

# Modelo de corriente de fuga en estructuras de unión p-n fabricados a base de nitruros del grupo III en fase cubica

E. Martínez-Guerrero

Departamento de Electrónica Sistemas e Informática (DESI)  
Instituto Tecnológico y de Estudios Superiores de Occidente (ITESO)  
Periférico Sur Manuel Gomez Morin 8585, Tlaquepaque Jalisco 45090.  
Tel. (33) 3669 3598, Fax: (33) 3669 3511, e-mail: [emquerrero@iteso.mx](mailto:emquerrero@iteso.mx)

**Resumen:** Mediante mediciones de SIMS, encontramos evidencia de difusión de impurezas residuales hacia el bulto de películas de GaN cubico no intencionalmente dopadas. El análisis de imágenes de espectroscopía de masas de iones secundarios (SIMS) revela que la difusión es propiciada por las fallas de apilamiento. La profundidad a la que las impurezas residuales difunden, concuerda con la distancia a la que la densidad de fallas de apilamiento alcanza su valor mínimo. Mediciones de microscopía electrónica en transmisión (TEM) muestran una alta densidad de fallas de apilamiento en las zonas de contacto ohmico de diodos de unión p-n fabricados con GaN cúbico. De acuerdo con datos reportados en la literatura que indican conducción parásita a través de defectos estructurales y con base en estos resultados, se propone un modelo de corriente de fuga en diodos de unión p-n de GaN cúbico que degradan su desempeño y/o provocan su falla.

**Palabras clave:** Nitruros semiconductores, modelado, dispositivos electrónicos.

## I: INTRODUCCION

Diversos dispositivos tales como diodos emisores de luz (LED) emitiendo en el azul, y blanco [1], diodos láser (LD) emitiendo en el azul y en el verde [2] de alta eficiencia (a pesar de la gran densidad de defectos estructurales que poseen las capas activas de los dispositivos), transistores de efecto de campo (FET) capaces de manejar niveles de potencia y operar a frecuencias muy por arriba de la que manejan los dispositivos fabricados con Silicio, Arsenuro de Galio, Carburo de Silicio y prácticamente cualquier otro semiconductor existente (véase por ejemplo los FET fabricados de hetero-estructuras GaN/AlGaN que pueden amplificar señales a frecuencias del orden de 10GHz y manejar una densidad de potencia del orden de 10W/mm [3]), etc., ilustran los atributos de los dispositivos fabricados con nitruros semiconductores del grupo III, lo que ha propiciado el gran auge en investigación y desarrollo tecnológico de estos materiales para aplicaciones en opto-electrónica y en transistores de alta velocidad y alta potencia. Los dispositivos antes mencionados se han obtenido con nitruros que

cristalizan en la fase hexagonal. Sin embargo, es también ampliamente conocido que los nitruros cristalizan en la fase cúbica. Aunque la calidad estructural de películas de nitruro cúbico obtenida es aun baja comparada con la de los nitruros hexagonales, los recientes progresos en nitruros cúbicos reportados en [4, 5, 6] así como la incorporación controlada de impurezas tipo n y tipo p en el rango de  $10^{16}$  a  $10^{20}$   $\text{cm}^{-3}$  [7, 8, 9], permiten prever el desarrollo de dispositivos a base de estos materiales en un futuro cercano. Los nitruros cúbicos presentan ventajas adicionales a las de los nitruros hexagonales debido a la alta simetría de la estructura cúbica: mayor velocidad electrónica; mayor movilidad debido a la menor dispersión por fonones; mayor eficiencia radiativa debido a la ausencia de polarización espontánea y finalmente el clivaje natural de la estructura cúbica [5], esta última propiedad hace a los nitruros cúbicos adecuados para la realización de cavidades resonantes de estructuras de diodos láser.

