

Простой метод восстановления тонкой структуры легирования полупроводников из $C-V$ -измерений в электрохимической ячейке

© В.И. Шашкин, И.Р. Каретникова, А.В. Мурель, И.М. Нефедов, И.А. Шерешевский

Институт физики микроструктур Российской академии наук,
603600 Нижний Новгород, Россия

(Получена 13 августа 1996 г. Принята к печати 25 декабря 1996 г.)

Предложен простой метод восстановления тонкой структуры легирования полупроводников из вольт-фарадных измерений при электрохимическом травлении. Метод дает возможность определять профиль легирования непосредственно от поверхности полупроводника и обеспечивает разрешение на масштабах, меньших радиуса дебаевского экранирования. Результаты численных расчетов подтверждают возможность восстановления профиля легирования полупроводников с разрешением на уровне единиц нанометров.

1. Введение

Метод, основанный на измерении вольт-фарадных ($C-V$) характеристик при подаче обратного смещения на барьер Шоттки, широко используется для определения профиля концентрации легирующей примеси полупроводниковых структур [1]. В середине 70-х годов было предложено использовать для этой цели (вместо напыленных металлических или ртутных контактов) барьерный контакт полупроводникового образца с электролитом [2]. Возможность проводить поочередно измерение концентрации и весьма прецизионное электролитическое травление образца в электрохимической ячейке позволило практически снять ограничение на глубину восстановления профиля легирования. Таким образом, исследователи оказались вооружены удобным и оперативным методом восстановления профиля при электрохимическом травлении (метод ЭХП) [3]. Сохранив основополагающие принципы $C-V$ -измерений, метод ЭХП унаследовал и недостатки [1,4]: 1) невозможность получения информации о распределении примеси в области начального обеднения вблизи поверхности; 2) ошибки и ограничения в разрешении тонкой структуры профиля легирования на масштабах, сопоставимых с радиусом дебаевского экранирования. Оба этих недостатка связаны с использованием при анализе классических формул, полученных в приближении полного обеднения. При этом концентрация определяется на границе области обеднения, где это приближение является предельно грубым. Проблема точности восстановления профиля легирования отчетливо сформулирована достаточно давно [5] и впоследствии неоднократно обсуждалась (см., например, [1,4]). Однако только в последнее время предложены практически работоспособные схемы восстановления резких профилей легирования на основе данных $C-V$ -измерений [6–8]. Все они основаны на итеративном определении профиля легирования в заданном классе функций путем численной минимизации невязки измеренных и рассчитанных $C-V$ -зависимостей. Очевидно, что получение такой информации весьма актуально при исследовании разнообразных полупроводниковых многослойных микроструктур.

В настоящей работе предлагается простой метод восстановления тонкой структуры легирования полупроводников на основе данных $C-V$ -измерений при электрохимическом травлении. Метод обеспечивает разрешение на масштабах, меньших радиуса дебаевского экранирования, и восстановление профиля легирования в приповерхностной области начального обеднения. Обсуждаются пределы применимости предлагаемого подхода. Проведено численное моделирование экспериментов по ЭХП тестовых полупроводниковых структур, показывающее возможность получения нанометрового разрешения в восстановлении профиля легирования.

2. Постановка прямой задачи для расчета емкости

Будем считать, что электролит приведен в контакт с плоской поверхностью полупроводника, для определенности n -типа проводимости, имеющего некоторое неоднородное распределение примеси вблизи поверхности $N(x)$. При определенном смещении V ток через контакт мал, что соответствует постоянным положениям квазиуровней Ферми в полупроводнике (E_{FS}) и электролите (E_{FE}) [9]. Задача считается одномерной. Для простоты предполагаем, что в полупроводнике примеси полностью ионизованы, отсутствуют глубокие уровни, вклад неосновных носителей мал, электроны подчиняются бальмановской статистике; падением потенциала в электролите можно пренебречь.

