



**I
N
A
O
E**

**Instituto Nacional de Astrofísica, Óptica y
Electrónica.**

*CRECIMIENTO Y PROPIEDADES DEL
ÓXIDO Y SU INTERFASE CON SILICIO
DE ALTO ÍNDICE CRISTALINO .*

Tesis que presenta el M.C. **Ramiro
Rogelio Rodríguez Mora** para obtener el
Grado de Doctorado en la especialidad de
Electrónica

Dirigida por:

Dr. Francisco Javier De la Hidalga Wade.

TONANTZINTLA, PUEBLA, MARZO DE 2009.

©INAOE 2009

Derechos Reservados

El autor otorga al INAOE el permiso de reproducir y
distribuir copias de esta tesis en su totalidad o en partes.



Agradecimientos

Agradezco a mi esposa Celeste por el apoyo que me ha brindado para terminar esta tesis.

A mis amigos, que me han impulsado a continuar con este trabajo.

A mi asesor F. J. de la Hidalga Wade por su ayuda y asesoría.

A los sinodales Dr. Don L. Kendall, Dr. Joel Molina Reyes, Dr. Alfonso Torres Jacome, Dr. Oleksandr Malik y Dr. Wilfrido Calleja Arriaga por sus correcciones al trabajo.

A todo el personal del laboratorio de microelectrónica, Dr. Carlos Zúñiga, Leticia, Rosi, Mauro Landa, Nacho, Pablo, Juan Manuel, Netzahualcoyotl, Adrian, Manuel y Daniela.

Al Dr. Roberto Murphy Arteaga por el apoyo de la institución.

Al CONACyT por su apoyo a través de la beca 158493 y el proyecto C01-39886.

Al CONCYTEP por el apoyo a través de la Beca-Tesis 2008 y a su director general Dr. Jaime Díaz Hernández

Resumen

La tecnología actual de circuitos integrados utiliza sustratos de silicio (0 0 1) y (1 1 1). En este trabajo se analizan en las orientaciones (0 0 1), (1 1 4), (1 1 3), (7 7 17), (5 5 12), (1 1 2), (1 1 1) y (1 1 0) las características de crecimiento de óxido (siguiendo el modelo de Deal y Grove), índice de refracción del óxido, carga efectiva, función trabajo efectiva del metal, densidad de estados en la interfase y carga iónica móvil. Esto con el fin de caracterizar procesos para la fabricación de tecnología en silicio de alto índice cristalino.

Se realizaron 6 procesos de oxidación a 1000, 925 y 850°C, en total 18, para encontrar las constantes de crecimiento lineal y parabólico de cada orientación y los índices de refracción del óxido a cada temperatura. A estos procesos se agregaron uno sin tratamientos térmicos de reducción de cargas, como conjunto de comparación, y un proceso estándar de óxido de compuerta del proceso CMOS-INAOE.

Los resultados de las constantes de crecimiento de óxido mostraron en general el comportamiento de tener velocidades de crecimiento mayores conforme la orientación de silicio se aleja de (0 0 1). Sin embargo, se encontraron velocidades mas altas de lo esperado en (1 1 4) y (1 1 3), ya que superaron a la orientación (5 5 12).

En índice de refracción se encontró independencia de la orientación cristalina y dependencia del grosor de óxido. A mayor temperatura se encontró menor índice de refracción y, por lo tanto, menor tensión en el óxido.

La función trabajo efectiva no tiene dependencia de la orientación cristalina ni de la temperatura de oxidación, parece tener un comportamiento aleatorio.

La densidad de carga efectiva se calculó mediante 3 métodos, el tradicional de corrimiento del voltaje de banda plana, mediante el corrimiento del voltaje de banda plana junto con la función trabajo efectiva y mediante el corrimiento del voltaje de media banda con la función trabajo efectiva. El típico comportamiento de crecimiento de la carga efectiva junto con la orientación cristalina sólo se observó para el método tradicional de corrimiento de voltaje de banda plana. Para los otros métodos no se encontró dependencia de la orientación cristalina.

La densidad de estados en la interfase mostró muy poca dependencia de la orientación cristalina en los procesos que siguieron tratamientos térmicos para reducir dichas cargas. El proceso que no siguió tratamientos térmicos mostró una clara dependencia de la orientación cristalina, creciendo conforme se aleja la orientación de (0 0 1).

Se obtuvo la carga iónica móvil y se modificó el cálculo para obtener densidades de carga iónica móvil efectivas.

Los resultados se aplicaron para obtener una estimación de la carga fija.

Summary.

Today's CI's technology uses silicon substrates with (0 0 1) and (1 1 1) orientations. In this work are analyzed the oxide grow (using Deal and Grove model), oxide refraction index, effective charge, effective metal work function, interface states density and ionic mobile charge on (0 0 1), (1 1 4), (1 1 3), (7 7 17), (5 5 12), (1 1 2), (1 1 1) and (1 1 0) orientations. The objective is to characterize CI fabrication processes applicable on high index silicon.

Were conducted 6 oxidation processes at 1000, 925 and 850°C, a total of 18 processes, to find in each orientation the linear and parabolic grow constants and the refraction indexes in every orientation. An extra process was added without charge reduction thermal treatment, as a reference set, as well as a standard CMOS-INAOE gate oxide process with the same propose.

Oxide grow constants results show a higher oxidation rate as silicon orientation goes a way from (0 0 1). However oxidation rates higher than expected were found on (1 1 4) and (1 1 3) orientations, since they were higher than (5 5 12) oxidation rate.

On refractive index was found independence upon crystal orientation, but oxide thickness dependence. At higher oxidation temperatures was found lower refraction index and, hence, lower oxide tension.

The metal effective work function do not has any dependence on crystal orientation, and it seems show a random behavior.

Effective charge density was calculated by 3 methods, the wide used flat band voltage shift, flat band voltage shift using the metal effective work function and using the mid gap voltage shift with metal effective work function. The typical behavior of growing in effective charge as crystal orientation goes away from (0 0 1) was observed only in the traditional flat band shift method. For other methods was not found any crystal orientation dependence.

Interface states density shown poor dependence on crystal orientation on processes conducted with charge reduction thermal processes. The process without thermal treatment shown palpable dependence on crystal orientation, growing as orientation goes a way from (0 0 1).

Ionic mobile charge was obtained and the method was modified to obtain effective ionic mobile charge.

Results were applied to obtain a fixed charge estimation.

Índice

CRECIMIENTO Y PROPIEDADES DEL ÓXIDO Y SU INTERFASE CON SILICIO DE ALTO ÍNDICE CRISTALINO.....	i
Agradecimientos	iii
Resumen	v
Summary.....	vii
Índice	ix
Introducción general.....	1
El desarrollo actual de la tecnología MOS.....	1
Tecnología de silicio dependiente de la orientación	2
Posibles aplicaciones de silicio en alto índice.....	4
El spikeMOS.	6
Objetivos de este trabajo de tesis.	8
Capítulo 1	11
Estructura superficial del silicio de (0 0 1) a (1 1 0).....	11
1.1 Introducción.	11
1.2 Reducción de la energía superficial.	13
1.3 Orientación (0 0 1).	14
1.4 Orientación (1 1 4).	15
1.5 Orientación (1 1 3).	16
1.6 Orientación (7 7 17).	17
1.7 Orientación (5 5 12).	17

1.8 Orientación (1 1 2).	19
1.9 Orientación (1 1 1).	20
1.10 Orientación (1 1 0).	21
1.11 Densidades de átomos y enlaces en las superficies.....	21
1.12 Conclusiones.	23
Capítulo 2	25
Parámetros dependientes de la orientación cristalina	25
2.1 Introducción.	25
2.2 Cinética de crecimiento del óxido térmico.....	26
2.2.1 Modelo de Deal y Grove.	26
2.2.2 Dependencias y desviaciones del modelo.	29
2.2.3 Dependencia de la oxidación con respecto a la orientación cristalina.	31
2.3 Cargas en el sistema MOS.	34
2.4 Carga atrapada en el óxido Q_{ot}	36
2.4.1 Origen de Q_{ot}	36
2.4.2 Efectos de Q_{ot}	36
2.4.3 Cuantificación de Q_{ot}	37
2.4.4 Reducción de Q_{ot}	37
2.5 Carga iónica móvil Q_m	38
2.5.1 Origen de Q_m	38
2.5.2 Efectos de Q_m	39
2.5.3 Reducción de Q_m	40
2.6 Carga fija en la interfase Q_f	40
2.6.1 Origen de Q_f	40
2.6.2 Efectos de Q_f	42
2.6.3 Reducción de Q_f	43
2.6.4 Dependencia de Q_f con la orientación.	44
2.7 Estados en la interfase Q_{it}	47

2.7.1 Origen de Q_{it}	47
2.7.2 Efectos de Q_{it}	48
2.7.3 Reducción de Q_{it}	49
2.7.4 Dependencia de Q_{it} con la orientación.	50
2.8 Dipolos en el sistema MOS.....	52
2.8.1 Origen de los dipolos.....	52
2.8.2 Efectos de los dipolos.....	55
2.8.3 Dependencia de los dipolos con la orientación.	56
2.9 Conclusiones.	57
Capítulo 3	59
Métodos de caracterización	59
3.1 Introducción.	59
3.2 Elipsometría.	59
3.2.1 Principio físico de operación.....	60
3.2.2 Elipsometría Nula.....	66
3.2.3 Elipsometría Rotativa.....	67
3.3 Mediciones capacitancia-voltaje de alta frecuencia.	69
3.3.1 Grosor de óxido.....	69
3.3.2 Dopado del sustrato.....	70
3.3.3 Densidad de carga efectiva en el óxido.	72
3.3.4 Determinación de dipolos.....	77
3.3.5 Estados en la interfase.....	79
3.3.6 Carga iónica móvil.	81
3.4 Mediciones de capacitancia de alta-baja frecuencia.....	82
3.5 Equipo de caracterización.	84
3.6 Conclusiones.	85
Capítulo 4	87
Procedimiento experimental y resultados	87
4.1 Introducción.	87

4.2 Procedimiento experimental.....	88
4.2.1 Procesos de oxidación térmica seca.	88
4.2.2 Diseño de procedimientos de fabricación.	90
4.2.3 Capacitores con compuerta de aluminio.	92
4.3 Grosor de óxido t_{ox} y constantes B y B/A.	94
4.4 Índice de refracción N.	105
4.5 Función trabajo efectiva ϕ_{meff}	113
4.6 Densidad de carga efectiva N_{eff}	119
4.7 Densidad de estados en la interfase D_{it}	135
4.8 Carga Iónica móvil N_m	141
4.9 Discriminación de densidades de cargas.	144
4.10 Conclusiones.	146
Capítulo 5	149
Conclusiones	149
Apéndice.....	153
Índice de figuras	163
Índice de tablas	171
Referencias	175

Introducción general

El desarrollo actual de la tecnología MOS

La tecnología de semiconductores ha avanzado rápidamente en los aspectos de consumo de energía, densidad de integración, velocidad de procesamiento, área máxima de chip y costo. Sin embargo los rápidos avances en densidad de integración y velocidad pronto serán incapaces de mantenerse al ritmo actual dadas las limitantes físicas.

La densidad de componentes está limitada actualmente por la litografía. Para obtener litografías menores a 100nm se podrían emplear varias técnicas[1], tales como proyección láser, proyección mediante haz de electrones, proyección mediante rayos X, proyección mediante haz de iones, luz ultravioleta extrema y posiblemente litografía mediante Microscopía de Fuerza Atómica (AFM).

Aún cuando la litografía sea superada pronto, a futuro se llegará a las limitaciones físicas de los materiales, dadas las distancias interatómicas. Éste problema ya se está presentando en los óxidos de compuerta, con grosores de 40Å [2] y hasta 8 Å [3], en los que la estructura de compuerta ya tiene sólo unas cuantas distancias interatómicas de grosor.

Una solución es la investigación de nuevos materiales que puedan proporcionar mejores características a dimensiones comparables a las usadas actualmente en silicio, tales como substratos aislantes SOI, investigaciones en GaAs y otras. Sin embargo el uso de nuevos materiales implica el nuevo desarrollo de

muchos procesos optimizados para el nuevo material y además perder las ventajas que tiene el silicio, sobre todo su economía.

Otra solución que modificaría menormente la tecnología actual es el aprovechar características del silicio que no se han explotado hasta el momento, tales como la orientación cristalina.

Tecnología de silicio dependiente de la orientación

El desarrollo de la tecnología de silicio llevó desde su inicio a la experimentación con diversas orientaciones del sustrato, llevando al uso de la orientación (0 0 1) en dispositivos MOS por la baja densidad de cargas en la interfase SiO₂-Si; por otra parte la orientación (1 1 1) se utiliza en dispositivos bipolares por sus mejores características para crecimiento epitaxial.

Sin embargo, continuamente se ha experimentado con otras orientaciones buscando otros fines específicos, a continuación se mencionan algunos ejemplos.

- En tópicos generales de tecnología de silicio: Dispersión de carga anisotrópica en los sustratos (0 0 1) y (1 1 0) [4], características de pozos cuánticos sobre silicio (0 0 1) y (1 1 0) [5 y 6], nuevos dieléctricos en (0 0 1), (1 1 1) y (1 1 0) [7], formación de macro poros en (0 0 1), (1 1 5), (5 5 12) y (1 1 1) [8], RTP de anealing en (0 0 1), (1 1 1) y (1 1 0) [9], etc.
- Específicamente en MOSFETS: CMOS simétricos sobre (1 1 0) para aplicaciones en baja temperatura [10], alto desempeño de MOSFETS en sustratos de silicio híbridos (0 0 1)-(1 1 0) [11], efecto de las orientaciones en MOSFETS verticales [12], MOSFETS verticales disparados por diodos p-i-n en (0 0 1) y (1 1 1) [13], orientación óptima para MOSFETS en bajas temperaturas, (1 0 0), (3 1 1), (1 1

1) y $(1\ 1\ 0)$ [14]; e inclusive se han experimentado orientaciones en otros semiconductores, como los efectos en MOSFETS fabricados en GaAs $(1\ 0\ 0)$, $(0\ 1\ 1)$, GaAs (Ga) $(1\ 1\ 1)$ y GaAs (As) $(1\ 1\ 1)$ [15], etc.

Una mención especial son los trabajos desarrollados en el INAOE usando las orientaciones $(0\ 0\ 1)$, $(1\ 1\ 4)$ y $(5\ 5\ 12)$.

1. Densidad de cargas en la interfase [16-18][18], demostrando una dependencia de la carga efectiva y de estados en la interfase respecto a la orientación, así como dependencia también del grosor de óxido [19 y 20] y descripción de la obtención de obleas de alto índice [21].

2. Transistores en direcciones colineal y transversal a la textura superficial [22] y [23], encontrando que los MOSFETs con canal perpendicular a los surcos tienen menor movilidad que los que presentan el canal paralelo a los surcos, evidenciando la dependencia del desempeño del dispositivo con la orientación del canal con respecto a la dirección de los surcos superficiales.

3. Variaciones del ángulo respecto a esta textura superficial y estudios de perfiles para implantación iónica y difusión [24]. Respecto a los ángulos se encontró en alto índice una marcada anisotropía dependiente del ángulo del canal con respecto a la textura superficial, pudiendo tener movilidades incluso mejores a $(0\ 0\ 1)$ [24-28]. En difusión de impurezas (B y P) se encontró independencia de la orientación para ambientes no oxidantes y dependencia en ambientes oxidantes [29], y finalmente en implantación iónica se encontró una débil dependencia con la orientación cristalina, [30 y 31].

Estos trabajos de investigación están orientados a la caracterización de estas superficies en procesos de fabricación CMOS, con el propósito de desarrollar una tecnología optimizada para ellas.

Posibles aplicaciones de silicio en alto índice.

Generalmente la rugosidad superficial es considerada como un defecto de la interfase que se debe evitar [32]; sin embargo, existen propuestas para aprovecharla. La superficie (5 5 12) se estudia actualmente porque su celda unitaria superficial es de gran tamaño comparada con las celdas de otras superficies estables, y muy pequeña comparada con las geometrías obtenida mediante litografía. Esta periodicidad puede ser útil en varias aplicaciones, como el depósito de materiales, interfase de heteroestructuras, micromaquinado [8] y, dada su morfología de surcos, puede ofrecer comportamiento de confinamiento cuántico en la superficie.

Algunas de las ideas para aprovechar los surcos superficiales de las orientaciones de alto índice son:

- 1.-La fabricación de nano alambres de plata [33], dado que este elemento se deposita preferencialmente en líneas sobre la superficie (5 5 12).
- 2.-Trincheras para depositar fullerenos y crear superconductores a alta temperatura, esto por el posible grabado entre surcos, con el que se pueden obtener trincheras.
- 3.- Transistores MOS de alta velocidad en dimensiones micrométricas, obtenidos mediante el canal colineal con los surcos superficiales. Si los espacios entre surcos se encuentran libres de defectos en su mayoría, se pueden esperar efectos de sobretiro (overshoot) en la conducción eléctrica superficial.
- 4.- Emulación de transistores MOS con características multi compuerta LRTFET (Lateral Resonant Tunneling FET) [34], y de superred lateral [35]. En canales perpendiculares a los surcos de la superficie se crearía un potencial periódico que emula el potencial multi compuerta.

Dentro de estas aplicaciones las de más impacto podrían ser en los transistores MOS. Los dispositivos multi compuerta usan compuertas sub micrométricas perpendiculares al canal micrométrico, de tal manera que su polarización causa un potencial periódico superficial a lo largo del canal. Sobre todas estas compuertas se coloca una compuerta que las cubre en su totalidad, Figura 1. Las compuertas sub micrométricas modulan el potencial superficial bajo ellas, mientras que la compuerta superior modula el potencial superficial del área sin cubrir por las compuertas sub micrométricas. Para simular el mismo efecto se usa litografía en la superficie del silicio para crear pozos de potencial mediante patrones de surcos en la superficie del silicio en vez de las compuertas sub micrométricas; a esto último se le llama superred lateral [36]. Finalmente, la utilidad potencial de la superficie (5 5 12) es el uso de sus surcos periódicos sin necesidad de litografía.

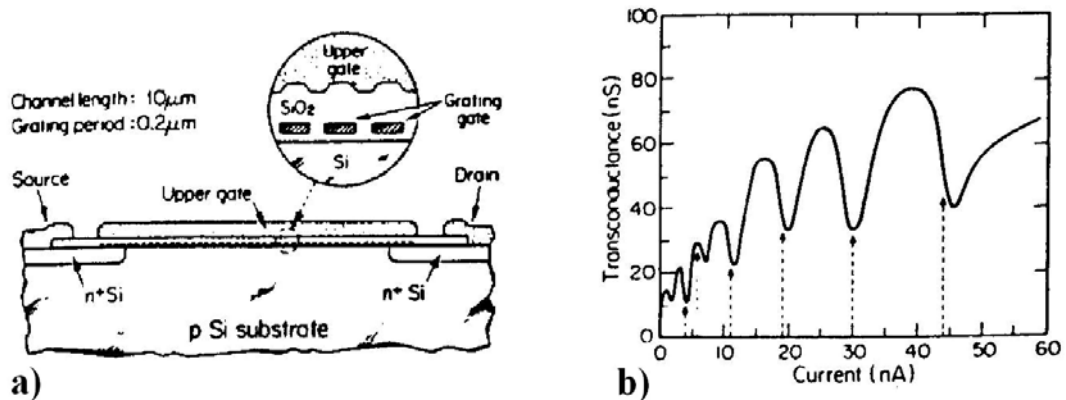


Figura 1 MOSFET multi compuerta [35], a) estructura física de compuertas sub micrométricas cubiertas por una compuerta superior micrométrica, b) comportamiento de la transconductancia. $T=1.2K$.

En todas las aplicaciones mencionadas anteriormente la clave fundamental se encuentra en aprovechar las características de los surcos en la superficie. Es de gran importancia hacer notar que el periodo entre surcos en (5 5 12) es de 5.35 nm; este valor se encuentra muy por debajo de las geometrías que es posible obtener con

litografía de Rayos X, que es de 50nm [34], e incluso por debajo de los 32 nm de la litografía mediante AFM [37].

El spikeMOS.

En noviembre de 2000, se fabricaron transistores MOS en el laboratorio de microelectrónica del Instituto Nacional de Astrofísica, Óptica y Electrónica, INAOE, empleando substratos Si-(5 5 12). D. Kendall, basado en análisis estructurales de la superficie Si-(5 5 12) realizados por A. Baski, predijo que los transistores MOS en estos planos poseerían un comportamiento inusual debido al efecto de potencial periódico superficial sobre los portadores en el canal de inversión. En este proceso de fabricación se encontró un dispositivo con características fuera de lo común (spikeMOS), presentando en sus curvas de salida 15 picos con gran regularidad (siempre en múltiplos de 0.155V) implicando que era producto de la topografía superficial, Figura 2; además, en las curvas de transferencia se observaron protuberancias que indican que la existencia de los picos se debía a un efecto intrínseco al transistor en esas orientaciones, Figura 3. Las aplicaciones propuestas por D. Kendall para estos dispositivos incluyen [38-44]:

- Osciladores en muy alta frecuencia. Al aprovechar la resistencia negativa en los picos de las curvas de salida.
- Aplicaciones de baja potencia. Si se considera el uno lógico en la posición del primer pico, se necesitaría un voltaje pequeño para llegar a ese pseudo estado de “saturación”.
- Dispositivos hasta con 16 niveles lógicos. Si cada pico puede ser interpretado como un nivel lógico.
- Generador de voltajes de referencia con precisión de 4 dígitos. Por la precisión en la posición de los picos en Vd.
- Sensores, filtros y nanoestructuras. Al manipular las propiedades de la estructura superficial.

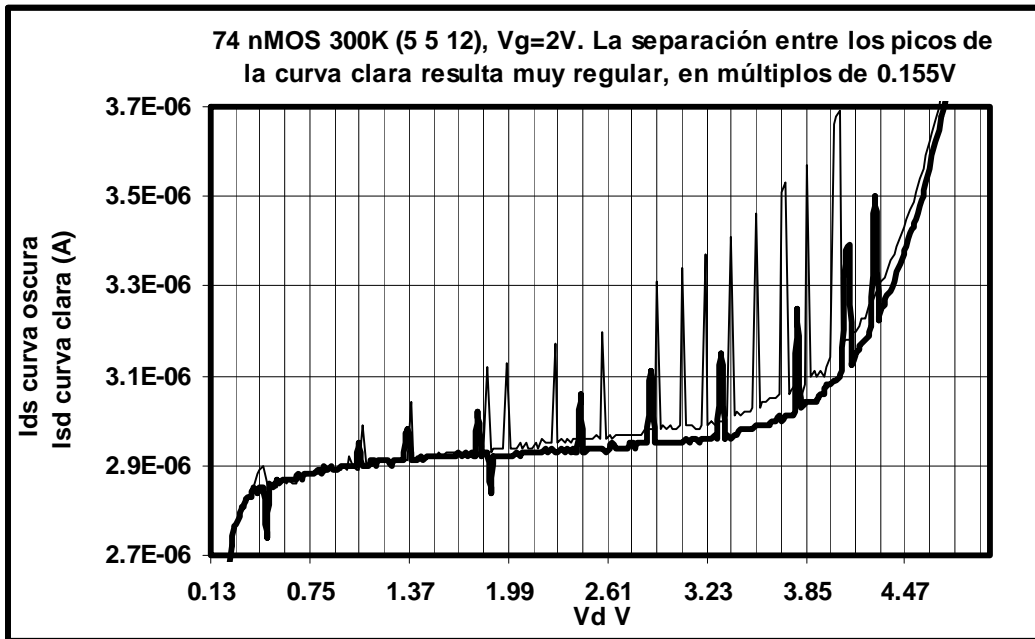


Figura 2 Curva de salida del SpikeMOS [42]. La presencia de picos con muy alta periodicidad, siempre en múltiplos de 0.155V atribuida a las características estructurales de la superficie en (5 5 12).

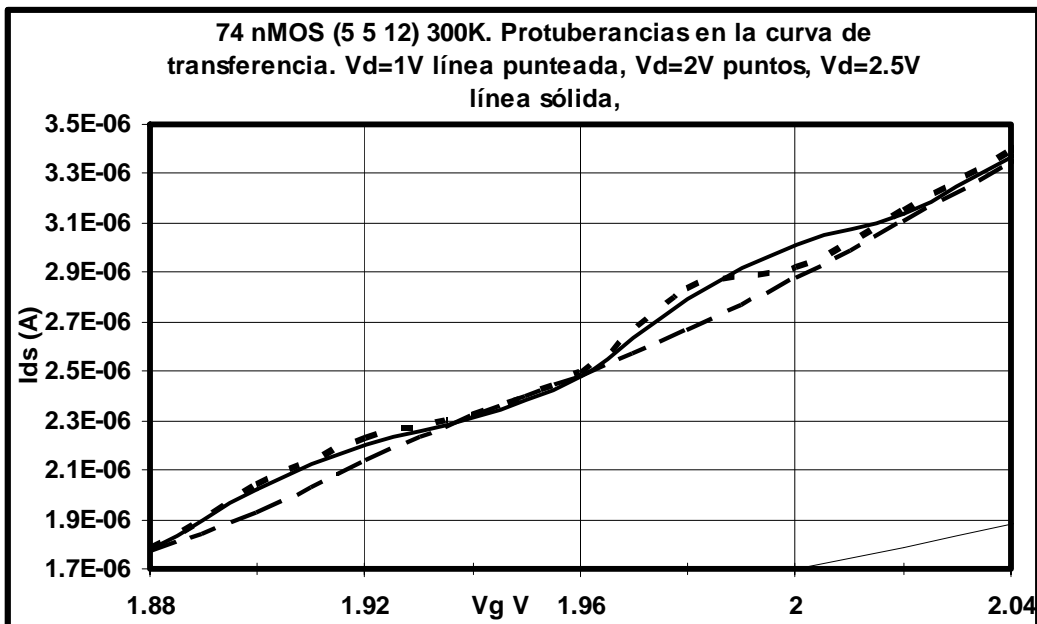


Figura 3 Curva de transferencia del SpikeMOS [42]. Se aprecian protuberancias que indican que los picos en las curvas de salida no se deben a efectos aleatorios, sino que están relacionados con la estructura superficial en Si-(5 5 12).

Actualmente Kendall y colaboradores tratan de explicar los mecanismos físicos que originaron el comportamiento de este dispositivo, y determinar las condiciones de proceso que permitan obtener otros más con estas características y con alto rendimiento.

Tanto el spikeMOS como el transistor multicompuerta, se basan en el uso de un potencial periódico superficial. El primero dada la textura superficial del semiconductor y el segundo debido a la multicompuerta. Sin embargo, el transistor multicompuerta presenta un potencial con periodo de 2000Å , Figura 1; mientras que en el spikeMOS el periodo es de 53.5Å

Objetivos de este trabajo de tesis.

A partir de las secciones anteriores se puede apreciar que las superficies de Si de alto índice cristalino son una opción para el desarrollo de nuevos dispositivos con importantes aplicaciones. Dado que en el desarrollo de esta tecnología sólo cambia la orientación del sustrato, se pretende utilizar los procedimientos de fabricación ya establecidos para el silicio.

El trabajo a desarrollar es la caracterización de los parámetros físicos, químicos y eléctricos que varían con la orientación para optimizar los procesos de fabricación.

Dentro de los parámetros que dependen de la orientación se pueden mencionar: velocidad de crecimiento de óxido, densidad de las diversas cargas en el óxido, movilidad en capas de inversión superficiales, velocidad y anisotropía de grabados, difusión de dopantes, implantación iónica y resistencia de contacto.

Objetivo General.

➤ En este trabajo de tesis se estudiarán los parámetros de crecimiento del óxido térmico seco, así como las cargas presentes en el capacitor MOS, respecto a la orientación cristalina, principalmente (1 1 4) y (5 5 12), utilizando como referencias las orientaciones de bajo índice (0 0 1), (1 1 1) y (1 1 0).

Objetivos particulares.

- Obtener las constantes de crecimiento parabólico y lineal de oxidación térmica seca en orientaciones de alto índice.
- Caracterizar la tensión en el óxido debida a la orientación cristalina mediante el índice de refracción
- Caracterizar la dependencia con la orientación de las cargas presentes en el sistema MOS: dipolos, carga efectiva y estados en la interfase.
- Encontrar una relación entre los parámetros dependientes de la orientación y las características superficiales de ésta, como lo son la densidad superficial de átomos y de enlaces insatisfechos

El desarrollo de la actual tecnología de silicio está alcanzando sus límites debido a que se está acercando a dimensiones atómicas. Dentro de las opciones para el desarrollo de nuevas tecnologías se tiene el uso de nuevos materiales o utilizar características no aprovechadas anteriormente en el silicio. Dentro de estas últimas se encuentra la orientación cristalina, para lo cual se han propuesto aplicaciones potenciales.

Para el desarrollo de tecnología de silicio dependiente de la orientación es necesaria la caracterización de los procesos típicos ya utilizados en silicio. Con el desarrollo de este trabajo de tesis se estudiará el crecimiento del óxido térmico y

densidades de carga en el sistema MOS, y se encontrará su relación con las características particulares de cada orientación cristalina.

La organización de la tesis tiene la siguiente estructura:

Capítulo 1. Se describen las características estructurales de las orientaciones de silicio utilizadas en este trabajo y se obtendrán sus densidades atómicas y de enlaces que servirán para relacionarse a las caracterizaciones que se realizaron.

Capítulo 2. Se describe detalladamente la dependencia con la orientación del crecimiento de óxido y las cargas presentes en el sistema MOS con sus antecedentes históricos. También se describen otras características que no dependen de la orientación, pero que son parte de la caracterización general del sistema MOS.

Capítulo 3. Se describe detalladamente la teoría de los métodos de caracterización utilizados, los parámetros que se obtendrán de ellos y se describen los equipos de medición utilizados.

Capítulo 4. Se exponen los conjuntos de muestras a utilizar, se detallan los pasos de los experimentos a realizar, su justificación de diseño, se exponen los resultados obtenidos y se analizan respecto a la orientación cristalina.

Capítulo 5. Se dan las conclusiones generales del trabajo de tesis.

Capítulo 1

Estructura superficial del silicio de (0 0 1) a (1 1 0)

1.1 Introducción.

No existen todavía diagramas de energía superficial para el silicio, por lo que la morfología de las superficies en un corte arbitrario no es conocida. La morfología de algunas superficies ha sido estudiada mediante las técnicas de microscopía y difracción. Basándose en estas técnicas se han propuesto algunos modelos atómicos para las orientaciones estables más conocidas (0 0 1), (1 1 1) y (1 1 3). Además también se han estudiado las superficies estables de alto índice (1 1 4) y (5 5 12), las cuales pueden ser base para las nuevas tecnologías

Se denominan superficies de alto índice a las que presentan precisamente en sus índices de Miller números superiores a la unidad, mientras que las superficies de bajo índice son (0 0 1), (1 1 1) y (1 1 0), todas éstas tienen estabilidad de reconstrucción superficial.

En un artículo Baski y col.[45] hacen un análisis a temperatura ambiente de la morfología de las superficies (0 0 1) a (1 1 1) utilizando un Microscopio de Barrido

por Tuneleo (STM por sus siglas en inglés). Este artículo tiene gran importancia para comprender las estructuras superficiales del silicio en altos índices.

En la Figura 1.1 se puede ver un mapa de las distintas orientaciones cristalinas utilizadas en este trabajo de tesis, desde (0 0 1) hasta (1 1 0), proyectándose sobre el plano del papel, que es el (0 1 1). En este esquema cada plano específico está marcado con puntos gruesos. En la tabla adyacente a esta figura se pueden ver las distintas direcciones, el ángulo que forman con referencia al plano (0 0 1) y la longitud de la celda básica correspondiente. A partir de la celda básica se obtiene el arreglo periódico de la superficie del cristal. Las líneas gruesas corresponden a las superficies estables y al final de estas líneas se ven imágenes obtenidas por STM de algunas superficies.

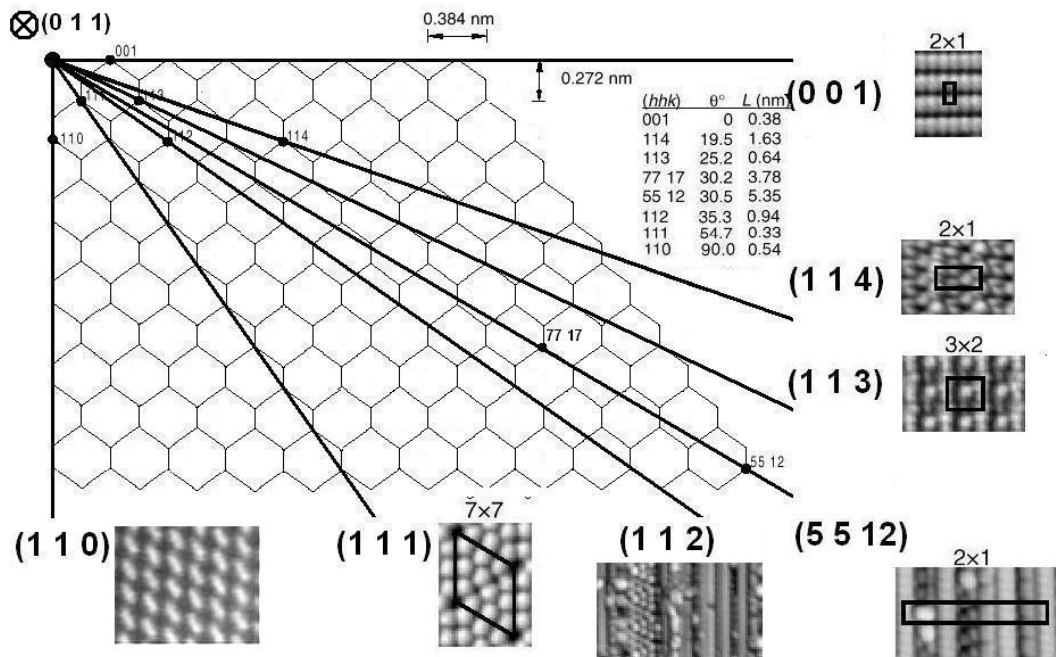


Figura 1.1 Orientaciones cristalinas de (0 0 1) a (1 1 1), modificada de [45]. Se muestran las orientaciones utilizadas en este trabajo, excepto la (7 7 17) que está muy cercana a (5 5 12), pero es inestable. La orientación (1 1 2) tampoco tiene una superficie estable, por lo que no muestra periodicidad alguna en su imagen STM.

Los resultados obtenidos por Baski demuestran que las superficies de alto índice cristalino (1 1 4), (1 1 3) y (5 5 12) son estables. Esto lo hace de una manera cualitativa, pues aún y cuando se muestran imágenes obtenidas con STM, no se realizó un análisis de la tensión en la superficie.

Las superficies estables se caracterizan por tener baja energía en la superficie, esto es, pocos enlaces insatisfechos, por lo que existe una reestructuración de la superficie ideal que reduce la cantidad de enlaces libres. Existen varias formas de enlaces que reducen la energía, modificando la estructura ideal, como se verá a continuación.

1.2 Reducción de la energía superficial.

En la superficie (0 0 1) es bien conocida la reconstrucción 2×1 , en la que pares de átomos se enlazan en la superficie formando dímeros, que a su vez forman hileras o filas. Este enlace de dímeros disminuye los enlaces libres a la mitad, reduciendo la energía en la superficie, como se muestra en la Figura 1.2. En las superficies vecinas a (0 0 1), las filas de dímeros forman terrazas con dos posibles orientaciones; con los ejes de los dímeros perpendiculares a los bordes de los escalones de las terrazas (tipo A), o paralelos a éstos (tipo B), Figura 1.2 d). Para ángulos pequeños, se encuentran terrazas de ambas orientaciones de dímeros separadas por escalones de una sola capa atómica. Para ángulos mayores, de 4° a 5° , la superficie consiste principalmente de terrazas tipo B separadas por escalones de una doble capa atómica (D_B , **Doble capa, dímeros tipo B**). En la Figura 1.2 d) y e) se marcan con líneas punteadas terrazas de celdas (0 0 1) de una sola capa y doble capa atómica D_L . En estas terrazas D_L se forman dímeros paralelos al escalón con lo que se obtienen los D_B , Figura 1.2 e).

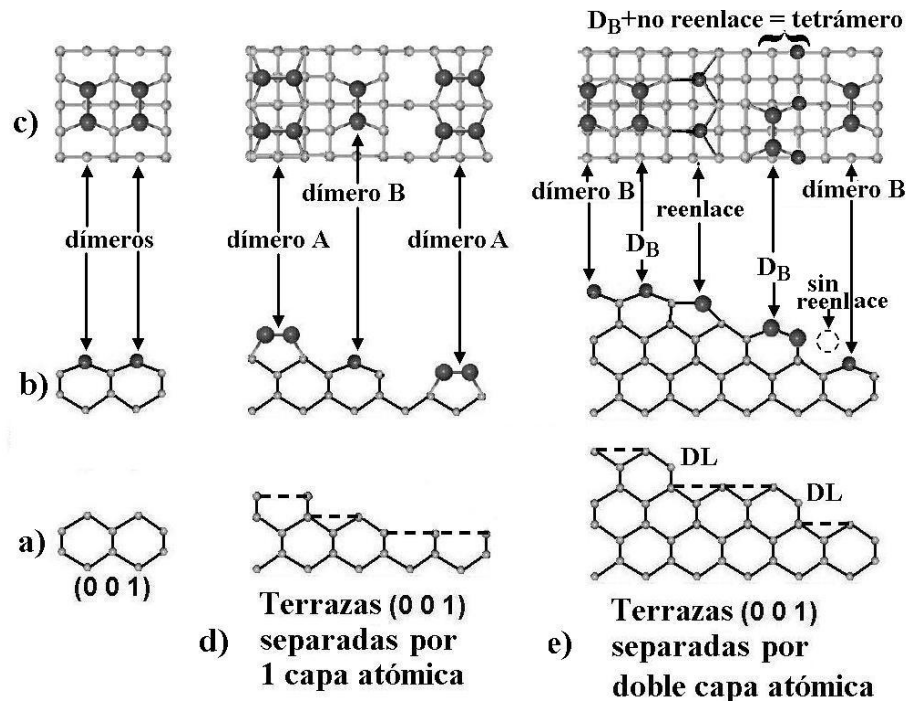


Figura 1.2 Reducción de la energía superficial [16], a) ideal, b) reconstrucción lateral, c) vista superior, d) y e) algunos tipos de enlaces para reducir la energía superficial.

En los bordes de los escalones D_B , la densidad de enlaces libres es reducida incorporando una fila extra de átomos a lo largo del escalón, formando un escalón *reenlazado*, el cual elimina una fila de dímeros, como se muestra en la Figura 1.2 e). Este tipo de escalón ha sido observado anteriormente y aunque disminuye la densidad de enlaces libres produce tensión en la superficie. En ángulos mayores a 12° se observa que el escalón D_B es “no reenlazado” y junto con dímeros tipo B de la terraza superior puede formar otro enlace conocido como tetrámero, que se observa en la Figura 1.2 e). Otros enlaces de este tipo son el π_6 y el π_7 , que se mostrarán posteriormente para la orientación (5 5 12).

1.3 Orientación (0 0 1).

Como ya se explicó en la sección anterior, la superficie (0 0 1) reduce su energía superficial mediante dímeros, en los cuáles 2 enlaces superficiales sueltos de

la superficie se unen, dejando otros 2 enlaces superficiales sueltos, por lo tanto la energía superficial se reduce a la mitad. En la figura 1.3 podemos observar la estructura ideal, la reconstruida y una imagen STM de la superficie.

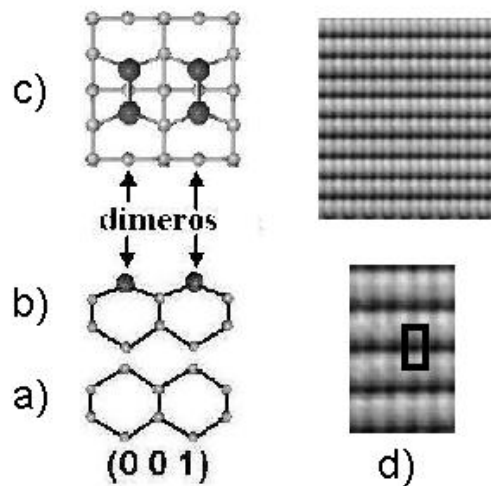


Figura 1.3 Orientación (0 0 1) [16], a) celda básica ideal, b) reconstrucción superficial vista lateralmente, c) reconstrucción superficial en vista superior, d) imágenes STM de la reconstrucción superficial.

1.4 Orientación (1 1 4).

Esta superficie se encuentra a un ángulo de inclinación de 19.5° ; como se puede observar en la Figura 1.1. La estructura ideal se muestra en la Figura 1.4 a). La estructura consta de 2 terrazas de celdas (0 0 1) separadas por escalones de 2 capas atómicas. En la reconstrucción mostrada en la Figura 1.4 b) la doble capa de la izquierda se reenlaza, absorbiendo uno de los dímeros de la terraza; la doble capa de la derecha no se reenlaza, y al asociarse al dímérico de la terraza superior forma un tetrámero. En la Figura 1.4 c) se presenta la vista superior de la reconstrucción, donde se observa que los dímeros son paralelos al escalón (tipo B). En la Figura 1.4 d) tenemos las imágenes obtenidas por STM, de las que se deduce la reconstrucción. Las letras R, T y D significan: reenlazado, tetrámero y dímérico respectivamente. Se nota que la superficie tiene periodicidad con algunos defectos. Un tratamiento más amplio del tema se puede encontrar en un artículo de S. C. Erwin y col [46].

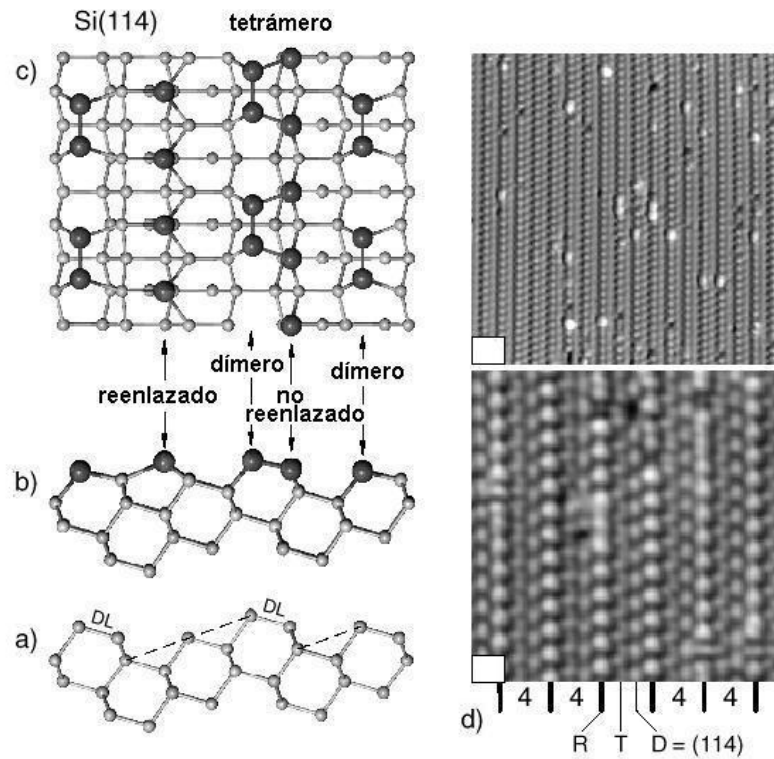


Figura 1.4 Orientación (1 1 4) [45], a) Superficie ideal en vista lateral, b) Reconstrucción en vista lateral, c) Reconstrucción en vista superior y d) Imagen STM

1.5 Orientación (1 1 3).

La orientación (1 1 3) es estable, su longitud de celda es muy corta, sólo son más pequeñas la (1 1 0) y la (1 1 1); la importancia de esta orientación proviene del hecho de que tiene una reconstrucción superficial estable y ha sido estudiada extensamente de el inicio de la electrónica en crecimiento de óxido [62].

Esta superficie tiene 2 reconstrucciones estables la 3×2 y la 3×1 , aunque a temperatura ambiente se estabiliza en la primera. En la Figura 1.5 se puede ver la celda ideal, la reconstrucción 3×2 en dos etapas, y la imagen STM de dicha orientación.

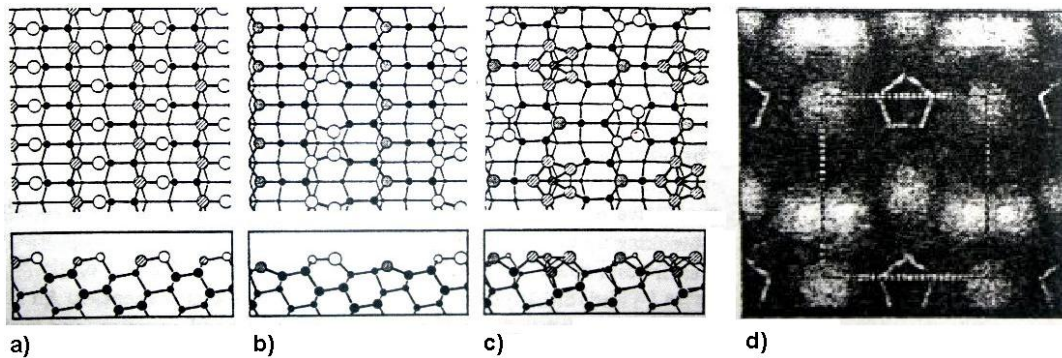


Figura 1.5 Orientación (1 1 3) [47], a) Superficie ideal lateral y superior, b) Primera parte de la reconstrucción 3×2, c) Reconstrucción total 3×2 de la superficie, d) Imagen STM.

1.6 Orientación (7 7 17).

Esta orientación de silicio no es estable, se encuentra muy cercana a (5 5 12) y de hecho forma parte de su celda básica, como se puede ver en la Figura 1.6 . Dada su cercanía con la orientación (5 5 12) su reconstrucción superficial consta de celdas de esta orientación intercaladas con las otras “sub-celdas” (2 2 5) y (3 3 7) de manera arbitraria.

1.7 Orientación (5 5 12).

Esta superficie se encuentra a un ángulo de 30.5° respecto a (0 0 1). La característica más importante de esta superficie es la gran longitud de su celda básica, de 5.35 nm, la cual es bastante mayor que los 1.63 nm de la celda (1 1 4), que es la anterior más grande.

La morfología es más complicada que la de otras orientaciones, principalmente por su extensión. Esta celda se compone de 3 terrazas, 2 de orientación (3 3 7) y una de orientación (2 2 5). También se puede considerar como

una celda básica (3 3 7) asociada a una (7 7 17), esta última compuesta de una celda (3 3 7) y una (2 2 5), como se presenta en la Figura 1.6, incisos d) y g).

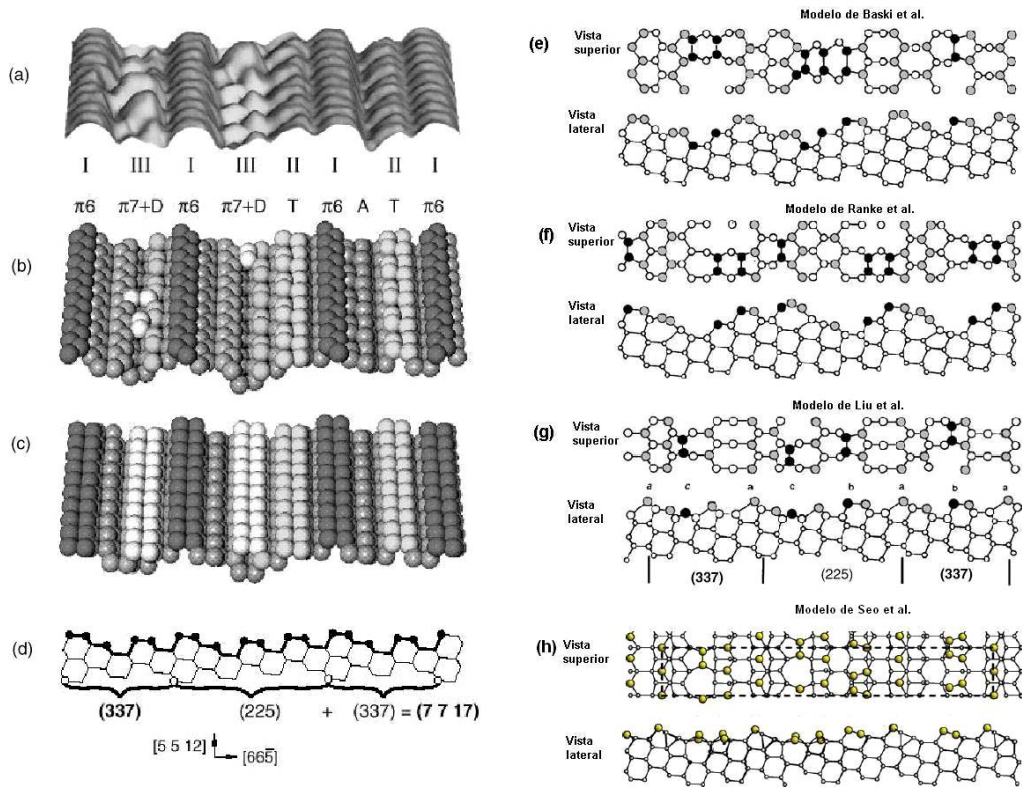


Figura 1.6 Orientación (5 5 12), a) Imagen STM, b) Interpretación de la imagen STM, c) Superficie ideal, d) Vista lateral y celdas que la componen, e), f), g) y h) Reconstrucciones sugeridas por [48], [49], [50] y [51], respectivamente.

En la Figura 1.6 a) se muestra la imagen por STM obtenida por Baski [48], en b), la reconstrucción basándose en la imagen STM. Aquí se indican los enlaces $\pi 6$, $\pi 7$, D dímeros, T tetrameros y A adatoms o átomos extras. En c) tenemos la estructura ideal, que se muestra en vista lateral en d); en este inciso se presentan también las tres celdas que forman la estructura (5 5 12). En los incisos e) f) g) y h) se tienen cuatro reestructuraciones superficiales propuestas para la superficie (5 5 12). En e) tenemos la de Baski y col. [48], en f) la de Ranke y Xing [49], en g) la propuesta por Liu y col. [50] y en h) la de Seo y col. [51] Es importante notar que aún cuando los modelos difieren entre sí, al comparar las imágenes de la superficie Liu y

col. [50] que encontraron que son iguales para e), f) y g), por lo que sólo varía la interpretación de los enlaces. El inciso h) es de una publicación posterior por Seo y col. [51], quien ha estudiado ampliamente la reconstrucción superficial de esta orientación [51-56].

Y. Peng y col.[57] han estudiado esta superficie, obteniendo imágenes con Microscopia por Reflexión de Electrones (REM) y patrones de Bragg mediante Difracción por Reflexión de Electrones de Alta Energía (RHEED), confirmando la estabilidad de la celda y su composición con celdas (2 2 5) y (3 3 7).

1.8 Orientación (1 1 2).

Esta orientación no es estable, sino que se compone de nanofacetos de las orientaciones (1 1 1) y (3 3 7). Su importancia se debe al hecho de ser una orientación a partir de la cual se pueden crecer fácilmente lingotes de silicio, el poder ser detectada con precisión mediante difracción de rayos X, y el encontrarse cerca de la orientación (5 5 12). Dadas las características anteriores, es ideal para cortar obleas de alto índice mediante cortes angulares de lingotes de esta orientación. Al ser una superficie inestable su reconstrucción consta de terrazas (3 3 7), (7 7 17) y (1 1 1). En la Figura 1.7 se muestra su estructura ideal y mediciones STM, en el inciso b) se marcan las celdas (3 3 7), (1 1 7) y (1 1 1).

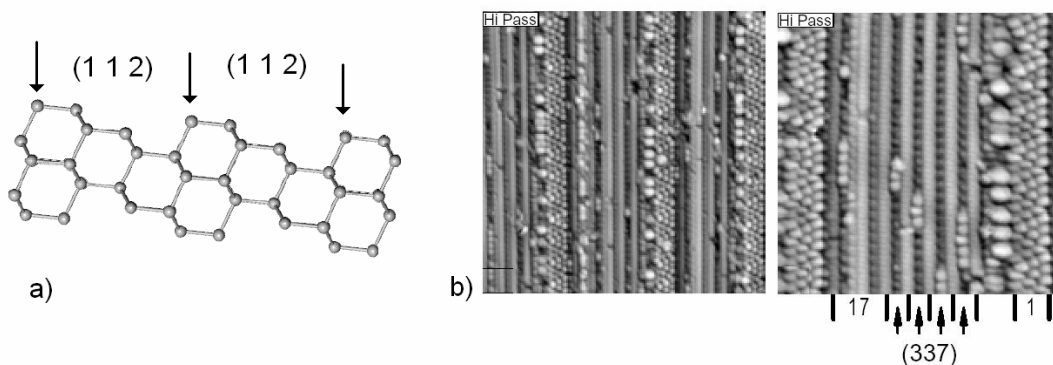


Figura 1.7 Orientación (1 1 2) [45], a) estructura ideal, b) Imágenes STM donde se muestran las terrazas de celdas que la componen, 17 indica (7 7 17) y 1 indica (1 1 1).

1.9 Orientación (1 1 1).

La orientación (1 1 1) es estable y tiene más de un tipo de reconstrucción superficial. Esta depende de la temperatura a la cual se eleve para reconstruir la superficie, pudiendo ser 7×7 o 5×5 . En la Figura 1.8 se muestra la reconstrucción 7×7 que es la más común después de tratamientos térmicos. Esta orientación es utilizada en la fabricación de dispositivos bipolares y para algunos parámetros tecnológicos presenta el máximo, como grosor de óxido y estados en la interfase, por lo que es un punto de referencia muy importante.

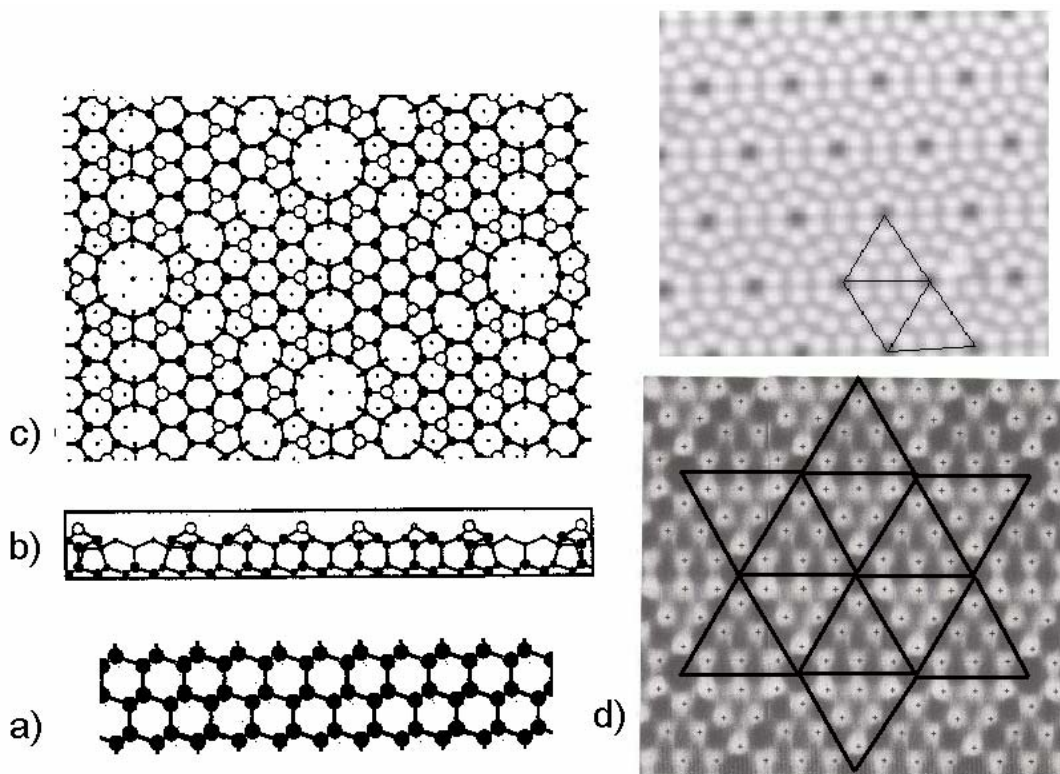


Figura 1.8 Orientación (1 1 1) [47], a) estructura ideal, b) vista lateral de la reconstrucción 7×7 , c) vista superior de la reconstrucción superficial, d) imágenes STM donde se marcan las reconstrucciones.