La realización de prototipos de diodos emisores de luz emitiendo en el azul a base de nitruros cúbicos fue demostrada desde finales de la década de los 90 [10, 11, 12]. Sin embargo, el desempeño de estos diodos de unión p-n ha sido bajo y su reproducibilidad ha sido difícil. Entre las causas de este bajo desempeño, se encuentran diversas limitaciones tecnológicas: la metastabilidad de la fase cúbica, la alta conductividad residual tipo n en películas de GaN, la activación eléctrica del dopante aceptor, bajo desempeño de contactos ohmicos para GaN dopado tipo p y la alta corriente de fuga en estos dispositivos. El origen de algunas de estas limitantes; por ejemplo el control de la pureza de fase, y la alta conductividad residual tipo n ha sido identificado y resuelto parcialmente [13], sin embargo, todavía resta por identificar y resolver muchos de los otros obstáculos para hacer viable la tecnología de los nitruros semiconductores en fase cúbica. En el caso particular del LED de unión p-n fabricado con GaN cúbico con emisión en el azul que reportamos en [11], las muestras consistieron de dos zonas; una rica en Ga y otra rica en N. Se

obtuvo electroluminiscencia y característica I(V) rectificante solamente para diodos fabricados en la zona rica en Ga. Por otro lado, de la característica I(V) también se observó una alta densidad de corriente de fuga y pequeño voltaje de ruptura en polarización inversa. Para el desarrollo de dispositivos fabricados con nitruros cúbicos es necesario entender el origen de las causas que provocan el bajo desempeño y/o la falla de tales dispositivos. El propósito del presente trabajo es contribuir con una explicación sobre las causas que provocan la alta corriente de fuga en polarización inversa de diodos emisores luz fabricados con nitruros semiconductores cúbicos.

## II: PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL

Para el presente estudio, se creó una muestra similar a la estructura de unión p-n [n-GaN/p-GaN/i-GaN/3C-SiC] reportada en [11] por epitaxia por haces moleculares con fuente de plasma de N generado por radiofrecuencia (PA-MBE). Los sustratos utilizados consisten de películas de 3C-SiC de 3  $\mu\text{m}$  de espesor, depositados por CVD sobre Si(100). Durante el crecimiento de la estructura de unión p-n el sustrato se mantuvo fijo para obtener una zona de material rico en Galio y otra zona adyacente de material rico en N. Se crecieron además películas gruesas (1.5  $\mu\text{m}$ ) de GaN en condiciones estequiométricas; una dopada con Si (n-GaN:  $5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ), otra dopada con Mg (p-GaN:  $3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ) y otra no intencionalmente dopada (i-GaN). La concentración absoluta de impurezas en películas de GaN fue determinada por espectroscopia de masas de iones secundarios (SIMS) utilizando un sistema CAMECA modelo IMS-5F. Utilizando las imágenes tomadas por el microscopio iónico del sistema SIMS en modo Resistive Anode Encoder (RAE) durante la medición de los perfiles de impurezas detectamos además la presencia de precipitados de impurezas no residuales en las películas i-GaN. La caracterización estructural de las películas realizó por microscopía electrónica en transmisión (TEM) utilizando un microscopio JEOL 4000X operado a 400kV.

## III: RESULTADOS Y DISCUSION

La corriente de fuga  $I_R$  en diodos de unión p-n se define por [14]:

$$I_R = AJ_A + PJ_P \quad (1)$$

donde  $J_A$  es la componente de densidad corriente de fuga en el bulto y  $J_P$  la componente de densidad de corriente de fuga superficial, A el área y P el perímetro de la unión.

Como es conocido, la corriente de fuga puede ser resultado de los procesos de generación-recombinación en la región de agotamiento de la unión o por tuneamiento asistido por niveles profundos.

