

UNIDAD ZACATENCO DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA ELÉCTRICA SECCIÓN ELECTRÓNICA DEL ESTADO SÓLIDO

"Estabilidad de la pasivación por Hidrógeno de defectos en HEMTs AlGaN/GaN"

TESIS

Que presenta:

ALMA SOFÍA ARREOLA PINA

Para obtener el grado de:

DOCTORA EN CIENCIAS

EN LA ESPECIALIDAD DE INGENIERÍA ELÉCTRICA

Director de Tesis:

DR. JAIME MIMILA ARROYO

CIUDAD DE MÉXICO

ABRIL 2021

Agradecimientos

A Dios, por haberme dado la oportunidad y los medios para llegar hasta aquí.

Agradezco profundamente a mis padres y familiares por todo el apoyo y cariño que me brindaron durante este proceso.

A mis amigos y compañeros de la SEES, por su compañía y motivación, especialmente a Esteban Díaz, Mauricio Espinoza, Angélica Hernández y Laura Valdez.

A mi amigo Antonio Cerna, por continuar con su apoyo y paciencia a través de los años.

Al Dr. Iván Miranda, por sus consejos y motivación, y por siempre ser un ejemplo a seguir como una excelente persona y profesionista.

A mi asesor, el Dr. Jaime Mimila, por haberme recibido como estudiante y por haber compartido su experiencia y conocimientos conmigo.

A los doctores Alejando Ávila, Víctor Cabrera, Ramón Peña y Gabriel Romero-Paredes por sus aportaciones para mejorar este manuscrito.

A Rubén Huerta Cantillo, por su incalculable apoyo en el laboratorio y por sus consejos.

Agradezco la asesoría académica recibida por parte de los doctores Arturo Escobosa y Esteban Díaz. Así mismo, agradezco el apoyo técnico brindado por Miguel Galván, Angélica Hernández, Martín Jiménez, Miguel Luna, Georgina Ramírez, Dr. Jorge Roque (LANE), Dr. Víctor Sánchez y Adolfo Tavira.

A los doctores María de la Luz Olvera y Alfredo Reyes, por su orientación académica y personal.

A Yesenia Cervantes, Mónica Davar, Erika Serrano y Beatriz Urrutia, por su apoyo administrativo.

Al **Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT)** por el apoyo económico proporcionado (**CVU 420325**).

Toda información reproducida de manera total o parcial en el presente trabajo ha sido utilizada únicamente con fines académicos y pertenece a sus autores correspondientes.

All the information totally or partially reproduced in this work has been used for academic purposes only and belongs to its respective authors.

⊳ Contenido

Agradecimientos	i
▷ Resumen	3
▷ Abstract	4
▷ Introducción	5
▷ Objetivo	6
▷ 1. El GaN, la heteroestructura AlGaN/GaN y el HEMT AlGaN/GaN	7
1.1 Introducción	7
1.2 Propiedades del nitruro de galio	7
1.2.1 Propiedades físicas intrínsecas	8
- Estructura cristalina	8
- Bandas de Energía	9
1.2.2 Defectos Puntuales y Extendidos	10
1.2.3 Movilidad y Concentración experimentales de portadores	14
1.3 Impurificación controlada del GaN	15
1.4 Sustratos extrínsecos más comunes	16
1.5 La heteroestructura AlGaN/GaN	19
1.5.1 El Al _x Ga _{1-x} N (Wurtzita) y la heteroestructura AlGaN/GaN	19
1.5.2 Dispersión de portadores en el gas bidimensional de electrones	21
1.5.3 Origen y localización del gas bidimensional de electrones	24
1.6 EI HEMT AIGaN/GaN	28
1.6.1 Proceso de elaboración del HEMT AlGaN/GaN	28
1.6.2 Principio de operación del HEMT AlGaN/GaN	30
1.7 Resumen	37
P 2. Hidrógeno en los Semiconductores, GaN, AlGaN/GaN y HEMT	46
2.1 Introducción	46
2.2 Hidrógeno en Semiconductores	46
2.2.1 Hidrógeno en GaN	49
2.3 Hidrógeno en la heteroestructura AlGaN/GaN	57
2.4 Hidrógeno en el transistor HEMT AlGaN/GaN	61
2.4.1 Hidrógeno en el HEMT fotoconductor	61

	2.4.2 Hidrógeno en el transistor HEMT AlGaN/GaN	62
	2.5 Resumen	
⊳	3. Desarrollo experimental	67
	3.1 Propuesta experimental	67
	3.2 Preparación de muestras	68
	3.2.1 Estudio por SIMS de la deuteración	71
	3.3 Estudio de la morfología de la muestra L893	73
	3.3.1 Microscopía de Fuerza Atómica	73
	3.3.2 Microscopía Electrónica de Barrido	75
	3.3.3 Propiedades estructurales de la muestra L893 (XRD)	77
	- Difractograma	78
	- Omega-Scan (XRD)	82
	3.3.4 Resumen: Propiedades de la estructura AlGaN/GaN	85
	3.4 Recocidos y caracterización eléctrica de HEMTs AG y Deuterados	86
	3.4.1 Curvas de salida	89
	3.4.2 Función de Transferencia	91
	- Transconductancia máxima (g _m)	91
	3.4.3 Transporte de carga en el 2DEG (Curva I-V con compuerta flotante)	92
	3.4.4 Propiedades de Transporte de la compuerta	97
	3.4.5 Capacitancia-Voltaje	101
	3.4.6 Discusión de Resultados de los recocidos y caracterización de HEMTs	102
⊳	4. Conclusiones y trabajo a futuro	112
	4.1 Conclusiones	112
	4.2 Trabajo a Futuro	112
⊳	ANEXO	113
	Publicación de resultados	113

▷ Resumen

El transistor de alta movilidad electrónica, HEMT (High Electron Mobility Transistor), AlGaN/GaN/Si se caracteriza por poseer un gas bidimensional de electrones (2DEG) que constituye el canal de conducción. Este grupo de trabajo demostró que su deuteración mejora sus propiedades de transporte de carga debido, principalmente, al incremento en la concentración de portadores en el 2DEG asociada a la pasivación de defectos aceptores en la región de las dislocaciones de borde, presentes en el AlGaN y en la superficie de la estructura, resultado fuertemente atractivo para ser aplicado en la manufactura de este dispositivo. Sin embargo, la estabilidad de dicha pasivación, indispensable para determinar sus aplicaciones, no ha sido estudiada. Por ello, en este trabajo ésta se evalúa en HEMTs deuterados (DEUT) y se compara con la de dispositivos idénticos no deuterados (AG).

Los transistores estudiados (AG y DEUT), de estructura GaN/AlGaN/GaN/Si crecida por la técnica de haces moleculares, provienen de una misma oblea, que fue cortada a la mitad antes del último paso tecnológico; el depósito de la compuerta. Una mitad fue deuterada mediante la técnica de Plasma de RF remoto de baja potencia a 0.1 W/cm², 350°C, durante 30 min. Posteriormente, en ambas mitades se depositó, simultáneamente, la compuerta para finalmente ser cortadas en dados, cada dado conteniendo múltiples transistores y otras estructuras no utilizadas en este trabajo.

Para el estudio de la estabilidad de la deuteración, dados "AG" Y "DEUT" fueron sometidos simultáneamente a una serie de recocidos isócronos (1hr) en ambiente de nitrógeno a temperaturas entre 300°C a 700°C con incrementos de 100°C, extrayendo sus parámetros de transporte de carga antes del primer recocido y después da cada uno. La caracterización comprende; curvas de salida, función de transferencia, curvas I-V con compuerta flotante y curva I-V compuerta-fuente (barrera Schottky), así como la distribución de electrones libres en el 2DEG. La evolución de los parámetros de los HEMTs deuterados se compara con la de los as-grown, obteniendo que, después del recocido a 700°C, los transistores as-grown se degradan más que los deuterados. El origen de la degradación de los as-grown se localiza en la interfase AlGaN/GaN, contra la cual se confina el 2DEG. El mecanismo es térmicamente estimulado con diferentes energías de activación para cada tipo de transistor; 1.37 eV para los as-grown y 0.63 eV para los deuterados. Los factores preexponenciales son 1.6x10⁶ para los as-grown y 497 para los deuterados. De los resultados, se concluye no sólo que la deuteración es estable en el rango de temperaturas estudiado, sino que también incrementa el desempeño y la robustez de este HEMT.

Abstract

The AlGaN/GaN/Si High Electron Mobility Transistor (HEMT) is characterized by a twodimensional electron gas (2DEG) that constitutes its conduction channel. This workgroup has previously demonstrated that its deuteration improves its charge transport properties mainly due to an increase in the 2DEG carrier concentration. This has been attributed to the passivation of acceptor defects located in the region of threading dislocations that exist in the AlGaN layer as well as in the surface of the structure. Such result is highly attractive for the manufacturing of this device. However, the stability of the passivation, crucial for determining its potential applications, has not been studied yet. Therefore, in this work, such stability is evaluated in deuterated HEMTs (DEUT) and is compared with that of otherwise identical nondeuterated devices (AG).

The studied transistors (AG and DEUT) have a GaN/AlGaN/GaN/Si structure that was grown by molecular beam epitaxy. All of them come from the same wafer, which was cut in two halves before the last technological step: the deposition of the gate. One half was deuterated using the low power remote RF Plasma technique at 0.1 W/cm², 350°C, for 30 min. Subsequently, the gate of the transistors was simultaneously deposited onto both halves. Finally, the wafer was cut into dices, each of them containing multiple transistors and other structures that were not used in this work.

To study the stability of the deuterated samples, "AG" and "DEUT" dices were simultaneously subjected to isochronous anneals (1hr) in nitrogen atmosphere at temperatures from 300°C up to 700°C, with a step of 100°C, obtaining their charge transport parameters before and after each anneal. The characterization comprised obtaining: Output Curves, Transfer Function, I-V Curves with floating gate and I-V Gate-Source curve (Schottky barrier), as well as the 2DEG free electron distribution. The evolution of the parameters of the deuterated HEMTs was compared with that of the as-grown devices, finding that, after the anneal at 700°C, the as-grown HEMTs showed a higher degradation than the deuterated ones. The origin of the degradation of the as-grown transistors is located at the AlGaN/GaN interface, against which the 2DEG is confined. The degradation mechanism is a thermally stimulated one, with different activation energies for each type of transistor; 1.37 eV for the as-grown and 0.63 eV for the deuterated transistors, respectively. From the results presented herein, it is concluded that not only is the deuteration stable in the studied temperature range, but it also improves the performance and increases the robustness of this HEMT.

