

О точности восстановления профиля легирования полупроводников на основе вольт-фарадных измерений в процессе электрохимического травления

© И.Р. Каретникова[¶], И.М. Нефедов, В.И. Шашкин

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

(Получена 23 ноября 2000 г. Принята к печати 25 ноября 2000 г.)

На основе численного моделирования проанализированы погрешности различных методов восстановления распределения легирующей примеси в полупроводниках по данным вольт-фарадных измерений в электрохимической ячейке. Показано, что предложенные ранее авторами два простых метода не только позволяют определить профиль легирования непосредственно на поверхности структуры, но и потенциально являются более точными, чем традиционно используемый подход. Однако эти методы предъявляют более высокие требования к точности измеряемых данных. Для их успешного применения относительная погрешность измерений должна быть не хуже $5 \cdot 10^{-4}$, что примерно на порядок выше обычного экспериментального уровня.

1. Введение

При изготовлении и практическом применении полупроводниковых структур важно знать распределение по глубине легирующей примеси (профиль легирования). Одним из наиболее простых методов определения такого распределения является восстановление профиля легирования по данным вольт-фарадных ($C-V$) измерений на контакте Шоттки металл-полупроводник при подаче обратного напряжения смещения. Приближенное решение этой задачи (видимый, "аррагент", профиль) было предложено более полувека назад и успешно применяется [1]. Недостатки этого подхода хорошо известны и неоднократно обсуждались в литературе (см., например, [1,2]) — это невозможность определить профиль легирования в приконтактной области, ограничение по разрешению на масштабах нескольких радиусов дебаевского экранирования, конечная глубина зондирования. Последний недостаток преодолен в середине 70-х годов, когда было предложено заменить контакт металл-полупроводник на контакт электролит-полупроводник [3,4], что позволило последовательно с измерением $C-V$ -характеристик электрохимически удалять часть материала, продвигаясь в глубь полупроводника. В последние годы появились новые методы, которые в принципе позволяют восстановить профиль легирования вблизи контакта с более высоким разрешением [5–8]. Эти методы требуют значительных вычислительных затрат и априорной информации о профиле легирования. Простые численные схемы определения концентрации примесей по измерениям в электрохимической ячейке, которые преодолевают указанные недостатки традиционного подхода, предложены в работах [9,10].

Несмотря на широкое применение методов восстановления профиля легирования и на усилия по разработке

новых подходов, нам неизвестны примеры определения профиля легирования по реальным $C-V$ -измерениям с точностью выше, чем точность видимого профиля (исключением может быть работа [7] в классе кусочно-постоянных профилей). Причиной этого, на наш взгляд, является недостаточное внимание, которое уделяется вопросам точности предлагаемых схем и их чувствительности к погрешностям измерений. Отметим в этой связи работу [11], в которой представлены результаты численных модельных расчетов видимого профиля для функции Хевисайда, и работу [2], где приведены количественные оценки погрешности видимого профиля для однородного распределения примесей. В других работах вопросы точности и влияния ошибок исходных данных либо вообще не упоминаются, либо обсуждаются лишь качественно [5–8].

Цель настоящей работы — исследования точности видимого профиля и методов восстановления, предложенных в [9], а также чувствительности этих методов к погрешностям измерений. Исследования проводились на основе численного моделирования типичных распределений примесей — однородного, линейного и функции Хевисайда.

Результаты численных расчетов показали, что новые методы являются более точными, чем широко используемый подход. Однако они более чувствительны к ошибкам измерений, так что для их успешного применения необходимо повысить точность измерений примерно на порядок до уровня относительной погрешности $5 \cdot 10^{-4}$.

2. Основные формулы и методика расчета

Предположим, что распределение легирующей примеси $N(x)$ является одномерным (ось x направлена перпендикулярно поверхности внутрь исследуемой структуры, точка $x = 0$ соответствует первоначальной поверхности).

[¶] E-mail: kart@ipm.sci-nnov.ru

Обозначим через y_1, y_2, \dots, y_I объемы стравливаемого материала на каждом из I шагов травления. Тогда точки $x_0 = 0, x_i = x_{i-1} + y_i/S, i = 1, 2, \dots, I$ представляют собой координаты точек травления (S — площадь дна кратера травления). В процессе профилирования на каждом шаге травления x_i измеряется значение емкости C_{ij} при различных значениях приложенного напряжения $V_{ij}, j = 1, 2, \dots, J$. Таблица $C_{ij} = C(x_i, V_{ij})$, а также значения V_{ij}, y_i и площадь S являются исходными данными, которые используются в задаче восстановления распределения легирующей примеси $N(x)$. Здесь и далее в работе используются безразмерные переменные. Для нормировки физических величин выбраны следующие константы: для напряжения — $V_0 = kT/e$ (k — постоянная Больцмана, e — величина заряда электрона, T — температура), для концентрации — значение концентрации N_∞ на большой глубине, где предполагается однородное распределение примесей, для длины — радиус Дебая $\lambda_D = \sqrt{kT\varepsilon/e^2N_\infty}$ (ε — диэлектрическая проницаемость), для удельной емкости — $C_0 = \varepsilon/\lambda_D$.