En este estudio abordaremos solamente el análisis de la componente de corriente de fuga en el bulto. Algunos grupos de investigación [15, 16] han sugerido que los defectos estructurales y en particular las dislocaciones pueden jugar un papel importante en el mecanismo de corriente de fuga. Hsu et al., [17] evidenciaron por primera vez la conducción eléctrica a través de dislocaciones en diodos Schottky fabricados de GaN hexagonal. Por otro lado, en un estudio de corriente de fuga en diodos de unión p-n fabricados a base de Ge-Si/Si, Ross et al. [18] reportaron que el proceso de generación-recombinación no explica el modelo de corriente de fuga en el bulto sino más bien un mecanismo de creación de defectos puntuales y/o difusión de metales hacia las dislocaciones durante la formación de estos defectos. En [4] reportamos que en el caso de películas de GaN cúbico, la densidad de dislocaciones disminuye con el espesor de la película epitaxial y por lo tanto se reduce la probabilidad de conducción eléctrica parásita a través de dislocaciones. Esto, en general ocurre cuando la heteroepitaxia de nitruros cúbicos se realiza sobre sustratos cuya superficie es lisa a escala atómica pues la densidad de fallas de apilamiento se reduce por auto-aniquilación; ya que las fallas de apilamiento se encuentran sobre los planos {111}, cuando se produce el encuentro de dos de ellas pueden anularse y dar lugar a una dislocación en el plano perpendicular al de las fallas de apilamiento, es decir en los planos {110}. Sin embargo, como se ilustra en la figura 1, cuando el sustrato contiene dislocaciones emergentes, éstas cruzan la interfaz y multiplican la densidad de defectos estructurales en la película de GaN. Ante este escenario, de acuerdo con lo reportado por Hsu et al [17] uno puede suponer la presencia de canales de conducción eléctrica verticales a través de las dislocaciones. Por otro lado, cuando la heteroepitaxia se realiza sobre sustratos rugosos, no se produce el fenómeno de auto-aniquilamiento de fallas de apilamiento y por lo tanto éstas pueden emerger en la superficie de la película de GaN o generar dislocaciones a espesores más allá del reportado en [4].

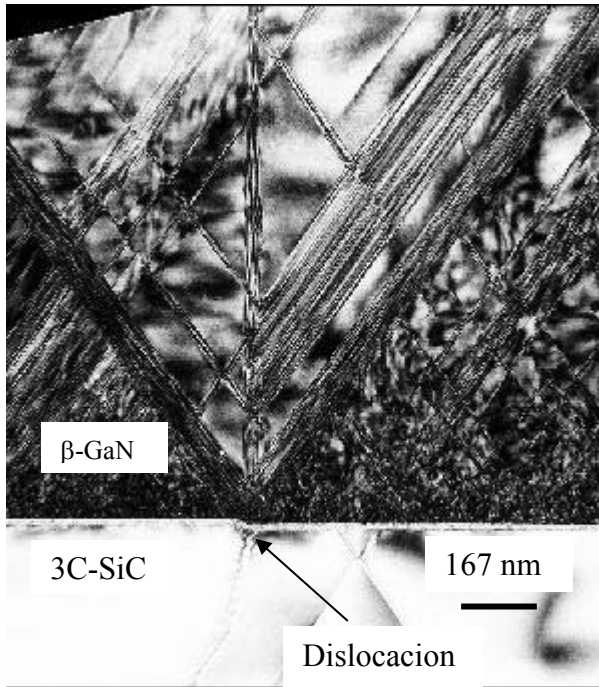


Figura 1. Imagen TEM en resolución convencional de una estructura i- GaN crecida sobre 3C-SiC(001) mostrando el efecto de dislocaciones provenientes del sustrato. Nótese los paquetes de fallas de apilamiento generadas por la dislocación emergente.

La presencia de defectos estructurales puede también afectar drásticamente la incorporación intencional de impurezas utilizadas para modular la conductividad de películas activas de dispositivos. Cuando se tiene un cristal perfecto, uno puede predecir la concentración de impurezas  $D$  de acuerdo al modelo propuesto por Neugebauer et al., [19] y Bernardini et al., [20]:

$$D = N_{sit} \exp\left(\frac{E_f}{k_B T}\right) \quad (2)$$

donde  $N_{sit}$  es el número de sitios disponibles a la incorporación en la red cristalina del GaN,  $E_f$  la energía de formación,  $k_B$  la constante de Boltzmann y  $T$  la temperatura.

Así, siguiendo este modelo, uno encuentra que los dos dopantes más usados en la tecnología de GaN (Silicio y Magnesio) se incorporan preferencialmente en el sitio de menor energía, es decir, en sitio de Galio [19 – 21] en condiciones de crecimiento apropiadas. De esta manera el  $Si_{Ga}$  da como resultado GaN de conductividad tipo n y el  $Mg_{Ga}$  resulta GaN de conductividad tipo p.