Электростатический потенциал $\psi(x)$ подчиняется уравнению Пуассона

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{4\pi e}{\epsilon} [N_0 \exp(e\psi/kT) - N(x)], \quad x \geq x_e, \quad (1)$$

с обычными граничными условиями

$$\psi(x_e) = -V - \frac{\Phi - E_0}{e}, \quad \psi(\infty) = 0, \quad (2)$$

которые поясняет зонная схема контакта электролит–полупроводник, представленная на рис. 1. Здесь Φ — гальвани-потенциал, $E_c(x)$ обозначает положение дна

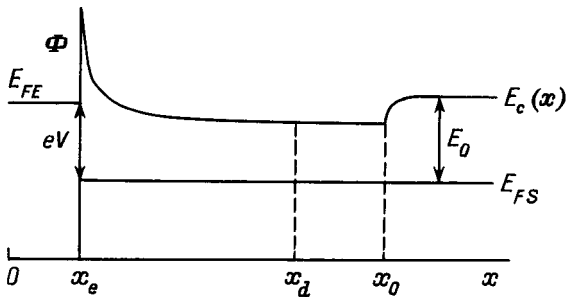


Рис. 1. Зонная диаграмма контакта электролит-полупроводник при $V \neq 0$.

зоны проводимости —

$$E_c(x) = E_0 - e\psi(x), \quad E_0 = -kT \ln(N_0/N_c), \quad (3)$$

где N_c — эффективная плотность состояний в зоне проводимости. Введены обозначения для положения фронта травления — x_e и границы области обеднения — x_d .

При записи соотношений (1)–(3) фактически делается предположение о том, что начиная с некоторого x_0 полупроводник однороден, т.е. концентрация легирующей примеси остается постоянной,

$$N(x) = N_0, \quad x \geq x_0. \quad (4)$$

Как было отмечено в [10], такое предположение зачастую соответствует реальной ситуации для эпитаксиальной структуры, выращенной на полупроводниковой подложке, или может быть оправдано тем, что при достаточном удалении неоднородности легирования не могут существенно влиять на пространственный заряд области обеднения.

При заданном профиле $N(x)$ задача (1), (2) допускает решение, определяющее интегральные характеристики — заряд, отнесенный к единичной площади,

$$Q(x_e, V) = -\frac{\varepsilon}{4\pi} \frac{\partial \psi}{\partial x} \Big|_{x=x_e} = e \int_{x_e}^{\infty} [N(x) - N_0 \exp(e\psi/kT)] dx \quad (5)$$

и удельную емкость

$$C(x_e, V) = \frac{\partial Q}{\partial V}, \quad (6)$$

являющиеся функциями двух независимых переменных x_e и V .

3. Приближение полного обеднения области неоднородного легирования

Приближение полного обеднения основано на введении резкой гипотетической границы x_d , отделяющей полностью обедненную основными носителями область при $x < x_d$ от нейтральной при $x \geq x_d$ (см., например, [1]).

Представляется очевидным, что приближение полного обеднения может быть вполне удовлетворительным, если неоднородно легированная часть структуры обедняется в интересующем диапазоне напряжений V и шагов травления x_e , т.е.

$$x_d(x_e, V) > x_0. \quad (7)$$

При этом решение задачи очевидно,

$$Q(x_e, V) = e \int_{x_e}^{x_d} N(x) dx, \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \psi(x_d) - \psi(x_e) &= V + \frac{\Phi - E_0}{e} \\ &= \frac{4\pi e}{\varepsilon} \int_{x_e}^{x_d} (x - x_e) N(x) dx, \end{aligned} \quad (9)$$

и допустимость использования в качестве граничного условия $\psi(x_d) = 0$ в [9] не вызывает сомнений. Считая переменные x_e и V независимыми, продифференцируем (8) и (9):

$$\frac{1}{e} dQ = N(x_d) \frac{\partial x_d}{\partial V} dV + \left[N(x_d) \frac{\partial x_d}{\partial x_e} - N(x_e) \right] dx_e, \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \frac{\varepsilon}{4\pi e} &= N(x_d)(x_d - x_e) \frac{\partial x_d}{\partial V} dV \\ &+ \left[N(x_d)(x_d - x_e) \frac{\partial x_d}{\partial x_e} - \frac{1}{e} Q \right] dx_e. \end{aligned} \quad (11)$$

Отсюда получаются с учетом (6) традиционные формулы C–V-профилирования [1,4]

$$C = eN(x_d) \frac{\partial x_d}{\partial V} = \frac{\varepsilon}{4\pi(x_d - x_e)} \quad (12)$$

и далее

$$x_d = x_e + \frac{\varepsilon}{4\pi C}, \quad N(x_d) = \frac{8\pi}{\varepsilon e} \left[\frac{\partial(1/C^2)}{\partial V} \right]^{-1}, \quad (13)$$

определяющие в параметрическом виде профиль легирования на основе измеренной зависимости $C(x_e, V)$. Естественно, что в силу сделанного предположения (7), вычисления по формуле (13) дадут тривиальный результат: $N(x_d) = N_0$.

