicht geklärt ist. Da es sich bei mittels PECVD abgeschiedenem Nitrid um ein amorphes Material handelt, sollte das Auftreten eines solchen Effektes aus Symmetriegründen (analog zum SiO_2) nicht möglich sein [108]. Auch eine teilweise kristalline Anordnung des Nitrids an der Grenzfläche zum Silizium [106] ist hier unwahrscheinlich, da sich zwischen Silizium und Nitrid eine lagerungsbedingte native Oxidschicht befindet. Es lässt sich lediglich vermuten, dass beim Abscheidungsprozess bestimmte Mechanismen wirken, die für eine gewisse Gerichtetheit bei der Abscheidung des Nitrids sorgen.

Um zu überprüfen, ob die Frequenzverdopplungseffekte in den nitridbeschichteten Proben allein durch die Präsenz der Deckschicht verstärkt werden, oder ob sich auch hier ein Einfluss der Verspannung nachweisen lässt, wurden die nitridbeschichteten Proben untereinander verglichen (Abb. 7.10). Da hier an allen Proben durch die Anwesenheit der Nitridschicht eine Art verspannungsunabhängige „Vorverstärkung“ des frequenzverdoppelten Signals auftritt, ist es hier geeigneter, die unverspannte Probe `SiNO` als Referenzprobe zu verwenden. Es ist klar erkennbar, dass mit der Zunahme des Verspannungsgradienten auch ein Anstieg der Konversionseffizienz auftritt. Dies belegt, dass der Effekt der verspannungsinduzierten Frequenzverdopplung auch in nitridbeschichteten Proben auftritt. Damit werden die in Ref. [15] getroffenen Aussagen bestätigt mit dem Unterschied, dass dort der zusätzliche Einfluss der Nitridschicht selbst unterschätzt wurde.

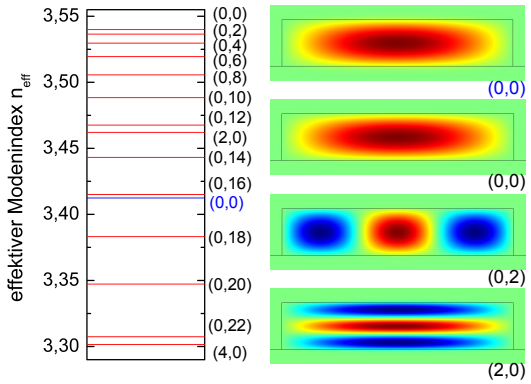
Zwar zeigt der Verlauf in Abb. 7.10 eine Abhängigkeit der Konversionseffizienz η von dem Gradienten Σ, welche für kleine Σ linear und für große Σ zu einer Sättigung der Konversionseffizienz zu führen scheint. Daraus lassen sich allerdings noch keine Rückschlüsse auf den Zusammenhang zwischen dem lokalen $\chi^{(2)}$ und dem lokalen Gradienten ziehen, da Σ nur die Gesamtheit der lokalen Beiträge berücksichtigt. Einen Hinweis auf die lokale Abhängigkeit liefert ein Vergleich der Proben `SiN1` und `SiN2`. Beide weisen die gleiche Konversionseffizienz sowie ein nahezu identisches Σ auf, obwohl sich die Verteilung der Verspannungen deutlich unterscheidet. Dies lässt zum einen den Schluss zu, dass das erzeugte Signal unabhängig von der Richtung des Gradienten ist. Außerdem lässt sich vermuten, dass das induzierte $\chi^{(2)}$ linear vom Betrag des Gradienten abhängt, da dieser in beiden Proben trotz unterschiedlicher Verteilung desselben zu einer gleichen Konversionseffizienz führt.

Abhängigkeit der Konversionseffizienz von der Probenbreite

Es hat sich also gezeigt, dass entgegen vorheriger Aussagen neben der induzierten Verspannung auch die Nitridschicht selbst bzw. deren Grenzfläche zum Silizium einen deutlichen Einfluss auf die Frequenzverdopplung im Wellenleiter hat. Einen Hinweis auf eine weitere Größe, die die Effizienz des Frequenzverdopplungseffekts im Wellenleiter beeinflusst, liefert die Untersuchung der Konversionseffizienz in Abhängigkeit der Wellenleiterbreite (Tabelle. 7.1). Hier hat sich gezeigt, dass η in den 10 μm breiten Wellenleitern größer ist als in den 4 μm breiten, eine Feststellung, die durch die Ergebnisse in Ref. [15] bestätigt wird. Dieses Verhalten ist unerwartet, da der Verspannungsgradient in den 4 μm breiten Wellenleitern verhältnismäßig größer ist als in den 10 μm breiten[11]. Eine spekulative Erklärung für die dennoch höhere Konversionseffizienz könnte das Auftreten einer Art Phasenanpassung (*engl.: Phasematching*) zwischen der Anregungswelle und dem frequenzverdoppelten Signal liefern. Ähnlich wie in einem ausgedehnten Material [21] kommt es auch hier auf Grund der unterschiedlichen Dispersion beider Wellen zu einem Auseinanderlaufen der jeweiligen Anteile, so dass eine phasenrichtige Überlagerung der frequenzverdoppelten Teilwellen verhindert wird. Im Wellenleiter wird dabei die Propagationsgeschwindigkeit der jeweiligen Welle durch ihren effektiven Modenindex n_{eff} bestimmt. Eine große Differenz der Modenindizes von Fundamental- und frequenzverdoppelter Mode führt somit zu einer geringen Konversionseffizienz, wohingegen eine Anpassung der Modenindizes zu einer verstärkten Konversion und somit einer höheren Intensität der frequenzverdoppelten Mode führt. Die Wirkungsweise dieses Prinzip wurde erfolgreich an Siliziumnitrid-Ringresonatorstrukturen untersucht [106]. Abbildung 7.11 zeigt den Vergleich der durch die Fundamentalmode ($\lambda = 2,2$ μm) anregbaren frequenzverdoppelten Moden ($\lambda = 1,1$ μm) für einen 4 μm breiten (a) und einen 10 μm breiten Wellenleiter (b), wobei davon ausgegangen wurde, dass durch die symmetrische Anregungsmode nur symmetrische Moden angeregt werden können. Wie man sieht, ist die Anzahl anregbarer Moden in einem identischen Bereich um den Modenindex der Anregungsmode herum für den 10 μm breiten Wellenleiter wesentlich größer, was durch die Breite des Wellenleiters bedingt ist. Zwar stimmen die berechneten effektiven Indizes nicht genau überein, so dass die Rechnungen keine



(a) Modenverteilung und elektrisches Feld in einem 4 μm breiten Silizium-Wellenleiter.



(b) Modenverteilung und elektrisches Feld in einem 10 μm breiten Silizium Wellenleiter.

Abbildung 7.11: Vergleich des Modenindex der TE-Fundamentalmode (blau) mit den anregbaren Moden (rot) bei der Wellenlänge ($\lambda = 1,1$ μm) des frequenzverdoppelten Signals für einen 4 μm bzw. 10 μm breiten Wellenleiter. Auf Grund der Vielzahl anregbarer Moden im 10 μm breiten Wellenleiter ist eine Anpassung der Moden hier besser möglich, was zu einer Steigerung der Konversionseffizienz führt.

[11] Auf Grund der Breite des 10 μm Wellenleiters kann die Verspannung in der Mitte des Wellenleiters, ähnlich wie bei einer ausgedehnten Schicht, nicht mehr gut in das Silizium eindringen, wodurch sich hier der Verspannungsgradient verringert.

Aussage über den Grad der Modenanpassung in den experimentell untersuchten Wellenleitern liefern. Es ist jedoch erkennbar, dass der 10 μm breite Wellenleiter auf Grund der hohen Anzahl verfügbarer Moden eine bessere Modenanpassung gewährleistet als der 4 μm breite Wellenleiter.

7.6 Zusammenfassung verspannungsinduzierte Frequenzverdopplungseffekte

In den vorherigen Kapiteln konnte nachgewiesen werden, dass das Einbringen inhomogener Verzerrungen dazu genutzt werden kann, im Silizium eine nichtlineare Suszeptibilität zweiter Ordnung $\chi^{(2)}$ zu induzieren. Dies wurde zunächst am einfachen Fall von planaren Siliziumproben gezeigt, die durch Oxidschichten mit unterschiedlichem Verspannungsgrad verzerrt wurden. Durch Messung des Frequenzverdopplungseffekts in Reflexion konnte eine lineare Abhängigkeit zwischen der aufgebrachten Verspannung und der induzierten Nichtlinearität nachgewiesen werden. Diese Erkenntnis stimmt mit theoretischen Vorhersagen aus der Literatur überein, die für einen solchen Spezialfall getroffen wurden. Des Weiteren zeigen die Messdaten, dass die Nichtlinearität nur durch die Verspannung und nicht durch die Oxidschicht selbst hervorgerufen wird. Als Ursprung der Nichtlinearität wurde eine ca. 5 nm dicke verspannte Schicht im Silizium direkt an der Grenzfläche zum Oxid identifiziert.

In einem nächsten Schritt wurde versucht, durch das gezielte Einbringen einer Strukturierung das verzerrte Volumen im Silizium zu vergrößern. Mit Hilfe von Röntgenmessungen konnte dieser Bereich, der sich bis in eine Tiefe von ca. 150 nm erstreckt, nachgewiesen werden. Die Untersuchung des Verspannungseinflusses auf den Frequenzverdopplungseffekt wurde jedoch an verspannten Wellenleitern in Transmission vorgenommen, da sich herausgestellt hatte, dass die zunächst verwendete Reflexionsmethode nicht für Untersuchungen an ausgedehnten Volumina geeignet ist.

Durch die Transmissionsmessungen an mit thermischem Oxid verspannten Wellenleitern konnte belegt werden, dass sich auch in einem ausgedehnten Siliziumvolumen ein verspannungsbedingtes $\chi^{(2)}$ hervorrufen lässt. Außerdem wurden auch mit Siliziumnitrid verspannte Proben untersucht. Dabei wurde ein zusätzlicher Einfluss auf die Nichtlinearität durch die Nitridschicht selbst bzw. durch die SiN/Si Grenzfläche beobachtet, wobei beide Effekte ungefähr gleich stark sind. Durch diese Beobachtungen konnten widersprüchliche Ansichten den Ursprung der Suszeptibilität betreffend geklärt werden. So wurde bisher im Fall nitridverspannter Proben die Verstärkung der Nichtlinearität allein der Verspannung zugeschrieben [14, 15]. Andere Arbeiten hingegen hatten allein von einem Einfluss der Nitridschicht selbst berichtet [16, 17]. Der hier beobachtet Beitrag der Nitridschicht überlagert sich konstruktiv mit dem Einfluss der Verspannung und sorgt somit für eine zusätzliche Erhöhung der effektiven Nichtlinearität. Diese liegt nach einem Vergleich mit Messdaten aus Ref. [15] in der Größenordnung $\chi^{(2)} \approx 10$ pm/V.

Diese Angabe stellt jedoch nur eine grobe Abschätzung dar, unter der Annahme, dass keine Phasenanpassungseffekte den Konversionsprozess beeinflussen. Hinweise, dass ein solcher Effekt bedingt durch eine Anpassung der effektiven Modenindizes von Fundamental- und 2ω-Mode auftritt, lieferte ein Vergleich der Konversionseffizienzen unterschiedlich breiter Wellenleiter. Es ist daher für künftige Untersuchungen wichtig, die verschiedenen Einflüsse auf den Konversionsprozess separieren zu können. Auch wird eine Theorie benötigt, die einen Zusammenhang zwischen dem lokalen Verspannungsgradienten und dem resultierenden $\chi^{(2)}$ herstellt. Ein entsprechender Zusammenhang lässt sich aus den Messungen nicht eindeutig gewinnen, da hier über die Verteilung des Verspannungsgradienten im Probenquerschnitt gemittelt wird. Die Ergebnisse lassen jedoch die Vermutung zu, dass hier ein linearer Zusammenhang besteht.

8 Numerische Untersuchung lokal infiltrierter eindimensionaler Wellenleiter-Schlitz-Mikroresonatoren

Im vorliegenden Kapitel wird ein alternativer Ansatz zur Erzeugung nichtlinearer optische Effekte in photonischen Siliziumstrukturen diskutiert. Im Gegensatz zum zuvor behandelten Konzept der direkten Beeinflussung der optischen Eigenschaften des Siliziums werden hier die nichtlinearen optischen Eigenschaften durch zusätzlich aufgebrachte Materialien erzeugt. Wie in der Einleitung erwähnt, besteht die Herausforderung hierbei darin, die nichtlinearen Materialien optimal mit dem Silizium in Verbindung zu bringen. Hier wird das neue Konzept lokal infiltrierter Wellenleiter-Schlitz-Mikroresonatoren (Abb. 8.1) numerisch untersucht, das eine Kombination aus Schlitzwellenleiter und eindimensionalem Wellenleiter-Resonator darstellt.

Zunächst werden die Prinzipien des Schlitzwellenleiters und des eindimensionalen Wellenleiter-Resonators erläutert. Im Anschluss werden geeignete Parameter für die zu verwendenden Spiegel und den Schlitz festgelegt. Im Hauptteil liegt der Fokus dann auf der Gestaltung des Übergangs zwischen den Spiegeln und der geschlitzten Kavität, welcher einen wesentlichen Einfluss auf die Güte des Systems hat. Zur Optimierung des Übergangs werden ausgehend von den theoretischen Grundlagen Prinzipien abgeleitet, die eine gezielte Verbesserung der Güte des infiltrierten Schlitzresonators erlauben. Zum Abschluss wird der Effekt des bistabilen Verhaltens als mögliches Anwendungsbeispiel für einen opto-optischen Schalter diskutiert.
Teile der hier vorgestellten Ergebnisse wurden vom Autor in Ref. [109–112] veröffentlicht.

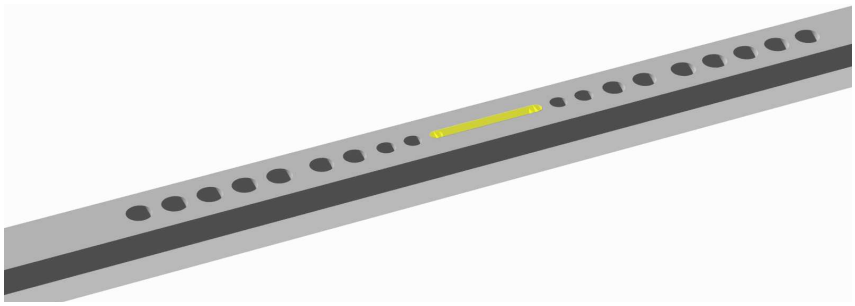


Abbildung 8.1: Skizze eines lokal infiltrierten eindimensionalen Wellenleiter-Schlitz-Mikroresonators.

8.1 Prinzipien der Lichtausbreitung in photonischen Strukturen

Schlitzwellenleiter

Im Gegensatz zu konventionellen Wellenleitern, wie sie in Kapitel 7 verwendet wurden und in denen das Licht auf Grund der internen Totalreflexion im hochbrechenden Material propagiert, findet in Schlitzwellenleitern (*engl.: slot waveguide*) die Lichtleitung im niedrig brechenden Material statt. Diese Art von Wellenleiter ist noch relativ neu und wurde erstmalig 2004 von Lipson *et al.*

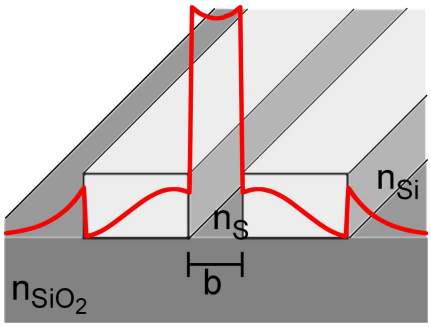


Abbildung 8.2: Schematische Darstellung eines Schlitzwellenleiters aus Silizium auf Siliziumdioxid. Dieser besteht aus zwei Streifen Silizium mit dem Brechungsindex n_{Si}, welche den Schlitz (n_{S}) begrenzen. Das elektrische Feld im Schlitz ist eine Überlagerung der geführten Moden der jeweiligen Streifen. Für eine TE polarisierte Welle erfährt das elektrische Feld eine Feldüberhöhung im Schlitz, die von dessen Breite b abhängt.

beschrieben [113, 114]. Das Schema eines solchen Wellenleiters zeigt Abb. 8.2. Er besteht aus einem gewöhnlichen Wellenleiter, der zusätzlich in der Mitte mit einem Schlitz versehen wurde. In solchen Wellenleitern können sich TE polarisierte Eigenmoden ausbilden, deren elektrisches Feld stark im Schlitz konzentriert ist. Die Moden bestehen dabei aus einer Überlagerung von Eigenmoden der Wellenleiter zu beiden Seiten des Spalts [113]. Die Feldüberhöhung im Spalt beruht auf dem Umstand, dass für TE polarisiertes Licht die Normalenkomponente des elektrischen Flusses D stetig an der Innenwand des Spalts ist. Für das elektrische Feld E gilt $E = \epsilon^{-1}D$, mit ϵ als Dielektrizitätskonstante. Dieses erfährt an der Grenzfläche einen Sprung, wobei die Amplitude des elektrischen Feldes um den Faktor $n_{\mathrm{Si}}^2/n_{\mathrm{S}}^2$ erhöht wird. Da das magnetische Feld an der Grenzfläche kontinuierlich ist, erhöht sich auch die Intensität der Mode im Schlitz. Für einen luftgefüllten Silizium - Schlitzwellenleiter lässt sich somit eine Felderhöhung um den Faktor $\Delta E = 12$ erreichen.

Die Verteilung des elektrischen Feldes in einem mit Chalkogenidglas ($n = 2,3$) (vgl. Abschn. 8.2) gefüllten Wellenleiter ist in Abb. 8.3 dargestellt. Die Ausrichtung der elektrischen Feldlinien bestätigt, dass das Feld senkrecht zur Grenzfläche zwischen hoch- und niedrigbrechendem Material steht, was für die starke Diskontinuität sorgt. Das elektrische Feld ist um den Faktor $n_{\mathrm{Si}}^2/n_{\mathrm{S}}^2 = 2,32$ erhöht und homogen im Spalt verteilt. Die Homogenität und Intensität des Feldes werden wesentlich durch die Breite des Spaltes b und den Abklingkoeffizienten des Feldes γ_S im Spalt vorgegeben, wobei idealerweise stets $b \ll 1/\gamma_S$ gelten sollte. Dies wird verständlich, wenn man sich die Spaltmode als Superposition zweier benachbarter Wellenleitermoden vorstellt. Wird der Spalt zu breit gewählt, verringert sich die Überlappung beider Moden und somit die Intensität im Spalt. Eine Abschätzung für γ_{S} und somit die maximale Breite des Spalts lässt sich über den effektiven Modenindex n_{eff} vornehmen. Dieser kann mit

$$n_{\mathrm{eff}} \approx (n_{\mathrm{S}}^2 + \gamma_{\mathrm{S}}^2/k_0^2)^{1/2} \tag{8.1}$$

approximiert werden [114], wobei $k_0 = 2\pi/\lambda_0$ ist. Für TE polarisiertes Licht ist dieser wesentlich kleiner (siehe Abschn. 8.2) als für einen konventionellen Streifenwellenleiter mit gleichen Abmessungen, was daran liegt, dass das Feld im niedrigbrechenden Material konzentriert ist. Im Gegensatz dazu ergibt sich für TM polarisiertes Licht keine wesentliche Änderung des effektiven Brechungsindex, da das Feld in diesem Fall nicht im Wellenleiter konzentriert ist.

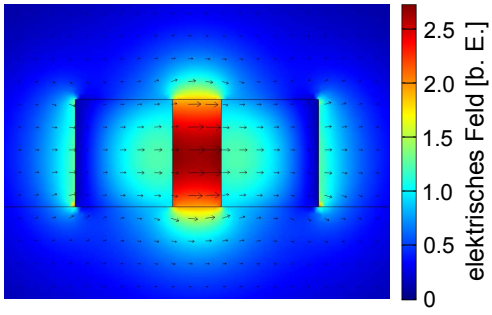
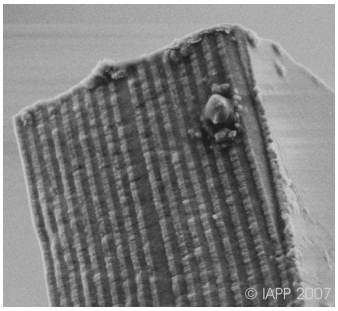


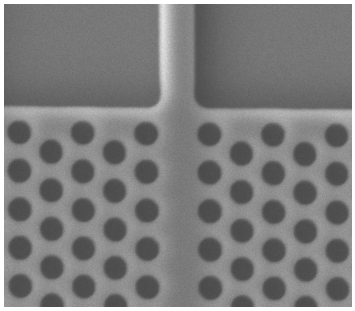
Abbildung 8.3: Intensitätsverteilung des TE polarisierten elektrischen Feldes im Querschnitt eines mit Chalkogenidglas ($n_{\mathrm{S}} = 2,3$) gefüllten Schlitzwellenleiters. Anhand der Farbskala lässt sich die Feldüberhöhung innerhalb des Schlitzes erkennen. Auf Grund der geringen Breite des Schlitzes $b = 100$ nm ist das Feld sehr homogen im Schlitz verteilt und die Feldlinien (schwarz) stehen senkrecht auf den Wänden des Spalts.

Mittlerweile werden Schlitzwellenleiter für verschiedenste Anwendungen genutzt. Beispielsweise können sie mit optisch nichtlinearen Materialien gefüllt werden, womit sich Silizium-Organische-Hybrid Bauteile realisieren lassen [115, 116]. Außerdem können Schlitzwellenleiter in photonische Kristalle eingebracht werden, wodurch sich das elektrische Feld im Resonator weiter verstärken lässt [117, 118]. Diese Bauelemente lassen sich dann z.B. als Gassensoren verwenden [119]. Eine andere interessante Einsatzmöglichkeit ist die Nutzung der Schlitzwellenleiter zum Transport kleiner Partikel wie DNA Moleküle, die durch die Kraft des elektrischen Feldes mitgeführt werden [120].

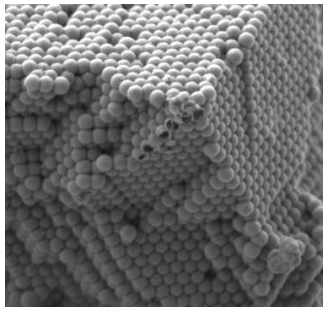
Lichtausbreitung in photonischen Kristallen



(a) Eindimensionaler photonischer Kristall, bestehend aus dielektrischen Spiegeln und einem aktiven mit Farbstoff gefüllten Resonator [121, 122]. Solche Strukturen lassen sich als Laser benutzen, wobei die Laserstrahlung senkrecht zur Spiegeloberfläche austritt[123] (*engl.: Vertical Cavity Surface Emitting Laser* (VCSEL)). Bild entnommen aus [124].



(b) Zweidimensionaler photonischer Kristallwellenleiter. Die Lichtleitung im Kristall erfolgt durch einen Liniendefekt, bei dem eine Porenreihe entfernt wurde. Durch Modifikation der Porendurchmesser und -abstände lassen sich die Transmissionseigenschaften des Kristalls modifizieren [125].



(c) Dreidimensionaler photonischer Kristall mit Opalstruktur. Solche Kristalle weisen richtungsabhängige Transmissionseigenschaften auf und lassen sich deshalb in mehrschichtigen Solarzellen als richtungsselektive Filter einsetzen [126]. Bild entnommen aus Ref. [126].

Abbildung 8.4: Rasterelektronenmikroskopaufnahmen von Beispielen für eindimensionale, zweidimensionale und dreidimensionale photonische Kristallstrukturen

Eine weitere Möglichkeit die Propagation von Licht in Materie zu beeinflussen bieten photonische Kristalle. Die Funktionsweise solcher Strukturen wurde erstmalig 1987 von Yablonovich [127] und John [128] beschrieben. Je nach Periodizität der Kristallstruktur werden sie als ein-, zwei-, oder dreidimensionale photonische Kristalle bezeichnet (siehe Abb. 8.4). Besonders interessant für Lichtleitungseffekte sind zweidimensionale Kristalle, die als planare Strukturen in der Form integrierter Bauelemente genutzt werden können. Dabei ist vor allem die Modifikation der Bandstruktur von Interesse, mit der die Lichtausbreitung durch resonante Defekte oder durch eine Verlangsamung des Lichts (*engl.: slow-light-effect*) [129–131] verzögert wird.

Das Grundprinzip der photonischen Kristalle beruht auf der Einführung einer periodischen Änderung des Brechungsindexes, wobei die charakteristische Länge dieser Änderung in der Größenordnung der Wellenlänge des zu beeinflussenden Lichts liegt. Analog zu Elektronen im Festkörpergitter erfahren hier die Photonen Streuungen an der periodischen Struktur, was zur Ausbildung von Bereichen in der Dispersionsrelation führt, in denen keine propagierenden Wellen im Kristall angeregt werden können. Analog zur Festkörperphysik werden diese Bereiche als Bandlücke bezeichnet [98].

Besonders interessant für diese Arbeit sind photonische Kristalle mit Punktdefekten, die zu einer lokalen Erhöhung der Licht-Materie-Wechselwirkung führen können und sich somit für eine

Verstärkung nichtlinearer optischer Effekte anbieten. Die Erhöhung der Wechselwirkung zwischen lokalisierter Mode und Material beruht auf einem resonanten Aufschaukeln des elektromagnetischen Feldes, weshalb solche Defektstrukturen auch als (Mikro-)Resonatoren (*engl.: Microcavity*) bezeichnet werden. Das einfachste Beispiel einer solchen Struktur ist der Fabry-Pérot-Resonator, bestehend aus zwei Spiegeln, die die Kavität umgeben.

