

## Estudio y modelado de la interfase Si-SiO<sub>2</sub>, usando estructuras MOS

M. Pacio, H. Juárez\*, T. Díaz, G. Garcia, E. Rosendo, F. Mora, G. Escalante y M. Rodriguez  
 Centro de Investigaciones en Dispositivos Semiconductores, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla  
 14 Sur y San Claudio, Ciudad Universitaria, C.P. 72570, Cd. Puebla, México.  
 (Recibido: 21 de julio de 2009; Aceptado: 23 de octubre de 2009)

A partir de la teoría de los procesos de generación y recombinación de Shockley-Read-Hall se presenta un modelo de la generación de portadores minoritarios en la interfase silicio-dióxido de silicio (Si-SiO<sub>2</sub>) de estructuras metal-óxido-semiconductor (MOS). Se obtuvieron las curvas experimentales de generación de las estructuras MOS con óxidos depositados por el método de depósito químico en fase de vapor a presión atmosférica (APCVD). Se muestra que estas curvas pueden presentar un incremento no lineal en la razón de generación, donde este incremento depende de las condiciones iniciales de polarización y cuya naturaleza se debe a la componente de generación superficial. Partiendo del modelo propuesto y de las curvas experimentales de generación, se calcularon los parámetros que caracterizan las trampas en la interfase, como lo son, la densidad de trampas, el coeficiente de emisión y la energía de activación

*Palabras clave:* Interfase Si-SiO<sub>2</sub>; Estructura MOS; Sistema APCVD; Shockley-Read-Hall; Curvas Zerst

**Abstract.** Starting from the theory of generation-recombination of Shockley-Read-Hall process, a minority carrier generation model at interface Si-SiO<sub>2</sub> from metal-oxide-semiconductor (MOS) structure is developed. Experimental generation curves of the MOS structures, made with silicon oxides deposited by atmospheric pressure chemical vapor deposition (APCVD) technique were obtained. It is shown that generation curves can exhibit a no-linear increase in the generation rate and it depended on the initial conditions of polarization. This effect was attributed to the contribution of the surface generation in the generation process. From the proposed model and experimental generation curves, the interface trap density, emission coefficient and the activation energy, that characterize the traps at interface, are calculated.

*Keywords:* Si-SiO<sub>2</sub> interface; MOS structure, APCVD system; Shockley-Read-Hall generation; Zerst curves

### 1. Introducción

La estructura de Silicio-Oxido de Silicio (Si-SiO<sub>2</sub>) es la base del 80% de los dispositivos semiconductores que se producen en el mundo, por esta razón este sistema ha sido objeto de estudios por años, continuando actualmente las investigaciones en este campo. Con el decremento en las dimensiones de los dispositivos semiconductores, el aumento en la densidad de escala de integración y la disminución de la temperatura de depósito de los óxidos [1], los parámetros como la densidad de estados en la interfase, defectos extendidos, impurezas extrínsecas o intrínsecas, entre otros, pueden modificar las características eléctricas y ópticas de los dispositivos con base en la estructura Si-SiO<sub>2</sub>. Algunos de estos pueden tener propiedades, las cuales pueden ser aplicadas en nuevos dispositivos con nuevas funciones (centros de atrapamiento de impurezas metálicas, dispositivos fotoluminiscentes, sensores de luz o gas, etc.).

El uso de estructuras MOS para estudiar las propiedades superficiales de películas aislantes sobre germanio fue introducida por Rupprecht [2]. Esta idea fue posteriormente extendida para investigar las trampas en el volumen del semiconductor [3], observando el cambio en la conductancia superficial de una estructura de efecto de campo, ante un pulso de voltaje aplicado. El método de pulso de voltaje [4] y el método de barrido senoidal [5, 6]

están siendo usados para medir y analizar la distribución de trampas en la interfase usando estructuras MOS.