1.10 Orientación (1 1 0).

La orientación (1 1 0) es importante dado que es una orientación estable, es de bajo índice y, además, muestra un mínimo relativo en las características físicas como el crecimiento de óxido y cargas. En la Figura 1.9 se muestra su celda básica, su reconstrucción, e imágenes STM.

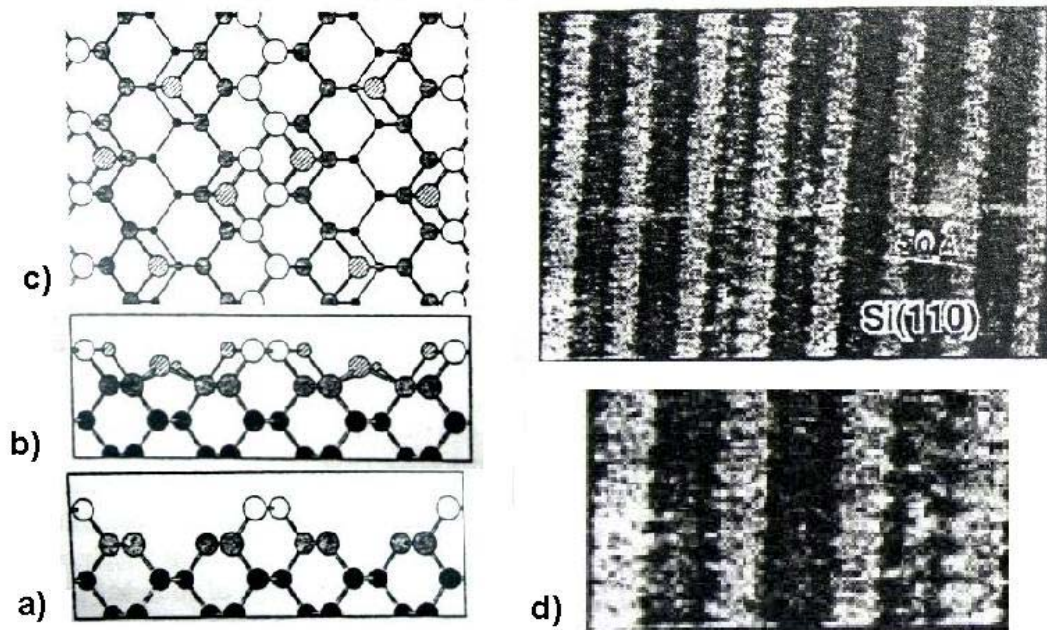


Figura 1.9 Orientación (1 1 0) [47], a) Vista lateral ideal, b) Reconstrucción en vista lateral, c) Vista superior de la reconstrucción y d) Imágenes STM.

Las 8 orientaciones anteriores se utilizarán en este trabajo de tesis, a continuación se hace una revisión de las densidades de átomos y enlaces en la superficie de ellas.

1.11 Densidades de átomos y enlaces en las superficies.

La densidad de enlaces libres en la superficie de cada orientación está relacionada directamente con la densidad de átomos. Aún cuando es importante conocer las reconstrucciones superficiales de las distintas orientaciones, para el

estudio de interfases y su efecto se utiliza la superficie ideal (corte del plano sin reconstrucción). Por lo anterior, las densidades que se calcularon se basan en las superficies ideales, Tabla 1.1 y Tabla 1.2

Orientación	Dimensiones Longitud Ancho (nm)	Área En Cm ²	Átomos superficiales	Átomos parcialmente satisfechos	Enlaces satisfechos	Enlaces rotos
(0 0 1)	L 0.384 A 0.384	1.474E-15	2	1	2	2
(1 1 4)	L 1.629 A 0.384	6.256E-15	10	5	12	8
(1 1 3)	L 0.6367 A 0.384	2.446E-15	4	2	5	3
(7 7 17)	L 3.776 A 0.384	1.451E-14	24	12	31	17
(5 5 12)	L 5.348 A 0.384	2.054E-14	34	17	44	24
(1 1 2)	L 0.940 A 0.384	3.613E-15	6	3	8	4
(1 1 1)	L 0.332 A 0.384	1.278E-15	2	1	3	1
(1 1 0)	L 0.543 A 0.384	2.089E-15	4	2	6	2

Tabla 1.1 Áreas de celdas unitarias, número de átomos superficiales por celda, átomos con enlaces sueltos, enlaces satisfechos en la superficie y enlaces rotos en la superficie. Todo calculado a partir de las celdas unitarias ideales.

Orientación.	Densidad atómica.	Densidad atómica parcialmente satisfecha.	Densidad de enlaces completos.	Densidad de enlaces rotos.	Densidad total de enlaces.
(0 0 1)	1.356E+15	6.782E+14	1.356E+15	1.356E+15	2.713E+15
(1 1 4)	1.598E+15	7.992E+14	1.918E+15	1.279E+15	3.197E+15
(1 1 3)	1.636E+15	8.178E+14	2.045E+15	1.227E+15	3.271E+15
(7 7 17)	1.654E+15	8.271E+14	2.137E+15	1.172E+15	3.309E+15
(5 5 12)	1.655E+15	8.275E+14	2.142E+15	1.168E+15	3.310E+15
(1 1 2)	1.661E+15	8.303E+14	2.214E+15	1.107E+15	3.321E+15
(1 1 1)	1.565E+15	7.823E+14	2.347E+15	7.823E+14	3.129E+15
(1 1 0)	1.915E+15	9.575E+14	2.873E+15	9.575E+14	3.830E+15

Tabla 1.2 Densidades por cm² de átomos superficiales, átomos parcialmente satisfechos, enlaces completos en la superficie, enlaces rotos y enlaces superficiales totales.

Estas densidades se utilizarán para ser relacionadas con los parámetros dependientes de la orientación. Su dependencia con el ángulo de las orientaciones respecto a (0 0 1) se muestra en la Figura 1.10.

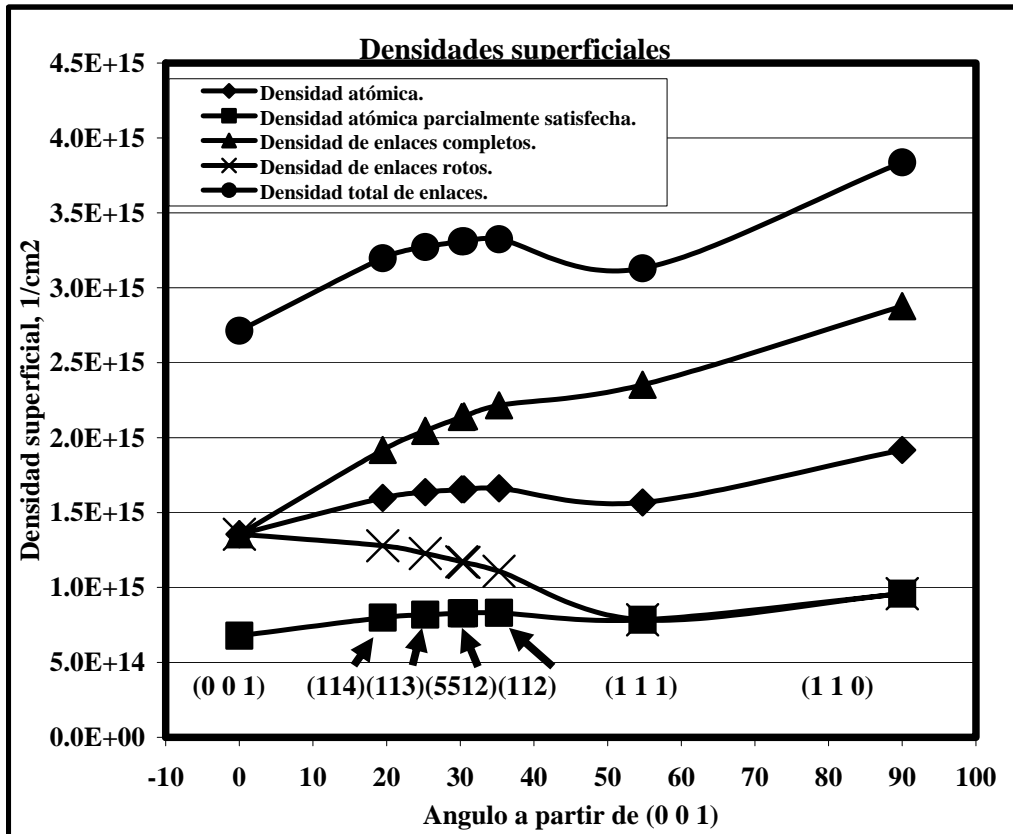


Figura 1.10 Densidades superficiales de átomos, átomos insatisfechos, enlaces completos, rotos y total de éstos. Estas densidades están graficadas respecto al ángulo de las orientaciones respecto a (0 0 1)

1.12 Conclusiones.

En este capítulo se presentaron las características estructurales de las orientaciones de silicio a utilizar en este trabajo de tesis. De entre de ellas, las más importantes para este trabajo son las orientaciones (1 1 4) y (5 5 12), ya que como se

mostró tienen una celda periódica superficial grande comparadas con las otras orientaciones. Las orientaciones de bajo índice se usarán como referencia y las demás orientaciones servirán para tener una perspectiva más amplia de la dependencia con la orientación cristalina de los parámetros a estudiar.

Las densidades superficiales de átomos, átomos parcialmente satisfechos, enlaces, enlaces satisfechos, enlaces rotos y total de enlaces calculados serán correlacionadas posteriormente con los resultados experimentales.

Capítulo 2

Parámetros dependientes de la orientación cristalina

2.1 Introducción.

En un sustrato de silicio cristalino la orientación de su superficie es tan importante como el tipo de dopado y la resistividad, dado que influye en la gran mayoría de los procesos de fabricación de los CIs y las propiedades eléctricas de los dispositivos fabricados en ellas. Algunos ejemplos son: el crecimiento de óxido térmico, crecimiento epitaxial, perfiles de implantación iónica, movilidad de electrones y huecos, tensión superficial, carga fija y densidad de estados en la interfase.

En este trabajo de tesis se analizarán los efectos de la orientación en el crecimiento de óxido térmico seco utilizando elipsometría, y los efectos en la interfase óxido-silicio mediante mediciones C-V en capacitores MOS. Con estas herramientas se caracterizarán las constantes de crecimiento térmico de óxido lineal y parabólico, densidad de carga efectiva, densidad de estados en la interfase y dipolos. También se caracterizará la carga iónica móvil mediante mediciones C-V aunque no

tenga dependencia con la orientación. En este capítulo se presenta una revisión de los parámetros que se caracterizarán y su dependencia con respecto a la orientación.

2.2 Cinética de crecimiento del óxido térmico.

2.2.1 Modelo de Deal y Grove.

El modelo de la cinética de crecimiento del óxido más congruente con los resultados experimentales, bajo las condiciones más comunes de oxidación, es el propuesto por Deal y Grove [58]. Este modelo condiciona un óxido inicial sobre el silicio y se basa en la difusión de las especies oxidantes dentro del óxido hacia la interfase óxido-silicio [59]. De acuerdo a esto el mecanismo de oxidación sigue los pasos listados a continuación.

1. Las especies son transportadas desde el flujo del gas oxidante hasta la superficie del óxido, donde son absorbidas.
2. Las especies se difunden a través del óxido hasta la superficie del silicio.
3. Las especies reaccionan en la superficie del silicio para formar una nueva capa de SiO_2 .

Se considera que el proceso de oxidación se encuentra más allá de un estado transitorio y los flujos son iguales en todo momento. El diagrama correspondiente a este modelo se muestra en la Figura 2.1

Se toma como flujo el número de moléculas oxidantes cruzando una unidad de área en una unidad de tiempo. El flujo desde el gas hasta la vecindad de la superficie del óxido es F_1 ; el flujo del oxidante a través del óxido F_2 está dado por la ley de Fick; y el flujo correspondiente a la reacción de oxidación F_3 , es expresado por la

constante de reacción superficial y la concentración de las especies oxidantes, ecuaciones (2.1)-(2.3)

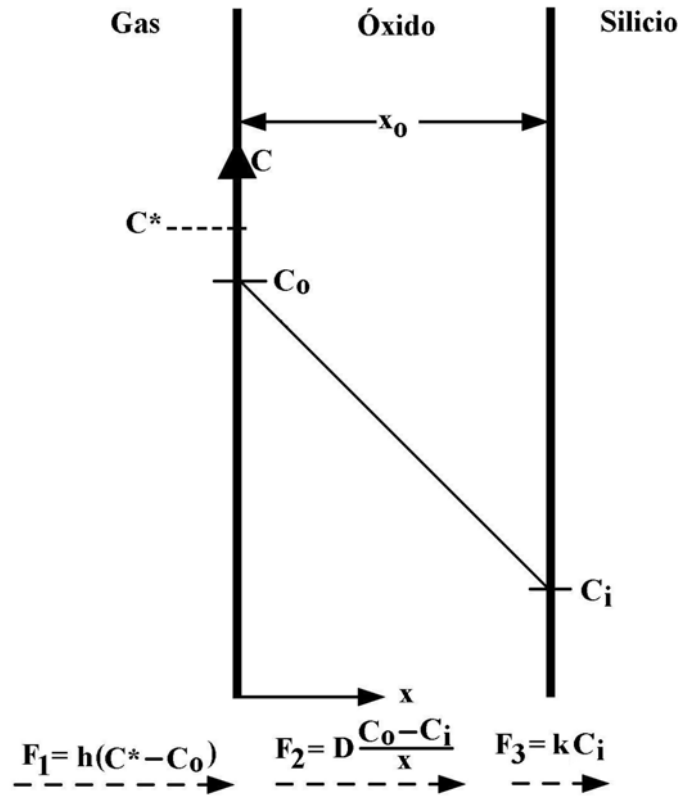


Figura 2.1 Modelo de oxidación del silicio [58].

$$F_1 = h(C^* - C_0) \quad (2.1)$$

$$F_2 = -D \frac{dC}{dx} \quad (2.2)$$

$$F_3 = k C_i \quad (2.3)$$

donde h es el coeficiente de transporte en fase-gas, C^* es la concentración en equilibrio del oxidante en el ambiente, C_0 es la concentración del oxidante en la superficie del óxido en cualquier tiempo dado, D es el coeficiente de difusión efectiva, dC/dx es el gradiente de concentración del oxidante dentro del óxido, k es

una constante de la reacción, y C_i la concentración de oxidante en la interfase. En estado estacionario los flujos son iguales.

El tratamiento matemático completo se puede encontrar en la referencia [58]. Con las condiciones anteriores se obtiene la siguiente ecuación dependiente del tiempo

$$x_o^2 + Ax_o = B(t + \tau) \quad (2.4)$$

donde

$$A \equiv 2D\left(\frac{1}{k} + \frac{1}{h}\right) \quad (2.5)$$

$$B \equiv 2DC^*/N_1 \quad (2.6)$$

y

$$\tau \equiv \frac{(x_i^2 + Ax_i)}{B} \quad (2.7)$$

Donde N_1 es el número de moléculas oxidantes incorporadas al óxido por unidad de volumen. La cantidad τ corresponde a un desplazamiento en la coordenada del tiempo que indica la presencia de una capa de óxido inicial de espesor x_i .

Resolviendo la ecuación cuadrática para el grosor del óxido dependiente del tiempo, tenemos:

$$x_o = \frac{A}{2} \left[1 + \frac{t + \tau}{A^2/4B} \right]^{1/2} - \frac{A}{2} \quad (2.8)$$

Existen dos casos límite; el primero es para tiempos muy largos, cuando $t \gg A^2/4B$ y $t \gg \tau$, para este caso la función se aproxima como

$$x_o \approx \sqrt{Bt} \quad (2.9)$$

que indica una relación parabólica de la oxidación en función del tiempo.

El segundo caso es para tiempos cortos de oxidación, considerando que $t + \tau \ll A^2/4B$, y ahora la aproximación resultante es

$$x_o \approx \frac{B}{A}(t + \tau) \tag{2.10}$$

Los resultados normalizados, considerando los datos experimentales publicados por varios autores, fueron graficados por Deal y Grove [58]. En todos los casos el modelo se ajustó claramente a los datos. Esta gráfica se muestra en la Figura 2.2 para diferentes temperaturas y ambientes de oxidación secos y húmedos.

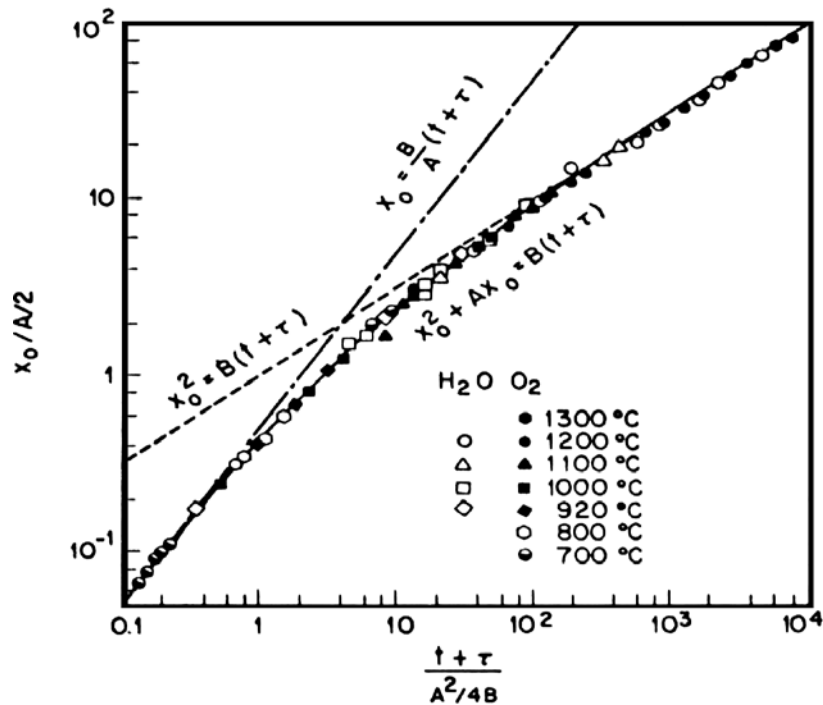


Figura 2.2 Comparación de resultados experimentales de oxidación húmeda y seca a varias temperaturas (símbolos) con el modelo de Deal y Grove (línea sólida) y los 2 casos extremos lineal y parabólico (líneas punteadas) [58].

2.2.2 Dependencias y desviaciones del modelo.

Las constantes A y B en realidad son funciones de varios parámetros como el ambiente de oxidación, la orientación, la tensión en la superficie, la tensión en el óxido, la temperatura y la presión a la que se realiza la oxidación.

Se ha experimentado con combinaciones de ambientes húmedo y seco. En [60] se realizaron experimentos de oxidación seca con trazas de humedad, llegando a la conclusión de que unas cuantas partes por millón (25 ppm) de moléculas de agua en oxígeno incrementan apreciablemente la razón de crecimiento; es decir, en este caso se altera principalmente el término parabólico B . Por otra parte, Deal y Grove [58] realizaron oxidaciones húmedas utilizando flujos de oxígeno o nitrógeno como vehículo para el vapor de agua, y no encontró diferencias en las velocidades de crecimiento. De esto se puede deducir el dominio de la oxidación húmeda cuando la oxidación se realiza usando mezclas húmedo-secas.

Un ejemplo de las variaciones de la velocidad de crecimiento dependiente de la presión y la orientación cristalina se puede obtener comparando los resultados de Ligenza [61] y Pliskin [62]. Los experimentos de Ligenza se realizaron con presiones de 40 a 150 Atm., y obtuvo velocidades de crecimiento, respecto a las orientaciones, distintos a los obtenidos por Pliskin. Este último realizó sus oxidaciones a 1 Atm.

La tensión en la superficie del silicio tiene también efectos importantes. En [63 y 64] Kao y col. utilizando estructuras bidimensionales como cilindros y trincheras, determinaron que la razón de oxidación es dependiente del radio de curvatura en los cilindros. Las trincheras en sus ángulos cóncavo y convexo muestran una disminución de las velocidades de oxidación hasta del 30%, y para el ángulo convexo se presentó la razón de oxidación más baja. Finalmente los autores atribuyen estos cambios a la viscosidad del óxido.

La tensión en el óxido depende principalmente de la temperatura de crecimiento. Doremus [65] determinó que el óxido crecido a temperaturas de 950°C y menores no tiene relajación, mientras que a 1200°C y mayores la relajación es total. Para temperaturas intermedias se tiene que el óxido está relajado de tensiones

parcialmente. Esta relajación de las tensiones depende de la viscosidad del óxido a la temperatura de oxidación y se refleja en las velocidades de oxidación.

Los experimentos de oxidación pueden predecirse usando el modelo de Deal y Grove en oxidaciones con temperaturas mayores a 900° C, presión atmosférica y grosores de óxido mayores a 350Å. Sin embargo, cambios significativos en estos parámetros originan grandes desviaciones de este modelo.

2.2.3 Dependencia de la oxidación con respecto a la orientación cristalina.

Experimentalmente se ha observado una dependencia de la oxidación respecto a la orientación cristalina. La determinación de las constantes B (constante parabólica) y B/A (constante lineal) por Deal y Grove [58] y Pliskin [62], resultaron en una constante B independiente de la orientación y una constante B/A dependiente de ésta. Al sustituir las ecuaciones (2.5) y (2.6) en B/A tenemos

$$\frac{B}{A} = \frac{2DC^*/N_1}{2D\left(\frac{1}{k} + \frac{1}{h}\right)} = \frac{C^*/N_1}{\left(\frac{1}{k} + \frac{1}{h}\right)} = \frac{kh}{k+h} \left(\frac{C^*}{N_1}\right) \quad (2.11)$$

y nuevamente B

$$B \equiv 2DC^*/N_1 \quad (2.12)$$

En la ecuación (2.11) tenemos que la única variable dependiente de la orientación cristalina es k , la constante de reacción interfacial, y en (2.12), la dependencia está relacionada a D , la difusión de las especies dentro del óxido. La constante k se determina experimentalmente y aún no se entiende bien la relación que guarda con los planos cristalinos, aún y cuando se sabe que está fuertemente relacionada a la densidad de átomos y enlaces por unidad de área [47].

A continuación se presentan, en orden cronológico, los resultados más importantes encontrados para la dependencia de las velocidades de oxidación con distintas orientaciones cristalinas

Ligenza [61] propuso una dependencia proporcional a la densidad de átomos en la superficie del silicio y la energía de activación. Sus experimentos se llevaron a cabo en alta presión, de 40 a 150 Atm. con oxidación húmeda. Utilizó tres orientaciones cristalinas, con temperaturas en el rango de 773 a 1073°C, obteniendo en el régimen lineal a todas las temperaturas la relación de grosores de óxido

$$(1\ 1\ 0) > (1\ 1\ 3) > (1\ 1\ 1)$$

Pliskin [62], oxidando en ambiente húmedo a 971°C y presión de 1 Atm., determinó la siguiente relación de grosores

$$(1\ 1\ 1) > (1\ 1\ 0) > (1\ 1\ 3) > (0\ 0\ 1)$$

Irene y col.[66] utilizaron tres orientaciones, a presión de 1 Atm. en oxidación seca, con mediciones por elipsometría automatizada in situ de alta precisión y variaciones de temperatura de 800 a 1000°C. Encontró que en el régimen delgado, donde no se puede aplicar el modelo de Deal, la relación de crecimiento entre orientaciones es

$$(1\ 1\ 0) > (1\ 1\ 1) > (0\ 0\ 1)$$

Para estos óxidos con espesores por debajo de 250Å propuso también un modelo en [67 y 68].

Sin embargo, conforme el óxido crece la relación cambia. Antes de alcanzar el régimen lineal del modelo de Deal (350Å), la nueva relación es

$$(1\ 1\ 1) > (0\ 1\ 1) > (0\ 0\ 1)$$

El grosor del óxido al que se modifica el comportamiento depende de la temperatura, y analizando los resultados de Ligenza respecto a Pliskin, quizás también por la presión.

Recientemente **Ngau** y col. [69] realizaron oxidaciones húmedas a 785°C, a presión de 1 Atm, y con tres orientaciones. Los resultados obtenidos son similares a los de Irene en oxidación seca, con una relación inicial de crecimiento entre orientaciones

$$(1\ 1\ 0) > (1\ 1\ 1) > (0\ 0\ 1)$$

En este caso para óxidos mayores de 2430 Å se modificó la relación. Este grosor representa un orden más de magnitud que en oxidación seca, y además, ya se encuentra en el régimen parabólico de crecimiento. Después del cruce en las curvas de crecimiento la relación de grosores es

$$(1\ 1\ 1) > (0\ 1\ 1) > (0\ 0\ 1)$$

Este cambio de la relación entre orientaciones, partiendo del rango de óxidos delgados hacia óxidos gruesos, fue observado anteriormente [70] a grosores de óxidos menores de 350Å y baja presión. Posiblemente los resultados de Ligenza se encuentren afectados por la presión de oxidación, manteniendo la relación inicial de crecimiento hasta los 10,000Å (el grosor máximo que fabricó). Por otra parte, los resultados de Ngau pueden deberse a que la oxidación fue húmeda en lugar de seca, y en ese caso el factor de importancia puede ser que la alta concentración de las moléculas de agua en el óxido (durante la oxidación) retarde el cambio de velocidades de crecimiento.

Se ha especulado que el cruce entre las velocidades de crecimiento del óxido se deba a que al principio de la oxidación domine la densidad de átomos en la superficie, mientras que a grosores mayores, la tensión superficial del silicio afecte la difusión en el óxido. Dado que la superficie (1 1 1) es la que presenta menor tensión debería permitir una mayor difusión del oxidante hasta la superficie [71].

La dependencia de la razón de oxidación con la orientación reside en las propiedades de la superficie; sin embargo, esta dependencia puede ser alterada por otros factores como la presión, la temperatura y el tipo de oxidante. Aún no se tienen teorías ni modelos consistentes para explicar los cruces en las velocidades de crecimiento, ni la alta velocidad de crecimiento en el régimen de óxidos delgados.

2.3 Cargas en el sistema MOS.

En el dispositivo MOS ideal se tiene un óxido libre de defectos y una interfase perfecta con el silicio. Sin embargo en el dispositivo real existen defectos dentro del óxido debidos a enlaces sueltos e impurezas de otros materiales. Además, se tiene una interfase imperfecta con enlaces rotos debido a que las celdas básicas del silicio y el óxido no tienen el mismo tamaño y, por lo tanto, no se pueden enlazar perfectamente. Estos defectos introducen cargas en el óxido, estados en la interfase y dipolos.

El efecto de las cargas modifica el comportamiento ideal del dispositivo MOS, principalmente en el voltaje de encendido. Estas cargas están siempre presentes aún cuando pueden ser reducidas mediante tratamientos térmicos y su cuantificación es importante para conocer la confiabilidad de los dispositivos.

Existen cinco tipos comunes de carga asociados con el sistema $\text{SiO}_2\text{-Si}$, que se muestran en la Figura 2.3; estas son: la *carga atrapada en el óxido* (positiva y negativa), la *carga iónica móvil*, la *carga fija en el óxido*, la *carga atrapada en la*

interfase o estados en la interfase, y los dipolos. Otros tipos de carga menos comunes son grupos hidroxilos en la superficie y contaminantes orgánicos.

Los símbolos de cada carga denotan cierta descripción de ellas, y en todos los casos Q_X es la carga total efectiva por unidad de área, considerándola en la interfase SiO₂-Si (C/cm²), mientras que N_X es el número total de cargas efectivas por unidad de área considerándola en la interfase SiO₂-Si (1/cm²). Por definición $N_X = |Q_X/q|$, donde Q_X puede ser positivo o negativo, pero N_X es siempre positivo. De forma particular D_{it} está dado en 1/(cm²*eV), y la carga dipolar sólo será analizada aquí como un voltaje total V_{dip} , dado que es imposible discriminar el dominio de los dipolos de una u otra interfase

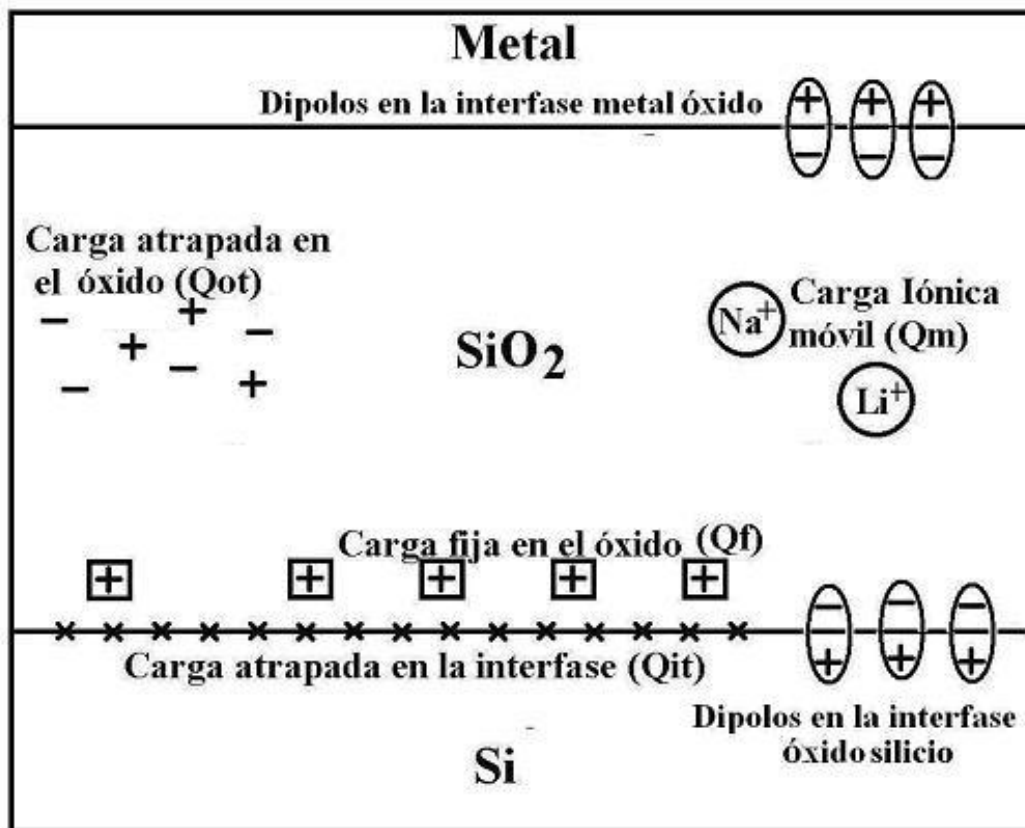


Figura 2.3 Tipos de carga presentes en el óxido e interfase del sistema MOS.

La carga fija y los estados en la interfase dependen de la orientación cristalina del sustrato, y por ello es importante caracterizar su comportamiento en orientaciones de alto índice cristalino, motivo de este trabajo. A continuación se describen en detalle los tipos de cargas presentes en el dispositivo MOS, su origen, su efecto en el dispositivo, su reducción y su posible dependencia con la orientación. La cuantificación de las cargas se presenta detalladamente en [59 y 72]

2.4 Carga atrapada en el óxido Q_{ot} .

2.4.1 Origen de Q_{ot} .

La carga atrapada en el óxido puede ser positiva o negativa, debido a huecos o electrones atrapados en el óxido, y tiene una distribución aleatoria en todo el óxido. Las cargas pueden ser atrapadas durante el proceso de fabricación, por radiación ionizante, o durante el funcionamiento del dispositivo. Esto último como resultado de inyección por avalancha, tuneleo Fowler-Nordheim u otros mecanismos activados por campo eléctrico elevado.

2.4.2 Efectos de Q_{ot} .

La carga atrapada en el óxido se apantalla parcialmente en la compuerta y en el silicio; mientras las cargas se encuentren más cerca de la compuerta serán apantalladas en ella, por lo que no tienen efecto mayor en el dispositivo. Si por el contrario, se encuentran más cerca del silicio, entonces modularán ó inducirán una mayor carga superficial en el sustrato. El efecto principal es el corrimiento en el eje de voltaje de la curva capacitancia – voltaje, afectando los voltajes de encendido y de banda plana. El corrimiento de la curva es positivo cuando la carga total es negativa y es negativo cuando la carga total es positiva; además es posible también la asociación de cargas positivas y negativas que formen dipolos dentro del óxido.

2.4.3 Cuantificación de Q_{ot} .

Dado que esta carga no depende de la orientación cristalina no se estudiará en este trabajo de tesis, además de que la técnica usada para su cuantificación es destructiva, como se describe a continuación.

Existen 2 métodos eléctricos para la cuantificación de esta carga. En primer lugar se tiene el **grabado de óxido**. En este caso se realizan grabados secuenciales del óxido, midiendo entre cada paso la curva C-V. Cada grabado elimina una capa de óxido junto con su carga atrapada, razón por la que este método es destructivo. A partir de éstas curvas C-V con distinto grosor de óxido, se determina la densidad Q_{ot} .

En otro método [72] se calcula Q_{ot} en dispositivos MOS con inyección de carga mediante el **corrimiento del voltaje de banda plana inducido por un alto voltaje**. Se calcula el voltaje de banda plana del dispositivo antes de la inyección de carga y después de la inyección. La inyección de carga se lleva a cabo mediante alto voltaje aplicado a la compuerta a temperatura ambiente. Se considera que después de la inyección la densidad de las otras cargas no cambia, sólo Q_{ot} , y que toda esta carga se encuentra en la interfase SiO_2 -Si donde su influencia es máxima; entonces el corrimiento en el voltaje de banda plana es proporcional a la carga atrapada en el óxido.

2.4.4 Reducción de Q_{ot} .

La carga atrapada en el óxido se reduce con un tratamiento térmico a baja temperatura ($<500^\circ C$) en ambiente inerte aunque permanecen las trampas neutras. Respecto a la orientación su concentración es independiente, ya que depende del proceso de fabricación o de las condiciones de operación del dispositivo.

2.5 Carga iónica móvil Q_m .

2.5.1 Origen de Q_m .

La carga iónica móvil se debe principalmente a impurezas iónicas como Na^+ , Li^+ , K^+ e H^+ , aunque también pueden estar presentes iones negativos como Cl^- y F^- . Sin embargo, éstas impurezas con carga negativa no son móviles a temperaturas menores de $500^\circ C$ [73]. Particularmente, el sodio es un contaminante difícil de controlar, ya que se encuentra en muchos metales, sustancias químicas de laboratorio e incluso en los operarios. La movilidad μ de los iones está determinada por su radio, la temperatura T , su energía de activación (E_A), y se relacionan mediante la ecuación

$$\mu = \mu_0 \exp\left(-\frac{E_A}{kT}\right) \quad (2.13)$$

La velocidad de arrastre dentro del óxido v_d es

$$v_d = \mu V_G / t_{ox} \quad (2.14)$$

para un voltaje de compuerta V_G ; y el tiempo total de tránsito (t_t) a través del grosor del óxido (t_{ox}) es

$$t_t = \frac{t_{ox}}{v_d} = \frac{t_{ox}^2}{\mu V_G} = \frac{t_{ox}^2}{\mu_0 V_G} \exp\left(\frac{E_A}{kT}\right) \quad (2.15)$$

En la Tabla 2.1 se muestran las movilidades y energías de activación del sodio y el litio [74].

Elemento	E_A	μ_0
Li	0.47 +/- 0.08 eV	$4.5 \cdot 10^{-4} \text{cm}^2/\text{Vs}$
Na	0.44 +/- 0.09 eV	$3.5 \cdot 10^{-4} \text{cm}^2/\text{Vs}$

Tabla 2.1 Energías de activación y movilidades de Na y Li en el óxido [74].

El rango de densidad de carga móvil aceptable en circuitos integrados MOS es $N_m=5 \cdot 10^9 - 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ [72].

2.5.2 Efectos de Q_m .

Este tipo de carga tiene también una distribución aleatoria dentro del óxido. Sin embargo, esta carga se puede mover dentro del óxido dependiendo de la temperatura y el voltaje aplicado, como se puede inferir de la ecuación (2.15). Si el voltaje aplicado a la compuerta es positivo, las cargas iónicas positivas se desplazan hacia la interfase $\text{SiO}_2\text{-Si}$, donde tienen su mayor influencia y desplazan la curva C-V negativamente en el eje del voltaje. Si el voltaje aplicado a la compuerta es negativo la carga iónica positiva se desplaza hacia la compuerta, donde su influencia es la más baja, desplazando la curva positivamente en el eje del voltaje. Cada cambio en la curva depende de la distribución de la carga iónica móvil y altera los voltajes de encendido y banda plana. Estos efectos en un dispositivo MOS tipo p (sustrato p) se muestran en la Figura 2.4.

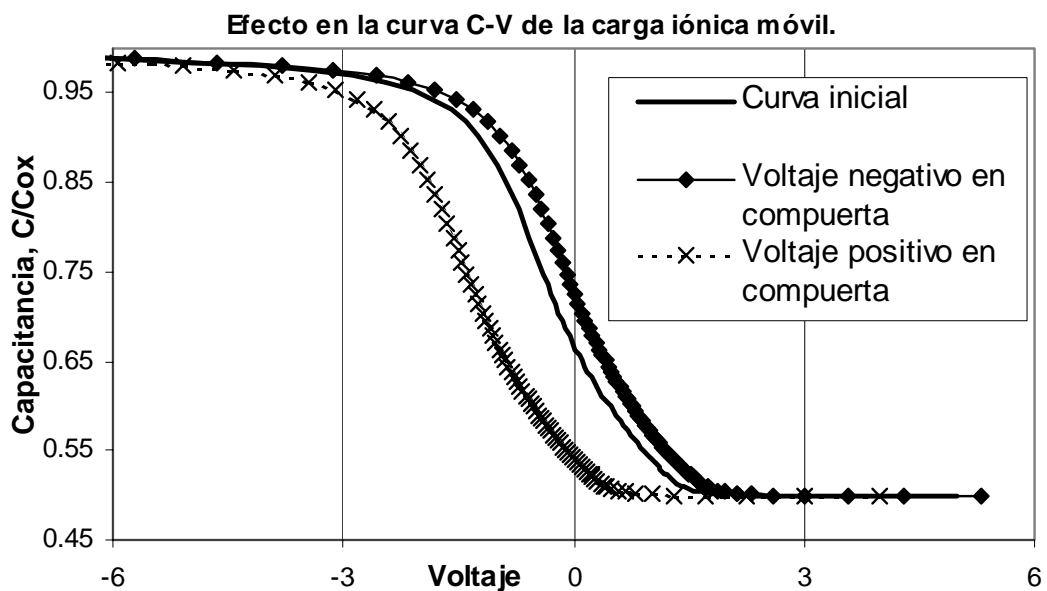


Figura 2.4 Efecto de la carga iónica móvil en la curva capacitancia-voltaje.

2.5.3 Reducción de Q_m .

La carga iónica móvil es un reflejo del nivel de limpieza en el proceso de fabricación. Los reactivos químicos del laboratorio y el contacto humano son las principales fuentes de contaminación. Para minimizar los efectos de esta carga se cubre el óxido con vidrio de fosfosilicato (PSG por sus siglas en inglés), el cual actúa como trampa para los iones. Otro método es proteger el óxido con una capa de nitruro, el cuál es prácticamente impermeable a los iones en un amplio rango de temperaturas. Finalmente, se puede reducir el efecto de estos iones positivos mediante el uso de mezclas de oxígeno con compuestos clorados durante el crecimiento del óxido.

La densidad de la carga iónica móvil sólo depende de las condiciones de limpieza del proceso, por lo tanto no tiene dependencia con la orientación cristalina.

2.6 Carga fija en la interfase Q_f .

2.6.1 Origen de Q_f .

La carga fija se encuentra a unos 10\AA de la interfase en toda el área de la interfase. El origen de la carga fija en la interfase se considera estrechamente ligado al origen de los estados en la interfase. Esto se debe a que tienen las mismas variaciones con la temperatura de oxidación, razón de oxidación, ambiente de oxidación, orientación cristalina y rugosidad en la superficie [75]; sin embargo, la reducción de cada carga se puede realizar de manera independiente. Se han propuesto modelos cualitativos que correlacionan esta carga a la densidad de átomos y enlaces libres en la superficie del silicio (dependientes de la orientación), con el ancho de la región no-estequiométrica SiO_x en la interfase y además de la concentración de silicio intersticial y tensión de la superficie del silicio. En la Tabla 2.2 se muestra la variación de algunas cargas y otros parámetros relacionados a etapas de proceso.

Parámetro de proceso	N_f	D_{it}	Rugosidad	Movilidad
Incremento en temperatura de oxidación seca.	-	-	-	+
Incremento en temperatura de oxidación húmeda.	-	-	-	
Tratamiento térmico en Nitrógeno o Argón a alta temperatura.	-	-	-	
Tratamiento térmico post metalización en forming gas.	-	-		+
Agua	-/+	-	+	+/-
Limpieza → contaminación	+	+	+	-
Orientación del silicio. (0 0 1) → (1 1 1).	+	+	+	-

Tabla 2.2 Variación de N_f , D_{it} , rugosidad y movilidad respecto a parámetros de proceso.

Un modelo físico que se ajusta a la mayoría de los datos experimentales fue propuesto por Akinwande y Plummer [76 y 77], y en el que dos procesos se encuentran en competencia generando y eliminando la carga fija. Los centros de generación de la carga fija son apilamientos de silicio en la superficie; esto se basa en el hecho comprobado de la mayor densidad de carga fija con mayor rugosidad en la superficie, lo que genera regiones de SiO_x . Los centros de eliminación de carga fija son los átomos de silicio intersticial recombinándose en los apilamientos de silicio. Esto basándose en el hecho de que a altas temperaturas las velocidades de crecimiento son altas y también lo es la generación de silicio intersticial; esta recombinación causa que la carga fija disminuya. Entonces, la variación de densidad de carga fija está dada por la ec (2.16).

$$\frac{d}{dt} N_f = \underbrace{k_g \left(\frac{dx}{dt} \right)}_{\text{Generación}} - \underbrace{k_r \left(C_{sil} N_f - C_{sil}^* N_{fe} \right)}_{\text{Recombinación}} \quad (2.16)$$

Donde N_f es la densidad de carga fija, K_g una constante de generación de apilamientos de silicio, K_r una constante de recombinación de los apilamientos, C_{sil} la concentración de silicio intersticial, C_{sil}^* la concentración de silicio intersticial en

equilibrio y N_{fe} una constante en función de la concentración en equilibrio de apilamientos.

Este modelo muestra concordancia con los datos obtenidos por Akinwande [77], en casos de oxidación generando carga fija, como se muestra en la Figura 2.5, y en reducción de carga fija, como se mostrará en la sección 2.6.3.

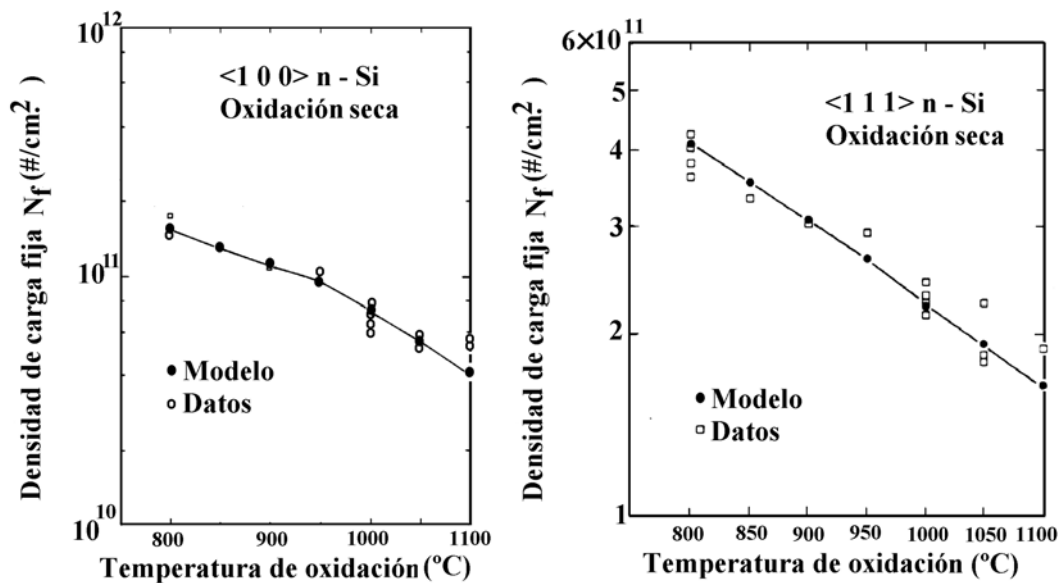


Figura 2.5 Dependencia de la generación de carga fija con la temperatura y comparación con el modelo para 2 orientaciones de silicio [77].

S. Vitkavage e Irene [78] también encontraron influencia de las velocidades de crecimiento de óxido con la densidad de carga fija, por lo que también dependen de la presión parcial de oxidación, la temperatura y orientación del silicio.

2.6.2 Efectos de Q_f .

El efecto de la carga fija en el óxido es similar al producido por las dos cargas anteriores, iónica móvil y atrapada en el óxido, es decir, produce un corrimiento en los voltajes de banda plana y encendido; en este caso todos ellos se corren en sentido

negativo del eje de voltaje por ser una carga positiva, Figura 2.6. Además se debe tener en cuenta que esta carga se encuentra a aproximadamente 10-20 Å de la interfase, por lo que su influencia es muy marcada en la carga inducida en el semiconductor.

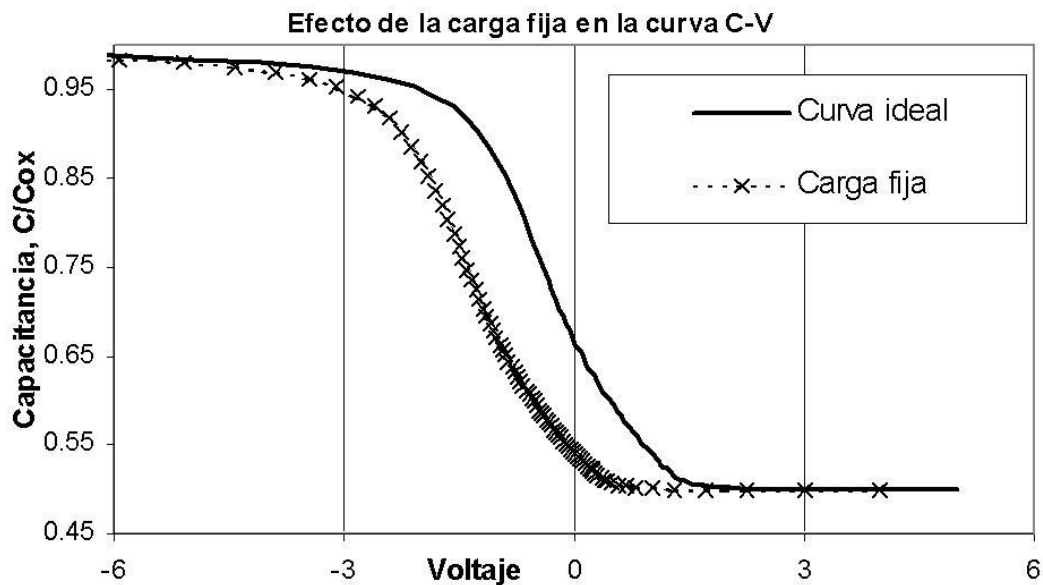


Figura 2.6 Efecto de la carga fija en la curva C-V.

2.6.3 Reducción de Q_f .

La temperatura final de oxidación determina Q_f , y ésta se reduce mediante un tratamiento térmico a alta temperatura en ambiente inerte, por lo general nitrógeno o argón. Esta relación entre la temperatura de oxidación y reducción de carga fija se refleja en el triángulo de Deal y Grove, mostrado en la Figura 2.7 a). Además de la temperatura, el tiempo del tratamiento térmico tiene una gran influencia en la reducción de estas cargas. En la Figura 2.7 b) se muestran los resultados de Akinwande y Plummer [77] y la consistencia de su modelo propuesto de procesos en competencia. Si la temperatura es más alta la generación de silicio intersticial es mayor, con lo que existe una eliminación de apilamientos de silicio y por lo tanto de carga fija.

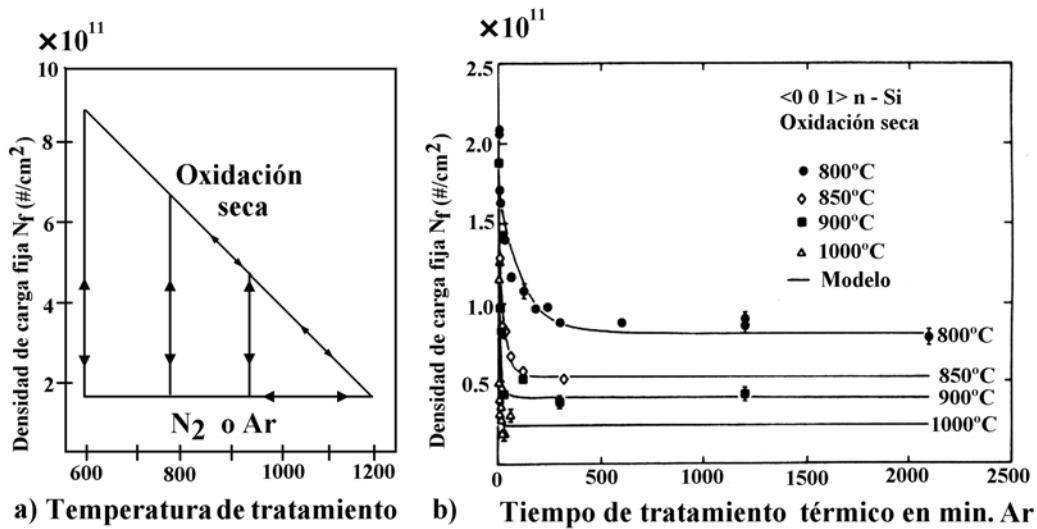


Figura 2.7 . a) Triángulo de Deal y Grove b) Comparación del modelo de Akinwande en función de tiempo y temperatura con datos experimentales [77].

2.6.4 Dependencia de Q_f con la orientación.

Existe una fuerte dependencia de Q_f con respecto a la orientación. En 1967 Abowits y col. [79], utilizando un hemisferio de silicio de 23mm de diámetro, encontraron una simetría en la densidad de carga fija respecto a las orientaciones, y la relacionaron con la tensión en la superficie del silicio. Esta tensión está determinada por el módulo de Young, que también se muestra en la Figura 2.8. Sin embargo, es necesario tomar en cuenta varios aspectos de este experimento, primero el uso de un hemisferio, la razón de oxidación en superficies curvas se ve afectada por el radio de éstas, y como Q_f se ve afectada por la razón de oxidación, también se verá afectada por la curvatura. El segundo aspecto es el uso de una sola temperatura de oxidación, 1200°C, lo cual hace que el experimento sea limitado. Sin embargo, se estableció una clara relación entre la densidad de carga fija y la orientación. En un trabajo posterior Arnold y col. [81], usando el mismo hemisferio, encontraron la similitud en el comportamiento de la carga fija y los estados en la interfase, esto se mostrara en la sección 2.7.4 de estados en la interfase.

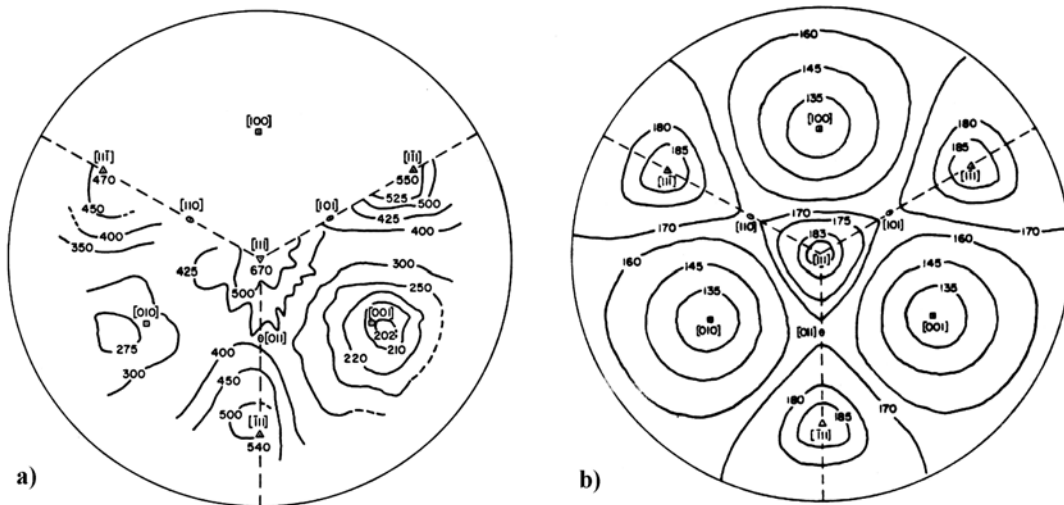


Figura 2.8 a) Simetría de N_f respecto a las orientaciones b) Módulo de Young. Las líneas indican un nivel de carga o módulo de Young igual, con máximos en (1 1 1) y mínimos en (0 0 1), [79].

En la Figura 2.8 a) se muestra una vista superior del hemisferio, la cúspide tiene orientación (1 1 1), se divide en 3 sectores que contienen las mismas orientaciones, y cada sección es simétrica. Cada línea de nivel indica la misma densidad de carga fija a lo largo de ella, los máximos se encuentran en las orientaciones (1 1 1), uno en el centro y tres ubicados sobre las líneas punteadas (triángulos). Los mínimos concuerdan con la orientación (0 0 1) ubicada sobre la bisectriz del ángulo de cada sector (cuadros). En la Figura 2.8 b), se muestra el módulo de Young, que determina la tensión en la superficie; cada línea de nivel indica el mismo módulo de Young a lo largo de ella. De manera similar, los máximos se encuentran en (1 1 1) y los mínimos en (0 0 1). Las Figura 2.8 a) y b) guardan similitud, por lo que Abowits especuló que existe una relación entre N_f y la tensión en la superficie.

S. Vitkavage e Irene [78] utilizaron obleas con orientaciones (0 0 1), (1 1 5), (1 1 1) y (1 1 0); sus resultados demuestran una dependencia de la carga fija con respecto a la orientación y al utilizar temperaturas entre 750 y 1000°C aportaron un

panorama más completo, Figura 2.9. Los procesos se realizaron con y sin reducción de estados post metalización (PMA).