Als Kenngröße für die feldüberhöhenden Eigenschaften eines solchen Resonators ist die Güte (*engl.: Quality factor*), auch Q-Faktor (Q) genannt, geeignet, die wie folgt definiert ist [72]:

$$Q = \frac{2\pi\,(\text{Energie im Resonator})}{\text{Energieverlust pro Schwingungsperiode}}. \tag{8.2}$$

Sie ist damit ein Maß für den durch die Spiegel bestimmten Energieverlust des Resonators pro Periodendauer $T = 2\pi/\omega$ des Lichts. Ein Resonator mit geringen Verlusten zeichnet sich daher durch einen hohen Q-Wert aus. Dieser lässt sich auch mit der Verweil- oder Lebensdauer τ verknüpfen wobei gilt $Q = \omega_0\,\tau$. Praktikabler als die Untersuchung des Abklingverhaltens des Resonators ist jedoch die Vermessung der spektralen Breite der Resonanz zur Bestimmung der Güte. Aus Gl. 8.2 lässt sich ableiten [100], dass für Q

$$Q = \frac{\omega_0}{\Delta\omega} = \frac{\lambda_0}{\Delta\lambda} \tag{8.3}$$

gilt, wobei ω_0 bzw. λ_0 der Frequenz bzw. Wellenlänge der Resonanz entsprechen sowie $\Delta\omega$ bzw. $\Delta\lambda$ der jeweiligen Halbwertsbreite[1]. Somit lässt sich aus dem Transmissionsspektrum sehr einfach die Güte des gesamten Systems bestimmen.

Eine weitere wichtige Kenngröße eines Resonators ist das effektive Modenvolumen. Dies bezeichnet das effektive Volumen, dass vom elektrischen Feld der Mode durchsetzt ist und lässt sich wie folgt berechnen [132]:

$$V_{\text{eff}} = \frac{\int\limits_V \epsilon(\vec{r}) \left|\vec{E}(\vec{r})\right|^2 \mathrm{d}^3\mathrm{r}}{\max\left[\epsilon(\vec{r}) \left|\vec{E}(\vec{r})\right|^2\right]}. \tag{8.4}$$

Das Volumen V wird dabei so gewählt, dass es alle signifikanten Feldanteile der Mode im Resonator umfasst. Da die Güte nur ein Maß für die Verweildauer der Photonen im Resonator darstellt, ist die zusätzliche Angabe des effektiven Modenvolumens erforderlich, um eine Aussage über die Konzentration der elektrischen Felder im Resonator zu treffen[2].

Eindimensionale photonische Kristallmikroresonatoren in Wellenleitern

Eine besondere Anwendungsform photonischer Kristalle ist ihre Implementierung in Wellenleiterstrukturen. Dies hat den Vorteil, dass entsprechende Bauelemente als integrierte Bausteine auf einem Chip verwendet werden können, wobei die verschiedenen Elemente über Wellenleiter miteinander verbunden sind. Die photonischen Kristallstrukturen lassen sich u.a. durch das Einbringen von periodischen Einkerbungen [133–138] bzw. Poren [139–141] realisieren. Letztere Variante wird hier näher untersucht. Durch die resultierende periodische Modulation des effektiven Indexes bildet sich in Richtung der Wellenleiterstrukturen eine Bandlücke aus. Durch das Entfernen einer oder mehrerer Poren lässt sich daraus ein Mikroresonator erzeugen, in dem es zu einer Intensitätsüberhöhung des Lichts bei der Wellenlänge der Defektmode kommt. Die Skizze

[1] Das Verhältnis zwischen der Lebensdauer eines Photons im Resonator und der spektralen Breite der Resonanz lässt sich als Analogon zur Energie-Zeit-Unschärfe bei atomaren Zuständen verstehen. Je schärfer das Energieniveau und somit die Breite der Resonanz, desto langlebiger ist der angeregte Zustand und umgekehrt.

[2] Hohe Q-Werte ergeben sich für große Resonatoren, da das Licht dort eine größere Strecke pro Umlauf zurücklegt und somit länger im Resonator verweilt. Die Feldüberhöhung ist jedoch nur gering, da sich das Feld auf ein entsprechend großes Volumen verteilt.

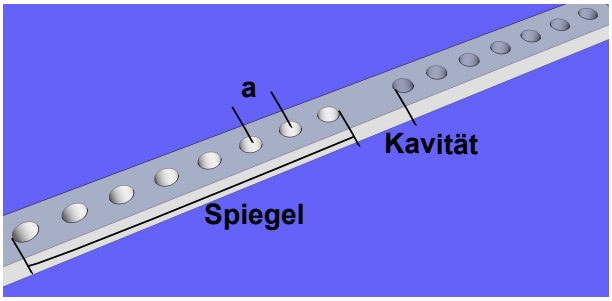


Abbildung 8.5: Schematische Darstellung eines Mikroresonators in einem optischen Wellenleiter. Die Kavität des Resonators wird von Spiegeln umgeben, die in der Kavität vorhandenes Licht reflektieren und so eine Feldüberhöhung im Resonator erzeugen. Die Spiegel bestehen aus periodisch angeordneten Poren und lassen sich als dielektrischer Spiegel verstehen, der aus einer Abfolge von Schichten mit alternierendem Brechungsindex besteht.

eines solchen photonischen Wellenleiter-Mikroresonators (*engl.: photonic wire microcavity*) ist in Abb. 8.5 dargestellt. Eine solche Struktur lässt sich vereinfacht als Fabry-Pérot-Resonator betrachten, bei dem die periodischen Porenreihen dielektrischen Spiegeln entsprechen. Der Bereich der fehlenden Poren entspricht der Kavität mit einer optischen Länge von einem Vielfachen der halben Designwellenlänge. Licht mit der Designwellenlänge wird innerhalb des Resonators von den Spiegeln reflektiert, was zu einer erhöhten Verweildauer der Photonen im Resonator und damit zu einem erhöhten Q-Faktor führt (vgl. Abschn. 8.1). Dieser ist jedoch bei einfachen Resonatoren wie in Abb. 8.5 noch sehr gering ($Q \approx 300$ [142, 143]), was an den hohen Verlusten auf Grund von Streueffekten an der Grenze zwischen Kavität und Spiegel liegt. Um diese Verluste zu reduzieren, wurden verschiedene Konzepte entwickelt, die alle auf dem Einsatz eines speziellen Übergangs (*engl.: Taper*) zwischen Spiegel und Resonator basieren [144–147].

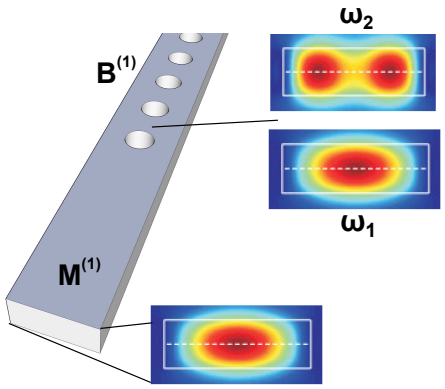
Hier soll eines der fundierten Konzepte vorgestellt werden. Dieses Konzept, entwickelt von Lalanne *et al.* [148, 149], basiert auf dem Prinzip der Feldanpassung zwischen Spiegel- und Resonatormoden und erlaubt es, Vorhersagen über ein geeignetes Design des Übergangs zu treffen. Dies eröffnet die Möglichkeit, Vorschriften für die Optimierung von Resonatorstrukturen zu entwickeln. Bei dieser Methode steht die Vermeidung von Streuverlusten durch eine Erhöhung der modalen Reflektivität R der Spiegel im Vordergrund, die nach dem Fabry-Pérot-Model mit

$$Q = \frac{k_0}{1-R}\, n_\mathrm{g}\, (L + 2\, L_\mathrm{p}) \tag{8.5}$$

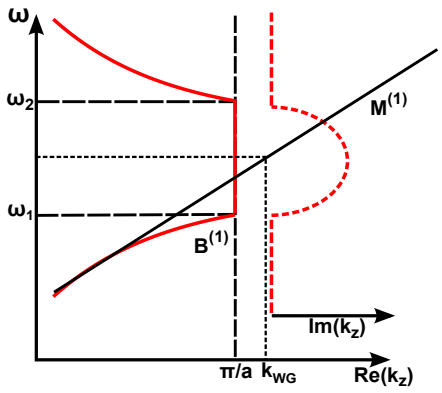
einen starken Einfluss auf den Q-Faktor hat [149]. Hier entspricht k_0 dem Wellenvektor der Resonatormode, n_g dem zugehörigen Gruppenindex, L ist die Kavitätslänge und L_p bezeichnet die Eindringtiefe der Mode in die Spiegel.

Die Reduktion der Streuverluste erfolgt durch eine Anpassung der Modenprofile zwischen der Resonatormode $M^{(1)}$ und der entsprechenden Blochmode des Spiegels $B^{(1)}$. Beide Moden sind exemplarisch in Abb. 8.6 (a) dargestellt. Im Fall unendlich kleiner Löcher wäre die Modenverteilung in Wellenleiter und Spiegel identisch und es würde gelten $B^{(1)} = M^{(1)}$. Für den Fall größerer Löcher bildet sich eine Bandlücke aus und $B^{(1)}$ entspricht einer propagierenden Welle außerhalb bzw. einer evaneszenten Welle (mit komplexem Wellenvektor) innerhalb der Bandlücke. Da die Blochmode durch die Anwesenheit der Löcher beeinflusst wird, ändert sich ihr Modenprofil, so dass auf Grund der Fehlanpassung zwischen $M^{(1)}$ und $B^{(1)}$ weitere Moden angeregt werden [150]. Diese können zu einer Kopplung zwischen dem Wellenleiter und seiner Umgebung führen, wodurch das Auftreten von Streuverlusten begünstigt wird.

Um die Ursachen dieser Verluste zu verstehen, werden zunächst die Modenprofile von $B^{(1)}$ und $M^{(1)}$ an den Kanten der Bandlücke betrachtet (siehe Abb. 8.6 (b)). Für niedrige Frequenzen (ω_1) ist $B^{(1)}$ stark im dielektrischen Material konzentriert, was dazu führt, dass das Modenprofil dem der Wellenleitermode stark ähnelt. An der oberen Bandkante (ω_2) befindet sich das sogenannte Luftband, bei dem die Mode stark von den luftgefüllten Poren beeinflusst wird. Ihr Profil



(a) Modenprofile der Resonatormode $M^{(1)}$ sowie der Spiegelmode $B^{(1)}$ an der unteren (ω_1) bzw. oberen (ω_2) Bandkante. An der unteren Bandkante ist das Feld stark in den Porenzwischenräumen konzentriert, weshalb es ein ähnliches Profil wie die Resonatormode zeigt.



(b) Schematische Darstellung der Dispersionsrelation der Resonatormode $M^{(1)}$ (schwarz) und der Spiegelmode $B^{(1)}$ (rot).

Abbildung 8.6: Veranschaulichung der Modenfehlanpassung am Übergang zwischen Resonator und angrenzendem Spiegel.

unterscheidet sich daher stark von dem der Mode $M^{(1)}$. Für die auftretenden Streuverluste L gilt nach Ref. [150]:

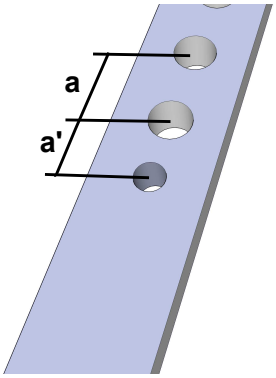
$$L = 1 - \eta^2, \tag{8.6}$$

wobei η das Überlappintegral des elektromagnetischen Feldes von $M^{(1)}$ und $B^{(1)}$ ist. Daraus folgt, dass eine Kopplung der Wellenleitermode an die Mode der unteren Bandkante die Streuverluste reduzieren kann.

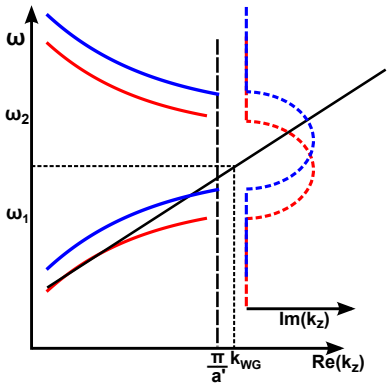
Um beide Moden aneinander zu koppeln, ist es vorteilhaft, die Blochmoden als Eigenzustände einzelner Porensegmente zu betrachten. Dies ist auch möglich, wenn sich ein Segment nur über eine Gitterperiode a erstreckt [148]. Durch die Änderung der Gitterkonstanten a lässt sich nun die Bandkante des entsprechenden Porensegments verschieben. Es lassen sich auch zusätzliche Segmente zwischen Wellenleiter und Spiegel einfügen, deren Gitterkonstante a' verkleinert wurde (Abb. 8.7 (a)). Dies führt zu einer Verschiebung der unteren Bandkante in Richtung der Resonatormode (siehe Abb. 8.7 (b)).

Das Verschieben der Bandkante entspricht einer Anpassung des Wellenvektors $k' = 2\pi/a'$ an den Wellenvektor k_{WG} des Wellenleiters und somit auch einer Anpassung der Wellenlänge der Feldoszillation im Wellenleiter und im Spiegel (siehe Abb. 8.8). Ein abrupter Übergang der Kavitätsmode zur Spiegelmode stört die räumlich sinusförmige Oszillation des Feldes, was zu Streuverlusten an der Grenzfläche führt. Im angepassten Fall erfolgt der Übergang wesentlich langsamer und somit verlustärmer.

Einen weiteren Einfluss auf die Streuverluste hat das Abklingverhalten der Resonatormode im angrenzenden Spiegel. Innerhalb der Bandlücke des Spiegels kann die Resonatormode lediglich an evaneszente Spiegelmoden ankoppeln, deren exponentielles Abklingverhalten vom Imaginärteil des jeweiligen Wellenvektors abhängt (siehe Abb. 8.7 (b)). Moden in der Mitte des Stoppbandes besitzen einen großen Imaginärteil, was zu einer geringen Eindringtiefe in die Spiegel führt. Analog zum Fall der Wellenlängenanpassung sorgt auch hier der abrupte Übergang für zusätzliche Streuverluste. Da durch das Verschieben der Bandlücke die Resonatormode an die Spiegelmode am Rand der Bandlücke ankoppeln kann, erhöht sich die effektive Eindringtiefe in den Spiegel, wodurch sich auch diese Art der Streuverluste verringert. Resonatoren, die solche optimierten Übergänge verwenden, sind dazu geeignet, lokal starke Feldüberhöhungen zu erzeugen, wobei Strukturen mit sehr hohen Q-Werten im Bereich von $Q \approx 30000 - 147000$ realisiert wur-



(a) Durch das Einfügen zusätzlicher Porensegmente mit einer Gitterkonstante a' lässt sich eine schrittweise Anpassung zwischen Spiegel- und Resonatormode erzielen.



(b) Durch das Einfügen eines Porensegments mit verringerter Gitterkonstante a' verschiebt sich dessen Bandstruktur (blau) gegenüber der des Spiegels (rot). Dabei nähert sich die untere Bandkante dem Band der Resonatormode, was einer Anpassung der Wellenvektoren beider Moden entspricht.

Abbildung 8.7: Veranschaulichung der Anpassung der Wellenvektoren der Resonatormode und der des angrenzenden Spiegels.

den [148, 151–154]. Hierbei wird der optimierte Porenübergang oftmals durch eine numerische Variation der Parameter der einzelnen Porensegmente ermittelt. Diese Möglichkeit ist mit einem enormen Rechenaufwand verbunden und wird daher in der vorliegenden Arbeit nicht genutzt.

Statt dessen wird eine vereinfachte und direktere Möglichkeit der Optimierung des Porenabstands verwendet, die auf einer Anpassung der effektiven Brechungsindizes der Spiegel- und der Resonatormode beruht [155]. Dabei wird davon ausgegangen, dass die zuvor beschriebene Anpassung der Wellenvektoren gleichzeitig zu einer Anpassung der Feldverteilungen führt, so dass erstere im Wesentlichen die Streuverluste an der Grenzfläche bestimmt[3]. Der effektive Index des Wellenleiters n_{eff} bestimmt sich aus der Modenverteilung im Wellenleiter [156]. Der effektive Index der Blochmode im Spiegel n_B ergibt sich aus der Bragg-Bedingung ($k = \pi/a$) innerhalb der Bandlücke zu $n_B = \lambda/2\,a$. Somit lässt sich mit einer graduellen Änderung der Segmentlänge des Spiegel-Wellenleiter-Übergangs eine Anpassung der effektiven Indizes erreichen, ohne dass eine numerische Variation der Porenabstände nötig ist. In Ref. [155] wird gezeigt, dass auf diese Art erzeugte Übergänge die Streuverluste in der gleichen Größenordnung reduzieren können wie Übergänge, die durch numerische Variation optimiert wurden.

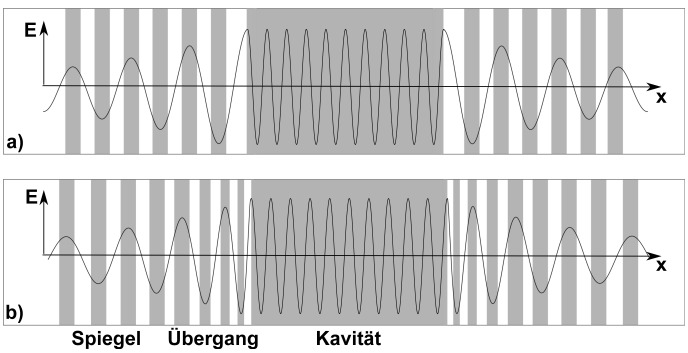


Abbildung 8.8: Veranschaulichung des Prinzips der Wellenvektor- bzw. Wellenlängenanpassung. Beim Resonator ohne geglätteten Übergang kommt es zu einer abrupten Änderung der räumlichen Feldoszillation an der Grenzfläche, was zu Streuverlusten führt (a). Durch Einführung eines Übergangs mit schrittweise angepasstem Porenabstand erfolgt die Anpassung der räumlichen Feldoszillationen über einen größeren Bereich, wodurch die Moden adiabatisch angepasst und die Streuverluste verringert werden (b).

[3] Diese Annahme lässt sich nachvollziehen, da die Modenprofile im Resonator bzw. Wellenleiter und an der unteren Bandkante des Spiegels bereits sehr ähnlich sind, da in beiden Fällen das Feld im Material konzentriert ist.

8.2 Struktur- und Parameterdefinition

Durch die Kombination der feldüberhöhenden Eigenschaften der zuvor beschriebenen Schlitzwellenleiter mit denen der eindimensionalen Mikroresonatoren lassen sich Hybridstrukturen erzeugen, bei denen es zu einer starken Erhöhung der Wechselwirkung zwischen dem eingestrahlten Licht und dem in den Resonatorschlitz eingebrachten Infiltrat kommt. Dies wiederum führt zu einer Verstärkung der auftretenden nichtlinearen optischen Effekte.

Als mögliche optisch aktive Materialien, die zur Infiltration geeignet sind, kommen u.a. Polymere und Chalkogenidgläser in Betracht. Letztere sind auf Grund ihres höheren Brechungsindex jedoch geeigneter für die Verwendung in Schlitzresonatoren. Bei Chalkogenidgläsern [157–159] handelt es sich um Gläser, die auf chalkogenen Elementen (S, Se und Te) basieren. Auf Grund ihrer hohen Transparenz und geringer Verluste im infraroten Spektralbereich wurden sie im optischen Bereich bisher vor allem in Lichtleitfasern eingesetzt. Ein weiteres Merkmal, das in jüngster Zeit das Interesse an Chalkogenidgläsern wieder geweckt hat, sind ihre starken nichtlinearen optischen Eigenschaften [160]. Besonders die nichtlineare optische Suszeptibilität dritter Ordnung ($\chi^{(3)}$), die zu einer intensitätsabhängigen Änderung des Brechungsindexes führt, wird dabei untersucht. Gegenüber Silizium haben Chalkogenidgläser wie As_2S_3 den Vorteil einer geringen Zwei-Photonen-Absorption [161]. Dies ist vor allem dann wichtig, wenn es darum geht, extrem schnelle optische Schalter und Modulatoren zu bauen. Da Chalkogenidgläser in amorpher Form abgeschieden werden, besitzen sie in der Regel keine nichtlineare Suszeptibilität zweiter Ordnung. Allerdings ist es möglich, eine thermisch [162] oder optisch [163] induzierte Polung zu erzeugen, womit es möglich wird, Chalkogenidgläser für Frequenzverdopplungseffekte zu nutzen.

Aus den erwähnten Gründen sind Chalkogenidgläser in den letzten Jahren auch als Material zur Herstellung nichtlinearer photonischer Kristalle untersucht worden [164–166]. Besonders interessant sind hier dünne Chalkogenid-Membranstrukturen, in die photonische Kristalle geätzt werden können [167].

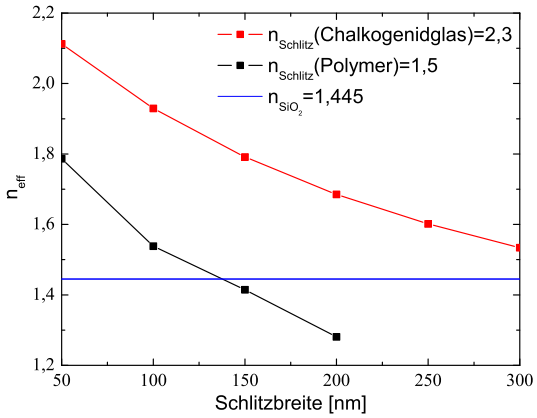
Als Ausgangsdesign für den zu untersuchenden Schlitz-Resonator diente eine von Zain *et al.* entwickelte Struktur [151], von der berichtet wurde, dass sie besonders hohe Q-Werte aufweist[4] ($Q_{\text{Theorie}} = 177000$ und $Q_{\text{Experiment}} = 147000$). Bei der Referenzstruktur handelt es sich um einen eindimensionalen Mikroresonator mit fünfporigen dielektrischen Spiegeln und einem Übergang zwischen Spiegeln und Kavität bestehend aus vier Poren. Um die Vergleichbarkeit mit dem Referenzmodell zu gewährleisten wurden bei dem hier untersuchten Modell die gleiche Anzahl an Poren sowie eine identische Strukturbreite von 500 nm verwendet. Anders als im Referenzmodell wurde hier jedoch eine Strukturhöhe von 220 nm sowie die Resonanzwellenlänge auf 1,55 μm festgelegt.

Zur Bestimmung der geeigneten Modellparameter wurden die Parameter der Referenzstruktur entsprechend dem Prinzip der Skalierbarkeit der Maxwell-Gleichungen angepasst [169]. Für die Spiegel der Modellstruktur ergeben sich daraus Porendurchmesser von $d = 200$ nm und Porenabstände von $a = 385$ nm.

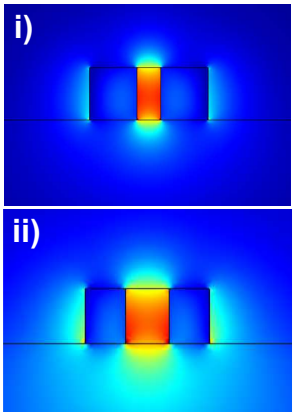
Optimierung des Resonatorschlitzes

Die Breite des Schlitzes im Resonator sowie der Brechungsindex des Füllmaterials haben einen wesentlichen Einfluss auf die Stärke der Interaktion zwischen dem Licht und dem infiltriertem Material. Wie in Abschn. 8.1 beschrieben, nimmt die Feldintensität im Spalt auf Grund der geringeren Überschneidung der Moden zu beiden Seiten des Spalts bei einer Vergrößerung der

[4] Es sei darauf hingewiesen, dass Reproduktionen der Rechnung wesentlich geringere Q-Faktoren ergeben als die in Ref. [151] angegeben. Die Überprüfung der Rechnungen erfolgte mit zwei verschiedenen Methoden, zum einen durch den Autor dieser Arbeit mittels Comsol (FEM) sowie im Rahmen einer Bachelorarbeit [168] mit der Finite-Difference-Time-Domain-Methode (FDTD). Beide Methoden liefern vergleichbare Werte, die jedoch mit Werten von $Q \approx 30000$ deutlich unter den in Ref. [151] angegeben liegen. Es ist zu vermuten, dass in dieser Publikation falsche Parameter angegeben wurden.



(a) Abhängigkeit des effektiven Brechungsindex n_{eff} von der Schlitzbreite für verschiedene Füllmaterialien. Für breite Schlitze kann n_{eff} unter den Brechungsindex des Substrats (n_{SiO_2}) sinken, was die Anregung von Substratmoden ermöglicht, die zu zusätzlichen Verlusten führen.



(b) Verteilung des TE-polarisierten elektrischen Feldes im Spalt für eine Schlitzbreite von (i) 100 nm und (ii) 175 nm unter der Annahme, dass das Füllmaterial einen Brechungsindex von $n_{\text{Schlitz}} = 1,5$ besitzt.

Abbildung 8.9: Abhängigkeit des effektiven Modenindex des infiltrierten Schlitzes von der Schlitzbreite und dem Füllmaterial.

Spaltbreite ab. Des Weiteren verringert sich der effektive Modenindex n_{eff} bei einer Verbreiterung des Schlitzes (Abb. 8.9 (a)), da in diesem Fall der Einfluss des schwächer brechenden Füllmaterials zunimmt. Dies hat zur Folge, dass sich n_{eff} dem Brechungsindex des Substrats ($n = 1,45$) annähert, was wiederum eine Kopplung zwischen Wellenleitermode und Leckmoden in das Substrat ermöglicht (Abb. 8.9 (b)). Diese zusätzlichen Verluste führen dann zu einer Verringerung des Q-Faktors des Resonators.

Neben der Schlitzbreite wird der effektive Modenindex auch durch den Brechungsindex des Füllmaterials beeinflusst. Wie in Abb. 8.9 (a) dargestellt, erhöht sich bei einem höheren Brechungsindex des Infiltrats ebenfalls n_{eff}, was die Koppelverluste in das Substrat reduziert. Bei den hier untersuchten Strukturen soll Chalkogenidglas wie z.B. As_2S_3 als Füllmaterial verwendet werden, so dass ein Brechungsindex von $n = 2,3$ angenommen wurde. Die Breite des Schlitzes wurde auf 100 nm festgelegt. Dies entspricht einem Kompromiss zwischen einem möglichst schmalen Schlitz mit hoher Feldkonzentration und den technischen Möglichkeiten, einen solchen Schlitz tatsächlich herzustellen und zu infiltrieren.