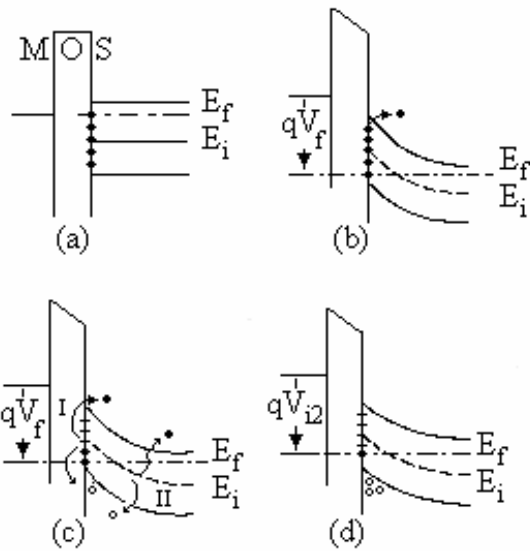
En el presente trabajo se presenta un modelo de la generación superficial debido a la existencia de trampas en la interfase Si-SiO<sub>2</sub>, así como también la obtención de los parámetros característicos de las trampas a partir de las curvas de generación experimentales y del modelo propuesto.

### 2. Preparación de las muestras

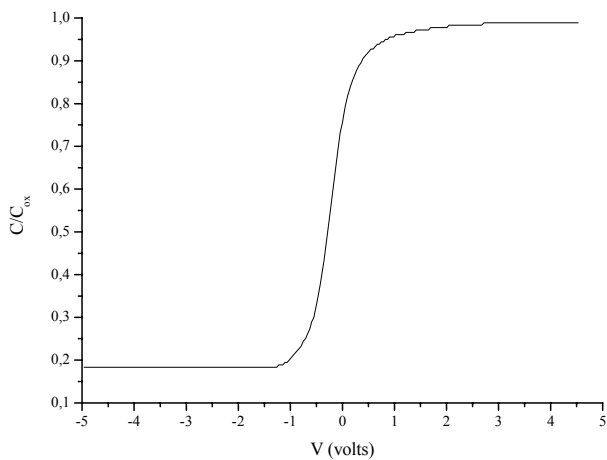
Se usaron sustratos de silicio tipo n, orientación (100) y resistividad 2.5-5 ohms-cm. Para eliminar las impurezas orgánicas e inorgánicas se usó el proceso de limpieza estándar RCA.

Se depositó una película de SiO<sub>2</sub> sobre un sustrato de Si por APCVD [1]. La temperatura de depósito de la película fue de 200 °C para obtener un espesor aproximado de 80 nm, las mediciones del índice de refracción y espesores de las películas obtenidas por APCVD fueron realizadas por elipsometría mediante un elipsómetro Rudolph 439L633P

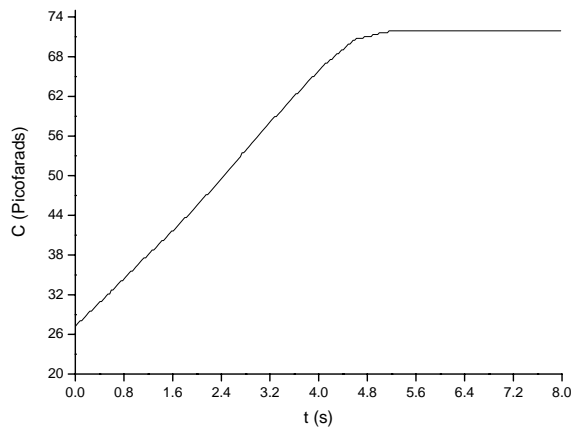
Para formar las estructuras MOS, se evaporaron contactos circulares de aluminio sobre el óxido. La caracterización eléctrica se realizó en un sistema C-V MDC automatizado. En este sistema se obtuvieron las curvas capacitancia vs voltaje (C-V), capacitancia vs tiempo (C-t), y a partir de ellas las curvas de generación o Zerst.



**Figura 1.** Procesos de emisión, generación y recombinación de las trampas en la interfase para (a) trampas llenas, (b) emisión a través de las trampas, (c) generación superficial y en volumen, (d) emisión y generación suprimida.