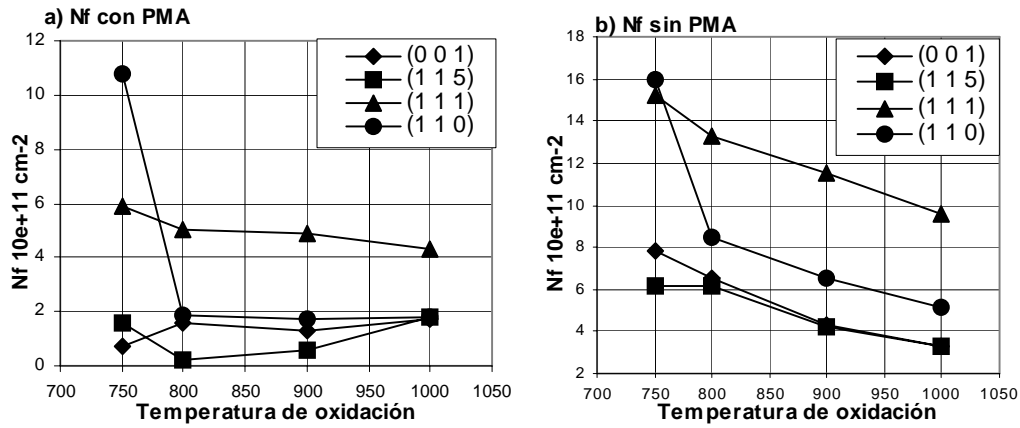


Figura 2.9 a) N_f de 4 orientaciones con PMA b) N_f de 4 orientaciones sin PMA para distintas temperaturas. El cruce de (1 1 0) con (1 1 1) es un detalle interesante [78].

En estas gráficas se encuentra una relación entre las velocidades de oxidación y N_f con la temperatura; es importante notar un cruce de N_f entre las orientaciones (1 1 0) y (1 1 1). Este hecho puede estar relacionado con el cruce en las velocidades de oxidación entre estas dos orientaciones, tratado en la sección 2.2.3. Los resultados de S. Vitkavage e Irene [78] se proporcionan en la Tabla 2.3.

Temperatura de oxidación en °C.	Densidad de carga fija N_f (10^{11}cm^{-2}), con dispersión máxima indicada \pm .			
	(0 0 1)	(1 1 5)	(1 1 1)	(1 1 0)
Muestras con reducción de estados post metalización (PMA).				
750	0.7 ± 0.4	1.6 ± 0.4	5.9 ± 0.4	10.8 ± 1.2
800	1.6 ± 0.5	0.2 ± 0.2	5.0 ± 0.6	1.9 ± 0.3
900	1.3 ± 0.2	0.6 ± 0.2	4.9 ± 0.1	1.7 ± 0.3
1000	1.7 ± 0.1	1.8 ± 0.1	4.3 ± 0.2	1.8 ± 0.1
Muestras sin reducción de estados post metalización (PMA).				
750	7.8 ± 1.6	6.2 ± 0.4	15.2 ± 0.6	16.0 ± 1.3
800	6.5 ± 0.9	6.2 ± 0.3	13.3 ± 0.4	8.5 ± 0.8
900	4.3 ± 0.1	4.2 ± 0.1	11.5 ± 0.3	6.5 ± 0.1
1000	3.3 ± 0.3	3.3 ± 0.3	9.6 ± 0.6	5.1 ± 0.5

Tabla 2.3 Resultados de densidad de carga fija para 4 orientaciones y varias temperaturas [78].

De la Figura 2.9 se puede especular que los resultados obtenidos por Abowits y col [79] completan los efectos de la temperatura de oxidación con 1200°C, donde N_f ya muestra claramente un mínimo en (0 0 1) y un máximo en (1 1 1), Figura 2.8.

La dependencia de la orientación es más marcada para bajas temperaturas. De los resultados se puede especular una fuerte dependencia de la carga respecto a las velocidades de oxidación, y como se expuso, estas velocidades de oxidación tienen una estrecha relación con la orientación cristalina. Sin embargo existen también otros factores que las afectan, como lo son el ambiente oxidante, la presión parcial de éste, la temperatura y la altitud respecto al nivel del mar (en sistemas de oxidación abiertos) o presión total de oxidación (sistemas cerrados).

2.7 Estados en la interfase Q_{it} .

2.7.1 Origen de Q_{it} .

Generalmente se acepta que los estados en la interfase tienen como origen enlaces de silicio incompletos en la interfase SiO_2 -Si. Conforme el óxido de silicio crece, rompe los enlaces Si-Si para formar el SiO_2 , y algunos de los enlaces quedan sueltos en la interfase ya que las celdas unitarias del Si y el SiO_2 no tienen el mismo tamaño. Los enlaces sueltos introducen una distribución de estados de energía permitidos en la banda prohibida. Estos estados actúan como trampas tanto para huecos como para electrones. Otras fuentes de generación de estados en la interfase pueden ser impurezas de metales, defectos causados por radiación o cualquier otro mecanismo de ruptura de enlaces. Un estado en la interfase es considerado donador si adquiere carga positiva o neutra al donar un electrón. Un estado en la interfase es considerado aceptor si adquiere carga negativa o neutral al aceptar un electrón. Generalmente se considera que los estados en la interfase son aceptores cuando se encuentran arriba del nivel de Fermi intrínseco y donadores cuando se encuentran debajo de éste, como se muestra en la Figura 2.10.

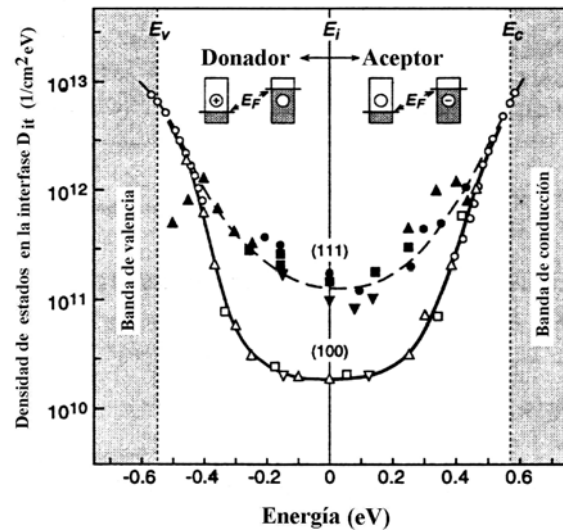


Figura 2.10 Distribución de estados en la banda prohibida, los estados arriba de E_i son aceptores y los que se encuentran debajo de E_i son donadores.

2.7.2 Efectos de Q_{it} .

El efecto principal de los estados en la interfase no es el corrimiento en voltaje de la curva C-V, como ocurre con las demás cargas, sino que producen un ‘estiramiento’ de la curva respecto al voltaje, como se puede ver en la Figura 2.11. Esta deformación es debida a que el nivel de ocupación de los estados en la interfase varía con el voltaje de compuerta.

Dado que los estados en la interfase aceptores y donadores se encuentran en las partes superior e inferior de la banda prohibida, respectivamente, se considera que no están cargadas cuando el potencial en la superficie es 0. Por ello no existe un corrimiento en la curva C-V debido a Q_{it} cuando C es igual a la capacitancia de media banda prohibida C_{mg} , definida para el potencial superficial igual al voltaje del nivel de Fermi ($\phi_s = \phi_f$). Cuando V_G es de un valor tal que $\phi_s < 0$, los estados en la interfase donadores arriba de E_f se cargan positivamente; esto resulta en un corrimiento negativo sobre el eje del voltaje de la curva C-V, dado por la ecuación (2.17).

$$\Delta V = -\frac{q}{C_{ox}} \int_{\varphi_s}^0 D_{it}(\varphi) d\varphi \quad \text{para } \varphi_s < 0 \quad (2.17)$$

De forma similar, cuando V_G es de un valor tal que $\varphi_s > 0$, los estados en la interfase debajo de E_f se cargan negativamente, lo que resulta en un corrimiento positivo en el eje del voltaje de la curva C-V, de acuerdo a la ecuación (2.18).

$$\Delta V = \frac{q}{C_{ox}} \int_0^{\varphi_s} D_{it}(\varphi) d\varphi \quad \text{para } \varphi_s > 0 \quad (2.18)$$

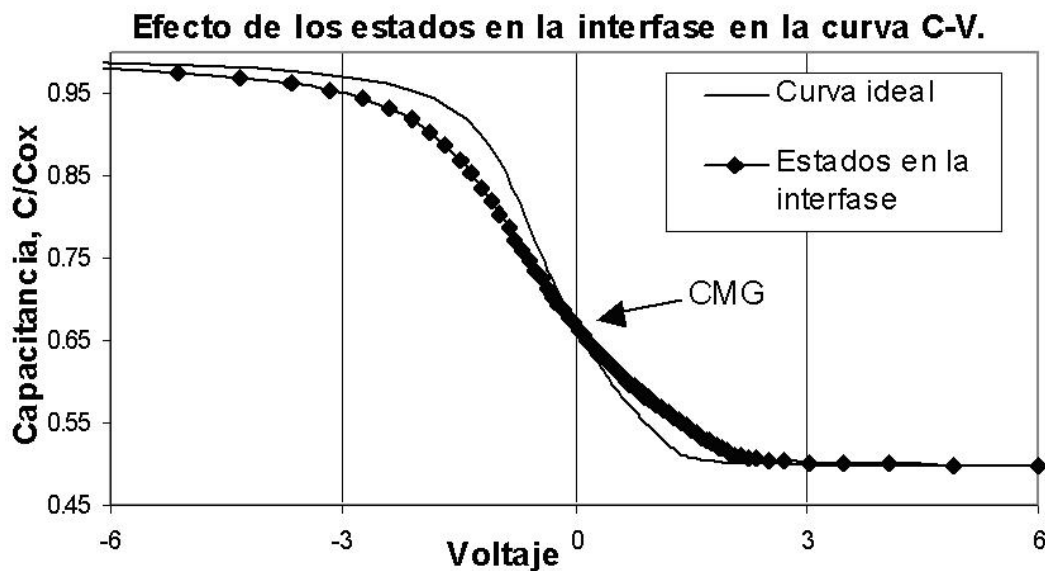


Figura 2.11 Efecto de estiramiento de los estados en la interfase en la curva C-V.

2.7.3 Reducción de Q_{it} .

Este tipo de carga se reduce con un tratamiento térmico a baja temperatura, aproximadamente 450°C , en una mezcla de 5 a 10% de hidrógeno en nitrógeno, llamada 'forming gas'. Realmente el gas que elimina los estados en la interfase es el hidrógeno, pero al ser un gas altamente explosivo sólo se usa diluido en algún gas

inerte. Los átomos de hidrógeno satisfacen los enlaces rotos en la superficie del silicio pasivando la superficie. Debe de hacerse notar la diferencia con la reducción de la carga fija, la cual se realiza a alta temperatura y en ambiente de nitrógeno.

2.7.4 Dependencia de Q_{it} con la orientación.

Los estados en la interfase, como ya se mencionó, parecen tener un origen común con la carga fija. Una de las razones principales es que, además de su ubicación en la interfase, tienen un comportamiento similar en función de la orientación. Uno de los primeros trabajos en este sentido fue realizado por Gray y Brown [80], donde se observó el incremento de la densidad de estados con la orientación en el orden $(0\ 0\ 1) < (1\ 1\ 0) < (1\ 1\ 1)$, oxidando a 1000°C . Después Arnold y col. [81] utilizó el mismo hemisferio de silicio que usaron Abowitz y col. [79], con un grosor de óxido aproximado de 1500Å crecido en oxígeno seco a 1200°C . Las densidades de Q_{eff} y Q_{it} presentaron el mismo comportamiento, como se puede observar en la Figura 2.12.

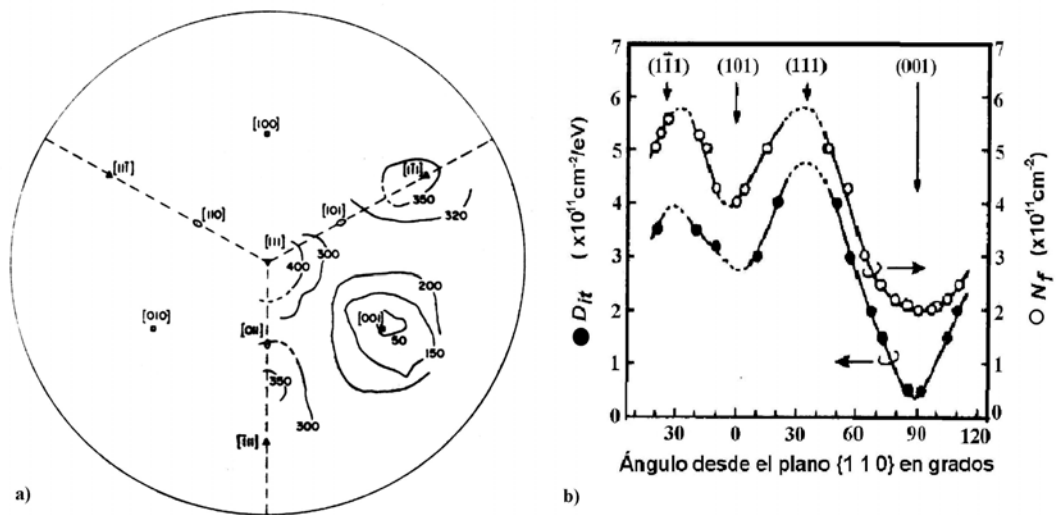


Figura 2.12 a) Simetría de los estados en la interfase respecto a la orientación cristalina. b) Comportamiento de los estados en la interfase y la carga fija con respecto a la orientación [81].

S. Vitkavage e Irene [78] además de la carga fija en el óxido estudiaron los estados en la interfase en las orientaciones (0 0 1), (1 1 5), (1 1 1) y (1 1 0), a diferentes temperaturas, con PMA y sin PMA. Los resultados nuevamente indican un comportamiento análogo a la carga fija respecto a la orientación, incluyendo los cruces entre las orientaciones (1 1 1) y (1 1 0) a bajas temperaturas, como se observa en la Figura 2.13.

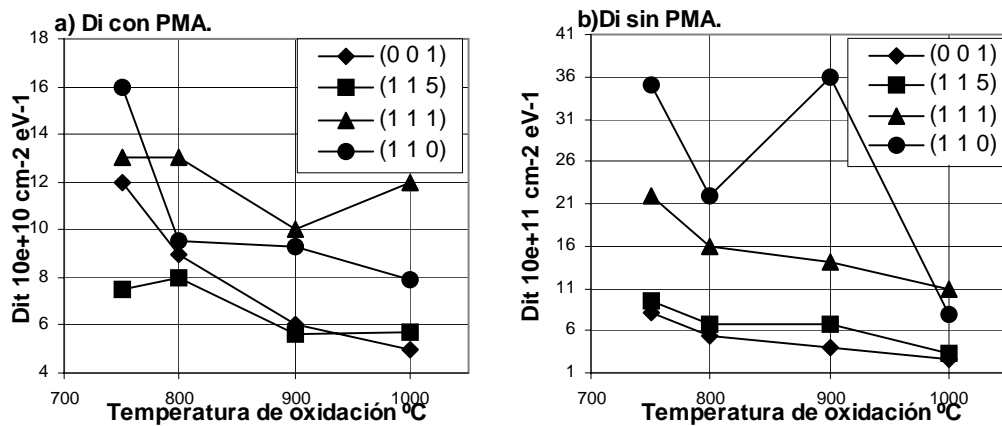


Figura 2.13 a) D_{it} para 4 orientaciones con PMA y b) D_{it} para 4 orientaciones sin PMA para distintas temperaturas [78].

Nuevamente se puede especular que existe una fuerte relación entre las densidades de carga y las velocidades de crecimiento para cada orientación, como se vio en la carga fija con el modelo de Akinwande y Plummer [77]. Sin embargo, para los estados en la interfase no existe ningún modelo teórico que explique la generación o reducción de éstos, a pesar de la especulación de que existe un origen común de la carga fija y los estados en la interfase. La relación con la densidad atómica o de enlaces sueltos en la superficie nuevamente se descarta como único factor. La mayor densidad corresponde a la orientación (1 1 0) y para ésta no se presenta la mayor densidad de cargas a todas las temperaturas de oxidación aplicando o no procedimientos para la reducción de carga.

2.8 Dipolos en el sistema MOS.

2.8.1 Origen de los dipolos.

Se ha encontrado en varios trabajos que la función trabajo del metal en el sistema MOS no coincide con los datos obtenidos por emisión termoiónica o emisión fotoeléctrica. Esta diferencia se ha interpretado como un voltaje extra a la diferencia de función trabajo metal-semiconductor. Los análisis demostraron que este voltaje es originado por cargas dipolares, cuya influencia no depende del grosor de óxido, como la carga fija en el óxido, la carga atrapada en el óxido, y la carga iónica móvil; sin embargo, este voltaje puede presentar dependencia con la orientación cristalina del sustrato.

Los dipolos se forman con dos cargas, positiva y negativa, asociadas eléctricamente por su cercanía. En el sistema MOS existen 3 orígenes para este tipo de cargas: el primero, y menos importante, las cargas opuestas atrapadas en el óxido y cercanas entre sí; segundo, la transferencia de carga parcial entre el silicio y el óxido debida a la distinta electronegatividad de los materiales [82]; y tercero, la transferencia de carga parcial entre el óxido y el metal [83].

S. Kar [83] encontró la función trabajo efectiva ϕ_{meff} para 7 distintos metales de compuerta; todas estas funciones difieren de la función trabajo encontrada por emisión termoiónica y emisión fotoeléctrica. Este trabajo fué totalmente experimental, ya que aunque se obtuvieron las funciones trabajo, no se ofrece ningún modelo o teoría acerca de la diferencia en la función trabajo. Estas diferencias en la función trabajo fueron interpretadas posteriormente como efecto de dipolos [82].

H. Z. Massoud [82] estudió el efecto de los dipolos en la interfase $\text{SiO}_2\text{-Si}$ usando una aproximación de primer orden. Los dipolos se forman debido a la

distinta electronegatividad de los materiales mediante el principio de ecualización de electronegatividad, Tabla 2.4 y Tabla 2.5. Este principio establece que cuando átomos de diferente electronegatividad forman un compuesto estable su electronegatividad se ajusta a una intermedia. Sin embargo, alguno de los átomos adquiere más de la mitad del electrón del enlace compartido por tener mayor electronegatividad, y este desplazamiento parcial de carga negativa crea un dipolo entre los átomos del compuesto. Este principio también se cumple para enlaces entre elementos y compuestos, como lo es la interfase Si-SiO₂.

Material	Electronegatividad		
	Ref [82]	Ref [84]	Ref [85]
Al	2.22	3.2	1.61
Hg		4.9	2.00
Si	2.84	4.8	1.90
O	5.21		3.44
H	3.55		2.10
N	4.49		3.04

Tabla 2.4 Electronegatividad de elementos usados en el capacitor MOS y otros elementos presentes en el sistema.

Compuestos en el óxido, ref. [82]	Electronegatividad
SiO ₂	4.256
SiH	3.175
SiN	3.571
SiOH	3.745
SiO	3.847
Si ₂ O	3.477
Si ₂ O ₃	4.087

Tabla 2.5 Electronegatividad de los compuestos presentes en la interfase óxido-silicio.

Para el caso de la interfase $\text{SiO}_2\text{-Si}$ podemos notar de la Tabla 2.5 que las especies posibles que se encuentran en la interfase tienen mayor electronegatividad que el silicio [82], por lo que los dipolos tendrán la carga negativa hacia el óxido y la positiva hacia el silicio, como se muestra en la Figura 2.14. Según ese trabajo la carga del dipolo está dada por la electronegatividad de los componentes y por la distancia entre estos (longitud del enlace). Para el caso de la interfase metal-óxido se pueden usar las electronegatividades correspondientes.

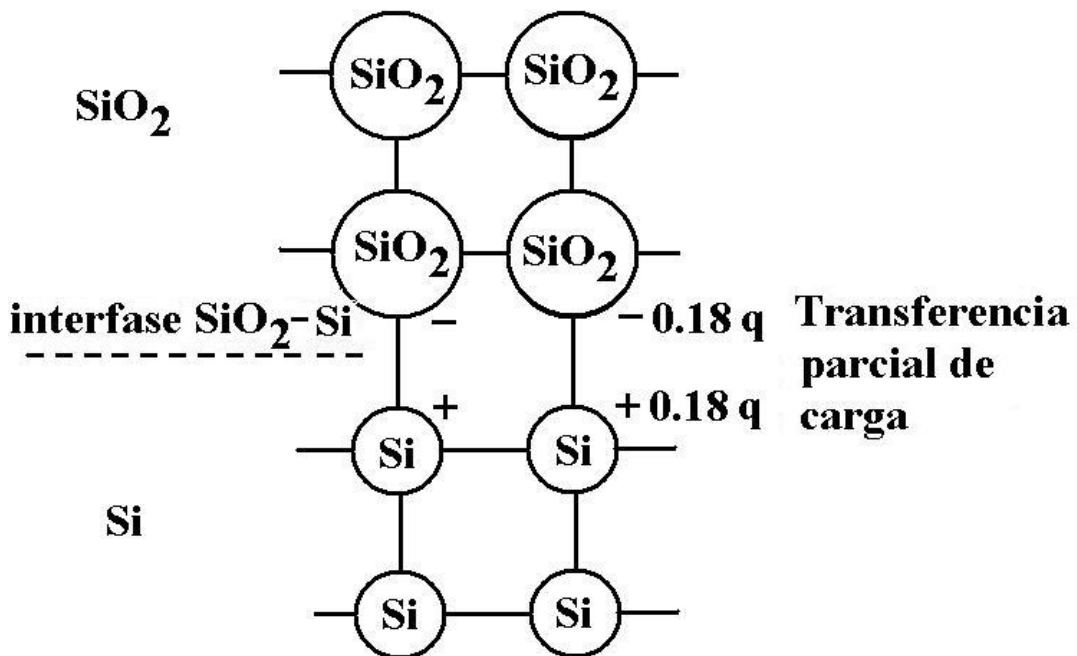


Figura 2.14 Transferencia parcial de carga en la interfase oxido-silicio por equalización de electronegatividad [82].

La transferencia parcial de carga no se limita a la interfase, dado que al quedar las moléculas o átomos inmediatos con electronegatividades medias, presentarán una distinta a la de las moléculas o átomos siguientes, de tal manera que la transferencia de carga se desplaza dentro de los materiales disminuyendo con cada capa atómica. Figura 2.15

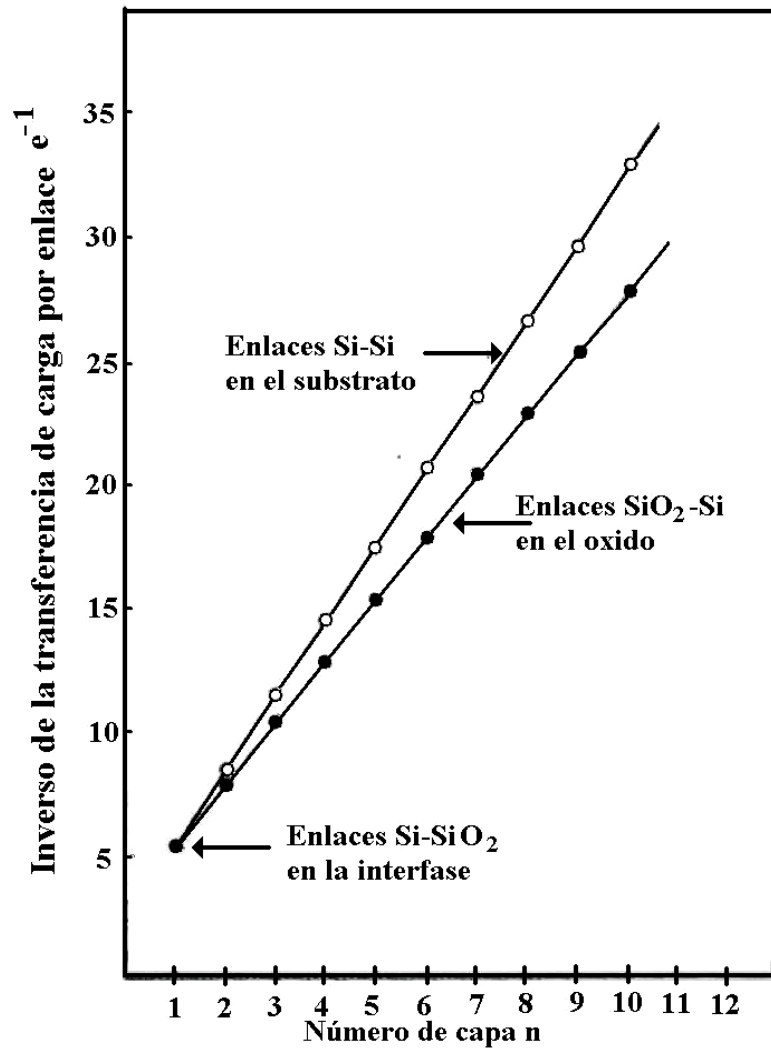


Figura 2.15 Decaimiento de la transferencia parcial de carga respecto a las capas lejos de la interfase [82].

2.8.2 Efectos de los dipolos

El efecto de los dipolos se refleja directamente como un voltaje extra en la compuerta, al igual que la carga fija, la carga atrapada en la interfase y la carga iónica móvil, lo que la distingue es el hecho de que su influencia es independiente del grosor de óxido. Principalmente se ha modelado como una adición a al diferencia de funciones trabajo metal-semiconductor [82 y 83], por lo que se refleja directamente en el voltaje de compuerta.

2.8.3 Dependencia de los dipolos con la orientación.

El efecto de transferencia de carga en los enlaces con distinta electronegatividad, la distancia entre dichas cargas, su ángulo respecto a la interfase y la cantidad de estos enlaces determinan el efecto final de un voltaje. Por lo anterior es claro que la densidad de enlaces en la superficie del silicio y su ángulo respecto a la superficie determinarán el efecto final. Como cada orientación cristalina tiene distinta densidad de enlaces y distinta inclinación de éstos, los dipolos presentarán una cierta dependencia con la orientación cristalina. La relación total está dada por [82]

$$V_{fb} = \phi_{ms} - \frac{Q_{eff}}{C_{ox}} - \frac{q\rho N_{bo} \delta}{\epsilon} \quad (2.19)$$

donde Q_{eff} es la carga efectiva con efecto dependiente del grosor de óxido, ρ es la transferencia de carga parcial, N_{bo} es la densidad de enlaces, ϵ es el promedio de las permitividades de los materiales $\epsilon = (\epsilon_{si} + \epsilon_{ox})/2$ y δ es la componente perpendicular a la interfase de la separación d de la transferencia parcial de carga; δ está dada por

$$\delta = d \sin \theta \quad (2.20)$$

donde θ es el ángulo respecto a la interfase SiO₂-Si.

El desplazamiento del voltaje de banda plana debido a los dipolos en la orientación (0 0 1) es de -0.476 V y el de la orientación (1 1 1) es de -0.951V, de tal manera que la diferencia de función trabajo metal-semiconductor es 0.475V más grande para (0 0 1) que para (1 1 1) [82].

Es importante hacer notar que este desplazamiento se puede adicionar a la ϕ_m para obtener una función trabajo del metal efectiva ϕ_{meff} , pero eso no indica que la

función trabajo del metal varíe con la orientación o que varíe la E_c del semiconductor, como algunos han propuesto [86].

Este modelo de primer orden quizás no pueda utilizarse adecuadamente en todas las orientaciones bajo estudio, ya que las diversas inclinaciones de los enlaces respecto a la superficie y los escalones o terrazas atómicas pueden alterar el modelo.

2.9 Conclusiones.

De este capítulo se resalta que las cargas en el óxido y la interfase tienen gran influencia en el desempeño de los dispositivos, y es por ello que se deben monitorear. Es importante el hecho de que la carga fija y los estados en la interfase varíen con la orientación cristalina, sin embargo esta dependencia no ha podido ser explicada satisfactoriamente. Sólo para la carga fija existe un modelo, pero éste depende de otro factor que no tiene una clara explicación, la razón de crecimiento del óxido. Es también importante la relación de los estados en la interfase con la velocidad de crecimiento del óxido. Finalmente las velocidades de crecimiento (de las que parecen depender la carga fija y los estados en la interfase) tienen dependencia no sólo de la orientación cristalina, sino del oxidante, de la presión parcial de oxidación, de la temperatura y de la altitud o presión total de oxidación.

Capítulo 3

Métodos de caracterización

3.1 Introducción.

El método de caracterización de un parámetro tiene gran importancia, ya que determina el límite de exactitud del resultado a obtener, esta exactitud puede disminuir debido a los instrumentos de medición. La exactitud del método está determinada por características tales como: tomar la medición de forma directa o indirecta, la resolución, la inmunidad al ruido y reproducibilidad, etc. En este capítulo se exponen detalladamente los métodos físicos de caracterización utilizados y su aplicación a cada uno de los parámetros a caracterizar.

3.2 Elipsometría.

La elipsometría es una técnica óptica no destructiva a partir de la cual se puede determinar mediante reflexión de luz el índice de refracción de una muestra; también se pueden determinar el grosor y el índice de refracción de una capa o capas superiores mediante modelos. Existen varias modalidades de elipsometría, tales como la elipsometría nula, la elipsometría rotativa y la elipsometría espectroscópica. Aquí se describen las dos primeras en su aplicación a **sustratos** y **sistemas de una sola**

capa transparente; un tratamiento más extenso sobre elipsometría se puede encontrar en las referencias [87 y 88].

3.2.1 Principio físico de operación.

Un haz monocromático (típicamente $\lambda=632.8\text{nm}$) de luz polarizada se hace incidir en un sistema óxido-silicio, este haz sufre los fenómenos de reflexión, y transmisión dentro del óxido, el óxido se considera transparente a la longitud de onda del haz y por lo tanto no existe dispersión. El haz reflejado regresa al medio 1, típicamente aire, con un índice $N_1=1$. El haz original tiene componentes electromagnéticas E_p (paralela al plano de incidencia) y E_s (perpendicular al plano de incidencia), como se muestra en la Figura 3.1. El haz reflejado tiene componentes E_{rp} y E_{rs} igualmente paralela y perpendicular. La razón de la amplitud reflejada respecto a la amplitud incidente está dada por los coeficientes de reflexión de Fresnel.

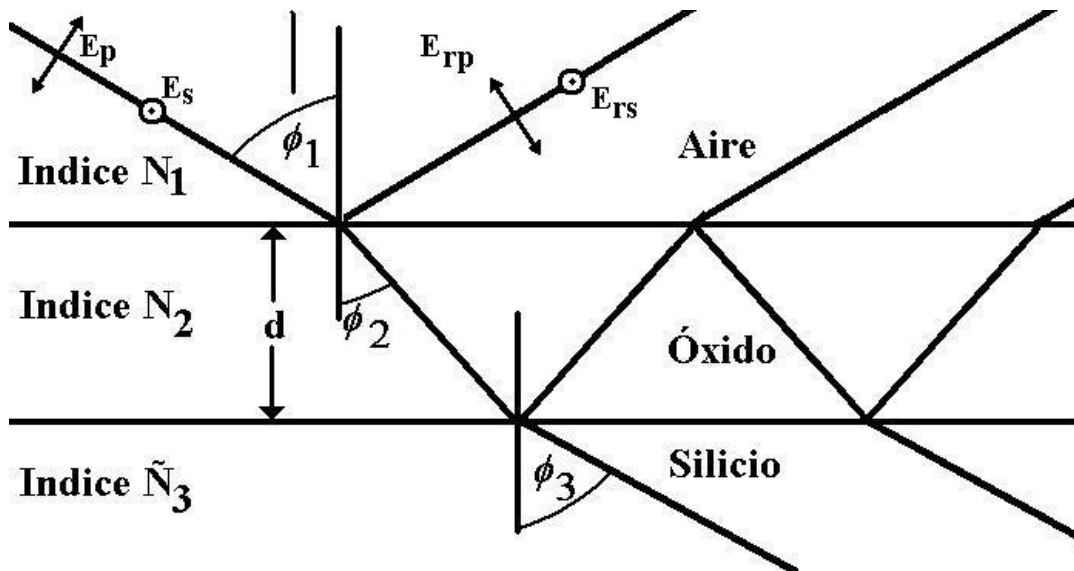


Figura 3.1 Incidencia de un haz de luz en el sistema óxido-silicio con los distintos ángulos, índices y haces reflejados, así como el grosor de la capa d .

Los coeficientes de reflexión de Fresnel son 2, uno para la razón de las amplitudes paralelas al plano r_{12}^p (3.1) y otro para la razón de las amplitudes perpendiculares a este r_{12}^s (3.2).

$$r_{12}^p = \frac{N_2 \cos \phi_1 - N_1 \cos \phi_2}{N_2 \cos \phi_1 + N_1 \cos \phi_2} \quad (3.1)$$

$$r_{12}^s = \frac{N_1 \cos \phi_1 - N_2 \cos \phi_2}{N_1 \cos \phi_1 + N_2 \cos \phi_2} \quad (3.2)$$

donde N_2 es índice de refracción del óxido, con un valor típico de 1.46, ϕ_1 es el ángulo de incidencia respecto a la vertical y ϕ_2 es el ángulo respecto a la vertical en el óxido o segundo medio.

Realizando el mismo análisis para la segunda interfase entre el óxido y el silicio obtenemos los coeficientes paralelo r_{23}^p (3.3) y perpendicular r_{23}^s (3.4)

$$r_{23}^p = \frac{\tilde{N}_3 \cos \phi_2 - N_2 \cos \phi_3}{\tilde{N}_3 \cos \phi_2 + N_2 \cos \phi_3} \quad (3.3)$$

$$r_{23}^s = \frac{N_2 \cos \phi_2 - \tilde{N}_3 \cos \phi_3}{N_2 \cos \phi_2 + \tilde{N}_3 \cos \phi_3} \quad (3.4)$$

donde \tilde{N}_3 es el índice de refracción del silicio, que es complejo cuando $\lambda = 632.8$ nm, con un valor de $3.874 - 0.037i$; y ϕ_3 es el ángulo respecto a la normal en el silicio.

Utilizando la ley de Snell podemos conocer los términos de las ecuaciones (3.1) a (3.4), ya que:

$$N_2 \cos \phi_2 = \sqrt{N_2^2 - N_1^2 \sin^2 \phi_1} \quad (3.5)$$

$$\tilde{N}_3 \cos \phi_3 = \sqrt{\tilde{N}_3^2 - N_1^2 \sin^2 \phi_1} \quad (3.6)$$

Utilizando estas razones de amplitud de cada interfase podemos conocer los **coeficientes de reflexión total** paralelo R^p y perpendicular R^s al plano de incidencia, dados por

$$R^p = \frac{r_{12}^p + r_{23}^p \exp(-i2\beta)}{1 + r_{12}^p r_{23}^p \exp(-i2\beta)} \quad (3.7)$$

$$R^s = \frac{r_{12}^s + r_{23}^s \exp(-i2\beta)}{1 + r_{12}^s r_{23}^s \exp(-i2\beta)} \quad (3.8)$$

donde β es igual a

$$\beta = 2\pi \left(\frac{d}{\lambda} \right) N_2 \cos \phi_2 \quad (3.9)$$

en esta ecuación d es el grosor de la película de óxido y λ la longitud de onda del haz electromagnético.

La razón de la reflexión total paralela a la reflexión total perpendicular se define como

$$\rho = \frac{R^p}{R^s} = \tan \Psi e^{i\Delta} \quad (3.10)$$

conocida como la **ecuación fundamental de la elipsometría**, y donde Ψ es el ángulo cuya tangente es la razón de las magnitudes de los coeficientes de reflexión total

$$\Psi = \tan^{-1} \left| \frac{R^p}{R^s} \right| \quad (3.11)$$

y varía entre 0 y 90 grados

Definiendo δ_1 como la diferencia de fase entre la componente paralela y perpendicular del haz incidente y δ_2 como la diferencia de fase entre la componente paralela y perpendicular del haz reflejado, tenemos que

$$\Delta = \delta_1 - \delta_2$$

por lo que Δ se define como el cambio en la diferencia de fase del haz incidente al reflejado. Puede variar entre 0 y 360 grados.

Teniendo en cuenta que ρ es un número complejo podemos obtener separadamente los valores de Ψ y Δ

$$\Psi = \tan^{-1}|\rho| \quad (3.12)$$

$$\Delta = \tan^{-1}\left(\frac{\text{Im } \rho}{\text{Re } \rho}\right) \quad (3.13)$$

Redefiniendo a Δ

$$\Delta = \begin{cases} \Delta & \Delta \geq 0 \\ \Delta + 360 & \Delta < 0 \end{cases} \quad (3.14)$$

estas variables Δ y Ψ son las que se obtienen de las mediciones elipsométricas básicas. Es de hacer notar que al ser angulares son periódicas, cada periodo comprende determinados grosores de óxido, el grosor límite d_p al cuál se repite el periodo está dado por

$$d_p = \frac{\lambda}{2\sqrt{N_2^2 - \sin^2 \phi_1}} \quad (3.15)$$

y está determinado por el ángulo de incidencia, el índice de la película a analizar y la longitud de onda del haz de prueba.

Finalmente, la determinación del grosor de óxido de una capa se encuentra de gráficas o tablas de las trayectorias elipsométricas o cálculos iterativos. Dichas trayectorias se calculan a partir de $\Delta(d)$ vs. $\Psi(d)$ con parámetros fijos λ , N_1 , N_2 , \tilde{N}_3 y ϕ_1 . En la Figura 3.2 se muestra la trayectoria elipsométrica para los parámetros típicos de un sistema óxido-silicio medido con un láser He-Ne $\lambda=6328 \text{ \AA}$, $N_1=1$, $N_2=1.46$, $\tilde{N}_3=3.874-0.067i$ y $\phi_1=70^\circ$ con indicadores cada 100\AA de grosor de óxido (para estos parámetros $d_p=2832 \text{ \AA}$) [87].

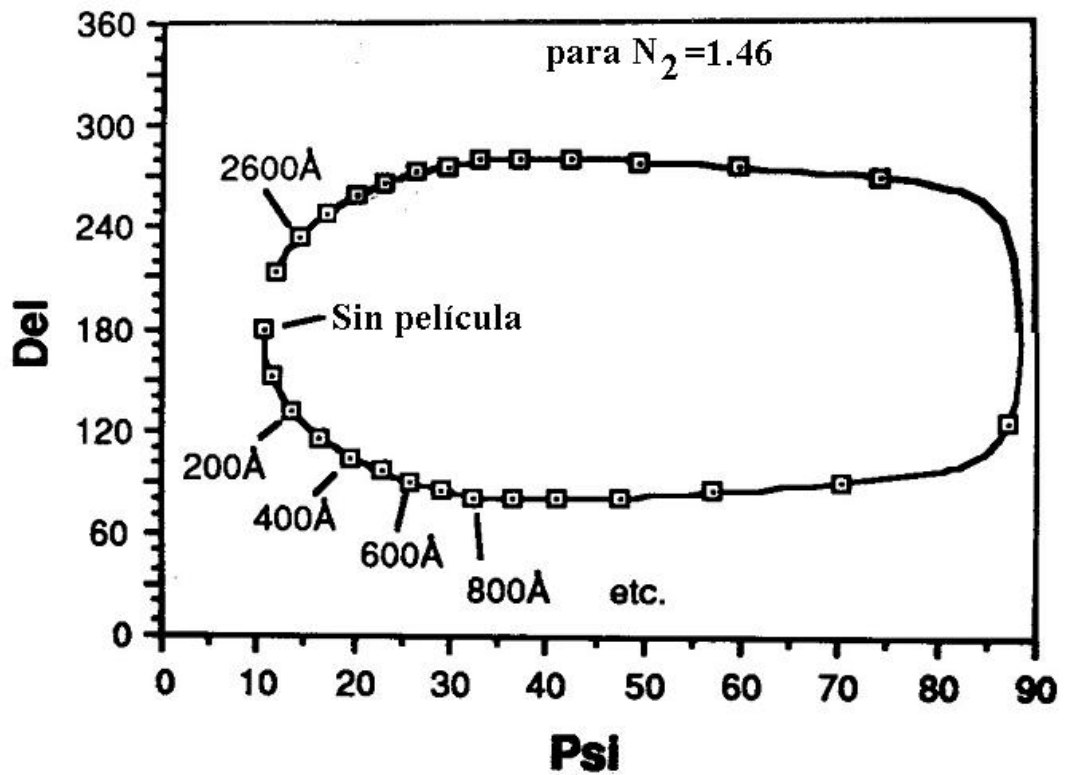


Figura 3.2 Trayectoria elipsométrica para un óxido de silicio y sustrato de silicio ideales en ambiente de aire con indicadores cada 100 Å [87].

En realidad el índice de refracción del óxido depende de la temperatura de oxidación y estrés, por lo que la manera de determinar tanto el grosor como el índice de refracción del óxido es medir Δ y Ψ mediante algún método elipsométrico y después buscar estos valores en trayectorias para distintos índices de refracción. La trayectoria que más se ajuste a los valores medidos determina tanto el grosor de óxido como el índice de refracción. En la Figura 3.3 se muestran las trayectorias elipsométricas calculadas para índices N_2 de 1.1 a 2.0 y los demás parámetros iguales a la Figura 3.2.

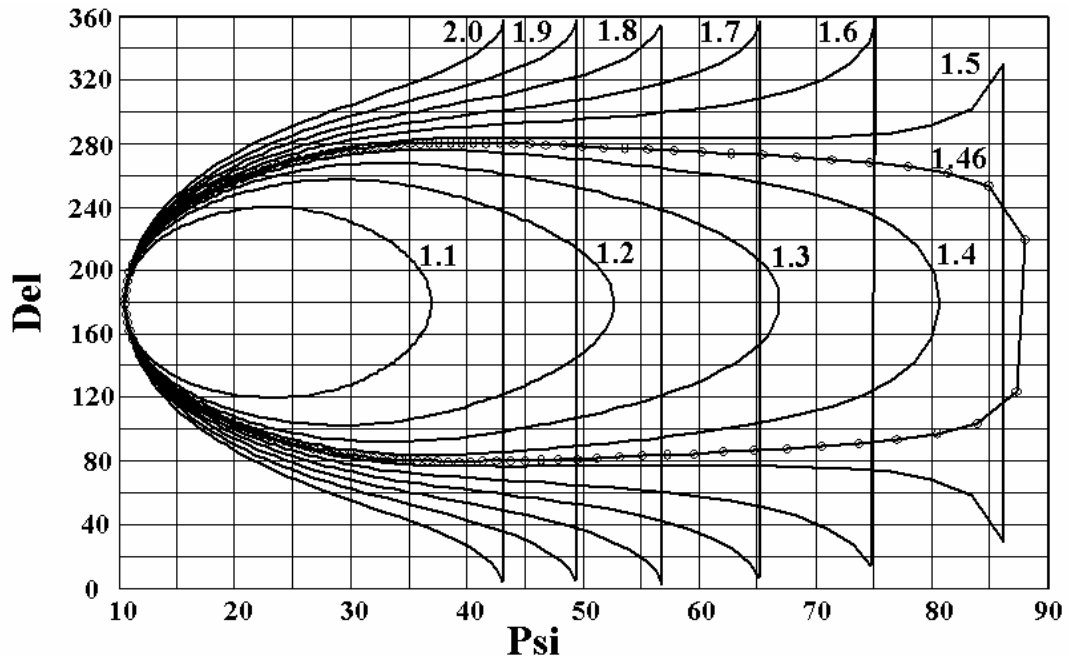


Figura 3.3 Trayectorias elipsométricas para índices de refracción de 1.1 a 2.0 en ambiente de aire y sustrato de silicio, marcado el índice 1.46 del óxido de silicio cada 20 Å.

En forma ideal se puede conocer el grosor e índice de refracción de cualquier material transparente a la longitud de onda de prueba sobre silicio, tal como dióxido de silicio o nitruro de silicio. La exactitud del cálculo del índice de refracción y grosor de óxido están limitados por los siguientes parámetros:

1. Para $\Psi < 15^\circ$ las trayectorias son muy cercanas, lo que disminuye la exactitud (grosos más precisos de 300 a 2500 Å aproximadamente en el 1er periodo de SiO_2)
2. El modelo es para una interfase ideal del óxido con el silicio, pero es conocido que existe una región no estequiométrica de unos 20 Å que reduce la exactitud del modelo.
3. La precisión de Δ y Ψ . Dependiendo de la exactitud de nuestra medición será más exacto el resultado, por lo que las mediciones manuales son más susceptibles a errores mayores.

4. Medir el índice del sustrato ayuda a compensar pequeñas variaciones de su índice de refracción, pero presenta el problema de que no existe una interfase ideal con el aire; por lo general se tienen contaminantes químicos usados en la remoción del óxido nativo y trazas de óxido.

A continuación se describen 2 métodos usados en esta tesis para obtener Δ y Ψ : elipsometría nula y elipsometría rotativa.

3.2.2 Elipsometría Nula.

En la elipsometría nula se utiliza el arreglo de la Figura 3.4, donde el polarizador ajustable deja pasar un haz polarizado linealmente, este haz es polarizado en forma elíptica por la placa de un cuarto de onda (QWP), este haz incide en la muestra de tal manera que se ajusta el polarizador a un ángulo P_1 para obtener un haz reflejado lineal (la muestra compensa la polarización del QWP). Finalmente el analizador es rotado a un ángulo A_1 para encontrar extinción total (90 grados respecto a la polarización lineal que refleja la muestra). Generalmente se toman 2 mediciones en distintos cuadrantes (A_1, P_1) y (A_2, P_2) y se calcula el promedio.

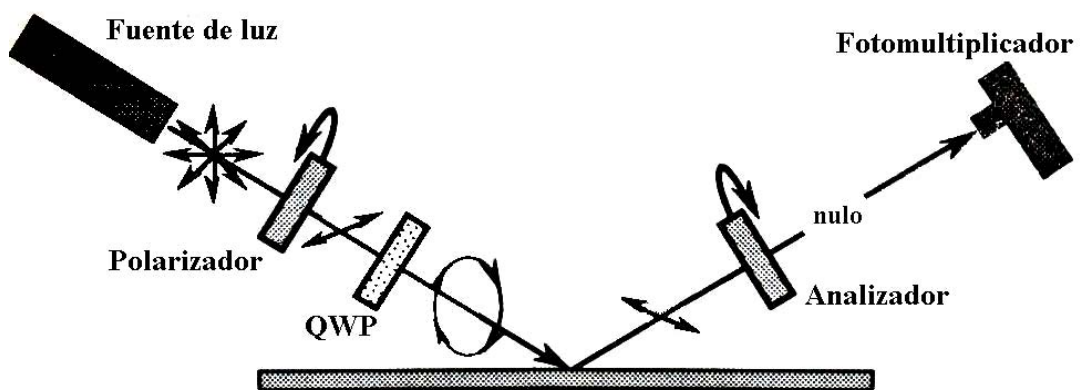


Figura 3.4 Elipsómetro nulo [87]. El polarizador se gira hasta obtener una polarización elipsométrica por el QWP que es compensada por la muestra a una polarización lineal, finalmente el analizador nulifica este haz lineal.

Dependiendo del ángulo al que sea colocado el QWP se obtendrán las relaciones para Δ y Ψ dependientes de los ángulos A_1 , A_2 , P_1 y P_2 , de tal manera que para 90° del QWP tenemos las relaciones

$$\Psi = \frac{180^\circ - (A_2 - A_1)}{2} \quad y \quad \Delta = 360 - (P_1 + P_2) \quad (3.16)$$

una vez obtenidos Ψ y Δ , se buscan en las trayectorias elipsométricas y se obtiene el grosor de óxido correspondiente.

3.2.3 Elipsometría Rotativa.

Existen 2 tipos de elipsómetros de este tipo, el de elipsometría nula automatizado y el fotométrico (Figura 3.5). El primero es un elipsómetro nulo con motores automáticos para variar los ángulos, el segundo mide la intensidad del haz y la interpreta como se describe a continuación.

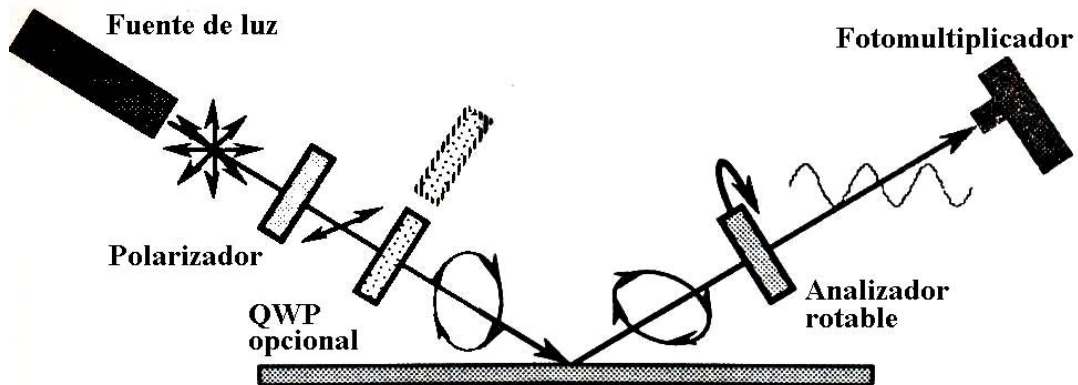


Figura 3.5 Elipsómetro rotativo[87]. En este elipsómetro el polarizador y el QWP están fijos, sólo se rota el analizador, de tal manera que la Intensidad del haz es medida y analizada por método de Fourier.

El elipsómetro rotativo fotométrico tiene el polarizador fijo, el QWP es opcional y el analizador gira de forma automatizada. La intensidad medida varía con el giro de forma oscilante, como se puede ver en la Figura 3.5 y se comporta de acuerdo a la ecuación (3.17).

$$I(t) = I_0 [1 + A_f \cos 2A(t) + B_f \sin 2A(t)] \quad (3.17)$$

donde I_0 es el promedio de la intensidad luminosa, $A_f = -\cos 2\Psi$, $B_f = \sin 2\Psi \cdot \cos \delta_2$, y

$$A(t) = 2\pi ft + A_c \quad (3.18)$$

con f igual a la frecuencia angular de rotación del analizador y A_c una diferencia de fase constante. Despejando, tenemos

$$\Delta = \cos^{-1} \left(\sqrt{\frac{B_f^2}{1 - A_f^2}} \right) \quad (3.19)$$

y

$$\Psi = \tan^{-1} \left(\sqrt{\frac{1 + A_f}{1 - A_f}} \right) \quad (3.20)$$

A_f y B_f son obtenidos mediante análisis de Fourier de $I(t)$. Por último se buscan o calculan d y N_2 de las trayectorias elipsométricas.

Con los grosores de óxido obtenidos por elipsometría podemos obtener las constantes de crecimiento lineal y parabólica para el modelo de Deal y Grove, sección 2.2.1. Derivando la ecuación (2.8) y manipulando algebraicamente tenemos

$$\frac{dx_0}{dt} = \frac{B}{2x_0 + A} \quad (3.21)$$

invirtiéndola tenemos

$$\left(\frac{dx_0}{dt}\right)^{-1} = \frac{2}{B}x_0 + \frac{A}{B} \quad (3.22)$$

esta derivada invertida es una recta con pendiente $2/B$ e intercepta el eje en A/B . Con un conjunto de oxidaciones que satisfagan al modelo de Deal y Grove podemos obtener las constantes lineal B/A y parabólica B . El problema es tener un conjunto de valores lo suficientemente grande para evitar inexactitud en la derivada.

3.3 Mediciones capacitancia-voltaje de alta frecuencia.

La medición capacitancia-voltaje en capacitores MOS es una de las herramientas más poderosas para la caracterización de parámetros de proceso en la tecnología MOS, ya que es rápida, no destructiva y aporta gran cantidad de información. La medición de alta frecuencia se realiza con una polarización de DC y una componente AC de alta frecuencia y pequeña señal; la frecuencia de esta señal debe ser tal que los portadores minoritarios no respondan a la variación, mientras que los mayoritarios deben responder a ella.

3.3.1 Grosor de óxido.

En una estructura MOS (metal-óxido-semiconductor) se tiene un capacitor con el metal y el semiconductor como placas paralelas y el óxido como aislante, esta capacitancia, conocida como capacitancia de óxido C_{ox} , está determinada por la siguiente ecuación:

$$C_{ox} = \frac{AK_{ox}\epsilon_0}{t_{ox}} \quad (3.23)$$

Donde A es el área del metal de compuerta, K_{ox} la permitividad dieléctrica relativa del óxido, ϵ_0 la permitividad dieléctrica del vacío y t_{ox} el grosor del óxido.

La polarización inversa del dispositivo crea una región de agotamiento o deserción de portadores en el semiconductor. Dicha región se comporta como una capa más de aislante, dando un capacitor en el silicio C_{si} dada por la ecuación

$$C_{si} = \frac{AK_{si}\epsilon_0}{W} \quad (3.24)$$

donde K_{si} es la permitividad dieléctrica relativa del silicio y W es el ancho de la región de agotamiento que es dependiente de la polarización del dispositivo

La combinación en serie de C_{ox} y C_{si} da como resultado una capacitancia total C_{tot} dada por

$$C_{tot} = \frac{1}{\frac{1}{C_{ox}} + \frac{1}{C_{si}}} \quad (3.25)$$

3.3.2 Dopado del sustrato.

Cuando el voltaje de polarización logra la inversión de la superficie la región de agotamiento alcanza un máximo $W_{d\max}$ y la capacitancia alcanza el mínimo C_{inv} , dado por

$$C_{inv} = \frac{1}{\frac{1}{C_{ox}} + \frac{1}{A\epsilon_{si}/W_{d\max}}} \quad \text{ó} \quad C_{inv} = \frac{1}{\frac{1}{C_{ox}} + \frac{W_{d\max}}{A\epsilon_{si}}} \quad (3.26)$$

donde ϵ_{si} es la permitividad del silicio, dada por $K_{si}\epsilon_0$

Esta $W_{d\max}$ se logra al tener un voltaje en la superficie del semiconductor igual a 2 veces el potencial del sustrato ϕ_B , dado por

$$\phi_B = D \frac{kT}{q} \ln \left(\frac{N_B}{n_i} \right) \quad (3.27)$$

donde D es -1 para semiconductor tipo n y 1 para semiconductor tipo p, N_B es la densidad volumétrica de dopantes en el sustrato, k la constante de Boltzman, T la temperatura en Kelvin, q la carga elemental del electrón y n_i la concentración de portadores intrínseca en el silicio. $W_{d\max}$ queda determinada por

$$W_{d\max} = \sqrt{\frac{4\epsilon_{si}|\phi_B|}{qN_B}} \quad (3.28)$$

sustituyendo en la capacitancia de inversión tenemos

$$C_{inv} = \frac{1}{\frac{1}{C_{ox}} + \frac{\sqrt{\frac{4\epsilon_{si}|\phi_B|}{qN_B}}}{A\epsilon_{si}}} \quad (3.29)$$

de aquí podemos despejar N_B

$$N_B = \frac{4}{q\epsilon_{si}} \frac{|\phi_B|}{A^2 \left(\frac{1}{C_{inv}} - \frac{1}{C_{ox}} \right)^2} \quad (3.30)$$

y sustituyendo el valor de ϕ_B

$$N_B = \frac{4kT}{q^2\epsilon_{si}} \frac{\ln\left(\frac{N_B}{n_i}\right)}{A^2 \left(\frac{1}{C_{inv}} - \frac{1}{C_{ox}} \right)^2} \quad (3.31)$$

De tal manera que N_B puede ser obtenida mediante iteraciones de esta ecuación; a 300°K esta ecuación se puede expresar como

$$N_B = 6.2303099 \times 10^{29} \frac{\ln\left(\frac{N_B}{n_i}\right)}{A^2 \left(\frac{1}{C_{inv}} - \frac{1}{C_{ox}} \right)^2} (cm^{-3}) \quad (3.32)$$

3.3.3 Densidad de carga efectiva en el óxido.

El método comúnmente usado para encontrar la densidad de carga efectiva N_{eff} es el del corrimiento de voltaje de banda plana, la condición de banda plana implica que las bandas están alineadas y el potencial superficial ψ_s es igual a 0. Mediante este método se encuentra el voltaje de banda plana ideal V_{fb}^o y se compara con el voltaje de banda plana real V_{fb} , y la diferencia entre estos 2 voltajes determina la densidad de carga efectiva.