Spezifikation der Parameter des Spiegel-Kavitäts-Übergangs

Wie in Abschn. 8.1 diskutiert, ist die Form des Übergangs zwischen den dielektrischen Spiegeln und der Kavität des Resonators entscheidend für die Höhe der dort auftretenden Streuverluste und somit für die Güte des Resonators. Um die Anforderungen an einen solchen Übergang für einen Schlitz-Resonator zu bestimmen, wurden verschiedene Strukturen numerisch untersucht. Um die Vergleichbarkeit mit den in Ref. [151] vorgestellten massiven Resonatoren zu gewährleisten, wurden für die hier untersuchten Modelle ebenfalls vier Poren für den Übergang genutzt. Die Parameter der Übergangsporen (siehe Abb. 8.10) werden im Folgenden sukzessiv in drei Schritten untersucht.

1. Schritt: Resonator mit abruptem Übergang

Im ersten Schritt wurde zunächst der abrupte Übergang vom dielektrischen Spiegel zum Resonator ohne Anpassung der Poren untersucht. Dazu wurden für die vier Übergangsporen dieselben Parameter wie für den Spiegel verwendet. Dabei wurde der Abstand zwischen der Mitte der dem Schlitz nächsten Pore und dem Schlitz entsprechend der Gitterkonstante des Spiegels auf

$a = 385$ nm festgelegt. Das Modell besteht somit effektiv aus einem neunporigen Spiegel. Da die Zahl der Gesamtporen damit in allen Modellen gleich bleibt, kann ausgeschlossen werden, dass mögliche feldverstärkende Effekte auf einer Erhöhung der Porenanzahl basieren.

2. Schritt: Übergang mit Variation des Porenabstands

In der zweiten Simulation wurde der Abstand zwischen den vier Poren des Übergangs angepasst. Hierbei wurde die in Abschn. 8.1 erwähnte Annahme genutzt, dass eine Anpassung von Spiegel- und Resonatormode durch eine Anpassung der jeweiligen effektiven Modenindizes erreicht werden kann. Dementsprechend wurde der Abstand zwischen den Poren derart geändert, dass dies einer linearen Änderung des effektiven Brechungsindex entspricht.

3. Schritt: Übergang mit Variation des Porendurchmessers

Im dritten Modell wurde anstelle des Porenabstandes der Porendurchmesser variiert. Da es bisher keine Modellvorstellungen gibt, wie der Porendurchmesser des Übergangs den Q-Wert des Resonators beeinflusst, wurde hier eine lineare Änderung des Porendurchmessers untersucht. Als Randwerte dienten dabei der Durchmesser der Spiegelporen (200 nm) und die Breite des Schlitzes (100 nm).

4. Schritt: Übergang mit Variation des Porendurchmessers und -abstandes

In einem weiteren Modell wurde schließlich sowohl der Abstand als auch der Durchmesser der vier Übergangsporen angepasst und der Einfluss auf die Güte des Resonators untersucht. Für Durchmesser und Abstand wurden dabei die selben Parameter verwendet wie in den Schritten zwei und drei. Zur besseren Übersicht sind alle Parameter noch einmal in Tabelle 8.1 zusammengefasst.

5. Schritt: Änderung der Porenanzahl des Übergangs

Zum Abschluss wurde die Abhängigkeit der Güte des Übergangs von der Anzahl der verwendeten Poren untersucht. Dazu wurde zunächst der Einfluss der Anzahl der Spiegelporen auf die Güte des Resonators untersucht. Nach der Optimierung des Spiegels konnte der Einfluss der Porenanzahl im Übergang unabhängig von der Zahl der Spiegelporen analysiert werden.

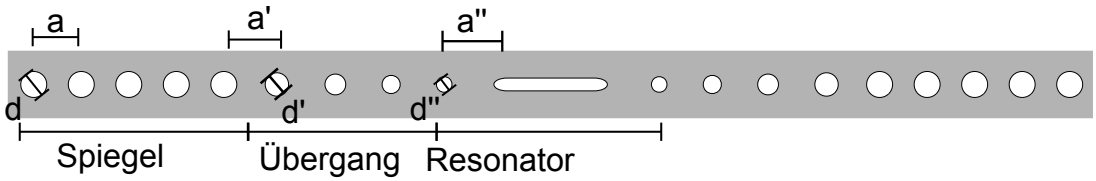


Abbildung 8.10: Schematische Darstellung eines Schlitzresonators mit der Bezeichnung der verschiedenen Modellparameter (vgl. Tabelle 8.1). Je nach untersuchtem Modell werden in den folgenden Abschnitten Teile dieser Parameter variiert.

Implementierung der Finite-Elemente-Methode

Zur numerischen Untersuchung wurde die in Abschn. 4.3 beschriebene FEM-Methode genutzt, wobei die Implementierung durch COMSOL Multiphysics in Verbindung mit MATLAB erfolgte. Um möglichst realitätsgetreue Simulationsergebnisse zu erzielen, wurden für alle Berechnungen dreidimensionale Modelle verwendet. Das Rechengebiet, in dem sich die untersuchten Strukturen befinden, wurde mit Streurandbedingungen[6] (*engl.: Scattering boundary conditions*) umgeben, um Rückreflexionen des Lichts am Rande des Rechengebiets zu unterdrücken. Der modellierte

[5] Der in Klammern angegebene Wert ist der Abstand zwischen der Mitte der an den Resonator angrenzenden Pore und dem Mittelpunkt der Rundung des Schlitzes.

[6] Streurandbedingungen werden ähnlich wie die bekannteren *Perfectly Matched Layer* (PML) eingesetzt, um Reflexionen des Lichts beim Austritt aus dem Rechengebiet zu unterdrücken. Im Gegensatz zu PMLs werden die Streurandbedingungen auf einer Fläche definiert und nicht in einem Volumen. Dies macht das Modell kleiner und spart so Rechenzeit.

Tabelle 8.1: Modellparameter für die Schlitzwellenleitersimulationen

Allgemeine Modellparameter

n_{Si}	n_{SiO_2}	n_{Slot}	Breite Wl.	Höhe Wl.	Schlitzbreite	Ø Poren d	Porenabstand a
3,45	1,445	2,3	500 nm	220 nm	100 nm	200 nm	385 nm

Spiegel-Resonator-Übergänge

	Porenabstand [nm] $a' \rightarrow a''$ Spiegel $\rightarrow$ Resonator	Ø Poren [nm] $d' \rightarrow d''$ Spiegel $\rightarrow$ Resonator
ohne Variation	385 - 385 - 385 - 385 - (385) [5]	200 - 200 - 200 - 200
Variation Porenabstand	388 - 390 - 393 - 396 - (399)	200 - 200 - 200 - 200
Variation Porendurchmesser	385 - 385 - 385 - 385 - (385)	180 -160 - 140 - 120
Variation Porenabstand und -durchmesser	388 - 390 - 393 - 396 - (399)	180 -160 - 140 - 120

Wellenleiter besitzt zwei Schnittflächen mit diesen Rändern. Um das Transmissionsverhalten der Struktur zu untersuchen, wurde an einer dieser Schnittflächen eine einlaufende TE-polarisierte ebene Welle definiert. An der gegenüberliegenden Schnittfläche lässt sich das transmittierte Feld bestimmen und mittels Durchstimmen der Anregungswellenlänge ein Transmissionsspektrum und daraus die Güte des Resonators berechnen. Da auf Grund der hohen Q-Werte und somit schmalen Resonanzen die Wellenlänge nur in sehr kleinen Schritten variiert werden kann, ist diese Methode zur Bestimmung des Q-Faktors sehr zeitaufwendig. Für eine effektivere Bestimmung der Resonatorgüte eignet sich das in Abschn. 4.3 beschriebene Verfahren der Eigenmodenanalyse. Entsprechend Gl. 4.24 lassen sich die Resonanzwellenlängen sowie die Q-Werte direkt aus den komplexen Eigenfrequenzen bestimmen. Zur Absicherung der Simulationsergebnisse wurden die Q-Werte für ausgewählte Strukturen mit beiden Methoden bestimmt.

Die Genauigkeit der Position der Resonanzmode sowie der Betrag ihres Q-Faktors hängen stark von der Auflösung des Gitters ab, das zur Diskretisierung des Rechengebiets genutzt wird. Ein geeignetes Maß für die Auflösung des Gitters und des damit verbundenen Rechenaufwands stellt die Anzahl der zu berechnenden Freiheitsgrade dar (vgl. Abschn. 4.3). In Abb. 8.11 sind der Q-Wert und die Wellenlänge der Resonanzmode eines exemplarischen Modells in Abhängigkeit der Anzahl der zu berechnenden Freiheitsgrade dargestellt. Für die vorliegenden Modelle wurden

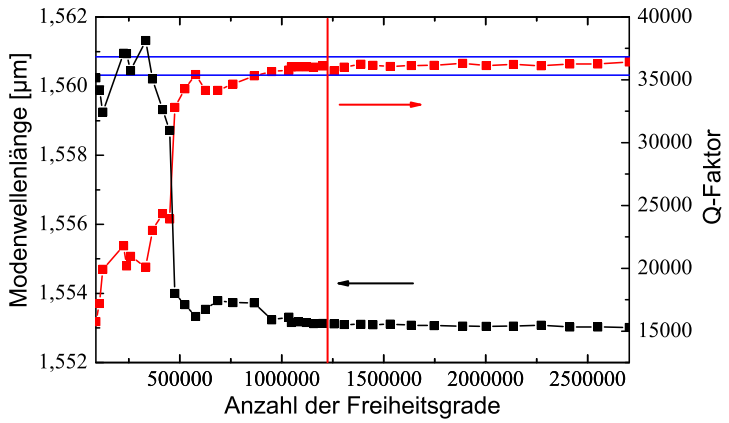


Abbildung 8.11: Abhängigkeit der Wellenlänge (schwarz) und des Q-Faktors (rot) der Resonatormode von der Anzahl der im Modell berechneten Freiheitsgrade. Ab einer Anzahl von einer Million Freiheitsgrade treten keine signifikanten Schwankungen der Kenngrößen auf. So variiert der Q-Faktor um weniger als 2% (blaue Linien). In den Modellen wurden ca. 1,2 Mio. Freiheitsgrade verwendet (rote Linie).

ca. 1,2 Mio. Freiheitsgrade berücksichtigt. Mit dieser Gitterauflösung können die Rechnungen als konvergiert betrachtet werden, da die Schwankungen des Q-Faktors bei unter 2% liegen. Eine weitere Verfeinerung des Gitters ist nicht sinnvoll, da dies keine Auswirkungen auf die berechneten Größen hat und lediglich zu einer Erhöhung der Rechenzeit führt.

8.3 Simulationsergebnisse und Interpretation

Im folgenden Abschnitt werden die Ergebnisse der numerischen Untersuchungen der Spiegel-Kavitäts-Übergänge der Schlitz-Resonatoren vorgestellt, ihre physikalischen Ursachen diskutiert und entsprechende Regeln zur Entwicklung geeigneter Resonatorstrukturen abgeleitet.

Einfacher Schlitzwellenleiter

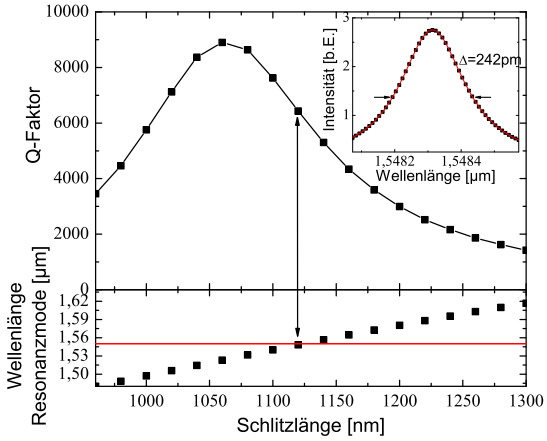


Abbildung 8.12: Q-Faktor eines einfachen Schlitzwellenleiters ohne speziellen Übergang in Abhängigkeit von der Schlitzlänge. Da die Wellenlänge der Resonatormode linear von der Länge des Schlitzes abhängt, lässt sich mit ihr die Resonanzwellenlänge einstellen. Die Resonanzmode bei einer Schlitzlänge von 1120 nm ist auch als Peak im Transmissionsspektrum zu erkennen (Inset). Aus ihrer Halbwertsbreite kann ebenfalls der Q-Faktor bestimmt werden.

Zunächst wird als Referenz das Modell eines Schlitzresonators ohne speziellen Spiegel-Resonator-Übergang untersucht. Die entsprechenden Modellparameter sind in Tabelle 8.1 zusammengefasst. Um den maximalen Q-Faktor der Struktur zu ermitteln, ist es notwendig, die Resonanzwellenlänge der Kavität zu variieren, was durch eine Variation der Schlitzlänge erreicht werden kann. Wie im unteren Teil von Abb. 8.12 ersichtlich, hängt die Wellenlänge der Resonanzmode linear von der Schlitzlänge ab. Dies ist verständlich, da für die Resonanzwellenlänge $\lambda_{\text{Resonanz}} = m\, l\, n_{\text{eff}}/2$ gilt, wobei l die Schlitzlänge ist, n_{eff} der Modenindex und m der Ordnung der Mode entspricht.

Im oberen Teil der Abbildung ist die Abhängigkeit des Q-Faktors von der Schlitzlänge und somit indirekt von der Wellenlänge der Resonatormode dargestellt. Um die Wellenlänge der Resonanz möglichst nah an die Designwellenlänge ($\lambda = 1,55\ \mu$m) zu schieben, für welche die Spiegel optimiert wurden, muss eine Schlitzlänge von 1120 nm gewählt werden. Dies entspricht einer Resonanzwellenlänge von $\lambda_{\text{Resonanz}} = 1,548\ \mu$m. Der mittels Eigenfrequenzanalyse bestimmte Q-Faktor der zugehörigen Mode besitzt einen Wert von $Q = 6400$ und stimmt damit mit dem aus der Halbwertsbreite (FWHM) der Resonanz ($\Delta = 242$ pm) nach Gl. 8.3 bestimmten Wert überein.

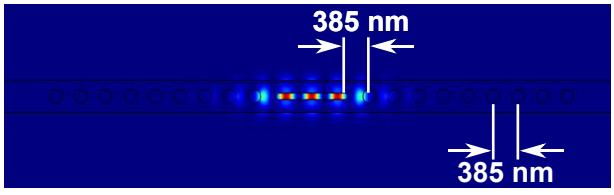


Abbildung 8.13: Örtliche Verteilung der Intensität des elektrischen Feldes im Resonator ohne speziellen Übergang. Die Mode dritter Ordnung, erkennbar an den drei Intensitätsmaxima, ist fast ausschließlich im Schlitz der Kavität lokalisiert.

Die zur Mode gehörende Feldverteilung ist in Abb. 8.13 dargestellt. Wie bereits in Abschn. 8.2 beschrieben, ist das TE-polarisierte elektrische Feld stark im Schlitz konzentriert, was die Interaktion mit dem infiltrierten Material verstärkt. Das effektive Modenvolumen (Gl. 8.4) beträgt $V_{\text{eff}} = 0,062\ \mu\text{m}^3$ und stellt ein Maß für die Konzentration des Lichts im Resonator dar. Ein geringes Modenvolumen ist neben einem hohen Q-Faktor ein Kennzeichen für einen Resonator mit hoher Feldverstärkung. Im Vergleich zur Referenzstruktur in Ref. [151] ($V_{\text{eff}} = 0,065\ \mu\text{m}^3$) ist das Modenvolumen dieser Struktur etwas kleiner. Dies lässt sich mit dem abrupten Modenübergang an der Grenze zwischen Resonator und Spiegel erklären. Im Gegensatz zur Referenzstruktur, bei der die Resonatormode langsam im Spiegel abklingt, ist hier die Eindringtiefe reduziert und somit auch das von der Mode eingenommene Volumen.

Es ist jedoch zu beachten, dass bei der Optimierung der feldverstärkenden Eigenschaften des Resonators dessen Güte und Modenvolumen nicht unabhängig voneinander maximiert werden können. Da der Q-Faktor nach Gl. 8.5 linear von der Eindringtiefe des Feldes in die Spiegel L_p und der Länge des Resonators L abhängt, die wiederum das Modenvolumen bestimmen, führt eine Reduktion des Modenvolumens gleichzeitig zu einer Verringerung des Q-Wertes. Beeinflussen lässt sich das Verhältnis von Q-Faktor und Modenvolumen durch die Wahl der Ordnung der Resonanzmode. Moden niedriger Ordnung weisen geringere Modenvolumina auf, besitzen allerdings in der Regel auch kleinere Q-Faktoren. Wie in Abb. 8.13 zu sehen ist, handelt es sich bei der untersuchten Resonanz um eine Mode dritter Ordnung, erkennbar an den drei Intensitätsmaxima. Sie wurde ausgewählt, da sie einen guten Kompromiss aus einem kleinen Modenvolumen und einem hohen Q-Faktor darstellt. Außerdem ist ihr Modenvolumen vergleichbar mit dem der in Ref. [139, 151, 153] genannten Strukturen.

Der maximale Q-Wert von $Q \approx 9000$ liegt bei einer geringeren Wellenlänge von $\lambda = 1,52\ \mu\text{m}$, was einer Schlitzlänge von 1060 nm entspricht. Die Abnahme des Q-Wertes bei längeren Kavitäten und somit größeren Resonanzwellenlängen lässt sich damit erklären, dass sich die Mode der unteren Bandkante des Spiegels annähert, was eine Verringerung der Reflektivität zur Folge hat. Es kommt daher zu erhöhten Verlusten auf Grund der Transmission durch die Spiegel. Für kleinere Resonanzwellenlängen (kürzere Kavitäten) reduziert sich der Q-Faktor auf Grund des Auftretens von lateralen Streuverlusten in das Substrat bzw. das umgebende Medium. Diese treten auf, weil sich die Moden für kleinere Wellenlängen in Richtung des Luftbandes verschieben, was zu einer Verringerung des effektiven Modenindex und somit einer verstärkten Modenfehlanpassung führt. Diese Interpretation der Beobachtungen stimmt mit Untersuchungen von Lalanne *et al.* [148] überein, Reflektivitäten und Streuverluste an BRAGGspiegeln in Streifenwellenleitern betreffend.

Schlitzwellenleiter mit variiertem Porenabstand

Im nächsten Schritt wurde das Übergangskonzept von Lalanne *et al.* [148] für einen infiltrierten Schlitzresonator getestet. Dieses beruht auf einer Anpassung von Spiegel- und Resonatormode durch eine Variation des Porenabstands (vgl. Abschn. 8.1).

Da eine numerische Bestimmung der optimalen Porenabstände unangemessen hohe Rechenzeiten erfordern würde, wurde die Annahme von Sauvan *et al.* [155] genutzt, wonach die Feldanpassung durch eine Anpassung der effektiven Modenindizes erzielt werden kann. Da für den effektiven Index der Blochmode im Spiegel $n_{\text{B}} = \lambda/2\,a$ gilt, lässt sich die Anpassung der Modenindizes durch eine Änderung des Porenabstands $a' \rightarrow a''$ (Abb. 8.10) erreichen. In diesem Modell wurde der Porenabstand so geändert, dass dies einer linearen Anpassung des effektiven Indexes des Spiegels $n_{\text{B}} = 1,55\ \mu\text{m}/2 \cdot 385\ \text{nm} = 2,013$ an den effektiven Index der Resonatormode $n_{\text{eff}} = 1,929$ entspricht. n_{eff} wurde hierbei mittels Modenanalyse bestimmt [156].

Die Änderung erfolgte in fünf Schritten, in denen die Abstände zwischen der letzten Spiegelpore und der ersten Übergangspore (a') bis zum Abstand zwischen der letzten Pore des Über-

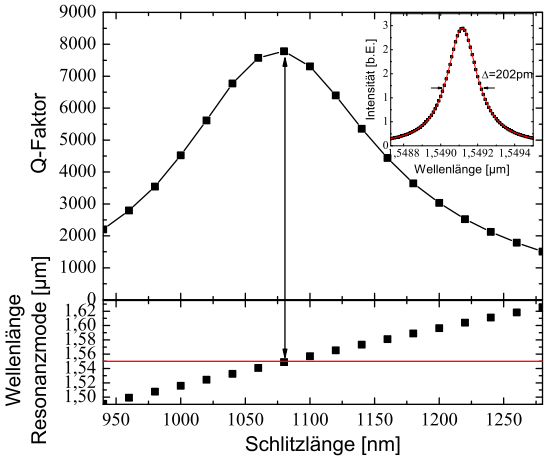


Abbildung 8.14: Änderung der Güte eines Schlitzresonators bei Anpassung des Porenabstands im Übergang zwischen Kavität und Spiegel, in Abhängigkeit von der Schlitzlänge. Bei einer Schlitzlänge von 1080 nm beträgt die Halbwertsbreite der Resonanz $\Delta = 202$ pm, was bei einer Resonanzwellenlänge von $\lambda = 1,549$ μm einer Güte von $Q \approx 8000$ entspricht.

gangs und dem Schlitz (a'') angepasst werden (Abb. 8.10). Die Parameter sind in Tabelle 8.1 zusammengefasst.

Die in Abhängigkeit der Schlitzlänge ermittelten Q-Werte wurden analog zum vorherigen Modell ermittelt und sind in Abb. 8.14 dargestellt. Der Q-Faktor der Resonanz bei der Designwellenlänge von $1,55$ μm hat sich im Vergleich mit der Resonanz des Referenzmodells auf einen Wert von $Q \approx 8000$ erhöht. Die im Vergleich zur Literatur recht moderate Erhöhung des Q-Wertes wird jedoch nicht durch eine generelle Erhöhung des Q-Faktors auf Grund des angepassten Porenabstands verursacht. Vielmehr führt die Änderung des Porenabstands zu einer Verschiebung des maximalen Q-Werts zur Designwellenlänge.

Einen Hinweis, warum die Anpassung des Porenabstands nicht zu der erwarteten Erhöhung des Q-Wertes führt, liefert ein Blick auf die Feldverteilung der zum maximalen Q-Faktor gehörenden Mode (Abb. 8.15). Im Vergleich zur Feldverteilung in Abb. 8.13 lässt sich kein nennenswerter Unterschied in der Ausdehnung der Mode erkennen, was sich ebenfalls im effektiven Modenvolumen widerspiegelt. Dies ist mit $V_{\text{eff}} = 0,062$ μm^3 genauso groß wie das des Referenzresonators. Anscheinend hat die Anpassung der effektiven Indizes hier nicht zu einer gleichzeitigen Anpassung der Spiegel- und Resonatormoden geführt.

Die Ursache hierfür lässt sich aus der Untersuchung der Feldverteilungen an Querschnitten verschiedener Stellen der Resonatorstruktur ableiten. Hierzu werden die Modenprofile innerhalb des Schlitzes und in der ersten Spiegelpore verglichen. Wie den Querschnitten in Abb. 8.16 zu entnehmen ist, unterscheiden sich die Feldverteilungen an beiden Orten stark voneinander. Das Feld innerhalb der Übergangspore ist stark ausgedehnt im Vergleich zum Feld innerhalb des Resonatorschlitzes, das stark komprimiert und dadurch in horizontaler Richtung sehr homogen im Schlitz verteilt ist. Es ist daher verständlich, dass die Feldüberlagerung zwischen Spiegel- und Resonatormode gering ist. Um eine effiziente Anpassung der beiden Moden zu erzielen, ist es daher erforderlich, neben der Anpassung des Porenabstands eine Anpassung der Porendurchmesser vorzunehmen. Im folgenden Abschnitt wird dazu der Einfluss eines Spiegel-Resonator-Übergangs mit angepasstem Porendurchmesser untersucht.

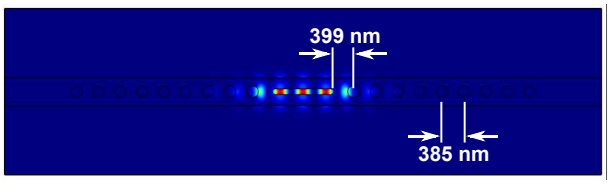


Abbildung 8.15: Örtliche Verteilung der Intensität des elektrischen Feldes im Resonator bei angepasstem Porenabstand des Spiegel-Kavitäts Übergangs. Zwar hat sich die Schlitzlänge mit Resonanz bei der Designwellenlänge auf 1080 nm verkürzt, die Feldverteilung im Resonator bleibt jedoch gleich, weshalb auch das effektive Modenvolumen gleich bleibt.

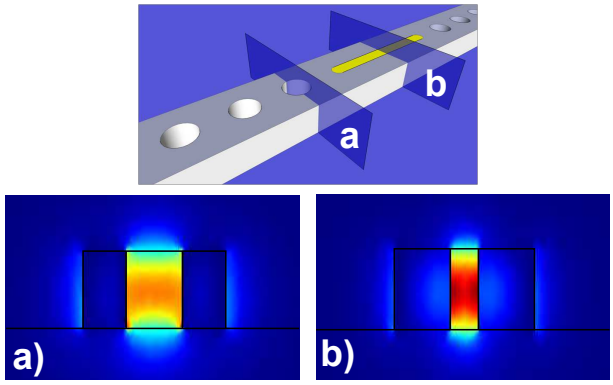


Abbildung 8.16: Vergleich der Intensitätsverteilung der Mode eines Resonators mit einer Schlitzlänge von 1080 nm im Querschnitt der ersten Übergangspore (a) und im Querschnitt durch die Kavität (b).

Schlitzwellenleiter mit variiertem Porendurchmesser

Die Untersuchungen im vorhergehenden Abschnitt haben gezeigt, dass die für feste Resonatoren bewährte Näherung nach Sauvan *et al.* [155], eine Modenanpassung durch eine graduelle Variation der Porenabstände zu erreichen, bei infiltrierten Resonatoren keine Erhöhung der Güte zur Folge hat. Deshalb wird in diesem Abschnitt der Einfluss einer Änderung des Porendurchmessers untersucht. Ausgehend von der starken Abweichung der Modenprofile im Resonator und der angrenzenden Pore (Abb. 8.16) ist zu vermuten, dass dieser Ansatz einen wesentlichen Einfluss auf die Güte des Resonators haben wird.

Wie im vorhergehenden Abschnitt besteht das Modell aus einem Übergang mit vier Poren, an den sich der Spiegel mit fünf Poren anschließt. Der Abstand zwischen den einzelnen Poren des Übergangs sowie der Abstand zwischen dem Mittelpunkt der letzten Pore und dem Mittelpunkt der Krümmung des Schlitzendes entspricht der Gitterkonstante a des Spiegels. Dies gewährleistet, dass mögliche Änderungen des Q-Faktors im Vergleich zum unmodifizierten Modell in Abschn. 8.3 allein durch die Änderung des Porendurchmessers verursacht wurden.

