

Simulación de curvas C-V y C-t para la caracterización eléctrica de dispositivos MIS

G. Francisco Pérez-Sánchez, Jesús Carrillo-López, Adán Luna-Flores
*Centro de Investigaciones en Dispositivos Semiconductores, ICUAP,
 Apdo. Postal 165; Puebla, Pue., 7200 México.*

Arturo Morales-Acevedo
*Centro de Investigación y Estudios Avanzados del IPN
 Departamento de Ingeniería Eléctrica
 Avenida IPN No. 2508, 07300 México. D. F.*

En este trabajo se presenta el desarrollo de programas en MathCad para determinar parámetros en estructuras metal-aislante-semiconductor (MIS), como son: la concentración de impurezas en el semiconductor, la constante dieléctrica del aislante, la carga en el aislante, la densidad de estados superficiales en la interfaz aislante-semiconductor y la velocidad de generación superficial. Para la simulación de las curvas C-V se emplearon las ecuaciones convencionales para la capacitancia en alta frecuencia. Para la determinación experimental del tiempo de generación y la velocidad de generación superficial, el dispositivo se cambia súbitamente de la condición de acumulación a la de agotamiento profundo, por medio de un pulso de voltaje, obteniendo así una respuesta transitoria C-t. Usando la teoría convencional de capacitores MIS fuera de equilibrio se obtiene un conjunto de ecuaciones analíticas, con las cuales se pueden ajustar los datos experimentales por medio de un programa en Mathcad.

In this work we present the development of programs in Mathcad to determine electrical parameters in metal-insulator-semiconductor (MIS) structures, such as: the impurity concentration in the substrate, the insulator dielectric constant, charges in the oxide, trap density at the insulator-semiconductor interface and the surface generation velocity. For the simulation of the C-V curves, the conventional high frequency capacitance equations were employed. For determining the surface generation time and velocity, the device is changed abruptly from accumulation to deep depletion through a voltage pulse, causing a transient C-t response. Using the conventional theory of MIS capacitors out of equilibrium we obtain a set of analytic equations that can be fitted to the experimental data through a Mathcad program.

Keywords: Método de Therman; Caracterización eléctrica de estructuras MIS; Carga en dieléctricos.

1. Introducción

La caracterización eléctrica de aislantes mediante dispositivos MIS es de suma importancia, sobre todo cuando se estudian nuevos materiales dieléctricos. Con esta información también se puede hacer una evaluación rápida de los dispositivos con la finalidad de brindar posibles aplicaciones, o bien, para mejorar los procesos tecnológicos que permitan obtener las características deseadas en el material investigado. Los equipos modernos de caracterización cuentan con programas para extraer estos parámetros, pero con frecuencia los algoritmos no son satisfactorios cuando se trata de hacer el análisis de aislantes diferentes al dióxido de silicio, y en consecuencia no se puede hacer una interpretación adecuada de la fenomenología en el dispositivo. En el presente trabajo, se realizaron programas en Mathcad con el propósito de tener una mayor flexibilidad, en este sentido. Los resultados obtenidos se compararon con los valores que son proporcionados por equipos comerciales, observando buena concordancia para el caso del dióxido de silicio. Sin embargo, se encontraron diferencias notables cuando se analizaron otro tipo de aislantes en la estructura MIS. En nuestro caso, los programas se aplicaron a dispositivos que emplean oxinitruros de silicio depositados por LPCVD.

2. Teoría

A partir de una curva C-V, medida a alta frecuencia, se puede obtener la concentración de impurezas uniforme en el substrato resolviendo la siguiente relación^[1]:

$$Na = \frac{4kT (\epsilon_0 \epsilon_{oxi})^2}{q^2 \epsilon_s t_{ox}^2} \left(\frac{C_{ox}}{C_{inv}} - 1 \right)^{-2} \times \left(\ln \left(\frac{Na}{ni} \right) + \frac{1}{2} \ln \left(2 \ln \frac{Na}{ni} \right) - 1 \right) \quad (1)$$

en donde la constante dieléctrica del aislante está dada por:

$$\epsilon_{oxi} = \frac{C_{ox} t_{ox}}{\epsilon_0 A} \quad (2)$$

ϵ_{oxi} es la constante dieléctrica y t_{ox} el espesor del dieléctrico, respectivamente; A es el área del dispositivo; C_{ox} y C_{inv} son las capacitancias en las condiciones de acumulación e inversión respectivamente; k es la constante de Boltzman, T la temperatura absoluta, ϵ_s la constante dieléctrica del semiconductor, ϵ_0 la permitividad del vacío, q la carga del electrón y n_i es la concentración intrínseca de portadores en el semiconductor a temperatura ambiente.