Introducción

El nitruro de galio (GaN) es un semiconductor cuyas propiedades, como ancho de banda grande, alto campo eléctrico de ruptura, alta velocidad de saturación y movilidad de portadores, lo convierten en un material ampliamente utilizado en la elaboración de dispositivos optoelectrónicos y de potencia. Por otra parte, la heterounión AlGaN/GaN se caracteriza por tener un gas bidimensional de electrones (2DEG o TEG; two-dimensional electron gas) contenido en su totalidad en el GaN y confinado contra la interfase. Éste posee una alta concentración y movilidad de electrones, del orden de 10¹³/cm² y 2000 cm²/Vs, respectivamente [1]. Este gas bidimensional forma parte del transistor de alta movilidad electrónica (HEMT), en el que constituye el canal de conducción. Sin embargo, debido al uso de sustratos extrínsecos para crecer esta heteroestructura, las películas que la constituyen contienen una elevada densidad de dislocaciones, originadas por el desacople entre los parámetros de red del GaN y el sustrato, degradando sus propiedades físicas, así como el desempeño del HEMT. Estas películas, crecidas sin la adición expresa de impurezas donadoras o aceptoras, resultan de conductividad n, cualquiera que sea la técnica de crecimiento, con concentraciones típicas de 10¹⁶ cm⁻³. Conociendo que el hidrógeno es capaz de pasivar algunos defectos en semiconductores, este grupo de la SEES ha realizado un estudio integral del efecto de la hidrogenación de: películas aisladas de GaN, de la estructura del transistor, es decir, de la heteroestructura AlGaN/GaN, y en transistores HEMT con longitud y ancho de compuerta de 1.00 µm y 100.0 µm. Tal estudio revela que la introducción de hidrógeno en películas de GaN, incrementa la movilidad de los electrones y reduce su concentración, aumenta el rendimiento de su fotoluminiscencia y reduce la fotoconductividad persistente, entre otras mejoras. En la estructura HEMT y en el HEMT, mejora las propiedades de transporte de carga, debido a un importante aumento en la concentración de portadores en el 2DEG. Así mismo, homogeneiza el desempeño de los HEMTs en la oblea, inicialmente muy irregular. En el HEMT, específicamente, la introducción de deuterio, isótopo del hidrógeno, incrementa la corriente de drenador y la transconductancia, disminuye el voltaje de saturación, la resistencia de encendido, la corriente de fuga de drenador en apagado y la corriente de fuga de la barrera de compuerta, entre otros parámetros. Estas mejoras fueron atribuidas a la pasivación de estados aceptores en la región de las dislocaciones de borde, lo que conlleva a un incremento en la concentración de electrones libres en el 2DEG, sin modificar su movilidad [2]. En el presente trabajo, este grupo explora la estabilidad y confiabilidad de HEMTs deuterados y la compara con la de HEMTs idénticos, pero no deuterados.

▷ Objetivo

Determinar la estabilidad térmica de la pasivación de defectos aceptores contenidos en la región de las dislocaciones de borde del transistor HEMT, resultado de su deuteración. Como se mencionó anteriormente, la deuteración de este transistor, en las condiciones adecuadas, mejora considerablemente varios de sus parámetros característicos de desempeño.

Metodología:

Se estudiaron transistores de estructura idéntica, en su estado bruto de crecimiento: as-grown (AG), y deuterados (DEUT), recociéndolos simultáneamente de forma acumulativa, incrementando la temperatura de recocido hasta observar un deterioro cuantificable en cualquier tipo de dispositivo. Los transistores fueron caracterizados eléctricamente en su estado inicial y tras cada uno de los recocidos a los que se sometieron. La evolución de los parámetros de cada tipo de transistor con respecto a la temperatura de recocido fue comparada para establecer cuál se degrada con mayor rapidez, evaluando si algún tipo de transistor en particular presentó una mayor degradación, o si ambos se degradaron en la misma proporción. Finalmente, se propuso un probable origen del deterioro observado, relacionándolo con la estabilidad de la deuteración.

Referencias

^[1] Ambacher, O., et al. "Two dimensional electron gases induced by spontaneous and piezoelectric polarization in undoped and doped AlGaN/GaN heterostructures." Journal of applied physics 87.1 (2000): 334-344.

^[2] Hernandez Gutierrez C.A. Tesis de Maestría: "Efecto de Deuterar HEMTs de estructura Ni/AlGaN/GaN/Si de 1.0µm de compuerta en sus propiedades de transporte." Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN, Dpto. de Ing. Eléctrica Sec. de Electrónica del Estado Sólido, 2013.

▶ 1. El GaN, la heteroestructura AlGaN/GaN y el HEMT AlGaN/GaN

1.1 Introducción

En este capítulo se resumen las principales propiedades físicas del nitruro de galio, GaN; ancho de banda, movilidad electrónica, campo eléctrico de ruptura, estructura cristalina y bandas de energía, varias de las cuales lo hacen un semiconductor muy atractivo para la fabricación de dispositivos optoelectrónicos y de potencia. Así mismo, se describen los principales defectos intrínsecos del material junto con los inconvenientes derivados del alto costo y dificultad para el crecimiento de sustratos nativos, que orillan al uso de sustratos no nativos (de otros materiales), a pesar de las diferencias entre sus constantes de red y coeficientes de expansión térmica. Se mencionan ventajas y desventajas de los tres sustratos más utilizados para el crecimiento del GaN. Se presenta también la heterounión AlGaN/GaN y sus principales características, el posible origen del gas bidimensional de electrones que se forma espontáneamente en la interfase entre ambos materiales y sus mecanismos de dispersión de portadores más importantes. Este gas se encuentra totalmente contenido en el GaN y se destaca por tener una elevada densidad de portadores con una alta movilidad. Finalmente, se presenta el Transistor de Alta Movilidad Electrónica, HEMT (High Electron Mobility Transistor), basado en dicha heterounión, y se explican los aspectos básicos de su fabricación y funcionamiento.

1.2 Propiedades del nitruro de galio

El GaN es un semiconductor de ancho de banda directa (3.44 eV @ RT), campo eléctrico de ruptura elevado (3.3x10⁶ Vcm⁻¹), alta velocidad de saturación (2.5x10⁷ cm/s) y movilidad de portadores (1200 cm²/Vs). Su gran estabilidad fisicoquímica permite que los dispositivos elaborados con este material operen convenientemente a altas temperaturas, aunque, por otro lado, dificulta algunos de los procesos tecnológicos requeridos en la elaboración de dispositivos. Su baja conductividad térmica por otra parte, al estar relacionada con la capacidad para disipar el calor generado, lo pone en desventaja con respecto a otros materiales de ancho de banda parecida, como el SiC [1]. A continuación, se resumen las principales propiedades físicas intrínsecas del GaN; estructura cristalina, estructura de bandas, propiedades ópticas y eléctricas.

1.2.1 Propiedades físicas intrínsecas

Las principales propiedades físicas del GaN se encuentran resumidas en la *Tabla 1.1*. En esta misma tabla, se presentan también, con fines comparativos, las propiedades del silicio, GaAs y Ga₂O₃.

	GaN	GaAs	Si	β-Ga ₂ O ₃
Ancho de banda prohibida a 300 K	E _g = 3.44 eV	1.42 eV	1.12 eV	4.7-4.9 eV
Campo eléctrico de ruptura	3.3x10 ⁶ V/cm	4x10 ⁵ V/cm	3x10 ⁵ V/cm	8x10 ⁶ V/cm
Velocidad de saturación	2.5x10 ⁷ cm/s	1x10 ⁷ cm/s	1x10 ⁷ cm/s	1.5x10 ⁷ cm/s
Movilidad de electrones a 300K	1200 cm²/Vs	8500 cm ² /Vs	1400 cm²/Vs	300 cm ² /Vs
Conductividad térmica	1.3 W/cm K	0.55 W/cm K	1.3 W/cm K	0.23 W/cm K [010]
Constante de red a 300 K	(Wurtzita) a=b=3.189 Å c=5.185 Å	(Zincblenda) 5.65 Å	(Zincblenda) 5.4 Å	a=12 Å b=3.0 Å c=5.8 Å
Coeficiente de expansión térmica	$\Delta a/a = 5.59 \times 10^{-6}/K$ $\Delta c/c = 3.17 \times 10^{-6}/K$	5.75x10 ⁻⁶ /K	2.6x10 ⁻⁶ /K	0.1x10 ⁻⁶ -1.7x10 ⁻⁶ /K

Tabla 1.1. Propiedades físicas del GaN, GaAs, Si y β-Ga₂O₃ [1-12]

- Estructura cristalina

El GaN cristaliza en la estructura Wurtzita (hexagonal) y en la estructura Zincblenda, la segunda bajo circunstancias y sustratos determinados [13]. Sin embargo, esta última no es estable en condiciones ambientales (presión y temperatura), por lo que no es muy utilizada para la elaboración de dispositivos. El GaN está conformado por planos de átomos de galio alternados con planos de nitrógeno a lo largo de la dirección c, como se ilustra en la *Figura 1.1*. Sus enlaces galio(catión)-nitrógeno poseen una componente iónica, lo que provoca que las subredes del Ga y del N se atraigan electrostáticamente, causando un desplazamiento de los átomos con respecto a la estructura ideal de la Wurtzita en la dirección c, produciendo una asimetría de los enlaces, dando lugar a dipolos locales. Su suma vectorial es diferente de cero en esa dirección, es decir que existe una polaridad espontánea intrínseca al material a lo largo del eje c, dirección (0001).



Figura 1.1. a) Estructura cristalina del GaN Wurtzita. b) Diferentes planos dentro de la estructura hexagonal [14].

- Bandas de Energía

La *Figura 1.2* muestra la gráfica de la energía del electrón en función del momento a lo largo de diferentes direcciones dentro de la primera zona de Brillouin, calculada por Fritsch et al. [15], en la que se observa que el mínimo de la banda de conducción y el máximo de la banda de valencia se encuentran ambos localizados en el punto Γ , correspondiente al origen (*k=0*) de la primera zona de Brillouin, es decir, que se trata de un semiconductor de banda directa.



Figura 1.2. Estructura de bandas del GaN Wurtzita calculada por Fritsch et al. [15].

Espectros de fotoluminescencia a baja temperatura (2K) muestran tres excitones; A: 3.4799 eV, B: 3.486 eV y C: 3.5025 eV [13], debido a que la banda de valencia del GaN está constituida por tres sub-bandas separadas, tal como se ilustra en la *Figura 1.3.b*: Γ_9 , Γ_7 superior y Γ_7 split-off (separada) [16]. Conforme a los cálculos de Jeon et. al [17], las masas efectivas de los huecos en Γ_9 (huecos pesados, m_{hh}^*), Γ_7 superior (huecos ligeros, m_{lh}^*) y Γ_7 split-off (m_{sh}^*) son $m_{hh}^* = 0.49m_0$, $m_{lh}^* = 0.43m_0$ y $m_{sh}^* = 0.59m_0$; evaluadas conforme a ($m_{\perp}^2 m_{\parallel}$)^{1/3}. La masa

efectiva de los electrones es $m_e^* = 0.2 \pm 0.02 m_0$. Por otra parte, la densidad de estados efectiva a temperatura ambiente es $N_V = 4.36 x 10^{19} cm^{-3}$ para estados en la banda de valencia, mientras que para la banda de conducción es $N_C = 2.3 x 10^{18} cm^{-3}$ [18].



Figura 1.3. Separación de bandas en la posición Γ (a) sin considerar el efecto del acoplamiento spin-orbita (b) Considerando el efecto del acoplamiento spin-orbita [16].

1.2.2 Defectos Puntuales y Extendidos

Considerando las masas efectivas antes dadas, el GaN debería tener una concentración de portadores intrínseca del orden de 10⁻¹⁰ cm⁻³ a temperatura ambiente [2]. Sin embargo, independientemente del método utilizado para su crecimiento, resulta de conductividad tipo-n, con concentraciones de electrones de entre 10¹⁵ (MOCVD) y 10²⁰ cm⁻³ (MBE) [19, 20], lo que necesariamente se debe a impurificación no intencional o defectos intrínsecos; vacancias, intersticiales, átomos en antisitio, etcétera, que se comportan como donadores. Por este motivo, en la literatura es común hacer referencia al GaN como uid-GaN (unintentionally doped GaN).