Analog zu Abschn. 8.3 wurde ein linearer Übergang erzeugt, wobei hier der Durchmesser der Poren linear variiert wurde. Als Randwerte wurden der Durchmesser der Spiegelporen ($d = 200$ nm) sowie die Breite des Schlitzes ($b = 100$ nm) verwendet. Die entsprechenden Werte sind in Tabelle 8.1 zusammengefasst. Vergleicht man nun die Feldverteilung der Resonatormode bei der Designwellenlänge (Abb. 8.17) analog zu Abb. 8.16 im Schlitz und in der ersten angrenzenden Pore, so lässt sich eine deutlich bessere Übereinstimmung der Modenprofile feststellen. Die erhöhte Feldüberlappung macht sich auch bezüglich der spektralen Breite der Resonatormode bemerkbar. Deren Halbwertsbreite verringert sich auf $\Delta\lambda = 130$ pm (Inset Abb. 8.18), was bei einer Wellenlänge von $\lambda = 1,55$ μm einem Q-Wert von $Q \approx 12000$ entspricht. Dieser ist damit doppelt so hoch wie der Q-Faktor eines gleichartigen Resonators ohne modifizierten Übergang.

Eine noch stärkere Erhöhung der Güte ergibt sich für Resonatoren mit kürzeren Schlitzlängen (siehe Abb. 8.18). Dabei tritt der Maximale Q-Faktor von $Q \approx 55300$ bei einer Schlitzlänge von

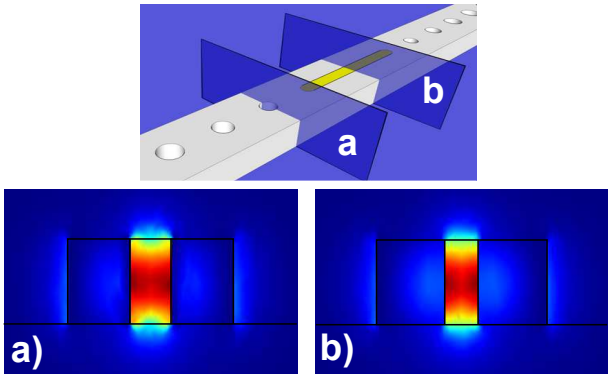


Abbildung 8.17: Vergleich der Intensitätsverteilung der Mode eines Resonators mit einer Schlitzlänge von 1020 nm im Querschnitt der ersten Übergangspore (a) und im Querschnitt durch die Kavität (b). Durch die Anpassung des Porendurchmessers im Übergangsbereich zwischen Spiegel und Kavität ähneln sich die Feldverteilungen wesentlich stärker.

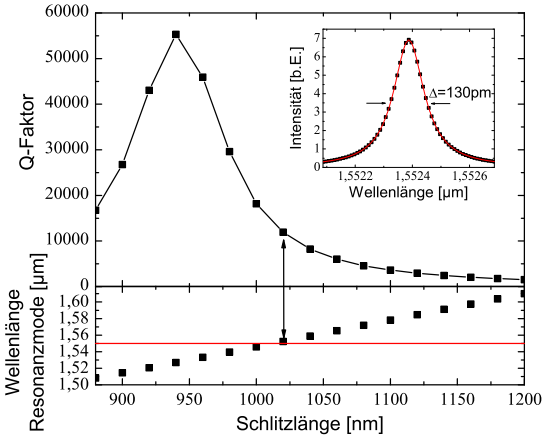


Abbildung 8.18: Q-Faktor eines Schlitzresonators, bei dem der Porendurchmesser d im Übergangsbereich linear geändert wurde, in Abhängigkeit von der Schlitzlänge. Der maximale Q-Faktor erhöht sich auf einen Wert von $Q \approx 55300$. Allerdings ist die entsprechende Resonanzmode stark blau verschoben.

940 nm auf, was einer Resonanzwellenlänge von $\lambda = 1,527$ μm entspricht. Diese Erhöhung des maximalen Q-Faktors um mehr als das Sechsfache bestätigt damit eindrucksvoll die Effektivität der Anpassung des Porendurchmessers im Übergang.

Schlitzwellenleiter mit variiertem Porenabstand und -durchmesser

Im Folgenden wird die Kombination der zuvor betrachteten Methoden zur Anpassung der Feldverteilung von Spiegel- und Resonatormode untersucht. Die Porenabstände des Übergangs wurden dazu entsprechend Abschn. 8.3 und die Porendurchmesser entsprechend Abschn. 8.3 gewählt (siehe Tabelle 8.1). Alle anderen Parameter entsprechen denen der vorhergehenden Modelle. Bei der Betrachtung der schlitzlängenabhängigen Q-Werte (siehe Abb. 8.19) zeigt sich, dass die zusätzliche Einführung der Variation des Porenabstandes im Übergang zwar zu einer Verringerung des maximalen Q-Wertes geführt hat. Allerdings hat sie auch zu einer Verschiebung des Maximalwertes zur Designwellenlänge geführt, wie es bereits in Abschn. 8.3 zu beobachten war. Für ein Modell mit einer Resonanz bei der Designwellenlänge hat somit die Kombination beider Anpassungsmethoden zu einer weiteren Erhöhung des Q-Wertes auf $Q \approx 35000$ geführt. Dies zeigt eindrucksvoll, wie mittels geeigneter Kombination aus Porendurchmesseränderung und Abstandsanpassung der Übergang zwischen Schlitzkavität und Spiegeln wesentlich sanfter modelliert werden kann, was die den Q-Faktor limitierenden Streuverluste reduziert. Der verbesserte Übergang spiegelt sich auch in der in Abb. 8.20 dargestellten Intensitätsverteilung der Resonatormode mit einer Wellenlänge von $\lambda = 1.55$ μm wider. Im Vergleich zu Abb. 8.3 erstreckt sich die Mode hier weiter in das Porengebiet, was für die langsame Anpassung des Modenprofils spricht. Die erhöhte Eindringtiefe spiegelt sich auch in dem von der Mode eingenommenen Volumen wider,

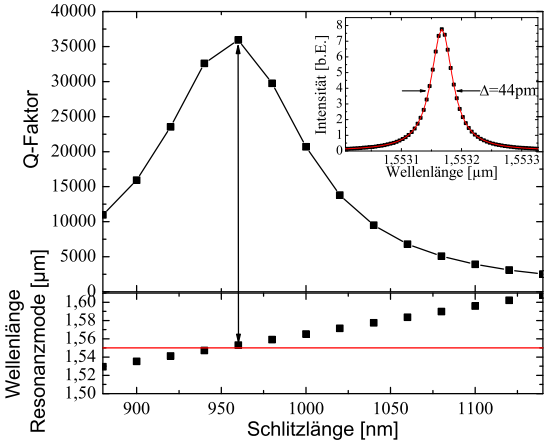


Abbildung 8.19: Q-Faktor eines Schlitzresonators mit vollständig angepasstem Übergang in Abhängigkeit von der Schlitzlänge. Die Güte der Resonatormode bei der Designwellenlänge $\lambda = 1,55$ μm erhöht sich auf einen Wert von $Q \approx 35000$. Dies entspricht einer spektralen Halbwertsbreite von $\Delta = 44$ pm.

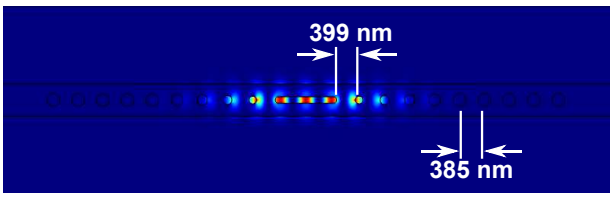


Abbildung 8.20: Örtliche Verteilung der Intensität des elektrischen Feldes in einem Resonator mit vollständig angepasstem Übergangsbereich. Durch die Anpassung von Porendurchmesser und -abstand erfolgt die Kopplung von Spiegel- und Kavitätsmode wesentlich sanfter was zu einem tieferen Eindringen der Feldverteilung in den Übergangsbereich führt.

das sich auf $V_{\text{eff}} = 0,084\ \mu\text{m}^3$ vergrößert hat (vgl. $V_{\text{eff}} = 0,062\ \mu\text{m}^3$ der Referenzstruktur in Abschn. 8.3).

Nachdem gezeigt werden konnte, wie die Variation von Porenabstand und -durchmesser den Q-Faktor bei einer bestimmten Wellenlänge erhöhen kann, ist es angebracht, die wesentlichen Unterschiede zwischen den Übergängen in massiven Resonatoren und Schlitzresonatoren zu diskutieren, um eine Erklärung zu finden, warum das vereinfachte Anpassungskonzept nach Sauvan *et al.* [155] im vorliegenden Fall versagt.

Betrachtet man das Vorgehen von Lalanne *et al.* in Ref. [148], so findet dort die Anpassung zwischen der Feldverteilung im massiven Resonator und der Feldverteilung zwischen den angrenzenden Poren statt. Es ist offensichtlich, dass diese eine starke Überschneidung besitzen, da die Verteilung der Dielektrizitätskonstanten in beiden Fällen gleich ist. Würde hingegen die Anpassung der Feldverteilung im Resonator an die Feldverteilung in den angrenzenden Poren erfolgen, so würde sich keine hohe Überschneidung erzielen lassen, da die Modenprofile zu stark voneinander abweichen.

Anderes gilt im Fall der Schlitzresonatoren. Hier *muss* die Anpassung der Feldverteilung der Resonatormode an das Feld in der Pore erfolgen, da diese ebenfalls im Innern der Pore konzentriert ist. Sie entspricht somit wesentlich besser dem Profil der Resonatormode als das Profil des Feldes zwischen den Spiegeln.

Einfluss der Porenanzahl auf den Q-Faktor

Ein weiterer Parameter, der die Anpassung der Moden zwischen Kavität und Spiegel beeinflussen kann, ist die Länge des Übergangs und somit die Anzahl seiner Poren. Um die Vergleichbarkeit zwischen den untersuchten Schlitz-Resonatoren und dem Ausgangsmodell von Zain *et al.* [151] zu gewährleisten, war diese bisher auf vier Poren festgelegt. Da sich gezeigt hat, dass ein möglichst adiabatischer Übergang zwischen den Moden die Reduktion von Streuverlusten begünstigt, scheint eine Erhöhung der Porenanzahl im Übergang geeignet, den Q-Wert weiter zu erhöhen. Um jedoch den Einfluss der Änderung der Porenanzahl zu bestimmen, ist es zunächst erforderlich, den Einfluss der Anzahl der Spiegelporen und den der Übergangsporen zu separieren. Erstere bestimmt im Wesentlichen die Verluste, die durch Transmission des Lichts in den sich anschließenden Wellenleiter entstehen, letztere wie bereits erwähnt die Streuverluste des Übergangs. Die

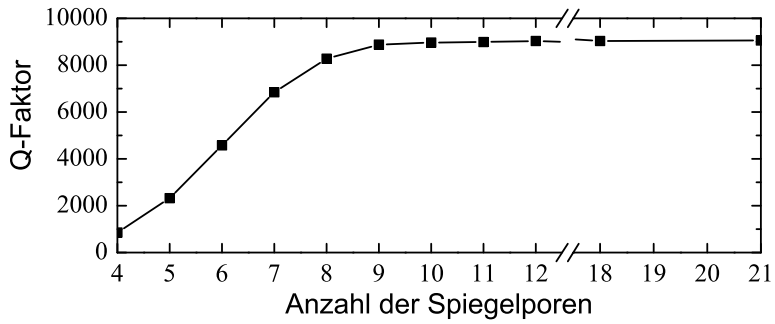


Abbildung 8.21: Abhängigkeit des Q-Faktors von der Anzahl der Spiegelporen. Ab neun Poren ist die maximale Güte erreicht. Die hier verwendeten Spiegel bestehen aus 13 unmodifizierten Poren.

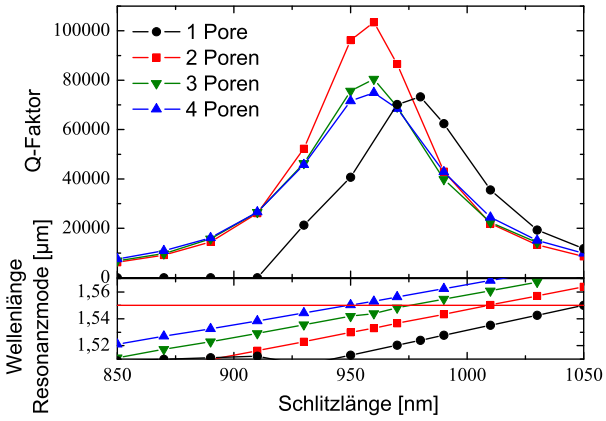


Abbildung 8.22: Abhängigkeit der Resonatorgüte von der Anzahl der verwendeten Poren im Übergang. Die höchste Güte lässt sich für einen Übergang mit zwei Poren erzielen ($Q \approx 103000$).

Stärke der beiden Verlustmechanismen lässt sich mit $1/Q_{\text{trans}}$ bzw. $1/Q_{\text{streu}}$ angeben [170], womit die Gesamtverluste analog zu Ref. [171]

$$\frac{1}{Q_{\text{ges}}} = \frac{1}{Q_{\text{trans}}} + \frac{1}{Q_{\text{streu}}} \tag{8.7}$$

betragen.

Um den Einfluss der Streuverluste auf die Güte Q_{ges} des Resonators separat zu betrachten, ist es daher erforderlich, die Transmissionsverluste zu minimieren, indem Q_{trans} maximiert wird. Dies lässt sich durch eine Erhöhung der Anzahl der Spiegelporen erreichen, wodurch die Reflektivität der Spiegel bis zur „Sättigung“ erhöht wird. Der Q-Faktor ist somit im Wesentlichen durch die Streuverluste am Spiegel-Kavitäts-Übergang limitiert. Abbildung 8.21 zeigt die Abhängigkeit des Q-Faktors von der Anzahl der Spiegelporen. Die Poren besitzen, wie die der zuvor untersuchten Modelle, eine Gitterkonstante von $a = 385$ nm und einen Porendurchmesser von $d = 200$ nm. Für Spiegel mit vier Poren ergibt sich eine sehr breite Resonanz mit einem entsprechend geringen Q-Faktor von $Q \approx 1000$. Dieser steigt mit zunehmender Porenanzahl linear an und sättigt für neun Poren pro Spiegel bei einem Wert von $Q \approx 9000$, wie schon im ersten Beispiel eines Resonators ohne spezialisierten Übergang (Abschn. 8.3) gezeigt wurde. Somit beeinflussen in einem Resonator mit mehr als neun Spiegelporen nur die zusätzlich modifizierten Poren im Übergang die Güte des Resonators. Für die folgenden Rechnungen wurden Spiegel mit jeweils 13 unmodifizierten Poren genutzt, an die sich die modifizierten Poren der Übergänge anschließen. Die Übergänge besitzen linear angepasste Porenabstände und -durchmesser analog zu Abschn. 8.3. Dabei sind die Randwerte für den Porendurchmesser wiederum die Schlitzbreite der Kavität ($d = 100$ nm) und der Durchmesser der Spiegelporen ($d = 200$ nm). Der Porenabstand variiert zwischen $a = 402$ nm und $a = 385$ nm (vgl. Abschn. 8.3). Die exakten Parameter der jeweiligen Übergänge sind in Tabelle 8.2 zusammengefasst.

Tabelle 8.2: Parameter der Übergänge mit variabler Porenanzahl

	Porenabstand [nm] Spiegel → Resonator	Porendurchmesser [nm] Spiegel → Resonator
1 Pore	390 - (396) [4]	150
2 Poren	389 - 393 - (397)	167 - 133
3 Poren	388 - 392 - 395 - (398)	175 - 150 - 125
4 Poren	388 - 390 - 393 - 396 - (399)	180 - 160 - 140 - 120

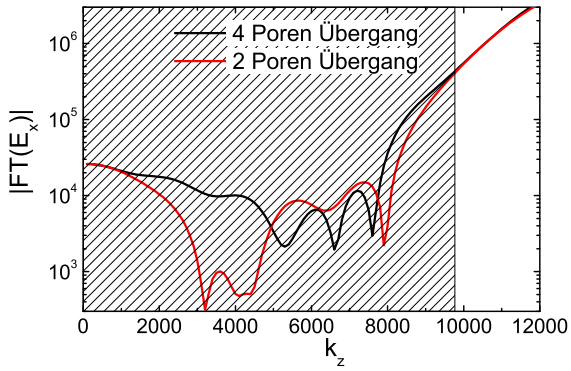


Abbildung 8.23: Fouriertransformierte der TE-Komponente des elektrischen Feldes der Resonatormode an der Grenzfläche zum Substratoxid in Abhängigkeit von der Wellenvektorkomponente k_z in Ausbreitungsrichtung. Diese weist für einen vierporigen Übergang (schwarz) mehr Feldanteile ($\int |FT(E_x)|\,\mathrm{dk_z} = 2,9$ b.E.) oberhalb der Lichtlinie des Substrats (schraffiert) auf als für den zweiporigen Übergang ($\int |FT(E_x)|\,\mathrm{dk_z} = 2,3$ b.E.). Die resultierenden Verluste führen zu einer stärkeren Reduktion des Faktors der Struktur.

Für einen vierporigen Übergang erhöht sich der Q-Faktor bei 13 Spiegelporen im Vergleich zu den zuvor untersuchten Strukturen auf einen maximalen Wert von $Q \approx 75000$. Ein Vergleich der Übergänge mit unterschiedlicher Porenanzahl (Abb. 8.22) zeigt, dass sich entgegen der zuvor aufgestellten Vermutung keine Verbesserung des maximalen Q-Faktors mit einer zunehmenden Anzahl an Poren im Übergang erreichen lässt. Statt dessen zeigt der zweiporige Übergang den mit $Q \approx 103000$ höchsten Wert. Offensichtlich ergeben sich für eine geringere Anzahl an Poren insgesamt geringere Streuverluste als für längere Übergänge, obwohl der Übergang abrupter erfolgt.

Das lässt sich auch aus der Betrachtung der Fourieranalyse des elektrischen Feldes an der Grenzfläche zum unterliegenden Oxid erkennen. Dies ist eine häufig verwendete Methode zur Analyse der Verlustmechanismen in Resonatorstrukturen. Dabei werden die Feldanteile der Resonatormode in Abhängigkeit der Wellenzahl der jeweiligen Teilwelle dargestellt, wodurch Feldanteile identifiziert werden können, die auf Grund eines ungünstigen Wellenvektors an die Umgebung ankoppeln können. Abbildung 8.23 zeigt die Fouriertransformierte des TE-Feldanteils in Abhängigkeit der Wellenvektorkomponente k_z in Ausbreitungsrichtung für den Fall eines zwei- bzw. vierporigen Übergangs. Es zeigt sich, dass für den vierporigen Übergang mehr Feldanteile mit einem Wellenvektor, der oberhalb der Lichtlinie des Substratoxids liegt, auftreten als im Fall des zweiporigen Übergangs. Das bedeutet, dass diese Anteile des elektrischen Feldes an Moden im Oxid ankoppeln können und somit verloren gehen. Die Verluste in der vierporigen Struktur sind damit entsprechend höher was eine Erklärung für den reduzierten Q-Wert liefert. Dieser Fall zeigt, dass der Ansatz eines möglichst glatten Übergangs zwar geeignet ist Strukturen mit hohen Q-Faktoren zu erzeugen, allerdings wir damit nicht notwendigerweise der maximal mögliche Q-Faktor einer Resonatorstruktur erreicht. Dieser lässt sich bisher nur näherungsweise durch umfangreiche Simulationen mit zufällig veränderten Porenparametern erreichen.

8.4 Realisierungskonzept für eindimensionale Wellenleiter-Schlitz-Mikroresonatoren

Die hier beschriebenen Strukturen lassen sich mittels Elektronenstrahllithografie und einer anschließenden Strukturierung durch Plasmaätzverfahren (siehe Abschn. 3.3) herstellen. Dabei bietet sich analog zu den Wellenleitern in Kapitel 7 die Verwendung eines SOI Materialsystems an. Auf Grund der hohen Präzision der verwendeten Verfahren lassen sich dabei auch die schmalen Schlitze in der Kavität problemlos erzeugen (Abb. 8.24).

Eine größere Herausforderung stellt die lokale Infiltration des Schlitzes dar. Da ein Einbetten des gesamten Resonators in das Infiltrat die Güte des Systems drastisch reduzieren kann, ist es besonders wichtig, nur den Schlitz zu infiltrieren. Prinzipiell stellt die Infiltration eines solchen Schlitzes kein Problem dar, da Vertiefungen im Silizium mit den zuvor erwähnten Ab-

[4] Der in Klammern angegebene Wert ist der Abstand zwischen der Mitte der an den Resonator angrenzenden Pore und dem Mittelpunkt der Rundung des Schlitzes.

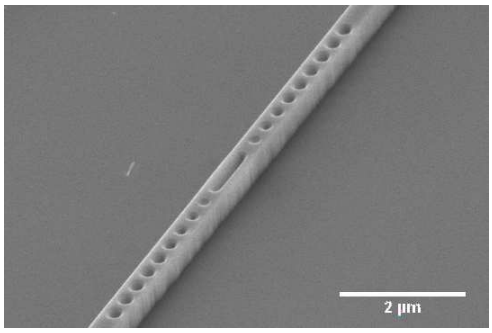


Abbildung 8.24: Elektronenmikroskopaufnahme des Prototypen eines eindimensionalen Wellenleiter-Schlitz-Mikroresonators. Das Design orientiert sich hierbei an der in Abschn. 8.3 untersuchten Struktur. Das Bauelement wurde mittels Elektronenstrahllithografie und anschließendem RIE-Plasmaätzschritt hergestellt.

scheideverfahren homogen gefüllt werden können. Schwieriger ist es, das Chalkogenidglas von den umliegenden Flächen gezielt zu entfernen.[7]

Ein vielversprechender Ansatz hierfür ist die Methode des „Direct Laser Writings“ [172], bei der das Chalkogenidglas mit einem stark fokussierten Laser lokal belichtet wird. Auf Grund der hohen Photosensitivität der Chalkogenidgläser ist es möglich, das Glas durch photoinduzierte Polymerisation auszuhärten. Unbelichtete Teile lassen sich anschließend naßchemisch entfernen.

Analog zum „Direct Laser Writing“ lassen sich auch Elektronenstrahlen zur Belichtung des Chalkogenidglases verwenden [173]. Dies würde die Erzeugung noch feinerer Strukturen ermöglichen, die ebenfalls naßchemisch freigelegt werden können.

8.5 Anwendungsbeispiel bistabiles Verhalten

Zum Abschluss des Kapitels soll hier ein mögliches Anwendungsbeispiel für lokal infiltrierte Wellenleiter-Schlitz-Resonatoren diskutiert werden. Dabei liegt der Schwerpunkt auf dem bistabilen Transmissionsverhalten einer solchen Struktur, das durch die Verwendung eines KERR-aktiven Materials wie As_3S_2 hervorgerufen wird. Ein solches Material weist einen intensitätsabhängigen Brechungsindex $n = n_0 + n_2\, I$ auf, wobei $n_2^{As_3S_2} = 2,9 \cdot 10^{-18}$ m^2/W der KERR-Koeffizient ist. Um eine Abschätzung der Intensitätsschwelle für das Auftreten eines solchen Effekt in der in Abschn. 8.1 untersuchten Struktur mit zweiporigem Übergang zu treffen, wurde für die Berechnung der Transmissionseigenschaften das Modell eines einfachen Fabry-Pérot-Resonators verwendet. Dabei wurde davon ausgegangen, dass sich der Resonator bereits im eingeschwungenen Zustand befindet. Für die Güte des Resonators wurde ein Wert von $Q = 10000$ angenommen. Dies stellt eine konservative Abschätzung für einen realen Resonator dar, dessen Q-Faktor in der Regel unter dem theoretisch bestimmten Wert liegt. Um daraus die Reflektivität der Resonatorspiegel zu ermitteln, lässt sich der analytische Ausdruck für den Q-Wert [72]

$$Q = \pi\, L_{\mathrm{cav}}/\lambda \frac{\sqrt{R}}{1-R}\,, \tag{8.8}$$

mit der Resonatorlänge L_{cav} umformen zu:

$$R = \left(-\frac{\pi\, L_{\mathrm{cav}}}{2\, Q\, \lambda} + \sqrt{\left(\frac{\pi\, L_{\mathrm{cav}}}{2\, Q\, \lambda}\right)^2 + 1} \right)^2 . \tag{8.9}$$

Die linearen Transmissionseigenschaften (Inset Abb. 8.25) lassen sich dann mit Hilfe der Airy-Formel berechnen [174]:

$$I_{\mathrm{trans}} = \frac{(1-R)^2}{(1-R)^2 + 4\, R \sin^2 \varphi}\, I_0\ , \tag{8.10}$$

[7] Der Versuch das Chalkogenid (As_2S_3) mit Hilfe eines Lift-Off Prozesses zu entfernen, war nicht erfolgreich. Hierbei wurde die Oberfläche mit einer dünnen Chromschicht bedeckt, auf der das Chalkogenidglas abgeschieden wurde. Beim anschließenden naßchemischen Ablösen des Chroms wurde allerdings auch das Chalkogenidglas aus der Vertiefung entfernt.

