

## Determinación de perfiles de impurezas cercanos a la superficie

MAGALI ESTRADA DEL CUETO

*Departamento de Ingeniería Eléctrica*

*Sección de Electrónica del Estado Sólido*

*Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN*

*México, D.F., México*

Y

JOSÉ CARLOS LEÓN ORTEGA

*Instituto Central de Investigación Digital (ICID)*

*La Habana, Cuba*

Recibido el 20 de febrero de 1995; aceptado el 8 de noviembre de 1995

RESUMEN. En la determinación de perfiles de concentración de impurezas a partir de las curvas C-V se utilizan modelos físicos diferentes, según el tipo de perfil, el nivel de concentración de impurezas y la región del semiconductor donde se desea determinar el perfil. El control de los parámetros de procesos de introducción de impurezas utilizados en la fabricación de circuitos integrados, muchos de los cuales se caracterizan por producir perfiles de impurezas no abruptos y de concentración baja, así como por estar localizados en una región cercana a la superficie del semiconductor, requiere de métodos que permitan realizar la determinación de dichos perfiles en la región señalada, con la precisión requerida y que de ser posible no sean destructivos. En el presente trabajo se muestran los resultados obtenidos en la determinación de perfiles reales con concentración no homogénea de impurezas, hasta la misma superficie. Para ello se implementó el modelo de Ziegler y Klausmann en un algoritmo de cálculo que permite su aplicación no sólo a perfiles constantes, sino a perfiles cuya concentración varía de forma no abrupta en la región cercana a la superficie. Se hace un análisis de las aproximaciones adicionales al modelo de base, que se introducen al calcular perfiles variables y se estiman los errores que se producen en perfiles con intervalo de variación diferente.

ABSTRACT. The determination of impurity concentration profiles starting from C-V curves, requires different physical models for calculating it, in dependence of the type of the profile, the impurity concentration and the semiconductor region where it is to be determined. The control of the processes usually used for the introduction of impurities during the fabrication of integrated circuits, which in many cases produce shallow, low concentration and not having abrupt changes in the region nearby the surface of the semiconductor profiles, requires methods that permit their characterization in the mentioned region, with the required precision, and if possible in a non-destructive way. In this article we show the results obtained in the determination of real impurity profiles with variable concentration, up to the surface. We implemented the model of Ziegler and Klausmann in an algorithm that permits the determination not only of constant profiles, but of profiles that do not have abrupt variation near the surface. We indicate additional approximations to the base model necessary for considering the variable concentration and estimate the error introduced for different ranges of variation of the impurity concentration.

## 1. INTRODUCCIÓN

La determinación de perfiles de impurezas en estructuras metal-dieléctrico-semiconductor (MDS) está basada en la medición de la capacitancia diferencial de la estructura en función del voltaje aplicado [1]. Esta capacitancia diferencial debe su origen a la variación de carga producida por una variación diferencial de voltaje. Para obtener el perfil de concentración de impurezas, es necesario que el semiconductor se encuentre empobrecido, para que exista una dependencia fuerte entre la concentración de portadores libres que varía con la señal externa aplicada y la concentración de impurezas.

Si se considera que en el semiconductor existe neutralidad eléctrica en ausencia de campo externo, la concentración de portadores en equilibrio será igual a la concentración de impurezas activas.

El modelo más sencillo para describir los fenómenos que ocurren es la aproximación de empobrecimiento (MADE) [2], en el cual se considera que el semiconductor se empobrece totalmente de portadores en la región en la que existe el campo eléctrico.

Las expresiones fundamentales para esta aproximación son

$$N(W) = \pm \frac{2}{q\kappa_s\epsilon_0} \frac{1}{d/d\psi_s(1/C_D)^2} \quad (1)$$

y

$$W = \frac{k_s\epsilon_0}{C_D}, \quad (2)$$

donde  $N(W)$  es la concentración de impurezas,  $q$  la carga del electrón,  $\epsilon_0$  la permitividad del vacío,  $\kappa_s$  la constante dieléctrica del semiconductor,  $\psi_s$  el potencial en la superficie del semiconductor,  $C_D$  la capacitancia por unidad de área del semiconductor y  $W$  el ancho de la zona empobrecida.