Asumiendo que los portadores minoritarios responden a la frecuencia de prueba (caso cuasi-estático), la solución para la capacitancia a baja frecuencia del semiconductor esta dado por^[2]:

$$C_{s,lf} = \bar{U}_s \frac{K_s e_o}{2L_{Di}} \left[\frac{e^{U_F} (1 - e^{-U_s}) + e^{-U_F} (e^{U_s} - 1)}{F(U_s, U_F)} \right] \quad (3)$$

en donde U_s y U_f son los potenciales normalizados, tanto en la superficie como en el volumen del semiconductor (potencial de Fermi), dados como: $U_s = q\psi_s/kT$ y $U_f = \ln(N_a/ni)$ respectivamente; ψ_s es el potencial superficial en el semiconductor y el símbolo \bar{U}_s es la función signo para el potencial superficial y esta dado por:

$$\bar{U} = \frac{|U_s|}{U_s} \quad (4)$$

$F(U_s, U_F)$ es el campo eléctrico adimensional en la superficie del semiconductor, el cual está definido como:

$$F(U_s, U_F) = \sqrt{e^{U_F} (e^{-U_s} + U_s - 1) + e^{-U_F} (e^{U_s} - U_s - 1)} \quad (5)$$

La longitud intrínseca de Debye, L_{Di} , esta dada con

$$L_{Di} = \sqrt{\frac{K_s e_o kT}{2 q^2 ni}} \quad (6)$$

Las curvas teóricas que definen C-V a alta frecuencia se calculan tomando en cuenta que hay una redistribución de carga en la región de carga espacial, dando origen a cuasi niveles de Fermi tanto para electrones como para huecos. También se considera que hay una razón de atrapamiento mínima en la condición de inversión. Entonces, la capacitancia esta dada por la relación siguiente^[3]

$$C_{s,lf} = \bar{U}_s \frac{K_s e_o}{2L_{Di}} \left[\frac{e^{U_F} (1 - e^{-U_s}) + e^{-U_F} (e^{U_s} - 1)/(1+d)}{F(U_s, U_F)} \right] \quad (7)$$

en donde \ddot{a} es:

$$d = \frac{(e^{U_s} - U_s - 1) / F(U_s, U_F)}{\int_0^{U_s} \frac{e^{U_F} (1 - e^{-U}) (e^U - U - 1)}{2[F(U, U_F)]^3} dU} \quad (8)$$

La capacitancia total del dispositivo se puede escribir como:

$$C = \frac{C_{ox} C_s}{C_{ox} + C_s} \quad (9)$$

Por otro lado, la expresión que relaciona al voltaje de compuerta V_g con el potencial superficial ψ_s , el potencial en el aislante V_{ox} y el voltaje de banda plana V_{fb} esta dada por la siguiente relación:

$$V_g = V_{fb} + \psi_s + V_{ox}$$

$$V_g = V_{fb} + \psi_s + \bar{U}_s \frac{kTK_s t_{ox} F(U_s, U_F)}{qK_{ox} L_{Di}} \quad (10)$$

El corrimiento obtenido en el eje del voltaje, en los casos reales, es debido principalmente a la diferencia de función de trabajo entre el metal y el semiconductor (f_{ms}), así como a las cargas diversas en el aislante:

$$V_{fb} = f_{ms} - \frac{Q_f}{C_{ox}} - g \left(\frac{Q_m}{C_{ox}} + \frac{Q_{ot}}{C_{ox}} \right) - \frac{Q_{it}(\psi_s)}{C_{ox}} \quad (11)$$