Recientemente Schmidt et al., [22] reportaron que las fallas de apilamiento inducen la

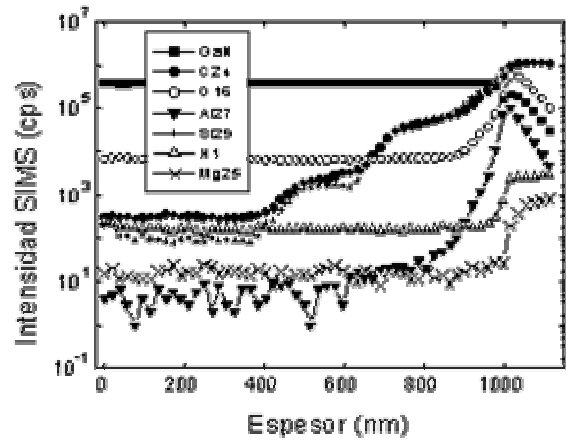


Figura 2. Perfil SIMS típico mostrando la concentración química de impurezas residuales (O, C, Al y Si, Mg y H) en películas i-GaN. Note que los perfiles alcanzan el nivel mínimo de detección ( $\sim 10^2$  cps) a una profundidad de aproximadamente 600nm desde la interfaz GaN/3C-SiC.

segregación de impurezas hacia los sitios de falla de apilamiento, es decir que las fallas de apilamiento presentan un comportamiento similar al de las dislocaciones [23, 24]. Todavía no es claro si las impurezas segregadas a lo largo de la línea de dislocación están eléctricamente activas [o desactivadas [23, 25]. Sin embargo, la alta conductividad tipo n observada mediante mediciones de efecto Hall en películas delgadas no intencionalmente dopadas de GaN hexagonal [26] o de GaN y de AlN cúbico (éste último siendo un aislante) [13] donde la densidad de fallas de apilamiento y de dislocaciones es muy elevada sugiere que las impurezas y otros defectos puntuales en estos defectos estructurales están eléctricamente activos y por lo tanto pueden formar canales de conducción eléctrica, lo cual es consistente con los resultados reportados por Hsu et al., [17]. Entonces, uno puede suponer la existencia de trayectorias de conducción eléctrica parásita siguiendo los planos cristalográficos de fallas de apilamiento, es decir, hilos de conducción inclinados a  $54.74^\circ$  con respecto al plano {100}. Este modelo esta soportado por nuestros resultados sobre la variación de la concentración de impurezas residuales en películas de GaN cúbico. La figura 2 presenta un perfil SIMS de impurezas residuales de la película i-GaN. Como puede notarse de la figura 2, la concentración relativa de impurezas residuales varía de manera diferente según el tipo de impureza: para el H y el Mg, se obtienen perfiles abruptos cerca de la interfaz mientras que para el O, C, Si y Al los perfiles descienden gradualmente

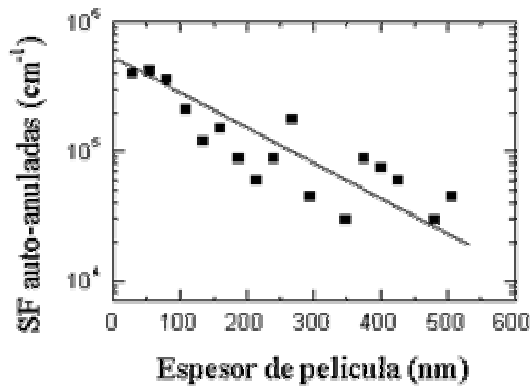


Figura 3. Variación de la densidad de fallas de apilamiento por unidad de longitud auto-anuladas en función del espesor de la película  $\text{i-GaN}$  según referencia [4]. Esta curva fue obtenida contando el aniquilamiento de fallas de apilamiento en un extensión de 700nm de ancho por 1000 nm de altura de imágenes TEM en cross-section de películas de  $\text{GaN}$  cúbico sobre  $\text{SiC}$  cúbico.