Las expresiones (1) y (2) pueden transformarse en [1]

$$N(W) = \pm \frac{2}{q\kappa_s\epsilon_0} \frac{1}{d/dV(1/C)^2} \quad (3)$$

y

$$W = k_s\epsilon_0 \left( \frac{1}{C} - \frac{1}{C_0} \right), \quad (4)$$

donde  $V$  es el potencial aplicado a la estructura,  $C_0$  la capacitancia por unidad de área en acumulación y  $C$  la capacitancia en función del voltaje aplicado.

Como se observa de las expresiones (1) y (3), la concentración de impurezas depende de la pendiente a la curva C-V, por lo tanto, cualquier efecto, como por ejemplo la presencia de trampas en la interfaz de las estructuras MDS capaces de variar su población de portadores con la señal de medición, afectará la determinación del perfil.

Una solución a este problema se puede lograr midiendo la curva C-V a frecuencia alta (igual o mayor de 1 MHz). Si la variación del voltaje de polarización de la estructura

se realiza lentamente, en la expresión (3) se deben diferenciar dos valores de capacitancia, uno medido a frecuencia alta  $C_{HF}$  y otro medido a frecuencia baja  $C_{LF}$  [1]:

$$N(W) = \pm 2 \frac{1 - (C_{LF}/C_i)}{1 - (C_{HF}/C_i)} \left\{ q k_s \epsilon_0 \frac{d}{dV} \left( \frac{1}{C_{HF}} \right)^2 \right\}^{-1} \tag{5}$$

y

$$W = k_s \epsilon_0 \left( \frac{1}{C_{HF}} - \frac{1}{C_i} \right). \tag{6}$$

Por ello, en principio, es necesario realizar dos mediciones de C-V, una para frecuencia alta y otra para baja.

Los métodos de medición de curvas C-V de frecuencia baja [3-6], a excepción del de carga realimentada [6], introducen bastante error en la determinación del perfil, por lo que su uso, lejos de mejorar la precisión, introduce errores mayores que el considerar que el valor de  $C_{LF}$  para un voltaje dado es igual al de  $C_{HF}$ .

Por suerte, las densidades de cargas en la interfaz SiO<sub>2</sub>-Si,  $Q_{fc}$  y  $Q_{ss}$  pueden ser reducidas significativamente mediante tratamientos térmicos, y la deformación de la curva C-V es despreciable incluso cuando ésta se mide a frecuencia baja.

Cuando la concentración de impurezas varía fuertemente en distancias del orden o menores que la longitud de Debye ( $L_D$ ), no es posible considerar que en la región analizada existe neutralidad eléctrica. En este caso es necesario utilizar un modelo propuesto por Kennedy y otros [7,8]. Una comparación entre los resultados que se obtienen con ambos modelos se pueden ver en la Ref. [9].

## 2. CÁLCULO DEL PERFIL DE CONCENTRACIÓN EN LA REGIÓN CERCANA A LA SUPERFICIE

Cuando se requiere calcular el perfil de impurezas hasta la superficie del semiconductor mediante estructuras MOS, o sea, a distancias menores de  $3L_D$  de la superficie, los resultados de la aproximación de empobrecimiento pierden su validez. En la Tabla I se muestran las distancias a partir de la superficie para las cuales el modelo MADE deja de ser aplicable para concentraciones de impurezas diferentes.

Ziegler y Klausmann [10] demostraron que para poder determinar un perfil de impurezas constante en un semiconductor hasta la propia superficie, es necesario tomar en consideración que la región de carga espacial en este caso no está totalmente empobrecida y, por lo tanto, la densidad de carga puede expresarse como

$$\rho_{sc}(x, W) = q[N_B^+(x) - n_n(x, W)]. \tag{7}$$

Para poder seguir obteniendo  $N(W)$  a través de la medición de la capacitancia debida a la zona de carga espacial y a su derivada, es necesario introducir una nueva definición de  $W$ .  $W$  constituye ahora una distancia característica definida por

$$\int_0^W n_n(x, W) dx = \int_W^\infty [N_B(x) - n_n(x, W)] dx, \tag{8}$$

TABLA I. Dependencia de  $L_D$  y  $W_{\max}$  con  $N$ .