La densidad de carga total en el aislante se calcula por la siguiente relación:

$$DQ = \frac{C_{ox}}{q} (f_{ms} - V_{fb}) \quad (12)$$

en donde DQ esta dada por:

$$DQ = Q_f - gQ_m - gQ_{ot} - Q_{it}(\psi_s) \quad (13)$$

Q_f es la carga fija en el aislante, Q_m es la carga móvil debida a iones, Q_{ot} es la carga atrapada en el volumen del aislante; y $Q_{it}(\psi_s)$ es la carga en la interfaz aislante-semiconductor, siendo esta dependiente del potencial superficial del semiconductor. En la última ecuación introducimos un factor γ para calcular la distribución a través del óxido, la cual esta definida como:

$$g = \frac{\int_0^{t_{ox}} (x / t_{ox}) \mathbf{r}(x) dx}{\int_0^{t_{ox}} \mathbf{r}(x) dx} \quad (14)$$

x es la distancia, medida desde la interfaz metal-aislante, y $\rho(x)$ es la función de distribución de la densidad de cargas a lo largo del espesor del aislante.

En base al conjunto de ecuaciones antes mostrado, para calcular la densidad de estados superficiales se emplea el método de Therman, el cual consiste en hacer la comparación de la curva experimental C-V a alta frecuencia con la curva teórica ideal, en donde idealmente se considera

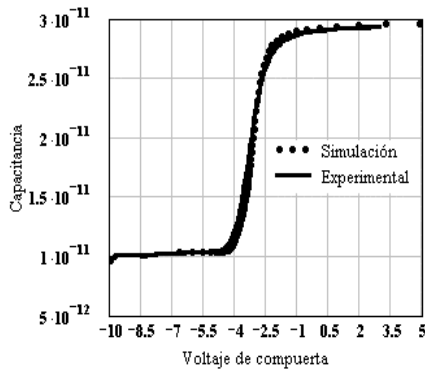


Figura 1. Comparación entre la curva C-V experimental y la curva teórica de un capacitor MIS típico.

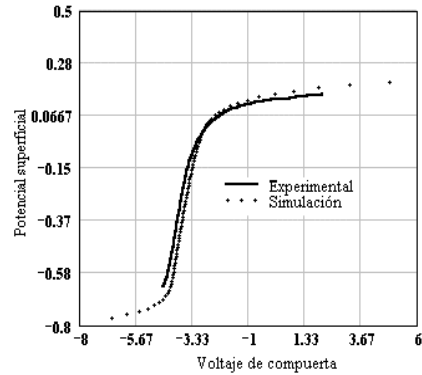


Figura 2. Comparación entre la curva experimental y la curva teórica (simulada) del potencial superficial y el voltaje de compuerta aplicado.

que la densidad de trampas es igual a cero. Así, para un mismo valor de la capacitancia, en las dos curvas, se puede relacionar el potencial superficial con el voltaje de polarización aplicado al dispositivo, permitiendo construir una gráfica que contiene toda la información acerca de la densidad de trampas en la banda prohibida del semiconductor. Por lo tanto, esta curva diferencial contiene la información de la distribución de densidad de estados interfaciales en la banda prohibida del semiconductor, la cual puede calcularse mediante la ecuación siguiente^[4]

$$C_{it} = \frac{C_{ox}}{q} \left(\frac{dV_g}{dy_s} - 1 \right) - \frac{C_s(y_s)}{q} \quad (15)$$

en donde C_s es la capacitancia del semiconductor en función del potencial superficial calculada con la ecuación (7).

Finalmente, cuando al capacitor MIS se le aplica un pulso de voltaje se obtiene una respuesta transitoria, que puede describirse con una ecuación analítica, en donde se considera solamente a las componentes de generación térmica como las más importantes a temperatura ambiente, la solución esta dada por^[5]

$$(1-Z) \ln \left(\frac{C_f/C_i - 1 + Z}{C_f/C - 1 + Z} \right) + \frac{C_f}{C_i} - \frac{C_f}{C} = \frac{C_f}{C_{ox}} \frac{ni}{N_a} \frac{t}{\tau_g} \quad (16)$$

en donde

$$Z = \frac{C_f S' \tau_g}{K_s \epsilon_0} \quad (17)$$

τ_g' contiene todas las componentes de la velocidad de generación en la región de la carga espacial, mientras que S' incorpora tanto la componente de la velocidad de generación en la región de carga espacial, como la componente de generación total en la región cuasi-neutra del semiconductor^[5]. C_i es la capacitancia inicial en $t=0^+$ y

C_f es la capacitancia de equilibrio. Si $C \ll C_f$, entonces $t \ll \tau_g'$ y de la ecuación anterior se ve que:

$$t_f = \frac{N_a C_{ox}}{ni C_f} \tau_g' \left\{ (1-Z) \ln \left[1 + \frac{1}{Z} \left(\frac{C_f}{C_i} - 1 \right) \right] + \frac{C_f}{C_i} \right\} \quad (18)$$

Algoritmo para el programa en Mathcad

Los únicos datos de entrada para el programa son: el espesor del aislante y el área del dispositivo, así como una tabla con los datos de C-V medidos a alta frecuencia. A partir de esta se definen los vectores para el voltaje y la capacitancia. Posteriormente, se efectúa una interpolación mediante polinomios de tercer orden (spline) de los puntos experimentales, permitiendo construir un polinomio para cada terna de datos.