Primero se determina V_{fb}^o dado por la diferencia de funciones trabajo del metal y el semiconductor

$$V_{fb}^o = \phi_m - \left(\chi_{si} + \frac{E_g}{2} + D \frac{kT}{q} \ln \left(\frac{N_B}{n_i} \right) \right) \quad (3.33)$$

donde ϕ_m es la función trabajo del metal de compuerta, χ_{si} es la afinidad electrónica del silicio y E_g el ancho de su banda prohibida; se puede utilizar la forma simplificada

$$V_{fb}^o = \phi_m - \left(4.6125 + D \cdot 0.02586 \ln \left(\frac{N_B}{n_i} \right) \right) \quad (3.34)$$

El voltaje de banda plana real se encuentra a partir de la capacitancia de banda plana C_{fb} en la curva experimental, donde el ancho de región de agotamiento para la condición de banda plana está dado por la longitud de Debye L_D , quedando la capacitancia de banda plana como

$$C_{fb} = \frac{1}{\frac{1}{C_{ox}} + \frac{L_D}{A\epsilon_{si}}} \quad (3.35)$$

donde la longitud de Debye es

$$L_D = \sqrt{\frac{\epsilon_{si}KT}{q^2 N_B}} \quad (3.36)$$

Sustituyendo, normalizando respecto a C_{ox} , y simplificando tenemos

$$C'_{fb} = \frac{1}{1 + \frac{L_D}{3t_{ox}}} \quad \text{ó} \quad C'_{fb} = \frac{1}{1 + \frac{1.362819 \times 10^{10}}{t_{ox} \sqrt{N_B}}} \quad (3.37)$$

donde C'_{fb} es la capacitancia de banda plana normalizada, con t_{ox} en angstroms y N_B en $1/\text{cm}^3$. Esta capacitancia se encuentra en la curva experimental para obtener el voltaje de banda plana real. La relación entre V'_{fb} y V_{fb} esta dada por

$$V_{fb} = V'_{fb} + \frac{qN_{eff}}{\epsilon_{ox}} t_{ox} \quad (3.38)$$

La diferencia entre el voltaje real y el ideal es un corrimiento dado por la densidad de carga efectiva, despejando N_{eff} y simplificando obtenemos

$$N_{eff} = \frac{V_{fb} - V'_{fb}}{-4.663977 \times 10^{-15} t_{ox}} \quad (3.39)$$

con t_{ox} en angstroms.

El método de corrimiento de banda plana se utiliza dado que bajo estas condiciones las bandas de energía no presentan variaciones espaciales y no existe caída de voltaje en el óxido. Sin embargo, en esta condición la cantidad de estados ocupados en la interfase no es la mínima, y pueden contribuir grandemente al cálculo de N_{eff} . Para evitar esto, se puede utilizar una nueva técnica propuesta en este trabajo, la de corrimiento del voltaje de media banda V_{mg} . El procedimiento es similar, sólo que se utiliza el corrimiento del voltaje de media banda en lugar del voltaje de banda plana. El voltaje V_{mg} se ha utilizado en forma similar unicamente para el análisis de dipolos en la interfase, por Kar [83].

Para alcanzar la condición de media banda (mid gap) es necesario que el voltaje superficial ψ_s sea igual al potencial del sustrato ϕ_B , de tal manera que el voltaje ideal de media banda V_{mg}^o es

$$V_{mg}^o = V_{fb}^o + V_{ox}(\psi_s) + \psi_s \quad (3.40)$$

donde

$$\psi_s = \phi_B = D \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{N_B}{n_i}\right) \quad (3.41)$$

y

$$V_{ox}(\psi_s) = D \frac{A \sqrt{2K_{si} \epsilon_0 q N_B |\psi_s|}}{C_{ox}} \quad (3.42)$$

sustituyendo

$$V_{mg}^o = \phi_m - \left(\chi_{si} + \frac{E_g}{2} + D \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{N_B}{n_i}\right) \right) + D \frac{A \sqrt{2K_{si} \epsilon_0 q N_B |\psi_s|}}{C_{ox}} + D \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{N_B}{n_i}\right) \quad (3.43)$$

y simplificando obtenemos

$$V_{mg}^o = \phi_m - 4.6125 + D \frac{A \sqrt{2K_{si} \epsilon_0 q N_B |\psi_s|}}{C_{ox}} \quad (3.44)$$

ó

$$V_{mg}^o = \phi_m - 4.6125 + D 9.263706 \times 10^{-17} \frac{A \sqrt{-N_B \ln\left(\frac{N_B}{n_i}\right)}}{C_{ox}} \quad (3.45)$$

Ahora falta obtener el voltaje de media banda real; éste se obtiene de encontrar la correspondiente capacitancia de media banda en la curva C-V experimental. La capacitancia de media banda C_{mg} se obtiene de evaluar la región de agotamiento en función del potencial superficial

$$W(\psi_s) = \sqrt{\frac{2\epsilon_{si} |\psi_s|}{q N_B}} \quad (3.46)$$

en un potencial superficial igual al potencial del sustrato ($W_{d\phi_B}$), quedando

$$W_{d\phi_B} = 578.19511 \sqrt{\frac{\ln\left(\frac{N_B}{n_i}\right)}{N_B}} \quad (3.47)$$

quedando C_{mg} igual a

$$C_{mg} = \frac{1}{\frac{1}{C_{ox}} + \frac{W_{d\phi_B}}{A\epsilon_{si}}} \quad (3.48)$$

Sustituyendo valores, simplificando, y normalizando respecto a C_{ox} obtenemos

$$C'_{mg} = \frac{1}{1 + \frac{1.927317 \times 10^{10}}{t_{ox}} \sqrt{\frac{\ln\left(\frac{N_B}{n_i}\right)}{N_B}}} \quad (3.49)$$

con t_{ox} en angstroms, N_b , y n_i en $1/\text{cm}^3$.

Una vez obtenida la capacitancia de media banda se busca en la curva experimental para obtener el voltaje de media banda real V_{mg} . La relación que se tiene del voltaje de media banda con la carga efectiva tiene la misma forma que la relación del voltaje de banda plana, con un corrimiento debido a la carga efectiva.

$$V_{mg} = V_{mg}^o + \frac{qN_{eff}}{\epsilon_{ox}} t_{ox} \quad (3.50)$$

de tal manera que la densidad efectiva simplificada es

$$N_{eff} = \frac{V_{mg} - V_{mg}^o}{-4.663977 \times 10^{-15} t_{ox}} \quad (3.51)$$

con t_{ox} en angstroms

En la Figura 3.6 se aprecia como afecta la densidad de estados en la banda prohibida a la determinación de la densidad de carga efectiva en un capacitor tipo P, adicionando una supuesta carga positiva (corrimiento a la izquierda).

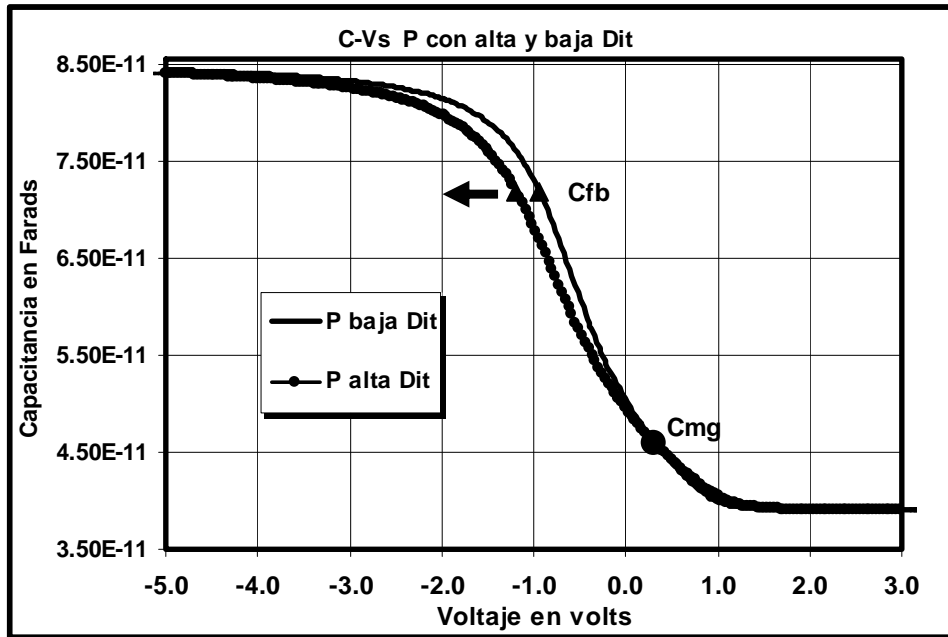


Figura 3.6 Cálculo inexacto de la N_{eff} por método de corrimiento de V_{fb} en un dispositivo tipo P con alta densidad de estados en la interfase. El efecto es una supuesta carga fija positiva extra.

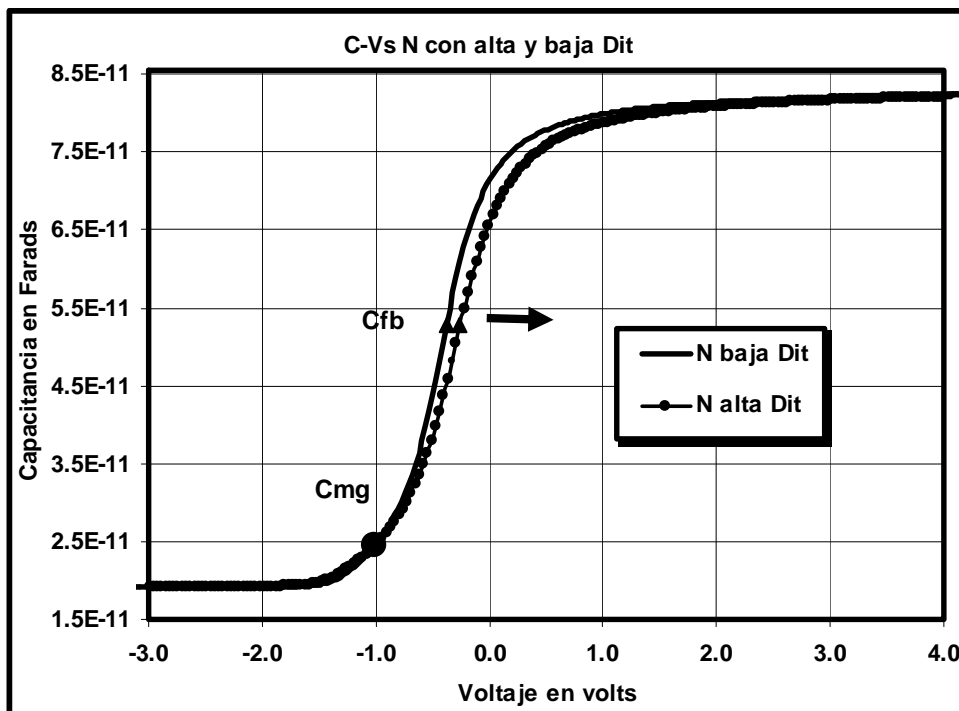


Figura 3.7 Cálculo inexacto de la N_{eff} por método de corrimiento de V_{fb} en un dispositivo tipo N con alta densidad de estados en la interfase. El efecto es una supuesta carga fija negativa extra.

En la Figura 3.7 se aprecia como afecta en un capacitor N , adicionando una supuesta carga negativa (corrimiento a la derecha).

Las dos técnicas de corrimiento de voltaje presentadas para obtener la densidad de carga efectiva dependen fuertemente de la **determinación correcta de la función trabajo del metal de compuerta**, además del voltaje adicional dado por los dipolos en el sistema. Por lo anterior, lo más correcto es utilizar para el calculo de la N_{eff} el método de V_{mg} vs t_{ox} , como se verá en la siguiente sección.

3.3.4 Determinación de dipolos.

La determinación del efecto de dipolos en el sistema MOS se basa en el hecho de que no tiene dependencia del grosor de óxido, sino que contribuye con una componente de voltaje que se adiciona al voltaje total del sistema (tal como lo hace el voltaje de banda plana ideal). Por lo anterior, se puede adicionar al voltaje de banda plana de la siguiente manera

$$V_{fb}^o = \phi_m + V_{dip} - \left(\chi_{si} + \frac{E_g}{2} + D \frac{kT}{q} \ln \left(\frac{N_B}{n_i} \right) \right) \quad (3.52)$$

Este voltaje es añadido a la función trabajo del metal para obtener una función trabajo efectiva ϕ_{meff} . La determinación de los dipolos como una densidad no es una tarea fácil, dado que depende de la separación entre las cargas que forman el dipolo, y por ello es preferible tomar sólo el efecto total en voltaje V_{dip} . Esta contribución en voltaje puede ser determinada a partir del voltaje de banda plana ideal, utilizando el voltaje de banda plana real para distintos grosores de óxido

$$V_{fb}(t_{ox}) = V_{fb}^o + \frac{qN_{eff}}{\epsilon_{ox}} t_{ox} \quad (3.53)$$

De esta manera, si obtenemos el voltaje de banda plana real para distintos grosores de óxido obtenemos una recta donde podemos extrapolar a un $t_{ox}=0$ el voltaje de banda plana ideal; además la pendiente está relacionada con la densidad de

carga efectiva. Una vez obtenido el voltaje de banda plana ideal podemos encontrar la contribución en voltaje de los dipolos

$$V_{dip} = V_{fb}^o - \phi_m + \left(\chi_{si} + \frac{E_g}{2} + D \frac{kT}{q} \ln \left(\frac{N_B}{n_i} \right) \right) \quad (3.54)$$

Sin embargo, resulta que nuevamente en la obtención del voltaje de banda plana tenemos influencia de la densidad de estados en la interfase en la carga efectiva. Esta última puede ser minimizada nuevamente utilizando el voltaje de media banda, ya que guarda la misma relación respecto al grosor de óxido que el voltaje de banda plana

$$V_{mg}(t_{ox}) = V_{mg}^o + \frac{qN_{eff}}{\epsilon_{ox}} t_{ox} \quad (3.55)$$

Extrapolando nuevamente a 0 para V_{mg}^o con la definición modificada de éste para incluir los dipolos

$$V_{mg}^o = \phi_m + V_{dip} - \chi_{si} - \frac{E_g}{2} + D \frac{A \sqrt{2K_{si} \epsilon_0 q N_B |\psi_s|}}{C_{ox}} \quad (3.56)$$

despejando

$$V_{dip} = V_{mg}^o + \phi_m + \chi_{si} + \frac{E_g}{2} - D \frac{A \sqrt{2K_{si} \epsilon_0 q N_B |\psi_s|}}{C_{ox}} \quad (3.57)$$

la pendiente en este caso tiene un efecto menor de los estados en la interfase, y se puede obtener de

$$N_{eff} = \frac{m \epsilon_{ox}}{q} \quad \text{ó} \quad N_{eff} = -2.155276 \times 10^{14} m \quad (3.58)$$

donde m es la pendiente experimental del voltaje de media banda respecto al grosor de óxido.

3.3.5 Estados en la interfase.

Existen varios métodos para obtener la densidad de estados en la interfase, pero a partir de la medición de alta frecuencia se tiene sólo el **método Terman** [89]. En este método se compara la curva experimental C-V de alta frecuencia con una curva de alta frecuencia ideal. La curva de alta frecuencia contiene la información de D_{it} en su 'estiramiento'. Conociendo φ_s para una $C(V_G)$ de un dispositivo con Q_{it} , se puede construir una curva $V_G-\varphi_s$ que contiene la información sobre las trampas en la interfase. El desarrollo del método se describe a continuación.

A partir de la ley de Gauss se define el voltaje de compuerta por la siguiente ecuación

$$V_G(\varphi_s) = V_{fb} + \varphi_s + V_{ox} \quad (3.59)$$

Se pueden introducir las cargas Q_{ot} , Q_m y Q_f , independientes de φ_s , al voltaje de banda plana (V_{fb}) junto con φ_{ms} , y las cargas dependientes de φ_s se introducen en el voltaje a través del óxido $V_{ox} = (Q_s(\varphi_s) + Q_{it}(\varphi_s))/C_{ox}$. Sustituyendo en la ecuación (3.59) tenemos

$$V_G(\varphi_s) = V_{fb} + \varphi_s - \frac{Q_s(\varphi_s)}{C_{ox}} - \frac{Q_{it}(\varphi_s)}{C_{ox}} \quad (3.60)$$

Derivamos respecto a φ_s , obteniendo

$$\frac{dV_G(\varphi_s)}{d\varphi_s} = 0 + 1 - \frac{dQ_s(\varphi_s)}{C_{ox}d\varphi_s} - \frac{dQ_{it}(\varphi_s)}{C_{ox}d\varphi_s} \quad (3.61)$$

Las variaciones de la carga respecto al potencial están definidas como

$$C_s(\varphi_s) = -\frac{dQ_s(\varphi_s)}{d\varphi_s} \quad \text{y} \quad C_{it}(\varphi_s) = -\frac{dQ_{it}(\varphi_s)}{d\varphi_s} \quad (3.62)$$

resultando en

$$\frac{dV_G(\varphi_s)}{d\varphi_s} = 1 + \frac{C_s(\varphi_s)}{C_{ox}} + \frac{C_{it}(\varphi_s)}{C_{ox}} \quad (3.63)$$

y despejando C_{it}

$$C_{it}(\varphi_s) = C_{ox} \left(\frac{dV_G(\varphi_s)}{d\varphi_s} - 1 \right) + C_s(\varphi_s) \quad (3.64)$$

Al dividir por q encontramos la variación de N_{it} respecto al potencial en la superficie, que es D_{it} .

$$\frac{C_{it}(\varphi_s)}{q} = N_{it}(\varphi_s) = D_{it} = \frac{C_{ox}}{q} \left(\frac{dV_G(\varphi_s)}{d\varphi_s} - 1 \right) + \frac{C_s(\varphi_s)}{q} \quad (3.65)$$

Entonces, la relación existente entre el voltaje de compuerta real y el potencial en la superficie, nos proporciona la densidad de estados en la interfase.

La función V - φ_s se obtiene a partir de la curva C-V real y la curva C- φ_s ideal. Se utiliza la capacitancia como variable auxiliar para obtener V- φ_s . La curva C- φ_s ideal fue determinada por Brews [90]. Primero obtiene la capacitancia del silicio C_s a alta frecuencia como

$$C_{s,hf}(U_s) = \hat{U}_s \frac{k_s \epsilon_0}{2L_D} \frac{\left[e^{U_f} (1 - e^{-U_s}) + e^{-U_f} (e^{U_s} - 1) \right] / (1 + \delta)}{\sqrt{e^{U_f} (e^{-U_s} + U_s - 1) + e^{-U_f} (e^{U_s} - U_s - 1)}} \quad (3.66)$$

donde $U_s = q\varphi_s/kT$, $U_f = (kT/q) \ln(N_A/n_i)$, $\hat{U}_s = |U_s|/U_s$, k_s es la constante dieléctrica relativa del silicio, L_D la longitud de Debye y δ es

$$\delta = \frac{(e^{U_s} - U_s - 1)}{\int_0^{U_s} \frac{\sqrt{e^{U_f}(e^{-U_s} + U_s - 1) + e^{-U_f}(e^{U_s} - U_s - 1)}}{e^{U_f}(1 - e^{-U})(e^U - U - 1)} dU} \quad (3.67)$$

El método Terman no es muy usado, ofrece un límite de medición mínimo en el rango de $10^{10} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$, lo cual es inferior en capacidad respecto a los otros métodos [91].

3.3.6 Carga iónica móvil.

Existen 2 métodos eléctricos para la cuantificación de la carga iónica móvil, el primero es el de **estrés-voltaje**. En contraste a la cuantificación de carga fija en el óxido, esta medición se realiza con voltajes moderados pero con alta temperatura, típicamente de 150 a 250°C. Al mismo tiempo se aplica un voltaje a la compuerta para tener un campo eléctrico de alrededor de 10^6 V/cm . Estas condiciones se mantienen por un tiempo de 5 a 10 minutos, que es suficiente para que las cargas iónicas se desplacen a la compuerta o a la interfase $\text{SiO}_2\text{-Si}$. Entonces el dispositivo es enfriado hasta la temperatura ambiente y se mide su curva C-V. Después se repite el procedimiento completo, pero con la polarización invertida. La carga iónica móvil se determina de la diferencia entre los voltajes de banda plana de las 2 curvas C-V, de acuerdo a la ecuación (3.68).

$$Q_m = -\Delta V_{FB} C_{ox} \quad (3.68)$$

En el caso más simple ocurre un desplazamiento paralelo, como el mostrado en la Figura 2.4; pero si la temperatura y el voltaje alteran la distribución de estados en la interfase, se puede obtener una distorsión de la curva, complicando la determinación del V_{fb} . Otro voltaje de referencia puede ser el voltaje de encendido o,

como en esta tesis, el voltaje de media banda. El rango de detección de este tipo de mediciones tiene su límite en densidades de aproximadamente 10^9 cm^{-2} .

El segundo método se explica brevemente; se trata del método de barrido con voltaje triangular. En este método se aplica una temperatura de 150 a 250°C y una rampa de voltaje de variación lenta, de la cual se mide la corriente. Esta corriente es la suma de la corriente de desplazamiento más la debida a la carga móvil, y de esta suma se obtiene la curva C-V de baja frecuencia. La densidad de carga se obtiene tomando el área entre la curva C-V de alta frecuencia y la de baja frecuencia.

3.4 Mediciones de capacitancia de alta-baja frecuencia.

Otro método para obtener la densidad de estados en la interfase es mediante el método de alta-baja frecuencia, que no requiere el cálculo de una curva teórica y permite una mayor exactitud.

Se parte del hecho de que la capacitancia total de baja frecuencia es

$$\frac{1}{C_{LF}} = \frac{1}{C_{ox}} + \frac{1}{C_{si} + C_{it}} \quad (3.69)$$

despejando C_{it} obtenemos

$$C_{it} = \left[\frac{1}{C_{LF}} - \frac{1}{C_{ox}} \right]^{-1} - C_{si} \quad (3.70)$$

De la capacitancia de alta frecuencia C_{HF} tenemos

$$\frac{1}{C_{HF}} = \frac{1}{C_{ox}} + \frac{1}{C_{si}} \quad (3.71)$$

despejando C_{si}

$$C_{si} = \left(\frac{1}{C_{HF}} - \frac{1}{C_{ox}} \right)^{-1} \quad (3.72)$$

sustituyendo en la ecuación (3.70) tenemos

$$C_{it} = \left(\frac{1}{C_{LF}} - \frac{1}{C_{ox}} \right)^{-1} - \left(\frac{1}{C_{HF}} - \frac{1}{C_{ox}} \right)^{-1} \quad (3.73)$$

Como ya se mencionó en la sección anterior, esta C_{it} está directamente relacionada con la densidad de estados en la banda prohibida.

$$D_{it} = N_{it}(\psi_s) = \frac{C_{it}(\psi_s)}{q} = \left[\left(\frac{1}{C_{LF}(V_g)} - \frac{1}{C_{ox}(V_g)} \right)^{-1} - \left(\frac{1}{C_{HF}(V_g)} - \frac{1}{C_{ox}(V_g)} \right)^{-1} \right] q^{-1} \quad (3.74)$$

por lo tanto necesitamos conocer una relación de ψ_s - V_g . Una manera es utilizar el método que ya se vio en el método Terman, otra es utilizar el método Q - V , que aunque efectivo requiere la conexión de un capacitor adicional; finalmente. el método más simple es utilizar la siguiente relación

$$\frac{d\psi_s}{dV_g} = 1 - \frac{C_{LF}}{C_{ox}} \quad (3.75)$$

integrando obtenemos

$$\psi_s(V_g) - \psi_s(V_{fb}) = \int_{V_{fb}}^{V_g} \left[1 - \frac{C_{LF}}{C_{ox}} \right] dV \quad (3.76)$$

donde $\psi_s(V_{fb})=0$ (condición de banda plana). El voltaje de banda plana V_{fb} para el límite de la integral se puede encontrar de la capacitancia de banda plana, como se vio en la sección anterior y el potencial de superficie ψ_s debe de variar entre E_v ($\phi_b - E_g/2$) y E_c ($\phi_b + E_g/2$)

3.5 Equipo de caracterización.

Para grosores de óxido e índices de refracción se utilizó un elipsómetro nulo manual Gaertner con láser de He-Ne con 6328\AA de longitud de onda, los resultados Δ y Ψ se procesaron para obtener grosor de óxido e índice de refracción mediante el programa Gaertner GPS+SubP+Sp manual. Se midieron al menos 5 puntos en cada muestra.

Para confirmar las mediciones de elipsometría nula se utilizó el elipsómetro rotativo Rudolph FE-III también con láser de He-Ne con 6328\AA de longitud de onda. En este equipo los resultados Δ y Ψ se procesan automáticamente en el programa del equipo, obteniendo tanto el grosor de óxido como el índice de refracción. Se diseñó una rutina de medición para medir 5 puntos en media oblea de 2" en este equipo.

El sistema utilizado para obtener las mediciones C-V de todos los procesos es el Keithley win32 simultáneo de alta baja frecuencia, (alta frecuencia de 100kHz). Este sistema se controló por computadora mediante el programa ICS, con tiempos de paso de 100ms ajustados según la muestra bajo medición y tiempo de integración de 0.1seg con filtro activo, el voltaje de paso varió dependiendo de las necesidades de la muestra. Todas las mediciones se realizaron en oscuridad.

Para las obleas oxidadas sin estructura metálica de compuerta se utilizó una punta de mercurio modelo 802B-150 de Materials Development Corporation, con área de contacto de $4.413 \times 10^{-3} \text{cm}^2$. Para el proceso con compuerta de aluminio se utilizó una punta de prueba con micromanipulador.

En la mayoría de los procesos de oxidación (las obleas sin aluminio) se grabó un escalón en el óxido con solución 7:1 para obtener la densidad de dipolos y función trabajo efectiva del mercurio, lo cual se discutirá en detalle en la sección

correspondiente. Para obtener contacto a sustrato en las mediciones con punta de mercurio se removió el óxido en la parte posterior de las obleas mediante solución 7:1.

3.6 Conclusiones.

Se revisaron los métodos físicos de determinación de los parámetros bajo estudio y se detalló la forma en que serán extraídos cada uno de los parámetros de las mediciones obtenidas.

La elipsometría obtiene el grosor de óxido e índice de refracción indirectamente a partir de la polarización de la luz y modelos del sistema bajo estudio, sin embargo es considerada una técnica de gran exactitud.

Las mediciones de capacitancia-voltaje de alta frecuencia proporcionan gran cantidad de información: grosor de óxido, tipo y densidad de dopado, densidad de carga efectiva, dipolos, estados en la interfase y carga iónica móvil entre otras. Sin embargo, su exactitud en estados en la interfase resulta baja.

Las mediciones de capacitancia-voltaje de alta-baja frecuencia nos proporcionan más exactitud en la obtención de estados en la interfase, por lo que son usadas.

Se expusieron también los sistemas de caracterización utilizados en las muestras y la preparación para las mediciones.

En el siguiente capítulo se expondrán los experimentos y resultados obtenidos.

Capítulo 4

Procedimiento experimental y resultados

4.1 Introducción.

En este capítulo se expondrán primeramente los diseños de experimentos y procedimientos de fabricación. Después se expondrán los resultados de las mediciones.

De los resultados obtenidos de las mediciones por elipsometría rotativa y nula en los procesos de oxidación, se analizarán los grosores de óxido para obtener las constantes de oxidación lineal B/A y parabólica B según el modelo de Deal y Grove para las orientaciones y temperaturas usadas. También de estas mediciones se relacionará cualitativamente el índice de refracción del óxido con la tensión de éste; según la orientación, temperatura y grosor de óxido.

Para las mediciones C-V se expondrán los resultados de la función trabajo efectiva del metal en primer lugar, dado que ésta se encuentra relacionada con la obtención de las densidades de carga efectiva. Posteriormente se expondrán los resultados de la carga efectiva mediante 3 métodos. Después se presentarán los resultados de la densidad de estados en la interfase mediante el método Terman para

los procesos de oxidación y los obtenidos mediante alta-baja frecuencia para un proceso con compuerta de aluminio.

Finamente se analizarán los resultados de carga iónica móvil, independiente a la orientación.

4.2 Procedimiento experimental.

Para la caracterización del óxido y su interfase con silicio de alto índice cristalino se llevaron a cabo 19 procesos de oxidación térmica y 1 proceso de fabricación de capacitores MOS con compuerta de aluminio. Los 19 procesos de oxidación térmica se hicieron con la finalidad principal de encontrar las constantes de crecimiento lineal y parabólico. El proceso de capacitores MOS se llevo a cabo en 5 orientaciones y fue encaminado principalmente a encontrar las densidades de estados en la interfase. Esto dadas ciertas dificultades en las mediciones en los procesos de oxidación mediante alta-baja frecuencia.

Se nombrará de aquí en adelante a los dispositivos MOS P ó N, dependiendo del sustrato. Se nombrarán MOS tipo P si se encuentran sobre sustrato tipo P, y se nombrarán MOS tipo N los fabricados sobre sustrato N.

4.2.1 Procesos de oxidación térmica seca.

Se oxidaron 6 conjuntos de obleas a 3 temperaturas diferentes, 850, 925 y 1000°C (procesos I a XVIII), más un conjunto extra a 1000°C sin disminución de cargas (proceso A). Cada una de las oxidaciones se llevó a cabo en un tiempo particular, con el fin de obtener curvas de grosor de óxido contra tiempo de oxidación. En los procesos de 850 y 1000°C se utilizaron medias obleas con las siguientes orientaciones cristalinas:

(0 0 1), (1 1 4), (1 1 3), (7 7 17), (5 5 12), (1 1 2), (1 1 1) y (1 1 0)

en el proceso extra a 1000°C, sin disminución de carga, se utilizaron las orientaciones

$$(0\ 0\ 1), (1\ 1\ 3), (5\ 5\ 12), (1\ 1\ 1) \text{ y } (1\ 1\ 0)$$

y en las oxidaciones a 925°C las siguientes orientaciones

$$(0\ 0\ 1), (5\ 5\ 12), (1\ 1\ 1) \text{ y } (1\ 1\ 0)$$

De la Tabla 4.1 a la Tabla 4.3 se muestran los nombres de cada oblea, tiempos de oxidación de los procesos A y I a XVIII, y las orientaciones utilizadas en cada uno.

Oxidaciones a 1000°C									
MINS	(0 0 1) _p	(0 0 1) _n	(1 1 4)	(1 1 3)	(7 7 17)	(5 5 12)	(1 1 2)	(1 1 1)	(1 1 0)
75		ANA		CA		EA		FA	GA
75	API	ANI	BI	CI	DI	EI		FI	GI
100	APII	ANII	BII	CII	DII	EII	HII	FII	GII
125	APIII	ANIII	BIII	CIII	DIII	EIII		FIII	GIII
175	APIV	ANIV	BIV	CIV	DIV	EIV		FIV	GIV
235	APV	ANV	BV	CV	DV	EV		FV	GV
325	APVI	ANVI		CVI	DVI	EVI		FVI	GVI

Tabla 4.1 Obleas y orientaciones utilizadas en las oxidaciones a 1000°C con el tiempo de oxidación en minutos; negritas, tipo P.

Oxidaciones a 850°C									
MINS	(0 0 1) _p	(0 0 1) _n	(1 1 4)	(1 1 3)	(7 7 17)	(5 5 12)	(1 1 2)	(1 1 1)	(1 1 0)
260	APVII	ANVII	BVII	CVII	DVII	EVII		FVII	GVII
285	APVIII	ANVIII	BVIII	CVIII	DVIII	EVIII	HVIII	FVIII	GVIII
310	APIX	ANIX	BIX	CIX	DIX	EIX		FIX	GIX
360	APX	ANX	BX	CX	DX	EX		FX	GX
420	APXI	ANXI	BXI	CXI	DXI	EXI		FXI	GXI
510	APXII	ANXII		CXII	DXII	EXII		FXII	GXII

Tabla 4.2 Obleas y orientaciones utilizadas en las oxidaciones a 850°C con el tiempo de oxidación en minutos; negritas, tipo P.

Oxidaciones a 925°C					
	(0 0 1) _p	(0 0 1) _n	(5 5 12)	(1 1 1)	(1 1 0)
110	APXIII		EXIII	FXIII	GXIII
135	APXIV	ANXIV	EXIV	FXIV	GXIV
160	APXV	ANXV	EXV	FXV	GXV
210	APXVI	ANXVI	EXVI	FXVI	
250	APXVII	ANXVII	EXVII	FXVII	GXVII
340	APXVIII	ANXVIII	EXVIII	FXVIII	GXVIII

Tabla 4.3 Obleas y orientaciones utilizadas en las oxidaciones a 925°C con el tiempo en minutos; negritas, tipo P.

4.2.2 Diseño de procedimientos de fabricación.

Se utilizaron los conjuntos de obleas más completos a las temperaturas de 1000 y 850°C por ser las temperaturas para compuerta del actual proceso CMOS del INAOE de 10µm y el futuro proceso BiCMOS de 0.8µm, respectivamente. La temperatura de 925°C se utilizó para complementar datos en función de temperatura. En total para estas oxidaciones se usaron 129 muestras.

Los tiempos de oxidación se determinaron a partir de simulaciones en SUPREME para las orientaciones de bajo índice, de tal manera que en el tiempo mínimo se obtuvo una coincidencia de +/- 4% con el modelo de Deal y Grove, terminando el régimen de crecimiento de óxido delgado. El tiempo máximo se eligió en función de grosores finales y tiempos no excesivamente largos.

Para poder calcular el óxido inicial o preexistente en el modelo de Deal y Grove, antes de la oxidación, las obleas fueron sumergidas en una solución al 0.2% de HF para remover el óxido crecido durante las limpiezas RCA hasta obtener hidrofobia en las muestras.

Para evitar la oxidación de las muestras antes de alcanzar la temperatura de oxidación deseada, se introdujeron en el horno de oxidación en ambiente de nitrógeno de ultra alta pureza. La temperatura de oxidación se alcanza

aproximadamente en 7 minutos, por lo que para asegurar la temperatura de oxidación se mantuvieron en ambiente de nitrógeno por 10 minutos.

Es conocido que una cantidad de apenas unas 25 ppm de agua eleva drásticamente las velocidades de crecimiento de óxido [60], por lo que se usó “oxígeno de investigación”, que contiene aproximadamente 3 ppm de H₂O y asegura tratar estos procesos de oxidación como ausentes de agua.

El densificado, que reduce la carga fija, se llevo a cabo a la temperatura de oxidación por 30 minutos.

La aleación, que reduce los estados en la interfase, se llevó a cabo después del densificado. La aleación típicamente en el proceso INAOE se utiliza para obtener un buen contacto entre el metal y el óxido y para reducir los estados en la interfase. En este caso sólo se utilizó para reducir los estados en la interfase, dado que no se utilizó metalización para la compuerta.

Los procesos de oxidación sólo se diferencian en tiempo y temperatura de oxidación, de tal manera que todas las muestras siguieron los siguientes pasos generales:

1.-Desengrasado

10 min. En TCE en baño ultrasónico;

10 min. En acetona en baño ultrasónico.

2.-Grabado de óxido nativo con solución 7:1

3.-Limpieza

RCA I 15 min.

RCAII 15 min.

4.- Súper Q

5.- Grabado de óxido crecido en súper Q en solución de HF al 0.2%

6.-Precalentamiento de obleas a la temperatura de oxidación por 10 minutos en ambiente de N_2 a 100ss

7.-Oxidación en flujo de O_2 a 115ss a temperatura y tiempo específico para cada proceso

8.-Densificado de óxido a la temperatura de oxidación por 30 min. a 100 SS.

9 –Aleación 475°C

N_2 : 60 SS.

H_2 : 40 SS. Flujo simultáneo 20 minutos.

El proceso de oxidación a 1000°C marcado con “A” al final no contó con los pasos de densificado y aleación, para servir como punto de comparación. En adelante se referirá a estos 19 procesos simplemente como **procesos de oxidación**, los conjuntos se pueden subdividir por su orientación con la letra A-H o por su tiempo y temperatura de oxidación I a XVIII.

4.2.3 Capacitores con compuerta de aluminio.

El proceso de capacitores se realizó en el año 2002. Sólo se fabricaron capacitores con compuerta de Aluminio usando la mascarilla de metal del chip CIR-PRU II. Se utilizaron 4 obleas tipo N de distintas orientaciones (0 0 1), (1 1 4), (5 5 12), (1 1 1) más 1 oblea tipo P (1 1 0). En este proceso se utilizaron las orientaciones (1 1 1) y (1 1 0) como una referencia adicional para las obleas de alto índice. La nomenclatura y características de las obleas se dan en la Tabla 4.4

Oblea	Resistividad Ωcm	Tipo	Orientación
G1	20	N	(0 0 1)
G2	65	N	(1 1 4)
G3	70	N	(5 5 12)
G4	10	N	(1 1 1)
G5	0.9	P	(1 1 0)

Tabla 4.4 Nomenclatura, resistividad, tipo y orientación de las obleas utilizadas en el proceso AIG.

Este proceso de fabricación de capacitores MOS siguió los pasos típicos para obtener el óxido de compuerta del proceso INAOE, descritos a continuación.

1.-Grabado de óxido nativo con HF:H₂O, 20:1,
enjuague D.I.,
secado

2.-Desengrasado
10 min. en TCE en baño ultrasónico;
10 min. en acetona en baño ultrasónico.

3.-Limpieza
RCA I 15 min.
RCAII 15 min.

4.-Crecimiento de óxido de compuerta.
1000°C
5 minutos O₂:44 SS.
80 minutos O₂/TCE: 115 SS.

5.-Densificado
1000°C
N₂:100 SS. durante 30 mins.

6.-Metalización
Depósito de 10,000Å de Aluminio.

7.-Fotolitografía de Aluminio.

8 –Aleación
475°C
N₂: 60 SS.
H₂: 40 SS. Flujo simultáneo 20 minutos.

El proceso será referido en adelante como **Al**. Destaca el uso de TCE en la oxidación, el no remover el óxido debido a limpiezas RCA, la falta de calentamiento previo a la oxidación y el uso de compuerta de aluminio.

4.3 Grosor de óxido t_{ox} y constantes B y B/A.

Se obtuvieron resultados por elipsometría rotativa automática y elipsometría nula manual. A continuación se muestran las tablas obtenidas por elipsometría rotativa para 1000°C (Tabla 4.5), 925°C (Tabla 4.6) y 850°C (Tabla 4.7).

Oxidación a 1000°C, t_{ox} por elipsometría rotativa									
Mins	(0 0 1)p	(0 0 1)n	(1 1 4)	(1 1 3)	(7 7 17)	(5 5 12)	(1 1 2)	(1 1 1)	(1 1 0)
75	597	614	626	670	649	664		713	718
100	707	705	697	780	760	791	815	827	829
125	796	777	798	873	854	881		947	936
175	981	969	1010	1102	1071	1093		1151	1157
235	1211	1202	1273	1302	1271	1268		1346	1345
325	1498	1495		1632	1602	1626		1671	1667

Tabla 4.5 Grosos de óxido en angstroms obtenidos mediante elipsometría rotativa para 1000°C, el tiempo de oxidación en minutos se muestra en la primera columna.

Oxidación a 925°C, t_{ox} por elipsometría rotativa					
Mins	(0 0 1)p	(0 0 1)n	(5 5 12)	(1 1 1)	(1 1 0)
110	322		383	467	436.
135	388	399	467	547	523
160	455	448	534	631	569
210	539	539	638	754	
250	585	577	668	828	734
340	725	735	852	991	842

Tabla 4.6 Grosos de óxido en angstroms obtenidos mediante elipsometría rotativa para 925°C, el tiempo de oxidación en minutos se muestra en la primera columna.

Oxidación a 850°C, t_{ox} por elipsometría rotativa									
Mins	(0 0 1)p	(0 0 1)n	(1 1 4)	(1 1 3)	(7 7 17)	(5 5 12)	(1 1 2)	(1 1 1)	(1 1 0)
260	257	252	293	295	292	306.		395	370
285	256	261	298	333	303	324	340	409	361
310	294.	283	333	342	347	360		444	402
360	297	311	354	360	348	370		470	420
420	325	314	363	388	374	395		489	451
510	353	373		464	438	456		590	536

Tabla 4.7 Grosos de óxido en angstroms obtenidos mediante elipsometría rotativa para 850°C, el tiempo de oxidación en minutos se muestra en la primera columna.

Los resultados obtenidos por elipsometría manual nula se muestran en las siguientes tablas. Las mediciones por elipsometría nula son manuales, por lo que la exactitud depende del operario.

Oxidación a 1000°C, t_{ox} por elipsometría nula									
Mins	(0 0 1)P	(0 0 1)N	(1 1 4)	(1 1 3)	(7 7 17)	(5 5 12)	(1 1 2)	(1 1 1)	(1 1 0)
75	579	594	614	660	649	662		708	717
100	716	711	741	778	754	786	814	827	832
125	804	793	845	898	858	882		946	935
175	980	970	1013	1100	1066	1097		1153	1160
235	1226	1200	1283	1312	1232	1291		1359	1363
325	1624	1499		1619	1596	1615		1648	1669

Tabla 4.8 Grosos de óxido en angstroms obtenidos mediante elipsometría nula para 1000°C, el tiempo de oxidación en minutos se muestra en la primera columna.

Oxidación a 925°C, t_{ox} por elipsometría nula					
Mins	(0 0 1)p	(0 0 1)n	(5 5 12)	(1 1 1)	(1 1 0)
110		320		391	428
135		405	399	458	535
160		455	449	544	568
210		534	528	633	746
250		595	585	681	747
340		738	743	864	846

Tabla 4.9 Grosos de óxido en angstroms obtenidos mediante elipsometría nula para 925°C, el tiempo de oxidación en minutos se muestra en la primera columna.

Oxidación a 850°C, t_{ox} por elipsometría nula									
Mins	(0 0 1)p	(0 0 1)n	(1 1 4)	(1 1 3)	(7 7 17)	(5 5 12)	(1 1 2)	(1 1 1)	(1 1 0)
260	236	241	280	293	280	303		390	372
285	256	248	288	327	298	320	348	403	360
310	276	284	323	326	348	352		443	396
360	315	313	354	351	356	371		463	439
420	321	311	370	393	374	400		489	457
510	362	378		464	451	454		591	540

Tabla 4.10 Grosos de óxido en angstroms obtenidos mediante elipsometría nula para 850°C, el tiempo de oxidación en minutos se muestra en la primera columna.

Al ser automatizada la elipsometría rotativa, se consideró que los valores obtenidos son más exactos que los obtenidos por elipsometría nula, por lo que se utilizaron para la obtención de las constantes parabólica y lineal.

Sin embargo, es importante mencionar que la diferencia porcentual entre ambas mediciones es muy baja, como se muestra en las siguientes tablas.

tox 1000°C diferencia porcentual de elipsometría nula respecto a elipsometría rotativa.									
Mins	(0 0 1)P	(0 0 1)N	(1 1 4)	(1 1 3)	(7 7 17)	(5 5 12)	(1 1 2)	(1 1 1)	(1 1 0)
75	-3.03%	-3.33%	-2.06%	-1.52%	-0.08%	-0.34%		-0.82%	-0.20%
100	1.18%	0.80%	6.29%	-0.37%	-0.90%	-0.72%	-0.16%	-0.06%	0.30%
125	0.93%	1.95%	5.88%	2.85%	0.44%	0.05%		-0.14%	-0.14%
175	-0.16%	0.10%	0.29%	-0.21%	-0.51%	0.33%		0.14%	0.22%
235	1.18%	-0.20%	0.78%	0.70%	-3.09%	1.74%		0.94%	1.28%
325	8.40%	0.23%		-0.83%	-0.43%	-0.72%		-1.40%	0.09%

Tabla 4.11 Diferencia porcentual entre la elipsometría nula y la rotativa para las oxidaciones a 1000°C.

tox 925°C diferencia porcentual de elipsometría nula respecto a elipsometría rotativa.					
Mins	(0 0 1)p	(0 0 1)n	(5 5 12)	(1 1 1)	(1 1 0)
110	-0.79%		2.02%	-1.82%	-1.93%
135	4.27%	-0.22%	-2.08%	1.12%	2.10%
160	-0.10%	0.22%	1.86%	-0.02%	-0.23%
210	-0.99%	-2.12%	-0.79%	-1.10%	
250	1.63%	1.38%	1.81%	0.06%	1.73%
340	1.70%	0.98%	1.32%	0.77%	0.37%

Tabla 4.12 Diferencia porcentual entre la elipsometría nula y la rotativa para las oxidaciones a 925°C.

tox 850°C diferencia porcentual de elipsometría nula respecto a elipsometría rotativa.									
Mins	(0 0 1)p	(0 0 1)n	(1 1 4)	(1 1 3)	(7 7 17)	(5 5 12)	(1 1 2)	(1 1 1)	(1 1 0)
260	-8.18%	-4.73%	-4.52%	-0.82%	-4.37%	-1.03%		-1.27%	0.42%
285	-0.33%	-4.99%	-3.51%	-2.06%	-1.91%	-1.43%	2.06%	-1.51%	-0.37%
310	-6.29%	0.33%	-3.07%	-4.94%	0.13%	-2.46%		-0.28%	-1.64%
360	5.79%	0.60%	-0.12%	-2.56%	2.09%	0.26%		-1.59%	4.37%
420	-1.31%	-1.17%	1.81%	1.04%	-0.14%	1.05%		-0.08%	1.21%
510	2.52%	1.12%		-0.11%	2.84%	-0.65%		0.12%	0.62%

Tabla 4.13 Diferencia porcentual entre la elipsometría nula y la rotativa para las oxidaciones a 850°C.

A continuación se muestran las gráficas de grosor de óxido contra tiempo para cada orientación y temperatura obtenidas mediante elipsometría rotativa.

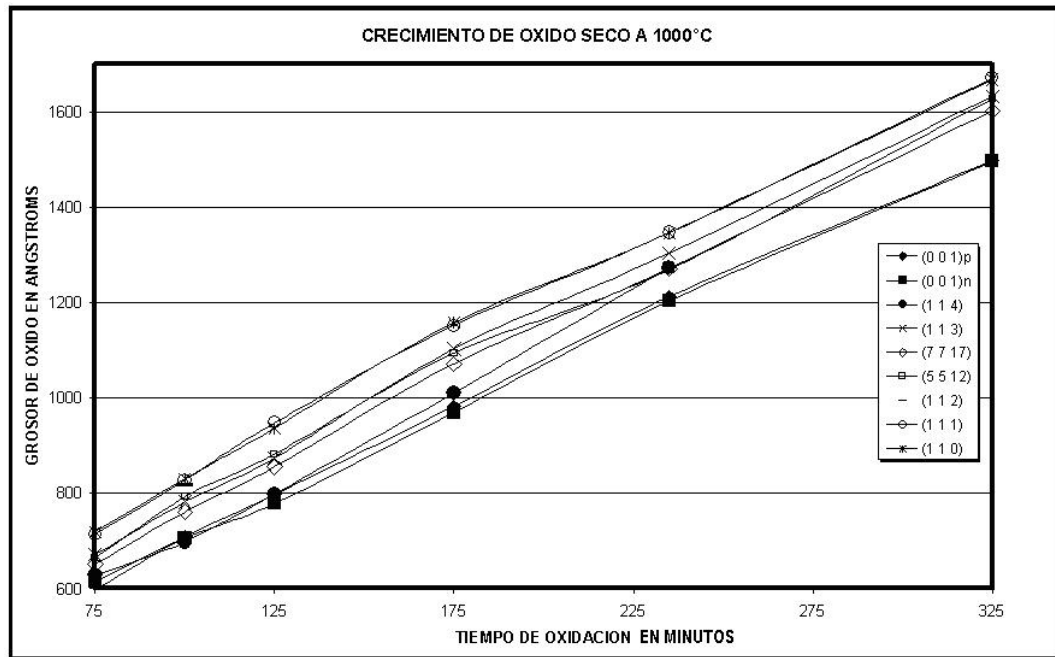


Figura 4.1 Crecimiento de óxido contra tiempo para 7 orientaciones, más un punto para (1 1 2) a 1000°C.

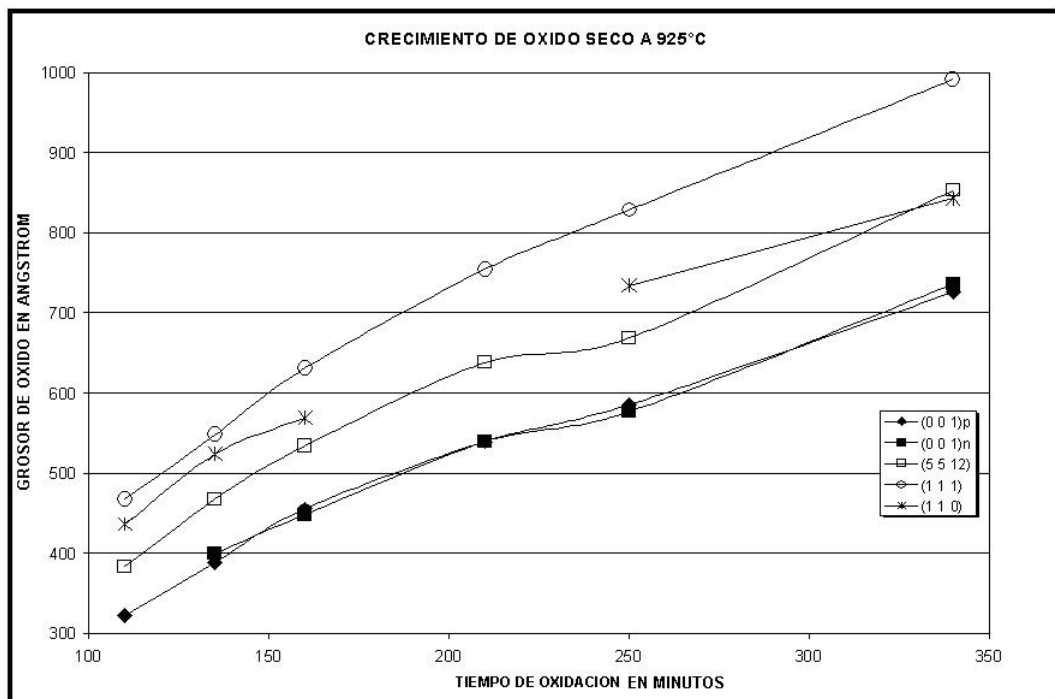


Figura 4.2 Crecimiento de óxido contra tiempo para 4 orientaciones a 925°C.

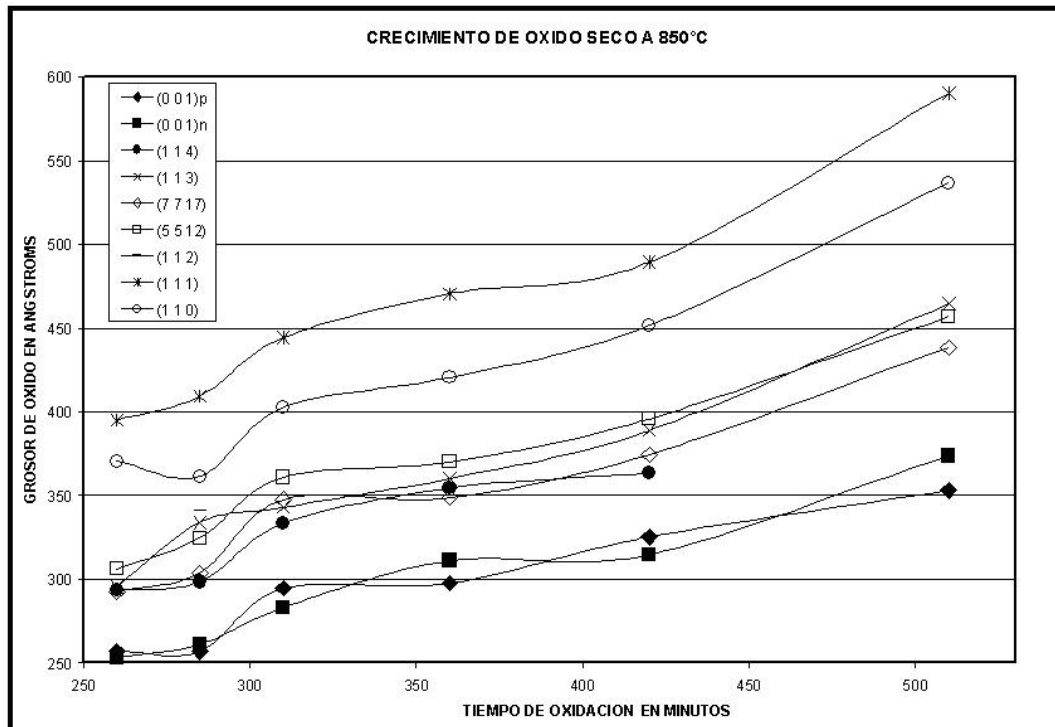


Figura 4.3 Crecimiento de óxido contra tiempo para 7 orientaciones, más un punto para (1 1 2) a 850°C.

La obtención de las constantes de crecimiento lineal y parabólico a partir de la ecuación (4.1) implica obtener la derivada de la curva de crecimiento de óxido con respecto al tiempo. Como la cantidad de datos en tiempo no es suficientemente alta para poder derivar con exactitud se siguieron los siguientes pasos:

1. Se ajustaron los grosores de óxido a una ecuación polinomial de 2° orden, mediante el software Origin, ecuación (4.2).
2. A partir de este polinomio se obtuvo el inverso de la derivada.
3. Estos datos no resultaron en una línea totalmente recta respecto a t_{ox} , por lo que nuevamente se ajustaron mediante Origin a una ecuación lineal de la forma (4.1).
4. De esta ecuación se obtuvieron las constantes de crecimiento lineal y parabólico

5. Se graficó el grosor de óxido calculado con las constantes obtenidas y la ecuación (4.3)
6. El valor de τ se varió hasta obtener coincidencia con el más alto valor de óxido y se calculo el oxido inicial x_i .
7. En los casos en los que la derivada se encontraba muy alejada de una ecuación lineal, la gráfica se ajustó directamente a una ecuación de la forma (4.4), que es una simplificación de (4.3) y se obtuvieron las constantes A y B . Este es el caso de la mayoría de las oxidaciones a 850°C y 925°C

$$\left(\frac{dt_{ox}}{dt}\right)^{-1} = \frac{2}{B}t_{ox} + \frac{A}{B} \quad (4.1)$$

$$t_{ox} = a_1 + b_1t + b_2t^2 \quad (4.2)$$

$$t_{ox} = \left[\frac{A^2}{4} + B\tau + Bt\right]^{\frac{1}{2}} - \frac{A}{2} \quad (4.3)$$

$$t_{ox} = [b + ct]^{\frac{1}{2}} - a \quad (4.4)$$

A continuación se presentan unas gráficas ejemplo para 1000, 925 y 850°C

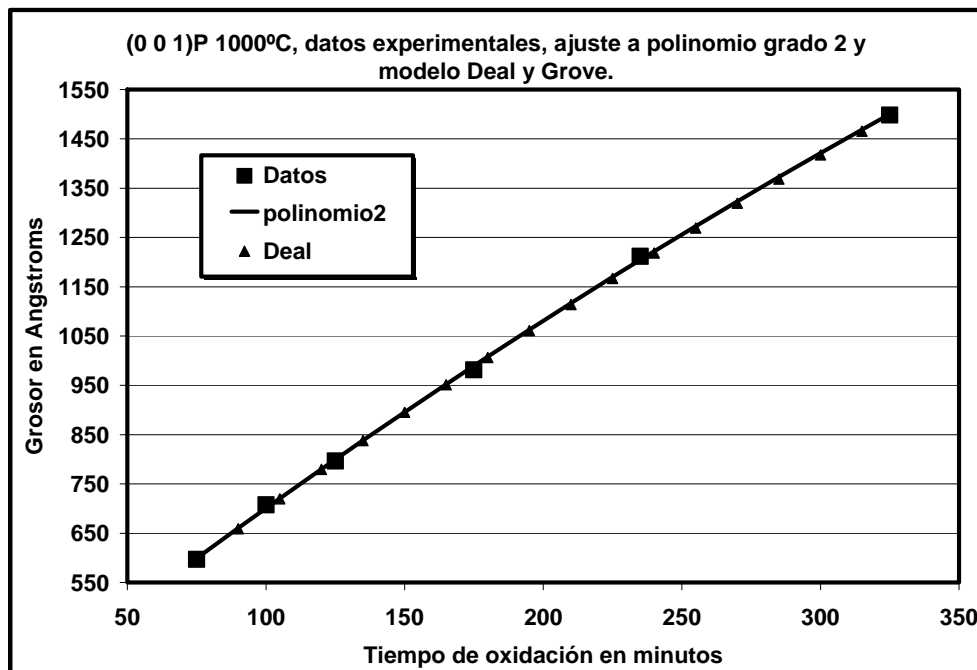


Figura 4.4 Datos de la oxidación para el conjunto de obleas AP (0 0 1) a 1000°C, ajuste a un polinomio grado 2 y modelo Deal y Grove con las constantes obtenidas.