$N$ [ $\text{cm}^{-3}$ ]	$L_D$ [ $\mu\text{m}$ ]	$W_{\max}$ [ $\mu\text{m}$ ]	$3L_D$ [ $\mu\text{m}$ ]
$5 \times 10^{14}$	0.185	1.2	0.55
$1 \times 10^{15}$	0.130	0.87	0.39
$5 \times 10^{15}$	0.058	0.41	0.174
$1 \times 10^{16}$	0.041	0.3	0.123
$5 \times 10^{16}$	0.0185	0.14	0.055
$1 \times 10^{17}$	0.130	0.1	0.039
$5 \times 10^{17}$	0.0058	0.046	0.0174

donde  $n_n$  es la concentración de portadores mayoritarios y  $N_B$  la concentración de impurezas ionizadas.

O sea, se llama  $W$  a la distancia a partir de la superficie del semiconductor para la cual se cumple que la carga debida a los portadores mayoritarios en la región es igual a la carga neta en el semiconductor desde  $W$  hasta infinito. En este caso, y tomando en consideración la condición (8),

$$\begin{aligned}
 Q_{\text{sc}} &= \int_0^\infty \rho_{\text{sc}}(x, W) dx = q \int_0^W [N_B(x) - n_n(x, W)] dx + \int_W^\infty [N_B(x) - n_n(x, W)] dx \\
 &= q \int_0^W N(x) dx. \tag{9}
 \end{aligned}$$

En el trabajo de Ziegler [10] se menciona que en principio el modelo podría ser generalizado a perfiles no homogéneos, pero no se profundiza en lo que implica esta nueva aproximación al modelo, ni mucho menos se implementa la nueva forma de cálculo que se requeriría.

En el presente trabajo se hace un estudio de la aplicación de dicho modelo a perfiles no homogéneos, analizando la aproximación que esto implica. Se calcula el error introducido para diferentes rangos y formas de variación de la concentración de impurezas en la región cercana a la superficie.

Esta generalización implica lo siguiente en las expresiones utilizadas en la Ref. [10]:

—Si el semiconductor ha sido implantado y presenta un perfil no homogéneo de impurezas, aun sin aplicar un campo eléctrico externo, existirá un campo interno y las bandas de energía no serán planas.

—Si el perfil varía en menos de dos órdenes en una distancia igual o menor que  $L_D$ , se puede considerar que hay neutralidad eléctrica y, por lo tanto,

$$n_{n0}(x) \sim N_B(x),$$

donde  $n_{n0}(x)$  es la concentración de portadores en equilibrio.

—La concentración de portadores mayoritarios en presencia de campo externo para cada ancho  $W$  de la región de carga espacial puede expresarse como

$$\begin{aligned} n_n(x, W) &= n_{n0} \exp\left(\frac{q}{kT} \Psi(x, W)\right) = n_{n0}(x) \exp\left(\frac{q}{kT} \Psi(x, W)\right) \\ &\approx N_B \exp\left(\frac{q}{kT} \Psi(x, W)\right) \end{aligned} \tag{10}$$

—La medición de la capacitancia diferencial para cada polarización externa permite determinar la concentración de impurezas en  $W$ , diferenciando (8) con respecto a  $W$  mediante

$$\frac{\partial Q_{sc}}{\partial W} = C_{cs} = qN_B(w). \tag{11}$$

La variación de  $N_B(w)$  cercana a la superficie (para  $x < 2L_D[W]$ ) puede aproximarse a la carga contenida en un perfil homogéneo de concentración  $N(W)$  y ancho  $W$ , o sea,

$$Q_{sc}(W) \cong qN(W)W = Q_{sc1}(W), \tag{12}$$

donde  $Q_{sc1}(W)$  es la carga en la zona de empobrecimiento para el caso de un perfil homogéneo.

Para el caso de un perfil homogéneo se puede llegar a una expresión que relaciona al parámetro  $W/L_D$  con el potencial aplicado:

$$\frac{W}{L_D} = \left[ e^{\frac{q}{kT} \Psi_s(W)} - \frac{q}{kT} \Psi_s(W) - 1 \right]^{\frac{1}{2}} = [g - \ln g - 1]^{\frac{1}{2}}. \tag{13}$$

Se define una función de corrección  $g_2$  como

$$g_2\left(\frac{W}{\lambda}\right) = \frac{1}{1 - g\left(\frac{W}{\lambda}\right)} \left\{ 1 - 2\left(\frac{W}{\lambda}\right)^2 \frac{g\left(\frac{W}{\lambda}\right)}{\left[1 - g\left(\frac{W}{\lambda}\right)\right]^2} \right\}, \tag{14}$$

donde  $g(W/\lambda)$  viene definida por la expresión (13).