hacia el bulto de la película de  $\text{GaN}$  y alcanzan el nivel mínimo de detección en SIMS ( $\sim 10^2$  cps) a un espesor de alrededor de 600 nm. Este espesor donde la concentración de impurezas residuales (O, C, Si y Al) alcanza el umbral de detección en SIMS coincide con el espesor al cual la disminución de la densidad de fallas de apilamiento alcanza su mínimo (ver figura 3), podemos entonces, atribuir este comportamiento de la distribución de impurezas residuales en películas  $\text{i-GaN}$  a un proceso de difusión asistido por fallas de apilamiento. Para indagar más en el estudio de la difusión de impurezas residuales hacia el bulto de la película de  $\text{GaN}$  cúbico, realizamos un estudio de imageneología en tiempo real de la distribución de los iones mediante el microscopio iónico del sistema SIMS. La figura 4 presenta una serie de 3 imágenes de la distribución del ión C-24 a diferentes profundidades del bulto de la película  $\text{i-GaN}$ . Puede verse del contraste de esta figura (ver zonas blancas en las imágenes), la acumulación de iones C-24 solo en ciertos lugares de la película, lo que indica la presencia de precipitados de esta impureza. Otra característica que puede notarse de la figura 4 es que a medida que uno se aproxima a la interfaz película-substrato, la densidad de precipitados se incrementa y al mismo tiempo, los precipitados van adquiriendo un cierto arreglo o alineamiento. Puesto que se conoce la orientación de la película epitaxial uno puede identificar que el alineamiento de los precipitados coincide con los planos  $\{110\}$ . Entonces, relacionando la distribución de dislocaciones en los planos  $\{110\}$  con la

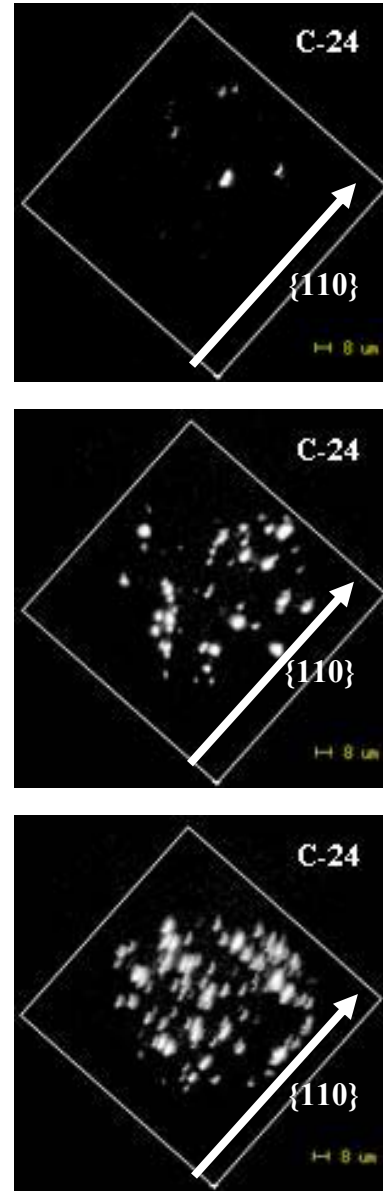


Figura 4. Imagen SIMS en modo RAE mostrando la distribución de precipitados de Carbono a diversas profundidades de la película  $\text{i-GaN}$ : (a) cerca de la superficie, (b) a profundidad intermedia y (c) cerca de la interfaz  $\text{GaN-3C-SiC}$ . El Carbono proviene de la superficie del substrato  $\text{SiC}(001)$ . Un comportamiento similar es observado para las impurezas O, Si y Al.

distribución de precipitados uno puede inferir la existencia de un proceso de segregación de impurezas hacia las dislocaciones generadas por cruzamiento de las fallas de apilamiento.

Este fenómeno de atrapamiento de impurezas residuales en principio es benéfico pues bastaría con crecer películas colchón suficientemente gruesas para reducir su

concentración y a la vez su efecto nocivo en la conductividad residual de películas no intencionalmente dopadas o la compensación de impurezas (principalmente aceptoras) incorporadas intencionalmente.