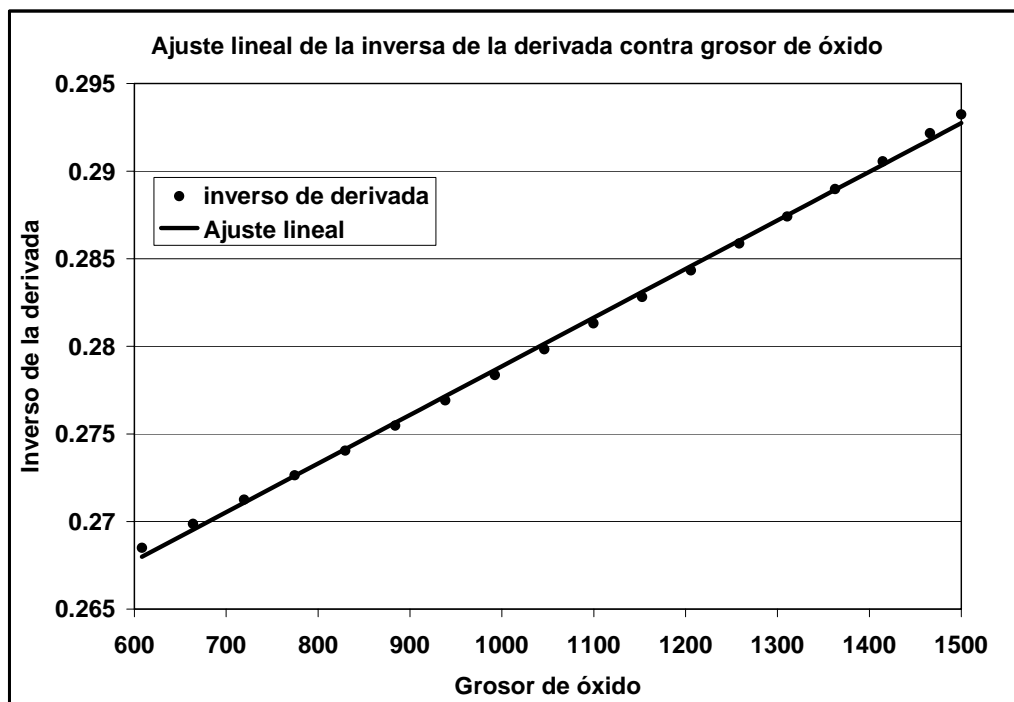


Figura 4.5 Ajuste lineal descrito en el paso 3 para obtener las constantes A y B. para el conjunto de obleas AP (0 0 1) a 1000°C.

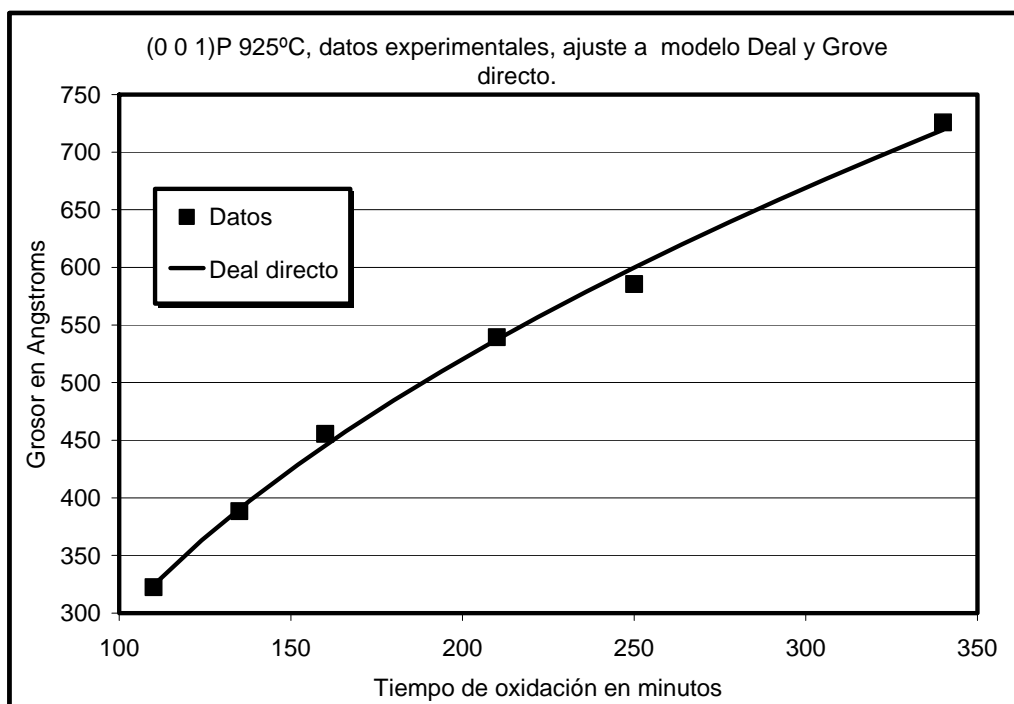


Figura 4.6 Ajuste directo al modelo de Deal y Grove del conjunto AP (0 0 1) a 925°C, dado que el ajuste lineal del paso 3 resulto muy pobre.

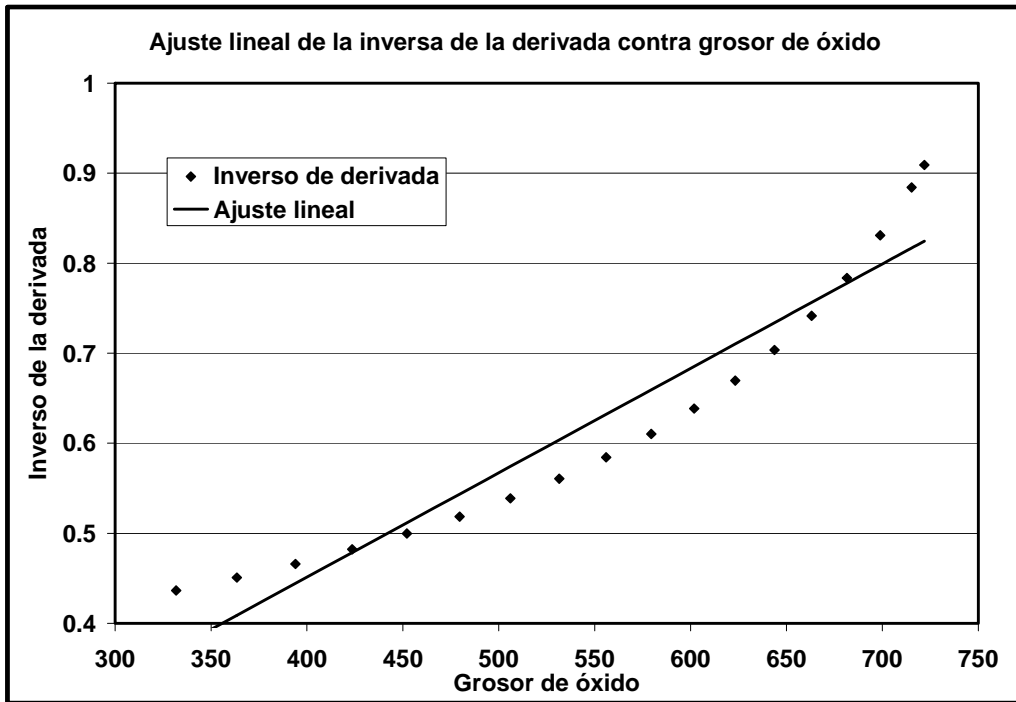


Figura 4.7 Ajuste lineal pobre del inverso de la derivada respecto al grosor de óxido para el conjunto AP(0 0 1) a 925°C, no se utilizó para el cálculo de A y B.

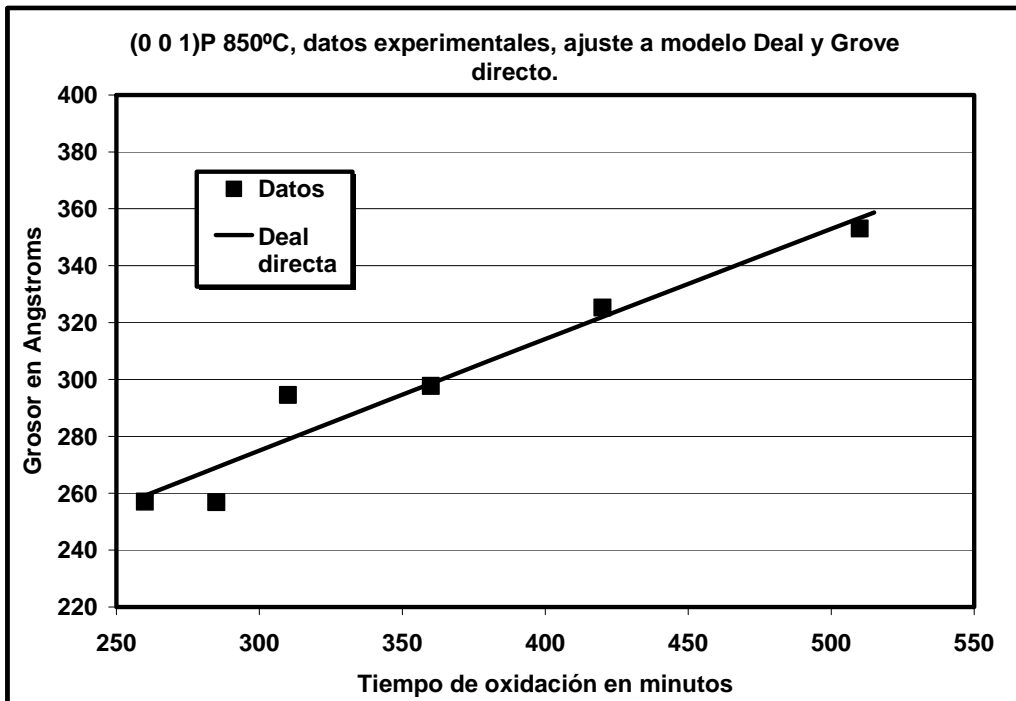


Figura 4.8 Ajuste directo al modelo de Deal y Grove del conjunto AP (0 0 1) a 850°C, dado que el ajuste lineal del paso 3 resultó muy pobre.

Las constantes obtenidas para el modelo de Deal y Grove para cada orientación y temperatura se muestran en las siguientes tablas.

	B	B/A	X_i	τ
	$\text{\AA}^2/\text{min.}$	$\text{\AA}/\text{min.}$	\AA.	min.
(0 0 1)N	72061	3.982	319	81
(0 0 1)p	23073	5.349	262	52
(1 1 4)	1077835	4.091	307	75
(1 1 3)	26959	5.697	322	60
(7 7 17)	31125	5.213	321	65
(5 5 12)	45919	4.627	374	84
(1 1 1)	19421	7.040	351	56
(1 1 0)	18923	7.130	351	55
Promedio B	33926			

Tabla 4.14 Constantes de crecimiento parabólico B , lineal B/A , grosor del óxido preexistente X_i y tiempo de corrimiento τ para las oxidaciones a 1000°C

El promedio de B se utilizará posteriormente para aplicar una mayor aproximación al modelo, para 1000°C (Tabla 4.14) no se utilizó el valor de B para (1 1 4) en el promedio por su valor elevado.

	B	B/A	X_i	τ
	$\text{\AA}^2/\text{min.}$	$\text{\AA}/\text{min.}$	\AA.	min.
(0 0 1)N	27960	1.712	186.27	110
(0 0 1)p	1613	-15.458	0	-65
(5 5 12)	3011	9.345	0	0
(1 1 1)	2807	-12.331	0	-70
(1 1 0)	1287	-2.327	0	-149
Promedio B	7335			

Tabla 4.15 Constantes de crecimiento parabólico B , lineal B/A , grosor de óxido preexistente X_i y tiempo de corrimiento τ para las oxidaciones a 925°C

Se puede notar que al aplicar directamente el modelo de Deal y Grove a 925°C obtenemos constantes lineales negativas, lo que no tiene sentido físico; así

como tiempos τ negativos, eso implicaría que la oxidación comenzaría minutos después de estar expuesta la oblea a las condiciones de oxidación.

	B	B/A	X_i	τ
	$\text{\AA}^2/\text{min.}$	$\text{\AA}/\text{min.}$	\AA.	min.
(0 0 1)N	2414	0.597	101	174+
(0 0 1)p	2401	0.434	154	364
(1 1 4)	1936	0.755	112	154
(1 1 3)	2000	0.849	106	131
(7 7 17)	3853	0.607	150	252
(5 5 12)	1081	0.932	143	173
(1 1 1)	3693	0.909	187	215
(1 1 0)	4000	0.786	172	227
Promedio B	2672			

Tabla 4.16 Constantes de crecimiento parabólico B , lineal B/A , grosor de óxido preexistente X_i y tiempo de corrimiento τ para las oxidaciones a 850°C

A continuación se muestran los resultados obtenidos por Massoud y col. [92] para oxidaciones secas para varias temperaturas y orientaciones a 1 atm. Estos datos tienen la particularidad de modificar B y B/A para obtener un x_i mínimo. Puede notarse que algunos datos tienen cercanía con los datos obtenidos en este trabajo como (0 0 1)P y (1 1 0) a 1000°C (negritas).

T °C	(0 0 1)			(1 1 1)			(1 1 0)		
	B $\text{\AA}^2/\text{min.}$	B/A $\text{\AA}/\text{min.}$	X_i \AA.	B $\text{\AA}^2/\text{min.}$	B/A $\text{\AA}/\text{min.}$	X_i \AA.	B $\text{\AA}^2/\text{min.}$	B/A $\text{\AA}/\text{min.}$	X_i \AA.
1000	28600	8.65	112.5	26000	16.4	117.5	14300	25.4	90
950	12100	4.01	105	10800	9.91	105	6590	10.4	97
900	5590	2.08	85	6500	4.6	87.5	4000	4.61	97.5
850	1890	0.93	82.5	2980	2.09	80	1840	1.75	100
800	660	0.43	70	1350	0.9	67.5	855	0.72	100

Tabla 4.17 Resultados de las constantes de oxidación para varias orientaciones y temperaturas obtenidos por Massoud [92]

Según la teoría de Deal y Grove la constante parabólica es independiente de la orientación, dado que está determinada por la difusión del oxígeno o agua en el óxido; por lo tanto se promediaron las constantes parabólicas obtenidas para todas las orientaciones y se compararon a las obtenidas por Massoud. Estas últimas también se promediaron y para 925°C se interpolaron, en la Tabla 4.18 se presentan los resultados. Los valores promedio de B obtenidos en este trabajo se redondearon y se utilizaron nuevamente como constante B fija en todas las orientaciones. Esto para obtener las constantes con un ajuste directo a Deal y Grove empleando la ecuación (4.4) para todas las orientaciones y temperaturas, Tabla 4.19, Tabla 4.20 y Tabla 4.21

	B promedio obtenido	B promedio Massoud	B fija
1000	33926	22966	34000
925	7335	7345	7300
850	2672	2236	2700

Tabla 4.18 Promedios e interpolación para obtener B fija.

	B	B/A	X_i	τ
	$\text{Å}^2/\text{min.}$	$\text{Å}/\text{min.}$	Å.	min.
(0 0 1)N	34000	4.569	297	67
(0 0 1)p	34000	4.651	292	65
(1 1 4)	34000	5.250	275	54
(1 1 3)	34000	5.203	334	67
(7 7 17)	34000	5.068	320	66
(5 5 12)	34000	5.033	348	72
(1 1 1)	34000	5.188	394	80
(1 1 0)	34000	5.158	397	81

Tabla 4.19 Parámetros obtenidos para una B fija de 34000 a 1000°C.

	B	B/A	X_i	τ
	$\text{Å}^2/\text{min.}$	$\text{Å}/\text{min.}$	Å.	min.
(0 0 1)N	7300	2.134	154	75
(0 0 1)p	7300	2.284	123	56
(5 5 12)	7300	2.942	141	50
(1 1 1)	7300	4.280	140	35
(1 1 0)	7300	2.521	239	102

Tabla 4.20 Parámetros obtenidos para una B fija de 7300 a 925°C.

	B	B/A	X_i	τ
	$\text{Å}^2/\text{min.}$	$\text{Å}/\text{min.}$	Å.	min.
(0 0 1)N	2700	0.589	102	178
(0 0 1)p	2700	0.429	154	368
(1 1 4)	2700	0.705	116	170
(1 1 3)	2700	0.781	114	150
(7 7 17)	2700	0.639	147	238
(5 5 12)	2700	0.669	158	245
(1 1 1)	2700	0.995	180	193
(1 1 0)	2700	0.855	167	205

Tabla 4.21 Parámetros obtenidos para una B fija de 2700 a 850°C.

Las nuevas constantes ajustan correctamente al crecimiento de óxido en todas las temperaturas y orientaciones.

Las constantes lineales B/A no tienen una relación clara con las orientaciones cristalinas; sólo si se toman en cuenta las orientaciones de bajo índice se puede notar un incremento de (0 0 1) hacia (1 1 1).

También se debe de tener en cuenta que las constantes encontradas son válidas sólo para la presión atmosférica del INAOE, con una altitud de 2160m sobre el nivel del mar y con una presión de 586 torr (0.771 Atm.).

4.4 Índice de refracción N.

El índice de refracción proporciona información acerca de la tensión que sufre el óxido, dado que la densidad del óxido está relacionada directamente al índice de refracción [93]. Este índice de refracción se encuentra estrechamente ligado a la temperatura de oxidación, entre más baja sea la temperatura, más altos serán la tensión de compresión en el óxido y el índice de refracción.

Al igual que en grosor, de óxido para el índice de refracción se utilizan los resultados obtenidos mediante elipsometría rotativa. Para el caso de índice de

refracción los resultados obtenidos manualmente mostraron poca regularidad y sólo coincidieron con la elipsometría rotativa a grosores elevados.

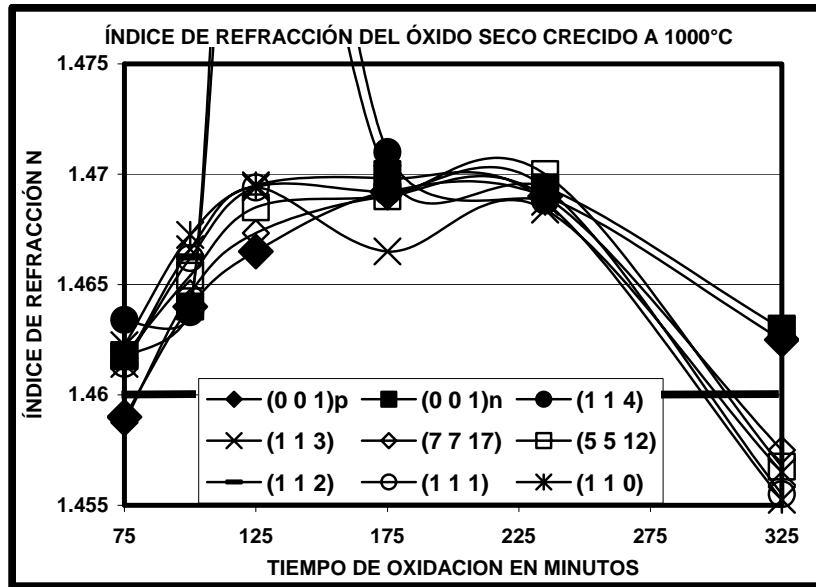


Figura 4.9 Índice de refracción N para las oxidaciones a 1000°C. La línea gruesa horizontal indica el índice de refracción usado típicamente para el óxido de silicio.

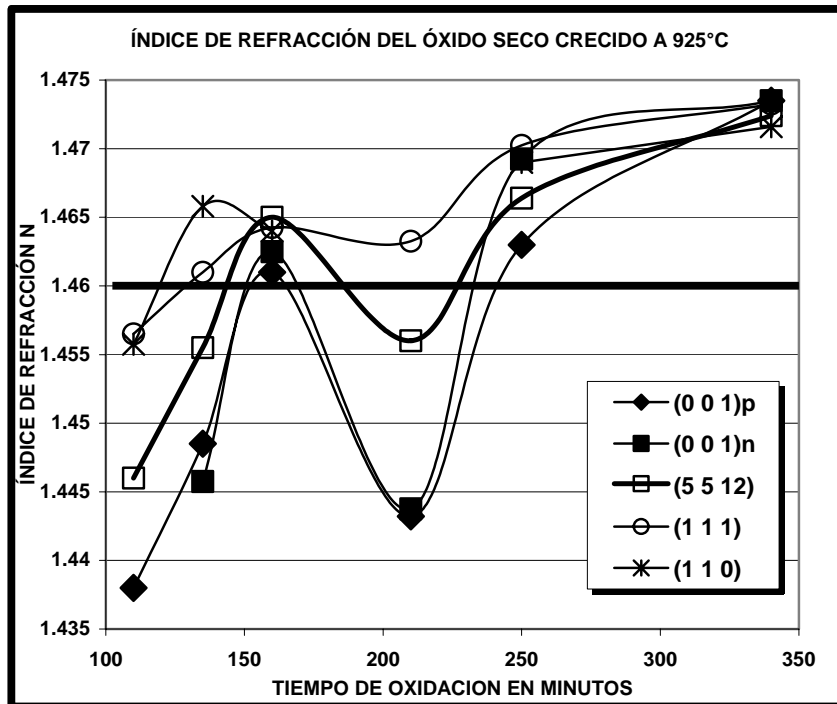


Figura 4.10 Índice de refracción N para las oxidaciones a 925°C. La línea gruesa horizontal indica el índice de refracción usado típicamente para el óxido de silicio.

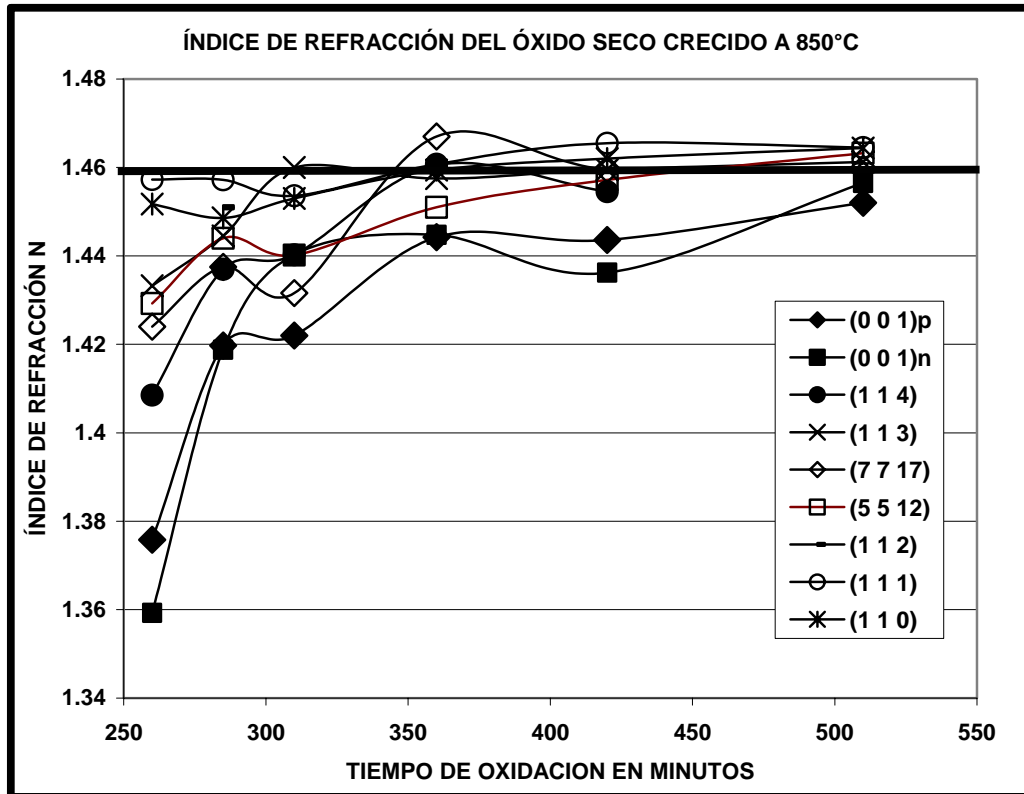


Figura 4.11 Índice de refracción N para las oxidaciones a 850°C. La línea gruesa horizontal indica el índice de refracción usado típicamente para el óxido de silicio.

Según los resultados para índice de refracción contra tiempo de oxidación encontramos que éste decrece cuando nos acercamos a la orientación (0 0 1) para un tiempo específico de oxidación; este comportamiento se observa a las tres temperaturas de oxidación. Esta forma de graficar, sin embargo, no es correcta. Se está tomando en cuenta la variación de tiempo de oxidación, cuando en realidad debemos tomar en cuenta que las distintas orientaciones cristalinas del silicio tienen distinto grosor de óxido para un mismo tiempo de oxidación y, por lo tanto, distinta tensión. Graficando el índice de refracción contra el grosor de óxido puede observarse un comportamiento distinto, como se aprecia en las Figuras 5.12-5.14.

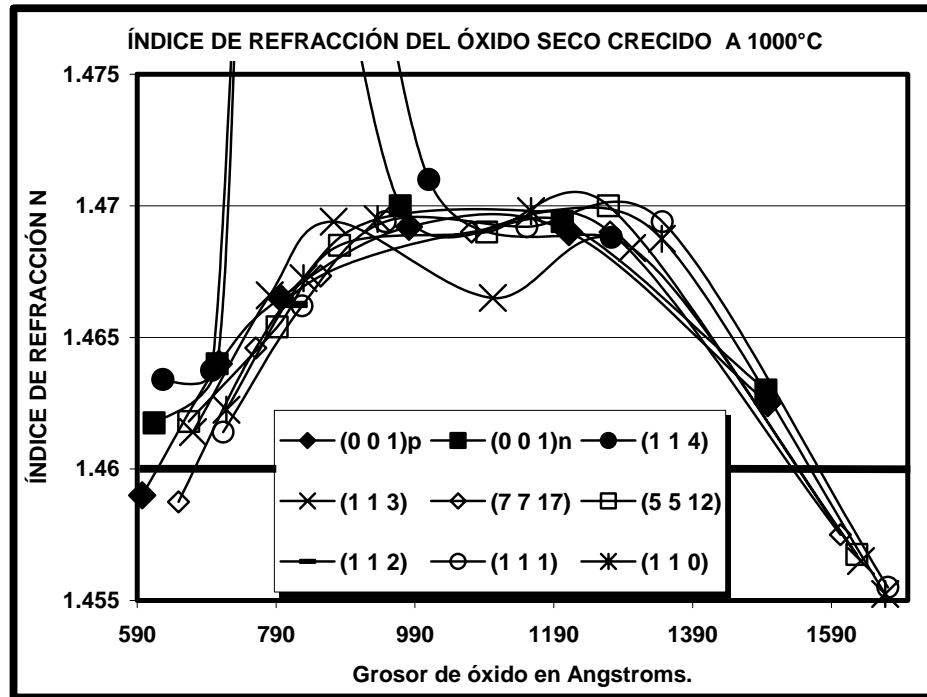


Figura 4.12 Índice de refracción para las oxidaciones a 1000°C de todas las orientaciones contra grosor de óxido.

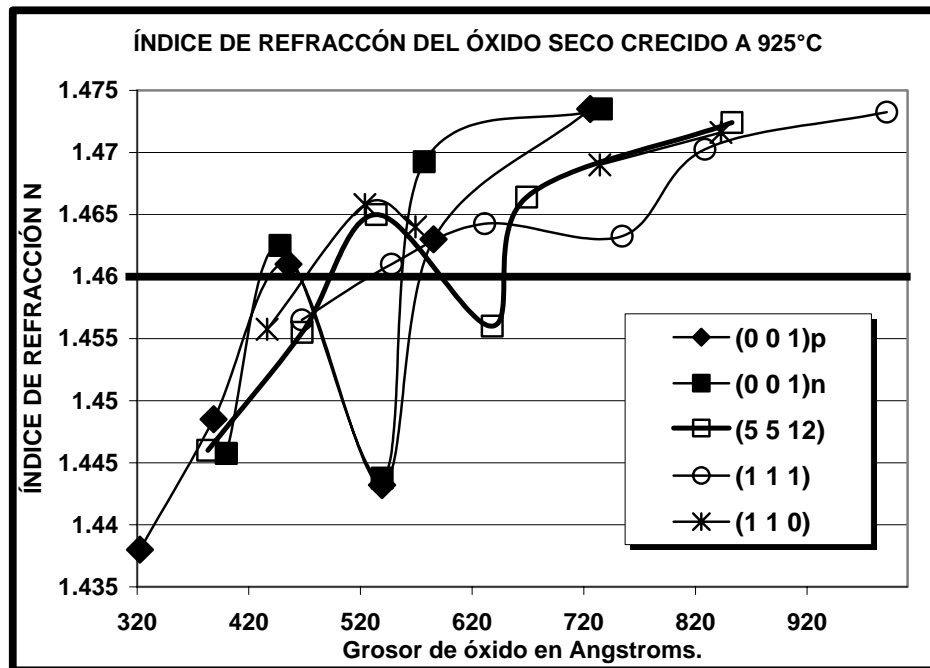


Figura 4.13 Índice de refracción para las oxidaciones a 925°C de todas las orientaciones contra grosor de óxido.

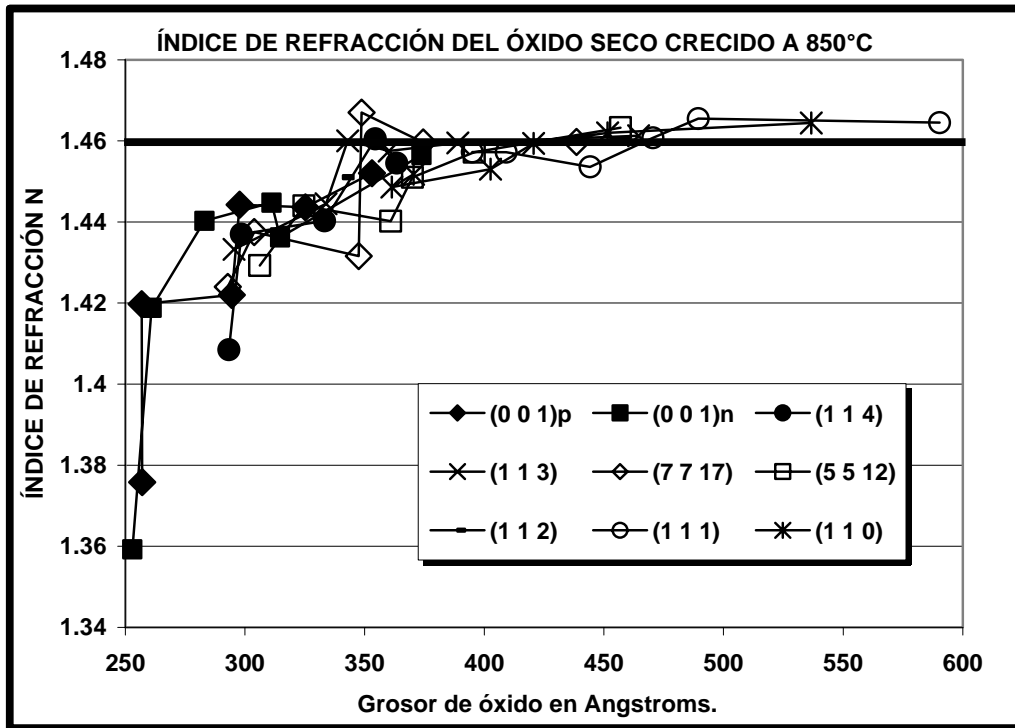


Figura 4.14 Índice de refracción para las oxidaciones a 850°C de todas las orientaciones contra grosor de óxido.

Se puede notar claramente que la variación en el índice de refracción respecto a la orientación cristalina es errónea, en realidad el índice de refracción se encuentra relacionado con el grosor de óxido y es independiente de la orientación. Nótese como a 1000°C el índice obtenido para (0 0 1)_n y (0 0 1)_p para el mayor grosor de óxido se encuentran prácticamente como datos intermedios para el grosor de las demás orientaciones. Lo mismo se puede observar a los más altos grosores para oxidaciones a 850°C.

Es importante hacer notar que los grosores más bajos de 925 y 850°C se encuentran cercanos a una $\Psi=15^\circ$ por lo que la determinación de N no es tan exacta dada la cercanía de las trayectorias elipsométricas, Figura 3.2. Sin embargo, si el marcado bajo índice se debiera a poca exactitud, los datos de grosor de óxido bajos mostrarían una dispersión aleatoria y no un claro incremento con el grosor de óxido.

Según Lucovsky y col. [93] para temperaturas debajo de 1000°C el índice de refracción es mayor, lo que implica una mayor densidad del óxido o tensión de compresión. Su análisis se llevo a cabo alrededor de los 1000Å para varias temperaturas y presiones atmosféricas. Se utilizó este grosor porque se encuentra dentro de la región de mayor exactitud de la primera trayectoria elipsométrica, Figura 3.2.

Analizando los índices obtenidos en 1000°C podemos notar que al parecer existe una baja tensión para grosores delgados, conforme se alcanzan los 870Å se mantiene constante hasta los 1345Å, cuando nuevamente baja la tensión en el óxido.

Para los índices a 925°C se mantiene un crecimiento constante del índice y tiene valores mayores a los correspondientes a 1000°C, como se esperaba.

Para los índices a 850°C parece ser que se tiene un incremento en la tensión de óxido con el grosor hasta llegar aproximadamente a un índice de 1.464. Este índice es menor que los de las temperaturas mayores, lo cual contradice la suposición de que a menor temperatura se tiene mayor índice de refracción.

Para analizar esto en más detalle se grafican en la Figura 4.15 todos los índices obtenidos a las 3 temperaturas. Se puede notar una fuerte dependencia con el grosor de óxido, y aparentemente son independientes de la orientación cristalina. La coincidencia de los datos a distintas temperaturas también parece indicar independencia de la temperatura de oxidación. Sin embargo, podemos notar que en

los traslapes de las curvas ajustadas a partir de los datos, a menor temperatura se presentan índices mayores, Figura 4.16.

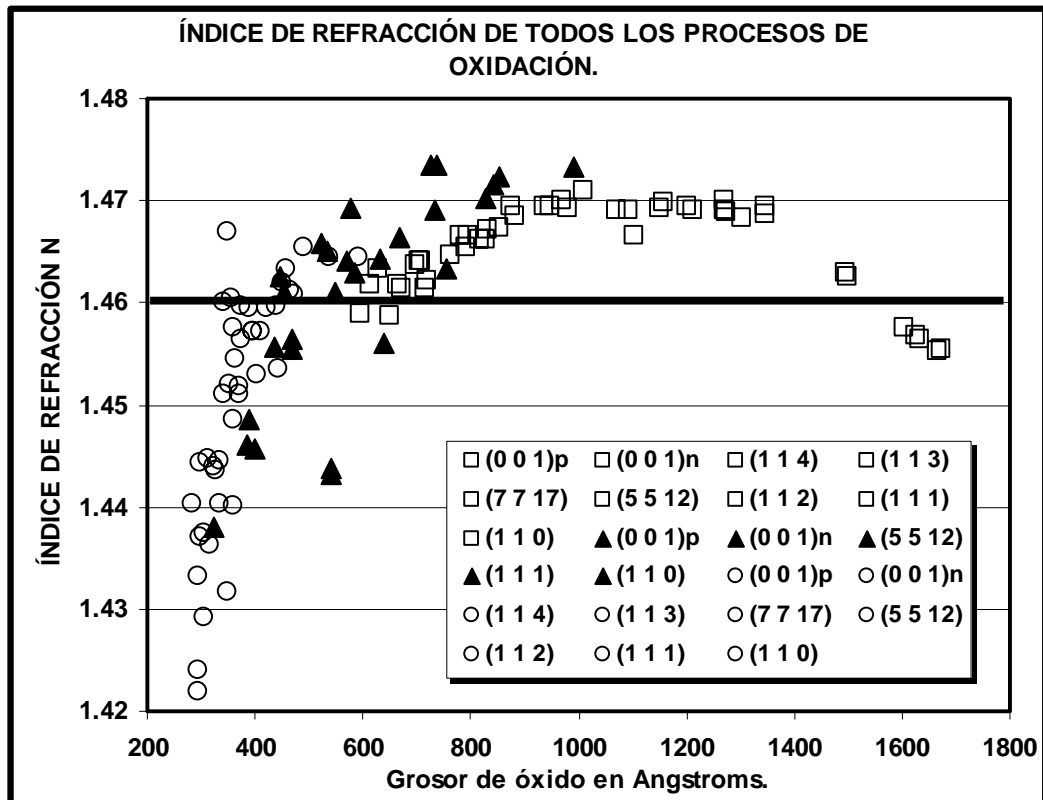


Figura 4.15 Índices de refracción de todos los procesos de oxidación. Cuadrados 1000°C, triángulos 925°C y círculos 850°C.

Posiblemente si se hubieran realizado oxidaciones en los mismos rangos de grosor para todas las temperaturas se hubiera encontrado un comportamiento como el descrito por Lucovsky. Por otra parte, en este trabajo se obtuvieron más grosores de óxido, lo que nos revela la dependencia del índice de refracción con el grosor de óxido.

El aumento de la presión total durante la oxidación conduce a un aumento en el índice de refracción [93], por lo que se esperaría que los índices de este trabajo fueran menores a los obtenidos a 1 atm, con $N=1.46$ a 1000°C . Sin embargo los índices de refracción obtenidos se encuentran por arriba de este valor.

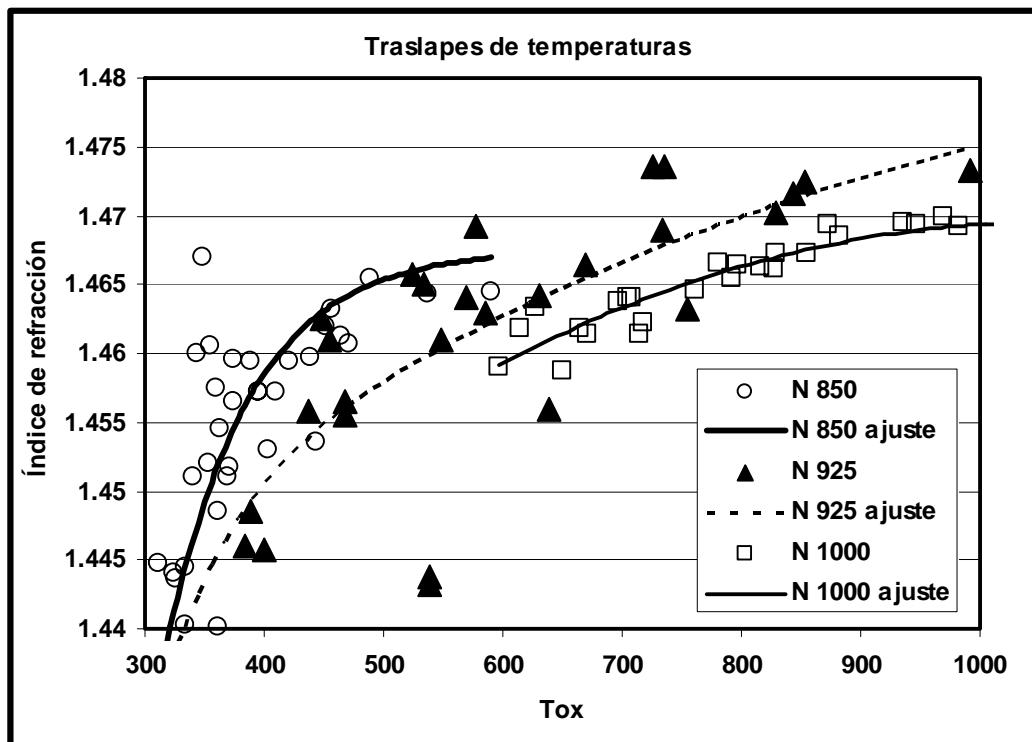


Figura 4.16 Traslape en grosor de óxido del índice de refracción para las temperaturas usadas y su ajuste a una curva exponencial.

Una posible explicación podría ser la alteración de la tensión del óxido debida a los tratamientos térmicos de densificado y aleación, que aumentarían el índice de refracción. Sin embargo, la comparación del proceso A (sin tratamientos) con el proceso I (con tratamientos), muestra contrariamente que las muestras sin tratamientos térmicos posteriores a la oxidación tienen mayor índice, Figura 4.17.

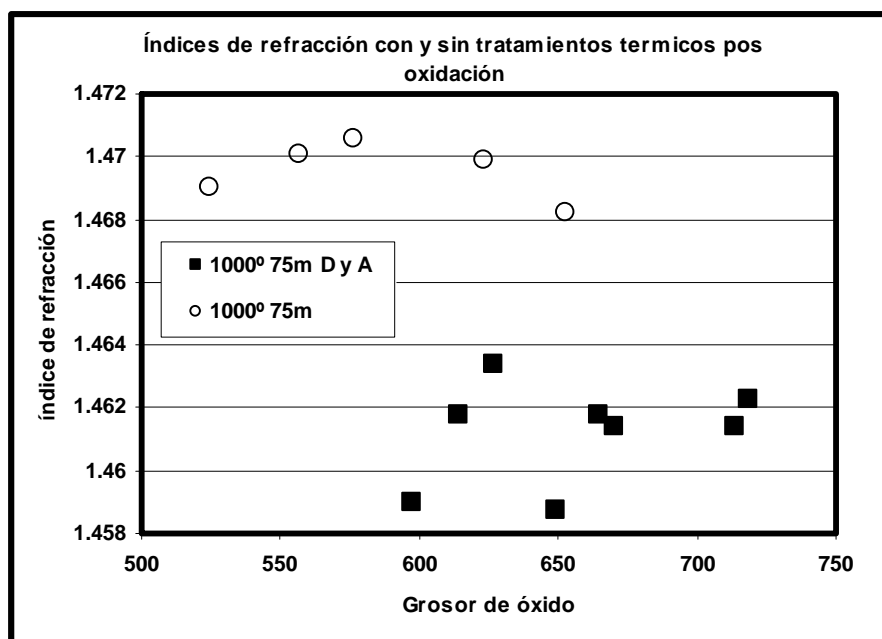


Figura 4.17 Índices de refracción para el proceso sin tratamientos pos oxidación A (círculos), y el proceso con tratamientos pos oxidación I (cuadros).

Descartando la presión de oxidación y los tratamientos térmicos post-oxidación, otra posibilidad sería el modelo elipsométrico usado, en el que se considera una interfase perfecta.

4.5 Función trabajo efectiva ϕ_{meff}

Para la correcta caracterización del sistema MOS es necesario conocer con precisión la función trabajo del metal. Esta función generalmente se toma como fija, despreciando los efectos de cargas que no varían su efecto con el grosor de óxido. Como se discutió en la sección 3.3.4, los dipolos en las interfases silicio-óxido y óxido-metal, y en menor medida dentro del óxido, determinan una función trabajo efectiva, la cual puede ser encontrada mediante la extrapolación a 0 de (4.5) o (4.6).

$$V_{mg}(t_{ox}) = V_{mg}^o + \frac{qN_{eff}}{\epsilon_{ox}} t_{ox} \quad (4.5)$$

ó

$$V_{fb}(t_{ox}) = V_{fb}^o + \frac{qN_{eff}}{\epsilon_{ox}} t_{ox} \quad (4.6)$$

Después la función trabajo efectiva se despeja de los valores de voltaje ideales mediante (4.7) y (4.8) para cada método respectivamente.

$$\phi_{meff} = \phi_m + V_{dip} = V_{fb}^o + \chi_{si} + \frac{E_g}{2} + D \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{N_B}{n_i}\right) \quad (4.7)$$

$$\phi_{meff} = \phi_m + V_{dip} = V_{mg}^o + \chi_{si} + \frac{E_g}{2} - D \frac{A \sqrt{2K_{si}\epsilon_0 N_B kT \ln\left(\frac{N_B}{n_i}\right)}}{C_{ox}} \quad (4.8)$$

Para obtener distintos grosores de óxido en las muestras, se grabó un escalón en solución 7:1, con una razón de grabado de aproximadamente 10Å/s. Para las muestras de los conjuntos I, VI, VII y XII no se grabó escalón alguno. En algunas de las muestras que fueron grabadas no se pudieron obtener mediciones C-V, posiblemente el grabado del óxido fue excesivo o creó “huecos” que pusieron en corto los capacitores. En las siguientes tablas se muestran los procesos en los que se pudieron obtener mediciones a 2 grosores de óxido.

Oxidaciones a 1000°C con mediciones a 2 grosores de óxido.									
MINS	(0 0 1)p	(0 0 1)n	(1 1 4)	(1 1 3)	(7 7 17)	(5 5 12)	(1 1 2)	(1 1 1)	(1 1 0)
75		ANA		CA		EA		FA	GA
100		ANII	BII	CII	DII	EII	HII	FII	GII
125	APIII	ANIII	BIII	CIII	DIII	EIII		FIII	GIII
175	APIV	ANIV	BIV	CIV	DIV	EIV		FIV	GIV
235	APV	ANV	BV	CV	DV	EV		FV	GV

Tabla 4.22 Muestras en las que se pudieron obtener mediciones C-V para dos grosores de óxido a 1000°C de oxidación.

Oxidaciones a 925°C con mediciones a 2 grosores de óxido.					
	(0 0 1)p	(0 0 1)n	(5 5 12)	(1 1 1)	(1 1 0)
110	APXIII		EXIII	FXIII	GXIII
135	APXIV	ANXIV	EXIV	FXIV	
160	APXV	ANXV	EXV		GXV
210	APXVI	ANXVI	EXVI		
250	APXVII	ANXVII	EXVII		GXVII
340	APXVIII	ANXIII	EXVIII	FXVIII	

Tabla 4.23 Muestras en las que se pudieron obtener mediciones C-V para dos grosores de óxido a 925°C de oxidación.

Oxidaciones a 850°C con mediciones a 2 grosores de óxido.									
MINS	(0 0 1)p	(0 0 1)n	(1 1 4)	(1 1 3)	(7 7 17)	(5 5 12)	(1 1 2)	(1 1 1)	(1 1 0)
285				CVIII	DVIII	EVIII	HVIII		GVIII
310						EIX			GIX
360	APX	ANX	BX		DX	EX		FX	GX
420			BXI		DXI	EXI			

Tabla 4.24 Muestras en las que se pudieron obtener mediciones C-V para dos grosores de óxido a 850°C de oxidación.

En la Figura 4.18 se ilustran ambas extrapolaciones en un capacitor tipo p. Puede notarse que la recta V_{mg} presenta una N_{eff} menor, (menor pendiente). Esta N_{eff} menor por V_{mg} ya se esperaba, dado que los estados en la interfase afectan como carga positiva en el V_{fb} aumentando la N_{eff} , Figura 3.6.

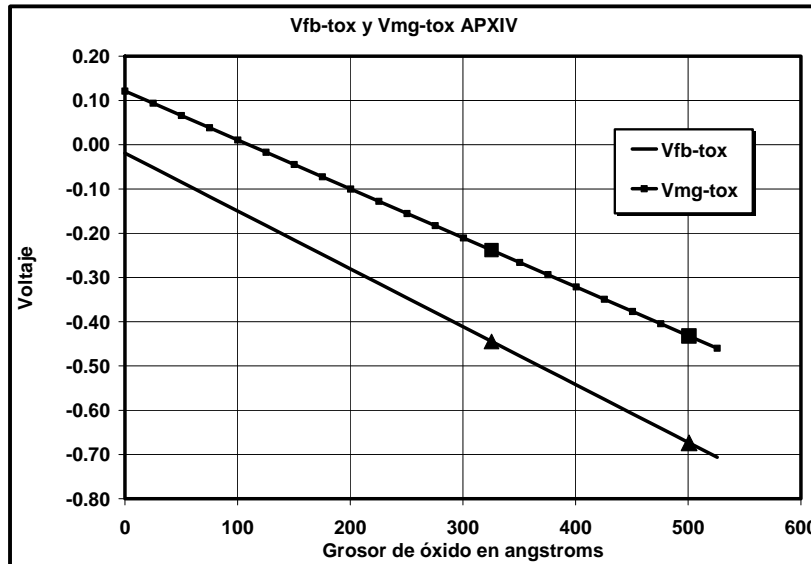


Figura 4.18 Extrapolación de V_{mg} y V_{fb} para obtener ϕ_{meff} en una oblea tipo p; los puntos gruesos indican los grosores de óxido para la extrapolación.

En la Figura 4.19 se ilustran ambas extrapolaciones para un capacitor tipo n. Puede notarse que la recta V_{mg} presenta una N_{eff} mayor, (mayor pendiente). Este incremento confirma lo esperado, dado que los estados en la interfase que se incluyen en la carga efectiva por V_{fb} , disminuyen N_{eff} , Figura 3.7.

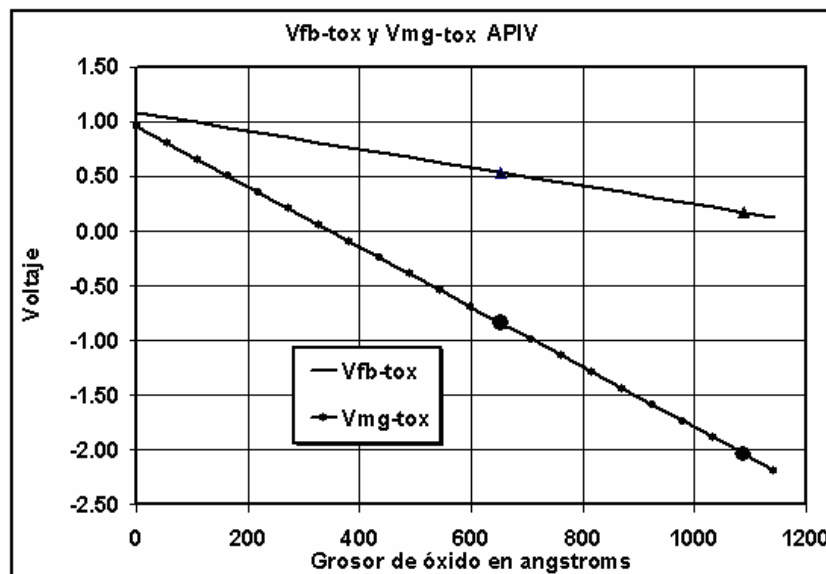


Figura 4.19 Extrapolación de V_{mg} y V_{fb} para obtener ϕ_{meff} en una oblea tipo n; los puntos gruesos indican los grosores de óxido para la extrapolación.

En la Tabla 4.25 se muestran los promedios por orientación de los valores de función trabajo efectiva ϕ_{meff} , obtenidos para cada temperatura de oxidación por el método de V_{mg} .

V_{mg}	(0 0 1)	(1 1 4)	(1 1 3)	(7 7 17)	(5 5 12)	(1 1 2)	(1 1 1)	(1 1 0)
1000	6.598	8.129	7.823	7.146	7.810	8.575	7.150	6.482
925	6.145				5.650		4.260	7.367
850	4.363	4.983	4.743	5.139	4.878	4.578	4.406	0.540

Tabla 4.25 Función trabajo efectiva promedio (en eV) para cada orientación y cada temperatura de oxidación. Se utilizó el método de $V_{mg}(t_{ox})$.

Utilizando el método de V_{fb} se obtuvieron los valores mostrados en la Tabla 4.26.

V_{fb}	(0 0 1)	(1 1 4)	(1 1 3)	(7 7 17)	(5 5 12)	(1 1 2)	(1 1 1)	(1 1 0)
1000	5.128	5.110	5.159	5.049	5.107	5.867	4.952	4.208
925	5.684				5.827		5.096	4.028
850	4.613	4.828	5.038	5.185	4.778	4.403	4.356	4.707

Tabla 4.26 Función trabajo efectiva promedio (en eV) para cada orientación y cada temperatura de oxidación. Se utilizó el método de $V_{fb}(t_{ox})$.

De la Figura 4.20 a la Figura 4.22 se grafican estos valores junto con la dispersión de resultados en cada orientación y, como referencia, una línea punteada para la función trabajo ideal del mercurio (4.53 eV), el metal de compuerta usado.

Los valores obtenidos por ambos métodos a 1000°C muestran una diferencia apreciable pero con una pequeña dispersión de los datos. No se aprecia una dependencia de la función trabajo efectiva con la orientación cristalina. A 925 y 850°C el promedio de las funciones trabajo efectivas son muy cercanas para ambos métodos, aún cuando los valores presentan una mayor dispersión. La orientación mas inconsistente es la (1 1 0), dado que presenta grandes variaciones e incluso funciones trabajo efectivas negativas.

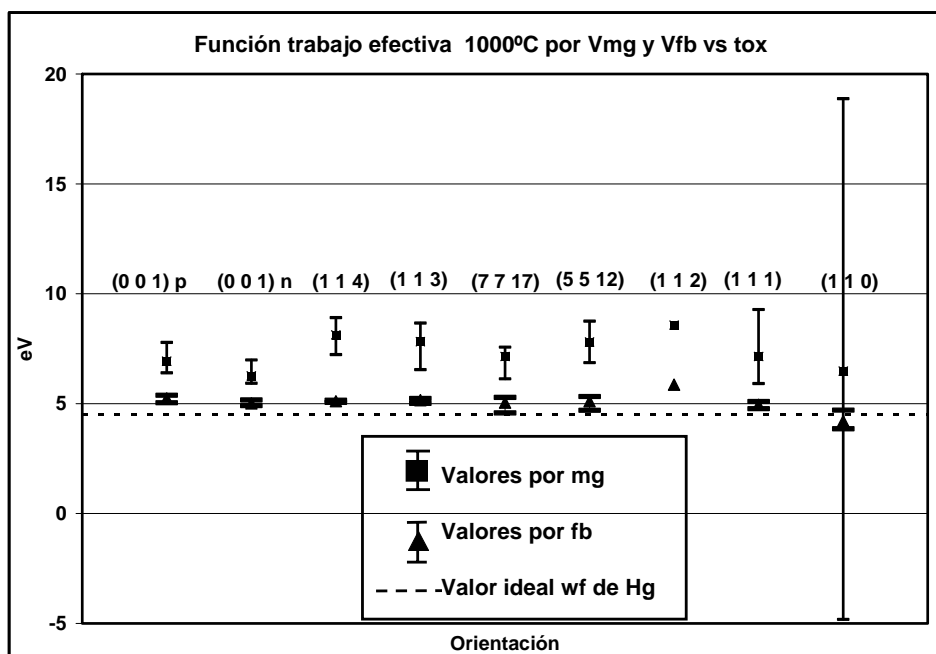


Figura 4.20 Funciones trabajo efectivas a 1000°C por V_{mg} y V_{fb} . El valor ideal se marca con la línea punteada.