Finalmente se expresa la concentración de impurezas como

$$N(W) = \pm 2 \frac{1 - (C_{LF}/C_i)}{1 - (C_{HF}/C_i)} \left\{ qk_s \epsilon_0 \frac{d}{dV} \left( \frac{1}{C_{HF}} \right)^2 \right\}^{-2} g_2. \tag{15}$$

Si el perfil es variable, la longitud de Debye será una función de la coordenada y la expresión (13) puede escribirse en la forma

$$\frac{W}{L_D(W)} = \frac{L_D(0)}{L_D(W)} \left[ e^{\frac{q}{kT} \Psi(x, W)} - \frac{q}{kT} \Psi(x, W) - 1 \right]^{\frac{1}{2}}, \tag{16}$$

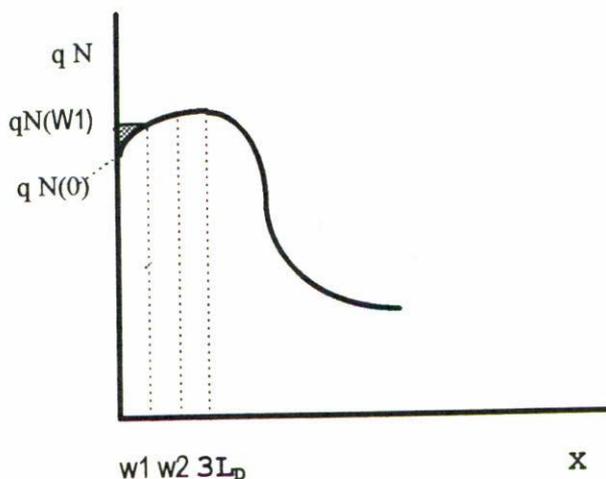


FIGURA 1. El área rayada corresponde a la carga añadida por utilizar la expresión (12) en el cálculo de la carga en una zona de empobrecimiento de ancho  $W$ .

donde

$$L_D(W) = \sqrt{\frac{2kT\epsilon_0 k_s}{q^2 n_{n0}(W)}} \tag{17}$$

Además de la aproximación expresada en (12) se considerará que para cada  $W$  en la región de  $x < 2L_D[W]$ ,  $L_D(0) \cong L_D(W)$ .

Como en realidad  $Q_{sc}(W) = Q_{sc1}(W) \pm \Delta Q$ , en una primera aproximación, para perfiles monótonamente crecientes o decrecientes, la carga que se pierde o que se añade para cada valor de  $W$  (véase la Fig. 1), puede expresarse como

$$\Delta Q_s = \frac{1}{2}([N(W) - N(0)]Wq) \tag{18}$$

En la Tabla II se muestran los errores que se introducen al calcular la densidad de carga y la relación  $W/L_D(W)$ , mediante (12) y (13) respectivamente, para el caso de perfiles monótonamente crecientes o decrecientes. La región en la que se aplica esta corrección, por ejemplo, para substratos con concentración de impurezas  $N_B = 5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ , será menor que  $0.2 \mu\text{m}$  (ver Tabla I). El error en el cálculo de  $N(W)$  puede estimarse conocidos los errores introducidos por el cálculo de  $W$  y de  $Q_{sc1}$ .

En el caso de perfiles con máximos contenidos en la región analizada, el error es incluso algo menor, debido a cierta compensación de áreas que se produce en estos casos.

### 3. RESULTADOS EXPERIMENTALES

El método de determinación del perfil de impurezas hasta la superficie fue implementado en un programa de cálculo a partir de mediciones realizadas en un sistema de mediciones

TABLA II. Error que se introduce por la aproximación en  $Q_{sc}$  y en  $W/L_D$ .

$N(0)/N(W)$	$Q_{sc1}/Q_{sc}$	% error	$[W/L_D(0)]/[W/L_D(W)]$	% error
0.5	1.33	33	1.25	25
0.7	1.2	20	1.07	7
1.1	0.95	5	1.004	0.4
1.3	0.87	13	1.03	3
1.5	0.8	20	1.08	8

automáticas descrito en la Ref. [12]. Algunas de las características del algoritmo utilizado [11] se describen a continuación.

En el error de la determinación del perfil influyen tanto la precisión del modelo ya analizado, como la técnica de medición y la implementación del algoritmo de cálculo.