Diferentes defectos, puntuales y extendidos se encuentran presentes en el GaN. En cuanto a defectos puntuales, las vacancias de galio y nitrógeno son defectos nativos, cuya energía de formación y, por lo tanto, como se verá más adelante, la concentración en la que se incorporan al material depende de la posición del nivel de Fermi del GaN [21,22]. Las vacancias de galio, V_{Ga}, son defectos aceptores que pueden presentar tres diferentes estados de carga. Su energía de formación es muy alta en GaN tipo-p, por lo que su formación en este tipo de material es poco probable. En contraste, su energía de formación en GaN tipo-n es relativamente pequeña, constituyendo aceptores triples, V_{Ga}³⁻, compensando parcialmente los donadores presentes en el material. Éstas, estando ionizadas, constituyen centros dispersores que reducen la movilidad de los portadores. Modelos recientes indican que son sólo uno de los defectos que contribuyen a la banda amarilla observada en espectros de fotoluminiscencia

(~2.2-2.3 eV) [23]. Por otra parte, las vacancias de nitrógeno, V_N , actúan como donadores en GaN, y su energía de formación incrementa con el nivel de Fermi, por lo que su ocurrencia es poco probable en GaN tipo-n, descartándose como el defecto responsable de la impurificación no intencional. Estos defectos se presentan de manera abundante en GaN tipo-p, en el que compensan aceptores.

Otros defectos nativos como el nitrógeno intersticial, N_i , galio intersticial, Ga_i , y antisitios; Ga_N y N_{Ga} , también pueden ocurrir en el GaN, sin embargo, sus energías de formación son mucho mayores que las de las vacancias, por lo que su presencia en el material no es considerable [21].

Con respecto a defectos extrínsecos, actualmente se ha establecido confiablemente que el silicio y el oxígeno, introducidos de manera no intencional durante los procesos de crecimiento, son los donadores residuales que dan lugar a la conductividad tipo-n. El silicio sustitucional es una impureza anfótera en el GaN, pudiendo comportarse como aceptor cuando sustituye un átomo de nitrógeno, Si_N, o bien, como donador, cuando sustituye un átomo de galio, Si_{Ga}, siendo este último, el de formación más probable. La *Figura 1.4* muestra las energías de formación en función del nivel de Fermi del GaN para los defectos nativos V_{Ga} y V_N, y del Si_{Ga} y O_N; en la que se observa que los dos últimos, donadores poco profundos en GaN, tienen menores energías de formación en GaN tipo-n en comparación con los dos primeros [24,25].



Figura 1.4. Energía de formación para defectos nativos aceptores (V_N , V_{Ga}) y donadores (Si_{Ga} , O_N) en el GaN en función de la posición del nivel de Fermi del GaN respecto al máximo de la banda de valencia [24].

El carbono es otra impureza que generalmente se encuentra en películas crecidas por MOCVD. El C_{Ga} es un donador somero, mientras que, cuando se encuentra sustituyendo al nitrógeno, se comporta como aceptor [26]. Conforme a los cálculos de A.F. Wright [27], el

carbono intersticial, C_i, debe ser un donador profundo en GaN tipo-p, y un aceptor profundo en GaN tipo-n.

Debido al alto costo y disponibilidad limitada de sustratos nativos para el crecimiento de películas de GaN, se utilizan sustratos extrínsecos, es decir de otros materiales, como zafiro, silicio y carburo de silicio. La diferencia de parámetros de malla entre ambos materiales conduce a altas densidades de dislocaciones, del orden de 10⁶–10¹¹ cm⁻², impactando negativamente el desempeño de los dispositivos. Las dislocaciones de borde son el defecto extendido más común, especialmente en aquellas películas crecidas por MBE (Molecular Beam Epitaxy) [18]. Las dislocaciones de este tipo consisten en semi-planos atómicos faltantes (o adicionales) en la red, *Figura 1.5.a*, que contienen enlaces atómicos incompletos. Éstas se generan en la interfase del GaN con el sustrato, y se propagan, en su mayoría, alcanzando la superficie de la película o transmitiéndose a las películas siguientes.

El borde de una dislocación consiste en una línea de enlaces incompletos, conformando líneas de impurezas aceptoras que atrapan electrones libres para completar los enlaces sueltos. Lo anterior forma una línea de carga que da lugar a una barrera de energía potencial interconstruida, con su región de carga espacial asociada, constituyendo un mecanismo de dispersión altamente eficiente para los electrones, reduciendo considerablemente su movilidad [28, 29]. Lo anterior se ilustra en la Figura 1.5, en la que se representa la deformación local del borde de la banda de conducción ocasionada por una dislocación cargada (Figura 1.5.c) y por un conjunto de dislocaciones separadas (Figura 1.5.d). La presencia de dislocaciones también ha sido relacionada con el efecto fotoconductor persistente que presentan las películas de GaN [30,31]: los electrones atrapados en las dislocaciones son transferidos a la banda de conducción por los fotones incidentes (incluso de energías menores al ancho de banda prohibida del GaN), disminuyendo la carga y la altura de la barrera, incrementando la movilidad de los portadores. Cuando la fuente de iluminación es retirada, conforme los electrones son capturados nuevamente por la dislocación, la barrera de energía se incrementa proporcionalmente, siendo cada vez mayor la energía que los electrones deben tener para superarla y ser capturados. La probabilidad de que sean capturados se reduce proporcionalmente debido a que los electrones con energía suficiente para esto son cada vez menos, ocasionando un retorno al equilibrio con una cinética cuya "constante de tiempo" no es constante, sino que se incrementa con el tiempo.

12



Figura 1.5. a) Representación de una dislocación de borde formada por la inserción adicional de medio plano de átomos [32]. Representación del diagrama de bandas considerando la presencia de b) una dislocación neutra c) una dislocación cargada negativamente d) Barreras individuales de múltiples dislocaciones (Banda de Conducción) [33].

El efecto de las dislocaciones sobre la movilidad de los electrones ha sido modelado teóricamente por diferentes grupos de trabajo. El modelo de Weinmann e Eastman [34] estima la movilidad electrónica total del GaN en función de la concentración de portadores para diferentes densidades de dislocaciones, explicando razonablemente el comportamiento experimental de la movilidad en este material, *Figura 1.6*.

Como muestra la *Figura 1.6*, la movilidad de los electrones disminuye con el incremento de la densidad de dislocaciones de borde, cuyo efecto dispersor se vuelve relevante con respecto a la dispersión por impurezas ionizadas a partir de densidades del orden de 10⁹ dislocaciones/cm². Sin embargo, conforme aumenta la concentración de portadores libres, deja de ser relevante para la movilidad. Este fenómeno es atribuido por los autores a que la dispersión por impurezas ionizadas comienza a ser el mecanismo dominante.



Concentración de portadores libres [cm-3]

Figura 1.6. Movilidad electrónica del GaN en función de la concentración de portadores libres para diferentes densidades de dislocaciones; resultados experimentales y teóricos conforme al modelo de Weinmann e Eastman, [34].

1.2.3 Movilidad y Concentración experimentales de portadores

Ante la dificultad de obtener cristales masivos de GaN de calidad, las propiedades de transporte de carga del GaN han sido estudiadas sobre todo en películas epitaxiales. Debido a las complicaciones inherentes al crecimiento que, como se ha dicho, producen una gran cantidad de defectos en ellas, hay una gran dispersión en los resultados reportados. Algunos de estos resultados se mencionan a continuación.

La movilidad electrónica (μ_e) de películas de GaN crecidas sobre zafiro reportada por P. Maruska and J. J. Tietjen (1969), es de 125-150 cm²/Vs para concentraciones de electrones ~10¹⁹ cm⁻³ [35]. Ilegems and H. C. Montgomery (1973), reportan en muestras crecidas por VPE (Vapor Phase Epitaxy) sobre zafiro un valor de 440 cm²/Vs para n = 10¹⁷ cm⁻³ [36]. Sin embargo, movilidades tan bajas como 10 cm²/Vs y 35 cm²/Vs a temperatura ambiente, fueron reportados por Bougrioua et al. (1999) y S. Yoshida et al. (1983), respectivamente [37,38]. Con la adición de una película buffer de AIN o ZnO entre el sustrato y la película de GaN se disminuyen los efectos ocasionados por el desacople de malla, incrementado la movilidad. Nakamura et al. (1992), reportaron la elaboración de películas de GaN con movilidades de 900 cm²/Vs para n ~ 10¹⁵ cm⁻³ [39]. Molnar et al. (1997) crecieron sobre zafiro, por la técnica de TF- MOCVD (Two-Flow Metal-Organic Chemical Vapor Deposition), pero con películas buffer de ZnO, ésta crecida por HVPE (Hydride Vapor-Phase Epitaxy), reportando movilidades de hasta 880 cm²/Vs para n = 10^{16} cm⁻³[40]. En películas "free-standing" crecidas sobre Al₂O₃ por HVPE, y posteriormente separadas del sustrato mediante irradiación laser (2000), se reporta una movilidad de entre 1100 cm²/Vs y 1245 cm²/Vs a temperatura ambiente [41, 4]. Tales valores fueron explicados por la disminución de dislocaciones de cuña debido a que el GaN se encontraba libre de sustrato.

En la *Figura 1.7* se presenta una recopilación de movilidades experimentales de películas de GaN en función de su concentración de portadores [42]. En ésta se observan diferentes curvas de movilidad para un mismo valor de concentración de portadores, consecuencia de la compensación por impurezas aceptoras ionizadas. Como se verá más adelante, la presencia de dislocaciones de borde disminuye la movilidad de los electrones en el GaN, especialmente a concentraciones de portadores bajas.



Figura 1.7. Movilidad experimental de los electrones en el GaN en función de su concentración, reportada por diversos autores. Las líneas de pendiente negativa y positiva indican diferentes movilidades para diferentes concentraciones de impurezas aceptoras en los cristalitos y el efecto de las diferentes concentraciones de dislocaciones, respectivamente. Recopilación por E. Morales. [42]

1.3 Impurificación controlada del GaN

Para obtener conductividad tipo-p, en un principio se exploró la introducción de las impurezas Be, Zn y Mg en GaN, de las que se esperaba un comportamiento aceptor. Sin embargo, se obtenían películas altamente compensadas y resistivas [18,43]. Películas de GaN tipo-p fueron obtenidas por primera vez mediante la técnica desarrollada por Akasaki y Amano, consistente en la irradiación de películas impurificadas con Mg, inicialmente de alta resistividad, con electrones de baja energía, LEEBI (Low-Energy Electron-Beam Irradiation). De esta forma,

obtuvieron una concentración de huecos de p ~ $2x10^{16}$ /cm³, movilidades de μ_p ~ 8 cm²/Vs y resistividades de ~35 Ω cm, en GaN impurificado con Mg, crecido sobre zafiro, con una capa buffer de AlN, tratado con LEEBI [43]. Utilizando esta misma técnica en GaN:Mg sobre zafiro, con película buffer de GaN, Nakamura et. al. obtuvieron resultados equivalentes; concentraciones de huecos de hasta p = $3x10^{18}$ cm⁻³, con movilidad de μ_p = 9 cm²/Vs, y resistividad de 0.2 Ω cm [44]. Gracias a la obtención de películas tipo-p mediante este procedimiento, fue posible elaborar LEDs de uniones p-n, entre otros dispositivos.