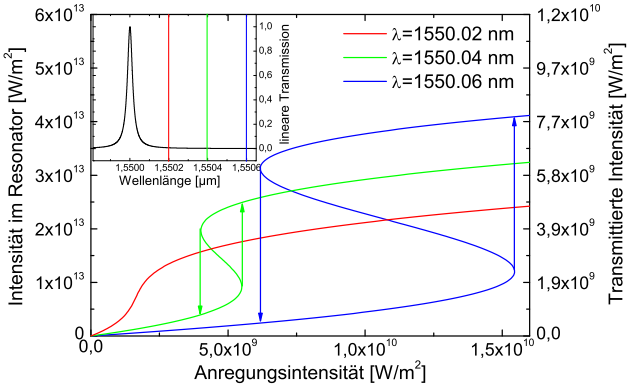


Abbildung 8.25: Simulation der optischen Bistabilität in einem mit As_3S_2 gefüllten Resonator. Durch die Intensitätsabhängigkeit des Brechungsindex verschiebt sich die Resonanzmode (linearer Fall siehe Inset), was zu einem Hystereseverhalten bei einer Änderung der Anregungsintensität führt. Die s-förmige Kurve stellt dabei lediglich eine analytische Lösung der entsprechenden Airy-Funktion dar. Praktisch kommt es zu einem Intensitätssprung an den mit Pfeilen gekennzeichneten Stellen. Der Schwellwert, ab dem ein solches Verhalten auftritt, wird durch den KERR-Koeffizienten des Infiltrats und die Güte des Resonators bestimmt.

mit $\varphi_0 = 2\pi\, n_0 \frac{L_{\mathrm{cav}}}{\lambda}$. Wenn der Resonator ein optisch nichtlineares Material enthält, wird der Phasenterm intensitätsabhängig und es ergibt sich ein weiterer Beitrag $\varphi_{\mathrm{NL}} = 2\pi\, \frac{L_{\mathrm{cav}}}{\lambda}\, n_2\, I_{\mathrm{cav}}$. Damit hängt die transmittierte Intensität nicht mehr linear von der eingestrahlten Intensität ab, so dass sich ein komplexes Transmissionsverhalten ergibt. Dieses wird indirekt durch:

$$I_0 = I_{\mathrm{cav}} \left[T + \frac{4\,R}{T} \sin^2\left(\varphi_0 + \varphi_{\mathrm{NL}}\right) \right] \tag{8.11}$$

mit $T = 1 - R$ beschrieben [174], das die Anregungsintensität I_0 in Abhängigkeit der Intensität im Resonator $I_{\mathrm{cav}} = I_{\mathrm{trans}}\, T^{-1}$ angibt. Abbildung 8.25 zeigt die entsprechend Gl. 8.11 bestimmte transmittierte Intensität für verschiedene Wellenlängen nahe der Resonanz. Der S-förmige Intensitätsanstieg kennzeichnet den bistabilen Bereich. Statt der Kurvenform tritt jedoch eine sprunghafte Änderung der transmittierten Intensität auf, wie es durch die Pfeile verdeutlicht wird.

Dieses Verhalten lässt sich dadurch erklären, dass die intensitätsabhängige Änderung des Brechungsindex ab einem Schwellwert zu einer signifikanten Verschiebung der Resonatormode hin zu größeren Wellenlängen führt. Für eine Wellenlänge nahe der linearen Resonanzmode tritt so plötzlich eine Resonanz auf, die zu einer Verstärkung des Feldes im Resonator führt. Dadurch wird die Mitte der Resonanzmode noch weiter zur Wellenlänge des eingestrahlten Lichts verschoben. Dieser selbstverstärkende Effekt ist für Wellenlängen, die weiter von der linearen Resonanz entfernt liegen stärker, da das Erreichen des Schwellwerts bereits eine höhere Anregungsintensität erfordert.

Für die hier untersuchte Struktur liegt die Schwelle für bistabiles Verhalten bei einer Intensität von ca. $5 \cdot 10^9$ W/m^2. Dies entspricht bei dem hier untersuchten Modell (Querschnitt 500 nm $\times$ 220 nm) einer Anregungsleistung von ca. 0,6 mW.

Die hier untersuchten Strukturen lassen sich damit beispielsweise als optische Schalter bzw. optische Transistoren verwenden. Dabei kann das Schalten direkt durch eine Modulation der Intensität des Anregungsstrahls erfolgen. Ein entsprechendes Bauteil würde dann aus einem Amplituden-modulierten Signal ein Pulsdauer-moduliertes Signal erzeugen. Es ist auch möglich, die Änderung des Brechungsindex mit einem zusätzlichen Strahl herbeizuführen, so dass dieser die Transmission des ersten Strahls regelt. Eine solche Verwendung würde dem Prinzip eines photonischen Transistors entsprechen, wobei der zusätzliche Strahl das Analogon zur Gatespannung des elektronischen Pendants darstellt.

9 Zusammenfassung

Das Ziel dieser Arbeit war es, Methoden zu untersuchen, mit denen sich die nichtlinearen optischen Eigenschaften von Silizium verstärken lassen und die somit die Herstellung siliziumbasierter optisch aktiver Bauelemente ermöglichen. Dazu wurden in dieser Arbeit zwei Ansätze untersucht.

Der erste eher grundlegende Ansatz befasste sich mit der direkten Erzeugung einer Nichtlinearität zweiter Ordnung ($\chi^{(2)}$) durch die Brechung der Kristallsymmetrie des Siliziums mit Hilfe mechanischer Verspannungen. Dieser Zusammenhang wurde zunächst an planaren (111) orientierten Siliziumproben untersucht, die durch das Aufbringen einer thermisch erzeugten Oxidschicht verspannt wurden. Hierbei wurden durch die Änderung der Oxidationsparameter unterschiedliche Verspannungszustände erzeugt, die mittels Biegungsmessungen an den jeweiligen Probenwafern charakterisiert wurden. Der Einfluss der im Silizium induzierten Verzerrung auf die Frequenzverdopplungseigenschaften wurde mit einem Reflexionsaufbau bestimmt, welcher im Rahmen dieser Arbeit entwickelt und errichtet wurde. Mit diesem lässt sich das frequenzverdoppelte Signal in Abhängigkeit des Azimutalwinkels bestimmen, was eine Beobachtung des Einflusses der strukturellen Eigenschaften des Siliziums auf das frequenzverdoppelte Signal ermöglicht. Durch das Hinzuziehen von Röntgenmessungen konnte eine Verbindung zwischen dem winkelabhängigen Signal und den Bindungen der Kristallstruktur hergestellt werden. Dadurch konnten die Tensorkomponenten der $\chi^{(2)}$-Suszeptibilität den unterschiedlichen Bindungen zugeordnet werden, wodurch die Interpretation der verspannungsabhängigen Messergebnisse erleichtert wurde.

Die Untersuchung der Verstärkung des $\chi^{(2)}$ in Abhängigkeit der aufgebrachten Verspannung offenbart einen linearen Zusammenhang zwischen der Suszeptibilitätsverstärkung und der aufgebrachten Verspannung. Das Ergebnis ist damit ein eindeutiger Beleg für die Richtigkeit des Konzepts einer verspannungsinduzierten Nichtlinearität und bestätigt damit erstmals den für ein solches Materialsystem theoretisch vorhergesagten Zusammenhang [35]. Aus den Messdaten geht weiter hervor, dass die aufgebrachte Oxidschicht selbst kein $\chi^{(2)}$ aufweist, wie es für ein amorphes Material zu erwarten ist. Ein Vergleich der verspannungsinduzierten Suszeptibilitätsverstärkung sowie deren Anstieg ($\chi^{(2)}_{\mathrm{rel}}/\sigma$) mit aus der Literatur extrahierten Werten [92, 96] bestätigt zusätzlich die gewonnenen Messergebnisse.

Die Dicke des Bereichs, in dem der für die Verstärkung der Nichtlinearität verantwortliche Verspannungsgradient auftritt, ist für eine planare Probe sehr gering und beträgt lediglich ca. 5 nm [83, 84]. Dies liegt daran, dass die Verspannung der aufgebrachten Oxidschicht auf Grund des ungleichen Verhältnisses ihrer Dicke zu der des Substrats schlecht relaxieren und somit schlecht ins Silizium übertragen werden kann. Um den Einfluss von Verzerrungen auf das $\chi^{(2)}$ in einem größeren Volumen zu untersuchen, wurden in einem nächsten Schritt die oxidverspannten Proben mit einem periodischen Liniengitter strukturiert. Diese Strukturen ermöglichen eine teilweise Übertragung der Verspannungen in das darunterliegende Silizium. Dies konnte mit Hilfe von HRXRD-Messungen nachgewiesen und die Verspannungsverteilung mit Hilfe von FEM- und auf periodische Strukturen erweiterten Streusimulationen rekonstruiert werden. Dabei wurde ein ca. 150 nm tiefer verspannter Bereich identifiziert.

Bei der wie zuvor in Reflexion durchgeführten Untersuchung des Frequenzverdopplungseffekts wurde festgestellt, dass es zu einer Überlagerung der nichtlinearen Emissionseigenschaften der atomaren Struktur mit den Beugungseigenschaften des nanostrukturierten Gitters kommt. Dies konnte durch einen Vergleich des Messsignals mit einem, in dieser Arbeit entwickelten, Faltungs-

modell, das beide Einflüsse berücksichtigt, belegt werden. In den Reflexionsmessungen konnte allerdings kein eindeutiger Einfluss des verspannten Siliziumvolumens auf das frequenzverdoppelte Signal festgestellt werden. Eine Analyse des Prozesses der Frequenzverdopplung in Reflexion hat gezeigt, dass dies an der teilweise destruktiven Interferenz der Signalbeiträge aus tieferen Bereichen liegt, die daher mit dieser Methode nicht detektiert werden können.

Der Nachweis eines verspannungsinduzierten Volumen-$\chi^{(2)}$ konnte dennoch mit Hilfe von Transmissionsmessungen erbracht werden. Dafür wurden mit Siliziumdioxid verspannte Wellenleiter untersucht, von denen aus den vorhergehenden Untersuchungen bekannt war, dass der Frequenzverdopplungseffekt nicht durch die Oxidschicht beeinflusst wird.Die gemessene Erhöhung der Konversionseffizienz konnte daher eindeutig dem verspannungsinduzierten $\chi^{(2)}$ im Silizium zugewiesen werden. Die oxidierten Proben stellen somit den in Ref. [14, 15] untersuchten Proben ein alternatives Materialsystem gegenüber, das im Gegensatz zu den dort untersuchten nitridbeschichteten Wellenleitern eindeutige Aussagen zum Ursprung der Nichtlinearität erlaubt.

Des weiteren konnte der Einfluss der Präsenz einer Siliziumnitridschicht auf den Effekt der Frequenzverdopplung nachgewiesen werden. Dazu wurde die Konversionseffizienz in einem unbeschichteten Referenzwellenleiter mit der eines mit unverspanntem Nitrid beschichteten Wellenleiters verglichen. Dies bestätigt Berichte in Ref. [16, 106] von Frequenzverdopplungseffekten an amorphen Siliziumnitridschichten.

Weitere Vergleiche mit verspannten nitridbeschichteten Proben haben allerdings auch hier einen verspannungsbedingten Einfluss auf den Frequenzverdopplungseffekt gezeigt. Eine Abschätzung der resultierenden effektiven Nichtlinearität ergab dabei Werte von $\chi^{(2)} \approx 40$ pm/V.

Die hier gewonnenen Erkenntnisse stützen die Ergebnisse von Cazzanelli *et al.*[15]. Sie zeigen jedoch auch, dass der Einfluss der Nitridschicht selbst bisher unterschätzt wurde. Die hier durchgeführten Untersuchungen zeigen, dass beide Beiträge in etwa gleich groß sind.

Zusätzlich wurden bei den Transmissionsexperimenten Hinweise auf Anpassungseffekte zwischen der Fundamentalmode und den 2ω-Moden gefunden, die zu einer Verstärkung des frequenzverdoppelten Signals führen können. Die Abhängigkeit der Effizienz der Frequenzkonversion von der Breite der untersuchten Wellenleiter legt eine entsprechende Vermutung nahe. Das Vorhandensein eines solchen Anpassungseffekts ließe sich durch eine direkte Beobachtung der Modenprofile der 2ω-Moden nachweisen, die in diesem Fall der Feldverteilung einer höheren Mode mit annähernd gleichem effektiven Modenindex wie dem der Anregungsmode entsprechen sollten.

Im Gegensatz zum verspannten Silizium befasst sich der zweite in dieser Arbeit untersuchte Ansatz mit der Erzeugung nichtlinearer optischer Eigenschaften in Silizium durch die Integration optisch stark nichtlinearer Materialien in geeignete photonische Strukturen. Dabei wurde mit Hilfe numerischer Methoden ein neuartiges Konzept für eine Hybridstruktur entwickelt, bei dem die feldverstärkenden Eigenschaften von Mikroresonatoren und Schlitzwellenleitern verbunden werden. Durch ein spezielles Design des Übergangs zwischen der geschlitzten Kavität und den angrenzenden Spiegeln konnte dabei eine Güte von $Q \approx 35000$ bei einem effektiven Modevolumen von $V_{\text{eff}} = 0,084\ \mu\text{m}^3$ erzielt werden. Die feldüberhöhenden Eigenschaften sind damit vergleichbar mit den für einen Resonator ermittelten, der aus einer Referenzstruktur ohne Schlitz besteht. Eine weitere Optimierung des Resonatormodells führte sogar zu Q-Werten von $Q \approx 100000$.

Auf Grund seiner geringen Größe ist eine Verwendungsmöglichkeit dieses Konzepts in der Form eines optischen Schalters zu sehen, der in einen gewöhnlichen Streifenwellenleiter integriert werden kann. Das dazu erforderliche Schaltverhalten, basierend auf dem Effekt der optischen Bistabilität, wurde ebenfalls numerisch untersucht. Dabei hat sich gezeigt, dass für einen mit dem Chalkogenidglas As_3S_2 infiltrierten Resonator mit einer Güte von $Q = 10000$ eine Anregungsleistung von lediglich 0,6 mW erforderlich ist, um die erforderliche Schaltschwelle zu erreichen.

Ausblick

In dieser Arbeit konnten einige grundlegende Fragen und Widersprüche geklärt werden, die den Ursprung des Frequenzverdopplungseffekts in verspannten Siliziumstrukturen betreffen. Für ein detailliertes Verständnis der Abhängigkeiten zwischen dem lokalen Verspannungsgradienten und dem resultierenden $\chi^{(2)}$ im Siliziumvolumen sind jedoch weitere Untersuchungen erforderlich. Da es bei der experimentellen Untersuchung dieses Zusammenhangs in der Regel zu einer Mittelung über Beiträge unterschiedlich verspannter Bereiche kommt, bietet sich an diesem Punkt eine Analyse mit Hilfe theoretischer Methoden wie der Dichtefunktionaltheorie an. Dies würde es erlauben, den Frequenzverdopplungseffekt lokal auf der Ebene des verzerrten Siliziumgitters zu studieren.

Wie sich hier gezeigt hat, bietet neben dem Verspannungsaspekt auch das Siliziumnitrid selbst eine Möglichkeit zur optischen Funktionalisierung des Siliziums. Die Kenntnis der Ursache für das Auftreten einer Nichtlinearität zweiter Ordnung im Nitrid wäre dabei hilfreich, Prozesse zu entwickeln, die es ermöglichen, gezielt Schichten mit einer sehr hohen Nichtlinearität abzuscheiden.

Großes Potential zur weiteren Steigerung des Frequenzverdopplungseffektes in verspannten Wellenleitern bietet nach Meinung des Autors auch die Möglichkeit der Phasenanpassung durch gezieltes Wellenleiterdesign, da sich dadurch bekanntlich erhebliche Steigerungen der Effizienz der Frequenzkonversionsprozesse erzielen lassen [21]. Falls sich dieser Effekt der Modenanpassung in den verspannten Wellenleitern eindeutig nachweisen lässt, würde dies eine technologisch einfachere Alternative zu Konzepten wie der periodischen Polung des nichtlinearen Materials [175] darstellen.

Mittelfristig bietet verspanntes Silizium vielseitige Einsatzmöglichkeiten als nichtlineares Material, besonders wenn auch andere Möglichkeiten der Verspannungserzeugung genutzt werden. So lassen sich mittels Ionenimplantation lokal hohe Verspannungen erzeugen, wobei die Tiefe der eingebrachten Verspannung durch die kinetische Energie der Ionen bestimmt wird. Die Verwendung von Maskenstrukturen würde eine zusätzliche Strukturierung des verspannten Bereichs in der Ebene ermöglichen [176]. Insgesamt wäre somit ein dreidimensionales Verspannungsdesign im Silizium möglich.

Kurzfristig scheint jedoch das Konzept der Hybrid-Bauelemente z.B. der hier untersuchten lokal infiltrierten Wellenleiter-Schlitz-Mikroresonatoren bessere Möglichkeiten zur Realisierung optisch aktiver Bauelemente zu bieten. Dies liegt daran, dass die optischen Eigenschaften der in Betracht kommenden nichtlinearen Materialien bereits bekannt sind. Die größte Herausforderung liegt hier im Infiltrationsprozess. Methoden wie das Aufschmelzen des Infiltrats unter Druck bieten hier vielversprechende Lösungsansätze.

A Anhang

A.1 Prozessparameter der Lithografieverfahren

Tabelle A.1: Prozessschritte der Fotolithografie

1.	Aufschleudern des Haftvermittlers AR300-80 bei 500 U/min (15 s) und anschließend 4000 U/min (90 s).
2.	Ausheizen der Probe bei 180° C für 3 min.
3.	Spincoating des Fotolacks AR-N 4340 mit 500 U/min (15 s) und 2000 U/min (90 s) mit einer resultierenden Schichtdicke von ca. 2000 nm.
4.	Ausheizen der Probe für 15 min bei 85° C um das Lösungsmittel zu verdampfen.
5.	Belichtung für 30 s bei konstanter Intensität mit einer Wellenlänge von $\lambda = 365$ nm (i-Line).
6.	Post Exposure Bake für 5 min bei 95° C.
7.	Entwickeln der Probe für 60 s (AR 300-475).

Tabelle A.2: Prozessschritte der Laserinterferenzlithografie

1.	Probenreinigung mit Aceton, Isopropanol und DI-Wasser.
2.	Trocknen der Probe für 20 min bei 200° C auf der Heizplatte zur Wasserdesorption.
3.	Spincoating des Fotolacks AR-N4240 in Verdünnung 1:2 mit AR 300-12 mit 500 U/min (5 s) und 4000 U/min (30 s) ergibt eine Schichtdicke von ca. 200 nm.
4.	Ausheizen der Probe für 2 min bei 80° C um das Lösungsmittel zu verdampfen.
5.	Belichtung mittels Laserinterferenzlithografie.
6.	Nachheizen der Probe für 30 min bei 80° C. Dies verstärkt die intermolekularen Bindungen zwischen den belichteten Lackmolekülen und erhöht damit die Selektivität der Belichtung.
7.	Entwickeln der Probe für 30 s (AR 300-47).

A.2 Zusammenhang zwischen Dehnungs- und Biegeverspannung in einer dünnen Oxidschicht

Im Folgenden wird der in Gl. 4.4 dargestellte Zusammenhang zwischen der in einer dünnen verspannten Oxidschicht vorherrschenden Dehnungsspannung und der ins Silizium induzierten Biegespannung hergestellt, welche mit der Waferbiegemethode gemessen wird. Nach Ref. [68] gilt für die Dehnungsverspannung in einer durch thermische Oxidation erzeugten Oxidschicht auf einem Siliziumsubstrat:

$$\sigma_{\mathrm{Ox,D}} = -\frac{d_{\mathrm{Si}} E_{\mathrm{Ox}} E_{\mathrm{Si}} (\alpha_{\mathrm{Si}} - \alpha_{\mathrm{Ox}}) \Delta T}{d_{\mathrm{Si}} E_{\mathrm{Si}} + d_{\mathrm{Ox}} E_{\mathrm{Ox}}}, \tag{A.1}$$

wobei d der Dicke der jeweiligen Schicht, E dem YOUNG-Modul und α dem thermischen Ausdehnungskoeffizienten entspricht sowie ΔT der Temperaturdifferenz zwischen Oxidations- und Raumtemperatur. Da die Dicke der Oxidschicht bei den in dieser Arbeit untersuchten Proben wesentlich geringer ist als die des Substrats ($d_{\mathrm{Ox}} \ll d_{\mathrm{Si}}$) kann Gl. A.1 mit $d_{\mathrm{Si}} E_{\mathrm{Si}} + d_{\mathrm{Ox}} E_{\mathrm{Ox}} \approx d_{\mathrm{Si}} E_{\mathrm{Si}}$ zu

$$\sigma_{\mathrm{Ox,D}} \approx -E_{\mathrm{Ox}} (\alpha_{\mathrm{Si}} - \alpha_{\mathrm{Ox}}) \Delta T \ , \tag{A.2}$$

vereinfacht werden.

Für den Biegeradius der Probe ist Folgendes definiert [68]:

$$\frac{1}{r} = \frac{6(\alpha_{\mathrm{Si}} - \alpha_{\mathrm{Ox}}) \Delta T (d_{\mathrm{Si}} + d_{\mathrm{Ox}})}{4(d_{\mathrm{Si}} + d_{\mathrm{Ox}})^2 - 2 d_{\mathrm{Si}} d_{\mathrm{Ox}} + \frac{E_{\mathrm{Si}} d_{\mathrm{Si}}^3}{E_{\mathrm{Ox}} d_{\mathrm{Ox}}} + \frac{E_{\mathrm{Ox}} d_{\mathrm{Ox}}^3}{E_{\mathrm{Si}} d_{\mathrm{Si}}}} \ . \tag{A.3}$$

Auch diese Gleichung lässt sich unter Annahme einer dünnen Oxidschicht vereinfachen zu:

$$\frac{1}{r} \approx \frac{6(\alpha_{\mathrm{Si}} - \alpha_{\mathrm{Ox}}) \Delta T}{4 d_{\mathrm{Si}} + \frac{E_{\mathrm{Si}} d_{\mathrm{Si}}^2}{E_{\mathrm{Ox}} d_{\mathrm{Ox}}}} \ . \tag{A.4}$$

Mit Gl. A.2 ergibt sich daraus:

$$\frac{1}{r} \approx \frac{6 \frac{-\sigma_{\mathrm{Ox,D}}}{E_{\mathrm{Ox}}}}{\frac{4 d_{\mathrm{Si}} E_{\mathrm{Ox}} d_{\mathrm{Ox}} + E_{\mathrm{Si}} d_{\mathrm{Si}}^2}{E_{\mathrm{Ox}} d_{\mathrm{Ox}}}} = -6 \frac{\sigma_{\mathrm{Ox,D}} d_{\mathrm{Ox}}}{4 d_{\mathrm{Si}} E_{\mathrm{Ox}} d_{\mathrm{Ox}} + E_{\mathrm{Si}} d_{\mathrm{Si}}^2} \ . \tag{A.5}$$

Da ($d_{\mathrm{Ox}} \ll d_{\mathrm{Si}}$) gilt folgt daraus, dass ebenfalls $4 d_{\mathrm{Si}} E_{\mathrm{Ox}} d_{\mathrm{Ox}} \ll E_{\mathrm{Si}} d_{\mathrm{Si}}^2$ gilt und damit

$$\frac{1}{r} = -6 \frac{\sigma_{\mathrm{Ox,D}} d_{\mathrm{Ox}}}{E_{\mathrm{Si}} d_{\mathrm{Si}}^2} \mathrm{bzw.} \sigma_{\mathrm{Ox,D}} = -\frac{E_{\mathrm{Si}} d_{\mathrm{Si}}^2}{6 d_{\mathrm{Ox}}} \frac{1}{r} \ . \tag{A.6}$$

Gleichung A.6 entspricht damit im Wesentlichen der STONEY-Formel (Gl. 4.5) und stellt eine Beziehung zwischen dem Biegeradius des Probenwafers und der Dehnungsspannung in der Oxidschicht her.

Um die Verbindung zur Biegespannung herzustellen lässt sich der folgende Ausdruck für die Verspannung im Silizium verwenden [68]:

$$\sigma_{\mathrm{Si,B}}(z) = E_{\mathrm{Si}} \cdot \frac{z - z_0}{r} \ . \tag{A.7}$$

Durch Einsetzen von Gl. A.6 ergibt sich die in Abschn. 4.1 beschriebene Beziehung zwischen der Biegeverspannung im Silizium und der dominierenden Dehnungsverspannung im Oxid:

$$\sigma_{\mathrm{Ox,B}}(z) \approx -6 \frac{E_{\mathrm{Ox}}}{E_{\mathrm{Si}}} \frac{d_{\mathrm{Ox}}}{d_{\mathrm{Si}}^2} \cdot (z - z_0) \sigma_{\mathrm{Si,D}} \ . \tag{A.8}$$

A.3 Abschätzung des Messfehlers der in Reflexionsmessung bestimmten verspannungsinduzierten Suszeptibilitätserhöhung

In Kapitel 5 wurde die verspannungsinduzierte Verstärkung der nichtlinearen Koeffizienten a und c (Abb. 5.8) behandelt. Hier werden die bei der Messung auftretenden Unsicherheiten bestimmt und der Messfehler diskutiert. Dieser setzt sich aus den Ungenauigkeiten der Messmethode sowie probenbedingten Intensitätsschwankungen auf Grund von Inhomogenitäten zusammen.

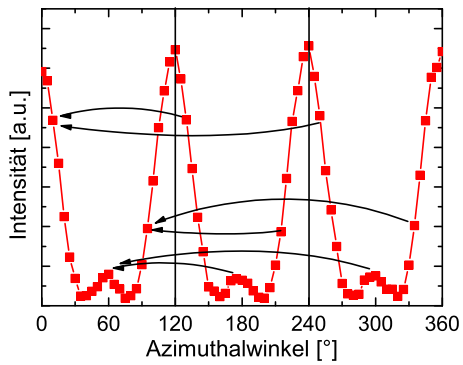
Der Einfluss von Messunsicherheiten wurde durch die Analyse der an einer Position gemessenen winkelabhängigen Intensität bestimmt. Dazu wurde das Signal von äquivalenten Winkelpositionen verglichen und eine mittlere relative Abweichung bestimmt (siehe Abb. A.1 (a)). Die resultierenden Abweichungen wurden anschließend über alle Proben gemittelt.

Die Abweichungen auf Grund von Probeninhomogenitäten wurden bestimmt, indem die an verschiedenen Positionen einer Probe unter äquivalenten Azimutalwinkel aufgenommenen Messsignale miteinander verglichen wurden (Abb. A.1 (b)). Um den Einfluss der Probeninhomogenitäten auf das Messergebnis zu verringern wurden die Messungen an mehreren Probenpositionen wiederholt. Da die Verstärkung der nichtlinearen Koeffizienten relativ zur unverspannten Referenzprobe bestimmt wurde, müssen die Messunsicherheiten beider Proben addiert werden, was den Fehler ungefähr verdoppelt.