A diferencia del trabajo referido en la Ref. [10] que calculaba  $N(W)$  según la Ec. (15) a partir de gráficos para las funciones de corrección  $g_2$  y  $W/L_D$ , en el presente trabajo dichos parámetros se calcularon numéricamente, mediante ecuaciones paramétrico-trascendentes relacionadas con los datos experimentales. Como se observa en la Ec. (15), el perfil a calcular se relaciona además con la curva C-V mediante la derivada  $dC/dV$ , la cual tendría que calcularse para cada uno de los puntos seleccionados de la curva experimental. Con vista a disminuir los errores provenientes del tratamiento de la curva experimental, se usa una expresión polinomial para construir una función analítica  $C = C(V)$  que se ajusta a los puntos experimentales. La aproximación utilizada se describe a través de

$$C(V) = \sum_{n=0}^M b_n P_n(V), \quad (19)$$

donde  $b_n$  son los coeficientes del desarrollo,  $P_n(V)$  los polinomios ortogonales de Gram y  $M$  el grado del polinomio.

La función de aproximación obtenida por el método de los mínimos cuadrados puede ser algebraicamente tratada y por lo tanto puede ser derivada para obtener  $dC/dV$  en los puntos requeridos.

El estudio de la precisión con que el método de aproximación funcional permite la descripción de la curva C-V, en función del número de puntos procesados y de la región de la curva que se analiza, dio como resultado que es necesario procesar curvas que no contengan puntos de inflexión o que, en caso de contener alguno, éste se encuentre cerca de alguno de los extremos de la región de la curva que se analiza. Por este motivo, el algoritmo utilizado determina la condición de  $W = 0$  en dos oportunidades. La primera de forma aproximada, para tomar este punto como referencia a partir del cual y hacia la región de inversión, se toman los puntos de medición, que serán procesados para obtener la curva teórica. Para perfiles homogéneos, la condición de  $W = 0$  está cercana al punto de inflexión de la curva C-V y puede demostrarse que en ese caso la curva teórica se logra hacer coincidir con muy buena aproximación con la curva experimental [9, 13].

En el caso de perfiles variables, la condición de  $W = 0$  puede estar más lejos del punto de inflexión y la curva C-V que queda luego de cortarse a partir del valor de voltaje

TABLA III. Perfiles correspondientes a los dispositivos  $C_1$  y  $C_2$ .

$C_1$			$C_2$		
$W$ [ $\mu\text{m}$ ]	$N(W)$ [ $10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ]	% error	$W$ [ $\mu\text{m}$ ]	$N(W)$ [ $10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ]	% error
0	1.95	2.56	0	1.95	2.56
0.0086	2.14	2.5	0.028	2.14	2.5
0.23	1.61	2.0	0.15	1.61	2.0
0.29	1.52	1.0	0.24	1.52	1.0
0.34	1.67	2.5	0.30	1.67	2.5
0.5	2.44	5.0	0.49	2.44	5.0
			0.69	3.84	17.0

correspondiente a dicha condición, puede contener un punto de inflexión más hacia el interior de la región analizada. En estos casos pueden obtenerse mediciones para las cuales no se encuentra una buena aproximación entre la curva teórica y la experimental y resulta necesario disminuir el intervalo de medición. El programa detecta estos casos y recomienda disminuir el intervalo de medición.

Una vez procesada la curva teórica y calculadas las derivadas en cada punto, se calcula la concentración de impurezas correspondiente. Finalmente, el programa en una segunda iteración precisa la condición de  $W = 0$  y calcula para su nuevo valor, el valor de  $N(0)$ .

La precisión en el método utilizado para implementar el algoritmo de cálculo, fue verificado para el caso de un perfil teórico homogéneo y de uno gaussiano, comparando los resultados obtenidos contra datos de entrada provenientes de una curva teórica [11], observándose un error inferior a 1%.

Desde el punto de vista experimental se determinó que es necesario que la precisión de la medición permita determinar la tercera cifra después del punto decimal en el valor de la capacidad relativa  $C/C_0$ . También influye el intervalo de voltaje a que se realizan las mediciones, pudiendo determinarse que el intervalo de  $\Delta = 0.05 \text{ V}$  resulta adecuado para la mayoría de las aplicaciones.

Con vistas a verificar la repetibilidad de las mediciones, un mismo dispositivo fue medido 10 veces, en diferentes días, comparándose los resultados obtenidos. En la Tabla III se muestran las concentraciones promedio obtenidas y su error de medición relativo, para diferentes coordenadas en el sustrato a partir de la superficie. Se midieron estructuras implantadas y no implantadas.