La obtención intencional de GaN tipo-n es necesaria para la realización de dispositivos bipolares. Las impurezas donadoras utilizadas son silicio y germanio. Nakamura et al. crecieron películas GaN tipo-n sobre zafiro mediante MOCVD, impurificándolas con estos elementos. Las películas GaN:Si fueron crecidas con concentraciones de electrones de entre 1x10¹⁷ cm⁻³ y 2x10¹⁹ cm⁻³, y las GaN:Ge, entre 7x10¹⁶ cm⁻³ y 10¹⁹ cm⁻³, las cuales que dependieron del flujo de SiH₄ y GeH₄, respectivamente; con movilidades inferiores a 600 cm²/Vs, según la concentración de portadores [45]. Fritze et al. obtuvieron concentraciones de entre n = 3×10^{18} cm⁻³ (μ_n = 112 cm²/Vs) y 1.9×10²⁰ cm⁻³ (μ_n = 49 cm²/Vs) en GaN-Ge y entre n = 3.9×10^{18} cm⁻³ (μ_n = 104 cm²/Vs) y 6×10¹⁹ cm⁻³ (μ_n = 49 cm²/Vs) en GaN-Si sobre zafiro. A diferencia de las películas impurificadas con germanio, en las impurificadas con silicio a altas dosis, se presentó una incorporación poco homogénea del silicio con esfuerzos de tensión importantes en las películas [46]. Fireman et al. [47] también obtuvieron películas altamente impurificadas con germanio con concentraciones de hasta ~2×10²⁰ cm⁻³ y μ_n = ~100 cm²/Vs mediante la técnica de Ammonia MBE. Recientemente, Furikura et al. [48] crecieron películas de n-GaN con concentración de electrones libres en el rango de 1015 cm-3 y movilidad electrónica de 1470 cm²/Vs, utilizando la técnica de QF-HVPE (Quartz-Free Hydride Vapor Phase Epitaxy), desarrollada por su grupo de trabajo.

1.4 Sustratos extrínsecos más comunes

Como se mencionó anteriormente, debido a la escasez de sustratos nativos, las películas de este material se crecen sobre sustratos extrínsecos. La diferencia de parámetros de malla y coeficiente de dilatación térmica dan lugar a un material con propiedades físicas disminuidas que impactan negativamente el desempeño de los dispositivos elaborados con este material. Para minimizar estos efectos se han propuesto diferentes métodos para obtener películas de la más alta calidad posible. Así, uno de los factores que más afectan las propiedades de transporte y calidad de las películas de GaN es el material del sustrato sobre el que son

crecidas. A continuación, se describirán brevemente las características, ventajas y desventajas de los más frecuentemente utilizados.

Zafiro

El zafiro, Al₂O₃, es el sustrato más utilizado debido a su bajo costo de fabricación, facilidad de limpieza, estructura hexagonal, transparencia a la luz visible, superficie grande y estabilidad a las altas temperaturas requeridas para el crecimiento de películas mediante CVD. Es posible crecer cristales de zafiro con una alta calidad cristalina, y no se ha observado que los defectos que este contiene se transfieran a la película de GaN [13], o bien, son mínimos en comparación con los defectos ocasionados por el desacople entre los parámetros de red, el cual tiene valores mayores al 16% [49]. Este desacople ocasiona densidades de dislocaciones del orden de ~10⁸-10¹¹/cm², degradando sus propiedades de transporte de carga y ópticas. El zafiro tiene un bajo coeficiente de conductividad térmica (0.25 W/cm K a 100°C), lo que conduce a una deficiente disipación de energía (calor). La diferencia entre los coeficientes de expansión térmica entre el zafiro y el GaN (mayor al 25% [50]) ocasiona una compresión biaxial en la capa de GaN y puede resultar en la fractura, o al menos deformación, tanto de la película como del sustrato. Además, el oxígeno parece disociarse del sustrato en la interfase con la película, contribuyendo al aumento de la concentración de electrones en el GaN no impurificado intencionalmente (nid-GaN) [51].

Silicio

El silicio, por su madurez tecnológica, alta calidad cristalina, disponibilidad de obleas de gran tamaño y la posibilidad de integrar dispositivos de GaN y Si, es un material muy atractivo como sustrato. Sin embargo, la gran diferencia entre constantes de red (~17%) y coeficientes de expansión térmica entre ambos materiales (~54%), junto con la mala nucleación del GaN sobre el silicio, limitan de manera importante la calidad de las películas. Estas diferencias generalmente conducen a altas densidades de dislocaciones. Otra desventaja es que tiende a formar una capa de nitruro de silicio amorfo (SiN_x) en su interfase con el GaN cuando este último se crece directamente sobre el silicio, resultando en películas de mala calidad. Sin embargo, el uso de películas buffer de AIN, mediante la exposición inicial del sustrato a flujos alternados de AI y NH₃, ayuda a prevenir este fenómeno, además de minimizar los efectos de la diferencia entre las constantes de red y favorecer la nucleación. De esta forma, utilizando una película buffer de AIN, Chen et al. crecieron películas de nid-GaN sobre Si(111) con

concentraciones de electrones de alrededor de 1.3x10¹⁷ cm⁻³ y movilidades de ~210 cm²/Vs, con una buena calidad cristalina [52]. El GaN también puede ser crecido utilizando una película buffer de GaN sobre un sustrato de silicio previamente nitridado, como es el caso de Zhang et al., quienes obtuvieron películas libres de fracturas con movilidades de 142 cm²/Vs y concentraciones de electrones de 1.76x10¹⁸ cm⁻³ por el método de evaporación reactiva [53]. Otros materiales como 3C-SiC, AlAs y GaAs pueden ser utilizados como capa buffer, sin embargo, las mejores películas se crecen utilizando AlN, teniendo la ventaja de poderse crecer en el mismo reactor [54]. Este sustrato ha acaparado la producción de HEMTs comercializados para aplicaciones diversas.

• Carburo de silicio

El SiC, aunque tiene más de 250 politipos que se distinguen por el orden de apilamiento entre las capas de carbón y silicio, SiC 4H-SiC y 6H-SiC tienen menor desacople de malla con el GaN (~3%), resultando en películas de mejor calidad. El SiC tiene una conductividad térmica (~3.8 W/cm K) mayor que la del Al₂0₃ y Si. A pesar del bajo desacople, debido a la dificultad para obtener superficies de SiC poco rugosas y a que los defectos en su superficie pueden ser transferidos a la película, las películas crecidas sobre este material aún presentan una densidad importante de defectos. Los sustratos de SiC tienen un alto costo, y las películas crecidas sobre éstos presentan una gran densidad de dislocaciones de tornillo (10³-10⁴ cm⁻²). [13, 49].

La *Tabla 1.2* resume la información más importante sobre estos tres sustratos y su relación con el GaN.

	GaN	AI_2O_3	Si	6H-SiC
Parámetro de red a(100) [Å]	3.189	4.73	5.43	3.08
Parametro de red a(111) [A]		2.679	3.84	
Parámetro de red c [Å]	5.186	12.99	-	15.12
Conductividad térmica λ [W/cmK]	1.3	0.5	1-1.5	3.0-3.8
Coeficiente de expansión térmica $\alpha_{I\!I}$ [10 ⁻⁶ K ⁻¹]	5.59	7.5	2.29	4.2
Desacople de red GaN/sustrato	-	16%	17%	3.5%
Desacople térmico GaN/sustrato	-	34%	54%	25%

Tabla 1.2. Propiedades físicas del zafiro, silicio, y carburo de siliciopara su comparación con las del GaN [55].

1.5 La heteroestructura AlGaN/GaN

1.5.1 El Al_xGa_{1-x}N (Wurtzita) y la heteroestructura AlGaN/GaN

El Al_xGa_{1-x}N, donde *x* representa la fracción molar de aluminio, es un compuesto ternario cuyas propiedades, como ancho de banda y constante de red toman valores intermedios a los correspondientes al GaN y al AIN, dependiendo de la concentración de aluminio. Su ancho de banda en función de la concentración de aluminio, $E_{G_{AIGaN}}$, está dado por [56]:

$$E_{G_{AlGaN}}(x) = (1-x)E_{G_{GaN}} + xE_{G_{AlN}} - bx(1-x) \ [eV]$$
(1.1)

En donde $E_{G_{GaN}}$ es el ancho de banda del GaN (~3.4 eV @ 300K), $E_{G_{AlN}}$ el ancho de banda del AlN (~6.1 eV @ 300K) y *b* el parámetro de doblamiento, que representa la desviación con respecto a la linealidad de la Ley de Vegard, siendo *b* = 1.0 *eV* para todo el rango de composición. El parámetro de red calculado varía con la concentración de aluminio de la siguiente manera [18]:

$$a_{Al_xGa_{1-x}N}(x) = 3.1986 - 0.0891x$$
 [Å] (1.2.a)

$$c_{Al_xGa_{1-x}N}(x) = 5.2262 - 0.2323x$$
 [Å] (1.2.b)

Utilizando estas expresiones, en la *Figura 1.8* se muestran las gráficas del ancho de banda prohibida y constantes de red del Al_xGa_{1-x}N en función de la concentración de aluminio. Como se observa, la variación total del parámetro de red $a_{Al_xGa_{1-x}N}$ es de 3% de un extremo al otro de la gráfica, es decir, en todo el rango de concentración de aluminio, mientras que para $c_{Al_xGa_{1-x}N}$, es del 5%.

Al igual que el GaN, el AlGaN también presenta polarización espontánea y piezoeléctrica a lo largo del eje c [18] y también se forman dislocaciones cuando se crece la estructura Al_xGa₁₋ _xN/GaN sobre sustratos no nativos [57].



Figura 1.8. Variación a) del ancho de banda y b) parámetros de red del Al_xGa_{1-x}N en función de la concentración de aluminio, x, conforme a las *expresiones* (1.2.a) y (1.2b).

Al formar la heterounión AlGaN/GaN, la diferencia entre los anchos de banda de ambos materiales introduce una discontinuidad en las bandas de energía en la interfase. Cuando la función de trabajo del AlGaN es menor que la del GaN, hay una transferencia de electrones desde el primero hacia el GaN. Éstos se acumulan en la interfase constituyendo un gas bidimensional (2DEG), *Figura 1.9*, caracterizado principalmente por una alta movilidad electrónica ($\mu_e \approx 2000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$) y una alta concentración de portadores ($n_s \approx 10^{13} \text{ cm}^2$) [58]. Este gas constituye el canal del HEMT, cuyo principio de operación se abordará más adelante.



Figura 1.9. Diagrama de la banda de conducción de la heteroestructura AlGaN/GaN en equilibrio.

1.5.2 Dispersión de portadores en el gas bidimensional de electrones

La movilidad de los portadores en los semiconductores está determinada por los mecanismos de dispersión presentes en el material, tales como impurezas ionizadas, fonones acústicos y ópticos, defectos nativos puntuales y extendidos (dislocaciones), y por efecto piezoeléctrico, presente en el GaN. En el caso del gas bidimensional que aquí interesa, interviene también la rugosidad química y física de la interfase.

De acuerdo con la regla de Matthiessen, la movilidad total de los portadores, considerando que cada uno de los mecanismos de dispersión, representados por *i*, la afecta de manera independiente, está dada por [55]:

$$\frac{1}{\mu_{Tot}} = \sum_{i} \frac{1}{\mu_i} \tag{1.3}$$

De acuerdo con resultados teóricos y experimentales, a temperatura ambiente y grandes densidades de dislocaciones (mayores a $\sim 2x10^8$ cm⁻²), la dispersión por fonones ópticos y por dislocaciones se vuelven significativas para la estructura AlGaN/GaN [55, 59]. Esto se puede observar en la *Figura 1.10*, gráfica de la movilidad total y de la correspondiente a cada contribución individual de las consideradas para su estimación, en función de la temperatura, para una densidad de dislocaciones de 10^9 cm⁻² y una concentración de electrones de $1.6x10^{12}$ /cm² en el 2DEG.