Posteriormente, de los datos experimentales para la capacitancia se extraen los valores de la capacitancia mínima y la capacitancia del óxido, el cual es medido en condiciones de acumulación fuerte; esto permite calcular la constante dieléctrica del material dada por la ecuación (2), y con este valor se resuelve la ecuación (1) para la concentración en el sustrato. Luego, esta cantidad se usa para calcular la capacitancia de banda plana del semiconductor mediante la relación (7), así como la capacitancia total del dispositivo que, al mismo tiempo, corresponde al voltaje de banda plana. Una vez que se ha determinado el voltaje de banda plana se procede a determinar la densidad de carga en el aislante mediante la relación (12). Finalmente, con estos datos, es posible simular la curva teórica para la capacitancia a alta frecuencia dada por las ecuaciones (7) y (8).

Para el cálculo de la densidad de estados, se emplea el método de Therman [2, 4]. Para obtener esta gráfica se igualan los valores de las capacitancias en la curva simulada con la curva experimental ajustada mediante polinomios de tercer orden (spline), y luego se resuelve cada par de ecuaciones resultante para todo el rango de voltaje aplicado, obteniendo así los valores para el potencial

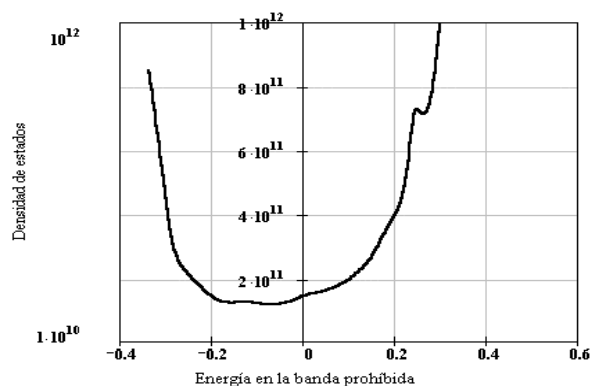


Figura 3. Densidad de estados obtenido por el método de Therman.

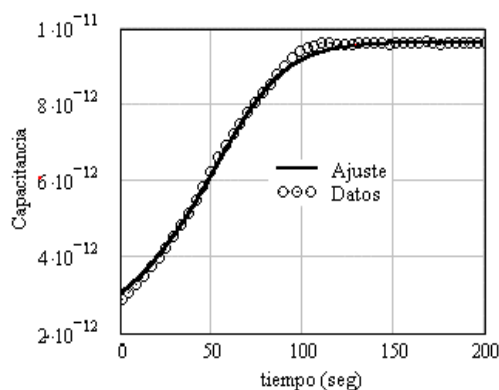


Figura 4. Gráfica de los datos experimentales y el ajuste que se obtiene al sustituir los valores de S y τ_g en la ecuación (15).

superficial correspondiente. Finalmente, empleamos la ecuación (15) para determinar la capacitancia adicional con la cual contribuyen los estados de superficie. Para obtener la densidad de estados, a esta última relación se le divide por la unidad de carga fundamental q .

Para determinar la velocidad de generación de portadores, nuevamente se crean dos vectores de entrada que corresponde a la capacitancia y el tiempo. Los datos medidos se ajustan a la ecuación (16), expresada en términos del tiempo de generación (t_g) y la velocidad de recombinación superficial (S), por el método de mínimos cuadrados.