В работе исследуются три метода восстановления профиля легирования $N(x)$. Первый — широко известен (см., например, [2]), назовем его А-формулой:

$$N_A(x_{d_i}) = \left\{ \frac{\partial [1/C^2(x_i, V)]}{\partial V} \right\}^{-1},$$

$$x_{d_i} = x_i + \frac{1}{C(x_i, V)}, \quad i = 1, 2, \dots, I. \quad (1)$$

Формула (1) основана на приближении полного обеднения, которое предполагает наличие резкой границы между обедненной приконтактной областью и остальной частью образца. При этом видимый профиль вычисляется на краю обедненной области x_{d_i} , где указанное приближение оказывается максимально грубым.

Второй метод (Q-формула) предложен в работе [9]:

$$N_Q(x_i) = Q(x_i, V)C(x_i, V) - \left. \frac{\partial Q(x, V)}{\partial x} \right|_{x=x_i},$$

$$Q(x, V) = \frac{1 + \frac{\partial}{\partial x} [1/C(x, V)]}{\frac{\partial}{\partial V} [1/C(x, V)]}. \quad (2)$$

Q-формула также получена в рамках приближения полного обеднения. Однако она дает значение концентрации примесей на границе электролит–полупроводник, где это приближение вполне оправдано. Поэтому точность Q-формулы оказывается выше, чем у видимого профиля (см. [9], а также разд. 3).

И наконец, третий метод (V-формула) также описан в [9]:

$$N_V(x_i) = \left. \frac{\partial^2 \psi(x, V)}{\partial x^2} \right|_{x=x_i}, \quad (3)$$

где $\psi(x, V)$ — электростатический потенциал в полупроводнике. Формула (3) является прямым следствием уравнения Пуассона, которое обсуждается далее. Ее

точность определяется степенью обеднения на границе с электролитом и поэтому весьма высока.

Методика расчета профиля легирования, использованная в работе, заключается в численных расчетах для выбранных модельных функций $N(x)$ емкостей $C(x, V)$, которые в свою очередь используются для восстановления профиля легирования. Затем вычисленные профили сравниваются с исходным $N(x)$.

Опишем процесс получения исходных данных. Зададим некоторый профиль легирования $N(x)$. Предположим, что вкладом неосновных носителей тока можно пренебречь, а концентрация основных носителей не слишком велика (для GaAs $\leq 5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ при комнатной температуре), так что их распределение описывается статистикой Больцмана. Тогда известно, что на каждом шаге травления электростатический потенциал $\psi_i(x, V)$ удовлетворяет уравнению Пуассона, которое в безразмерных переменных можно записать в следующем виде:

$$\frac{\partial^2 \psi_i}{\partial x^2} = N(x) - \exp(-\psi_i), \quad x \geq x_i, \quad (4)$$

$$\psi_i(x_i, V) = V, \quad \psi_i(\infty, V) = 0, \quad i = 0, 1, 2, \dots, I, \quad (5)$$

где V есть сумма приложенного и встроенного на контакте напряжения. При этом удельная емкость образца определяется как

$$C(x_i, V) = \left. \frac{\partial}{\partial V} \left[\frac{\partial \psi_i(x, V)}{\partial x} \right] \right|_{x=x_i}. \quad (6)$$

Предполагается также, что исследуемая структура на большой глубине однородна, т.е. существует точка x^* такая, что при $x \geq x^*$ распределение примесей постоянно и равно N_∞ . Чтобы избежать численного дифференцирования по V в формуле (6), как это обычно делается (см., например, [11,12]), для нахождения емкости $C_{ij} = C(x_i, V_{ij})$ введем дополнительные функции $\phi_i = \partial \psi_i / \partial V$. Дифференцируя (4), (5) по V и считая, что $N(x)$ не зависит от V , нетрудно получить уравнение и граничные условия для $\phi_i(x, V)$:

$$\frac{\partial^2 \phi_i}{\partial x^2} = \phi_i \exp(-\psi_i), \quad x \geq x_i, \quad (7)$$

$$\phi_i(x_i, V) = 1, \quad \phi_i(\infty, V) = 0, \quad i = 0, 1, 2, \dots, I. \quad (8)$$