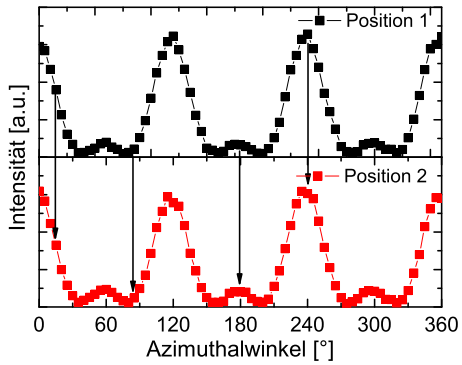
Anschließend wurden diese Werte über alle Proben gemittelt. Aus der Auswertung ergeben sich vergleichbare Fehler für die Probeninhomogenitäten (6%) und die Messungenauigkeiten (7%). Dabei entsteht der Messfehler hauptsächlich im Detektionsteil des Aufbaus und nicht im Anregungsteil. Ersterer wird im Wesentlichen vom Signal-Rauschverhältnis der Kombination aus Detektor und Sample-and-hold-Box bestimmt, letzterer von Schwankungen der Laserintensität, die jedoch nur ca 1% ausmachen.

Um den Einfluss der Intensitätsschwankungen auf die Verstärkung der nichtlinearen Koeffizienten zu bestimmen, wird der Fehler aus Gl. 5.1 bestimmt. Dabei ergibt sich das Problem, dass eine Größe I gemessen wurde, die von zwei Größen a und c abhängt, die beide Messschwankungen unterworfen sind. Deshalb wird an dieser Stelle angenommen, dass a und c in gleichem Maße von den Schwankungen betroffen sind. Es lässt sich demnach davon ausgehen, dass sich beide Werte um einen festen Faktor g unterscheiden. Damit ergibt sich:

$$I \propto a^2 \left(1 + g \cos 3\varphi\right)^2 \tag{A.9}$$



(a) Bestimmung der Unsicherheiten der Messmethode.



(b) Bestimmung der Unsicherheiten auf Grund von Probeninhomogenitäten.

Abbildung A.1: Analyse des Messsignals zur Bestimmung der Unsicherheiten auf Grund der Messmethode (a) und der Probenbeschaffenheit (b).

und somit

$$\Delta I = 2\Delta a = 2g\Delta c \quad \text{bzw.} \quad \frac{\Delta I}{I} = 2\frac{\Delta a}{a} = 2\frac{\Delta c}{c}. \tag{A.10}$$

Für a und c sind die relativen Fehler entsprechend der Annahme gleich groß und entsprechen der Hälfte des Gesamtfehlers der Intensität. Er ist als Fehlerbalken in Abb. 5.8 dargestellt.

Der Fehlerbalken für die Verspannung entspricht der Abweichung vom Mittelwert der Verspannung, der sich aus den Messungen mit unterschiedlicher Orientierung des Probenwafers zum Scanweg des Lasers bei der Biegungsmessung ergibt.

A.4 Analyse von Propagationsverlusten in Wellenleitern mittels Fouriertransformation

Um die Qualität der in Kapitel 7 untersuchten Wellenleiter zu charakterisieren und somit Aussagen über die Güte des Herstellungsprozesses sowie die Eignung der Proben für nichtlineare Transmissionsexperimente treffen zu können, ist es erforderlich, deren optische Verluste zu bestimmen.

Der dazu verwendete Aufbau ist in Abb. A.2 schematisch dargestellt. Das Licht eines durchstimmbaren Lasers (1490 - 1650 nm) wird durch eine belinste Faser in den zu untersuchenden Wellenleiter eingekoppelt, wobei die Polarisation manuell eingestellt wird. Das transmittierte Licht wird wieder in eine belinste Faser eingekoppelt und mit Hilfe eines Photodetektors registriert. Ein Teil des Lichts wird über einen -10dB-Koppler ausgekoppelt und in die Steuerelektronik geführt. Diese steuert die Fasern auf beiden Seiten der Probe mit Hilfe von Piezo-Stelltischen, um eine maximale Transmission zu erreichen. Eine sehr ausführliche Beschreibung befindet sich in Ref. [125].

Die optischen Verluste setzen sich aus unterschiedlichen Beiträgen zusammen und lassen sich grob in Koppelverluste und Propagationsverluste unterteilen. Die Koppelverluste sorgen für eine Dämpfung der transmittierten Intensität auf Grund einer Fehlanpassung des Profils des einzukoppelnden Strahls und der im Wellenleiter geführten Mode, was zu Streuverlusten an den Ein- und Auskoppelfacetten führt. Zusätzlich dazu treten Reflexionsverluste (*engl.: Fresnel insertion losses*) an der Facettengrenzfläche auf, die bedingt durch den Brechungsindexkontrast zwischen der umgebenden Luft und dem Silizium auftreten. Da die Koppelverluste durch die Beschaffenheit der Endfacetten bestimmt werden, lassen sich aus ihnen Informationen über die Qualität des Vereinzelungsprozesses der Proben (Abschn. 7.1) gewinnen.

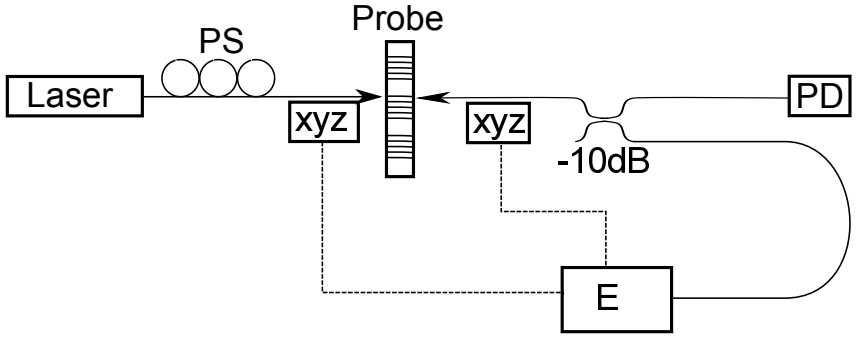


Abbildung A.2: Schematische Darstellung des Koppelmessplatzes zur linearen Transmissionsmessung. PS: Polarisationssteller, xyz: Piezo-Stelltisch, -10dB: -10dB-Koppler, PD: Photodetektor, E: Steuerelektronik. Die Abbildung wurde nach Ref. [125] adaptiert.

Bei den Propagationsverlusten handelt es sich um Intensitätsverluste, die beim Durchlaufen des Wellenleiters auftreten. Sie werden hauptsächlich durch die Rauhigkeit der Wellenleiterwände bestimmt und hängen somit maßgeblich von der Qualität der Lithografie und des Ätzprozesses ab. Da die Dämpfung des Signals auf Grund der Propagationsverluste von der Länge des Wellenleiters abhängt, wird sie in der Regel auf die Länge des untersuchten Wellenleiters normiert und in [dB/mm] angegeben, was die Vergleichbarkeit mit anderen Strukturen gewährleistet. Aus diesem Grund verwendet man üblicherweise die „Cut-Back"-Methode, bei der die Dämpfung für baugleiche Wellenleiter unterschiedlicher Länge bestimmt wird. Unter der Annahme, dass die Koppelverluste in jedem Wellenleiter gleich sind, lassen sich dann die Propagationsverluste mit Hilfe linearer Regression ermitteln:

$$\alpha = -\frac{\ln A}{L}. \tag{A.11}$$

Da in dieser Arbeit stets Wellenleiter mit einer festen Länge verwendet wurden, kam hier eine andere Methode zum Einsatz, die im Folgenden erläutert wird. Hierbei werden die Propagationsverluste aus dem fouriertransformierten Transmissionsspektrum extrahiert. Eine nähere Beschreibung der Methode findet sich in Ref. [125, 177, 178].

Das Grundprinzip dieser Methode basiert darauf, dass auf Grund des zuvor erwähnten Brechungsindexkontrastes an den Endfacetten an selbigen Reflexionen auftreten, deren Stärke durch den Reflexionskoeffizienten R bestimmt wird. Dadurch fungiert der Wellenleiter als ein Fabry-Pérot-Resonator, der für bestimmte Wellenlängen zu konstruktiver bzw. destruktiver Interferenz führt. Dies erzeugt Oszillationen im Transmissionsspektrum, deren spektraler Abstand von der optischen Länge des Wellenleiters abhängt (siehe Abb. A.3). Die durch den Wellenleiter transmittierte Intensität lässt sich nach dem Fabry-Pérot-Modell wie folgt berechnen [100]:

$$I_\mathrm{T} = \frac{(1-R^2)A}{(1-RA)^2 + 4RA\sin^2(\varphi/2)}\eta I_0. \tag{A.12}$$

Hierbei ist $\varphi = 4\pi n_\mathrm{g} L/\lambda$, wobei λ die jeweilige Wellenlänge, n_g der Gruppenindex der angeregten Mode und L die Länge des Wellenleiters ist. Die beim Durchlaufen des Wellenleiters auftretenden Verluste werden durch den Dämpfungsterm $A = e^{-\alpha L}$ beschrieben, wobei α der Absorptionskoeffizient ist. Der Anteil der in den Wellenleiter eingekoppelten Intensität I_0 des Anregungsstrahls wird durch die Effizienz η beschrieben.

Da die Dämpfung des transmittierten Lichts von der im Wellenleiter zurückgelegten Wegstrecke abhängt, ist es hilfreich, die Abnahme der Transmission in Abhängigkeit der Anzahl der

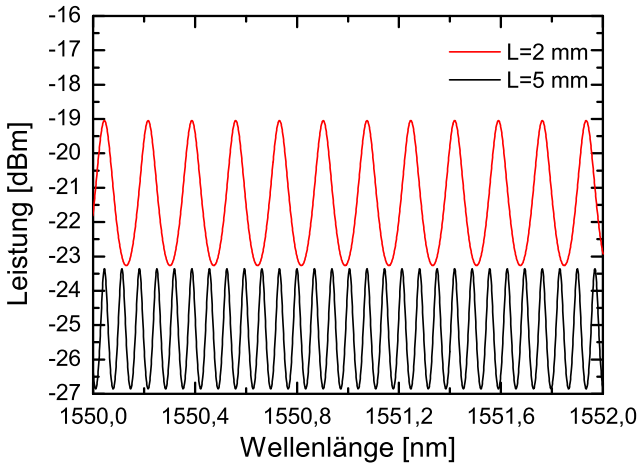


Abbildung A.3: Berechnete Transmissionsspektren idealer verlustbehafteter Wellenleiter unterschiedlicher Länge. Der Einfluss der Länge spiegelt sich in dem freien Spektralbereich zwischen den Fabry-Perot-Resonanzen wieder. Je länger der Wellenleiter, umso mehr Resonanzen können angeregt werden, wodurch sich der freie Spektralbereich entsprechend verringert.

Umläufe im Wellenleiter zu betrachten. Dazu wird das Transmissionsspektrum (Gl. A.12) mittels einer Fouriertransformation als Funktion der durchlaufenen optischen Weglänge d dargestellt:

$$FT\{I_\mathrm{T}\}(d) = \int I_\mathrm{T}(k) e^{i\pi dk} \mathrm{d}k, \tag{A.13}$$

mit $k = 2\pi/\lambda$. Abbildung A.4 zeigt exemplarisch ein solches Spektrum für zwei Wellenleiter mit einer Länge von zwei bzw. fünf Millimetern. Die Länge des Wellenleiters spiegelt sich in der Position des Peaks wider, so dass sich aus dieser bei bekannter Wellenleiterlänge der Gruppenindex n_g bestimmen lässt.

Für den Fall eines idealen Fabry-Pérot-Resonators mit $R = 1$ besteht das Fourierspektrum aus einer Reihe von Dirac-Delta-Funktionen an den Positionen, an den $d = n_\mathrm{g}L$ einem ganzzahligen Vielfachen der optischen Wellenleiterlänge entspricht:

$$|FT\{I_\mathrm{T}\}(d)| = \sum_i \delta\left(d - i(n_\mathrm{g}L)\right) T_0 e^{\rho d/(n_\mathrm{g}L)}, \tag{A.14}$$

mit $\rho = \ln(RA)$ und $T_0 = (1-R)^2A^2/(1-R^2A)$.

Um aus dem Fourierspektrum den Absorptionskoeffizienten α zu bestimmen gibt es nun mehrere Möglichkeiten, von denen zwei erwähnt werden sollen. Zum einen lässt sich α direkt aus dem Verhältnis der Peakhöhen ermitteln, was sich mit Gl. A.14 zeigen lässt. So entspricht das Verhältnis der Höhen zweier benachbarter Peaks:

$$\frac{FT\{I_\mathrm{T}\}((i+1)n_\mathrm{g}L)}{FT\{I_\mathrm{T}\}(in_\mathrm{g}L)} = RA\,. \tag{A.15}$$

Daraus lässt sich bei Kenntnis des Reflexionskoeffizienten R die Dämpfung A bestimmen und aus ihr, entsprechend ihrer Definition, der Absorptionskoeffizient. Zum anderen lässt sich α aus dem exponentiellen Abklingverhalten der Peaks im Fourierspektrum bestimmen. Dabei wird ρ in Gl. A.14 durch einen exponentiellen Fit (siehe Abb. A.4) bestimmt. Für α ergibt sich dann

$$\alpha = -\frac{\ln\left(e^\rho/R\right)}{L}. \tag{A.16}$$

Die Auswertung wird hier automatisiert mit Hilfe eines MATLAB-Skripts vorgenommen[1]. Hierbei wurde berücksichtigt, dass das Transmissionsspektrum auf Grund der Wellenleiterdispersion abschnittsweise zu analysieren ist. Zur Vermeidung unerwünschter numerischer Effekte

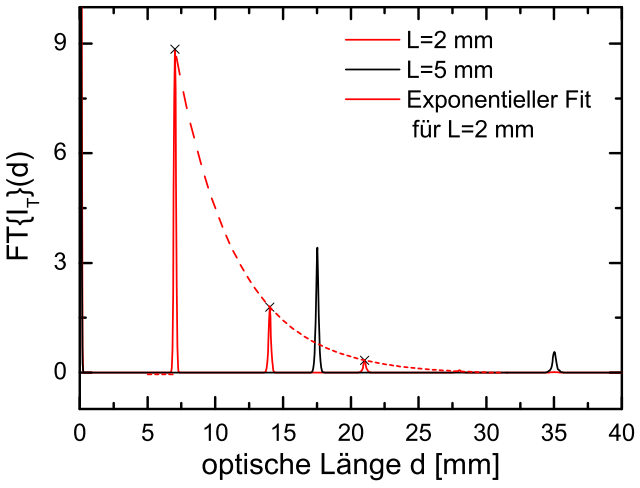


Abbildung A.4: Fouriertransformierte des Transmissionsspektrums idealer verlustbehafteter Wellenleiter unterschiedlicher Länge (vgl. Abb. A.12). Die Position der Peaks entspricht ganzzahligen Vielfachen der optischen Wellenleiterlänge, wodurch sich für längere Wellenleiter größere Peakabstände ergeben. Aus dem Verhältnis der jeweiligen Peakhöhen, bzw. durch einen Fit des exponentiellen Abklingverhaltens lässt sich der Absorptionskoeffizient α als Maß der Propagationsverluste bestimmen.

[1] Das Skript wurde von Peter Nolte [179] entwickelt und an die hier untersuchten Wellenleiter angepasst.

ist außerdem zu beachten, dass im Gegensatz zu einem theoretischen, unendlich ausgedehnten Spektrum nur eine begrenzte Anzahl von Datenpunkten transformiert wird, was einem abrupten Abschneiden des Spektrums entspricht. Um die daraus resultierenden Fehler zu unterdrücken, wird das Spektrum mit einer „Flat-Top"-Fensterfunktion gefaltet, was eine Glättung des Spektrumrandes zur Folge hat [179, 180].

Fehlerbetrachtung der Propagationsverluste in Siliziumwellenleitern

Im Folgenden wird der Fehler des Absorptionskoeffizienten α bestimmt. Dieser setzt sich aus den Unsicherheiten bei der Bestimmung der Länge des Wellenleiters ΔL, des Reflexionskoeffizienten der Endfacetten ΔR sowie dem Rauschen des Fourierspektrums ΔV zusammen. Letzteres enthält somit die Unsicherheiten die durch die Modensprünge bei der Messung der Transmission auftreten. Es gilt:

$$V = \frac{FT\{I_\mathrm{T}\}((i+1)n_\mathrm{g}L)}{FT\{I_\mathrm{T}\}(in_\mathrm{g}L)} = RA\ . \tag{A.17}$$

Aus Gl. A.11 ergibt sich für den Fehler von $\Delta\alpha$:

$$\Delta\alpha = \left|\frac{\ln R - \ln V}{L^2}\right| \Delta L + \left|\frac{1}{LR}\right| \Delta R + \left|\frac{1}{LR}\right| \Delta V\ . \tag{A.18}$$

Dabei wurden $\Delta R = 0,05$ sowie $\Delta L = 0,2$ mm verwendet. Der Fehler ΔV entspricht dem Fehler im Fourierspektrum, der durch das Rauschen im Transmissionsspektrum hervorgerufen wurde. Er wurde nach Ref. [125] aus der Standardabweichung des quadratischen Mittelwerts der transmittierten Intensität bestimmt:

$$\Delta V = \sqrt{\frac{\sum_\mathrm{i}^N \left(\bar{I} - I_\mathrm{i}\right)^2}{N}}\ . \tag{A.19}$$

Hier entspricht I_i, der Intensität des jeweiligen Messpunktes und N gibt die Anzahl der bestimmten Messwerte an. Der Gesamtfehler ist als Fehlerbalken in Abb. 7.4 eingezeichnet.

B Abkürzungsverzeichnis

Abkürzung	Bezeichnung
EFISH	Frequenzverdopplung bei statischem elektrischen Feld
FEM	Finite-Elemente-Methode
FMM	Fourier-Modale-Methode
FWHM	Halbwertsbreite
HRXRD	Hochaufgelöste Röntgenbeugung
ICP	Induktiv gekoppeltes Plasma
PECVD	Plasmagestützte Gasphasenabscheidung
Q-Wert	Güte eines Resonators
REM	Rasterelektronenmikroskop
RIE	Reaktives Ionenätzen
SHG	Frequenzverdopplung
SiO_2	Siliziumdioxid
SiN	Siliziumnitrid
Si_3N_4	Siliziumnitrid (stöchiometrisch)
SOI	Silizium-auf-Nichtleiter-Materialsystem
TE	Transversal elektrisch
TM	Transversal magnetisch

Literaturverzeichnis

[1] J. Bardeen und W. H. Brattain, The Transistor, A Semi-Conductor Triode, *Physical Review* **74** (2), 230–231 (1948).

[2] G. Moore, Cramming more components onto integrated circuits, *Electronics* **38** (8), 114–117 (1965).

[3] T. H. Maiman, Stimulated Optical Radiation in Ruby, *Nature* **187**, 493–494 (1960).

[4] S. E. Miller, Integrated Optics: An Introduction, *Bell System Technical Journal* **48**, 2059–2069 (1969).

[5] Y. Vlasov, S. Assefa, W. Green, M. Yang, C. Schow und A. Rylyakov, CMOS Integrated Nanophotonics: Enabling Technology for Exascale Computer Systems, 2010.

[6] R. Soref und J. Larenzo, All-silicon active and passive guided-wave components for $\lambda = 1.3$ and 1.6 μm, *IEEE Journal of Quantum Electronics* **22** (6), 873–879 (1986).

[7] B. Jalali, Teaching silicon new tricks, *Nature Photonics* **1**, 193 (2007).

[8] G. T. Reed, G. Mashanovich, F. Y. Gardes und D. J. Thomson, Silicon optical modulators, *Nature Photonics* **4** (8), 518–526 (2010).

[9] K. Rim, R. Anderson, D. Boyd, F. Cardone, K. Chan, H. Chen, S. Christiansen, J. Chu, K. Jenkins, T. Kanarsky, S. Koester, B. H. Lee, K. Lee, V. Mazzeo, A. Mocuta, P. M. Mooney, P. Oldiges, J. Ott, P. Ronsheim, R. Roy, A. Steegen, M. Yang, H. Zhu, M. Ieong und H.-S. P. Wong, Strained Si CMOS (SS CMOS) technology: opportunities and challenges, *Solid-State Electronics* **47**, 1133–1139 (2003).

[10] D.-X. Xu, P. Cheben, D. Dalacu, A. Delage, S. Janz, B. Lamontagne, M.-J. Picard und W. N. Ye, Eliminating the birefringence in silicon-on-insulator ridge waveguides by use of cladding stress, *Optics Letters* **29**, 2384–2386 (2000).

[11] K. K. Tsia, S. Fathpour und B. Jalali, Electrical tuning of birefringence in silicon waveguides, *Applied Physics Letters* **92**, 061109 (2008).

[12] K. K. Tsia, S. Fathpour und B. Jalali, Electrical control of parametric processes in silicon waveguides, *Optics Express* **16**, 9838–9843 (2008).

[13] R. S. Jacobsen, K. N. Andersen, P. I. Borel, J. Fage-Pedersen, L. H. Frandsen, O. Hansen, M. Kristensen, A. V. Lavrinenko, G. Moulin, H. Ou, C. Peucheret, B. Zsigri und A. Bjarklev, Strained silicon as a new electro-optic material, *Nature* **441**, 199–202 (2006).

[14] B. Chmielak, M. Waldow, C. Matheisen, C. Ripperda, J. Bolten, T. Wahlbrink, M. Nagel, F. Merget und H. Kurz, Pockels effect based fully integrated, strained silicon electro-optic modulator, *Optics Express* **19** (18), 17212–17219 (2011).

[15] M. Cazzanelli, F. Bianco, E. Borga, G. Pucker, M. Ghulinyan, E. Degoli, E. Luppi, V. Véniard, S. Ossicini, D. Modotto, S. Wabnitz, R. Pierobon und L. Pavesi, Second-harmonic generation in silicon waveguides strained by silicon nitride, *Nature Materials* **11** (2), 148–154 (2011).

[16] T. Ning, H. Pietarinen, O. Hyvarinen, J. Simonen, G. Genty und M. Kauranen, Strong second-harmonic generation in silicon nitride films, *Applied Physics Letters* **100** (16), 161902 –161902–4 (2012).

[17] J. S. Levy, A. Gondarenko, M. A. Foster, A. C. Turner-Foster, A. L. Gaeta und M. Lipson, CMOS-compatible multiple-wavelength oscillator for on-chip optical interconnects, *Nature Photonics* **4** (1), 37–40 (2010).

[18] C. Koos, L. Jacome, C. Poulton, J. Leuthold und W. Freude, Nonlinear silicon-on-insulator waveguides for all-optical signal processing, *Optics Express* **15** (10), 5976–5990 (2007).

[19] C. Koos, P. Vorreau, T. Vallaitis, P. Dumon, W. Bogaerts, R. Baets, B. Esembeson, I. Biaggio, T. Michinobu, F. Diederich, W. Freude und J. Leuthold, All-optical high-speed signal processing with silicon-organic hybrid slot waveguides, *Nature Photonics* **3** (4), 216–219 (2009).

[20] J. Hampe, J. H. Wülbern, S. Prorok, A. Y. Petrov, M. Eich, J. Luo und A. K. Jen, Hybrid silicon-organic racetrack resonator designs for electro-optical modulation, *Proceedings of SPIE* **7719**, 771911 (2010).

[21] R. W. Boyd, *Nonlinear Optics*, Academic Press, 2008.

[22] F. Zernike und J. E. Midwinter, *Applied Nonlinear Optics*, Wiley, 1973.

[23] P. Guyot-Sionnest und Y. R. Shen, Bulk contribution in surface second-harmonic generation, *Physical Review B* **38**, 7985–7989 (1988).

[24] H. W. K. Tom, T. F. Heinz und Y. R. Shen, Second-Harmonic Reflection from Silicon Surfaces and its Relation to Structural Symmetry, *Physical Review Letters* **51**, 1983–1986 (1983).

[25] N. Bloembergen, R. K. Chang, S. S. Jha und C. H. Lee, Optical Second Harmonic Generation in Reflection from Media with Inversion Symmetry, *Physical Review* **174**, 813–822 (1968).

[26] J. E. Sipe, D. J. Moss und H. M. van Driel, Phenomenological theory of optical second- and third-harmonic generation from cubic centrosymmetric crystals, *Physical Review B* **35**, 1129–1141 (1987).

[27] A. Rumpel, B. Manschwetus, G. Lilienkamp, H. Schmidt und W. Daum, Polarity of space charge fields in second-harmonic generation spectra of Si(100)/SiO_2 interfaces, *Physical Review B* **74**, 081303 (2006).

[28] J. L. Fiore, V. V. Fomenko, D. Bodlaki und E. Borguet, Second harmonic generation probing of dopant type and density at the Si/SiO_2 interface, *Applied Physics Letters* **98** (4), 041905 (2011).

[29] G. Lüpke, D. J. Bottomley und H. M. van Driel, Second- and third-harmonic generation from cubic centrosymmetric crystals with vicinal faces: phenomenological theory and experiment, *Journal of the Optical Society of America B* **11**, 33–44 (1994).

[30] D. J. Bottomley, G. Lüpke, C. Meyer und Y. Makita, Exact separation of surface and bulk contributions to anisotropic second-harmonic generation from cubic centrosymmetric media, *Optics Letters* **20**, 453–455 (1995).

[31] H. R. Huff und D. C. Gilmer, *High dielectric constant materials: VLSI MOSFET applications*, Springer, 2005.

[32] B. E. Deal und A. S. Grove, General Relationship for the Thermal Oxidation of Silicon, *Journal of Applied Physics* **36**, 3770 (1965).

[33] N. F. Mott, On the oxidation of silicon, *Philosophical Magazine Part B* **55**, 117–129 (1987).

[34] E. P. EerNisse, Stress in thermal SiO_2 during growth, *Applied Physics Letters* **35** (1), 8–10 (1979).

[35] S. V. Govorkov, V. I. Emel'yanov, N. I. Koroteev, G. I. Petrov, I. L. Shumay und V. V. Yakovlev, Inhomogeneous deformation of silicon surface layers probed by second-harmonic generation in reflection, *Journal of the Optical Society of America B* **6**, 1117–1124 (1989).

[36] E. Kobeda und E. A. Irene, A measurement of intrinsic SiO_2 film stress resulting from low temperature thermal oxidation of Si, *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures* **4** (3), 720–722 (1986).