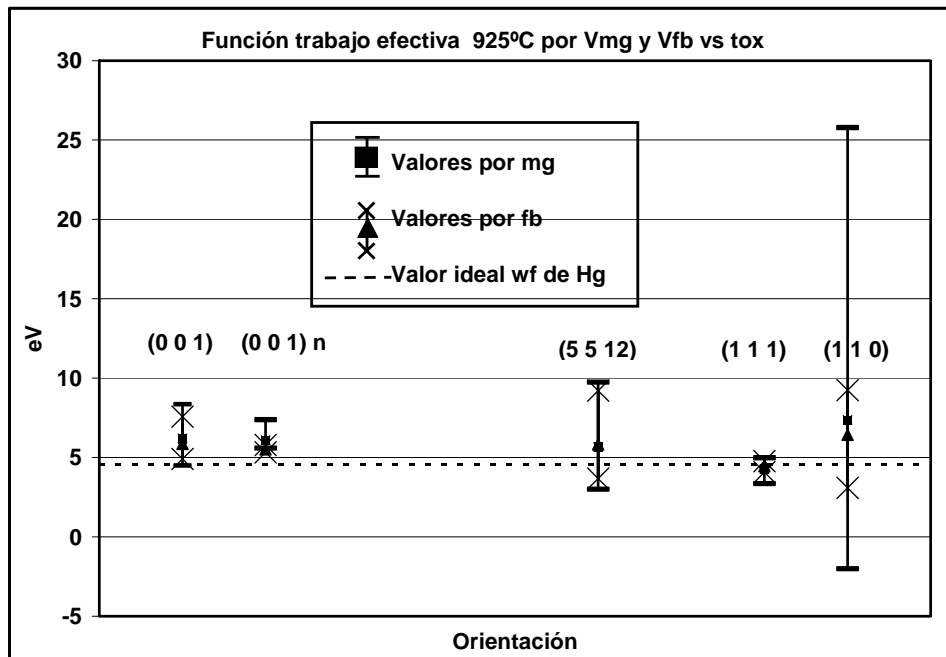


Figura 4.21 Funciones trabajo efectivas a 925°C por V_{mg} y V_{fb} . El valor ideal se marca con la línea punteada.

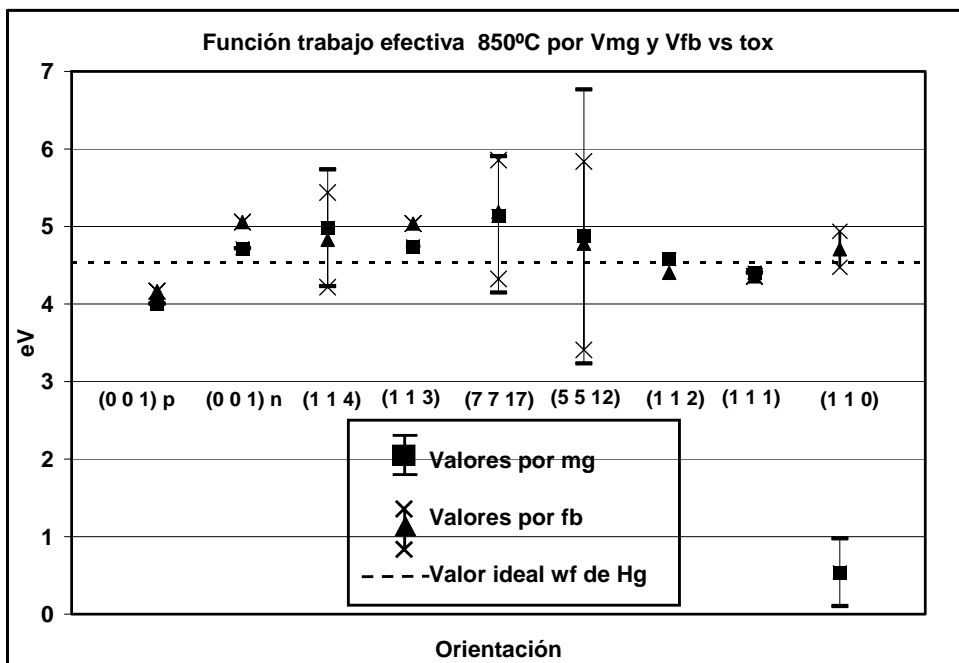


Figura 4.22 Funciones trabajo efectivas a 850°C por V_{mg} y V_{fb} . El valor ideal se marca con la línea punteada.

H. Z. Massoud [82], al analizar dipolos, encontró que aún cuando existe una diferencia teórica entre las funciones trabajo efectivas para (0 0 1) y (1 1 1) ésta no se manifiesta siempre. La diferencia máxima puede describirse por la ecualización de electronegatividad, pero no necesariamente está presente siempre, además hay que tomar en cuenta que los dipolos en la interfase metal-óxido tienen gran importancia, ya que esta carga no depende de la lejanía a la interfase (grosor de óxido). En el sistema de medición utilizado en este trabajo de tesis hay que tomar en cuenta que la punta de mercurio no tiene una unión de enlaces atómicos con el óxido, sino sólo de contacto físico. Esto significa una “interfase” llena de defectos y por lo tanto de cargas.

Las funciones trabajo efectivas de la Tabla 4.25 y Tabla 4.26 se utilizaron para obtener las densidades de carga efectiva N_{eff} mediante el corrimiento del voltaje de media banda prohibida y corrimiento del voltaje de banda plana respectivamente, como se muestra en la siguiente sección.

Finalmente el análisis en temperatura muestra en el método de voltaje de media banda un incremento con la temperatura de la función trabajo efectiva en 6 orientaciones y por lo tanto del voltaje V_{dip} . Para el método de voltaje de banda plana aparentemente no existe una relación.

4.6 Densidad de carga efectiva N_{eff} .

A partir de simples mediciones capacitancia-voltaje de alta frecuencia no se pueden separar las cargas presentes en el sistema MOS. La carga dipolar se puede extraer con capacitores con distinto grosor de óxido, los estados en la interfase mediante varios métodos como alta-baja frecuencia, la carga iónica móvil mediante estrés voltaje-temperatura, y la carga atrapada en el óxido mediante mediciones entre

grabados de óxido. Sólo la carga fija en el óxido no puede ser extraída, ya que se encuentra muy cerca del óxido, lo que dificulta su medición directa.

Generalmente se considera medir una N_{eff} o carga efectiva que incluye el efecto de todas las cargas parásitas, y esta se puede obtener de la pendiente de las mediciones de la carga bipolar usando V_{fb} o V_{mg} , ecuaciones (4.9) y (4.10), respectivamente

$$V_{fb}(t_{ox}) = V_{fb}^o + \frac{qN_{eff}}{\epsilon_{ox}} t_{ox} \quad (4.9)$$

$$V_{mg}(t_{ox}) = V_{mg}^o + \frac{qN_{eff}}{\epsilon_{ox}} t_{ox} \quad (4.10)$$

ó utilizando la función trabajo efectiva ϕ_{meff} para calcular V_{fb}^o o V_{mg}^o y las ecuaciones (4.11) y (4.12), respectivamente

$$N_{eff} = \frac{V_{fb} - V_{fb}^o}{-4.663977 \times 10^{-15} t_{ox}} \quad (4.11)$$

$$N_{eff} = \frac{V_{mg} - V_{mg}^o}{-4.663977 \times 10^{-15} t_{ox}} \quad (4.12)$$

Sin embargo, hay que tomar en cuenta que usando el voltaje de banda plana se incluye un efecto mayor de las cargas por estados en la interfase, como se expuso en la sección 3.3.3.

En este trabajo se determinó la carga efectiva usando los 4 métodos. Además se calculó, como se hace típicamente, usando la función trabajo ideal del metal ϕ_m y el corrimiento del voltaje de banda plana, ecuación (4.11).

La carga efectiva utilizando el corrimiento de voltajes ideales resultó tener una diferencia máxima del 2% con respecto a la carga obtenida por la pendiente de

distintos grosores, por lo que se utilizó la carga del corrimiento de voltajes ideales con función trabajo del metal efectiva, reduciendo los resultados a 3 conjuntos:

- Voltaje de media banda prohibida V_{mg}^o : Usando la función efectiva del mercurio φ_{meff} . Calculando N_{eff} por corrimiento. Resultado igual al de calcular N_{eff} por pendiente a distintos grosores.
- Voltaje de banda plana V_{fb}^o : Usando la función efectiva del metal φ_{meff} . Calculando N_{eff} por corrimiento. Resultado igual al de calcular N_{eff} por pendiente a distintos grosores.
- Corrimiento del voltaje de banda plana V_{fb}^o usando la función trabajo ideal del metal φ_m . El usado típicamente.

Podemos considerar que el método más cercano para obtener la carga fija en el óxido es el corrimiento de media banda prohibida con φ_{meff} , dado que no incluye el efecto de los dipolos y tiene un efecto reducido de los estados en la interfase. Después el de corrimiento de banda plana con φ_{meff} , ya que aunque no contiene la influencia de los dipolos tiene un efecto mayor de los estados en la interfase al primer método. Por último, el menos exacto para obtener la carga fija es el típico corrimiento de banda plana con φ_m ideal. Sin embargo, este último método incluye el efecto de todas las cargas y resulta más completo.

V_{mg}	A	I	II	III	IV	V	VI
(0 0 1)P			4.19E+11	5.55E+11	5.96E+11	2.91E+11	2.90E+11
(0 0 1)N	7.09E+11	6.51E+11	4.48E+11	4.89E+11	6.42E+11	2.85E+11	3.36E+11
(1 1 4)		9.32E+11	1.26E+12	7.42E+11	8.14E+11	6.79E+11	
(1 1 3)	1.32E+12	6.42E+11	9.17E+11	6.49E+11	8.46E+11	5.95E+11	
(7 7 17)		7.17E+11	9.51E+11	7.52E+11	5.87E+11	3.83E+11	5.35E+11
(5 5 12)	1.09E+12	8.59E+11	1.09E+12	5.26E+11	8.64E+11	2.16E+11	6.50E+11
(1 1 2)			1.11E+12				
(1 1 1)	2.24E+12	5.35E+11	1.48E+12	7.40E+11	6.40E+11	3.11E+11	5.01E+11
(1 1 0)	-1.56E+12	1.16E+12	-1.27E+12	-1.79E+12	-1.88E+12	-1.64E+12	6.41E+11

Tabla 4.27 Densidades de carga efectiva N_{eff} para 1000°C por el método de voltaje de media banda.

A continuación se muestran las tablas de N_{eff} obtenidas por los 3 métodos y las gráficas correspondientes. La densidad de carga es por definición positiva, dado que es el valor absoluto de la carga sobre el área $N_x = |Q_x|/A$. Sin embargo, en este trabajo se considerará negativa la densidad de carga cuando la carga asociada sea negativa (e^-), dado que eso nos indicará si existe un incremento relativo de carga positiva entre orientaciones, y no sólo una cercanía de la carga total a cero. Por otra parte se considera que la carga fija es positiva y la mayor contribución a la carga efectiva, por lo que una densidad negativa indica que existen contribuciones de carga negativas superiores a la carga fija.

Puede notarse en la Figura 4.23 que no existe una relación claramente creciente con la orientación cristalina, sólo apreciando el conjunto se nota una pequeña tendencia a incrementar N_{eff} hacia (1 1 1) y decaer en (1 1 0).

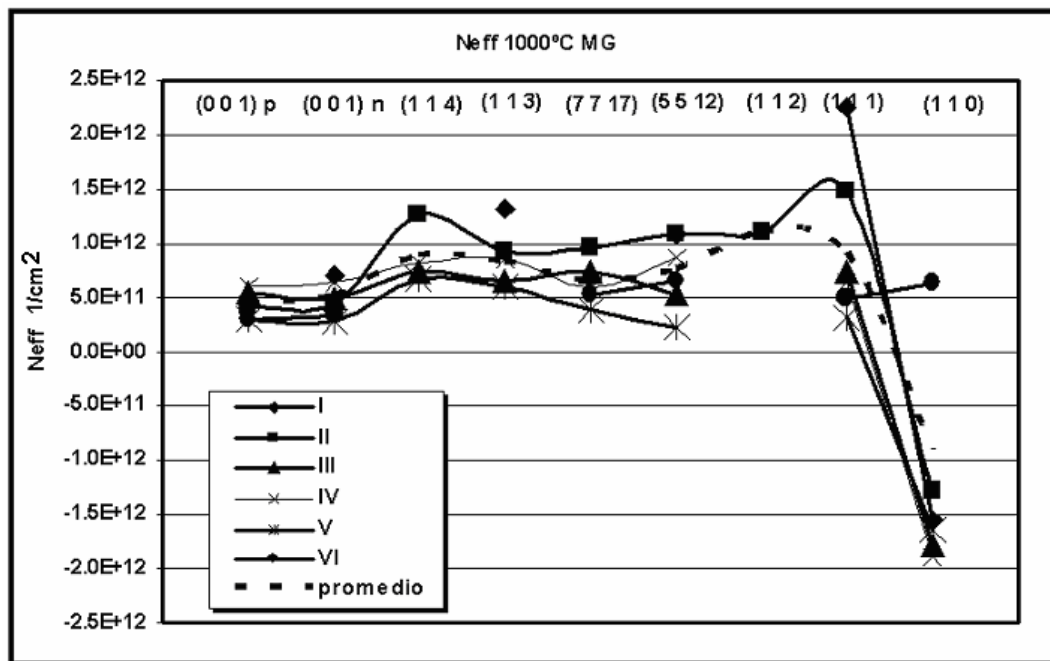


Figura 4.23 Densidades de carga efectiva N_{eff} para 1000°C por el método de voltaje de media banda. No se grafica el proceso de oxidación A.

V_{fb}	A	I	II	III	IV	V	VI
(0 0 1)P			1.18E+11	2.58E+11	1.81E+11	9.36E+10	9.96E+10
(0 0 1)N	2.76E+11	2.15E+11	1.59E+11	1.55E+11	1.91E+11	9.26E+10	1.24E+11
(1 1 4)		3.67E+11	2.40E+11	2.33E+11	1.82E+11	1.60E+11	
(1 1 3)	3.97E+11	2.87E+11	2.48E+11	1.72E+11	2.29E+11	2.74E+11	
(7 7 17)		2.74E+11	2.86E+11	2.62E+11	1.97E+11	8.98E+10	2.13E+11
(5 5 12)	2.31E+11	3.64E+11	2.97E+11	2.14E+11	2.25E+11	5.91E+10	2.36E+11
(1 1 2)			4.45E+11				
(1 1 1)	8.13E+11	3.49E+11	4.08E+11	3.02E+11	2.63E+11	1.40E+11	1.88E+11
(1 1 0)	-1.85E+12	5.01E+11	3.90E+11	4.32E+11	4.23E+11	4.59E+11	4.48E+10

Tabla 4.28 Densidades de carga efectiva N_{eff} para 1000°C por el método de voltaje de banda plana.

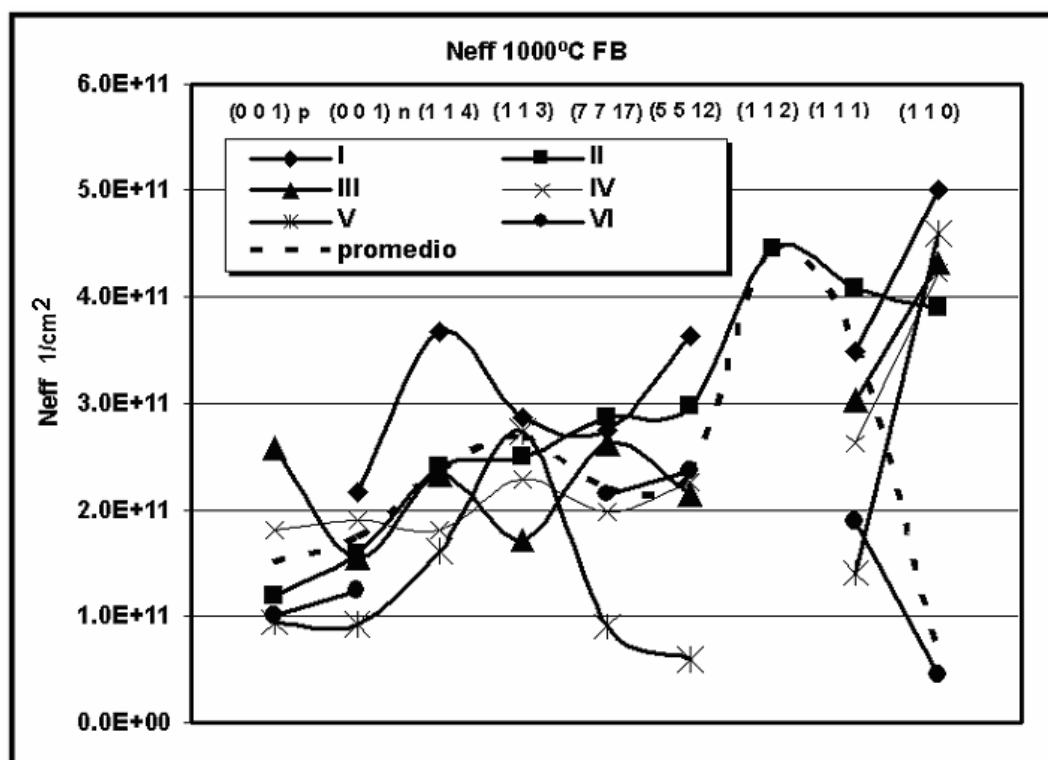


Figura 4.24 Densidades de carga efectiva N_{eff} para 1000°C por el método de voltaje de banda plana. No se grafica el proceso de oxidación A.

Para la N_{eff} obtenida por voltaje de banda plana no se encuentra tampoco una tendencia clara respecto a la orientación cristalina. Las densidades son menores que las obtenidas por voltaje de media banda.

	A	I	II	III	IV	V	VI
(0 0 1)P			-1.74E+10	5.47E+10	2.47E+10	1.78E+10	2.21E+10
(0 0 1)N	8.01E+10	2.65E+10	2.36E+09	4.92E+10	3.98E+10	2.54E+10	3.65E+10
(1 1 4)		1.88E+11	7.45E+10	7.79E+10	5.00E+10	6.95E+10	
(1 1 3)	2.12E+11	1.36E+11	1.05E+11	8.45E+10	9.18E+10	1.75E+11	
(7 7 17)		1.30E+11	9.86E+10	1.03E+11	8.07E+10	8.39E+10	1.46E+11
(5 5 12)	6.19E+10	2.00E+11	1.04E+11	9.99E+10	9.72E+10	4.52E+10	1.60E+11
(1 1 2)			1.30E+11				
(1 1 1)	6.65E+11	2.41E+11	2.57E+11	1.97E+11	1.73E+11	1.12E+11	1.34E+11
(1 1 0)	-1.72E+12	5.78E+11	5.24E+11	3.91E+11	4.80E+11	5.75E+11	8.76E+10

Tabla 4.29 Densidades de carga efectiva N_{eff} para 1000°C por el método de voltaje de banda plana con función trabajo del metal ideal.

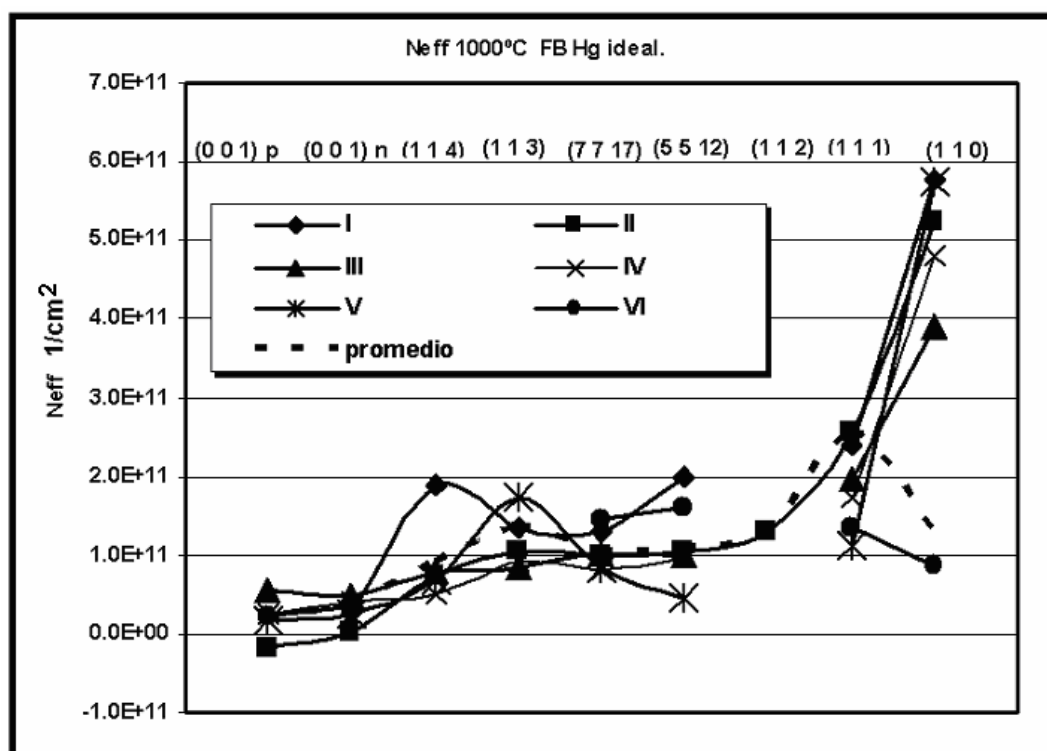


Figura 4.25 Densidades de carga efectiva N_{eff} para 1000°C por el método de voltaje de banda plana con función trabajo del metal ideal. No se grafica el proceso de oxidación A.

Para las densidades calculadas a partir del corrimiento del voltaje de banda plana con función trabajo del metal ideal a la temperatura de 1000°C (Figura 4.25) se puede apreciar una tendencia a incrementarse de la densidad con la orientación cristalina, que es la tendencia reportada por varios autores [78] para la variación de la carga efectiva y el método más usado para obtenerla [72].

V_{mg}	XIII	XIV	XV	XVI	XVII	XVIII
(0 0 1)P	1.50E+12	2.38E+11	6.03E+11	3.53E+11	1.58E+12	5.60E+11
(0 0 1)N		1.01E+12	8.64E+11	1.44E+12	7.66E+11	3.46E+11
(5 5 12)	1.14E+12	6.04E+11	7.11E+11	-2.06E+11	1.93E+11	1.46E+12
(1 1 1)	-1.47E+11	2.03E+11	1.59E+11	3.29E+11	2.00E+11	3.19E+11
(1 1 0)	-3.26E+12	-1.73E+12	2.32E+12		-1.50E+12	

Tabla 4.30 Densidades de carga efectiva N_{eff} para 925°C por el método de voltaje de media banda con función trabajo del metal efectiva.

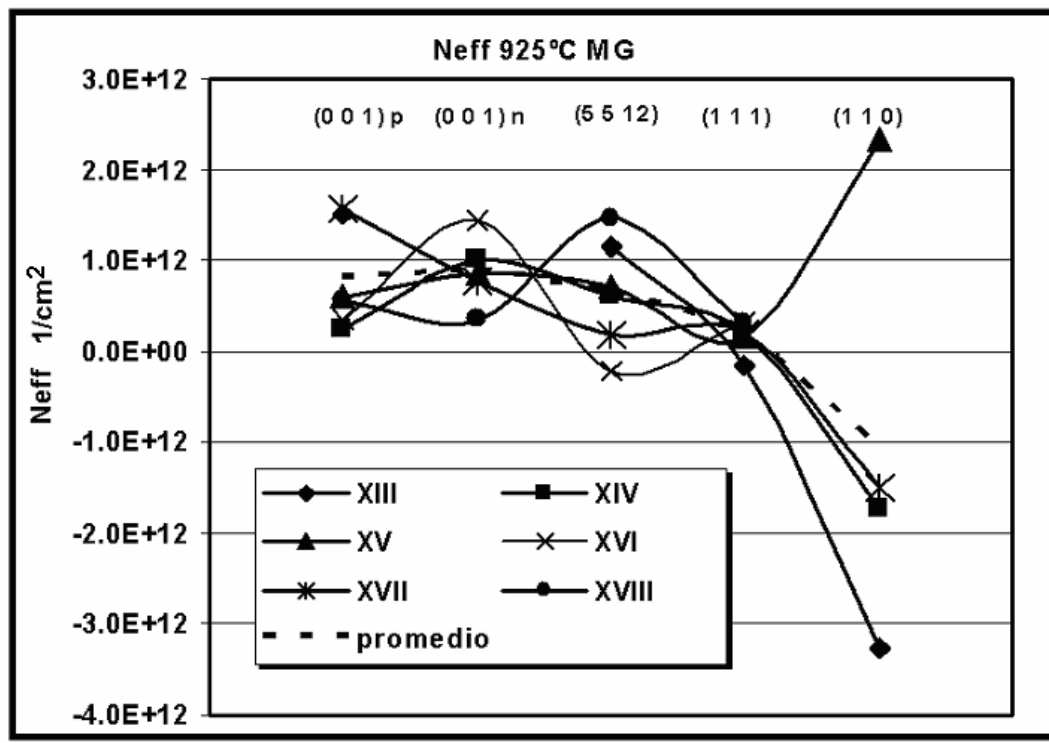


Figura 4.26 Densidades de carga efectiva N_{eff} para 925°C por el método de voltaje de media banda con función trabajo del metal efectiva.

En los procesos de oxidación a 925 y 850°C no se tiene una tendencia apreciable en cuanto a la variación con la orientación. Inclusive pareciera que disminuye con la orientación cristalina, como se puede apreciar en la Figura 4.26. Otro punto importante: a todas las temperaturas no se tiene una distinción clara entre el número de proceso, p.e. en la Figura 4.26 de XIII a XVIII, lo que nos indica además que la densidad no tiene dependencia del grosor de óxido.

V_{fb}	XIII	XIV	XV	XVI	XVII	XVIII
(0 0 1)P	8.19E+11	2.82E+11	5.78E+11	2.91E+11	1.20E+12	6.96E+11
(0 0 1)N		6.17E+11	6.66E+11	5.97E+11	4.18E+11	2.92E+11
(5 5 12)	1.23E+12	6.01E+11	6.78E+11	-4.83E+10	2.42E+11	1.28E+12
(1 1 1)	1.28E+11	2.18E+11	4.26E+11	5.15E+11	3.94E+11	2.53E+11
(1 1 0)	-5.38E+11	-8.29E+12	-4.54E+12		1.20E+12	

Tabla 4.31 Densidades de carga efectiva N_{eff} para 925°C por el método de voltaje de banda plana con función trabajo del metal efectiva.

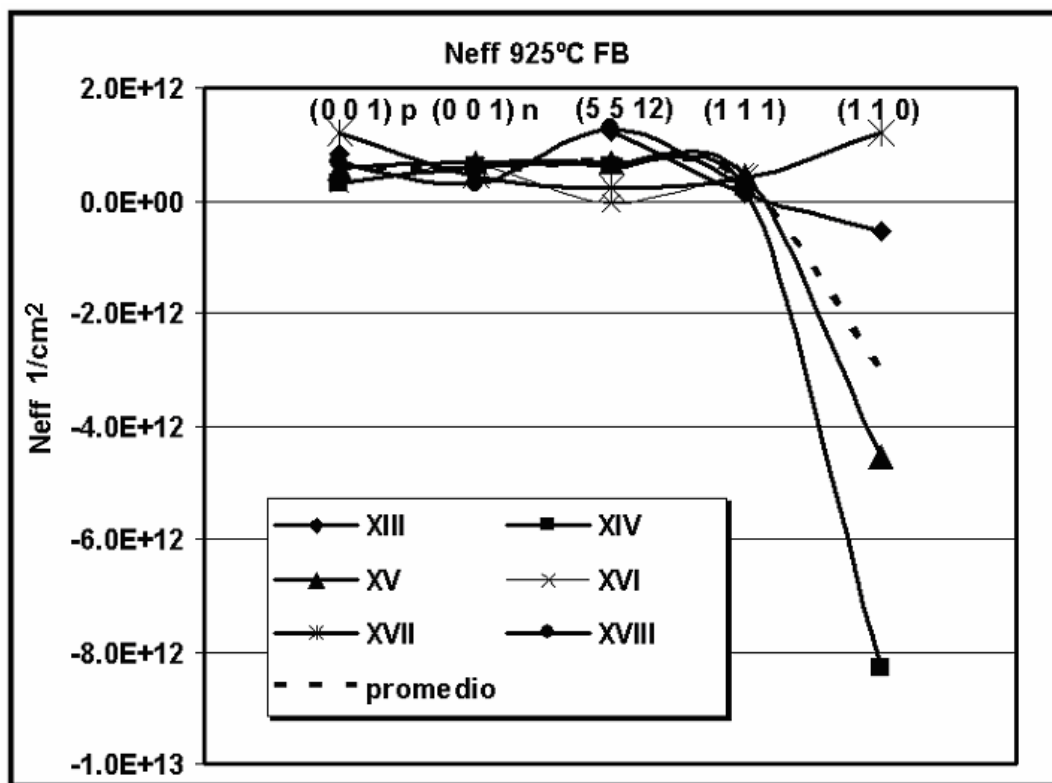


Figura 4.27 Densidades de carga efectiva N_{eff} para 925°C por el método de voltaje de banda plana con función trabajo del metal efectiva.

	XIII	XIV	XV	XVI	XVII	XVIII
(0 0 1)P	7.66E+10	1.19E+11	2.02E+11	1.64E+11	2.10E+11	2.59E+11
(0 0 1)N		1.38E+11	1.72E+11	5.77E+10	8.57E+10	-8.47E+09
(5 5 12)	6.27E+11	1.98E+11	1.72E+11	2.27E+11	1.38E+11	2.12E+11
(1 1 1)	3.26E+11	2.21E+11	2.28E+11	3.46E+11	2.40E+11	2.03E+11
(1 1 0)	2.94E+11	-8.06E+12	-6.73E+12		4.35E+11	

Tabla 4.32 Densidades de carga efectiva N_{eff} para 925°C por el método de voltaje de banda plana con función trabajo del metal ideal.

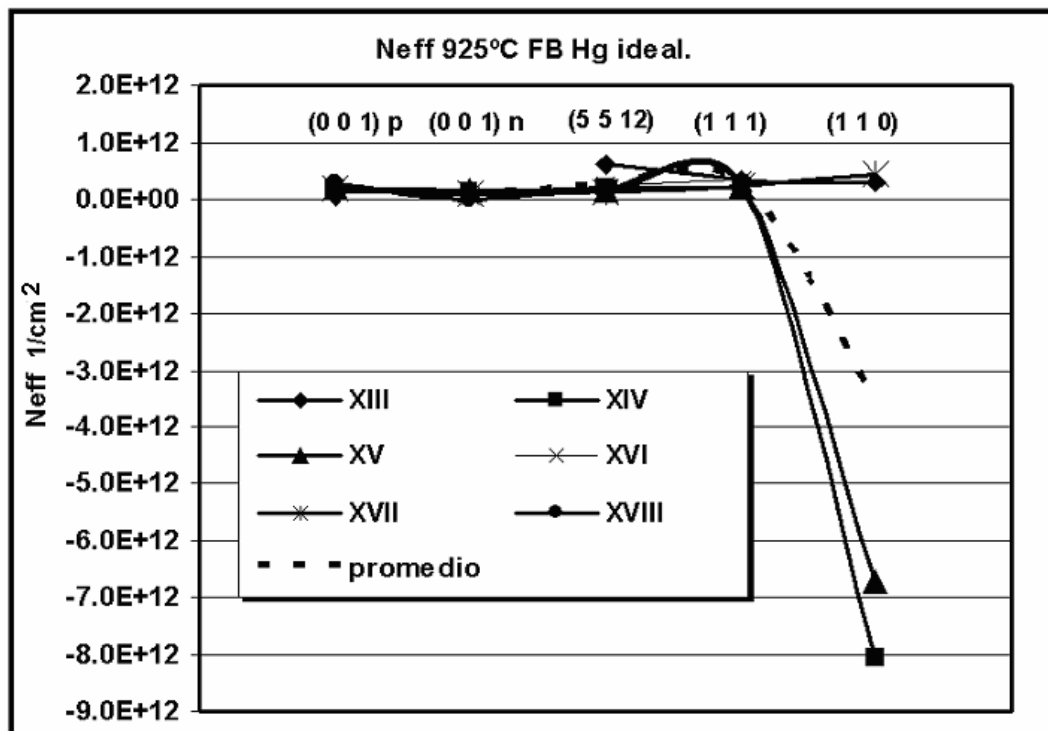


Figura 4.28 Densidades de carga efectiva N_{eff} para 925°C por el método de voltaje de banda plana con función trabajo del metal ideal.

V_{mg}	VII	VIII	IX	X	XI	XII
(0 0 1)P	-4.91E+11	2.21E+11	4.71E+11	-2.04E+10	3.43E+11	1.35E+11
(0 0 1)N	1.19E+11	2.10E+11	-5.02E+11	3.39E+11	1.64E+11	1.38E+11
(1 1 4)	4.22E+11		3.89E+12	7.81E+11	8.19E+10	
(1 1 3)	1.14E+11	6.99E+11		3.32E+11	3.45E+11	2.33E+11
(7 7 17)	2.74E+11	4.06E+11		1.07E+12	5.91E+11	3.61E+11
(5 5 12)	3.55E+11	-2.98E+11	1.86E+12	4.28E+11	3.49E+11	1.09E+11
(1 1 2)		-6.29E+11				
(1 1 1)	1.80E+11	9.90E+11	1.11E+12	4.41E+11	5.08E+11	1.86E+11
(1 1 0)	-8.49E+11	-5.24E+12	-1.19E+12	-1.50E+12	-9.62E+11	-4.76E+12

Tabla 4.33 Densidades de carga efectiva N_{eff} para 850°C por el método de voltaje de media banda con función trabajo del metal efectiva.

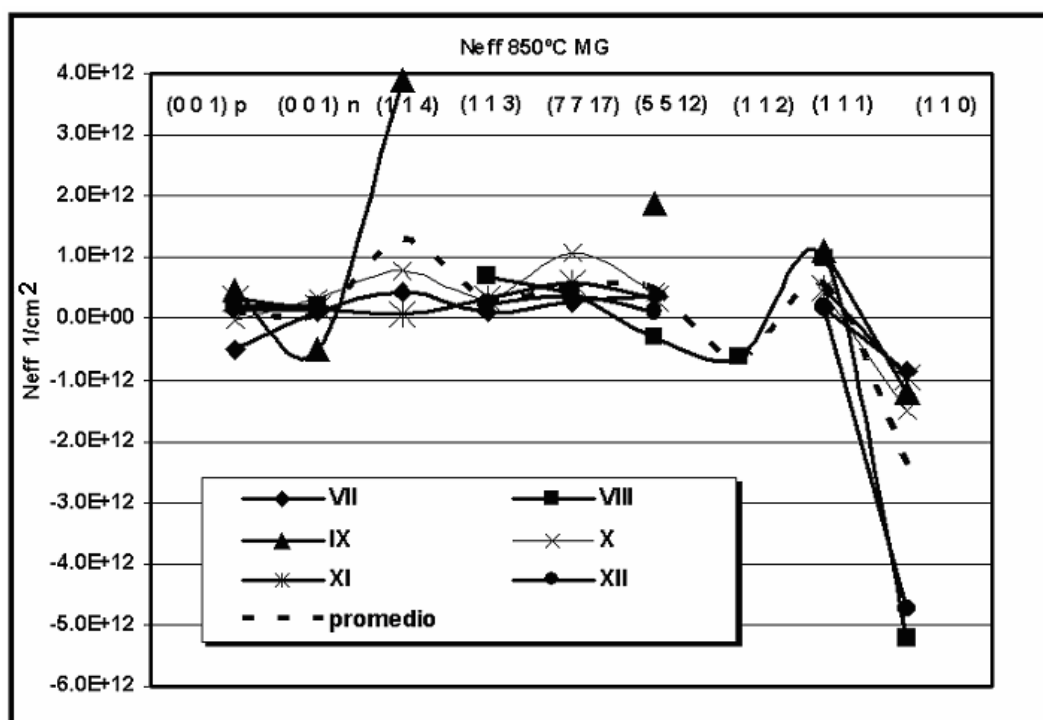


Figura 4.29 Densidades de carga efectiva N_{eff} para 850°C por el método de voltaje de media banda con función trabajo del metal efectiva.

V_{fb}	VII	VIII	IX	X	XI	XII
(0 0 1)P	3.05E+11	3.59E+11	2.76E+11	-1.78E+10	3.74E+11	1.73E+11
(0 0 1)N	2.45E+11	1.70E+11	3.11E+11	3.70E+11	1.68E+11	1.84E+11
(1 1 4)	3.45E+11		3.83E+12	6.18E+11	7.30E+10	
(1 1 3)	5.96E+11	7.37E+11		3.84E+11	3.96E+11	3.04E+11
(7 7 17)	7.31E+11	3.95E+11		9.65E+11	5.44E+11	3.67E+11
(5 5 12)	2.82E+11	-2.73E+11	1.27E+12	4.07E+11	4.25E+11	4.67E+11
(1 1 2)		-6.44E+11				
(1 1 1)	1.60E+11	8.30E+11	5.35E+11	3.84E+11	4.25E+11	1.78E+11
(1 1 0)	5.11E+11	-3.44E+12	8.76E+11	3.85E+11	5.73E+11	7.88E+11

Tabla 4.34 Densidades de carga efectiva N_{eff} para 850°C por el método de voltaje de banda plana con función trabajo del metal efectiva.

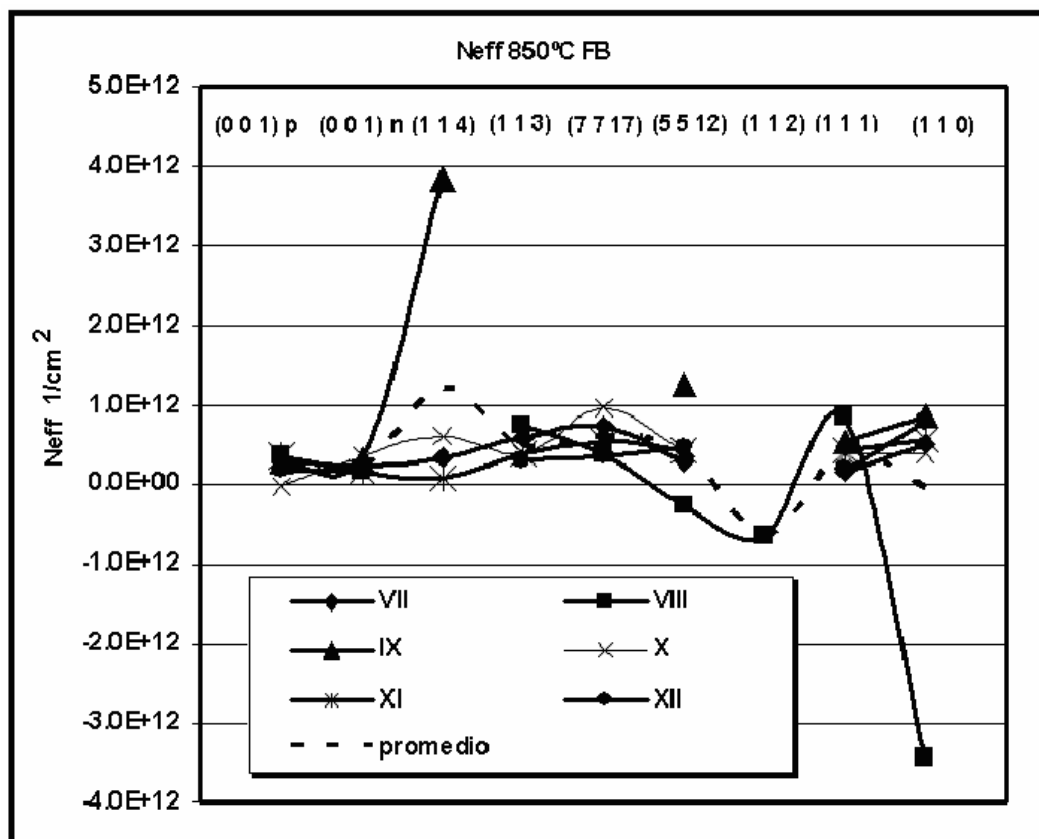


Figura 4.30 Densidades de carga efectiva N_{eff} para 850°C por el método de voltaje de banda plana con función trabajo del metal efectiva.

	VII	VIII	IX	X	XI	XII
(0 0 1)P	2.53E+11	3.26E+11	2.25E+11	1.95E+11	3.26E+11	1.39E+11
(0 0 1)N	1.90E+11	5.46E+10	2.58E+11	2.91E+10	1.08E+11	1.44E+11
(1 1 4)	1.70E+11		1.61E+11	1.63E+11	2.49E+11	
(1 1 3)	3.81E+11	5.29E+11		1.83E+11	2.05E+11	1.33E+11
(7 7 17)	4.01E+11	5.11E+11		3.02E+11	1.38E+11	1.07E+11
(5 5 12)	1.46E+11	3.75E+11	5.61E+11	2.57E+11	2.01E+11	3.64E+11
(1 1 2)		-5.80E+11				
(1 1 1)	2.33E+11	9.26E+11	6.30E+11	4.69E+11	5.05E+11	2.34E+11
(1 1 0)	4.26E+11	7.85E+11	6.39E+11	4.14E+11	4.91E+11	7.22E+11

Tabla 4.35 Densidades de carga efectiva N_{eff} para 850°C por el método de voltaje de banda plana con función trabajo del metal ideal.

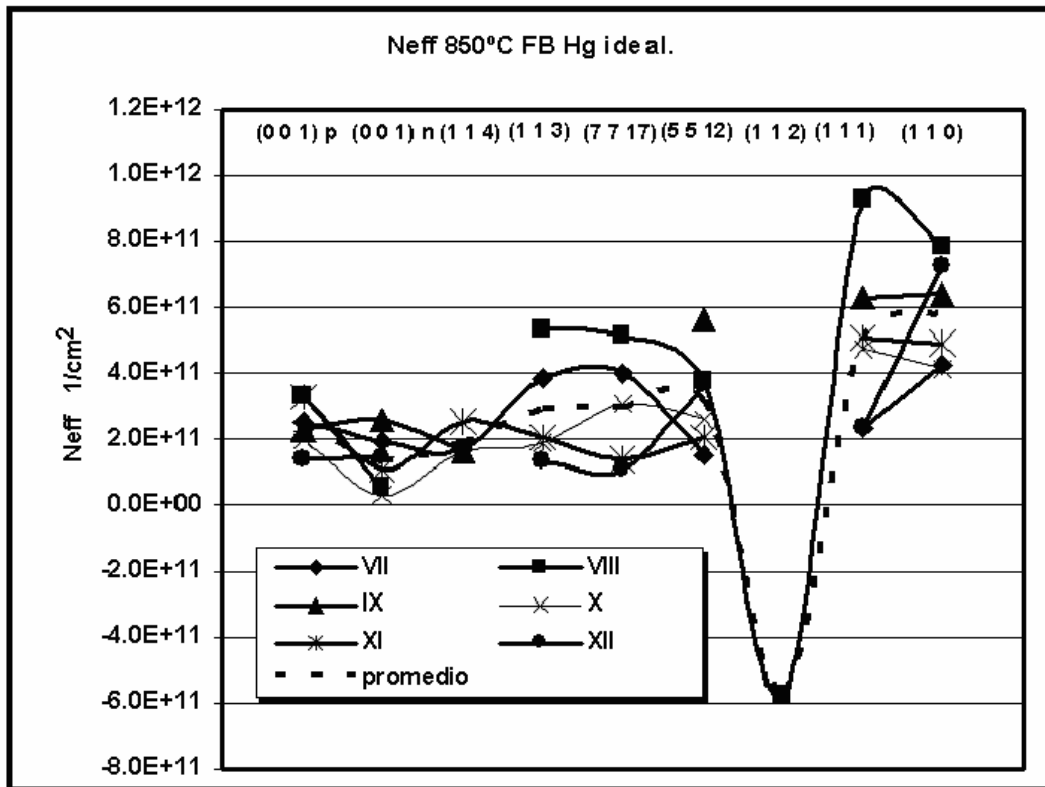


Figura 4.31 Densidades de carga efectiva N_{eff} para 850°C por el método de voltaje de banda plana con función trabajo del metal ideal.

A partir de las ecuaciones (3.52) y (4.11) se puede obtener que la diferencia en el método de corrimiento de banda plana usando la función trabajo ideal o real es función del voltaje de los dipolos V_{dip} .

$$N_{eff} = \frac{V_{fb}^o - V_{fb}}{4.663977 \times 10^{-15} t_{ox}} + \frac{V_{dip}}{4.663977 \times 10^{-15} t_{ox}} \quad (4.13)$$

Según la eculización de carga este voltaje es positivo. Los resultados obtenidos en la función trabajo efectiva también nos reportan un V_{dip} positivo en la mayoría de los casos; dado que las funciones trabajo efectivas se encuentran por arriba de la función trabajo ideal del mercurio. Esto implica que la diferencia entre usar la función trabajo ideal o real es un incremento de la carga directamente proporcional a V_{dip} , es decir, el segundo sumando de la ecuación (4.13).

Por otro lado el uso del voltaje de media banda evita la disminución de la carga debida a estados en la interfase en dispositivos tipo n o el aumento por la misma razón en los dispositivos tipo p. Lo anterior implica que la densidad de carga obtenida por este método en comparación a la obtenida por el método de banda plana con función trabajo efectiva debe de ser mayor en dispositivos n y menor en dispositivos tipo p.

A continuación se presentan los resultados para el proceso II, que tiene el conjunto más completo de orientaciones.

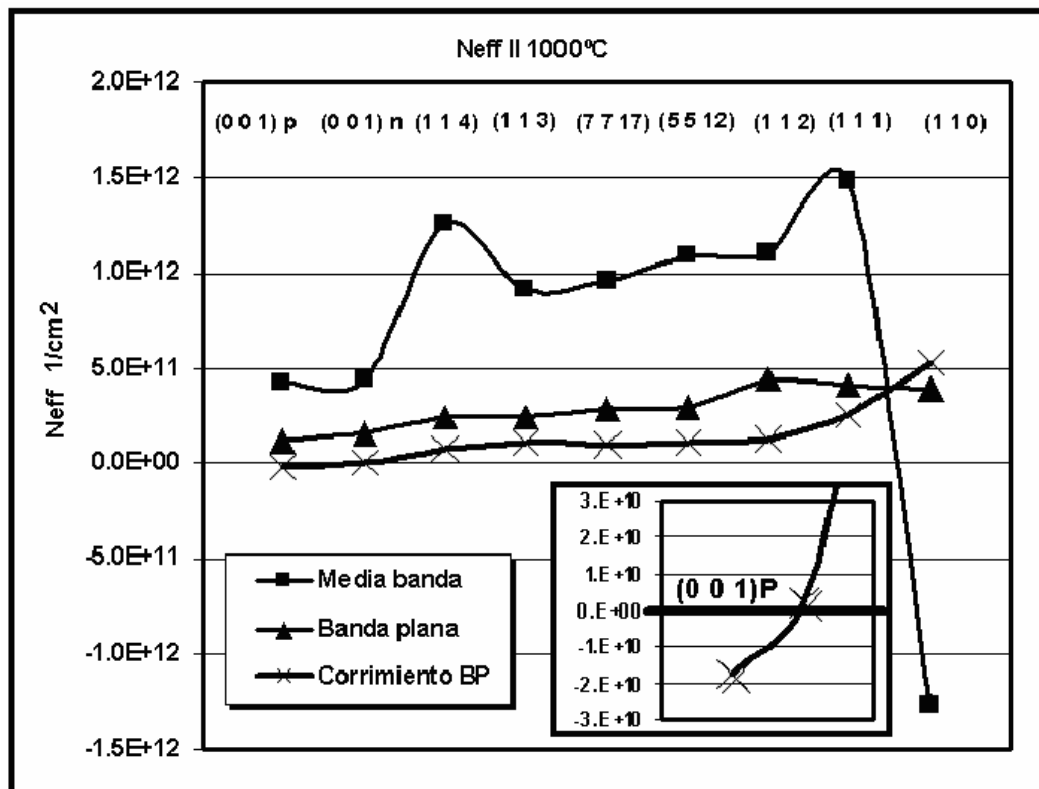


Figura 4.32 Comparación de los 3 métodos para el proceso II con un acercamiento a la densidad efectiva por banda plana con función trabajo ideal en la oblea (0 0 1)p

Puede notarse como la determinación de carga efectiva usando el método de banda plana con función trabajo efectiva es mayor al que se obtiene cuando se utiliza

la función trabajo ideal. Por otra parte el método de voltaje de media banda es mayor al de banda plana con función trabajo efectiva para obleas tipo n y menor para obleas tipo p (oblea (1 1 0)).

El acercamiento para la Oblea (0 0 1)P demuestra que el no tomar en cuenta la función trabajo efectiva puede llevar a obtener densidades efectivas de cargas negativas. Por lo anterior es importante caracterizar debidamente esta función trabajo efectiva.

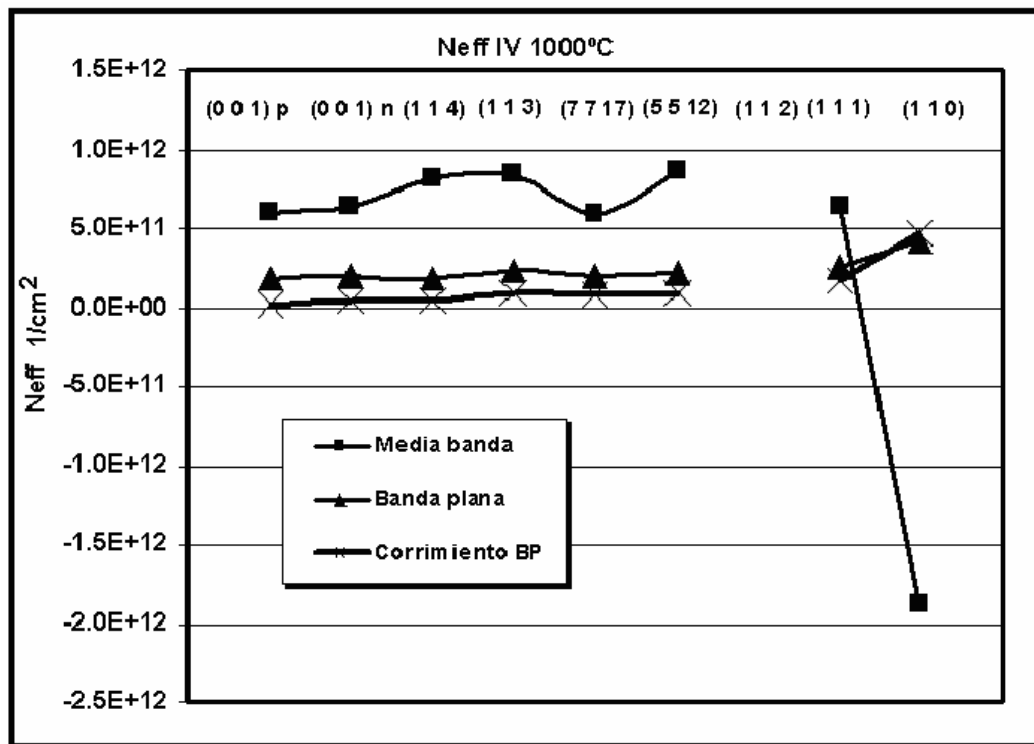


Figura 4.33 Densidades efectivas por 3 métodos para el proceso de oxidación IV y que muestra el mismo comportamiento que el del conjunto II, Figura 4.32

En la Figura 4.33 se puede apreciar como el comportamiento de los 3 métodos es también el esperado en el proceso IV. La oblea (1 1 0) es tipo p.

Por último en la Figura 4.34 podemos confirmar la diferencia entre obleas n y p, dado que las obleas (0 0 1)n, (1 1 4) y (1 1 1) son tipo n y las demás tipo p. Note que aún así en la orientación (7 7 17) tenemos una inconsistencia, dado que es tipo p.

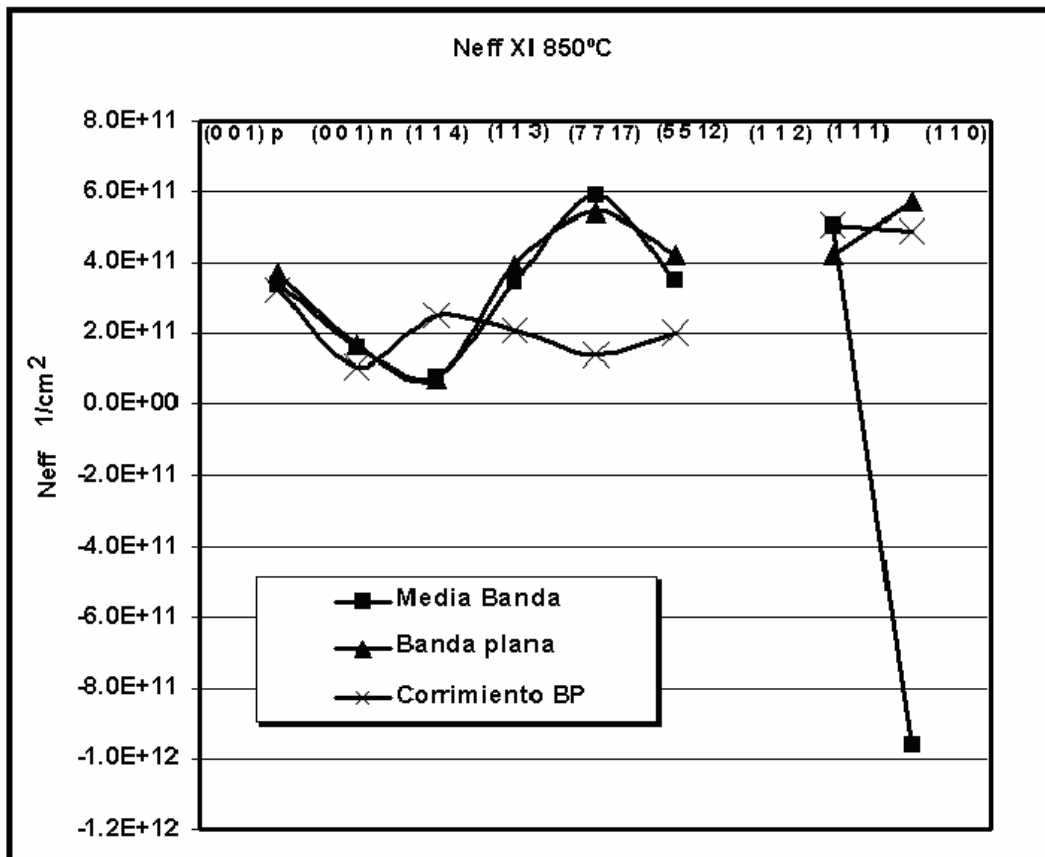


Figura 4.34 Densidades efectivas por 3 métodos para el proceso de oxidación XI.

Para procesos en los que la función trabajo efectiva se encuentre muy cercana a la ideal los 3 métodos determinarán cargas efectivas muy cercanas. Este es el caso de algunas orientaciones en los procesos a 850°C, Tabla 4.25 y Tabla 4.27. Esto se ejemplifica en la Figura 4.35

En general podemos decir que si no se incluye el voltaje V_{dip} en la función trabajo, sino directamente en la carga efectiva, tendremos densidades de carga bajas que incluso pueden ser negativas (método típico). Por otra parte el usar el voltaje de

media banda prohibida nos ayuda a eliminar influencia de los estados en la interfase. Esta influencia depende del tipo de la oblea.