Тогда емкость вычисляется следующим образом:

$$C(x_i, V) = \left. \frac{\partial \phi_i(x, V)}{\partial x} \right|_{x=x_i}.$$

Полученная система уравнений (4), (7) решалась численно на каждом шаге травления x_i и для каждого значения напряжения $V_{ij}, j = 1, 2, \dots, J$. Интегрирование выполнялось методом Рунге–Кутты 4-го порядка с автоматическим выбором шага, начиная с точки $x = x^*$ до $x = x_i$, аналогично тому, как описано в работе [13]. Введение второго уравнения (7) незначительно увеличило время счета, но при этом позволило на несколько порядков увеличить точность вычисления емкости.

Как уже отмечалось выше, исходными данными для определения профиля легирования являются дискретные значения емкости C_{ij} , напряжения V_{ij} , а также значения y_i и площадь S . Чтобы применить формулы восстановления (1)–(3), нужно перейти к их дискретным аналогам \hat{N}_α , $\alpha = A, Q, V$. При этом следует иметь в виду, что такая процедура вносит дополнительную погрешность, которая зависит от способа дискретизации. Используемые в работе дискретные формулы восстановления приведены в *Приложении*. Для оценки погрешности δN_α восстановленного профиля легирования использовалось его максимальное отклонение от истинного профиля:

$$\delta N_A = \max_i |\hat{N}_A(x_{d_i}) - N(x_{d_i})|,$$

$$\delta N_\alpha = \max_i |\hat{N}_\alpha(x_i) - N(x_i)|, \quad \alpha = Q, V. \quad (9)$$

3. Результаты численного моделирования

Сравнение представленных выше методов проведено для трех характерных модельных профилей: однородного, линейного и задаваемого функцией Хевисайда. Числовые значения параметров выбирались близкими к тем, которые используются в условиях реального эксперимента для GaAs:

$$N_\infty = 5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}, \quad \lambda_D = 6.1 \text{ нм}, \quad V_0 = 0.026 \text{ В},$$

$$C_0 = 0.019 \text{ Ф/м}^2, \quad S = 2.1 \cdot 10^{-5} \text{ м}^2, \quad x^* = 2.5 \cdot 10^4 \text{ нм}.$$

Большинство расчетов было выполнено для постоянного шага травления $\Delta x \geq 1 \text{ нм}$, при этом напряжения на контакте электролит–полупроводник были одинаковы на каждом шаге травления $V_{ij} = V_j$, $j = 1, 2, \dots, 5$:

$$V_1 = V - 2\Delta V, \quad V_2 = V - \Delta V, \quad V_3 = V,$$

$$V_4 = V + \Delta V, \quad V_5 = V + 2\Delta V, \quad V = 0.75 \text{ В},$$

значения ΔV варьировались в пределах от 0.01V до 0.05V.

3.1. Точность формул восстановления

Прежде всего рассмотрим вопрос о точности приведенных выше формул восстановления профиля легирования, предполагая, что исходные данные (емкость, напряжение, шаг травления и площадь дна кратера травления) известны точно. В этом случае погрешности δN_α в (9) можно представить как сумму погрешностей дискретизации δ_α^d и погрешностей δ_α^f самих формул, т. е.

$$\delta N_\alpha = \delta_\alpha^f + \delta_\alpha^d, \quad \alpha = A, Q, V. \quad (10)$$

Очевидно, что погрешности δN_α^f не зависят от приращения напряжения ΔV и шага травления Δx , тогда как величина δ_α^d меняется с изменением ΔV и Δx и стремится к 0 при $\Delta V, \Delta x \rightarrow 0$. Следовательно, по

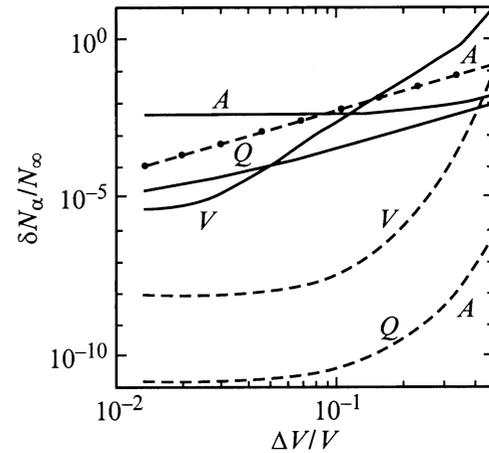


Рис. 1. Погрешность восстановления однородного (штриховые линии) и линейного (сплошные линии) распределения примесей с помощью A-, Q- и V-формул; точками указана погрешность профиля легирования, вычисленного по формуле (П. 1); $\Delta x/\lambda_D = 0.165$.