**Figura 2.** Curva C-V experimental de alta frecuencia de la estructura MOS con óxido obtenido por APCVD.



**Figura 3.** Curva C-t experimental correspondiente a voltaje inicial de polarización  $V_G(t=0)=0$ .

### 3. Teoría

Al aplicar un pulso de voltaje entre compuerta y sustrato ( $V_G$ ) de un MOS, el dispositivo entra al modo de agotamiento profundo causando inversión en la región de agotamiento, la suficiente para balancear el incremento de carga en la compuerta, subsecuentemente se generan pares electrón-hueco (e-h), donde los huecos son arrastrados hacia la interfase Si-SiO<sub>2</sub> por el campo eléctrico que existe en la región de agotamiento, y los electrones son llevados a la región neutra.

Los dos principales mecanismos de generación son la generación térmica en el volumen del semiconductor y la generación superficial

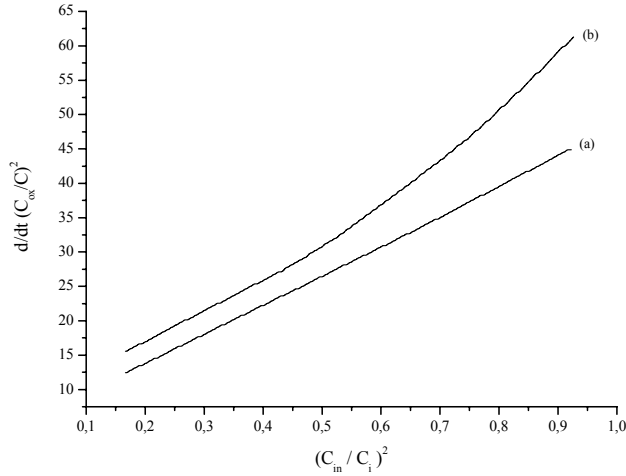
En la figura 1(a) se ilustra el diagrama de bandas de un dispositivo MOS en ausencia de polarización (considerando que se encuentra en la condición de bandas planas), se observa que si las trampas están por abajo del nivel de Fermi estarán llenas de electrones. Al aplicar un voltaje negativo tipo escalón entre compuerta y sustrato de la estructura MOS, su valor debe ser lo suficiente para que el dispositivo llegue al modo de agotamiento profundo, los electrones dentro de las trampas escapan por emisión térmica hacia la banda de conducción (figura 1(b)), este proceso continúa hasta que las trampas se vacían. Posteriormente inicia el proceso de generación superficial (proceso I) de la Fig. 1(c)), donde, para cada electrón que deja la interfase por generación superficial, un hueco es creado en la banda de valencia en la interfase. El proceso de generación en el volumen (proceso II) figura 1(c)) en la región de agotamiento ocurre simultáneamente con los procesos de emisión y generación superficial. Para voltajes aplicados relativamente bajos, y en ausencia de una alta concentración de huecos en la interfase, inicialmente la emisión y generación superficial serán dominantes con respecto a la generación en el volumen debido a que el proceso de generación superficial decrece con el incremento de la densidad de huecos libres en la superficie.

El proceso de emisión puede ser suprimido parcialmente, aplicando una polarización inicial al dispositivo tal que algunas de las trampas estén sobre el nivel de Fermi, con lo cual estarán vacías.

También, con una polarización inicial del dispositivo en el modo de fuerte inversión, existirá una alta concentración de huecos libres en la interfase (figura 1(d)) con lo cual la generación superficial y como consecuencia la emisión superficial puede ser suprimida.

Los procesos que se efectúan en la superficie de acuerdo al modelo o estadística de Shockley-Read-Hall [7], a través de un centro de recombinación-generación (R-G) son los siguientes:

Captura de un electrón desde la banda de conducción ( $r_a$ ), emisión de un electrón a la banda de conducción ( $r_b$ ), emisión de un electrón a la banda de valencia (o captura de un hueco desde la banda de valencia) ( $r_c$ ) y la captura de un electrón desde la banda de valencia (o emisión de un hueco a la banda de valencia) ( $r_d$ ).