4. Простой метод восстановления профиля легирования

Из (10), (11) вытекают более важные для дальнейшего изложения выражения для $N(x_e)$ и Q :

$$N(x_e) = \frac{1}{e} \left(\frac{4\pi}{\varepsilon} QC - \frac{\partial Q}{\partial x_e} \right), \quad (14)$$

$$Q(x_e, V) = \left[1 + \frac{\varepsilon}{4\pi} \frac{\partial(1/C)}{\partial x_e} \right] \left[\frac{\partial(1/C)}{\partial V} \right]^{-1}. \quad (15)$$

Приведенные соотношения являются решением обратной задачи и позволяют на основе измеренных зависимостей емкости от напряжения $C(x_e, V)$ определить профиль концентрации легирующей примеси на каждом шаге травления, начиная непосредственно от поверхности полупроводника.

Из (10), (11) следуют другие способы нахождения профиля концентрации, которые могут быть удобными с точки зрения эксперимента. Например, можно производить измерения, сохраняя на нескольких шагах травления неизменным положение границы области обеднения. Полагая в (10), (11) $dx_d = 0$, находим, что

$$N(x_e) = \frac{\varepsilon}{4\pi e} \frac{d^2V}{dx_e^2} \tag{16}$$

при условии, что

$$x_e + \frac{\varepsilon}{4\pi C(x_e, V)} = \text{const.} \tag{17}$$

В этом случае процедура восстановления профиля легирования состоит в следующем. На нескольких последовательных шагах травления подбираются приращения напряжения ΔV , удовлетворяющие условию (17), а вычисление $N(x_e)$ производится по формуле (16) с помощью какой-либо схемы численного дифференцирования.

Основное различие в традиционном согласно (13) и предлагаемом в соответствии с (14), (16) подходах к восстановлению профиля легирования состоит в том, что в последнем случае изменение емкостных характеристик полупроводника связывается с удаляемым в процессе электролитического травления зарядом поверхностного слоя. По этой причине особенности в распределении подвижных носителей заряда на границе обеднения не оказывают существенного влияния на точность и разрешение в восстановлении профиля легирования. Поэтому расчеты на основе (14), (16) не имеют ограничений в разрешении на масштабах радиуса дебаевского экранирования, присущих традиционному подходу [5]. Очевидно, что справедливость выражений (16), (17) можно обосновать, отказавшись от предположений разд. 3. Действительно, формула (16) — это уравнение Пуассона (1), записанное для приповерхностной части структуры, где $-\psi \gg kT/e$ и вкладом подвижных носителей заряда можно пренебречь. Условие (17) обеспечивает изменение приложенного напряжения (2) на шагах травления x_e и x'_e , сохраняющее неизменным потенциал, отвечающий точному уравнению (1), в глубине полупроводника, $\psi(x_e, V, x) = \psi(x'_e, V', x)$ при $x > x'_e > x_e$. Действительно, решая уравнение Пуассона в интервале (x_e, x'_e) легко установить необходимую связь емкостей

$$\frac{1}{C(x'_e, V')} = \frac{1}{C(x_e, V)} - \frac{\varepsilon}{4\pi(x'_e - x_e)}, \tag{18}$$

эквивалентную (17). Таким образом, единственным условием применимости формулы (16) для восстановления профиля легирования, в отличие от подхода на основе (14), является требование сильного обеднения вблизи поверхности полупроводника: $-\psi \gg kT/e$.

5. Результаты численного моделирования

Для того чтобы оценить возможности в восстановлении профилей легирования на основе (14), (16), было проведено численное моделирование процесса ЭХП для различных профилей $N(x)$. Для нахождения зависимости емкости от напряжения на каждом шаге травления численно решалась прямая граничная задача (1), (2), которая сводилась к задаче Коши методом, наиболее подробно описанном в [10]. Кроме того, чтобы избежать ошибок, связанных с численным дифференцированием при вычислении емкости (6), уравнение Пуассона и граничные условия дифференцировались по V . Полученная система двух уравнений 2-го порядка решалась методом Рунге-Кутты 4-го порядка с автоматическим выбором шага. Вычисленная таким образом зависимость $C(x_e, V)$ использовалась для восстановления профиля легирования в варианте А — по формуле (14), в варианте В — по формуле (16) с интерполяцией зависимости C от V для нахождения необходимых приращений ΔV .