зависимостям δN_α от ΔV и Δx можно оценить вклад каждого слагаемого в правой части (10).

В случае однородного профиля распределение нормированной концентрации примеси составляет $N(x) = 1$ и задача (4), (5) решается аналитически, а вольт-фарадная характеристика имеет вид

$$C(V) = \frac{1 - e^{-V}}{\sqrt{2(V + e^{-V} - 1)}}. \quad (11)$$

Подставляя это выражение в формулу (1), получим видимый профиль легирования, который не зависит от x :

$$N_A^0 = \frac{(1 - e^{-V})^3}{1 - 2Ve^{-V} - e^{-2V}}.$$

При этом погрешность формулы δ_A^f при указанном выше значении напряжения V оказывается равной $4 \cdot 10^{-11}$. Погрешность Q-формулы δ_Q^f в данном случае совпадает с δ_A^f , поскольку емкость в (11) не зависит от x и формулы (1) и (2) совпадают. На рис. 1 штриховыми линиями показаны зависимости погрешностей δN_α от ΔV . Видно, что при малых Δ погрешности дискретизации δ_A^d и δ_Q^d становятся пренебрежимо малы, что является следствием того, что зависимость функции $1/C^2$ от V близка к линейной. Заметим, что при использовании формулы (П.1) для вычисления видимого профиля вместо (1) (см. *Приложение*), где численно дифференцируется функция $C(V)$, погрешность дискретизации резко возрастает, что показано точками на рис. 1. Погрешность V-формулы для однородного профиля оказывается больше, чем для A- и Q-формулы, что связано с большей ошибкой дискретизации. В целом следует отметить, что при небольших ΔV все три формулы хорошо восстанавливают однородный профиль легирования.

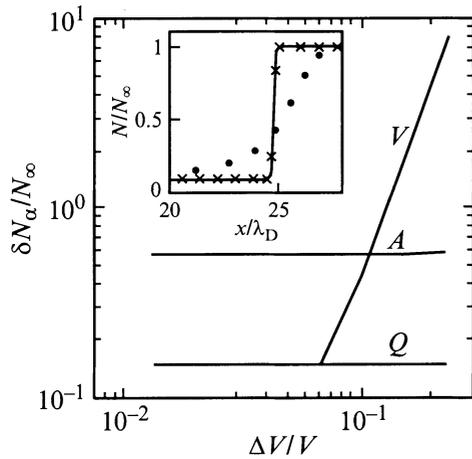


Рис. 2. Погрешность восстановления функции Хевисайда с помощью *A*-, *Q*- и *V*-формул. На вставке — исходный профиль легирования (сплошная линия), видимый профиль (точки) и профиль, восстановленный по *Q*-формуле, $\Delta V/V = 0.0133$, $\Delta x/\lambda_D = 0.165$.

Погрешность восстановления линейного распределения примесей значительно больше, чем в случае однородного распределения, что показано сплошными линиями на рис. 1. Видно, что при малых значениях ΔV , *Q*- и *V*-формулы более точные, чем *A*-формула. По виду зависимости δN_Q и δN_V от ΔV можно сделать вывод, что основной вклад в них дает погрешность конечно-разностной аппроксимации производных, т.е. в правой части формулы (10) преобладает слагаемое δ_α^d , $\alpha = Q, V$. Анализ дискретных аналогов формул (2) и (3) показывает, что при фиксированном шаге травления Δx они имеют разный порядок аппроксимации по ΔV , а именно $\delta_Q^d = 0(\Delta V^2)$, $\delta_V^d = 0(\Delta V^3)$. Этим можно объяснить более резкий рост погрешности δN_V по сравнению с δN_Q при увеличении ΔV . Погрешность δN_A практически не зависит от ΔV . Следовательно, погрешность видимого профиля определяется погрешностью самого метода δ_A^f .