En películas intencionalmente dopadas (n-GaN o p-GaN) con capa colchón gruesa en general, raramente se observa la presencia de precipitados de impurezas intencionalmente incorporadas, excepto cuando se rebasa la solubilidad sólida de estas impurezas en GaN como ha sido reportado en el caso de GaN hexagonal [27].

Mediciones de TEM en la estructura de unión p-n muestran que la densidad de fallas de apilamiento para la zona de la muestra de material rico en N es mas alta que para la zona de material rico en Ga. La mayoría de estas fallas provienen de la interfaz película-substrato y emergen en las zonas de los contactos ohmicos de los diodos. Ante tan fuerte densidad de defectos en esta zona del material vistos por medio de TEM, es difícil distinguir si nuevas fallas de apilamiento son formadas en el bulto de de la estructura de unión p-n. Sin embargo, no se descarta, que en esta zona de la muestra se formen defectos durante el crecimiento de las películas de GaN pues en general, bajo condiciones de crecimiento ricas en N, el frente es rugoso y propicia la formación de tales defectos estructurales, lo que se manifiesta como un incremento en la densidad de dominios de fase hexagonal [13]. Una mayor densidad de defectos estructurales implica una mayor densidad de centros de recombinación no radiativa y puede ser una causa de no electroluminiscencia en diodos de esta zona de la muestra de unión p-n de GaN cúbico.

#### IV: CONCLUSIONES

En resumen, presentamos evidencia de la difusión de impurezas residuales asistido por fallas de apilamiento que resultan de la relajación del esfuerzo debido al desacople de red entre la película epitaxial GaN cúbico y el substrato SiC(001). La difusión a su vez provoca la formación de precipitados de impurezas residuales cuya densidad va disminuyendo con el espesor de la película epitaxial. Cuando la heteroepitaxia se realiza sobre substratos rugosos o sobre substratos con dislocaciones emergentes, las dislocaciones y las fallas de apilamiento emergen a la superficie de las películas de GaN, Estos defectos también se localizaron en las zonas por debajo de los contactos ohmicos de los diodos de unión p-n. En concordancia con otros resultados experimentales reportados en la literatura que indican conducción eléctrica a través de defectos estructurales. Proponemos dos mecanismos de conducción: uno

vertical a lo largo de las líneas de dislocación y otro inclinado a lo largo de los planos de las fallas de apilamiento. Este modelo es una explicación plausible a la corriente de fuga observada en diodos de unión p-n fabricados a base de GaN cúbico.

#### V: RECONOCIMIENTOS

Las diferentes caracterizaciones de películas epitaxiales de nitruros fueron desarrolladas durante la estancia de estudios de doctorado en el CEA-Grenoble Francia. El autor agradece las fotografías de TEM y fotografías de SIMS proporcionadas por el grupo de "Nanophysique et semiconducteurs" DRFMC/CEA-Grenoble Francia así como el financiamiento de la estancia por parte del CONACYT-México.