[37] E. Kobeda und E. A. Irene, In situ stress measurements during thermal oxidation of silicon, *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures* **7** (2), 163–166 (1989).

[38] R. J. Jaccodine und W. A. Schlegel, Measurement of Strains at Si-SiO_2 Interface, *Journal of Applied Physics* **37** (6), 2429–2434 (1966).

[39] E. P. EerNisse, Viscous flow of thermal SiO_2, *Applied Physics Letters* **30** (6), 290–293 (1977).

[40] E. Kobeda und E. A. Irene, SiO_2 film stress distribution during thermal oxidation of Si, *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures* **6** (2), 574–578 (1988).

[41] A. Tarraf, J. Daleiden, S. Irmer, D. Prasai und H. Hillmer, Stress investigation of PECVD dielectric layers for advanced optical MEMS, *Journal of Micromechanics and Microengineering* **14** (3), 317–323 (2004).

[42] W. A. P. Claassen, W. G. J. N. Valkenburg, M. F. C. Willemsen und W. M. v. d. Wijgert, Influence of Deposition Temperature, Gas Pressure, Gas Phase Composition, and RF Frequency on Composition and Mechanical Stress of Plasma Silicon Nitride Layers, *Journal of The Electrochemical Society* **132** (4), 893–898 (1985).

[43] W. A. P. Claassen, W. G. J. N. Valkenburg, W. M. v. d. Wijgert und M. F. C. Willemsen, On the relation between deposition conditions and (mechanical) stress in plasma silicon nitride layers, *Thin Solid Films* **129**, 239–247 (1985).

[44] L. Vanzetti, M. Barozzi, D. Giubertoni, C. Kompocholis, A. Bagolini und P. Bellutti, Correlation between silicon-nitride film stress and composition: XPS and SIMS analyses, *Surface and Interface Analysis* **38** (4), 723–726 (2006).

[45] E. Cianci, A. Schina, A. Minotti, S. Quaresima und V. Foglietti, Dual frequency PECVD silicon nitride for fabrication of CMUT membranes, *Sensors and Actuators A: Physical* **127** (1), 80–87 (2006).

[46] S. R. J. Brueck, Optical and Interferometric Lithography - Nanotechnology Enablers, *Proceedings of the IEEE* **93** (10), 1704–1721 (2005).

[47] J. de Boor, *Fabrication and Thermoelectric Characterization of Nanostructured Silicon*, Dissertation, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, 2011.

[48] J. de Boor, N. Geyer, J. V. Wittemann, U. Gösele und V. Schmidt, Sub-100 nm silicon nanowires by laser interference lithography and metal-assisted etching, *Nanotechnology* **21** (9), 095302 (2010).

[49] J. de Boor, D. S. Kim und V. Schmidt, Sub-50 nm patterning by immersion interference lithography using a Littrow prism as a Lloyd's interferometer, *Optics Letters* **35** (20), 3450–3452 (2010).

[50] B. Wu, A. Kumar und S. Pamarthy, High aspect ratio silicon etch: A review, *Journal of Applied Physics* **108**, 051101 (2010).

[51] F. Laermer und A. Schilp, *Method of anisotropically etching silicon*, Patent, 1996.

[52] S. Tachi, K. Tsujimoto und S. Okudaira, Low-temperature reactive ion etching and microwave plasma etching of silicon, *Applied Physics Letters* **52**, 616 (1988).

[53] U. Sökmen, A. Stranz, S. Fündling, H.-H. Wehmann, V. Bandalo, A. Bora, M. Tornow, A. Waag und E. Peiner, Capabilities of ICP-RIE cryogenic dry etching of silicon: review of exemplary microstructures, *Journal of Micromechanics and Microengineering* **19**, 105005 (2009).

[54] T. E. F. M. Standaert, M. Schaepkens, N. R. Rueger, P. G. M. Sebel, G. S. Oehrlein und J. M. Cook, High density fluorocarbon etching of silicon in an inductively coupled plasma: Mechanism of etching through a thick steady state fluorocarbon layer, in *International workshop on basic aspects of nonequilibrium plasmas interacting with surfaces (BANPIS"97)* **16**, 239–249 (1998).

[55] M. Schaepkens und G. S. Oehrlein, A Review of SiO_2 Etching Studies in Inductively Coupled Fluorocarbon Plasmas, *Journal of The Electrochemical Society* **148** (3), C211–C221 (2001).

[56] J. Keller, Inductive plasmas for plasma processing, *Plasma Sources Science and Technology* **5**, 166–172 (1996).

[57] J. Hopwood, Review of inductively coupled plasmas for plasma processing, *Plasma Sources Science and Technology* **1**, 109–116 (1992).

[58] A. P. Milenin, C. Jamois, T. Geppert, U. Gösele und R. B. Wehrspohn, SOI planar photonic crystal fabrication: Etching through $SiO_2/Si/SiO_2$ layer systems using fluorocarbon plasmas, *Microelectronic Engineering* **81** (1), 15–21 (2005).

[59] R. Gunn, C. Welch, D. Stephens und L. Deng, Comparison of etch processes for etching SiO_2 dielectric films, Technischer Bericht, Oxford Instruments Plasma Technology Ltd., 2009.

[60] H. Jansen, H. Gardeniers, M. Boer, M. Elwenspoek und J. Fluitman, A survey on the reactive ion etching of silicon in microtechnology, *Journal of Micromechanics and Microengineering* **6**, 14–28 (1996).

[61] V. Krastev, I. Reid, C. Galassi, G. Hughes und E. McGlynn, Influence of $C_4F_8/Ar/O_2$ plasma etching on SiO_2 surface chemistry, *Journal of Materials Science: Materials in Electronics* **16**, 541–547 (2005).

[62] A. Sankaran und M. J. Kushner, Etching of porous and solid SiO_2 in Ar/ c-C_4F_8, O_2/ c-C_4F_8 and Ar/ O_2/ c-C_4F_8 plasmas, *Journal of Applied Physics* **97**, 023307 (2004).

[63] X. Li, L. Ling, X. Hua, M. Fukasawa, G. S. Oehrlein, M. Barela und H. M. Anderson, Effects of Ar and O_2 additives on SiO_2 etching in C_4F_8-based plasmas, *Journal of Vacuum Science & Technology A* **21**, 284 (2002).

[64] Oxford Instruments Plasma Technology, *Deep Metal Masked SiO_2 etch for waveguides. Rev.2*, Technischer Bericht.

[65] C. C. Welch, A. L. Goodyear, T. Wahlbrink, M. C. Lemme und T. Mollenhauer, Silicon etch process options for micro- and nanotechnology using inductively coupled plasmas, *Microelectronic Engineering* **83**, 1170–1173 (2006).

[66] Oxford Instruments Plasma Technology, *Si etch using mixed C_4F_8-SF_6 Plasmalab System 100 ICP 380*, Technischer Bericht.

[67] T. C. Huang und P. K. Predecki, Grazing-Incidence X-Ray Technique for Surface, Interface, and Thin-Film Analysis, in *Advances in X-ray Analysis* **40** (1996).

[68] J. Zhang, *Verfahren und Einrichtungen zur Bestimmung mechanischer Eigenschaften mikromechanischer Werkstoffe*, VDI Verlag, 1994.

[69] G. Janssen, M. Abdalla, F. van Keulen, B. Pujada und B. van Venrooy, Celebrating the 100th anniversary of the Stoney equation for film stress: Developments from polycrystalline steel strips to single crystal silicon wafers, *Thin Solid Films* **517**, 1858–1867 (2009).

[70] U. Pietsch, V. Holý und T. Baumbach, *High-Resolution X-Ray Scattering - From Thin Films to Lateral Nanostructures*, Spinger-Verlag, 2004.

[71] M. Hanke, *Streuung von Röntgenstrahlen an selbstorganisierten Halbleiter-Inselstrukturen*, Dissertation, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, 2002.

[72] B. E. A. Saleh und M. C. Teich, *Fundamentals of Photonics*, John Wiley & Sons, Inc., 1991.

[73] B. Galerkin, On electrical circuits for the approximate solution of the Laplace equation, *Vestnik Inzh.* **19**, 897–908 (1915).

[74] P. P. Silvester und R. L. Ferrari, *Finite elements for electrical engineers*, Cambridge University Press, 1996.

[75] COMSOL Inc., www.comsol.com, *Comsol Multiphysics* .

[76] The Mathworks Inc., www.mathworks.de, *MATLAB* .

[77] C. Schriever, C. Bohley und R. B. Wehrspohn, Strain dependence of second-harmonic generation in silicon, *Optics Letters* **35**, 273–275 (2010).

[78] C. Schriever, C. Bohley, J. Schilling und R. B. Wehrspohn, Strain dependence of second-harmonic generation in silicon, in *Proceedings of SPIE* , 77190Z–77190Z–8 (2010).

[79] C. Schriever, C. Bohley und R. B. Wehrspohn, *Mechanical Stress on the Nanoscale: Simulation, Material Systems and Characterization Techniques*, Kapitel: Strain-Induced Nonlinear Optics in Silicon, 333–355, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2011.

[80] C. Schriever, C. Bohley, J. Schilling und R. B. Wehrspohn, Strained Silicon Photonics, *Materials* **5** (12), 889–908 (2012).

[81] G. D. Powell, J.-F. Wang und D. E. Aspnes, Simplified bond-hyperpolarizability model of second harmonic generation, *Physical Review B* **65** (20), 205320 (2002).

[82] D. E. Aspnes, Bond models in linear and nonlinear optics, *physica status solidi (b)* **247** (8), 1873–1880 (2010).

[83] J. T. Fitch, C. H. Bjorkman, G. Lucovsky, F. H. Pollak und X. Yin, Intrinsic stress and stress gradients at the SiO_2/Si interface in structures prepared by thermal oxidation of Si and subjected to rapid thermal annealing, *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures* **7** (4), 775–781 (1989).

[84] N. V. Nguyen, D. Chandler-Horowitz, P. M. Amirtharaj und J. G. Pellegrino, Spectroscopic ellipsometry determination of the properties of the thin underlying strained Si layer and the roughness at SiO_2/Si interface, *Applied Physics Letters* **64** (20), 2688–2690 (1994).

[85] Y. P. Kim, S. K. Choi, H. K. Kim und D. W. Moon, Direct observation of Si lattice strain and its distribution in the Si(001)-SiO_2 interface transition layer, *Applied Physics Letters* **71**, 3504–3506 (1997).

[86] W. Yashiro, K. Miki, K. Sumitani, T. Takahashi, Y. Yoda, K. Takahashi und T. Hattori, Mesoscopic-range strain field under SiO_2/Si interface with using the phase-sensitive X-ray diffraction technique, *IEIC Technical Report (Institute of Electronics, Information and Communication Engineers)* **104**, 21–26 (2004).

[87] E. Hasegawa, A. Ishitani, K. Akimoto, M. Tsukiji und N. Ohta, SiO_2/Si interface structures and reliability characteristics, *Journal of the Electrochemical Society* **142** (1), 273–282 (1995).

[88] T. Emoto, K. Akimoto, Y. Ishikawa, A. Ichimiya und A. Tanikawa, Strain near SiO_2-Si interface revealed by X-ray diffraction intensity enhancement, *Thin Solid Films* **369**, 281–284 (2000).

[89] W. Daum, H.-J. Krause, U. Reichel und H. Ibach, Identification of Strained Silicon Layers at Si–SiO_2 Interfaces and Clean Si Surfaces by Nonlinear Optical Spectroscopy, *Physical Review Letters* **71**, 1234–1237 (1993).

[90] W. Yashiro, K. Sumitani, T. Takahashi, Y. Yoda und K. Miki, New method to characterize mesoscopic range and very small strain with using multi-wave X-ray diffraction, *Surface Science* **550** (1-3), 93–105 (2004).

[91] S. V. Govorkov, N. I. Koroteev, G. I. Petrov, I. L. Shumay und V. V. Yakovlev, Laser Nonlinear-Optical Probing of Silicon/SiO_2 Interfaces: Surface Stress Formation and Relaxation, *Applied Physics A* **50**, 439–443 (1990).

[92] J. Y. Huang, Probing Inhomogeneous Lattice Deformation at Interface of Si(111)/SiO_2 by Optical Second-Harmonic Reflection and Raman Spectroscopy, *Japanese Journal of Applied Physics* **33**, 3878–3886 (1994).

[93] E. Kobeda und E. A. Irene, In situ stress measurements during thermal oxidation of silicon, *Journal of Vacuum Science and Technology B* **7**, 163–166 (1989).

[94] C. W. van Hasselt, E. Mateman, M. A. C. Devillers, T. Rasing, A. A. Fedyanin, E. D. Mishina, O. A. Aktsipetrov und J. C. Jans, Oxide-thickness dependence of second harmonic generation from thick thermal oxides on Si(111), *Surface Science* **331–333, Part B**, 1367–1371 (1995).

[95] C. W. van Hasselt, M. A. C. Devillers, T. Rasing und O. A. Aktsipetrov, Second-harmonic generation from thick thermal oxides on Si(111): the influence of multiple reflections, *Journal of the Optical Society of America B* **12** (1), 33–36 (1995).

[96] Y. Q. An, *Spectroscopic Studies of Optical Second-Harmonic Generation from Si(001) Surfaces*, Dissertation, University of Colorado, 2003.

[97] C. Schriever, C. Bohley, F. Naumann, J. de Boor, J. Lange und J. Schilling, Modification of second harmonic generation in silicon by strain and structuring, in *2011 8th IEEE International Conference on Group IV Photonics (GFP)* , 308–310 (2011).

[98] C. Kittel, *Einführung in die Festkörperphysik*, Oldenbourg Verlag, 1999.

[99] D. Gross, W. Hauger und P. Wriggers, *Technische Mechanik Band 4: Hydromechanik, Elemente der Höheren Mechanik, Numerische Methoden*, Springer, 2009.

[100] E. Hecht, *Optics*, Addison Wesley Longman, Inc., 1998.

[101] J. E. Harvey und C. L. Vernold, Description of Diffraction Grating Behavior in Direction Cosine Space, *Applied Optics* **37** (34), 8158–8160 (1998).

[102] L. Li, Use of Fourier series in the analysis of discontinuous periodic structures, *Journal of the Optical Society of America A* **13** (9), 1870–1876 (1996).

[103] L. Li, New formulation of the Fourier modal method for crossed surface-relief gratings, *Journal of the Optical Society of America A* **14** (10), 2758–2767 (1997).

[104] J. E. Stewart und W. S. Gallaway, Diffraction Anomalies in Grating Spectrophotometers, *Applied Optics* **1** (4), 421–429 (1962).

[105] D. E. Aspnes und A. A. Studna, Dielectric functions and optical parameters of Si, Ge, GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs, and InSb from 1.5 to 6.0 eV, *Physical Review B* **27** (2), 985–1009 (1983).

[106] J. S. Levy, M. A. Foster, A. L. Gaeta und M. Lipson, Second-Harmonic Generation in Silicon Nitride Ring Resonators, *arXiv:1010.6042* (2010).

[107] F. Bianco, K. Fedus, F. Enrichi, R. Pierobon, M. Cazzanelli, M. Ghulinyan, G. Pucker und L. Pavesi, Two-dimensional micro-Raman mapping of stress and strain distributions in strained silicon waveguides, *Semiconductor Science and Technology* **27** (8), 085009 (2012).

[108] G. Lucovsky und J. C. Phillips, Interfacial strain-induced self-organization in semiconductor dielectric gate stacks. I. Strain relief at the Si -SiO2 interface, *Journal of Vacuum Science Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures* **22** (4), 2087–2096 (2004).

[109] C. Schriever, C. Bohley und J. Schilling, Designing the quality factor of infiltrated photonic wire slot microcavities, *Optics Express* **18** (24), 25217–25224 (2010).

[110] C. Schriever, C. Bohley und J. Schilling, Numerical simulations of tapering concepts for infiltrated nanobeam slot microcavities, in *Proceedings of DoKDoK* , 118–119 (2011).

[111] J. Schilling, C. Schriever und C. Bohley, Slotted nanobeam microcavities enabling hybrid photonic devices, in *Proceedings of SPIE* , 80950A–80950A–8 (2011).

[112] C. Schriever, C. Bohley und J. Schilling, Numerical investigation of taper parameters for high Q infiltrated nanobeam slot microcavities, *Photonics and Nanostructures - Fundamentals and Applications* **10** (3), 312–318 (2012).

[113] V. R. Almeida, Q. Xu, C. A. Barrios und M. Lipson, Guiding and confining light in void nanostructure, *Optics Letters* **29** (11), 1209–1211 (2004).

[114] Q. Xu, V. R. Almeida, R. R. Panepucci und M. Lipson, Experimental demonstration of guiding and confining light in nanometer-size low-refractive-index material, *Optics Letters* **29** (14), 1626–1628 (2004).

[115] T. Vallaitis, C. Koos, R. Bonk, W. Freude, M. Laemmlin, C. Meuer, D. Bimberg und J. Leuthold, Slow and fast dynamics of gain and phase in a quantum dot semiconductor optical amplifier, *Optics Express* **16** (1), 170–178 (2008).

[116] J. Leuthold, W. Freude, J. Brosi, R. Baets, P. Dumon, I. Biaggio, M. L. Scimeca, F. Diederich, B. Frank und C. Koos, Silicon organic hybrid technology : a platform for practical nonlinear optics (2009).

[117] T. Yamamoto, M. Notomi, H. Taniyama, E. Kuramochi, Y. Yoshikawa, Y. Torii und T. Kuga, Design of a high-Q air-slot cavity based on a width-modulated line-defect in a photonic crystal slab, *Optics Express* **16** (18), 13809–13817 (2008).

[118] K. Foubert, L. Lalouat, B. Cluzel, E. Picard, D. Peyrade, F. de Fornel und E. Hadji, An air-slotted nanoresonator relying on coupled high Q small V Fabry-Perot nanocavities, *Applied Physics Letters* **94**, 251111 (2009).

[119] A. Di Falco, L. O'Faolain und T. F. Krauss, Chemical sensing in slotted photonic crystal heterostructure cavities, *Applied Physics Letters* **94** (6), 063503 (2009).

[120] A. H. J. Yang, S. D. Moore, B. S. Schmidt, M. Klug, M. Lipson und D. Erickson, Optical manipulation of nanoparticles and biomolecules in sub-wavelength slot waveguides, *Nature* **457** (7225), 71–75 (2009).

[121] R. Gehlhaar, *Terahertz oscillation and stimulated emission from planar microcavities*, Dissertation, Technische Universität Dresden, 2007.

[122] C. Schriever, *Untersuchung und Beeinflussung des Energietransfers zwischen Farbstoffmolekülen in Mikroresonatoren*, Diplomarbeit, Technische Universität Dresden, 2007.

[123] M. Koschorreck, R. Gehlhaar, V. G. Lyssenko, M. Swoboda, M. Hoffmann und K. Leo, Dynamics of a high-Q vertical-cavity organic laser, *Applied Physics Letters* **87**, 181108 (2005).

[124] Institut für Angewandte Photophysik, Dresden, www.iapp.de, *IAPP* .

[125] D. Pergande, *Polarisationsabhängige Transmissionseigenschaften von integriert optischen Wellenleitern auf Siliziumbasis*, Dissertation, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, 2009.

[126] J. Üpping, *3D-photonische Kristalle für photovoltaische Anwendungen*, Dissertation, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenbeg, 2011.

[127] E. Yablonovitch, Inhibited Spontaneous Emission in Solid-State Physics and Electronics, *Physical Review Letters* **58**, 2059–2062 (1987).

[128] S. John, Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices, *Physical Review Letters* **58**, 2486–2489 (1987).

[129] M. Notomi, K. Yamada, A. Shinya, J. Takahashi, C. Takahashi und I. Yokohama, Extremely Large Group-Velocity Dispersion of Line-Defect Waveguides in Photonic Crystal Slabs, *Physical Review Letters* **87** (25), 253902 (2001).

[130] T. F. Krauss, Slow light in photonic crystal waveguides, *Journal of Physics D: Applied Physics* **40** (9), 2666–2670 (2007).

[131] T. Baba, Slow light in photonic crystals, *Nature Photonics* **2** (8), 465–473 (2008).

[132] K. Srinivasan, M. Borselli, O. Painter, A. Stintz und S. Krishna, Cavity Q, mode volume, and lasing threshold in small diameter AlGaAs microdisks with embedded quantum dots, *Optics Express* **14** (3), 1094–1105 (2006).

[133] D. Peyrade, E. Silberstein, P. Lalanne, A. Talneau und Y. Chen, Short Bragg mirrors with adiabatic modal conversion, *Applied Physics Letters* **81**, 829 (2002).

[134] M. Gnan, G. Bellanca, H. M. H. Chong, P. Bassi und R. M. De La Rue, Modelling of Photonic Wire Bragg Gratings, *Optical and Quantum Electronics* **38**, 133–148 (2006).

[135] H. Kim, K. Ikeda und Y. Fainman, Tunable Transmission Resonant Filter and Modulator With Vertical Gratings, *Journal of Lightwave Technology* **25** (5), 1147–1151 (2007).

[136] H. Kim, K. Ikeda und Y. Fainman, Resonant waveguide device with vertical gratings, *Optics Letters* **32** (5), 539–541 (2007).

[137] A. Laakso, M. Dumitrescu, J. Viheriälä, J. Karinen, M. Suominen und M. Pessa, Optical modeling of laterally-corrugated ridge-waveguide gratings, *Optical and Quantum Electronics* **40**, 907–920 (2009).

[138] M. Gnan, W. C. L. Hopman, G. Bellanca, R. M. de Ridder, R. M. De La Rue und P. Bassi, Closure of the stop-band in photonic wire Bragg gratings, *Optics Express* **17** (11), 8830–8842 (2009).

[139] P. Velha, J. C. Rodier, P. Lalanne, J. P. Hugonin, D. Peyrade, E. Picard, T. Charvolin und E. Hadji, Ultra-high-reflectivity photonic-bandgap mirrors in a ridge SOI waveguide, *New Journal of Physics* **8** (9), 204 (2006).

[140] Y. Zhang, M. W. McCutcheon, I. B. Burgess und M. Loncar, Ultra-high-Q TE/TM dual-polarized photonic crystal nanocavities, *Optics Letters* **34** (17), 2694–2696 (2009).

[141] P. B. Deotare, M. W. McCutcheon, I. W. Frank, M. Khan und M. Loncar, High quality factor photonic crystal nanobeam cavities, *Applied Physics Letters* **94** (12), 121106 (2009).

[142] J. S. Foresi, P. R. Villeneuve, J. Ferrera, E. R. Thoen, G. Steinmeyer, S. Fan, J. D. Joannopoulos, L. C. Kimerling, H. I. Smith und E. P. Ippen, Photonic-bandgap microcavities in optical waveguides, *Nature* **390**, 143–145 (1997).

[143] D. J. Ripin, K. Lim, G. S. Petrich, P. R. Villeneuve, S. Fan, E. R. Thoen, J. D. Joannopoulos, E. P. Ippen und L. A. Kolodziejski, One-dimensional photonic bandgap microcavities for strong optical confinement in GaAs and GaAs/Al_xO_y semiconductor waveguides, *Journal of Lightwave Technology* **17** (11), 2152–2160 (1999).

[144] A. R. Md Zain, M. Gnan, H. M. H. Chong, M. Sorel und R. M. De La Rue, Tapered Photonic Crystal Microcavities Embedded in Photonic Wire Waveguides with large Resonance Quality - Factory and High Transmission, *Photonics Technology Letters IEEE* **20**, 6–8 (2008).

[145] B. Ahn, J. Kang, M. Kim, J. Song, B. Min, K. Kim und Y. Lee, One-dimensional parabolic-beam photonic crystal laser, *Optics Express* **18** (6), 5654–5660 (2010).

[146] Q. Quan, P. B. Deotare und M. Loncar, Photonic crystal nanobeam cavity strongly coupled to the feeding waveguide, *Applied Physics Letters* **96** (20), 203102 (2010).

[147] E. Kuramochi, H. Taniyama, T. Tanabe, K. Kawasaki, Y. G. Roh und M. Notomi, Ultrahigh-Q one-dimensional photonic crystal nanocavities with modulated mode-gap barriers on SiO_2 claddings and on air claddings, *Optics Express* **18** (15), 15859–15869 (2010).

[148] P. Lalanne und J. P. Hugonin, Bloch-wave engineering for high-Q, small-V microcavities, *IEEE Journal of Quantum Electronics* **39**, 1430–1438 (2003).

[149] P. Lalanne, C. Sauvan und J. Hugonin, Photon confinement in photonic crystal nanocavities, *Laser & Photonics Review* **2** (6), 514–526 (2008).

[150] M. Palamaru und P. Lalanne, Photonic crystal waveguides: Out-of-plane losses and adiabatic modal conversion, *Applied Physics Letters* **78**, 1466 (2001).

[151] A. R. Md Zain, N. P. Johnson, M. Sorel und R. M. De La Rue, Ultra high quality factor one dimensional photonic crystal/photonic wire micro-cavities in silicon-on-insulator (SOI), *Optics Express* **16** (16), 12084–12089 (2008).

[152] A. R. Md Zain, M. Sorel und R. M. De La Rue, Advancing the performance of one-dimensional photonic crystal/photonic wire micro-cavities in silicon-on-insulator, *Integrated Photonics and Nanophotonics Research and Applications* (2008).

[153] P. Velha, E. Picard, T. Charvolin, E. Hadji, J. Rodier, P. Lalanne und D. Peyrade, Ultra-High Q/V Fabry-Perot microcavity on SOI substrate, *Optics Express* **15** (24), 16090–16096 (2007).

[154] L. Lalouat, B. Cluzel, F. de Fornel, P. Velha, P. Lalanne, D. Peyrade, E. Picard, T. Charvolin und E. Hadji, Subwavelength imaging of light confinement in high-Q/small-V photonic crystal nanocavity, *Applied Physics Letters* **92** (11), 111111 (2008).

[155] C. Sauvan, G. Lecamp, P. Lalanne und J. Hugonin, Modal-reflectivity enhancement by geometry tuning in Photonic Crystal microcavities, *Optics Express* **13** (1), 245–255 (2005).

[156] P. Yeh, *Optical waves in layered media*, Wiley, 2005.