Аналогичная картина имеет место и для функции Хевисайда (рис. 2). Здесь также *Q*- и *V*-формулы дают более точный результат, чем *A*-формула, хотя значение погрешностей значительно больше, чем в случае однородного или линейного профилей. Как видно на рис. 2, величина δN_Q не зависит от ΔV и при малых ΔV совпадает с δN_V . Рост величины δN_V при больших значениях ΔV объясняется, как уже отмечалось, более высоким порядком аппроксимации по ΔV , чем у δN_Q . Расчеты при больших шагах травления показали, что значения δN_Q и δN_V при малых ΔV определяются разностной аппроксимацией второй пространственной производной и зависят в основном от Δx . Следует отметить, что рассматриваемая интегральная мера отклонения (9) вычисленного профиля от истинного не в полной мере отражает качество восстановления, что демонстрируется вставкой на рис. 2, где приведены восстановленные

профили легирования при фиксированных Δx и ΔV . Хорошо видно, что *Q*- и *V*-формулы дают более высокое разрешение при восстановлении резкого скачка в распределении примесей, а видимый профиль, как известно, такой скачок сглаживает.

Таким образом, для рассмотренных профилей легирования предложенные *Q*- и *V*-формулы дают более точный результат, если исходные данные не содержат ошибки. Такой же вывод вытекает из результатов восстановления распределения примесей в структурах с многократным резким изменением легирования [9,10]. По-видимому, это утверждение справедливо и для более широкого класса экспериментально реализуемых профилей.

3.2. Влияние погрешности измерений

Одним из наиболее важных вопросов практического применения той или иной формулы является вопрос о влиянии погрешностей измерения на точность восстановления профиля легирования. При наличии случайных ошибок измерений погрешность в восстановлении профиля легирования можно представить как сумму трех слагаемых:

$$\delta N_\alpha = \delta_\alpha^f + \delta_\alpha^d + \delta_\alpha^C, \quad \alpha = A, Q, V, \quad (12)$$

где δ_α^f и δ_α^d те же, что и в (10), а δ_α^C — погрешность, связанная с неточностью измерения емкости *C*. В реальном эксперименте источниками ошибок δC в значении *C* являются как ошибки измерения самой емкости δC_0^C , так и ошибки измерения напряжения δV , объема стравленного материала δu и площади дна кратера травления δS , т.е.

$$\delta C = \delta C_0^C + M_1 \delta V + M_2 \delta u + M_3 \delta S,$$

где постоянные M_i определяются значениями емкости $C(x, V)$ и ее производных $\partial C/\partial x$ и $\partial C/\partial V$. В проведенных нами численных экспериментах в основном исследовалось влияние суммарной ошибки δC на точность восстановления профиля легирования.

Чтобы смоделировать погрешности измерения, к каждому значению емкости C_{ij} , где $i = 1, 2, \dots, I$; $j = 1, 2, \dots, J$, полученному в результате решения уравнения Пуассона (4), добавлялась гауссовская случайная величина ξ_{ij} с нулевым средним значением и дисперсией σ_C/C_{ij} , т.е. для восстановления профиля легирования использовалась таблица значений

$$\tilde{C}_{ij} = C_{ij}(1 + \xi_{ij}).$$

В качестве относительной погрешности δC рассматривалась величина $\delta C = 3\sigma_C$. Дополнительно был проанализирован вклад, который дает в погрешность восстановления профиля легирования ошибка δS — ошибка измерения площади дна кратера травления. Для этого к величине *S* добавлялась гауссовская величина η с нулевым средним значением и дисперсией σ_S/S и вычисления проводились с площадью

$$\tilde{S} = S(1 + \eta),$$

при этом относительная погрешность δS в определении *S* выбиралась равной $\delta S = 3\sigma_S$.

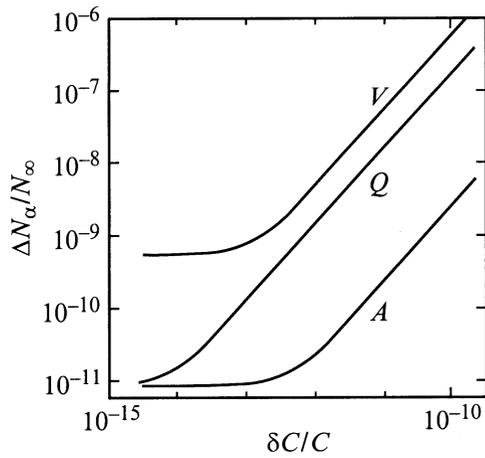


Рис. 3. Зависимости погрешности восстановления однородного профиля легирования (A-, Q- и V-формулы) от погрешности измерения емкости; $\Delta V/V = 0.0133$, $\Delta x/\lambda_D = 0.165$.