**Figura 4.** Curvas Zerst experimentales para las condiciones de polarización inicial: (a)  $V_G(t=0) = -2$ , (b)  $V_G(t=0) = 0$ .

En términos de los parámetros de las trampas y de la función de ocupación, tenemos las siguientes relaciones [7]:

$$r_a = v\sigma_n n_s N_{ts} (1-f) \quad (1a)$$

$$r_b = e_n N_{ts} f \quad (1b)$$

$$r_c = v\sigma_p p_s N_{ts} f \quad (1c)$$

$$r_d = e_p N_{ts} (1-f) \quad (1d)$$

$v$  es la velocidad térmica,  $\sigma_n$  la sección transversal de captura para los electrones,  $\sigma_p$  la sección transversal de captura para huecos,  $n_s$  la concentración superficial de electrones,  $p_s$  la concentración superficial de huecos,  $N_{ts}$  la concentración superficial de trampas y  $f$  la función de ocupación cuyo valor es 1 si las trampas están llenas o 0 si están vacías, y puede definirse como:

$$f = \frac{n_{ts}}{N_{ts}} \quad (2)$$

donde  $n_{ts}$  es la concentración superficial de trampas llenas de electrones.

La razón de generación superficial de electrones libres en la banda de conducción es:

$$G_n(t) = r_b - r_a = e_n N_{ts} f - v\sigma_n n_s N_{ts} (1-f) \quad (3)$$

y la razón de generación superficial para huecos libres en la banda de valencia

$$G_p(t) = r_d - r_c = e_p N_{ts} (1-f) - v\sigma_p p_s N_{ts} f \quad (4)$$

Es posible escribir la razón neta del cambio del número de electrones en las trampas como:

$$\frac{dn_{ts}}{dt} = r_a - r_b - r_c + r_d \quad (5)$$

considerando que  $n_s$  y  $p_s$  se pueden despreciar (bajo la condición inicial  $V_G(t=0)=0$ ) entonces:

$$\frac{dn_{ts}}{dt} = r_d - r_b \quad (6)$$

o

$$\frac{dn_{ts}}{dt} = e_p N_{ts} (1-f) - e_n N_{ts} f \quad (7)$$

sustituyendo la relación (2) en (7) se obtiene

$$\frac{df}{dt} = e_p - (e_n + e_p) f \quad (8)$$

Resolviendo la ecuación diferencial (8) bajo la condición inicial  $f(0)=0$  (tomando en cuenta que el proceso de emisión es mucho menor en tiempo comparado con el proceso de generación superficial) [8].

$$f = \frac{e_p}{e_p + e_n} \left( 1 - e^{-(e_n + e_p)t} \right) \quad (9)$$

Con respecto a la razón neta de generación de huecos libres en la banda de valencia esta se puede definir como:

$$G_{ps} = r_d - r_c \quad (10)$$

recordando que  $p_s$  se puede despreciar

$$G_{ps} = r_d = e_p N_{ts} (1-f) \quad (11)$$

sustituyendo la ecuación (9) en (11) se obtiene el modelo matemático de la generación de huecos en la superficie para semiconductores tipo n:

$$G_{ps}(t) = \frac{e_p e_n N_{ts}}{e_n + e_p} \left[ 1 + \frac{e_p}{e_n} \exp(-(e_n + e_p)t) \right] \quad (12)$$

La ecuación (12) muestra que existe una dependencia exponencial con el tiempo de la generación superficial, con un valor máximo para  $t=0$ , posteriormente decae a su valor mínimo en aproximadamente cuatro constantes de tiempo ( $t=4/(e_p+e_n)$ ). En la literatura se menciona que la generación superficial decrece con el tiempo, sin mostrar su dependencia.