En las Figs. 2 y 3 se muestra el perfil de concentración de impurezas obtenido de las curvas C-V de frecuencia alta obtenidas al medir dos dispositivos MOS. El primero de ellos, el  $C_1$ , muestra el empobrecimiento de boro producto de la redistribución y segregación de la impureza en la frontera óxido de silicio-silicio que tiene lugar al oxidar a  $1100^\circ\text{C}$  en oxígeno seco durante 45 minutos, una oblea de silicio tipo P, con concentración inicial homogénea del orden de  $10^{15} \text{ cm}^{-3}$ , obtenida por medición de resistividad por cuatro puntas. Este comportamiento del perfil esperado según la teoría es difícil de observar en la práctica, debido a los errores de los métodos de determinación de los perfiles especialmente en la región cercana a la superficie.

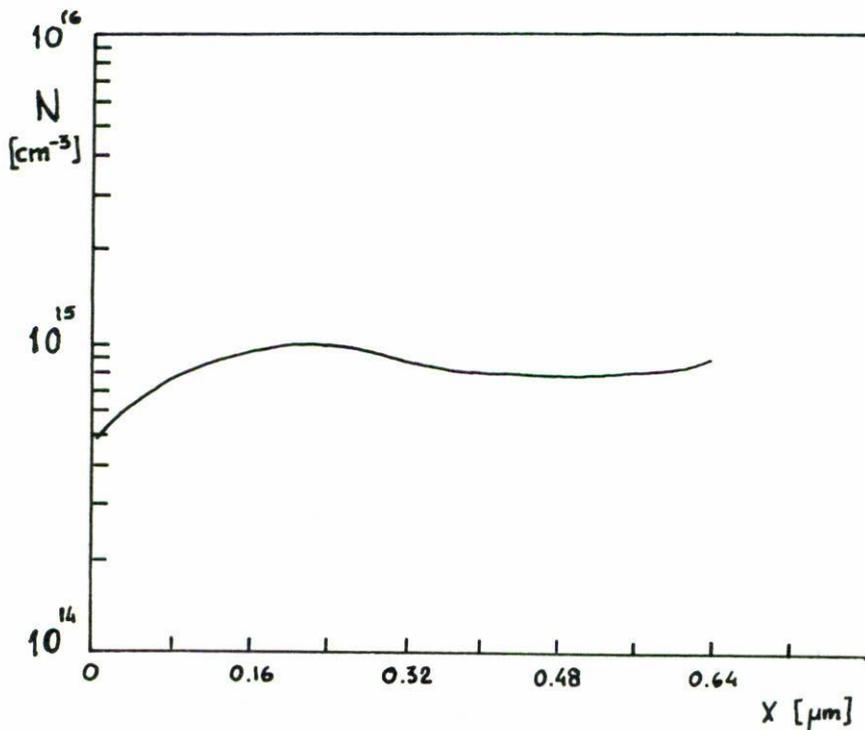


FIGURA 2. Perfil de impurezas correspondiente a un sustrato de silicio tipo P, de concentración inicial homogénea de  $10^{15} \text{ cm}^{-3}$ , después de redistribución producida por una oxidación a  $1100^\circ\text{C}$  en oxígeno seco durante 45 min.

El perfil de la Fig. 3 se obtuvo de la curva C-V obtenida al crecer un óxido de 98 nm en oxígeno seco a  $1100^\circ\text{C}$ , sobre un sustrato de partida de tipo P con concentración de  $3 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ , e implantar con boro, a través del óxido, con una energía y dosis de las que típicamente se utilizan para realizar el ajuste del voltaje umbral  $V_T$  de los transistores de un circuito integrado MOS, en este caso 40 keV y  $0.04 \mu\text{C}/\text{cm}^2$ . En este gráfico se puede observar la posibilidad que brinda el método presentado, de poder determinar los perfiles de concentración variable, precisamente en la región del dispositivo que es necesario analizar para determinar los valores de voltaje umbral de los dispositivos.

#### 4. CONCLUSIONES

En el trabajo se analiza y demuestra la posibilidad de aplicación del modelo de Ziegler y Klausmann para la determinación de perfiles variables hasta la superficie del semiconductor y se indican los errores en que se incurre por las aproximaciones realizadas, para diferentes rangos de variación de la concentración, dentro de una longitud de  $2L_D$  a partir de la superficie.