Figura 1.10. Dependencia teórica de la movilidad con la temperatura, para una estructura Al₁₅Ga₈₅N/GaN [55].

A temperaturas mayores a 0K, los átomos de la red oscilan en torno a sus posiciones de equilibrio, ocasionando perturbaciones locales del potencial a través de la misma, generando un gas de fonones ópticos que interactúa con los electrones libres, dispersándolos de forma dependiente con la temperatura del cristal [55]. Como se observa en la *Figura 1.10*, la dispersión por fonones ópticos es el mecanismo más importante para temperaturas mayores a 200K. Éstos consisten en oscilaciones atómicas en direcciones opuestas, es decir, que los átomos se alejan y se acercan entre sí al desplazarse con respecto a su posición en equilibrio. Debido este movimiento, el campo eléctrico local se modifica y, por lo tanto, surgen perturbaciones en el potencial que impactan en la movilidad electrónica. La movilidad afectada únicamente por este tipo de fonones, graficada en la *Figura 1.10*, es función de la temperatura y se reduce exponencialmente con el incremento de ésta, conforme a:

$$\mu_{opt}^{2D} \alpha e^{E_0/kT} \left[1 - \frac{5kT}{E_{G_{GaN}}} \right]$$
(1.4)

En donde $E_0 = 90.5meV$ es la energía de los fonones ópticos en el GaN, $E_{G_{GaN}}$, el ancho de banda prohibida de este mismo material, k la constante de Boltzmann y T la temperatura. Por otra parte, conforme a la propuesta de Podor adaptada al GaN [42], la movilidad debida únicamente a mecanismos de dispersión por dislocaciones está dada por:

$$\mu_{dis} = \frac{30(2\pi)^{1/2}\epsilon_s^2 c^2 (kT)^{3/2}}{N_{dis} q^2 f^2 \lambda_D m_e^{*1/2}} \ [cm^2/Vs]$$
(1.5.a)

$$\lambda_D = \left(\frac{\epsilon_s kT}{q^2 n}\right)^{1/2} \left[F^{1/2} V^{1/2} / C \cdot cm^{-3/2}\right]$$
(1.5.b)

En donde ϵ_s es la permitividad del semiconductor, *c* la separación entre estados aceptores adyacentes a lo largo de la dislocación, N_{dis} la concentración de dislocaciones por unidad de área (cm⁻²), *f* la fracción de llenado de los estados aceptores a lo largo del borde de la dislocación, λ_D la longitud de apantallamiento de Debye, m_e^* la masa efectiva de los electrones y *n* la concentración de electrones libres. La *Figura 1.11* contiene la gráfica de la movilidad en función de la concentración de portadores obtenida a partir de la *ecuación (1.5.a)* para una concentración de dislocaciones entre 10⁹ y 10¹¹ cm⁻².



Figura 1.11. Movilidad de los electrones en el GaN considerando únicamente mecanismos de dispersión por dislocaciones en función de su concentración, para diferentes concentraciones de dislocaciones [42].

Como se observa en la figura, la movilidad disminuye conforme aumenta la concentración de dislocaciones y aumenta con la concentración de electrones libres. Esto último se atribuye a que los electrones libres apantallan la actividad dispersiva de los estados aceptores en las dislocaciones, reduciendo su efecto de sobre la movilidad. Sin embargo, el aumento en la concentración de electrones libres implica un incremento en la concentración de impurezas donadoras ionizadas, cuyo efecto sobre la movilidad es más importante [42].

Dos mecanismos también relevantes son la dispersión por desorden de aleación y por rugosidad de la interfase. En una aleación, existe un desorden estructural debido a la distribución aleatoria de sus átomos [60]. Esto ocasiona variaciones locales del potencial, de

otra forma periódicamente perfecto, que dispersan a los portadores. Actualmente, en el caso de este HEMT, la dispersión por desorden de aleación es un problema tecnológicamente resuelto, ya que se reduce considerablemente mediante el uso de delgadas capas espaciadoras entre ambos materiales de la unión y utilizando una concentración apropiada de aluminio en la aleación [55].

1.5.3 Origen y localización del gas bidimensional de electrones

Como se mencionó anteriormente, en la heterounión AlGaN/GaN, parte medular de los transistores HEMT, existe un pozo de potencial triangular que aloja un gas bidimensional de electrones totalmente contenido en el GaN confinado contra su interfase con el AlGaN. A pesar de que éste se encuentra totalmente localizado en el GaN, los electrones que lo conforman no pueden provenir de esta misma capa: espesores y concentraciones residuales de electrones típicos del nid-GaN se encuentran entre 1-3 µm y 10¹⁶ cm⁻³, respectivamente, las cuales corresponden a una concentración superficial del orden de 10¹² cm⁻², valor inferior a las concentraciones de electrones en el 2DEG generalmente reportadas (~10¹³ cm⁻²). Estos electrones, por lo tanto, deben provenir del AlGaN, siendo necesario que su función de trabajo sea menor que la del GaN, de forma en que, al realizar la unión, haya una transferencia de electrones desde el AlGaN hacia el GaN.

Por otra parte, tanto en el GaN como en el AlGaN crecidos en la dirección *c*, existe una polarización intrínseca espontánea en esa dirección constituyendo planos alternados de carga de signo opuesto que se manifiestan en sus superficies (e interfases) opuestas, $+Q^{SP}, -Q^{SP}$ estableciendo un campo eléctrico a través del material, y que son neutralizadas por una redistribución de la carga libre en el material y por especies ionizadas adsorbidas en la superficie [61]. Sin embargo, cuando la estructura se encuentra sometida a esfuerzos, por ejemplo, al ser crecida sobre materiales con diferente parámetro de red, existe un desplazamiento extra de los átomos con respecto a su posición ideal, ocasionando una polarización adicional a la espontánea, denominada piezoeléctrica (P_{PZ}). La dirección del vector neto de polarización depende de las características de las películas y del tipo de esfuerzo al que éstas se encuentran sometidas. Generalmente, las películas de GaN y AlGaN crecidas por MBE y MOCVD, terminan en la cara-Ga [62] (*Figura 1.12.a*). Una película de AlGaN crecida sobre GaN presenta esfuerzos de tensión en el plano de crecimiento (e_{\perp}), por lo que el vector de polarización piezoeléctrico apunta en la dirección [00 $\cdot \overline{1}$] [63].



Figura 1.12. Dibujo esquemático de la estructura del GaN tipo Wurtzita con terminación en a) Cara-Ga, utilizada en este HEMT, y b) Cara-N. Por convención, el vector del eje [0001] apunta del plano-N al plano-Ga) [64]

En la interfase de la estructura AlGaN/GaN abrupta, aún sin la presencia de esfuerzos, existe una polarización interfacial neta, resultado de la diferencia entre las polarizaciones espontáneas de cada una de las películas, que resulta en una hoja de carga fija, Q_i^{Pol} , en este caso (AlGaN terminado en la cara-Ga), positiva, dada por [64]:

$$Q_i^{Pol} = P_{SP_{top}} - P_{SP_{bottom}} \left[C/cm^2 \right]$$
(1.6.a)

$$Q_{i_{AlGaN/GaN}}^{Pol} = P_{SP_{AlGaN}} - P_{SP_{GaN}} \left[C/cm^2 \right]$$
(1.6.b)

y una capa de carga negativa en la superficie del AlGaN [62], como se ilustra en la *Figura 1.13*. Debido a la presencia de esta carga (fija), se establece un campo eléctrico que arrastra a los electrones libres del AlGaN hacia la interfase.



Figura 1.13. Diagrama de bandas de energía de la heterounión AlGaN/GaN y densidades de carga eléctrica en las superficies terminales de cada material: la carga ocasionada por el efecto de polarización espontánea, la carga superficial y la de los electrones libres en la interfase. (A partir de [62]).

Cuando se realiza la heterounión, se transfieren electrones desde el AlGaN hacia el GaN. Cuando se alcanza el equilibrio, la carga negativa (electrones libres y aceptores ionizados en el GaN) en la interfase, Q_n , compensa la carga fija positiva de la polarización (Q_i^{Pol}).

Son la polarización espontánea y piezoeléctrica, junto con la transferencia de carga entre ambos materiales para alcanzar el equilibrio las que contribuyen a la localización del gas bidimensional de electrones en la interfase.

Considerando que la concentración de aceptores ionizados en el GaN es despreciable, la densidad de carga negativa que compensa la carga fija positiva en la interfase es:

$$Q_n = -Q_i^{Pol} \approx q n_s \left[C/cm^2 \right] \tag{1.7}$$

En donde n_s es la concentración de electrones en el 2DEG.

Se ha propuesto que estos electrones provienen de donadores superficiales intrínsecos o impurezas (no-intencionales o intencionales) en el AlGaN [65]. Para que éstos puedan ser transferidos al GaN, es necesario que sus niveles de energía se encuentren por arriba del nivel de Fermi, y que su concentración sea del orden de la concentración de electrones en el 2DEG. Considerando que la concentración de electrones en el gas es de alrededor de 10¹³/cm², con

base en la *ecuación (1.7)*, la densidad de carga fija inducida en la interfase debe ser del orden de 10⁻⁶ C/cm².

Por otra parte, la presencia de esfuerzos en las películas modifica la carga neta en la interfase:

$$Q_{i}^{Pol} = P_{top} - P_{bottom}$$

$$Q_{i}^{Pol} = \left\{ P_{SP_{top}} + P_{PZ_{top}} \right\} - \left\{ P_{SP_{bottom}} + P_{PZ_{bottom}} \right\}$$

$$Q_{i}^{Pol} = \left\{ P_{SP_{AlGaN}} + P_{PZ_{AlGaN}} \right\} - \left\{ P_{SP_{GaN}} + P_{PZ_{GaN}} \right\}$$

$$= \left\{ P_{AlGaN} \right\} - \left\{ P_{GaN} \right\}$$
(1.8)

En el caso del HEMT AlGaN/GaN, la película de AlGaN crecida sobre GaN presenta esfuerzos de tensión en el plano de crecimiento [58]. Cuando, además, la capa de GaN se encuentra relajada, la dirección de la polarización espontánea (P_{SP}) y piezoeléctrica (P_{PZ}) en el AlGaN es la misma, incrementando la diferencia entre P_{AlGaN} y P_{GaN} , por lo que tanto la carga fija en la interfase Q_i^{Pol} como la concentración de portadores en el 2DEG, n_s , incrementan. Esto se ilustra en la *Figura 1.14*.



Figura 1.14. Dirección de los vectores de polarización espontánea, P_{SP} y piezoeléctrica, P_E , y carga inducida por la polarización, para diferentes situaciones de esfuerzo en la estructura AlGaN/GaN. Columna izquierda: terminación en cara-Ga, derecha, en cara-N. a) y d) Ambas películas relajadas, b) y e) AlGaN en esfuerzo de tensión. c) y f) Estructura GaN/AlGaN con GaN en esfuerzo de compresión. [58]

1.6 EI HEMT AIGaN/GaN

El transistor HEMT (High-Electron-Mobility-Transistor), también conocido como TEGFET (Two-dimensional-Electron-Gas-FET), cuya estructura simplificada se muestra en la *Figura 1.15*, es un transistor de efecto de campo de heterounión que controla la corriente entre sus terminales de fuente (S) y drenador (D) a través de la modulación de la carga en el gas bidimensional de electrones (*Figura 1.15*, línea discontinua) por medio de un voltaje en la terminal de compuerta (G), la cual consiste en una barrera Schottky. Su proceso básico de fabricación, y principio de funcionamiento se detallan a continuación.