#### 4. Resultados

Para aplicar el modelo de generación superficial propuesto y obtener los parámetros que caracterizan las trampas en la interface, inicialmente se obtuvo la curva C-V experimental de alta frecuencia de una estructura MOS (figura 2) y de esta los parámetros de mayor interés, los cuales se muestran en la tabla 1

Posteriormente se usó el método de pulso de voltaje [8] para obtener las curvas C-t para dos condiciones diferentes de polarización inicial,  $V_G(t=0) = -2$  y  $V_G(t=0) = 0$  que de acuerdo a la figura 2 corresponden a las condiciones de

**Tabla 1.** Parámetros obtenidos de la curva C-V (figura 2).

$C_{ox}$ (pf)	$C_{inv}$ (pf)	$V_{bp}$ (V)	$N_D$ ( $cm^{-3}$ )	$A$ ( $cm^2$ )
402.7	72.48	-0.175	$4.74 \times 10^{14}$	$1.03 \times 10^{-2}$

inversión, y aproximadamente bandas planas (solo se ilustra en la figura 3 la curva C-t para  $V_G(t=0)=0$ ).

A partir de las graficas C-t se obtuvieron las curvas Zerst o de generación [9] para las dos condiciones de polarización inicial (figura 4). En esta figura se observa que el incremento no lineal en la razón de generación es dependiente de la condición inicial de polarización, donde este incremento puede ser debido al proceso de generación superficial y no a la generación en el volumen [10]. Para la condición inicial  $V_G(t=0) = -2 = V_{inv}$  (voltaje de inversión), correspondiente a la curva de generación de la figura 4(a), se suprimen los efectos superficiales y solo se observa generación térmica en el volumen (curva totalmente lineal), dado que inicialmente existe una alta concentración de huecos en la superficie.

Sin embargo, cuando la condición inicial es  $V_G(t=0) = 0$  (curva 4(b)), se observa que existe un máximo en la razón de generación en  $t=0$  y decae a su valor mínimo en  $C_{inv}/C=0.46$  que de acuerdo a la figura 2 corresponde a un tiempo de 2.46 segundos. En  $t=0$  de acuerdo a la ecuación (12) la generación superficial es máxima y en  $t=2.46$  seg., debe corresponder a cuatro constantes de tiempo, por lo cual:

$$\frac{4}{e_n + e_p} = 2.46 \text{ seg} \Rightarrow e_n + e_p = 1.62 \quad (13)$$

El valor de la ordenada al origen de la curva (b) es 10, y de acuerdo a la teoría [9], la velocidad superficial de generación  $S$ , está relacionada con este valor de la siguiente forma:

$$S = \frac{(10)\epsilon_0\epsilon_s N_D A}{2n_i C_{ox}} \quad (14)$$

donde  $\epsilon_0$  es la permitividad en el vacío,  $\epsilon_s$  es la constante dieléctrica,  $n_i$  la concentración intrínseca,  $C_{ox}$  la capacitancia del óxido y  $A$  el área transversal de la compuerta (metal) de la estructura MOS. Sustituyendo los valores correspondientes de la tabla 1 en la ecuación (14) se obtiene:

$$S = 4.27 \text{ cm/seg} \quad (15)$$

De acuerdo a Zerst [9] y Heiman [11] la razón de generación superficial es función de  $S$  de la forma:

$$G_{ps} = n_i S \quad (16)$$

por lo que se puede obtener el valor de la generación superficial

$$G_{ps} = 6.19 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \quad (17)$$

El correspondiente valor de la generación superficial de acuerdo a la ecuación (12) es (en cuatro constantes de tiempo):

$$G_{ps} = \frac{e_p e_n}{e_p + e_n} N_{ts} \quad (18)$$

a partir de las relaciones (13) y (17) y sustituyéndolas en (18) se obtiene:

$$N_{ts} = \frac{10.02 \times 10^{10}}{e_n e_p} \quad (19)$$

De la misma curva (4b) se observa que para  $t=0$  le corresponde un valor de  $d/dt(C_{ox}/C)=20.35$  (eliminando la componente de generación térmica en la región de carga espacial (RCE)), por lo cual el valor de  $S$  usando la ecuación (14) es:

$$S = 8.68 \text{ cm/seg} \quad (20)$$

y su correspondiente valor de generación superficial

$$G_{ps} = 12.58 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \quad (21)$$