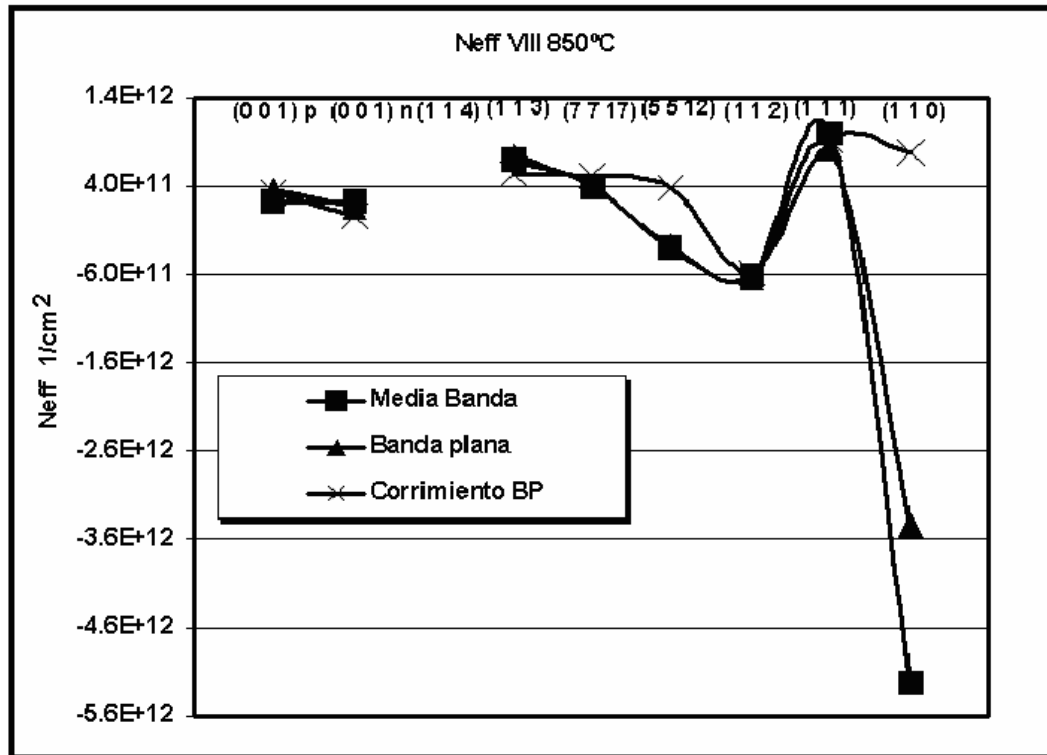


Figura 4.35 Densidades efectivas por 3 métodos para el proceso de oxidación VIII.

La carga efectiva N_{eff} no presentó una dependencia clara respecto a la orientación, y en los procesos de oxidación donde lo mostró fue solamente con el método típico de corrimiento de voltaje de banda plana con la función trabajo del metal ideal.

El proceso de oxidación A, sin tratamientos térmicos de reducción de cargas, presenta densidades de carga efectiva mayores a las del proceso I, que tiene las mismas condiciones de fabricación. Este comportamiento es de esperarse. Sin embargo, la orientación (1 1 0) presenta densidades que no coinciden con lo esperado.

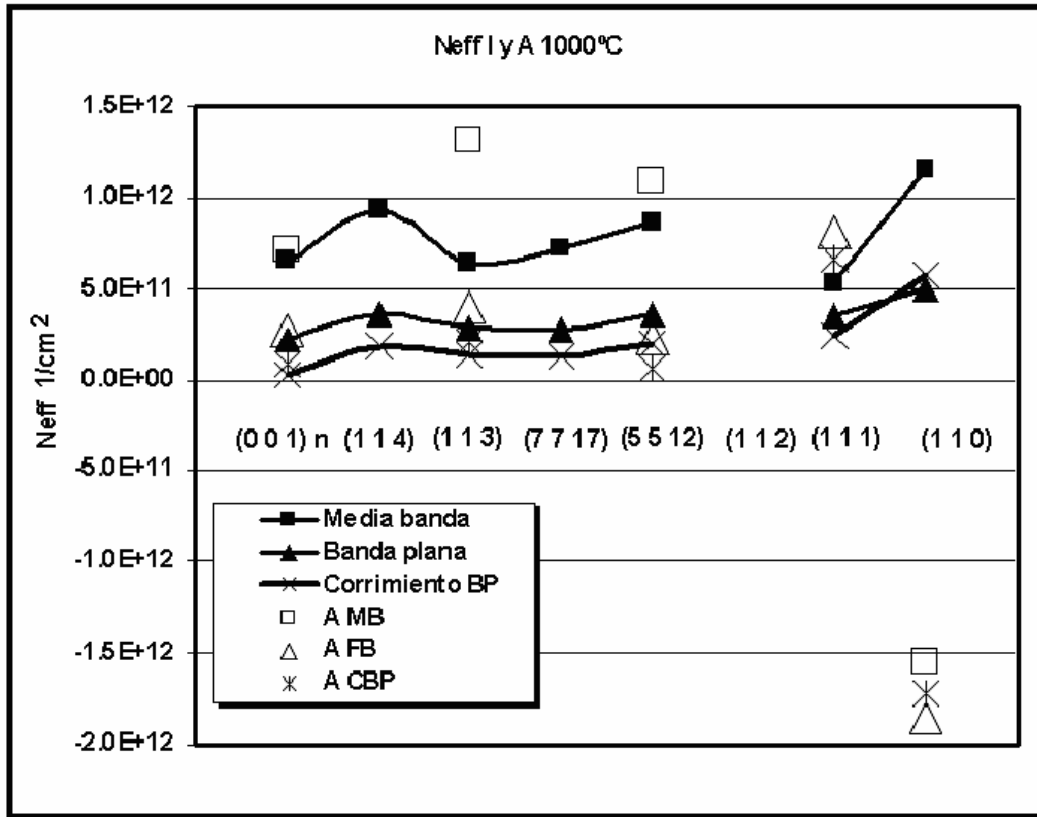


Figura 4.36 Densidades de carga para los procesos A y I; procesos sin y con tratamientos térmicos de reducción de carga respectivamente.

4.7 Densidad de estados en la interfase D_{it} .

Para los procesos de oxidación no se pudieron obtener mediciones de estados en la interfase mediante el método de alta-baja frecuencia. Se encontraron irregularidades de ruido y excesiva capacitancia en la curva de baja frecuencia. Estos problemas pueden deberse a el exceso de defectos en la interfase del contacto mercurio-óxido, la cual es sólo física. Por otra parte se pudieron obtener las densidades por medio del método Terman. Dado que los resultados son específicos para cada capacitor sólo se caracterizaron los procesos A y I. Ambos procesos llevaron los mismos tratamientos y tiempos de oxidación; a excepción de los 2 tratamientos de reducción de cargas, el densificado y la aleación, que fueron omitidos en el proceso de oxidación A.

En Figura 4.37 se muestran las densidades de estados permitidos en la interfase para el proceso I. Se puede notar que no existe una clara diferencia entre orientaciones, a excepción de la orientación (1 1 0) que muestra una D_{it} elevada, al igual que la N_{eff} tratada en la sección anterior.

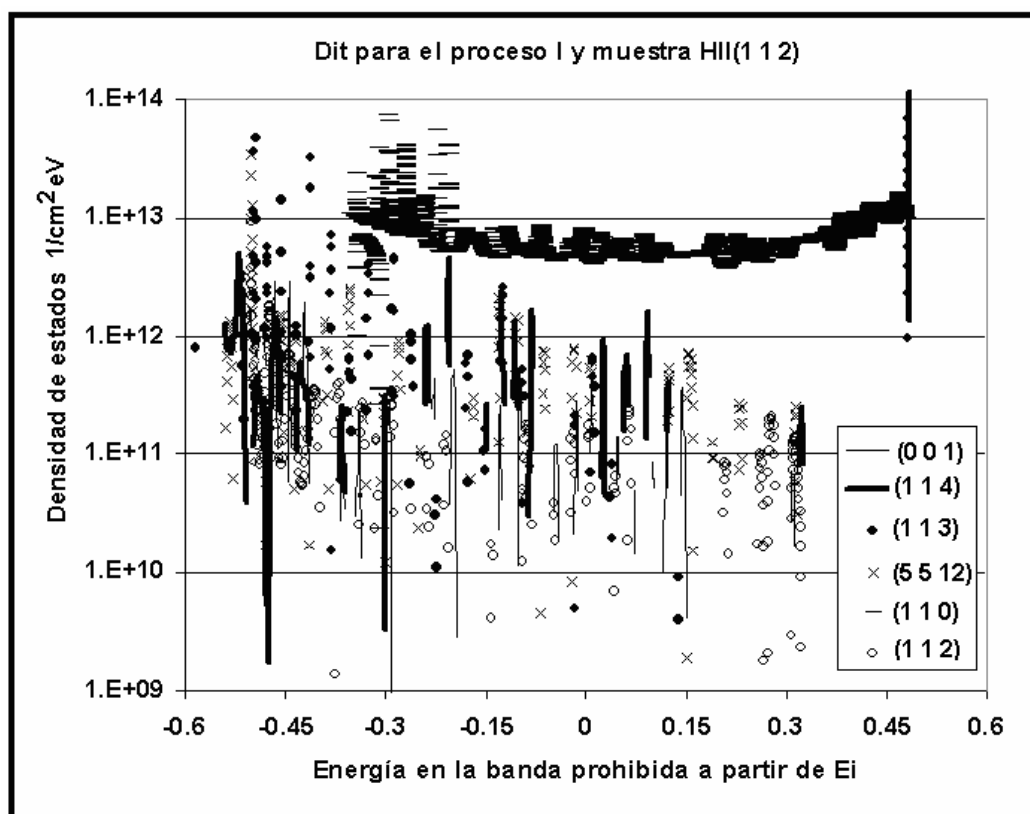


Figura 4.37 Densidad de estados en la interfase D_{it} para el proceso I. Se incluye la muestra HII de orientación (1 1 2). No se incluyó la muestra (1 1 1) dado que presentó una densidad muy baja.

En la Figura 4.38 se puede apreciar que en el proceso de oxidación A las densidades de estados en la interfase son claramente distinguibles, principalmente las más lejanas a (0 0 1). En este caso se tiene un claro orden creciente respecto a la orientación cristalina de la densidad de estados. Otro aspecto importante es que la orientación (1 1 1) no presenta el máximo de la densidad de estados en la interfase, como se esperaba de la literatura, sino que el máximo lo presenta la orientación (1 1 0).

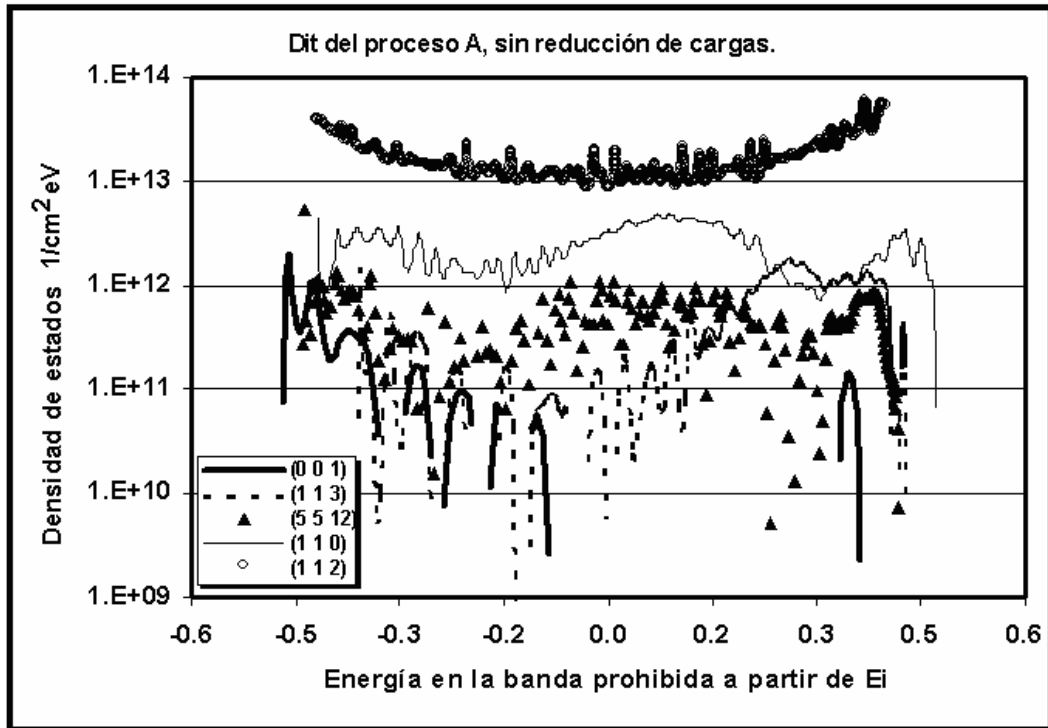


Figura 4.38 Densidad de estados en la interfase para el proceso de oxidación A.

En las Figura 4.39 se grafican las densidades de estados para la orientación (5 5 12) 1000°C-A sin reducción de cargas, 1000°C con reducción de cargas y 850°C con reducción de cargas. En ésta orientación las oxidaciones a 1000°C presentan una D_{it} del mismo orden de magnitud, mientras que la oxidación a 850°C muestra una D_{it} mayor (esto último coincidiendo con otros autores). Sin embargo, para la orientación (1 1 1) (Figura 4.40), las oxidaciones a 1000°C no tienen la misma magnitud, y la oxidación a 850°C, muestra una D_{it} menor. Para la orientación (1 1 0) la mayor densidad se presentó a 1000°C-A sin tratamientos de reducción de carga, mientras que las muestras con reducción de carga a 1000 y 850°C, muestran el mismo orden de magnitud, Figura 4.41. En conclusión: el comportamiento de los estados en la interfase no mostró resultados consistentes en variaciones de la temperatura de oxidación o tratamientos de reducción de carga respecto a la orientación.

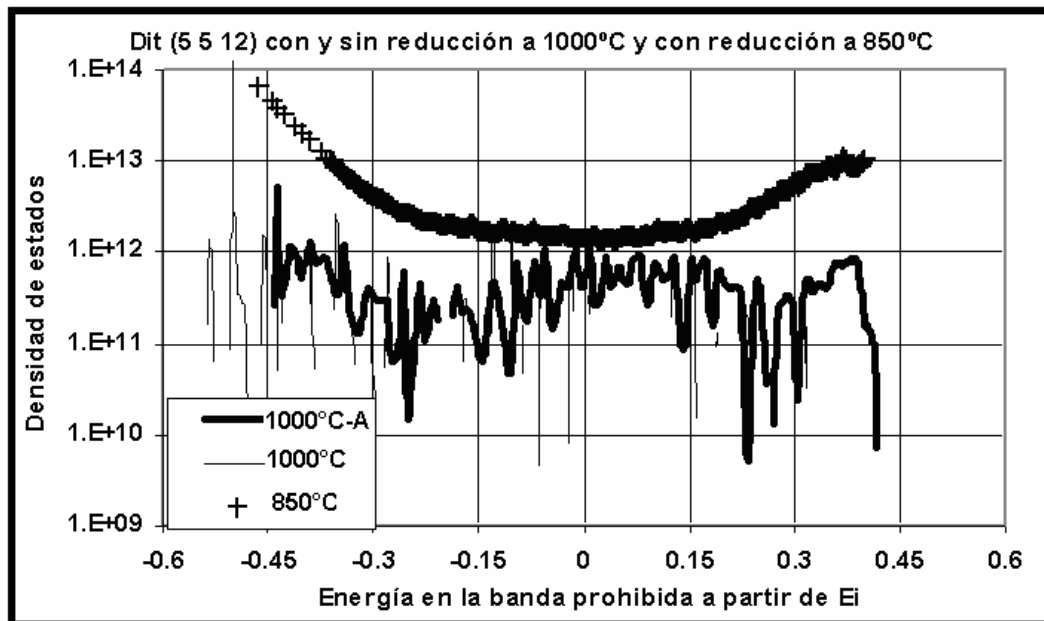


Figura 4.39 Dittention a 1000°C con y sin reducción de cargas y a 850°C con reducción, (5 5 12).

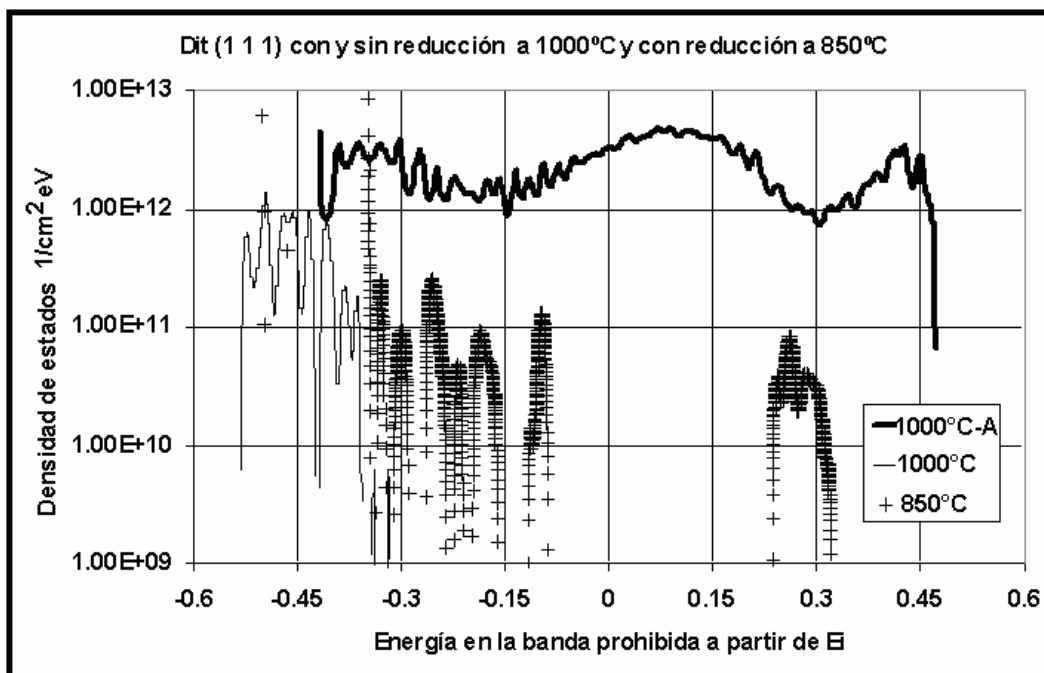


Figura 4.40 Dittention a 1000°C con y sin reducción de cargas y a 850°C con reducción, (1 1 1).

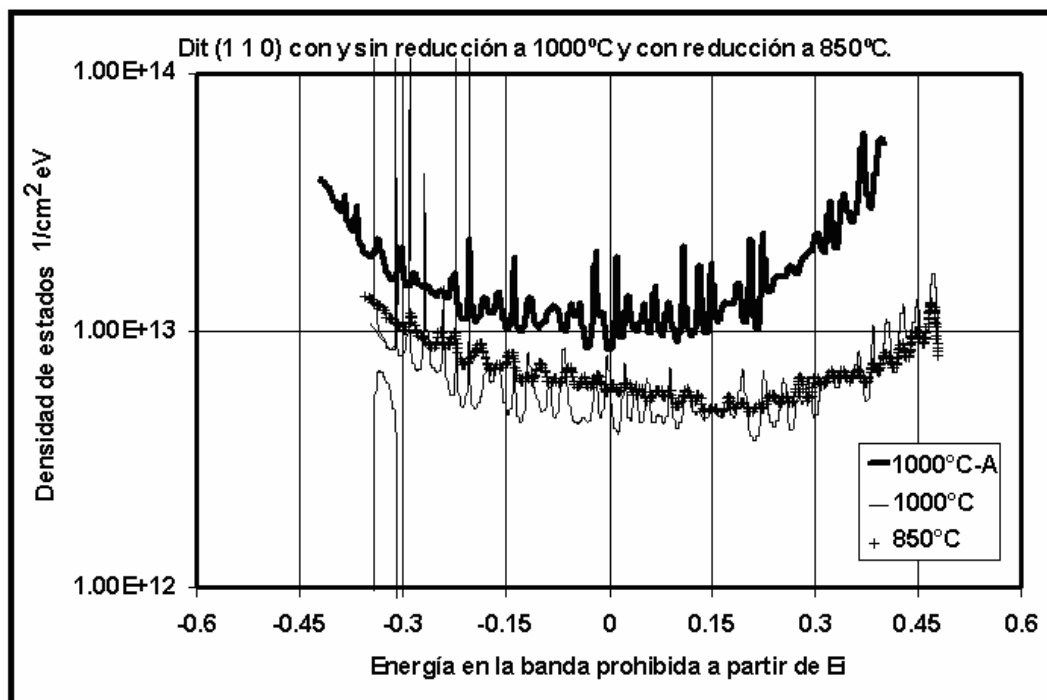


Figura 4.41 DIT a 1000°C con y sin reducción de cargas y a 850°C con reducción, (1 1 0).

El recocido y la aleación, como métodos de reducción de carga, se deben optimizar de acuerdo a la temperatura de oxidación y el grosor de óxido (en el cual influye la orientación). Los procesos de reducción de carga en estos procesos no fueron optimizados, sólo se utilizaron los tiempos típicos del proceso CMOS INAOE. Por lo anterior es probable que el comportamiento de las densidades de estados respecto a la temperatura y tratamientos de reducción de carga o falta de ellos no muestren ninguna tendencia clara por la falta de optimización.

Para el proceso Al se obtuvieron las densidades de estados mediante el método de alta-baja frecuencia. Estas densidades se muestran en la Figura 4.42.

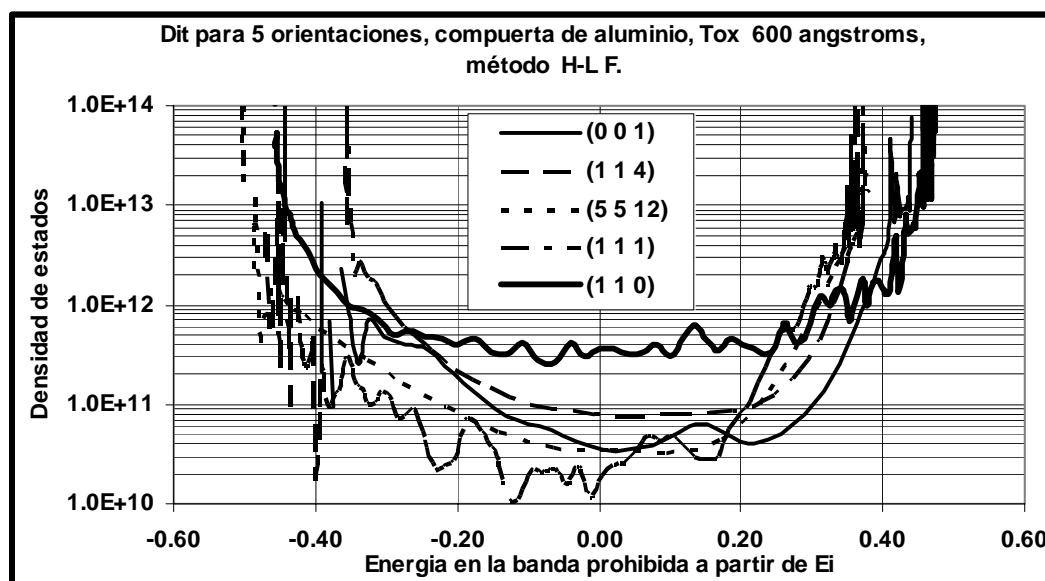


Figura 4.42 Densidad de estados en la interfase en el proceso Al mediante el método de alta-baja frecuencia.

En el caso del proceso Al se nota que la densidad de estados de la orientación (0 0 1) no es la más baja. A pesar de las diferencias con los procesos de oxidación la densidad más alta se obtiene también para la orientación (1 1 0). Esto confirma que no se tiene una medición errónea de las densidades con el método Terman.

Otro punto importante referente a la orientación (1 1 0) es que las densidades de estados son muy elevadas, recordemos que estas densidades afectan el cálculo de la carga efectiva por el método de banda plana sumándose en dispositivos tipo P. Disminuir esta contribución mediante el método de media banda es lo que ocasiona densidades de carga efectiva negativas para esta orientación.

Como resumen: Respecto a las densidades de estados en la interfase se tiene una clara dependencia respecto a la orientación en el proceso que no presenta los procesos de reducción de carga. En los procesos en los que se aplicaron éstos procesos las densidades no guardan una relación consistente entre procesos, excepto por la orientación (1 1 0), que resultó ser la más alta. La falta de relación respecto a

la orientación muy posiblemente se debe a que los procesos térmicos de disminución de carga no actúan de igual manera en todas las orientaciones y grosores de óxido. En el proceso Al con el método de alta-baja frecuencia se confirmó lo obtenido por método Terman en los procesos de oxidación, principalmente el máximo de estados en la orientación (1 1 0). Los resultados en los procesos de oxidación muestran que las densidades no muestran gran cambio respecto a la orientación (excepto (1 1 0)), esto nos demuestra que las orientaciones de alto índice se pueden utilizar en tecnología MOS sin tener problemas referentes a la densidad de estados. Un análisis importante a obtener tanto en estados en la interfase como en densidad de carga efectiva, sería obtener estos parámetros en grosores de óxido iguales para todas las orientaciones y sin aplicar tratamientos térmicos de disminución de carga.

El proceso de oxidación A, sin reducción térmica de cargas, manifestó claramente la tendencia a tener mayores densidades conforme la orientación cristalina se aleja de (0 0 1). Pero el máximo está presente en la orientación (1 1 0) y no la (1 1 1), como han observado otros autores [78], [80 y 81][81]. Los resultados de dichos autores parecen indicar una dependencia de D_{it} inversa a la densidad de enlaces rotos en la superficie, con un mínimo absoluto en (0 0 1), un máximo absoluto en (1 1 1) y un mínimo relativo en (1 1 0), Figura 1.10. Sin embargo, en los resultados obtenidos en este trabajo se tiene una tendencia creciente, con sólo un mínimo absoluto en (0 0 1) y un máximo absoluto en (1 1 0); esta tendencia es directa a la densidad total de enlaces completos en la superficie, Figura 1.10.

4.8 Carga Iónica móvil N_m .

Se caracterizó la carga iónica móvil en capacitores MOS simples con compuerta de aluminio en orientación (0 0 1) para ambos tipos, n y p. Esta carga no tiene dependencia alguna con la orientación cristalina, dado que sólo depende de la limpieza del proceso.

Se muestran las curvas obtenidas para capacitores **n** en la Figura 4.43 y para capacitores **p** en la Figura 4.44

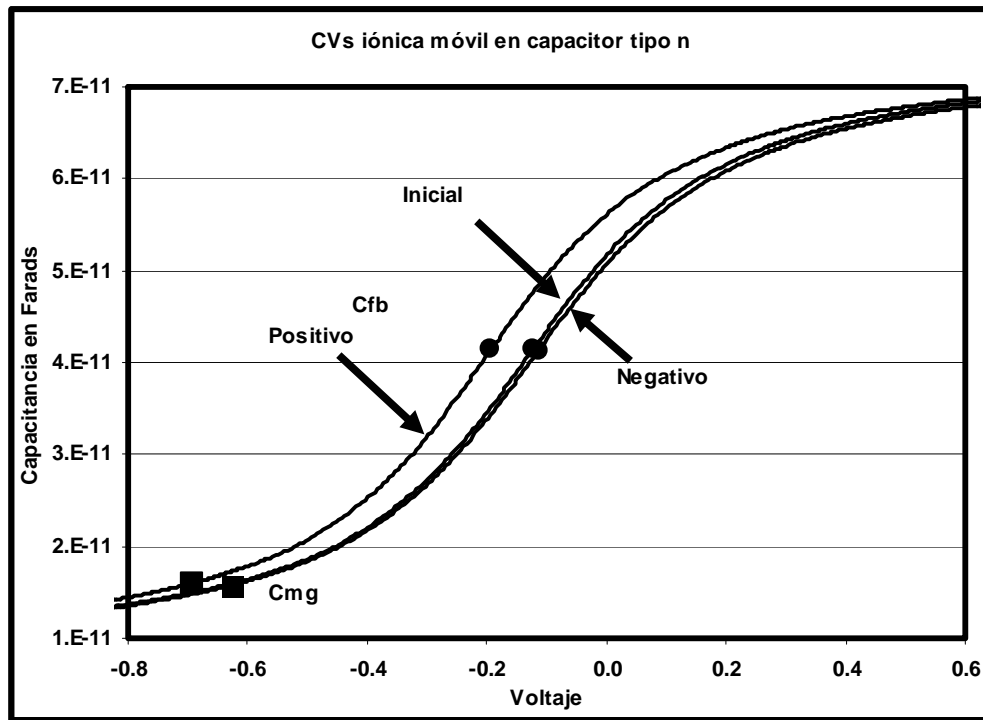


Figura 4.43 C-Vs para determinar la carga iónica móvil en un capacitor MOS tipo n.

La carga total esta determinada por el corrimiento en voltaje de las mediciones en estrés térmico con polarización positiva y negativa. Sin embargo, el efecto real de las cargas es el voltaje que se encuentra entre la medición inicial con una distribución arbitraria de la carga y la medición después de aplicar un voltaje negativo bajo estrés térmico. Esto es, la diferencia entre la distribución arbitraria de la carga y la distribución más lejana a la compuerta (influencia mínima).

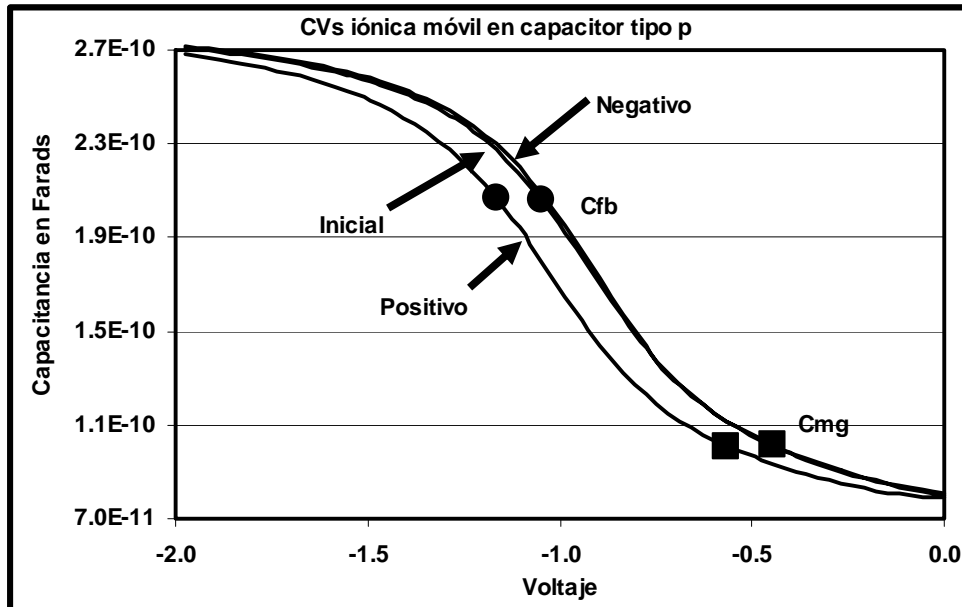


Figura 4.44 C-Vs para determinar la carga iónica móvil en un capacitor MOS tipo p.

Para calcular el corrimiento podemos utilizar tanto el voltaje de banda plana como el voltaje de media banda.

En la Tabla 4.36 se muestran las densidades de carga iónica móvil para capacitor n y p, utilizando voltaje de banda plana (fb) y voltaje de media banda (mg). El corrimiento real es la diferencia de la capacitancia inicial y la capacitancia después de aplicar estrés térmico y voltaje negativo. En negritas se marcan las densidades que se consideran más adecuadas por ser efectivas y usar la capacitancia de media banda.

	p mg	p fb	n mg	n fb
Corrimiento total	0.119	0.120	0.047	0.070
N_m total	1.620E+10	1.634E+10	1.691E+10	2.551E+10
Corrimiento real (negativo)	0.001	0.031	0.009	0.009
N_m efectiva	1.362E+08	4.221E+09	3.407E+09	3.294E+09

Tabla 4.36 Densidades de carga iónica móvil para capacitores n y p por corrimiento de voltaje de banda plana y voltaje de media banda.

Como se puede notar, las cargas obtenidas son bastante bajas y dentro del rango de $5E9$ a $5E10$ cm^{-2} requeridos en la tecnología CMOS.

La determinación de esta carga se realizó sólo para completar el conjunto de cargas que pueden ser determinadas directamente y para tratar de discriminar unas cargas de otras cargas, como se verá en la siguiente sección.

4.9 Discriminación de densidades de cargas.

Como ya se ha mencionado la densidad de carga fija N_f no puede ser extraída directamente dada su cercanía a la interfase. Sin embargo podríamos aproximarnos a su valor al manipular los datos obtenidos por otros métodos.

Primero es importante el utilizar la capacitancia de media banda y su voltaje asociado para reducir la influencia de los estados en la interfase en los cálculos del voltaje V_{dip} y la densidad de carga efectiva N_{eff} . Después es necesario obtener la densidad de estados en la interfase. Idealmente la diferencia entre la densidad de estados en la interfase y la densidad de carga efectiva nos daría sólo la combinación de la carga fija y la iónica móvil, que ya fue extraída, por lo que fácilmente se puede obtener una estimación de la carga fija.

Desde otro punto de vista podríamos clasificar las cargas por su comportamiento eléctrico en los siguientes tipos generales

1. Cargas independientes del grosor de óxido. Principalmente dipolos en cualquier parte del óxido. Se caracteriza mediante mediciones C-V para distintos grosores de óxido.

2. Cargas dependientes del grosor de óxido. A estas pertenecen la carga fija, carga atrapada en el óxido y la iónica móvil.
3. Cargas dependientes del nivel de energía. A estas cargas pertenecen los estados permitidos en la interfase.

De tal manera que podemos extraer una aproximación a la carga fija. Primero obtenemos la función trabajo efectiva, que incluye toda la carga independiente del grosor de óxido. En Segundo, obtenemos la carga efectiva por el método de media banda a partir de la función trabajo efectiva. Tercero, obtenemos la densidad de estados en la interfase. Cuarto, obtenemos la densidad de carga iónica móvil efectiva. De la carga efectiva podemos restar los estados en media banda y la iónica efectiva para obtener una aproximación a la carga fija (incluiría todavía el efecto de la carga atrapada en el óxido).

Para obtener esta aproximación es necesario tener bien determinada la densidad de estados en la interfase en la media banda. En los procedimientos de oxidación realizados en este trabajo de tesis las D_{it} más definidas se obtuvieron para el proceso de oxidación A, mientras que para los demás procesos se obtuvo una densidad de estados muy baja o dispersa en la media banda. En la Tabla 4.37 se encuentran las densidades de carga fija obtenidas para el proceso de oxidación A; en la Figura 4.45 se grafican estos resultados.

Orientación	N_f
(0 0 1)	7.87E+11
(1 1 3)	1.30E+12
(5 5 12)	9.38E+11
(1 1 1)	7.38E+11
(1 1 0)	-8.44E+12

Tabla 4.37 Densidad de carga fija N_f aproximada para el proceso de oxidación A.

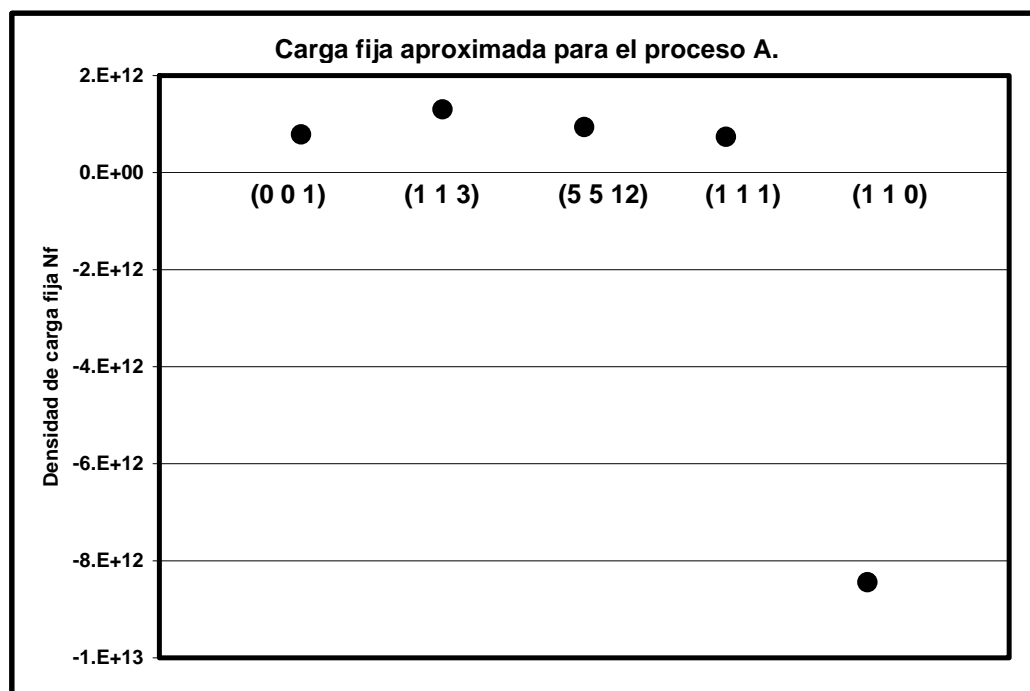


Figura 4.45 Densidad de carga fija N_f aproximada para el proceso de oxidación A.

La densidad de carga fija aproximada no presenta dependencia de la orientación cristalina.

4.10 Conclusiones.

Se obtuvieron las constantes de crecimiento parabólico B y lineal B/A para oxidación térmica seca en orientaciones de alto y bajo índice para 3 temperaturas, estas constantes se encuentran cercanas a las obtenidas en otros trabajos.

El índice de refracción, y por lo tanto la tensión en el óxido, mostró tener independencia de la orientación cristalina, pero una marcada dependencia con el grosor de óxido, además de variación respecto a la temperatura. Sin embargo, contrario a lo esperado se obtuvieron índices mayores al estimado comúnmente de 1.642.

La función trabajo efectiva, que incluye el efecto de los dipolos, no presentó dependencia alguna con la orientación cristalina. En la mayoría de los casos el incremento en la función trabajo ideal debido a los dipolos fue positivo, como lo describe la teoría.

La densidad de carga efectiva se obtuvo mediante varios métodos, la comparación demostró que no existe una dependencia creciente de esta carga con la orientación cristalina en la mayoría de los casos. Sólo la determinación clásica de corrimiento de voltaje de banda plana ideal parece guardar relación creciente en todos los casos con la orientación cristalina.

En densidad de estados en la interfase los resultados consistentes son los obtenidos en el proceso sin disminución de cargas por procesos térmicos. Esta carga sigue la tendencia de crecer con la lejanía de la orientación cristalina de (0 0 1).

La densidad de la carga iónica móvil sólo se encontró para comparar su magnitud con las otras cargas y poder eliminarla como fuente significativa de error. Su baja densidad demuestra que no es un factor determinante.

Capítulo 5

Conclusiones

Se obtuvieron las constantes de crecimiento parabólico B y lineal B/A para oxidación térmica seca en orientaciones de alto y bajo índice para 3 temperaturas, estas constantes se encuentran cercanas a las obtenidas en otros trabajos. La constante de crecimiento lineal B/A mostró dependencia de la orientación, sin embargo las orientaciones (1 1 3) y (1 1 4) no cumplieron con el orden esperado, dando velocidades de crecimiento mayores a (7 7 17) y (5 5 12), el orden final es

1000°C (0 0 1) < (7 7 17) \approx (5 5 12) < (1 1 3) < (1 1 4) < (1 1 0) < (1 1 1)

925°C (0 0 1) < (5 5 12) < (1 1 0) < (1 1 1)

850°C (0 0 1) < (7 7 17) \approx (5 5 12) < (1 1 4) < (1 1 3) < (1 1 0) < (1 1 1)

Las orientaciones (5 5 12) y (7 7 17) son muy próximas tanto en la constante de crecimiento como en ángulo a partir de (0 0 1), por lo que las variaciones se consideran despreciables.

El índice de refracción, y por lo tanto la tensión en el óxido, mostró tener independencia de la orientación cristalina, pero una marcada dependencia del grosor de óxido y también variación respecto a la temperatura. Mostró también un comportamiento en 1000°C con un máximo respecto al grosor de óxido. Dado que

sólo se trató la tensión en el óxido de manera cualitativa no es posible decir si este máximo pudiera corresponder a grosores de óxidos libres de tensión entre 2 regiones que pudiera pasar de compresiva a expansiva.

En cuanto a la variación con temperatura, a más alta temperatura, menor índice de refracción para grosores de óxido iguales.

$$N_{1000^{\circ}\text{C}} < N_{925^{\circ}\text{C}} < N_{850^{\circ}\text{C}}$$

Sin embargo, contrario a lo esperado se obtuvieron índices mayores al usado comúnmente de 1.642

La función trabajo efectiva, que incluye el efecto de los dipolos, no mostró dependencia alguna con la orientación cristalina, en su mayoría el incremento debido a los dipolos a la función trabajo ideal fue positivo, como lo describe la teoría de eualización de electronegatividad.

La densidad de carga efectiva se obtuvo mediante varios métodos, la comparación demostró que existe dependencia creciente de esta carga con la orientación cristalina al utilizar el típico método de corrimiento de voltaje de banda plana. Sin embargo, al utilizar el método de pendiente del voltaje de banda plana o pendiente del voltaje de media banda a varios grosores, no se encontró dependencia clara con la orientación cristalina.

Para densidades de estados en la interfase se encontró que el proceso térmico de reducción o anealing resulta en densidades suficientemente bajas en todas las orientaciones eliminando prácticamente la dependencia con la orientación. Sin embargo en el proceso en el que no se aplicó reducción de cargas existe una clara dependencia con la orientación cristalina, como lo han reportado otros autores. Estos

resultados indican que se pueden utilizar orientaciones de alto índice en dispositivos MOS sin tener efectos marcados por estados en la interfase.

La carga iónica móvil no mostró diferencia significativa para dispositivos n o p. se obtuvo por corrimiento de banda plana y corrimiento de media banda. Se calculó también la densidad de carga que afecta directamente al capacitor MOS usando sólo el corrimiento en voltaje negativo respecto al inicial. Esta carga no tiene dependencia con la orientación, sólo se obtuvo para determinar su magnitud respecto a los estándares MOS (los cuales cumple) y para asegurar que su magnitud no afecte las demás densidades de carga obtenidas.

Finalmente se describió un método de discriminación de cargas para obtener una aproximación a la densidad de carga fija. Al aplicarse al proceso más adecuado para calcular la N_f no se encontró dependencia de la orientación cristalina.

Apéndice.

A continuación se presenta un artículo de gran importancia para apreciar la importancia del estudio de la orientación de alto índice de silicio (5 5 12).

"Quantum (5 5 12)Si Nanowire 300K MOSFET"

D.L. Kendall, F.J. De La Hidalga, R. Rodriguez-M, M. Castro-L, A. Torres-J, W. Calleja-A, E. Meza Prieto, M. Landa-V, C. Zuñiga-I, R Murphy-A, N. Carlos-R, I, Juarez-R and M. Kendall

VOL. 13 no. 1 capítulo 4 CMOS Chanel Engineering and Novel Device Structures pp 337-344

ADVANCED GATE STACK, SOURCE/DRAIN, AND CHANNEL
ENGINEERING FOR Si-BASED CMOS 4. NEW MATERIALS, PROCESSES,
AND EQUIPMENT

Editores P.J. Timans, E.P. Gusev, H. Iwai, D. -L- Kwong, M. C. Öztürk, F. Roozeboom

ISSN 1938-6737 (online)

ISSN 1938-5862

ISBN 978-1-56677-626-4

ECS Transactions, 13 (1) 337-344 (2008)
 10.1149/1.2911515 ©The Electrochemical Society

Quantum (5 5 12) Silicon Nanowire 300K MOSFET

D. L. Kendall^{a,b,*}, F. J. De la Hidalga-W^a, R. R. Rodríguez-M^a, M. Castro-L^a
 A. Torres-J^a, W. Calleja-A^a, E. Meza Prieto^{a,c}, M. Landa-V^a, C. Zúñiga-I^a
 R. Murphy-A^a, N. Carlos-R^a, I. Juárez-R^a, M. Kendall^a

^a Instituto Nacional de Astrofísica, Óptica, y Electrónica (INAOE), Puebla, Mexico

^b Center for High Technology Materials (CHTM)

University of New Mexico, Albuquerque, NM 87106, USA

^c Present address: Universidad Autónoma de Ciudad Juárez, Chihuahua, Mexico

*Contact Author: e-mail: donk@chtm.unm.edu; phone: 505-299-5903

A nanowire (NW) device in parallel with a normal nMOSFET is fabricated with a poly-Si planar CMOS process on (5 5 12)Si. With a unit cell of 5.35 nm, this plane has the largest stable atomically flat Si surface. When output current I_{sd} flows from source S to drain D along $\langle 110 \rangle$, the device has 15 positive spikes at integer multiples of 154 mV, all at 300K and zero magnetic field. I_{ds} has only 9 positive and 2 negative spikes. The positive spikes in I_{sd} and I_{ds} are due to parabolic confinement of elongated q-dots in the NWs near D. Both I_{sd} and I_{ds} show missing spikes and one-dimensional artificial atom behavior. The negative spikes appear to be Kronig-Penney effects on the NWs. The NWs and q-dots have estimated widths near 2 nm and Line Edge Roughness (LER) less than 0.1 nm due to the crystal-lattice precision of the surface.

Perspective and Introduction

There have recently been a number of discussions of the future of CMOS and other modern nanoelectronic devices when the smallest meaningful dimensions (SMDs) are reduced to the “single-digit” *true nanometer scale* below 10 nm. For example, significant attention has been paid to spin-based logic which predicts that up and down spins can move in an electric field in opposite directions along opposite edges of a nanowire, *sometimes even in a zero magnetic field* (1). A related example involves the storage and dissociation of excitons in parallel chains of semiconducting polymers (2). Quantum dots (q-dots) also have a wide range of highly unusual properties (3). Another surprising effect involves a circuit that results in the violation of Kirchoff’s laws where series resistors no longer add to each other (4). All of the above are generally only observed within a few degrees of absolute zero, and they typically occur only when one or more of the device dimensions are of the same magnitude as interatomic distances or the electron wavelength (5). We discuss here a *room temperature* nanowire device made with standard CMOS technology that has several perplexing anomalies that appear to fall into one or more of the above categories. *However, in this work we limit our working model to well known quantum effects involving parabolic confinement of elongated Si q-dots* (6), *the electron reflected branch of the Kronig-Penney model* (6), *and evidence for the existence of one dimensional (1D) or two dimensional (2D) artificial atoms* (7).

High Index Silicon Structure and Previous Nanometer Scale MOSFET Efforts

Scanning Tunneling Microscope (STM) images of several (hkk), or “(11X)”, high index Si surfaces can be seen in (8,9). The relevant images for this work of well aligned and slightly misaligned (5 5 12)Si are shown in Fig. 1 from (8) and Fig. 2 from (10), respectively. The (5 5 12) and (114) surfaces are the *only* well ordered and atomically flat high index crystal planes of Si that have a *well defined linear texture* similar to that shown in Fig. 1. We often informally call the (5 5 12) the (1 1 2.4) plane, which shows that it resides about halfway between the (112) and the (113) planes. Electron mobilities in 8 different surface directions and implant profiles on (5 5 12), (114), and (100) are reported by Castro, et al. in (11), and surface state densities and oxidation data on these planes are reported by Rodriguez, et al. in (12). Seminal work that was similar to ours was done in 1977 using the natural surface texture of the high index (118) to fabricate Si nMOSFETs (13). This showed extremely small conductance perturbations in the transfer curves at 1.5K. For a detailed review of this device, see (14). It is now known that the (118) is not a very well ordered surface of Si (8). Over a decade later, somewhat unstable but quite regular periodic conductance oscillations on (100) Si near 0.1K were observed in nMOSFETs made with 70 nm lithography (15). The above lithography-based approaches (13,15) appear to have been adversely affected by surface roughness and excessive Line Edge Roughness (LER). Finally, small irregular conductance variations were recently reported at 300K at very low drain voltages of 100 μ V at $V_g < 1V$ on a trigate SOI nMOSFET (16).

(5 5 12) MOSFETs from 300K Down to 77K and Critical Experimental Observations. Our devices on (001), (114), and the ones reported here on the (5 5 12), were fabricated at INAOE with a complete hydrogen-passivated CMOS process using standard poly-Si gate technology. The nMOSFETs had a Length to Width ratio L/W of 10 μ m/10 μ m and a gate oxide thickness of 70 nm. We measured the device properties of a total of 12 packaged chips from 2 different (5 5 12) wafers in a cryostat from 300K down to 77K (17) with the HP 4156 Parameter Analyzer with Vd-increments of 0.02V. This increment of $\pm 0.02V$ is also the uncertainty of the positions of the spike voltage maxima. The actual spike half-widths are probably much narrower than shown in Fig. 3. They may be even narrower than 0.01V, especially at Vsd values less than 3.7V and Vds less than 4.1V. Above a Vsd of 3.7V, we detect both double and triple-wide spikes (17). The *negative* spikes may be still narrower because we expected a third Kronig-Penney spike at Vds of 4.23V, which the measurement program may have missed completely. We damaged both the positive and negative spikes with the 15V measurements mentioned below before we could measure their widths (17). The measurement program for the packaged chips was initiated by the output measurements at Ids:Vds at Vg of 2 to 5V with Vds up to 5V (Fig. 3); followed by transfer curves Ids:Vg (Figs. 4 and 5); then Isd:Vsd outputs (current reversed) also shown in Fig. 3; then repeated Ids:Vg transfer curves; then outputs of Ids:Vds were obtained with Vds up to 15V. The latter caused hot-electron damage and lateral shifts of several spikes, as well as removal of all but 4 of the spikes, but little damage to the normal nMOS segment (17). Ids or Isd always flowed in the <110> surface direction between S and D. The bottom scale of Fig. 3 is force-fit to Vsd separations of 154 mV, which fits the spikes very well. We should also note that all the pMOSFETs behaved normally and did not show any spikes in these experiments.

We modified the above process after the first CMOS fabrication sequence to a simpler nMOS process and a much larger Length to Width ratio (L/W) of 45 $\mu\text{m}/45 \mu\text{m}$ to make the mobility, implantation, surface state, and the oxide growth studies of (11) and (12). The latter devices were designed for 8 current directions from parallel to perpendicular to the $\langle 110 \rangle$ direction (11). The larger structures were easier to fabricate and to analyze for the directional mobility, but we did not see current spikes in any of the larger nMOSFETs. This may have been the result of the larger 45 μm length, L, becoming greater than the electron mean free path (the ballistic range). A similar effect was reviewed in long HgTe quantum well devices in 2008 (1). Based on this, we predict that the spike effect should scale from at least 10 μm down to the maximum length of the elongated q-dots that touch D, which our working model suggests is probably less than 8 nm (17). If the gate-length, L, becomes shorter than the electron mean free path, the q-dot cavity resonance will be disrupted. One of the major observations from the data of Fig. 3 is that the Vsd spikes are separated by integer multiples of 0.154 V (or 0.152 V for Vds) where the zero for both Vds and Vsd is chosen as the “zero-point energy” of parabolic well confinement (6). The allowed energies of an *infinite square well* potential are:

$$E_n = \mathbf{Kn}^2/m_r^* w^2 \quad , \quad [1]$$

where K is 0.376 eV nm², namely $h^2/8m_0e$, where h is Planck’s constant, e the electronic charge, and m_0 the rest mass of the electron. In Equation [1], E_n is the nth allowed energy in eV, m_r^* is the relative effective mass, and w is the width of the wire in nm. We assume that E_1 provides a first order estimate of the allowed energy level separations of a wire (or elongated q-dot) with a parabolic confinement. To calculate the width for a confinement energy of 0.154 V, we use the longitudinal mass of 0.89 m_0 (18) in Equation [1] which leads to a width (or effective diameter) of 1.656 nm. For the smaller energy of 0.152V for Vds, we calculate a slightly larger width of 1.667 nm. The small differences in the average spike separations for Vds and Vsd appear to be robust enough for useful future studies (17). The transverse relative mass for *isolated* Si NWs of 0.20 (18) predicts a larger width of 3.49 nm. However, the *actual* effective masses in our oxide-confined q-dots attached to bulk Si along their length are not known. There is also no particular direction of electron travel in the active q-dots as there is in the isolated NWs of (18). For these reasons, we choose the larger longitudinal mass since it is more consistent with the estimated width near 2 nm of the conducting region of the (5 5 12) discussed below.

The missing spikes and the precise linear dependence of the spike positions on Vds or Vsd (rather than on the non-linear E-field of the inversion layer) suggest that many of the NW resistors are in series with the elongated q-dots juxtaposed to the edge of the D. The first spike occurs shortly *after* the drain saturation current I_{dsat} is reached at about 0.4 V. This is the voltage where the pinch off region POR begins to form in the inversion layer. The length of the POR can be estimated from simple p-n junction theory to vary from 0.07 μm at the first spike to 0.38 μm at the last Vds spike of 4.3V. So the POR is *much* larger than the 8 nm length expected for even the longest of the active spike-producing q-dots at the edge of D (17). The 1st four spike energies in our *output* curves in *both* Vds and Vsd are at the allowed integers of 3,7,9,12, but we choose to call them 2,6,8,11 to force a match with the first two *magic numbers of electrons in the vertical q-dots* of 2,6,12,20 of the *transfer* curves of Tarucha’s cylindrical FET (7). The difference

between our output curves and their transfer curves is likely due to our D acting as a second gate to add electrons to the inversion layer as V_{ds} increases (19), whereas the circular gate of Tarucha's device controls the number of electrons in their vertical q-dot. Our first 2 magic numbers are identical to theirs when the length of our q-dots is similar to our widths of about 2 nm. This gives these two active dots a strong 2D character. At higher V_{ds} , our q-dots become longer (while the width stays the same) as electrons are added and they show more and more 1D character. I_{ds} , but not I_{sd} , has a very large set of *nine* 1D "quasi-inert" artificial atoms at 2,6,8,11,15,18,21,24,26 (17). Tarucha's 500 nm device operates below 1.5K, but our 2 nm device operates at 300K because of the w^2 term in Equation [1]. Our smaller w greatly increases the confinement energy and operating temperature. Finally, we note that the first 4 magic numbers for the real inert 3D atoms (He, Ne, Ar, Kr) of the traditional periodic table are 2, 10, 18, and 36.

The 2 negative spikes in I_{ds} differ in V_{ds} by a factor 4.0, which is the signature for *reflected* electrons (or alternatively the "forward" *transmittance* of ejected holes from stored excitons) for the first 2 levels of the Kronig-Penney model (6) which appear to coexist with the transmitted positive spikes of parabolically confined electrons.

The *simulated* quantized fourth bumps of the transfer curves in Fig. 4 are shown in Fig. 5 at higher V_{ds} values taken from the envelope of the output spikes of Fig. 3, all at a V_g of 2V. The extraction of the spike positions of Figs. 3 from the transfer curves of Figs. 4 and 5, and vice versa, shows the internal consistency of two independent measurements.