В качестве тестовых были выбраны кусочно-постоянные профили $N(x)$. При моделировании были использованы типичные для метода ЭХП параметры [4,11]: шаг травления 1 нм, $\Phi - E_0 = 1.7$ эВ, диапазон напряжений от 0 до 0.2 В.

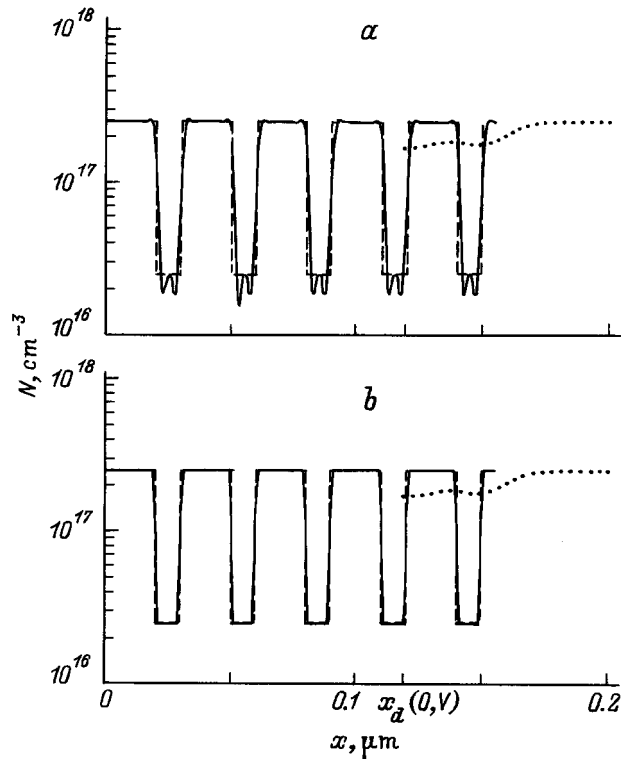


Рис. 2. Результаты численного расчета профиля легирования (сплошная линия) в вариантах А (а) и В (б), а также расчета по традиционной формуле (13) (точечная линия). Штриховая линия — заданный профиль.

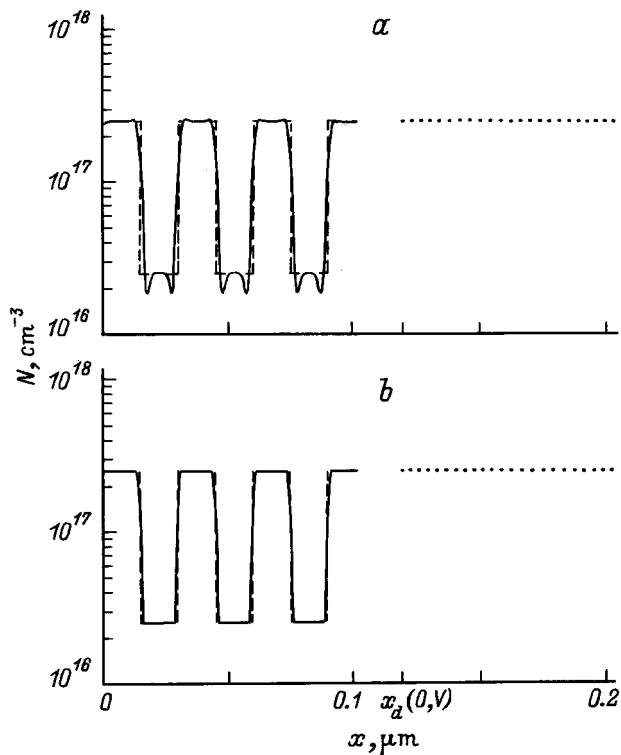


Рис. 3. То же, что на рис. 2, для структуры с более широкими областями постоянной концентрации.

Вид $N(x)$ и результаты расчетов приведены на рис. 2 и 3. Штриховой линией показан исходный профиль, точечной — профиль легирования, полученный при традиционном подходе (13). На рисунках отмечено положение границы обедненной области, которое достигается на первом шаге травления $x_e = 0$. Для профиля легирования, изображенного на рис. 2, неоднородная часть структуры изначально обеднена. Из рисунков видно, что с точностью до шага травления рассчитанные в вариантах А и В профили совпадают с заданным. Дополнительные пики на рис. 2, а, 3, а связаны с ошибками численного дифференцирования, которые оказались наибольшими вблизи скачков $N(x)$. Для структуры с более широкими областями постоянной концентрации, представленной на рис. 3, условие (7) нарушается, тем не менее оба варианта восстановления, по-прежнему, дают хорошее совпадение с исходным профилем. В общем случае при нарушении условия (7) расчеты в варианте А приводят к заметным ошибкам. Расчет на основе традиционного подхода, показанный точками на рис. 3, в данном случае практически не выявляет структуру распределения примесей.