Usando la ecuación (12) para la condición  $t=0$

$$G_{ps} = e_p N_{ts} \quad (22)$$

sustituyendo (21) en (22)

$$e_p N_{ts} = 12.58 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \quad (23)$$

de la ecuación (23) en (19) se obtiene el valor de  $e_n$

$$e_n = 0.79 \text{ s}^{-1}$$

A partir de la ecuación (13) y el valor obtenido de  $e_n$  se obtiene  $e_p$

$$e_p = 0.83 \text{ s}^{-1}$$

El valor de  $N_{ts}$  se obtiene de la ecuación (19)

$$N_{ts} = 1.52 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2} \quad (24)$$

El nivel de energía de las trampas dentro de la banda prohibida se obtiene a partir de:

$$E_{ts} = KT(\ln v_p - \ln e_p) \quad (25)$$

sustituyendo el valor obtenido de  $e_p$  con  $v_p=10^{11}$  cm/s [12] se obtiene:

$$E_{ts} = 0.66 \text{ eV}$$

## 5. Conclusión

Se usó la estadística de Shockley-Read-Hall para proponer un modelo de la razón de generación superficial en la interface Si-SiO<sub>2</sub> en estructuras MOS. De acuerdo a este modelo se obtuvo que la generación superficial

muestra un incremento exponencial inicial que depende de los coeficientes de emisión de las trampas (para huecos y electrones). Se obtuvieron las curvas de generación experimentales en dispositivos MOS con óxidos depositados a muy bajas temperaturas. Se muestra que estas curvas de generación pueden presentar un incremento en la razón de generación, donde este incremento depende de las condiciones iniciales de polarización. A partir del modelo propuesto y las curvas experimentales de generación se obtuvieron los parámetros que caracterizan las trampas, el coeficiente de emisión ( $e_p$ ,  $e_n$ ), la densidad de trampas ( $N_{ts}$ ) y el nivel de energía que introducen en la banda prohibida ( $E_{ts}$ ). Este resultado nos muestra que es necesario tomar en cuenta la influencia de las trampas en la interfase en el diseño y construcción de dispositivos y circuitos integrados con base a la estructura MOS.

## Referencias

- [1]. H. Juárez, T. Díaz, M. Pacio, G. García S. E. Rosendo, M. Rubín, G. Romero, A. García, y C. Morales, Phys. Stat. Sol. (c) **4**, 1481 (2007).
- [2]. G. Ruprecht, Phys. Rev., **111**, 75 (1958).
- [3]. G. Ruprecht y C. A. Klein, Phys. Rev., **116**, 342 (1959).
- [4]. P. Pan, C. Schaefer, J. Elec. Soc., **6**, 1171 (1986).
- [5]. P. Peykov, T. Díaz, H. Juárez, Rev. Mex. de Fís., **42**, 1381 (1996).
- [6]. P. Peykov, T. Díaz, H. Juárez, G. Romero, Sem. Phys. and Technol., **17**, 120 (1998).
- [7]. H. Juárez, T. Díaz, M. Cuamatzi, E. Rosendo, J. Martínez, M. Pacio, A. García, X Workshop IBERCHIP, (2004).
- [8]. D. K. Schroder, "Semiconductor Materials and Device Characterization", Wiley & Sons Inc. 245 (1990).
- [9]. M. Zerbst, Z. Angew. Phys., **22** (1966).
- [10]. P. Peykov, T. Díaz, H. Juárez, G. Romero, Phys. Stat. Sol. (a) **154**, 599 (1995).
- [11]. F. P. Heiman, Trans. IEEE ED, **14**, 781 (1967).
- [12]. H. Juárez, T. Díaz, M. Cuamatzi, O. López, XII International Materials Research Congress, 23 (2003).