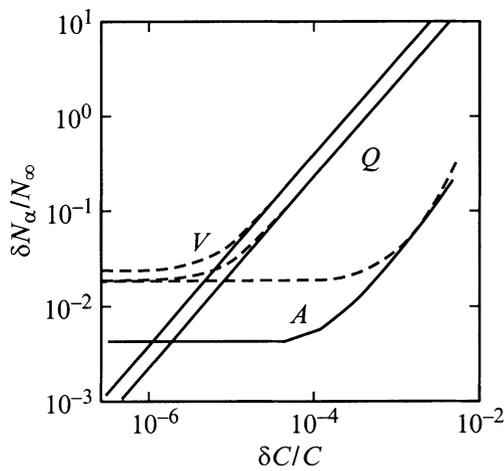


Рис. 4. Погрешность восстановления линейного профиля легирования (A-, Q- и V-формулы) при $\delta S = 0$ (сплошные линии) и $\delta S = 0.03$ (штриховые линии); $\Delta V/V = 0.0133$, $\Delta x/\lambda_D = 0.165$.

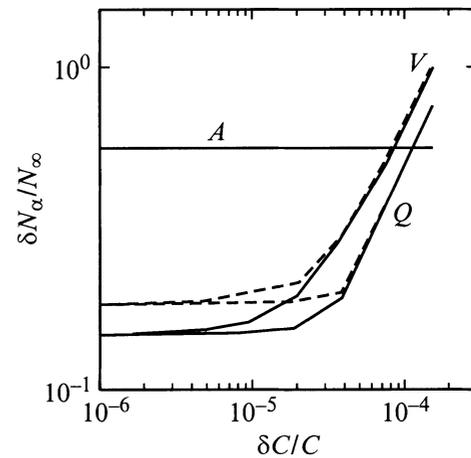


Рис. 5. Погрешность восстановления функции Хевисайда (A-, Q- и V-формулы) при $\delta S = 0$ (сплошные линии) и $\delta S = 0.09$ (штриховые линии); $\Delta V/V = 0.0133$, $\Delta x/\lambda_D = 0.165$.

В качестве погрешности восстановленного профиля легирования рассматривалось его максимальное среднеквадратичное отклонение от истинного профиля:

$$\delta N_A = \max_i \sqrt{\langle [\hat{N}_A(x_{di}) - N(x_{di})]^2 \rangle},$$

$$\delta N_\alpha = \max_i \sqrt{\langle [\hat{N}_\alpha(x_i) - N(x_i)]^2 \rangle}, \quad \alpha = Q, V,$$

где угловые скобки $\langle \rangle$ обозначают усреднение по случайным величинам ξ_{ij} и η .

На рис. 3 приведены погрешности δN_α восстановления однородного профиля легирования с помощью A-, Q-, V-формул в зависимости от погрешности измерения емкости δC , при этом площадь S дна кратера задана точно. На рисунке видно, что погрешности Q- и V-формул значительно больше, чем A-формулы, даже при очень малых δC .

Влияние ошибок измерений на точность восстановления линейного профиля и функции Хевисайда иллюстрируют рис. 4 и 5, где сплошными линиями показаны погрешности восстановления при $\delta S = 0$, а пунктирными — при $\delta S = 0.03$ (рис. 4) и $\delta S = 0.9$ (рис. 5). Здесь также отмечается более быстрый рост погрешностей δN_Q и δN_V по сравнению с δN_A при увеличении δC . При этом уже при малых δC (рис. 4) погрешности Q- и V-формул превышают погрешность A-формулы и становятся неприемлемо большими при $\delta C/C \approx 3 \cdot 10^{-4}$. Ошибка в несколько процентов в измерении S дает заметный вклад в суммарную погрешность восстановления лишь при малых значениях $\delta C/C \leq 10^{-5}$.

Зависимость погрешности δN_A видимого профиля от величины погрешности измерения δC проявляется при значительно больших значениях δC , чем для Q- и V-формул. При этом величина δN_A остается приемлемой

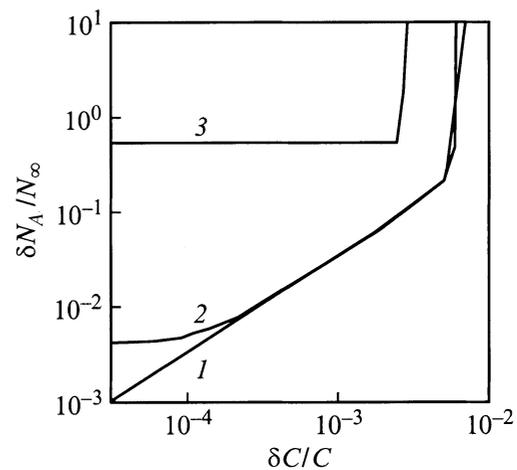


Рис. 6. Зависимости погрешности видимого профиля легирования от погрешности измерения емкости для однородного профиля (1), линейного (2) и в виде функции Хевисайда (3); $\Delta V/V = 0.0133$, $\Delta x/\lambda_D = 0.165$.