Проведенные численные расчеты при различных параметрах задачи показывают, что основная трудность применения предлагаемых формул (15) и (16) связана с необходимостью вычисления производных высокого порядка. Это накладывает достаточно жесткие требования на точность исходных данных. В частности, при

использовании формулы (15) необходимо знать значение емкости с более высокой точностью, чем при применении формулы (16). С другой стороны, при работе с формулой (16) требуются $C-V$ -зависимости в более широком и более подробно просчитанном диапазоне напряжений.

6. Заключение

Предположен простой метод восстановления тонкой структуры легирования при электрохимическом $C-V$ -профилеировании. Метод дает возможность восстановить профиль легирования непосредственно от поверхности полупроводника с высоким пространственным разрешением на масштабах, меньших радиуса дебаевского экранирования. Формально разрешение ограничивается величиной шага травления, который может быть равен нескольким нанометрам [4]. Очевидно обобщение предлагаемого подхода для анализа более сложных полупроводниковых структур (например, анизотропных, с вырожденной статистикой и других).

Недостатком метода является необходимость дифференцирования экспериментальных данных, что предъявляет достаточно жесткие требования к точности измерений и минимизации известных экспериментальных ошибок процедуры ЭХП [4]. Метод может быть реализован в рамках известных схем электрохимических профилометров, например, на основе цифрового автоматизированного комплекса, описанного в работе [11]. Результаты восстановления профилей реальных полупроводниковых структур будут опубликованы.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 95-02-05870а).

Список литературы

- [1] E.H. Roderick, R.H. Williams. *Metal-Semiconductor contacts* (1988).
- [2] M.M. Faktor, T. Ambridge, E.G. Bremner. *Apparatus and method for measuring carrier concentration in semiconductor materials* [U.K. Patent Specification No. 1482929 (1975)].
- [3] M.M. Faktor, T. Ambridge, C.R. Elliot, J.C. Regnault. *Current topics in Material Science*, ed. by E. Kuldis (1980) v. 6. p. 1.
- [4] P. Blood. *Semicond. Sci. Technol.*, **1**, 7 (1986).
- [5] W.C. Johnson, P.T. Panousis. *IEEE Trans. Electron. Dev.*, **ED-18**, 965 (1971).
- [6] G.J.L. Ouwering. *Sol.-St. Electron.*, **33**, 757 (1990).
- [7] K. Iniewski, C.A.T. Salama. *Sol.-St. Electron.*, **34**, 309 (1991).
- [8] M.F. Kokorev, N.A. Maleev, V.M. Ustinov, A.Yu. Egorov, A.F. Zhukov. *Abstracts Int. Symp. Nanostructures: Physics and Technology* (St. Petersburg, 1996) p. 161.
- [9] В.А. Мямлин, Ю.В. Плесков. *Электрохимия полупроводников* (М., Наука, 1965).
- [10] L.H. Holway. *IEEE Trans. Electron. Dev.*, **ED-37**, 1104 (1990).
- [11] И.В. Ирин. А.В. Мурель. *ПТЭ*, **6**, 150 (1993).

Редактор Л.В. Шаронова

Simple method for extraction of detailed structure of dopant distribution in semiconductors at electrochemical $C-V$ profiling

V.I. Shashkin, I.R. Karetnikova, A.V. Murel,
I.M. Nefedov, I.A. Shereshevskii

Institute for Physics of Microstructures,
Russian Academy of Sciences,
603600 Nyzhny Novgorod, Russia

Abstract The simple method for the extraction of a detailed structure of a dopant distribution in semiconductors based on the data of an electrochemical $C-V$ profiling is suggested. The method gives a possibility to determine a dopant distribution directly from a semiconductor surface and provides a sub-debye-length resolution. The results of a numerical simulation confirm a possibility of semiconductor dopant profile extraction with nanometer depth resolution.

E-mail: sha@ipm.sci-nnov.ru