[157] A. B. Seddon, Chalcogenide glasses: a review of their preparation, properties and applications, *Journal of Non-Crystalline Solids* **184** (0), 44–50 (1995).

[158] J. S. Sanghera und I. D. Aggarwal, Active and passive chalcogenide glass optical fibers for IR applications: a review, *Journal of Non-Crystalline Solids* **256-257** (0), 6–16 (1999).

[159] A. Zakery und S. Elliott, Optical properties and applications of chalcogenide glasses: a review, *Journal of Non-Crystalline Solids* **330** (1-3), 1–12 (2003).

[160] H. Kobayashi, H. Kanbara, M. Koga und K. Kubodera, Third-order nonlinear optical properties of As_2S_3 chalcogenide glass, *Journal of Applied Physics* **74** (6), 3683–3687 (1993).

[161] M. Asobe, T. Kanamori, K. Naganuma, H. Itoh und T. Kaino, Third-order nonlinear spectroscopy in As_2S_3 chalcogenide glass fibers, *Journal of Applied Physics* **77** (11), 5518–5523 (1995).

[162] M. Guignard, V. Nazabal, J. Troles, F. Smektala, H. Zeghlache, Y. Quiquempois, A. Kudlinski und G. Martinelli, Second-harmonic generation of thermally poled chalcogenide glass, *Optics Express* **13** (3), 789–795 (2005).

[163] J. Qiu, J. Si und K. Hirao, Photoinduced stable second-harmonic generation in chalcogenide glasses, *Optics Letters* **26** (12), 914–916 (2001).

[164] V. Ta'eed, N. J. Baker, L. Fu, K. Finsterbusch, M. R. E. Lamont, D. J. Moss, H. C. Nguyen, B. J. Eggleton, D. Choi, S. Madden und B. Luther-Davies, Ultrafast all-optical chalcogenide glass photonic circuits, *Optics Express* **15** (15), 9205–9221 (2007).

[165] D. Freeman, C. Grillet, M. W. Lee, C. L. Smith, Y. Ruan, A. Rode, M. Krolikowska, S. Tomljenovic-Hanic, C. de Sterke, M. J. Steel, B. Luther-Davies, S. Madden, D. J. Moss, Y. Lee und B. J. Eggleton, Chalcogenide glass photonic crystals, *Photonics and Nanostructures - Fundamentals and Applications* **6** (1), 3–11 (2008).

[166] C. Monat, M. Spurny, C. Grillet, L. O'Faolain, T. F. Krauss, B. J. Eggleton, D. Bulla, S. Madden und B. Luther-Davies, Third-harmonic generation in slow-light chalcogenide glass photonic crystal waveguides, *Optics Letters* **36** (15), 2818–2820 (2011).

[167] M. Spurny, L. O'Faolain, D. A. P. Bulla, B. Luther-Davies und T. F. Krauss, Fabrication of low loss dispersion engineered chalcogenide photonic crystals, *Optics Express* **19** (3), 1991–1996 (2011).

[168] K. Bittrich, *Numerische Untersuchung von Mikrokavitäten in Bragg-Wellenleitern*, Bachelorarbeit, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, 2010.

[169] J. D. Joannopoulos, R. D. Meade und J. N. Winn, *Photonic Crystals - Molding the Flow of Light*, Princeton University Press, 1995.

[170] J. Vučkovič, M. Lončar, H. Mabuchi und A. Scherer, Design of photonic crystal microcavities for cavity QED, *Physical Review E* **65** (1), 016608 (2001).

[171] D. Englund, I. Fushman und J. Vučkovič, General recipe for designing photonic crystal cavities, *Optics Express* **13** (16), 5961 (2005).

[172] S. Wong, M. Deubel, F. Pérez-Willard, S. John, G. A. Ozin, M. Wegener und G. von Freymann, Direct Laser Writing of Three-Dimensional Photonic Crystals with a Complete Photonic Bandgap in Chalcogenide Glasses, *Advanced Materials* **18** (3), 265–269 (2006).

[173] M. Vlek und H. Jain, Nanostructuring of chalcogenide glasses using electron beam lithography, *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials* **8** (6), 2108–2111 (2006).

[174] R. L. Sutherland, *Handbook of Nonlinear Optics*, CRC Press, 2003.

[175] N. K. Hon, K. K. Tsia, D. R. Solli und B. Jalali, Periodically poled silicon, *Applied Physics Letters* **94**, 091116 (2009).

[176] H. Hu, persönliche Mitteilung, *Universität Shandong* (2012).

[177] D. Hofstetter und R. L. Thornton, Theory of loss measurements of Fabry Perot resonators by Fourier analysis of the transmission spectra, *Optics Letters* **22** (24), 1831–1833 (1997).

[178] W. Bogaerts, *Nanophotonic Waveguides and Photonic Crystals in Silicon-on-Insulator*, Dissertation, Universität Gent, 2004.

[179] P. W. Nolte, *Untersuchung von integrierten Silizium-Hybrid-Wellenleiterstrukturen für nichtlineare optische Anwendungen*, Dissertation, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, in Arbeit.

[180] R. Lyons, Reducing FFT Scalloping Loss Errors Without Multiplication, *IEEE Signal Processing Magazine* **28** (2), 112 –116 (2011).

Abbildungsverzeichnis

1.1 Schematische Darstellung einer inhomogen verzerrten Kristallstruktur 2

2.1 Schematische Darstellung der Anregung eines Elektrons in einem nicht-/ zentrosymmetrischen Potential 4
2.2 Schematische Darstellung des Strahlenverlaufs bei Frequenzverdopplung in Reflexion 7
2.3 Kristallstruktur von (111)-orientiertem Silizium 9

3.1 Grundprinzip der Laserinterferenzlithografie 15
3.3 Schematische Darstellung eines Trockenätzprozesses 16
3.4 Schematische Darstellung der beim reaktiven Ionenätzen auftretenden Ätzvorgänge 17
3.5 Prinzipskizze des ionengestützten Ätzens 18
3.6 Strukturformeln von C_4F_8 und SF_6 19
3.7 REM Aufnahme einer geätzten Siliziumdioxidstruktur 20
3.8 REM Aufnahme eines geätzten Siliziumdioxid-Silizium-Schichtsystems 21
3.9 REM Aufnahme eines geätzten nitridbeschichteten Siliziumwellenleiters 21

4.1 Schematische Darstellung der Superposition von Dehnungs- und Biegeverspannung in einem Zweischichtmodell 23
4.2 Schematische Darstellung der Waferbiegungsanalyse 24
4.3 Schematische Darstellung des Prinzips der Röntgenbeugung 25
4.4 Skizze der Röntgenbeugung in komplanarer Messgeometrie ($Q_y = 0$) 26
4.5 Strahlengang im Röntgendiffraktometer 26
4.6 Schematische Darstellung zur transversalen Kohärenz der Röntgenstrahlung . . . 27
4.7 Messaufbau zur Untersuchung von Frequenzverdopplungseffekten in Reflexion . . 28
4.8 Skizze der Probenhalterung des Reflexionsaufbaus 29
4.9 Skizze zur Breite eines Gaussstrahls in Abhängigkeit der Strahlposition 30
4.10 Bestimmung des Profils des Anregungsstrahls mit der Klingenmethode 31
4.11 Veranschaulichung des Prinzips der Finite-Elemente-Methode 32

5.1 Durch thermische Oxidation erzeugte Verspannungen in der Oxidschicht in Abhängigkeit von der Prozesstemperatur 36
5.2 Vergleich der frequenzverdoppelten Intensitäten von Siliziumproben mit (100) bzw. (111) orientierter Oberfläche unter gleichen Messbedinungen. 37
5.3 Schema zur Messung von Frequenzverdopplungseffekten in verspanntem Silizium in Reflexion 37
5.4 Abhängigkeit des frequenzverdoppelten Signals von der Orientierung der Bindungen im Silizium Kristall 38
5.5 Anregungseffizienz der Bindungsdipole bei Frequenzverdopplung in Abhängigkeit des Azimutalwinkels 39
5.6 Verknüpfung der $\chi^{(2)}$-Komponenten mit den Bindungen des Siliziumkristalls. Die Pfeile zeigen die Schwingungsrichtung des jeweiligen Polarisationsanteils an. . . . 40
5.7 Experimentelle Bestimmung der nichtlinearen Koeffizienten a und c 41

5.8 Verstärkung von $\chi^{(2)}$ in Abhängigkeit der aufgebrachten Verspannung 41
5.9 Vergleich des frequenzverdoppelten Signals einer unbeschichteten Referenzprobe, einer beidseitig und einer einseitig oxidierten Probe 42
5.10 Schematische Darstellung der Ausbildung einer verspannten Siliziumschicht durch thermische Oxidation 43
5.11 Vergleich der nichtlinearen Koeffizienten gemessen unter $\Theta = 56°$ und $\Theta = 45°$ . . 45

6.1 Schematische Darstellung der Verspannungsrelaxation in verspannten Silizium-Gitterstrukturen 47
6.2 Übersicht über die Prozessschritte zur Herstellung strukturierter Proben 48
6.3 Elektronenmikroskopaufnahmen der Proben IL135-3 und IL136-3. 48
6.4 Vergleich der gemessenen und simulierten RSM der unverspannten Referenzprobe IL135-3 50
6.5 Skizze zur Nummerierung der Einheitszellen, die zur Röntgenbeugung beitragen . 51
6.6 Vergleich der gemessenen und simulierten RSM der verspannten Probe IL136-3 . 52
6.7 FEM-Modell des Dehnungsverlaufs in einem verspannten Zahn 53
6.8 Frequenzverdoppeltes Signal einer verspannten sowie einer unverspannten Siliziumprobe mit periodischer Linienstruktur 54
6.9 Schematische Darstellung der Beugung an einem Streifengitter 55
6.10 Vergleich der experimentell und numerisch bestimmten Beugungseffizienzen für eine unverspannte Probe 56
6.11 Vergleich der frequenzverdoppelten Intensität mit der des Faltungsmodells 57
6.12 Analyse der Phasenbeziehungen bei Frequenzverdopplung in Reflexion 59

7.1 Elektronenmikroskopaufnahmen der verschiedenen untersuchten Probentypen . . 63
7.2 Schichtverspannungen und Abscheideraten des verwendeten PECVD-Prozesses in Abhängigkeit des Arbeitszykluses 64
7.3 Analyse der Propagationsverluste am Beispiel eines 4 μm breiten Wellenleiters . . 65
7.4 Verteilung der aus dem Transmissionsspektrum (Abb. 7.3 (a)) bestimmten Propagationsverluste 66
7.5 Simulierte Verspannungsverteilung über den Querschnitt der verschiedenen Wellenleiter mit einer Breite von 10 μm 67
7.6 Skizze des Aufbaus zur Messung von Frequenzverdopplungseffekten in Wellenleitern in Justagekonfiguration 69
7.7 Beispiele für gut und schlecht justierte Wellenleiter 70
7.8 Skizze des Aufbaus zur Messung von Frequenzverdopplungseffekten in Wellenleitern in Messkonfiguration 71
7.9 Experimentell bestimmtes Transmissionsspektrum eines 10 μm breiten Wellenleiters der Probe `SiO2` 71
7.10 Zusammenhang zwischen der Konversionseffizienz η und dem Gesamtverspannungsgradienten Σ 74
7.11 Modenverteilung in einem 4 μm breiten und einem 10 μm breiten Silizium Wellenleiter. 75

8.1 Skizze eines lokal infiltrierten eindimensionalen Wellenleiter-Schlitz-Mikroresonators 77
8.2 Schematische Darstellung eines Schlitzwellenleiters in Silizium 78
8.3 Intensitätsverteilung des TE polarisierten elektrischen Feldes im Querschnitt eines mit Chalkogenidglas gefüllten Schlitzwellenleiters 78
8.4 REM Aufnahmen von Beispielen photonischer Kristallstrukturen 79
8.5 Schematische Darstellung eines Mikroresonators in einem optischen Wellenleiter . 81

8.6 Veranschaulichung der Modenfehlanpassung am Übergang zwischen Resonator und angrenzendem Spiegel . . . 82
8.7 Veranschaulichung der Anpassung der Wellenvektoren der Resonatormode und der des angrenzenden Spiegels . . . 83
8.8 Veranschaulichung des Prinzips der Wellenvektor- bzw. Wellenlängenanpassung . 83
8.9 Abhängigkeit des effektiven Modenindex des infiltrierten Schlitzes von der Schlitzbreite und dem Füllmaterial . . . 85
8.10 Schematische Darstellung eines Schlitzresonators mit der Bezeichnung der verschiedenen Modellparameter . . . 86
8.11 Konvergenzuntersuchung an einem dreidimensionalen FEM-Modell . . . 87
8.12 Q-Faktor eines einfachen Schlitzwellenleiters ohne optimierten Übergang in Abhängigkeit von der Schlitzlänge . . . 88
8.13 Örtliche Verteilung der Intensität des elektrischen Feldes im Resonator ohne optimierten Übergang . . . 88
8.14 Änderung der Güte eines Schlitzresonators bei Anpassung des Porenabstands im Übergang zwischen Kavität und Spiegel . . . 90
8.15 Örtliche Verteilung der Intensität des elektrischen Feldes im Resonator bei angepasstem Porenabstand des Spiegel-Kavitäts Übergangs . . . 90
8.16 Intensitätsverteilung der Mode eines Resonators mit einer Schlitzlänge von 1080 nm 91
8.17 Intensitätsverteilung der Mode eines Resonators mit einer Schlitzlänge von 1020 nm 91
8.18 Q-Faktor eines Schlitzresonators, mit optimiertem Porendurchmesser im Übergangsbereich . . . 92
8.19 Q-Faktor eines Schlitzresonators mit vollständig angepasstem Übergang in Abhängigkeit von der Schlitzlänge . . . 92
8.20 Örtliche Verteilung der Intensität des elektrischen Feldes in einem Resonator mit vollständig angepasstem Übergangsbereich . . . 93
8.21 Abhängigkeit des Q-Faktors von der Anzahl der Spiegelporen . . . 93
8.22 Abhängigkeit der Resonatorgüte von der Anzahl der verwendeten Poren im Übergang 94
8.23 Fouriertransformiertes elektrisches Feld einer Resonatormode an der Grenzfläche zum Substrat . . . 95
8.24 Elektronenmikroskopaufnahme des Prototypen eines eindimensionalen Wellenleiter-Schlitz-Mikroresonators . . . 96
8.25 Simulation der optischen Bistabilität in einem mit As_3S_2 gefüllten Resonator . . 97

A.1 Analyse des Messsignals zur Bestimmung der Unsicherheiten auf Grund der Messmethode und der Probenbeschaffenheit . . . 103
A.2 Skizze des Koppelmessplatzes zur linearen Transmissionsmessung . . . 104
A.3 Berechnete Transmissionsspektren verlustbehafteter Wellenleiter . . . 105
A.4 Fouriertransformierte des Transmissionsspektrums idealer verlustbehafteter Wellenleiter . . . 106

Danksagungen

An dieser Stelle möchte ich all denjenigen danken, die durch ihre Unterstützung zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Zunächst danke ich meinem Betreuer Jun.-Prof. Jörg Schilling für seine Unterstützung und die vielen Ratschläge, die mir bei meiner Arbeit weitergeholfen haben. Prof. Ralf B. Wehrspohn danke ich für die Betreuung während des ersten Teils meiner Arbeit sowie für seinen Einsatz für das ZIK „Sili-nano“, was mir die Durchführung meiner Arbeiten erst ermöglicht hat.

Bei Dr. Christian Bohley möchte ich mich für seine Hilfe vor allem bei der Entwicklung meiner Simulationsmodelle und beim Verstehen der nichtlinearen optischen Prozesse bedanken. Auch unsere hochgeistigen Diskussionen über diverse belanglose Themen sowie seine mahnenden Worte zum verantwortungsvollen Umgang mit der Kommasetzung werden mir in angenehmer Erinnerung bleiben.

Auch meinen beiden Büromitbewohnern Dr. Daniel Pergande und Peter Nolte möchte ich für das angenehme Büroklima und ihre Toleranz hinsichtlich der Ordnung meines Schreibtisches danken. Vor allem Peter Nolte sei darüber hinaus seine Hilfe bei den linearen Transmissionsmessungen gedankt.

Auch all meinen anderen Kollegen und Mitdoktoranden aus dem ZIK und der Arbeitsgruppe μMD möchte ich vielmals für ihre Hilfe bei diversen Gelegenheiten und das tolle Arbeitsklima danken. Besonders danke ich Dr. Bernd Ahrens für das Korrekturlesen meiner Arbeit.

Des weiteren gilt mein Dank der Reinraumcrew des IZM für die großartige Zusammenarbeit und ihre Hilfsbereitschaft. Insbesondere danke ich Dr. Bodo Fuhrmann für viele hilfreiche Diskussionen und das Korrekturlesen meiner Arbeit, Dr. Frank Heyroth für die Elektronenstrahllithografie, Frank Syrowatka für die gemeinsamen Stunden am ESEM sowie Hans Blaschek und Sven Schlenker für die vielen Male, in denen sie mich bei Arbeiten im Reinraum unterstützt haben. Hervorzuheben ist auch mein Hiwi Benjamin Köhler, der mich mit seiner selbständigen Arbeit am Plasmaätzer stark entlastet hat.

Für seinen fachlichen Rat die Ursachen der Verspannungen im Silizium betreffend möchte ich PD Dr. Hartmut Leipner danken.

Des Weiteren danke ich PD Dr. Michael Hanke und Dr. Christian Eisenschmidt für ihre Meinung zu meiner Interpretation der Röntgenmessungen, letztgenanntem auch für die Durchführung der Messungen.

Ich danke auch Dr. Joahnnes de Boor für die Belichtung meiner Proben mittels Laserinterferenzlithografie, Dr. Angelika Hähnel für ihre Untersuchungen mittels TEM sowie Klaus-Peter Meyer und Zafer Dunbay für die Oxidation meiner Wafer.

Ich möchte mich auch bei den Mitarbeitern der Arbeitsgruppe Optik bedanken, bei denen ich einen Teil meiner Messungen durchgeführt habe. Insbesondere danke ich Dr. Jens Lange und PD Dr. Gerhard Seifert für ihren Rat beim Aufbau des Messplatzes und für wissenschaftliche Diskussionen. Prof. Ulrich Höfer gilt mein Dank für seine Hinweise das Prinzip der Frequenzverdopplung betreffend.

Des Weiteren danke ich Prof. Lorenzo Pavesi, dass er es mir ermöglicht hat, meine Proben in seinen Laboren untersuchen zu können. Bei Dr. Massimo Cazzanelli und Federica Bianco bedanke ich mich für die konstruktive Zusammenarbeit.

Darüber hinaus möchte ich mich ganz herzlich bei all meinen Freunden und Familienmitgliedern bedanken die mich während der Zeit meiner Promotion unterstützt haben.

Mein größter Dank gilt meiner Ehefreundin Daniela, die auch in schwierigen Zeiten von mir überzeugt war und mir den Rückhalt gegeben hat meine Arbeit zu Ende zu führen. Auch meiner Tochter Helene möchte ich danken, dafür dass sie mich stets daran erinnert, die wichtigen Dinge nicht aus den Augen zu verlieren.

Lebenslauf

Persönliche Daten

Name:	Schriever
Vorname:	Clemens
Adresse:	Viktor-Scheffel-Straße 10, 06114 Halle (Saale)
E-Mail:	Clemens.Schriever@physik.uni-halle.de
Geburtsdatum und -ort:	24.11.1981 in Münster
Familienstand:	verheiratet

Bildungsweg

bis 07/2000:	Besuch des Martin-Luther-Gymnasiums in Wittenberg
	Abschluss: Abitur
09/2000 bis 07/2001:	Zivildienst in der unteren Umweltbehörde des Landkreises Wittenberg
10/2001 bis 03/2007:	Studium der Physik an der Technischen Universität Dresden
	Abschluss: Diplom-Physiker
03/2007 bis 12/2007:	Anstellung als wissenschaftliche Hilfskraft
	Technische Universität Dresden, Institut für Angewandte Photophysik
01/2008 bis 09/2009 :	Anstellung als wissenschaftlicher Mitarbeiter
	Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Institut für Physik
seit 09/2009 :	Anstellung als wissenschaftlicher Mitarbeiter
	Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, ZIK Sili nano

Halle (Saale), den 10. November 2013

Clemens Schriever

Eigene Veröffentlichungen und Vorträge

Eigene Veröffentlichungen

C. Schriever, C. Bohley und R. B. Wehrspohn, **Strain dependence of second-harmonic generation in silicon**, *Optics Letters* **35**, 273 (2010).

C. Schriever, C. Bohley, J. Schilling und R. B. Wehrspohn, **Strain dependence of second-harmonic generation in silicon** *Proceedings of SPIE*, **7719**, 77190Z (2010).

F. Naumann, C. Schriever und J. Schilling, **Numerische Analyse der Spannungsrelaxation nanostrukturierter siliziumbasierter optischer Wellenleiter zur Erzeugung nichtlinearer optischer Effekte**, *Proceedings Mikro-Nano-Integration (GMM-FB 63)*, (2010).

F. Naumann, O. Moutanabbir, M. Reiche, C. Schriever, J. Schilling und M. Petzold, **Numerical investigations of the strain behavior in nanoscale patterned strained silicon structures**, *Proceedings of EuroSimE*, (2010).

C. Schriever, C. Bohley und J. Schilling, **Designing the quality factor of infiltrate photonic wire slot microcavities**, *Optics Express* **18**, 24, 25217-24 (2010).

C. Schriever, C. Bohley und J. Schilling, **Numerical simulations of tapering concepts for infiltrated nanobeam slot microcavities**, *Proceedings of DoKDoK*, 118-119, (2011)

C. Schriever, C. Bohley und R. B. Wehrspohn, **Strain-Induced Nonlinear Optics in Silicon** in *Mechanical Stress on the Nanoscale - Simulation, Material Systems and Characterization Techniques*, Wiley-VCH, (2011) (Buchartikel)

J. Schilling, C. Schriever und C. Bohley, **Slotted nanobeam microcavities enabling hybrid photonic devices**, *Proceedings of SPIE* **8095**, 80950A (2011).

C. Schriever, C. Bohley, F. Naumann, J. de Boor, J. Lange und J. Schilling, **Modification of Second Harmonic Generation in Silicon by Strain and Structuring**, *Proceedings of 8th IEEE International Conference on Group IV Photonics*, 308 - 310, (2011)

C. Schriever und R.B. Wehrspohn **Stretching silicon's potential**, *Nature Materials*, **11**, 96 - 97, (2012)

R. B. Wehrspohn, M. Krause und C. Schriever, **Measuring residual stress on the nanometer scale - Novel tools for fundamental and applied research**, *MRS Proceedings*, **1424**, (2012)

C. Schriever, C. Bohley, J. Schilling und R. B. Wehrspohn **Strained silicon photonics**, *Materials*, **5**, 5, 889-908 (2012).

C. Schriever, C. Bohley und J. Schilling, **Numerical investigation of taper parameters for high Q infiltrated nanobeam slot microcavities** *Photonics and Nanostructures - Fundamentals and Applications*, **10**, 3, 312-318 (2012).

Eigene Präsentationen

C. Schriever, C. Bohley, D. Pergande und R. B. Wehrspohn, **Tailoring the second-order nonlinear optical properties of silicon by application of inhomogeneous strain**, *Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft*, 22. - 27. März 2009, Dresden. *(Vortrag)*

C. Schriever, C. Bohley, J. Schilling und R. B. Wehrspohn, **Strain dependence of second harmonic generation in silicon**, *Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft*, 21. - 26. März 2010, Regensburg. *(Vortrag)*

C. Schriever, C. Bohley, J. Schilling und R. B. Wehrspohn, **Strain dependence of second harmonic generation in silicon**, *SPIE Photonics Europe*, 12. - 16. April 2010, Brüssel. *(Vortrag)*

C. Schriever, C. Bohley und J. Schilling, **Field Enhancement in Hybrid Slot Photonic Wire Microcavities**, *Ninth International Conference on Photonic and Electromagnetic Crystal Structures (PECS)*, 26. - 30. September 2010, Granada. *(Vortrag)*

C. Schriever, C. Bohley, J. de Boor, C. Eisenschmidt, J. Lange und J. Schilling, **Second harmonic generation from strained silicon grating structures** ,*Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft*, 25. - 30. März 2012, Berlin. *(Vortrag)*

C. Schriever, C. Bohley, J. de Boor, C. Eisenschmidt, A. Hähnel, J. Lange und J. Schilling, **Structural modification of second harmonic generation in silicon** ,*SPIE Photonics Europe*, 16. - 20. April 2012, Brüssel. *(Vortrag)*

C. Schriever, C. Bohley und J. Schilling, **Taper design for high Q factors in hybrid photonic wire slot microcavities**,*Frühjahrstagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft*, 13. - 18. März 2011, Dresden. *(Poster)*

C. Schriever, C. Bohley und J. Schilling, **Numerical simulations of tapering concepts for infiltrated nanobeam slot microcavities**, *Doctoral Students Conference for the Discussion of Optical Concepts*, 21. - 25. März 2011, Naumburg. *(Poster)*

C. Schriever, C. Bohley, F. Naumann, J. de Boor, J. Lange und J. Schilling, **Modification of Second Harmonic Generation in Silicon by Strain and Structuring**, *8th IEEE International Conference on Group IV Photonics*, 14. - 16. September 2011, London. *(Poster)*

C. Schriever, C. Bohley und J. Schilling, **Slotted silicon hybrid microcavities for nonlinear applications** , *SPIE Photonics Europe*, 12. - 16. April 2010, Brüssel. *(Poster)*

Eidesstattliche Erklärung

Hiermit erkläre ich an Eides statt, dass ich die vorliegende Dissertation eigenständig und ausschließlich unter Zuhilfenahme der angegebenen Quellen und ohne unzulässige Hilfe Dritter angefertigt habe. Den benutzten Werken wörtlich oder inhaltlich entnommene Daten, Fakten und Konzepte sind unter Angabe der entsprechenden Quellen als solche gekennzeichnet. Diese Arbeit wurde bisher weder im In- noch Ausland in gleicher oder ähnlicher Form in einem anderen Prüfungsverfahren vorgelegt. Eine Anmeldung der Promotionsabsicht habe ich an keiner anderen Fakultät einer Universität oder Hochschule beantragt.

Halle (Saale), den 10. November 2013

Clemens Schriever