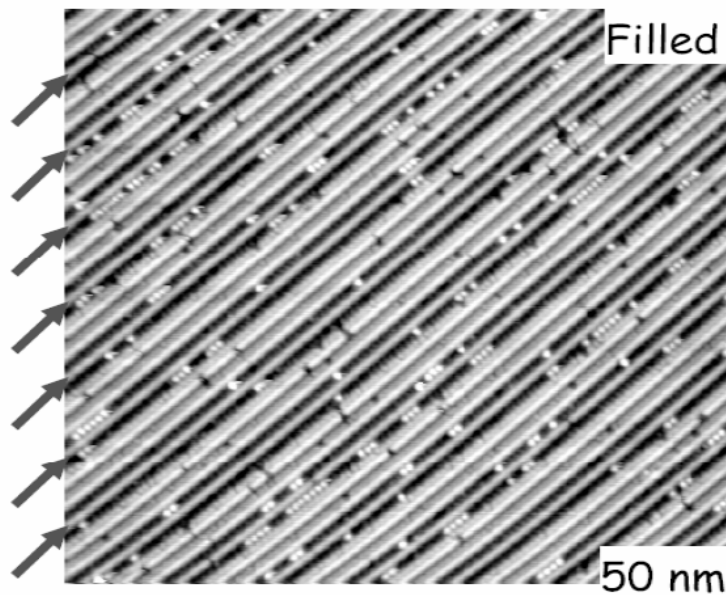


Fig. 1. Filled-state 50 nm X 50 nm STM image of the (5 5 12) surface at Ultra High Vacuum (UHV) of a flat surface region of Fig. 2 adapted from references (8) and (10). The perpendicular distance between the arrows is the (5 5 12) unit cell of 5.35 nm. See text for additional details on the proposed nanowire and q-dot regions of this surface.

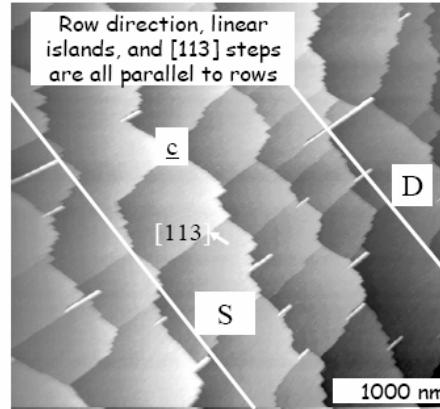


Figure 2. Misoriented (5 5 12) 1000 nm X 1000 nm image of the misalignment steps after etching with 10 monolayers of O₂ in UHV at 780°C (10). The white linear islands are slightly elevated etching features (10). See text for meanings of symbols.

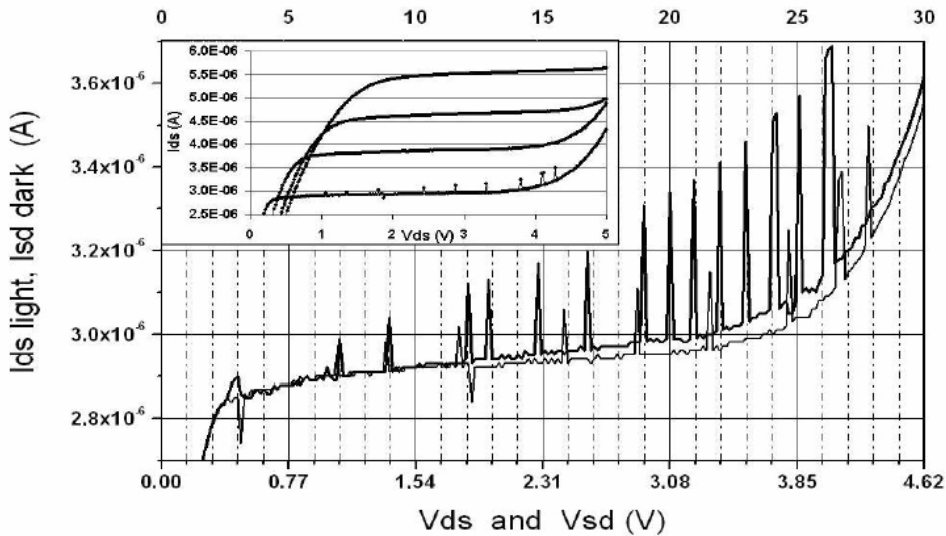


Figure 3. **Top insert:** Ids output curves at Vg of 2, 3, 4, and 5V after dividing Ids by 1, 7, 16.5, and 27, respectively. **Main figure:** Expanded output of Ids in insert at a Vg of 2V on device #8 on wafer 74 at 300K showing Ids flowing along <110> direction from drain D to source S with grounded S, along with Isd flowing from S to D. The integers at the top are the allowed energy positions of a parabolically confined nanowire (6). See text to explain the 0.154V scale across the bottom.

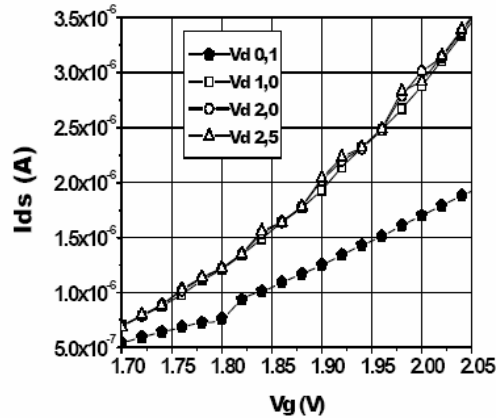


Figure 4. Transfer curves of device #8 at several values of V_d s with 4 small bumps between 1.72 to 2.02V, but only very small bumps outside of this range. Also note the dip at V_g of 1.8V in V_d s of 0.1V, as well as the multi-valued quantized values of V_d s at V_g of 2V, and also in Fig. 5 at the same V_g of 2V.

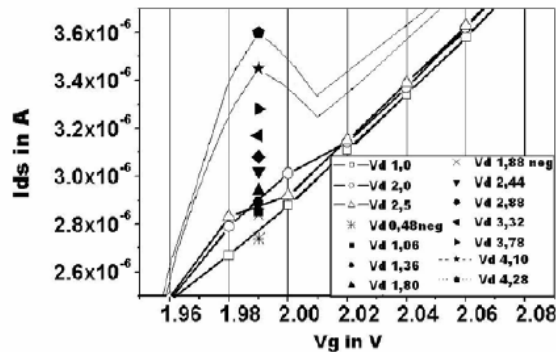


Figure 5. Expanded fourth bump of transfer curves from Fig. 4 and simulated maxima of the envelope of current spikes in I_{ds} from Fig. 3 at V_g of 2V. These simulated data points are shifted to 1.99V to avoid overlap with open symbols at a V_g of 2V. See text. Also note that all of the V_d values in the tables in both Figs. 4 and 5 are actually V_d s.

The images in Fig. 1 and 2 (8,10) from Baski's group contain important structural clues regarding the origin of the spikes in Fig. 3. We have added two straight lines perpendicular to the atomic row $\langle 110 \rangle$ surface direction to schematically represent the edges of S and D of our large nMOSFET. These two lines are not absolutely straight due to our optical lithographic line edge roughness of several tens of nm, but this is not critical since it is the *local* distance between the edge of D and the *nearest segments* of the misalignment steps that must have specific resonant separations. These two figures also contain important information from Seo's group. For example, the symbol \underline{c} in Fig. 2 shows one of several unusual curved step segments that have been identified as (6 9 17)

orientations (20). The [113] and/or the local step face of the curved (6 9 17) steps, along with the possible Schottky rectifying barriers at the Al metal overlay on the n+ poly-Si contact edge of D, are proposed to be responsible for the electron reflections at opposite ends of the active q-dot resonant cavities (17). The important aspect of Fig. 1 for our purposes is thought to be the first narrow white ridge below each arrow. This pi-bonded chain is bordered by two rows of gray T atoms that have tetramer-bonding (21). The pi-chain is of particular interest because localized Scanning Tunneling Spectroscopy (STS) measurements have very recently shown that the empty-state onset of the pi-chain is 0.5 eV smaller than that of the other white ridges (honeycomb-bonded chains) on each side of the pi-chains (22). Seo suggested that the pi-chain and perhaps one or both of the T-rows, which have a total width near 2 nm, are the likely atomic ridges to explain how electrons enter and traverse the Si NWs (23). We note that this argument is based on STM/STS data taken on pristine Si in UHV and the actual surface is covered by thermally grown SiO₂ which should cause some repositioning of the interface atoms.

Summary of Our Working Model and an Applications Note.

Our spikes are thought to be caused by many parallel NWs between S and D, some fraction of which are terminated at special electron-reflecting portions of misalignment steps of Fig. 2 by q-dots in contact with the edge of D. Electrons flow ballistically across many steps of Fig. 2, feed and charge up the q-dots nearest D, thereby causing coulomb blockade for the NW/q-dot combination. The stored electrons block the spike current until specific resonant V_{ds} or V_{sd} voltages are applied, at which time the excited electrons are ejected into D to cause a spike. The NWs and q-dots are parabolically confined in oxide on the top sides and the bottom sides are in intimate contact with the underlying bulk Si. The NWs and q-dots appear to be partially isolated from the underlying inversion layer by the 1 to 2 nm wide interface-depleted zone (14). The negative spikes are thought to be due to Kronig-Penney *electron reflections or perhaps to hole transmittances* (6). Some potential applications for SPIKEMOS are listed in (24).

Acknowledgements

We are heavily indebted to the research groups of Alison A. Baski of Virginia Commonwealth University in Richmond, VA and Jae M. Seo of Chonbuk University in Korea for sharing their extensive STM and STS high-index silicon data. We also had fruitful interactions with L. Lester, P. Eliseev, K. Malloy, R. Devine, and ex-students S. R. Sheu, C. Matzke, and Q. Wang of CHTM/UNM, Thomas Digges Jr. at VSI in Fredericksburg, VA, and Jamal Deen at McMasters University of Hamilton, Ont. Canada. The work was partially supported by CONACyT-Mexico under grants 39886 and 47141.

References

1. C. Day, *Physics Today*, p. 19 for zero-magnetic-field spin effects, January (2008), and see important cited references. For high-magnetic-field spin effects up to 7 Tesla, see: O. M. Auslaender, H. Steinberg, A. Yacoby, Y. Tserkovnyak, B. I. Halperin, K. W. Baldwin, L. N. Pfeiffer, K. W. West, *Science*, **308**, 88 (2005).
2. E. R. Bittner, J. G. S. Ramon, S. Karabunarliev, *J. Chem. Phys.* **122**, 214719 (2005).
3. S. Hoogland, *Photonics Spectra*, pp.80-86, January (2008).

4. J. Gabelli, G. Feve, J.-M. Berroir, B. Placais, A. Cavanna, B. Etienne, Y. Jin, D. C. Glatli, *Science*, **313**, 499 (2006).
5. M. C. Tringides, M. Jatochowski, E. Bauer, *Physics Today*, p. 50. April (2007).
6. J. P. McKelvey, *Solid State and Semiconductor Physics*, p. 99 parabolic potential well, p. 216 Kronig-Penney model, Harper and Row, New York (1966).
7. S. Tarucha, D. G. Austing, T. Honda, R. J. van der Hage, L. P. Kouwenhoven, *Phys. Rev. Lett.*, **77**, 3613 (1996). For parabolic confinement effects: P. Matagne, J. P. Leburton, D. G. Austing, S. Tarucha, *Phys. Rev. B*, **65**, 085325 (2002).
8. A. A. Baski, S. C. Erwin, L. J. Whitman, *Surface Sci.*, **392**, 69 (1997). Also A. A. Baski, S. C. Erwin, L. J. Whitman, *Science*, **269**, 1556 (1995).
9. D. L. Kendall, M. Kendall *NSTI-Nanotech*, Boston, **3**, 510 (2004); Also all authors of present paper, Mex. Congress AVS, Zacatecas, MX, (2004), Abstracts PLE-0-4 and MIC-6-12. Access at <http://www.starmega.com/publications.htm>.
10. A. A. Baski, Mex. Congress AVS, Vera Cruz, MX (2002). Power Point foil published with the permission of A. A. Baski. We have added labels and white lines to help explain our working device model, as discussed in the text.
11. M. Castro, F. J. De la Hidalga, P. Rosales, A. Torres, W. Calleja, E. A. Gutierrez, D. L. Kendall, *ECS Transactions*, **6(13)**, 21 (2007) Mobilities; also *ECS Transactions*, **6(13)**, 29 (2007) Implantations. Access at website in (9).
12. R. R. Rodriguez, W. Calleja, F. J. De la Hidalga, P. Rosales, A. Torres, D. L. Kendall, *ECS Transactions*, **3(33)**, 9 (2007) Oxide growth; Abstract 0986 *ECS Cancun*, Charge state densities, *ECS Mtg. Cancun* (2006). Access website in (9).
13. T. Cole, A. A. Lakhani, P. J. Stiles, *Phys. Rev. Lett.*, **38**, 722 (1977).
14. T. Ando, A. B. Fowler, F. Stern, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 437-672 (1982), p. 575 for a critical device discussion of (13); p. 475 for electron depleted interface diagram.
15. S. B. Field, M. A. Kastner, I. U. Meirav, J. H. V. Scott-Thomas, D. A. Antoniadis, H. I. Smith, S. J. Wind, *Phys. Rev. B* **42**, 3523 (1990).
16. J. P. Colinge, W. Xiong, C. R. Cleavelin, T. Schulz, K. Schrufer, K. Matthews, P. Patruno, *Elect. Dev. Lett.*, **27**, 775 (2006).
17. We are still studying hot electron damage effects, deep subthreshold transfer curves at 300K on wafer 73 and a different type of output spikes, anomalous subthreshold transfer curves from 77 to 300K, a proposed linear energy band diagram for the spike part of the output characteristics at 300K, and the effect of parabolic confinement on the magic number sequences in both Ids and Isd.
18. J. Wang, A. Rahman, A. Ghosh, G. Klimeck, M. Lundstrom, *IEEE Trans. ED-52*, 1589 (2005). Also, Y. Zheng, C. Rivas, R. Lake, K. Alam, T. B. Boykin, G. Klimeck, *IEEE Trans. ED-52*, 1097 (2005).
19. P. Richman, *MOS Field-Effect Transistors and ICs*, p. 90, J. Wiley, New York, (1973).
20. Y. Z. Zhu, H. Kim, J. M. Seo, *Phys. Rev. B*, **73**, 245319 (2006).
21. H. Kim, H. Li, Y. Z. Zhu, J. R. Hahn, J. M. Seo, *Surface Sci.*, **601**, 1831 (2007).
22. H. Kim, H. Li, G. Duvjir, J. M. Seo, AVS Meeting, Abs. SS-ThP6, Seattle (2007).
23. J. M. Seo, private communication with the first author.
24. Applications for our ordered spikes include base-16 logic in the space of a single MOSFET, multi-frequency wireless, and precise V-standards from 0.154V to 4.004V. Access biological and other applications of Strongly Textured Atomic Ridges (STAR) in the Mexican AVS Abstract PLE-0-4 of the website in (9).

Índice de figuras

Figura 1 MOSFET multi compuerta [35], a) estructura física de compuertas sub micrométricas cubiertas por una compuerta superior micrométrica, b) comportamiento de la transconductancia. $T=1.2K$	5
Figura 2 Curva de salida del SpikeMOS [42]. La presencia de picos con muy alta periodicidad, siempre en múltiplos de 0.155V atribuida a las características estructurales de la superficie en (5 5 12).....	7
Figura 3 Curva de transferencia del SpikeMOS [42]. Se aprecian protuberancias que indican que los picos en las curvas de salida no se deben a efectos aleatorios, sino que están relacionados con la estructura superficial en Si-(5 5 12).	7
Figura 1.1 Orientaciones cristalinas de (0 0 1) a (1 1 1), modificada de [45]. Se muestran las orientaciones utilizadas en este trabajo, excepto la (7 7 17) que está muy cercana a (5 5 12), pero es inestable. La orientación (1 1 2) tampoco tiene una superficie estable, por lo que no muestra periodicidad alguna en su imagen STM.	12
Figura 1.2 Reducción de la energía superficial [16], a) ideal, b) reconstrucción lateral, c) vista superior, d) y e) algunos tipos de enlaces para reducir la energía superficial.....	14
Figura 1.3 Orientación (0 0 1) [16], a) celda básica ideal, b) reconstrucción superficial vista lateralmente, c) reconstrucción superficial en vista superior, d) imágenes STM de la reconstrucción superficial.	15
Figura 1.4 Orientación (1 1 4) [45], a) Superficie ideal en vista lateral, b) Reconstrucción en vista lateral, c) Reconstrucción en vista superior y d) Imagen STM	16

Figura 1.5 Orientación (1 1 3) [47], a) Superficie ideal lateral y superior, b) Primera parte de la reconstrucción 3×2, c) Reconstrucción total 3×2 de la superficie, d) Imagen STM.	17
Figura 1.6 Orientación (5 5 12), a) Imagen STM, b) Interpretación de la imagen STM, c) Superficie ideal, d) Vista lateral y celdas que la componen, e), f), g) y h) Reconstrucciones sugeridas por [48], [49], [50] y [51], respectivamente.	18
Figura 1.7 Orientación (1 1 2) [45], a) estructura ideal, b) Imágenes STM donde se muestran las terrazas de celdas que la componen, 17 indica (7 7 17) y 1 indica (1 1 1).	19
Figura 1.8 Orientación (1 1 1) [47], a) estructura ideal, b) vista lateral de la reconstrucción 7×7, c) vista superior de la reconstrucción superficial, d) imágenes STM donde se marcan las reconstrucciones.	20
Figura 1.9 Orientación (1 1 0) [47], a) Vista lateral ideal, b) Reconstrucción en vista lateral, c) Vista superior de la reconstrucción y d) Imágenes STM.	21
Figura 1.10 Densidades superficiales de átomos, átomos insatisfechos, enlaces completos, rotos y total de éstos. Estas densidades están graficadas respecto al ángulo de las orientaciones respecto a (0 0 1).	23
Figura 2.1 Modelo de oxidación del silicio [58].	27
Figura 2.2 Comparación de resultados experimentales de oxidación húmeda y seca a varias temperaturas (símbolos) con el modelo de Deal y Grove (línea sólida) y los 2 casos extremos lineal y parabólico (líneas punteadas) [58].	29
Figura 2.3 Tipos de carga presentes en el óxido e interfase del sistema MOS.	35
Figura 2.4 Efecto de la carga iónica móvil en la curva capacitancia-voltaje.	39
Figura 2.5 Dependencia de la generación de carga fija con la temperatura y comparación con el modelo para 2 orientaciones de silicio [77].	42
Figura 2.6 Efecto de la carga fija en la curva C-V.	43
Figura 2.7 . a) Triángulo de Deal y Grove b) Comparación del modelo de Akinwande en función de tiempo y temperatura con datos experimentales [77].	44

Figura 2.8 a) Simetría de N_f respecto a las orientaciones b) Módulo de Young. Las líneas indican un nivel de carga o módulo de Young igual, con máximos en (1 1 1) y mínimos en (0 0 1), [79].	45
Figura 2.9 a) N_f de 4 orientaciones con PMA b) N_f de 4 orientaciones sin PMA para distintas temperaturas. El cruce de (1 1 0) con (1 1 1) es un detalle interesante [78].	46
Figura 2.10 Distribución de estados en la banda prohibida, los estados arriba de E_i son aceptores y los que se encuentran debajo de E_i son donadores.	48
Figura 2.11 Efecto de estiramiento de los estados en la interfase en la curva C-V. ...	49
Figura 2.12 a) Simetría de los estados en la interfase respecto a la orientación cristalina. b) Comportamiento de los estados en la interfase y la carga fija con respecto a la orientación [81].	50
Figura 2.13 a) D_{it} para 4 orientaciones con PMA y b) D_{it} para 4 orientaciones sin PMA para distintas temperaturas [78].	51
Figura 2.14 Transferencia parcial de carga en la interfase oxido-silicio por equalización de electronegatividad [82].	54
Figura 2.15 Decaimiento de la transferencia parcial de carga respecto a las capas lejos de la interfase [82].	55
Figura 3.1 Incidencia de un haz de luz en el sistema óxido-silicio con los distintos ángulos, índices y haces reflejados, así como el grosor de la capa d.	60
Figura 3.2 Trayectoria elipsométrica para un óxido de silicio y sustrato de silicio ideales en ambiente de aire con indicadores cada 100 Å [87].	64
Figura 3.3 Trayectorias elipsométricas para índices de refracción de 1.1 a 2.0 en ambiente de aire y sustrato de silicio, marcado el índice 1.46 del oxido de silicio cada 20 Å.	65
Figura 3.4 Elipsómetro nulo [87]. El polarizador se gira hasta obtener una polarización elipsométrica por el QWP que es compensada por la muestra a una polarización lineal, finalmente el analizador nulifica este haz lineal.	66

Figura 3.5 Elipsómetro rotativo[87]. En este elipsómetro el polarizador y el QWP están fijos, sólo se rota el analizador, de tal manera que la Intensidad del haz es medida y analizada por método de Fourier.	67
Figura 3.6 Cálculo inexacto de la N_{eff} por método de corrimiento de V_{fb} en un dispositivo tipo P con alta densidad de estados en la interfase. El efecto es una supuesta carga fija positiva extra.	76
Figura 3.7 Cálculo inexacto de la N_{eff} por método de corrimiento de V_{fb} en un dispositivo tipo N con alta densidad de estados en la interfase. El efecto es una supuesta carga fija negativa extra.	76
Figura 4.1 Crecimiento de óxido contra tiempo para 7 orientaciones, más un punto para (1 1 2) a 1000°C.	97
Figura 4.2 Crecimiento de óxido contra tiempo para 4 orientaciones a 925°C.....	97
Figura 4.3 Crecimiento de óxido contra tiempo para 7 orientaciones, más un punto para (1 1 2) a 850°C.	98
Figura 4.4 Datos de la oxidación para el conjunto de obleas AP (0 0 1) a 1000°C, ajuste a un polinomio grado 2 y modelo Deal y Grove con las constantes obtenidas.	99
Figura 4.5 Ajuste lineal descrito en el paso 3 para obtener las constantes A y B. para el conjunto de obleas AP (0 0 1) a 1000°C.	100
Figura 4.6 Ajuste directo al modelo de Deal y Grove del conjunto AP (0 0 1) a 925°C, dado que el ajuste lineal del paso 3 resulto muy pobre.....	100
Figura 4.7 Ajuste lineal pobre del inverso de la derivada respecto al grosor de óxido para el conjunto AP(0 0 1) a 925°C, no se utilizó para el cálculo de A y B.	101
Figura 4.8 Ajuste directo al modelo de Deal y Grove del conjunto AP (0 0 1) a 850°C, dado que el ajuste lineal del paso 3 resulto muy pobre.....	101
Figura 4.9 Índice de refracción N para las oxidaciones a 1000°C. La línea gruesa horizontal indica el índice de refracción usado típicamente para el óxido de silicio.....	106

Figura 4.10 Índice de refracción N para las oxidaciones a 925°C. La línea gruesa horizontal indica el índice de refracción usado típicamente para el óxido de silicio.....	106
Figura 4.11 Índice de refracción N para las oxidaciones a 850°C. La línea gruesa horizontal indica el índice de refracción usado típicamente para el óxido de silicio.....	107
Figura 4.12 Índice de refracción para las oxidaciones a 1000°C de todas las orientaciones contra grosor de óxido.	108
Figura 4.13 Índice de refracción para las oxidaciones a 925°C de todas las orientaciones contra grosor de óxido.	108
Figura 4.14 Índice de refracción para las oxidaciones a 850°C de todas las orientaciones contra grosor de óxido.	109
Figura 4.15 Índices de refracción de todos los procesos de oxidación. Cuadrados 1000°C, triángulos 925°C y círculos 850°C.	111
Figura 4.16 Traslape en grosor de óxido del índice de refracción para las temperaturas usadas y su ajuste a una curva exponencial.	112
Figura 4.17 Índices de refracción para el proceso sin tratamientos pos oxidación A (círculos), y el proceso con tratamientos pos oxidación I (cuadros).....	113
Figura 4.18 Extrapolación de V_{mg} y V_{fb} para obtener ϕ_{meff} en una oblea tipo p; los puntos gruesos indican los grosores de óxido para la extrapolación.	115
Figura 4.19 Extrapolación de V_{mg} y V_{fb} para obtener ϕ_{meff} en una oblea tipo n; los puntos gruesos indican los grosores de óxido para la extrapolación.	116
Figura 4.20 Funciones trabajo efectivas a 1000°C por V_{mg} y V_{fb} . El valor ideal se marca con la línea punteada.	117
Figura 4.21 Funciones trabajo efectivas a 925°C por V_{mg} y V_{fb} . El valor ideal se marca con la línea punteada.....	118
Figura 4.22 Funciones trabajo efectivas a 850°C por V_{mg} y V_{fb} . El valor ideal se marca con la línea punteada.....	118
Figura 4.23 Densidades de carga efectiva N_{eff} para 1000°C por el método de voltaje de media banda. No se grafica el proceso de oxidación A.	122

Figura 4.24 Densidades de carga efectiva N_{eff} para 1000°C por el método de voltaje de banda plana. No se grafica el proceso de oxidación A.	123
Figura 4.25 Densidades de carga efectiva N_{eff} para 1000°C por el método de voltaje de banda plana con función trabajo del metal ideal. No se grafica el proceso de oxidación A.	124
Figura 4.26 Densidades de carga efectiva N_{eff} para 925°C por el método de voltaje de media banda con función trabajo del metal efectiva.	125
Figura 4.27 Densidades de carga efectiva N_{eff} para 925°C por el método de voltaje de banda plana con función trabajo del metal efectiva.	126
Figura 4.28 Densidades de carga efectiva N_{eff} para 925°C por el método de voltaje de banda plana con función trabajo del metal ideal.	127
Figura 4.29 Densidades de carga efectiva N_{eff} para 850°C por el método de voltaje de media banda con función trabajo del metal efectiva.	128
Figura 4.30 Densidades de carga efectiva N_{eff} para 850°C por el método de voltaje de banda plana con función trabajo del metal efectiva.	129
Figura 4.31 Densidades de carga efectiva N_{eff} para 850°C por el método de voltaje de banda plana con función trabajo del metal ideal.	130
Figura 4.32 Comparación de los 3 métodos para el proceso II con un acercamiento a la densidad efectiva por banda plana con función trabajo ideal en la oblea (0 0 1)p	131
Figura 4.33 Densidades efectivas por 3 métodos para el proceso de oxidación IV y que muestra el mismo comportamiento que el del conjunto II, Figura 4.32.	132
Figura 4.34 Densidades efectivas por 3 métodos para el proceso de oxidación XI.	133
Figura 4.35 Densidades efectivas por 3 métodos para el proceso de oxidación VIII.	134
Figura 4.36 Densidades de carga para los procesos A y I; procesos sin y con tratamientos térmicos de reducción de carga respectivamente.	135
Figura 4.37 Densidad de estados en la interfase D_{ii} para el proceso I. Se incluye la muestra HII de orientación (1 1 2). No se incluyó la muestra (1 1 1) dado que presentó una densidad muy baja.	136

Figura 4.38 Densidad de estados en la interfase para el proceso de oxidación A.....	137
Figura 4.39 Dit a 1000°C con y sin reducción de cargas y a 850°C con reducción, (5 5 12).	138
Figura 4.40 Dit a 1000°C con y sin reducción de cargas y a 850°C con reducción, (1 1 1).	138
Figura 4.41 Dit a 1000°C con y sin reducción de cargas y a 850°C con reducción, (1 1 0).	139
Figura 4.42 Densidad de estados en la interfase en el proceso Al mediante el método de alta-baja frecuencia.....	140
Figura 4.43 C-Vs para determinar la carga iónica móvil en un capacitor MOS tipo n.	142
Figura 4.44 C-Vs para determinar la carga iónica móvil en un capacitor MOS tipo p.	143
Figura 4.45 Densidad de carga fija N_f aproximada para el proceso de oxidación A.	146

Índice de tablas

Tabla 1.1 Áreas de celdas unitarias, número de átomos superficiales por celda, átomos con enlaces sueltos, enlaces satisfechos en la superficie y enlaces rotos en la superficie. Todo calculado a partir de las celdas unitarias ideales.	22
Tabla 1.2 Densidades por cm^2 de átomos superficiales, átomos parcialmente satisfechos, enlaces completos en la superficie, enlaces rotos y enlaces superficiales totales. .	22
Tabla 2.1 Energías de activación y movilidades de Na y Li en el óxido [74].	38
Tabla 2.2 Variación de N_f , D_{it} , rugosidad y movilidad respecto a parámetros de proceso.	41
Tabla 2.3 Resultados de densidad de carga fija para 4 orientaciones y varias temperaturas [78].	46
Tabla 2.4 Electronegatividad de elementos usados en el capacitor MOS y otros elementos presentes en el sistema.	53
Tabla 2.5 Electronegatividad de los compuestos presentes en la interfase óxido-silicio.	53
Tabla 4.1 Obleas y orientaciones utilizadas en las oxidaciones a 1000°C con el tiempo de oxidación en minutos; negritas, tipo P.	89
Tabla 4.2 Obleas y orientaciones utilizadas en las oxidaciones a 850°C con el tiempo de oxidación en minutos; negritas, tipo P.	89
Tabla 4.3 Obleas y orientaciones utilizadas en las oxidaciones a 925°C con el tiempo en minutos; negritas, tipo P.	90
Tabla 4.4 Nomenclatura, resistividad, tipo y orientación de las obleas utilizadas en el proceso ALG.	92
Tabla 4.5 Grosos de óxido en angstroms obtenidos mediante elipsometría rotativa para 1000°C , el tiempo de oxidación en minutos se muestra en la primera columna.	94

Tabla 4.6 Grosos de óxido en angstroms obtenidos mediante elipsometría rotativa para 925°C, el tiempo de oxidación en minutos se muestra en la primera columna.	94
Tabla 4.7 Grosos de óxido en angstroms obtenidos mediante elipsometría rotativa para 850°C, el tiempo de oxidación en minutos se muestra en la primera columna.	94
Tabla 4.8 Grosos de óxido en angstroms obtenidos mediante elipsometría nula para 1000°C, el tiempo de oxidación en minutos se muestra en la primera columna. ...	95
Tabla 4.9 Grosos de óxido en angstroms obtenidos mediante elipsometría nula para 925°C, el tiempo de oxidación en minutos se muestra en la primera columna.	95
Tabla 4.10 Grosos de óxido en angstroms obtenidos mediante elipsometría nula para 850°C, el tiempo de oxidación en minutos se muestra en la primera columna.	95
Tabla 4.11 Diferencia porcentual entre la elipsometría nula y la rotativa para las oxidaciones a 1000°C.	96
Tabla 4.12 Diferencia porcentual entre la elipsometría nula y la rotativa para las oxidaciones a 925°C.	96
Tabla 4.13 Diferencia porcentual entre la elipsometría nula y la rotativa para las oxidaciones a 850°C.	96
Tabla 4.14 Constantes de crecimiento parabólico B, lineal B/A, grosor del óxido preexistente X_i y tiempo de corrimiento τ para las oxidaciones a 1000°C.....	102
Tabla 4.15 Constantes de crecimiento parabólico B, lineal B/A, grosor de óxido preexistente X_i y tiempo de corrimiento τ para las oxidaciones a 925°C.....	102
Tabla 4.16 Constantes de crecimiento parabólico B, lineal B/A, grosor de óxido preexistente X_i y tiempo de corrimiento τ para las oxidaciones a 850°C.....	103
Tabla 4.17 Resultados de las constantes de oxidación para varias orientaciones y temperaturas obtenidos por Massoud [92]	103
Tabla 4.18 Promedios e interpolación para obtener B fija.	104
Tabla 4.19 Parámetros obtenidos para una B fija de 34000 a 1000°C.....	104
Tabla 4.20 Parámetros obtenidos para una B fija de 7300 a 925°C.....	104
Tabla 4.21 Parámetros obtenidos para una B fija de 2700 a 850°C.....	105
Tabla 4.22 Muestras en las que se pudieron obtener mediciones C-V para dos grosos de óxido a 1000°C de oxidación.	114
Tabla 4.23 Muestras en las que se pudieron obtener mediciones C-V para dos grosos de óxido a 925°C de oxidación.	115

Tabla 4.24 Muestras en las que se pudieron obtener mediciones C-V para dos grosores de óxido a 850°C de oxidación.	115
Tabla 4.25 Función trabajo efectiva promedio (en eV) para cada orientación y cada temperatura de oxidación. Se utilizó el método de $V_{mg}(t_{ox})$	116
Tabla 4.26 Función trabajo efectiva promedio (en eV) para cada orientación y cada temperatura de oxidación. Se utilizó el método de $V_{fb}(t_{ox})$	117
Tabla 4.27 Densidades de carga efectiva N_{eff} para 1000°C por el método de voltaje de media banda.	121
Tabla 4.28 Densidades de carga efectiva N_{eff} para 1000°C por el método de voltaje de banda plana.	123
Tabla 4.29 Densidades de carga efectiva N_{eff} para 1000°C por el método de voltaje de banda plana con función trabajo del metal ideal.	124
Tabla 4.30 Densidades de carga efectiva N_{eff} para 925°C por el método de voltaje de media banda con función trabajo del metal efectiva.	125
Tabla 4.31 Densidades de carga efectiva N_{eff} para 925°C por el método de voltaje de banda plana con función trabajo del metal efectiva.	126
Tabla 4.32 Densidades de carga efectiva N_{eff} para 925°C por el método de voltaje de banda plana con función trabajo del metal ideal.	127
Tabla 4.33 Densidades de carga efectiva N_{eff} para 850°C por el método de voltaje de media banda con función trabajo del metal efectiva.	127
Tabla 4.34 Densidades de carga efectiva N_{eff} para 850°C por el método de voltaje de banda plana con función trabajo del metal efectiva.	128
Tabla 4.35 Densidades de carga efectiva N_{eff} para 850°C por el método de voltaje de banda plana con función trabajo del metal ideal.	129
Tabla 4.36 Densidades de carga iónica móvil para capacitores n y p por corrimiento de voltaje de banda plana y voltaje de media banda.	143
Tabla 4.37 Densidad de carga fija N_f aproximada para el proceso de oxidación A.	145

Referencias

- [1] R. A. Lawes, "Future Trends in high-resolution lithography", *Applied Surf. Sci.*, 154, (2000), 519-526.
- [2] B. G. Streetman "Solid State Electronic Devices", Prentice Hall (1995)
- [3] Chau, R. Kavalieros, J. Roberds, B. Schenker, R. Lionberger, D. Barlage, D. Doyle, B. Arghavani, R. Murthy, A. Dewey, G., "30 nm physical gate length CMOS transistors with 1.0 ps n-MOS and 1.7 ps p-MOS gate delays", *Electron Devices Meeting, Tech. Digest IEDM*, (2000), pp. 45-48.
- [4] K. E. Bean and J. R. Lawson "Application of Silicon Crystal Orientation and Anisotropic Effects to the control of charge Spreading in Devices" *IEEE Journal Of Solid State Circuits*. sc-9 No. 3 (1974) 111-117
- [5] P. E. Thompson, T. L. Kreifels M. Gregg, R. L. Hengehold, Y. K. Yeo, D. S. Simons, M. E. Twigg, M. Fatemi and K. Hobart "The grow and characterization of $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ multiple quantum wells on Si(1 1 0) and Si(1 1 1)." *Journal of Crystal Growth* 157 (1995) 21-26.
- [6] T. J. Thornton, F. Ge, A. Andersen, D. Pivin, J. Bird and D. K. Ferry "Minigaps in strained silicon quantum wells on tilted substrates" *Journal of Vacuum Science Technology B*, 17 No. 4 (1999) 17571-1760.
- [7] M. Yang, E. P. Gusev, M. Jeong, O. Gluschenkov, D. C. Boyd, K. K. Chan, P. M. Kozlowsky, Ch. P. D'Emic, R. M. Sicina, P. C. Jmison and A. I. Chou. "Performance Dependence of CMOS on Silicon Substrate Orientation for ultrathin Oxynitride and HfO_2 Gate Dielectrics" *IEEE Electronics Device Letters* 24 No. 5 (2003) 339-341.
- [8] M. Christophersen and J. Carstensen, H. Föll "Crystal Orientation Dependence of Macropore Formation in p-Type Silicon Using Organic Electrolytes" *Physica Status Solidi (a)* 182, No. 1 (2000) 103-107
- [9] P. K. Hurley, B. J. O'Sullivan, F. N. Cubaynes, P. A. Stolk, F. P. Widdershoven, and J. H. Das "Examination of the Si(111)-SiO₂, Si(110)-SiO₂, and Si(100)-SiO₂ Interfacial Properties Following Rapid Thermal Annealing" *Journal of The Electrochemical Society* 149 No. 3 pp G194-G197 (2002)
- [10] Aoki, M.; Yano, K.; Masuhara, T.; Shimohigashi, K. "Fully symmetric cooled CMOS on (110) plane" *IEEE Transactions on Electron Devices*, 36 No. 8 (1989) 1429-1433.

- [11] Yang, M.; Jeong, M.; Shi, L.; Chan, K.; Chan, V.; Chou, A.; Gusev, E.; Jenkins, K.; Boyd, D.; Ninomiya, Y.; Pendleton, D.; Surpris, Y.; Heenan, D.; Ott, J.; Guarini, K.; Dapos;Emic, C.; Cobb, M.; Mooney, P.; To, B.; Rovedo, N.; Benedict, J.; Mo, R.; Ng, H. "High performance CMOS fabricated on hybrid substrate with different crystal orientations" Electron Devices Meeting, 2003. IEDM apos;03 Technical Digest. IEEE Internacional No. 8-10 (2003) 18.7.1 - 18.7.4
- [12] B. Goebel, D. Schumann and E. Bertagnolli "Vertical N-channel MOSFETs for extremely high density memories: the impact of interface orientation on device performance" IEEE Transactions on Electron Devices, 48, No. 5, (May 2001) 897 – 906.
- [13] J. Schulze, C. Fink, T. Sulima, I. Eisele, W. Hansch "Vertical MOS-gated pin-diodes: MOS-gated tunneling transistors in Si(100) and Si(111)" Thin Solid Films No. 380 (2000) 154-157.
- [14] M. Aoki, K. Yano, T. Masuhara, S. Ikeda and S. Meguro, "Optimum crystallographic orientation of submicrometer CMOS devices operated at low temperatures" IEEE Transactions on Electron Devices, 34 No 1 (1987) 52 – 57.
- [15] T Onodera, H. Kawata, H. Nishi, T. Futatsugi and N. Yokoyama "Experimental Study of the Orientation Effect of GaAs MESFET's Fabricated on (100), (011), and (111) Ga, and (111) As Substrate" IEEE Transactions on Electron Devices 36 No. 9 (1989) 1586-1590.
- [16] R. R. Rodríguez Mora. "Caracterización del Óxido y su Interfase con Silicio en Superficies de Alto Índice Cristalino." Tesis de Maestría, INAOE, México, (2003).
- [17] R. R. Rodríguez, E. Meza, J. De la Hidalga, D. L. Kendall, A. Torres y W. Calleja "Estudio de Capacitores MOS Fabricados en Substratos de Silicio con Alto Índice Cristalino" XXII Congreso Nacional, Sociedad Mexicana de Ciencia de Superficies y Vacío A.C. (2002).
- [18] R. R. Rodríguez, E. Meza-P, M. Castro-L, I. Juárez, F. J. De la Hidalga-W, W. Calleja-A, A. Torres-J, M. Landa, C. Zúñiga, N. Carlos and Don L. Kendall: "Density of Interface States (Dit) on High Index Silicon MOS Capacitors", Sociedad Mexicana de Ciencia y Tecnología de Superficies y Materiales, Zacatecas (2005).
- [19] R. R. Rodríguez, J. De la Hidalga, W. Calleja, D. L. Kendall y A. Torres. "Obtención de las Razones de Oxidación Lineal para Silicio con Distintas Orientaciones Cristalinas y su Simulación con SUPREM" XXIV Congreso Nacional, Sociedad Mexicana de Ciencia y Tecnología de Superficies y Materiales. Antes Sociedad Mexicana de Ciencia de Superficies y Vacío (2004).
- [20] R. R. Rodríguez, J. De la Hidalga, W. Calleja, D. L. Kendall y A. Torres "Caracterización de Óxidos Crecidos en Silicio de Alto Índice Cristalino bajo el Régimen Lineal y Delgado" XXIV Congreso Nacional, Sociedad Mexicana de Ciencia y Tecnología de Superficies y Materiales. Antes Sociedad Mexicana de Ciencia de Superficies y Vacío (2004).
- [21] R. R. Rodríguez-M, E. Meza-P, M. Castro-L, F. J. De la Hidalga-W, W. Calleja-A, A. Torres-J and Don L. Kendall: "Fabrication of High Index Silicon Wafers", XXV Congreso Nacional de la Sociedad Mexicana de Ciencia y Tecnología de Superficies y Materiales, Zacatecas (2005).

- [22] E. Meza, "MOSFET's Fabricados en Superficies de Silicio de Alto Índice Cristalino" Tesis de Maestría Puebla INAOE (2003).
- [23] E. Meza-P, R. R. Rodríguez-M, M. Castro-L, F. J. De la Hidalga-W, W. Calleja-A, A. Torres-J and Don L. Kendall, "Efectos de la Orientación Cristalina en el Transistor MOS" XXII Congreso Nacional, Sociedad Mexicana de Ciencia de Superficies y Vacío A.C
- [24] M. Castro Licona "Implantación y Diusión de Impurezas en Silicio de Alto Índice Cristalino" Tesis de Doctorado, INAOE, México (2008)
- [25] M. Castro-L, F. J. De La Hidalga-W, P. Rosales-Q, A. Torres-J, W. Calleja-A, E. A. Gutiérrez-D, and D. L. Kendall: "Effects of Channel and Crystalline Orientations on the Electron Mobility in MOSFETs Fabricated on (114) and (5 5 12)-Silicon Substrates", ECS Transactions, 6, (2006), pp. 21-27.
- [26] M. Castro-L, F. J. De la Hidalga-W, P. Rosales-Q, A. Torres-J, W. Calleja-A: "Electron Mobility in Si-(114) and Si-(5 5 12) MOSFETs as a Function of the Channel Orientation". International Conference on Electronic Design, Veracruz (2006).
- [27] M. Castro-L, F. J. De la Hidalga-W, P. Rosales-Q, A. Torres-J, W. Calleja-A: "Electron Mobility in (114) and (5 5 12) Silicon Inversion Layers". Sociedad Mexicana de Ciencia y Tecnología de Superficies y Materiales, Puebla (2006).
- [28] M. Castro-L, E. Meza-P, R. Rodríguez-M, I. Juárez, F. J. De la Hidalga-W, W. Calleja-A, A. Torres-J, M. Landa, C. Zúñiga, N. Carlos, Don L. Kendall and M. Kendall: "MOSFETs on the High-Index Silicon Surfaces (5 5 12) and (1 1 4): Impact of Channel Orientation on Device Performance", Sociedad Mexicana de Ciencia y Tecnología de Superficies y Materiales, Zacatecas (2005).
- [29] M. Castro-L, F. J. De La Hidalga-W, P. Rosales-Q, A. Torres-J, W. Calleja-A, E. A. Gutiérrez-D, and D. L. Kendall: "Formation of n and p Regions in (114) and (5 5 12)-Silicon Substrates". ECS Transactions, 6, (2006), pp. 29-33.
- [30] M. Castro-L, F. J. De la Hidalga-W, P. Rosales-Q, A. Torres-J, W. Calleja-A: "Implantation and Activation of Phosphorus in Si-(001) and Si-(5 5 12)". International Conference on Electronic Design, Veracruz (2006).
- [31] M. Castro-L, F. J. De la Hidalga-W, P. Rosales-Q, A. Torres-J, W. Calleja-A: "Profiles of Boron and Phosphorus Implanted on (114) and (5 5 12) Silicon Substrates". Sociedad Mexicana de Ciencia y Tecnología de Superficies y Materiales, Puebla (2006).
- [32] Y. Chen, R Myricks, M. Decker, J. Liu and G. S. Higashi, "The Origination and Optimization of Si /SiO₂ Interface Roughness and its Effect on CMOS Performance" IEEE Electron Device Letters 24 No. 5 (2003) 295-297.

[33] A. A. Baski, K. M. Salud and K. M. Jones, "1-D Nanostructures Grown on the Si (5 5 12) Surface" *Applied Surface Science* No. 182 (2001) 216-222.

[34] K. Ng Kwor, "Complete guide to semiconductor devices." Ed. Mc Graw-Hill (1995).

[35] A. C. Warren, D. A. Antoniadis, H. I. Smith and Melngailis, "Surface Superlattice Formation in Silicon Inversion Layers Using 0.2- μm period Grating-Gate Electrodes" *IEEE Electron Device Letters* EDL-6 No. 6 (1985) 294-296

[36] C. Weisbuch and B. Vinter, "Quantum Semiconductor Structures" Ed. Academic press inc. (1991) 189-209

[37] [Http://www.stanford.edu/group/quate_group/Litho/LithoPages/ParallelLithography/ParallelLithographyFrame.html](http://www.stanford.edu/group/quate_group/Litho/LithoPages/ParallelLithography/ParallelLithographyFrame.html)

[38] D. L. Kendall, "Strongly Texture Atomic Ridge and Dot MOSFETs, Sensors and Filters", Patent No. US 6,509,619 B1, (2003).

[39] D. L. Kendall, "Quantum Ridges and Tips", Patent No. US 6,667,492 B1, 2003.

[40] D. L. Kendall, "Strongly Textured Atomic Ridge and Dot MOSFETs, Sensors and Filters", Patent No. US 7,019,324 B2, (2006).

[41] A. A. Baski y D. L. Kendall, "Strongly Textured Atomic Ridge and Dot Fabrication", Patent No. US 6,413, 880 B1, (2002).

[42] D. L. Kendall, J. de la Hidalga, A. Torres, R. R. Rodríguez, M. Castro, Elizabeth Meza Prieto, W. Calleja, M. Landa, C. Zúñiga, R. Murphy, N. Carlos, I. Juárez, and M. Kendall, "A 300K Si Nanowire Transistor Closely-Coupled With a Standard High-Index Silicon n-MOSFET", Plenary Lecture, 25th Anniv. of Mexican Congress of Amer. Vac. Soc., Sept. 27, (2005).

[43] D. L. Kendall, J. de la Hidalga, A. Torres, R. R. Rodríguez, M. Castro, Elizabeth Meza Prieto, W. Calleja, M. Landa, C. Zúñiga, R. Murphy, N. Carlos, I. Juárez, and M. Kendall, "High Index Si MOSFETs and the One Dimensional Artificial Atom", 25th Anniv. of Mexican Congress of Amer. Vac. Soc., Sept. 27, (2005).

[44] D. L. Kendall, J. de la Hidalga, A. Torres, R. R. Rodríguez, M. Castro, Elizabeth Meza Prieto, W. Calleja, M. Landa, C. Zúñiga, R. Murphy, N. Carlos, I. Juárez, and M. Kendall, "Quantum (5 5 12)Si Nanowire 300K MOSFET", ECS Transactions, 13, "Advance Gate Stack, Source/Drain, and Channel Engineering for Si-Based CMOS 4: New Materials, Processes, and Equipment", Phoenix, Az. meeting.

[45] A. A. Baski, S. C. Erwin y L. J. Whitman, "The Structure of Silicon Surfaces From (0 0 1) to (1 1 1)" *Surface Science* 392 (1997) 69-85.

[46] S. C. Erwin, A. A. Baski y L. J. Whitman, "Structure and Stability of Si(1 1 4) (2 \times 1)" *Physical Review Letters* 77 (1996) 4, 687-690 julio 1996.

- [47] J. Dabrowsky y H. J. Müssig. "Silicon surfaces and formation of interfaces" Ed. World Scientific (2000).
- [48] A. A. Baski, S. C. Erwin y L. J. Whitman, "A Stable High-Index Surface of Silicon: Si(5 5 12)" *Science* 269 No. 5230 septiembre (1995) 1556-1560.
- [49] W. Ranke y Y. R. Xing, "Electron Diffraction and Photoemission of clean and Water-Covered Si(5 5 12) and Si(1 1 2) Surfaces" *Surface Review and Letters* 4 No. 1 (1997) 15-23.
- [50] J. Liu, M Takeguchi, H. Yasuda y K. Furuya, "Cross-sectional HRTEM study of Si(5 5 12) reconstructed surface" *Journal of Crystal Growth*, Abril (2002) 188-191.
- [51] Sukmin Jeong, Hojin Jeong, Sanghee Cho, Jae Myung Seo "New structural model of the high-index Si(5 5 12)2X1 surface" *Surface Science* No. 557 (2004) 183-189
- [52] Sanghee Cho, Jae M. Seo "Atomic structure of Bi-dimer row selectively adsorbed on Si(5512)-2·1 surface" *Surface Science* No. 565 (2004) 14-26.
- [53] Hidong Kim, Yumi Cho, Jae M. Seo "Cyclic transformation of one-dimensional structures during homoepitaxy of Si(5512)-2 X 1" *Surface Science* No. 583 (2005) 265-280
- [54] Sanghee Cho and Jae M. Seo "Origin of the Parasitic (7 7 17) Domain on Reconstructed Si(5 5 12)-2 × 1" *Journal of the Korean Physical Society* 49 No. 1 (2006) 181-186
- [55] Yong-Zhe Zhu, Hidong Kim, and Jae M. Seo "Metrological determination of a (6 9 17) facet on vicinal Si (5 5 12) using STM" *PHYSICAL REVIEW B* 73 No. 24 (2006) 245319-1 – 245319-6
- [56] Hojin Jeong, Sukmin Jeong, S. H. Jang, J. M. Seo, and J. R. Hahn "Atomic Structures of Benzene and Pyridine on Si(5 5 12)-2 X 1" *Journal of Physical Chemistry B* No. 110 (2006) 15912-15919
- [57] Y. Peng, T. Suzuki, H. Minoda, Y Tanishiro y K. Yagi, "High Resolution REM Studies of Si (5 5 12) Surfaces and Their Roughening Phase Transition" *Surface Science* 493 (2001) 499-507.
- [58] B. E. Deal and A. S. Groove "General relationship for the thermal oxidation of silicon" *Journal of applied physics* 36 (1965) 3770-3778.
- [59] E. H. Nicollian and J.R. Brews. 'MOS (Metal Oxide Semiconductor) Physics and technology' John Wiley & Sons (1982).
- [60] E. A. Irene "The effects of trace amounts of water on thermal oxidation of silicon on oxygen" *Journal of the electrochemical society* 121 (1974) 1613-1616.
- [61] J. R. Ligenza "Effect of crystal orientation on oxidation rates of silicon in high pressure steam" *Journal of physics chemistry* 65 (1961) 2011-2014.
- [62] W. A. Pliskin "Separation of the linear and parabolic terms in steam oxidation of silicon" *IBM Journal of Research and Develop* 10 (1966) 198-205.

[63] D. B. Kao, P. McVittie, D. Nix and C. Saraswat "Two-dimensional thermal oxidation of silicon I experiments" *IEEE Transactions on Electron Devices* ED-34 (1987) 1008-1018.

[64] D. B. Kao, P. McVittie, D. Nix and C. Saraswat "Two-dimensional thermal oxidation of silicon II modeling stress effects in wet oxides" *IEEE Transactions on Electron Devices* ED-35 (1988) 25-37.

[65] R. H. Doremus "Oxidation of silicon: Stress relaxation in silica" *Journal of Electrochemical Society* 134 (1987) 2001-2003

[66] E. A. Irene H. Z. Massoud, E. Tierney "Silicon oxidation studies: Silicon orientation effects on thermal oxidation" *Journal of Electrochemical Society* 133 (1986) 1253-1256.

[67] H. Z. Massoud, J. D. Plummer y E. A. Irene "Thermal oxidation of silicon in dry oxygen grow-rate enhancement in thin regime I experimental results" *Journal of Electrochemical Society* 132 (1985) 1685-2693.

[68] H. Z. Massoud, J. D. Plummer y E. A. Irene "Thermal oxidation of silicon in dry oxygen grow-rate enhancement in thin regime II physical mechanisms" *Journal of Electrochemical Society* 132 (1985) 2693-2700.

[69] J. L. Ngau P. R. Griffin and J. D. Plummer "Silicon Orientation effects in the initial regime of wet oxidation" *Journal of Electrochemical Society* 149 (2002) F98-F101

[70] S. I. Raider and L. E. Forget "Reversal relative oxidation rates of (1 1 1) and (1 0 0) oriented silicon substrates at low oxygen partial pressures" *Journal of Electrochemical Society* 127 (1980) 1783-1787.

[71] E. A. Irene "Thermal oxidation of silicon: new experimental results and models" *Applied Surface Science* 30 (1987) 1-16.

[72] D. K. Schroder, "Semiconductor material and device characterization" ed. Wiley – Interscience (1998).

[73] B. El-Kareh and R. J. Bombard, "Introduction to VLSI devices" ed. Kluwer Academic Publishers, (1986).

[74] G. Greeuw and J. F. Verwey, "The mobility of Na⁺, Li⁺, and K⁺ ions in thermally grown SiO₂ films" *Journal of Applied Physics* 56 No. 8 (1984) 2218-2224.

[75] S. I. Raider and A. Berman, "On the nature of fixed oxide charge" *Journal of Electrochemical Society* 125 No. 4 (1978) 629-633.

[76] A. I. Akinwande and J. D. Plummer, "Quantitative modeling of Si/SiO₂ interface fixed charge I. Experimental results" *Journal of Electrochemical Society* 134 No. 10 (1987) 2565-2572.

[77] A. I. Akinwande and J. D. Plummer, "Quantitative modeling of Si/SiO₂ interface fixed charge II. Physical modeling" *Journal of Electrochemical Society* 134 No. 10 (1987) 2573-2579.

- [78] S. C. Vitkavage and E. A. Irene, "An investigation of Si-SiO₂ interface charges in thermally oxidized (1 0 0), (1 1 0), (1 1 1), and (5 1 1) silicon" *Journal of Applied Physics* 68 No. 10 (1990) 5262-5272.
- [79] G. Abowitz, E. Arnold and J. Ladell, "Symmetry of interface charge distribution in thermally oxidized silicon" *Physical Review and Letters*, 18 No. 14 (1967) 543-546.
- [80] P. V. Gray and D. M. Brown "Density of SiO₂-Si interface states" *Applied physics letters* 8 No. 2 (1966) 31-33.
- [81] E. Arnold J. Ladell and G Abowitz, "Crystallographic symmetry of surface state density in thermally oxidized silicon" *Applied Physics Letters* 13 No. 12 413-416.
- [82] H. Z. Massoud "Charge-transfer dipole moments at the Si-SiO₂ interface" *Journal of Applied Physics* 63 No. 6 (1988) 2000-2005.
- [83] S. Karr "Determination of Si-metal work function differences by MOS capacitance technique" *Solid-State Electronics*" 18 (1975) 169-181.
- [84] H. B. Michaelson "Relation between an atomic electronegativity Scale and the work function" *IBM Journal Research Development* 22 No. 1 (1978) 72-80
- [85] Wikipedia, subject "electronegativity".
- [86] H. C. Casey "Devices for integrated circuits" John Wiley & Sons 1999
- [87] H. G. Tompkins "A user's guide ellipsometry" Academic Press 1993.
- [88] R. M. A. Azzam, N. M. Bashara "Ellipsometry and Polarized Light" North Holland 1979
- [89] L. M. Terman "An investigation of surface states at a silicon/silicon oxide interface employing metal-oxide-silicon diodes" *Solid State Electronics* 5 (1962) 285-299.
- [90] J. R. Brews "An improved high-frequency MOS capacitance formula" *Journal of Applied Physics* 45 No. 3 (1974) 1276-1279.
- [91] E. Rosencher and D. Bois, "Comparison of interface state density in MIS structure from DLTS and Terman measurements" *Electronic Letters* 18 No. 3 (1982) 545-546.
- [92] H. Z. Massoud, J. D. Plummer y E. A. Irene "Thermal oxidation of silicon in dry oxygen" *Journal of Electrochemical Society* 132 (1985) 1745-1753.
- [93] G. Lukovsky, M. J. Manitini, J. K: Srivastava and E. A. Irene "Low temperature grow of silicon dioxide films: A study of chemical bonding by ellipsometry and infrared spectroscopy" *Journal of Vacuum Science and Technology B* 5. No. 2 (1987) 530-538.