вплоть до $\delta C \approx (2-5) \cdot 10^{-3}$ (рис. 6). Это позволяет использовать *A*-формулу для обработки данных, полученных в реальном эксперименте, поскольку стандартная аппаратура, используемая в таких измерениях [14], обеспечивает погрешность $\delta C/C \approx 10^{-3}$. Интересно отметить, что численные эксперименты указывают на наличие критического значения δC , выше которого восстановление профиля легирования становится невозможным (рис. 6).

Таким образом, приведенные результаты численного моделирования показывают, что *Q*- и *V*-формулы более чувствительны к ошибкам измерения данных, чем *A*-формула. При этом относительная погрешность $\delta C/C$, при которой ошибки *Q*- и *V*-формул не превышают ошибку видимого профиля, оказывается меньше, чем $\sim 7 \cdot 10^{-5}$. Причину такой чувствительности к ошибкам исходных данных можно понять, поскольку *Q*- и *V*-формулы содержат вторую пространственную производную емкости, а, как известно, численное дифференцирование табличных данных с ошибками дает большие погрешности.

4. Заключение

С помощью численного моделирования в работе проанализированы три метода восстановления распределения легирующей примеси в полупроводниковых структурах по данным *C*-*V*-измерений в электрохимической ячейке. Показано, что предложенные авторами *Q*- и *V*-формулы [9,10] не только позволяют определить профиль легирования непосредственно на контакте электролит-полупроводник, но и дают более точный результат, чем традиционно используемый видимый профиль [1]. Однако при практическом применении этих формул следует иметь в виду, что их погрешность гораздо сильнее зависит от погрешности измерения емкости, чем погрешность видимого профиля. Расчеты показали, что для получения приемлемых результатов по *Q*- и *V*-формулам относительная погрешность измерения емкости не должна превышать величины $\sim 5 \cdot 10^{-4}$.

Вообще, проблема высокой чувствительности результатов к ошибкам исходных данных является основным препятствием применения предложенных в последнее время новых методов восстановления профиля легирования [5,6,8]. Источником подобных трудностей является то обстоятельство, что задача восстановления профиля легирования представляет собой обратную задачу, которая является некорректной. Поэтому для построения работоспособных схем восстановления необходимы детальные исследования приближений и т. п.

Авторы выражают благодарность И.А. Шерешевскому и А.В. Мурелю за многочисленные плодотворные обсуждения.

Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 98-02-1624) и программой МНТП "Физика твердых наноструктур".

Дискретизация формул восстановления

Для производных по напряжению и координате, входящих в выражение для *A*- и *Q*-формул, были использованы центральные разности

$$\hat{N}_A(x_{d_i}) = \left(\frac{1/C_{ij+1}^2 - 1/C_{ij-1}^2}{V_{j+1} - V_{j-1}} \right)^{-1},$$

$$x_{d_i} = x_i + \frac{1}{C_{ij}}, \quad j = 2, \dots, J-1.$$

Заметим, что иногда формулу (1) записывают в эквивалентной форме

$$N_A(x_{d_i}) = -C^3(x, V) \left/ \frac{\partial C(x_i, V)}{\partial V} \right. \quad (\text{П. 1})$$

и используют соответствующий дискретный аналог. Однако формула (1) предпочтительней, поскольку она дает более точный ответ для однородного профиля легирования. Это связано с тем, что для такого профиля функция $1/C^2(x, V)$ близка к линейной по *V*, и, следовательно, погрешность дискретизации очень мала (см. разд. 3).

Дискретный аналог *Q*-формулы имеет вид

$$\hat{N}_Q(x_i) = Q_{ij}C_{ij} - (Q_{i+1,j} - Q_{i-1,j}) / (x_{i+1,j} - x_{i-1,j}),$$

$$Q_{ij} = \left(1 + \frac{1/C_{i+1,j} - 1/C_{i-1,j}}{x_{i+1,j} - x_{i-1,j}} \right) \left/ \left(\frac{1/C_{i,j+1} - 1/C_{i,j-1}}{V_{j+1} - V_{j-1}} \right) \right.,$$