Figura 1.15. Estructura simplificada de un transistor HEMT AlGaN/GaN, en donde *S* representa la terminal de fuente, *G* la compuerta, y *D* el drenador, mientras que L_G y W_G son la longitud y el ancho de compuerta, respectivamente.

1.6.1 Proceso de elaboración del HEMT AlGaN/GaN

Uno de los sustratos más utilizados para la elaboración de HEMTs es el silicio (111), ya que proporciona una simetría hexagonal para el crecimiento de GaN con estructura Wurtzita [66], sin embargo, como se mencionó anteriormente, debido a la diferencia entre sus constantes de red y expansión térmica, las películas crecidas sobre éste presentan una gran densidad de dislocaciones. Con la finalidad de mitigar los efectos del desacople de red con el sustrato y favorecer la nucleación del GaN, sobre éste se crecen una película semilla y una o varias películas de transición. En HEMTs crecidos sobre silicio, generalmente se utiliza una película semilla de AIN con espesores mayores o iguales a 30 nm y, sobre ésta, múltiples capas de AIN/GaN, AIN/AIGaN o AIGaN de hasta ~30 nm de espesor [67-69]. Sobre este conjunto de películas, se crece una película buffer de AIGaN o GaN de varios micrómetros de espesor (~1-

3 µm) para disminuir la densidad de dislocaciones. Cuando se utiliza AlGaN, sobre éste se crece una película de GaN (~300 nm). La parte superior de la película de GaN es en la que se aloja el gas bidimensional de electrones, siendo denominada, capa activa. Debido a que la capa buffer también debe proporcionar aislamiento eléctrico entre la capa activa y el sustrato, en ocasiones, ésta es impurificada con hierro o magnesio para compensar las impurezas donadoras introducidas de manera no intencional durante su crecimiento e incrementar su resistividad [67,70]. Finalmente, se crece una capa de AlGaN de entre 10 y 30 nm con concentraciones de aluminio típicas de entre x = 0.15 y x = 0.30 [71]. Se ha observado que la concentración de electrones en el 2DEG incrementa con la fracción de aluminio de la capa de AlGaN como consecuencia del incremento de la polarización piezoeléctrica derivado de los esfuerzos mecánicos a los que está sujeta la película. Sin embargo, su movilidad disminuye y la calidad del contactado óhmico del dispositivo se degrada [72,73]. Adicionalmente, el crecimiento de una delgada capa de GaN a baja temperatura sobre el AlGaN, denominada "cap", disminuye la corriente de fuga a través de la compuerta [74]. Así mismo, como se mencionó anteriormente, se puede agregar una capa interfacial de AIN, que disminuye el efecto del desorden de aleación sobre la movilidad, e incrementa la concentración de electrones en el 2DEG debido al aumento de la discontinuidad de la banda de conducción en la interfase (Δ_{EC}) [75].

La fabricación de los dispositivos comienza con la realización de las mesas de aislamiento, lo cual consiste en decapar el contorno del futuro HEMT y así conseguir un aislamiento eléctrico entre dispositivos adyacentes. Debido a la alta estabilidad del AlGaN y GaN, el decapado húmedo no es viable, derivado de una razón de decapado considerablemente baja y dificultades para encontrar una mascarilla adecuada [76], por lo que se recurre al ataque en seco, siendo el más común el Decapado por Iones Reactivos, RIE, en el que se utilizan mezclas de gases que contienen cloro o flúor, como SiF₆ [77].

Una vez que se realizaron las mesas de aislamiento, se elaboran los contactos óhmicos. Dada la dificultad para obtener contactos óhmicos con semiconductores de ancho de banda grande, comúnmente estos contactos consisten en múltiples capas de diferentes metales. Generalmente se realizan contactos de aluminio ($\phi_M \sim 4.3 \ eV$) sobre titanio ($\phi_M \sim 4.2 \ eV$), Ti/Al. Debido a que la función de trabajo de estos metales es mayor que la del semiconductor ($\sim 4.19 \ eV$, para $n_0 \sim 10^{17} \ cm^{-3}$, $n_i \sim 10^{-10} \ cm^{-3}$ y $\chi \sim 3.8 \ eV$ [78]), éstos resultan en contactos rectificantes, por lo que deben ser recocidos mediante RTA (Rapid Thermal Annealing) para disminuir su resistividad, al favorecer la reacción entre el titanio y el nitrógeno y la difusión del aluminio hacia la interfase. Este contacto tiene una alta afinidad con el oxígeno, por lo que se recubre con oro, separado por una capa de níquel que previene su difusión hacia el resto del

contacto [18,76-79]. Finalmente, se realiza el contacto de compuerta. Este contacto debe ser rectificante con una baja, idealmente nula, corriente de fuga. Como la altura de la barrera depende de la función de trabajo del metal [80], para su realización, generalmente se utilizan metales con función de trabajo grande, como platino ($\phi_M \sim 5.7 eV$) y níquel ($\phi_M \sim 5.2 eV$), también recubiertos por oro. Cada uno de los procesos descritos esta precedido de una etapa fotolitográfica.

1.6.2 Principio de operación del HEMT AlGaN/GaN

Para simplificar el análisis del pozo de potencial en la interfase del AlGaN/GaN en el que se acumulan los electrones formando el 2DEG, éste se aproxima como un pozo de potencial triangular, por lo que, consecuentemente, el campo eléctrico en el mismo es constante. Conforme a la solución aproximada de la ecuación de Schrödinger, la energía de un electrón en el pozo está cuantizada y dada por [81]:

$$E_n \approx \left(\frac{\hbar^2}{2m^*}\right)^{\frac{1}{3}} \left(\frac{3}{2}\pi q \mathcal{E}_{y0}\right)^{\frac{2}{3}} \left(n + \frac{3}{4}\right)^{\frac{2}{3}} [eV]$$
(1.9)

Donde E_n es la energía del n-ésimo nivel permitido, \mathcal{E}_{y0} es el campo eléctrico en el pozo en [V/m], \hbar la constante de Planck reducida en [Js] y m^* la masa efectiva de los electrones. En estas estructuras, el campo eléctrico en la interfase es del orden de $\mathcal{E}_{y0} = 10^6 V/cm$, por lo que, conforme a la *ecuación (1.9)*, considerando una masa efectiva de $m^* = 0.228m_o$, los valores de los primeros niveles de energía para el GaN son:

$$E_0 = 0.275 \ eV$$

 $E_1 = 0.483 \ eV$

En un sistema tridimensional la densidad de estados tiene una relación $\sim \sqrt{\varepsilon}$ con la energía, sin embargo, en un sistema bidimensional, ésta toma valores continuos independientes de la energía, y está dada por [82]:

$$D(E) = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} [J^{-1}m^{-2}]$$
(1.10)

, para cada nivel de energía cuantizada. Para el GaN es:

$$D = 6x10^{36} [J^{-1}m^{-2}]$$
$$D = 9.59x10^{13} [eV^{-1}cm^{-2}]$$

Debido a que en la estructura del transistor AlGaN/GaN que aquí se estudia, generalmente el nivel de Fermi se encuentra arriba de E_1 , la concentración de electrones por unidad de superficie en el 2DEG es entonces de alrededor de $n_s = 10^{13} cm^{-2}$. Por lo tanto, el canal se encuentra formado de manera previa a la polarización del dispositivo, es decir, que se trata de un transistor normalmente encendido, con una resistencia de hoja del orden de 200 – 400 Ω/\Box [83].

· Polarización del dispositivo

Al aplicar un voltaje entre las terminales de fuente y drenador del transistor, $V_{DS} > 0$, como se ilustra en la *Figura 1.16*, se establece un campo eléctrico longitudinal (paralelo a la interfase), \mathcal{E}_x , que produce una corriente I_{DS} entre ambos electrodos. Cuando el transistor opera con la compuerta flotante, o bien, para voltajes de drenador pequeños, la densidad lineal de corriente en el canal obedece la ley de Ohm [2]:

$$J_{DS} = q\mu_n n_s \cdot \mathcal{E}_x = G_s \cdot \mathcal{E}_x \quad [A/cm] \tag{1.11}$$

en donde *q* es la carga elemental, n_s la densidad superficial de electrones libres en el canal, μ_n su movilidad, \mathcal{E}_x el campo eléctrico longitudinal y G_s es la conductancia de hoja del canal en $[S \cdot \Box]$. En estas condiciones, se dice que el transistor opera en la región lineal, en la que, como su nombre indica, la caída de potencial a lo largo del canal es lineal, como se representa en la parte inferior de la *Figura 1.16*, y su resistencia de hoja está dada por [84]:

$$R_s = \frac{1}{G_s} = \frac{1}{qn_s\mu_n} \quad [\Omega/\Box] \tag{1.12}$$



Figura 1.16. Estructura simplificada de un transistor HEMT en su configuración de resistor (compuerta flotante) y caída de potencial a lo largo del mismo. V(x). A partir de [84].

Sin embargo, cuando se polariza la compuerta, el campo eléctrico que esta polarización produce, \mathcal{E}_{yG} , se superpone con el campo eléctrico transversal de la interfase en equilibrio, \mathcal{E}_{y0} , [84]:

$$\mathcal{E}_{y}(V_{GS}) = \begin{cases} \mathcal{E}_{y0} + \mathcal{E}_{yG} \ para \ V_{GS} > 0V \\ \mathcal{E}_{y0} - \mathcal{E}_{yG} \ para \ V_{GS} < 0V \end{cases}$$
(1.13)

Debido a que la concentración de electrones en el canal depende del campo eléctrico transversal, ésta será modificada por la polarización de compuerta [81]. Tal como lo describe la *ecuación (1.13)*, para un voltaje de compuerta positivo, el campo eléctrico ocasionado por la polarización se añade al de equilibrio, atrayendo más electrones hacia el canal e incrementando su concentración. Un voltaje de compuerta negativo disminuye el campo eléctrico transversal total, disminuyendo también la concentración de electrones en el canal.

El potencial aplicado en la compuerta cae parcialmente en la capa de AlGaN y parcialmente en el GaN, cerca de su interfase con el AlGaN, por lo que, en la región del canal que se encuentra debajo de dicha terminal, la profundidad del pozo de potencial y la concentración de portadores son modificadas por éste. Para un voltaje de compuerta negativo, tanto la profundidad del pozo como la concentración de electrones disminuyen. Aquel voltaje de compuerta para el que el pozo desaparece, es decir para el que el canal se interrumpe, es denominado Voltaje de Umbral o de Apagado, V_T . Cuando $V_G = V_T$, se dice que el transistor se encuentra en el estado de corte o apagado.