3. Resultados

Para probar los modelos propuestos se simularon las curvas C-V a alta frecuencia con el fin de poder comparar con datos experimentales. En la figura 1 se muestra la simulación para una curva típica C-V de un capacitor MIS con un área 10^{-3} cm^2 , sobre un substrato tipo n con una concentración de donadores de $2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, y un espesor de 1037 \AA para el aislante (SiO_2) crecido térmicamente en O_2 a 1000° C . En esta figura se aprecia sólo una pequeña diferencia entre las dos curvas. En cambio, cuando comparamos la gráfica del potencial superficial, con y sin

trampas, en contra del voltaje, la diferencia es más notable, haciendo evidente la existencia de una distribución de trampas en la banda prohibida del semiconductor, como se muestra en la figura 2.

En la figura 3 se muestra la densidad de estados interfaciales para un rango considerable en la banda prohibida del semiconductor. El cero corresponde a la mitad de la banda prohibida y valores positivos están mas cerca de la banda de conducción. La densidad de trampas promedio a la mitad de la banda prohibida, en el rango de -0.2 a 0.2 eV , fue de $1.8 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$.

De la misma manera, en la figura 4 se presenta el resultado de la simulación de una curva típica C-t del mismo dispositivo MIS comparado con los datos experimentales. Podemos apreciar el excelente ajuste obtenido por mínimos cuadrados.

A partir del ajuste, los valores obtenidos para la velocidad de recombinación superficial (S) y para el tiempo de generación (τ_g) fueron de $2.376 \times 10^{-2} \text{ cm/s}$ y de 49.2 \mu s , respectivamente, con un factor de correlación de 0.99985.

Algunas mediciones adicionales para la caracterización de dispositivos fabricados a partir de diversos oxinitruros de silicio (con diferentes contenidos de N_2), crecidos por LPCVD, se muestran en la tabla 1. Esta información ha sido muy útil para caracterizar las capas de

Tabla 1. Parámetros eléctricos obtenidos como resultado del análisis de datos usando los programas desarrollados en Mathcad para dispositivos fabricados a base de oxinitruros de silicio.

	Capacitor 1	Capacitor 2	Capacitor 3
Espesor (nm)	103.7	68	69
N_d (cm^{-3})	2×10^{15}	1.3×10^{15}	1×10^{15}
ϵ_{ox}	5.5	4.6	3.6
V_{fb} (V)	-4.8	-3.3	-1.8
DQ (C/cm^2)	1.6×10^{12}	1.1×10^{12}	4.3×10^{11}
Dit ($\text{cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$)	1.8×10^{11}	2×10^{11}	1×10^{11}
S (cm/s)	0.023	0.1	0.2

dicho material, lo cual es objeto de otro trabajo [7].

4. Conclusiones

Se han establecido las ecuaciones y se han desarrollado programas en MathCad para obtener, de manera rápida, los parámetros eléctricos de materiales aislantes en dispositivos MIS, los cuales han dado buenos resultados al compararlos con programas comerciales. Una ventaja importante es que nuestros programas pueden ser modificados fácilmente y extendidos para incluir otros métodos de caracterización, por ejemplo el método cuasi-estático, que es uno de los más usados y confiables para determinar densidad de estados interfaciales. Aunque el método de Terman, usado aquí, tiene limitaciones en relación con su sensibilidad para determinar la densidad de trampas, hemos notado que para densidades por arriba de $10^{10} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ el método funciona bien. Para densidades de estados por abajo de $10^9 \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ se requiere medir la curva C-V a alta frecuencia con precisión mayor a 0.0001 pF [6].

Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado parcialmente por CONACyT mediante el proyecto G32044-A. Agradecemos a Mauro Landa y Pablo Alarcón por su apoyo en la realización de los experimentos realizados en instalaciones del INAOE.

Referencias

- [1] Dieter K. Schroder, Semiconductor Material and Device Characterization, Second Edition, (John Wiley & Sons, New York, 1998).
- [2] E.H. Nicollian, J.R. Brews, Metal Oxide Semiconductor Physics and Technology, (John Wiley & Sons, New York, 1982).
- [3] J. R. Brews, J. Appl. Phys. **45**, 1276(1974).
- [4] L. M. Terman, Solid-State Electron. **5**, 285(1962).
- [5] J. S. Kang and D. K. Schroder, Phys. Stat. Sol. (a) **89**, 13 (1985).
- [6] C. T. Sah, A. B. Tole, and R. F. Pierret, Solid State Electron. **12**, 689(1969).
- [7] G. F. Pérez-Sánchez, J. Carrillo-López y A. Morales-Acevedo, Superficies y Vacío **15**, 55(2002).