#### REFERENCIAS

- [1] Eric Altendorf, Laser Focus World online, 3 pages, April 2002.
- [2] S. Nakamura, M. Senoh, S. Nagahama, N. Iwasa, T. Yamada, T. Matsushita, H. Kiyoku, Y. Sugimoto, T. Kosaki, H. Umemoto, M. Sano, and K. Chocho, Appl. Phys. Lett. 72, 2014 (1998).
- [3] Lester F. Eastman and Humees K. Mishra, IEEE Spectrum, 5 pages, 29 may 2002.
- [4] E. Martínez-Guerrero, E. Bellet-Amalric, L. Martinet, G. Feuillet, B. Daudin, H. Mariette, P. Holliger, C. Dubois, C. Bru-Chevallier, P. Aboughe-Nze, T. Chassagne, G. Ferro and Y. Monteil, J Appl. Phys. 91, 4983 (2002).
- [5] H. Okumura, H. Hamaguchi, T. Koizumi, K. Balakrishnan, Y. Ishida, M. Arita, S. Chichibu, H. Nakanishi, T. Nagatomo and S. Yoshida, J Cryst. Growth 189/190, 390 (1998).
- [6] K.H. Ploog, O. Brandt, H. Yang, B. Yang, and A. Trampert, J Vac. Sci. Technol. -B, 16, 2229 (1998)
- [7] D.J. As, D. Schikora, A. Greiner, M. Lübbbers, J. Mimkes, and K. Lischka, Phys. Rev. B, 54, R11118, (1996).
- [8] E. Martinez-Guerrero, B. Daudin, G. Feuillet, H. Mariette, Y. Genuist, S. Fanget, A. Philippe, C. Dubois, C. Bru-Chevallier, G. Guillot, P. Aboughe-Nze, T. Chassagne, Y. Monteil H. Gamez Cuatzin, and J. Tardy. Mater. Sci Eng. B 82, 59 (2001)
- [9] D.P. Xu, H. Yang, J.B. Li, D.G. Zhao, S.F. Li, S.M. Zhuang, R.H. Wu, Y. Chen and G. H. Li, Appl. Phys. Lett. 76, 3025 (2000)
- [10] D. Xu, L.X. Zheng, J.B. Li, X.J. Wang, D.P. Xu, Y.T. Wang and X.W. Xu, Appl. Phys. Lett. 74, 2498 (1999).
- [11] H. Gamez-Cuatzin, J. Tardy, P. Rojo-Romeo, A. Philippe, C. Bru-Chevallier, A. Soufi, G. Guillot, E. Martinez-Guerrero, G. Feuillet, B. Daudin, P. Aboughe-Nze and Y. Monteil, Phys. Stat. Sol. 176, 131 (1999)
- [12] D.J. As, A. Richter, J. Busch, M. Lübbbers, J. Mimkes, and K. Lischka, Appl. Phys. Lett. 76, 13 (2000).
- [13] E. Martínez Guerrero, PHD thesis (02ISAL.0009), INSA-Lyon, France, 2002.
- [14] A. Poyai, E. Simoen, and C. Claeys, J. Electrochemical Society, 146(3), 1151 (1999).
- [15] E.J. Miller, X.Z. Dang, and E.T. Yu, J. Appl. Phys., 88, 5951 (2000).
- [16] P. Kozodoy, J.P. Ibbetson, H. Marchand, P.T. Fini, S. Keller, J.S. Speck, S.P. Denbaars, and U.K. Mishra, Appl. Phys. Lett., 73(7), 975 (1998).

- [17] J.W.P. Hsu, M.J. Manfra, D.V. Lang, S. Richter, S.N.G. Chu, A.M. Sergent, R.N. Kleiman, L.N. Pfeiffer, and R.J. Molnar, *Appl. Phys. Lett.* 78(12), 1685 (2001).
- [18] F.M. Ross, R. Hull, D. Bahnck, J. C. Bean, L.J. Peticolas, and C.A. King, *Appl. Phys. Lett.*, 62(12), 1426 (1993).
- [19] J. Neugebauer, and Chris. G. Van de Walle, *J. Appl. Phys.* 85, 3003 (1999).
- [20] F. Bernardini, V. Fiorentini, and A. Bosin, *Appl. Phys. Lett.* 70, 2990 (1997).
- [21] I. Gorczyca, A. Svane, and N.E. Christensen, *Phys. Rev. B* 61, 7494 (2000).
- [22] T.M. Schmidt, J.F. Fausto, and A. Fazio, *Appl. Phys. Lett.* 78, 907 (2001).
- [23] A. Maiti, T. Kaplan, M. Mostoller, M.F. Chisholm, S.J. Pennycook, and S.T. Pantelides, *Appl. Phys. Lett.* 70, 336 (1997).
- [24] J.E. Northrup, *Appl. Phys. Lett.* 78(16), 2288 (2001).
- [25] J. Elsner, R. Jones, P.K. Sitch, V.D. Porezag, M. Elstner, Th. Frauenheim, M.I. Heggie, S. Öberg, and P.R. Bridon, *Phys. Rev. Lett.* 79, 3672, (1997).
- [26] W. Götz, L.T. Romano, J. Walker, N.M. Johnson, and R.J. Molnar, *Appl. Phys. Lett.* 72, 1214 (1998).
- [27] M. Hansen, L.F. Chen S.H. Lim, S.P. DenBaars, and J.S. Speck, *Appl. Phys. Lett.* 80, 2469 (2002).