$$i = 2, 3, \dots, I-1, \quad j = 2, 3, \dots, J-1.$$

Основная сложность дискретизации *V*-формулы связана с оценкой производной $\partial^2 \psi_i / \partial x^2$, для которой необходимо знать значения электростатического потенциала $\psi_i(x, V)$ на трех последовательных шагах травления $\psi_i(x_{i-1}, V)$, $\psi_i(x_i, V)$, $\psi_i(x_{i+1}, V)$, а нам известно лишь значение на *i*-м шаге $\psi_i(x_i, V) = V$. Для нахождения значений $\psi_i(x_{i-1}, V)$, $\psi_i(x_{i+1}, V)$ была использована следующая процедура. Считая стравленный слой последовательно включенным плоским конденсатором, можно определить емкость $\tilde{C}_{i-1,j}$ на (*i*-1)-м шаге травления из соотношения

$$1/\tilde{C}_{i-1,j} = (x_i - x_{i-1}) + 1/C_{ij}.$$

Затем по таблице $C_{i-1,j} = C(x_{i-1}, V_{i-1,j})$, $j = 1, 2, \dots, J$, путем обратной интерполяции находится напряжение $\tilde{V}_{i-1,j}$, соответствующее емкости $\tilde{C}_{i-1,j}$. Для интерполяции строится многочлен $P_{J-2}(C)$ степени $J-2$ методом наименьших квадратов по значениям $V_{i-1,1}, V_{i-1,2}, \dots, V_{i-1,J}$ и затем находится $\tilde{V}_{i-1,j} = P_{J-2}(\tilde{C}_{i-1,j})$. Аналогично находится значение

$\tilde{V}_{i+1,j}$ на $(i+1)$ -м шаге травления. Тогда профиль легирования определяется как

$$\hat{N}_V(x_i) = \frac{\tilde{V}_{i-1,j} - 2V_{i,j} + \tilde{V}_{i+1,j}}{(x_{i+1} - x_i)(x_i - x_{i-1})},$$

$$i = 2, 3, \dots, I-1; \quad j = 1, 2, \dots, J.$$

Это наиболее простой способ конечно-разностной аппроксимации второй производной $\partial^2 \psi_i / \partial x^2$. Другой подход описан в работе [10].

Список литературы

- [1] В.В. Батавин, Ю.А. Концевой, Ю.Ф. Федорович. *Измерение параметров полупроводниковых материалов и структур* (М., Радио и связь, 1985).
- [2] P. Blood. *Semicond. Sci. Technol.*, **1**, 7 (1986).
- [3] M.M. Faktor, T. Ambridge, E.G. Bremmer. *Apparatus and Method for Measuring Carrier Concentration in Semiconductor Materials* [U.K. Patent Specification No. 1482929 (1975)].
- [4] M.M. Faktor, T. Ambridge, C.R. Elliott, J.C. Regnault. *Current Topics in Material Science*, ed. by E. Kuldis (1980) v. 6, p. 1.
- [5] G.J.L. Quwerling. *Sol. St. Electron.*, **33**, 757 (1990).
- [6] K. Iniewski, C.A.T. Salama. *Sol. St. Electron.*, **34**, 309 (1991).
- [7] 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.
- [8] Y.K. Yeo, G.H. Gainer, Jr, Jong Hyun Kin, R.L. Hengehold. *Appl. Phys. Lett.*, **56**, 75 (1990).
- [9] В.И. Шашкин, И.Р. Каретникова, А.В. Мурель, И.М. Нefeldов, И.А. Шерешевский. *ФТП* **31**, 8 (1997).
- [10] V. Shashkin, I. Karetnikova, A. Murel, I. Nefedov, I. Shereshevskii. *IEEE, Trans. Electron. Dev.*, **6**, 47 (2000).
- [11] W.C. Johnson, P.T. Panousis. *IEEE Trans. Electron. Dev.*, **ED-18**, 965 (1971).
- [12] B. Jogonal, C.E. Stutz. *Appl. Phys.*, **78**, 2531 (1995).
- [13] L.H. Hollway. *IEEE Trans. Electron. Dev.*, **37**, 1104 (1990).
- [14] И.В. Ирин, А.В. Мурель. *ПТЭ*, № 6, 150 (1993).

Редактор Т.А. Полянская

On the accuracy of the semiconductor doping profile extraction on the basis of $C-V$ measurements in the process of electrochemical etching

I.R. Karetnikova, I.M. Nefedov, V.I. Shashkin

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

Abstract Based on numerical simulation, the errors inherent in different methods for the extraction of a dopant distribution in semiconductors from the data on voltage-capacitance measurements in an electrochemical cell are analysed. It is shown that the two methods proposed by the authors earlier not only allow to determine the doping profile directly on a structure surface, but also provide a better accuracy than the conventional approach. However, these methods impose higher requirements to the accuracy of measurements. To ensure their successful application, a relative error of measurements should be not worse than $5 \cdot 10^{-4}$, which is about an order of magnitude higher than the level of an ordinary experiment.