A continuación se considerará: que se aplican simultáneamente una polarización fuentedrenador, $V_D \ge 0V$, con la fuente como electrodo común, $V_S = 0V$, manteniendo $V_G =$ *constante* = 0*V*, que no hay caída de potencial a través de la capa de AlGaN, que la compuerta es una superficie equipotencial: $V_G(x) = constante = V_G$, para toda *x*, donde *x* es un eje paralelo al canal, desde fuente hasta drenador, y que las resistencias en serie de las regiones de acceso de fuente y drenador son despreciables, por lo que el potencial *V*(*x*) cae únicamente en la región del canal que se encuentra debajo de la compuerta, es decir, en el intervalo $0 \le x \le L_G$ de la *Figura 1.17*.

En estas condiciones, el potencial a lo largo del canal, V(x), incrementa su valor desde el extremo más cercano a la fuente, donde $V(x = 0) = V_s = 0$, hasta su extremo más cercano al drenador, donde $V(x = L_G) = V_D$. Por el principio de superposición, para un V_G arbitrario, la caída de potencial a través del canal (eje de las ordenadas), $V_{cy}(x)$, en cada punto x a lo largo del mismo es:

$$V_{CV}(x) = V_G - V(x)$$
(1.14)

De acuerdo con la ecuación (1.14), en estas condiciones, en el extremo más cercano a la fuente, $V_{CV}(0) = 0$, por lo que no hay ningún campo eléctrico externo que modifique la concentración de portadores en ese punto. Sin embargo, en el otro extremo; $x = L_G$, la caída de potencial, $V_{Cy}(L_G) = V_D$, genera un campo eléctrico que disminuye la concentración de portadores en el 2DEG con respecto a su concentración en equilibrio en ese punto. Por lo tanto, el potencial a través del canal no es constante a lo largo del mismo y tampoco la concentración de portadores en el 2DEG, la cual disminuye desde la fuente (x = 0) hacia el drenador ($x = L_G$). Para voltajes de drenador bajos, este efecto es despreciable, sin embargo, conforme V_D se incrementa, la corriente de drenador deja de tener una relación lineal con éste debido a que el canal se estrecha cada vez más hacia el extremo del drenador. Existe un valor del voltaje de drenador, denominado voltaje de saturación, $V_{D_{Sat}}$, para el cual $V_{cy}(L_G) = V_T$, punto en el que el canal se interrumpe, encontrándose vacío de portadores libres. Para voltajes $V_{DS} > V_{D_{Sat}}$, es decir cuando $|V_G - V(x)| \ge |V_T|$ y $V_D \ge |V_T|$, siempre habrá un punto X en la región del canal debajo de la compuerta, en el que $V_{cy}(x = X) = V_T$ a partir del cual el canal se encuentra ocluido, es decir, sin portadores libres. La caída de potencial a lo largo del canal, para $V_{DS} > V_{D_{Sat}}$ se ilustra en la Figura 1.17. A pesar de esta oclusión, los electrones aún pueden fluir hacia el drenador, por arrastre del campo eléctrico. En esta situación, la corriente depende de la densidad de electrones que llegan al punto X. Aunque este punto se desplaza ligeramente hacia la fuente conforme V_D incrementa más allá de $V_{D_{Sat}}$, el voltaje entre la fuente y éste se mantiene prácticamente constante, ya que es el voltaje necesario para que $\mathcal{E}_{v} \sim 0$ y
n_s sea despreciable, por lo que la corriente permanece constante. En estas condiciones, el transistor opera en la región de saturación. Para cada voltaje de compuerta existe un $V_{D_{sat}}$ correspondiente.



Figura 1.17. Estructura simplificada de un transistor HEMT y caída de potencial a lo largo del mismo, V(x), en la región de saturación. A partir de [84]. (Nota: La flecha indica la dirección del campo eléctrico, más no su magnitud).

A continuación, se realizará un análisis teórico simplificado del transporte de carga en el canal del transistor HEMT ideal. Para esto, se considerará que el canal se encuentra formado $(|V_G - V(x)| < |V_T|)$ en toda la región entre x = 0 y $x = L_G$, que la capa de AlGaN es perfectamente aislante, que no existen resistencias parásitas de fuente y drenador, y que la longitud y ancho del canal son iguales a las de la compuerta ($L_C = L_G y Z = W_G$).

En la región lineal, la corriente entre fuente y drenador sigue la ley de Ohm, y está dada por [81]:

$$I_D(x) = -Z \cdot \operatorname{qn}_{\mathsf{S}}(x)v_n(x) \quad [\mathsf{A}]$$
(1.15.a)

Para una movilidad constante:

$$I_D(x) = Z \cdot qn_S(x) \cdot \mu_n \mathcal{E}_x \quad [A]$$

$$I_D(x) = Z \cdot qn_S(x) \cdot \mu_n \frac{dV(x)}{dx} \quad [A] \quad (1.15.b)$$

En donde *Z* es el ancho del canal, $qn_S(x)$ la densidad superficial de carga en cualquier punto *x* del canal, $v_n(x)$ la velocidad promedio de arrastre de los electrones, μ_n su movilidad y \mathcal{E}_x el campo eléctrico longitudinal ocasionado por la polarización entre la fuente y el drenador. Debido a la presencia de la película aislante de AlGaN, la carga en el canal se encuentra acoplada capacitivamente al voltaje de compuerta. Ésta varía con el voltaje de compuerta conforme a:

$$qn_{S}(x) = C_{0}(V_{G} - V(x) - V_{T})$$
(1.16)

Con

$$C_0 = \frac{\epsilon_{AlGaN}}{d_{AlGaN}} \tag{1.17}$$

Donde C₀ es la capacitancia por unidad de área del AlGaN, y ϵ_{AlGaN} y d_{AlGaN} son la permitividad y el espesor de la capa de AlGaN, respectivamente. Sustituyendo (1.16) en (1.15.b):

$$I_D(x) = Z \cdot C_0 \mu_n (V_G - V(x) - V_T) \cdot \frac{dV(x)}{dx}$$
(1.18)

Considerando que la corriente es constante a lo largo de todo el canal, es decir $I_D(x) = I_D$, e integrando desde la fuente (V(x = 0) = 0) hasta el drenador ($V(x = L) = V_D$):

$$I_D \int_0^L dx = Z C_0 \mu_n \int_{V(x=0)=0}^{V(x=L)=V_D} (V_G - V(x) - V_T) \cdot dV$$
(1.19)

$$I_D(V_D) = \frac{Z}{L} C_0 \mu_n \left[(V_G - V_T) V_D - \frac{V_D^2}{2} \right]$$
(1.20.a)

En la región lineal, $V_D \ll V_G - V_T$, por lo que la *ecuación (1.20.a)* se reduce a:

$$I_{D_{lin}}(V_D) = \frac{Z}{L} C_0 \mu_n [(V_G - V_T) V_D]$$
(1.20.b)

Mientras que, en la región de saturación, en la que $V_D \ge V_G - V_T$, se reduce a:

$$I_{D_{Sat}} = \frac{Z}{L} C_0 \mu_n \left[\frac{(V_G - V_T)^2}{2} \right]$$
(1.20.c)

Las curvas de salida del transistor, calculadas mediante la *ecuación (1.20)* se muestran en la *Figura 1.18*.



Figura 1.18. Curvas de salida del transistor HEMT simuladas a partir de la *ecuación* (1.20), para Z = 100 μ m, L = 8 μ m, d_{AlGaN} = 20 nm, x_{Al}(AlGaN) = 0.3, n_s = 10¹³ cm⁻² y μ _n = 1500 cm²/Vs [85].

Tal como se resume en el trabajo de Montiel L. [85], la concentración de portadores en el canal y su movilidad dependen de factores como la técnica de crecimiento y las características de la capa de AlGaN. Así mismo, los parámetros característicos del HEMT dependen de su geometría. De esta forma, en la literatura se encuentran resultados diversos. Para transistores con concentraciones de aluminio de entre 0.23 y 0.3 y longitudes de compuerta de alrededor de 1-3 micrómetros, en la literatura se reportan movilidades de entre 900 y 1980 cm²/Vs y concentraciones de electrones de entre 8.5x10¹² y 1.3x10¹³ cm⁻². Las densidades de corriente l_{DS} directa máximas varían entre los 300 y 900 mA/mm para un voltaje de compuerta de V_G = 0 V, con resistencias de encendido de 2.4 a 13 Ω mm. Algunos de estos valores encontrados en la literatura, se resumen en la *Tabla 1.3*, en la que también se incluyen valores de transconductacia, la cual representa la capacidad del HEMT para modular la conductividad del canal mediante el voltaje de compuerta y está dada por:

$$g_m = \left. \frac{\partial I_D}{\partial V_G} \right|_{V_D = constante}$$
(3.8)

De forma que, a mayor transconductancia, mayor cambio en la corriente de drenador ante un cambio en el voltaje de compuerta, y viceversa, para un mismo punto de operación del HEMT. Las transconductancias máximas se encuentran típicamente en el orden de 100 mS/mm, pero pueden alcanzar hasta ~700 mS/mm.

L _G (µm)	W _G (μm)	Mat. Subs.	XAI	μ _e (cm²/Vs)	n _s (cm ⁻²)	I _{DSmax} @V _G =0V (A/mm)	g _{mmax} (mS/mm)	Año
0.8	1000	Zafiro	0.3	1575	1x10 ¹³	0.58	200	2005
1	150	GaN	0.3	1470	1.3x10 ¹³	0.9	-	2007
1	100	Zafiro	0.25	1350	8.8x10 ¹²	~0.6	~700	2007
2.5	150	Si (001)	0.3	1980	9.6x10 ¹²	0.53	232	2008
0.7	100	SiC	0.25	1840	9.9x10 ¹²	0.8	257	2012
2	50	Zafiro	0.3	1340	1.1x10 ¹³	0.48	115	2014
2	50	Si	0.3	1150	1.3x10 ¹³	0.4	105	2014
1	100	Zafiro	0.24	907	8.6x10 ¹²	0.3	112	2015
1	100	Zafiro	0.24	989	8.5x10 ¹²	0.312	119	2015
3	-	Si (111)	0.23	1270	1.1x10 ¹³	0.75	115	2017
2	200	SiC	-	1900	1x10 ¹³	0.65	150	2019

Tabla 1.3. Valores reportados en la literatura para diferentes transistores [85-94]

1.7 Resumen

El GaN es un semiconductor que, por sus propiedades físicas intrínsecas, como ancho de banda grande y alto campo eléctrico de ruptura, velocidad de saturación y movilidad de portadores, presenta ventajas con respecto a otros materiales para su utilización en dispositivos optoelectrónicos y de potencia, operando a frecuencias elevadas. Sin embargo, debido a la escasez de sustratos del mismo material, el uso de otros materiales propicia la formación de una gran densidad de defectos en las películas de GaN, especialmente dislocaciones de borde, que degradan las propiedades de transporte del material. Los sustratos más comunes son el zafiro, carburo de silicio y el silicio, siendo este último el utilizado en los dispositivos de este trabajo.

Debido a la diferencia entre las afinidades electrónicas de los materiales que componen la heterounión AlGaN/GaN, hay una discontinuidad en las bandas de energía en la interfase. Cuando la función de trabajo del AlGaN es menor que la del GaN, hay una transferencia de electrones hacia el GaN que se acumulan en la interfase, constituyendo un gas bidimensional, "2DEG" o "TEG", cuyo origen y localización se atribuyen a estados superficiales en el AlGaN y a la carga fija ocasionada por la polarización espontánea y piezoeléctrica de los materiales. A temperatura ambiente, la movilidad de este gas bidimensional de electrones se ve disminuida principalmente por dispersión por fonones ópticos y por la presencia de dislocaciones, así como la rugosidad de la interfase.