Se presentan resultados experimentales obtenidos al realizar las mediciones de curvas C-V en un sistema de mediciones automático desarrollado al efecto siguiendo las recomen-

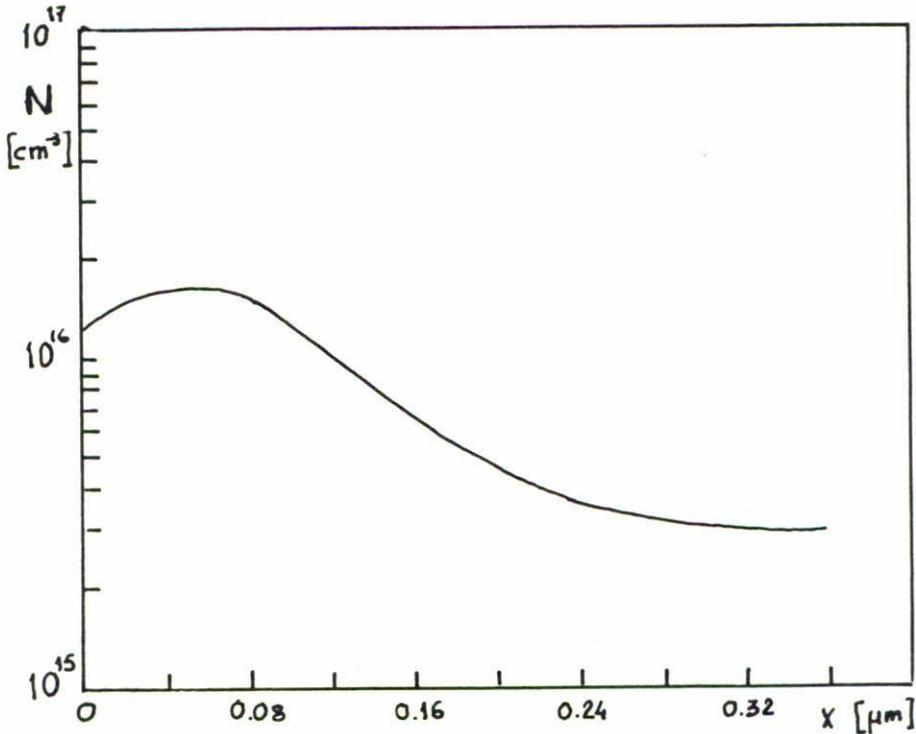


FIGURA 3. Perfil de impurezas correspondiente a un sustrato tipo P de silicio con concentración homogénea de  $3 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ , luego de implantar una dosis de  $0.04 \mu\text{C}/\text{cm}^2$  de boro a una energía de 40 keV.

daciones indicadas, y al procesar los datos obtenidos mediante un algoritmo de cálculo desarrollado, que demuestran la posibilidades del método.

El programa desarrollado puede capturarse por ftp solicitándolo a los autores.

#### REFERENCIAS

1. E.H. Nicollian y J.R. Brews, *MOS Physics and Technology*, Wiley-Interscience, New York (1982).
2. A.F. Grove, *Physics and Technology of Semiconductor Devices*, Wiley, New York (1967).
3. M. Kuhn, *Solid State Electronics* **13** (1970) 873.
4. K. Ziegler y E. Klausmann, *Appl. Phys. Lett.* **28** (1976) 679.
5. D.M. Bocilin, J.R. Brews y Nicollian E.H., *Solid State Electronics* **27** (1984) 977.
6. T.J. Mego, *Rev. Scient. Instruments.* **57** (1986) 2798.
7. P.P. Kennedy y R.R. O'Brien, *IBM Journal Res. Dev.* **13** (1969) 212.
8. P.P. Kennedy y D.P. Murley, *IBM Journal Res. Dev.* **12** (1968) 399.
9. J.C. León y M. Estrada, *Ing. Elec. Autom. y Com.* **7** (1986) 340.
10. K. Ziegler, E. Klausmann y S. Kar, *Solid State Electronics* **18** (1975) 189.
11. J.C. León y M. Estrada, *Rev. Cub. de Física* **7** (1987) 23.
12. M. Estrada y otros, *Ing. Elec. Autom. y Com.* **9** (1988) 325.
13. M. Estrada y J.C. León, *Ing. Elec. Autom. y Com.* **10** (1989) 57.