Finalmente, HEMT, High Electron Mobility Transistor, es un transistor de efecto de campo en el que el 2DEG de la heterounión AlGaN/GaN conforma el canal. En este transistor, la densidad de portadores en el canal y, por lo tanto, la corriente entre las terminales de fuente y drenador es controlada mediante la aplicación de un voltaje en la terminal de compuerta. Para su elaboración, además de las películas que conforman la heterounión y el depósito de los contactos óhmicos de fuente y drenador y la barrera Schottky de la compuerta, se crecen películas buffer y capas interfaciales para mitigar los efectos del desacople de red con el sustrato y desorden de aleación. Para HEMTs AlGaN/GaN con longitudes de compuerta en torno a 1 µm, con concentraciones de portadores en el canal cercanas a 10^{13} /cm² y movilidades electrónicas de entre ~1000 y ~2000 cm²/Vs, en la literatura se reportan densidades de corriente típicamente en el orden de varios cientos de mA/mm (0.3-0.9 A/mm a V_G = 0 V) y transconductancias máximas mayores a 100 mS/mm y, ocasionalmente, de ~600-700 mS/mm. Como se verá más adelante, las características de los transistores estudiados en este trabajo se encuentran en su totalidad dentro de las correspondientes al estado del arte.

Referencias

[1] Gaska, R., et al. "Self-heating in high-power AlGaN-GaN HFETs." IEEE Electron Device Letters 19.3 (1998): 89-91.

[2] Pelá, R. R., et al. "Accurate band gaps of AlGaN, InGaN, and AlInN alloys calculations based on LDA-1/2 approach." Applied Physics Letters 98.15 (2011): 151907.

[3] SUMIYOSHI, Kazuhide, et al. "Low On-Resistance High Breakdown Voltage GaN Diodes on Low Dislocation Density GaN Substrates." SEI Technical Review 77 (2013): 113.

[4] Look, David C., and J. R. Sizelove. "Predicted maximum mobility in bulk GaN." Applied Physics Letters 79.8 (2001): 1133.

[5] E. K. Sichel and J. I. Pankove. "Thermal conductivity of GaN, 25–360 K". Phys. Chem. Solids 38 (1977): 330.

[6] Darakchieva, Vanya, et al. "Lattice parameters of bulk GaN fabricated by halide vapor phase epitaxy." Journal of Crystal Growth 310.5 (2008): 959-965.

[7] Maruska, H. Pi, and J. J. Tietjen. "The preparation and properties of Vapor-Deposited singlecrystal-line GaN." Applied Physics Letters 15.10 (1969): 327-329.

[8] Sze, S. M., and K. NG Kwok. "Physics of Semiconductor Devices." (2007).

[9] NSM Archive. Physical-Technical Institute of the Russian Academy of Science (loffe).

[10] Higashiwaki, Masataka, et al. "Development of gallium oxide power devices." physica status solidi (a) 211.1 (2014): 21-26.

[11] Kumar, Sandeep, et al. "A performance comparison between beta-Ga2O3 and GaN High Electron Mobility Transistors." arXiv preprint arXiv:1802.02313 (2018).

[12] Cheng, Zongzhe, et al. "Thermal expansion of single-crystalline β -Ga2O3 from RT to 1200 K studied by synchrotron-based high resolution x-ray diffraction." Applied Physics Letters 113.18 (2018): 182102.

[13] Liu, L., and James H. Edgar. "Substrates for gallium nitride epitaxy."Materials Science and Engineering: R: Reports 37.3 (2002): 61-127.

[14] Zhu, Tongtong, and Rachel A. Oliver. "Unintentional doping in GaN."Physical Chemistry Chemical Physics 14.27 (2012): 9558-9573.

[15] Fritsch, Daniel, Heidemarie Schmidt, and Marius Grundmann. "Band-structure pseudopotential calculation of zinc-blende and wurtzite AIN, GaN, and InN." Physical Review B 67.23 (2003): 235205.

[16] Suzuki, Masakatsu, Takeshi Uenoyama, and Akira Yanase. "First-principles calculations of effective-mass parameters of AIN and GaN." Physical Review B52.11 (1995): 8132.

[17] Jeon, J. B., Sirenko, Y. M., Kim, K. W., Littlejohn, M. A., & Stroscio, M. A. (1996). Valence band parameters of wurtzite materials. Solid state communications, 99(6), 423-426.

[18] Morkoç, H. (2008). Handbook of Nitride Semiconductors and Devices: Materials Properties, Physics and Growth.

[19] Yoshida, S., S. Misawa, and S. Gonda. "Epitaxial growth of GaN/AIN heterostructures." Journal of Vacuum Science & Technology B 1.2 (1983): 250-253.

[20] Freitas Jr, J. A., et al. "Structural and optical studies of thick freestanding GaN films deposited by Hydride vapor phase epitaxy." Journal of Crystal Growth 350.1 (2012): 27-32.

[21] Van de Walle, Chris G., and Jörg Neugebauer. "First-principles calculations for defects and impurities: Applications to III-nitrides." Journal of Applied Physics 95.8 (2004): 3851-3879.
[22] Limpijumnong, Sukit, and Chris G. Van de Walle. "Diffusivity of native defects in GaN." Physical Review B 69.3 (2004): 035207.

[23] Xie, Zijuan, et al. "Donor and acceptor characteristics of native point defects in GaN." Journal of Physics D: Applied Physics (2019).

[24] Neugebauer, Jörg, and Chris G. Van de Walle. "Gallium vacancies and the yellow luminescence in GaN." Applied Physics Letters 69.4 (1996): 503-505.

[25] Walle, Chris G., Catherine Stampfl, and Jörg Neugebauer. "Theory of doping and defects in III–V nitrides." Journal of crystal growth 189 (1998): 505-510.

[26] Matsubara, Masahiko, and Enrico Bellotti. "A first-principles study of carbon-related energy levels in GaN. II. Complexes formed by carbon and hydrogen, silicon or oxygen." Journal of Applied Physics 121.19 (2017): 195702.

[27] Wright, A. F. "Substitutional and interstitial carbon in wurtzite GaN." Journal of applied physics 92.5 (2002): 2575-2585.

[28] Wright, A. F., and Ulrike Grossner. "The effect of doping and growth stoichiometry on the core structure of a threading edge dislocation in GaN."Applied physics letters 73.19 (1998): 2751-2753.

[29] Read Jr, W. T. "LXXXVII. Theory of dislocations in germanium." The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science 45.367 (1954): 775-796.

[30]Qiu, Kai, et al. "Threading dislocations related persistent photoconductivity effect in hydride vapor phase epitaxy grown GaN epilayers." EPL (Europhysics Letters) 82.1 (2008): 18002.

[31] Mimila-Arroyo, J., et al. "Improving the electrical properties of non-intentionally doped n-GaN by deuteration." Superficies y vacío 23.4 (2010): 31-34.

[32] Ripandelli, R., Master Thesis: "A method to obtain macroscopic plastic strain values with Electron Backscatter Diffraction data and a comparison with FEM". Rijksuniversiteit Groningen, 2018.

[33] Farvacque, J-L., Z. Bougrioua, and I. Moerman. "Free-carrier mobility in GaN in the presence of dislocation walls." Physical Review B 63.11 (2001): 115202.

[34] Weimann, Nils G., et al. "Scattering of electrons at threading dislocations in GaN." Journal of Applied Physics 83.7 (1998): 3656-3659.

[35] Maruska, H. Pi, and J. J. Tietjen. "The preparation and properties of Vapor-Deposited single-crystal-line GaN." Applied Physics Letters 15.10 (1969): 327-329.

[36] Ilegems, M., and H. C. Montgomery. "Electrical properties of n-type vapor-grown gallium nitride." Journal of Physics and Chemistry of Solids 34.5 (1973): 885-895.

[37] Bougrioua, Zahia, et al. "Mobility collapse in undoped and si-doped GaN grown by LP-MOVPE." Physica Status Solidi B Basic Research 216 (1999): 571-576.

[38] Yoshida, S., S. Misawa, and S. Gonda. "Epitaxial growth of GaN/AIN heterostructures." Journal of Vacuum Science & Technology B 1.2 (1983): 250-253.

[39] Nakamura, S., T. Mukai, and M. Senoh. "Insitu monitoring and Hall measurements of GaN grown with GaN buffer layers." Journal of applied physics 71.11 (1992): 5543-5549.

[40] Molnar, R. J., et al. "Growth of gallium nitride by hydride vapor-phase epitaxy." Journal of Crystal Growth 178.1 (1997): 147-156.

[41] Yun, F., et al. "Electrical, structural, and optical characterization of free-standing GaN template grown by hydride vapor phase epitaxy." Solid-State Electronics 44.12 (2000): 2225-2232.

[42] Morales Santillán, E.O., Tesis de Doctorado: "Efecto de Deuterar Películas de nid-GaN en sus Propiedades de Transporte de Carga", Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN, Dpto. de Ing. Eléctrica Sec. de Electrónica del Estado Sólido, 2012.

[43] Amano, Hiroshi, et al. "P-type conduction in Mg-doped GaN treated with low-energy electron beam irradiation (LEEBI)." Japanese Journal of Applied Physics 28.12A (1989): L2112.

[44] Nakamura, Shuji, Masayuki Senoh, and Takashi Mukai. "Highly p-typed Mg-doped GaN films grown with GaN buffer layers." Japanese journal of applied physics 30.10A (1991): L1708.
[45] Nakamura, Shuji, Takashi Mukai, and Masayuki Senoh. "Si-and Ge-doped GaN films grown with GaN buffer layers." Japanese journal of applied physics 31.9R (1992): 2883.

[46] Fritze, S., et al. "High Si and Ge n-type doping of GaN doping-Limits and impact on stress." Applied Physics Letters 100.12 (2012): 122104.

[47] Fireman, Micha N., et al. "High germanium doping of GaN films by ammonia molecular beam epitaxy." Journal of Crystal Growth 508 (2019): 19-23.

[48] Fujikura, Hajime, et al. "Homo-epitaxial growth of n-GaN layers free from carbon-induced mobility collapse and off-angle-dependent doping variation by quartz-free hydride vapor phase epitaxy." Applied Physics Letters 117.1 (2020): 012103.

[49] Kukushkin, S. A., et al. "Substrates for epitaxy of gallium nitride: new materials and techniques." Rev. Adv. Mater. Sci 17.1/2 (2008): 1-32.

[50] Ambacher, Oliver. "Growth and applications of group III-nitrides." Journal of Physics D: Applied Physics 31.20 (1998): 2653.

[51] Van Nostrand, J. E., et al. "Dissociation of Al2O3 (0001) substrates and the roles of silicon and oxygen in n-type GaN thin solid films grown by gas-source molecular beam epitaxy." Journal of Applied Physics 87.12 (2000): 8766-8772.

[52] Chen, P., et al. "Growth of high quality GaN layers with AIN buffer on Si (111) substrates." Journal of crystal growth 225.2 (2001): 150-154.

[53] Zhang, Haoxiang, Zhizhen Ye, and Binghui Zhao. "Epitaxial growth of wurtzite GaN on Si (111) by a vacuum reactive evaporation." Journal of Applied Physics 87.6 (2000): 2830-2834.

[54] Lahreche, H., et al. "Optimisation of AIN and GaN growth by metalorganic vapour-phase epitaxy (MOVPE) on Si (111)." Journal of crystal growth 217.1 (2000): 13-25.

[55] M. Kocan; "AlGaN/GaN MBE 2DEG Heterostructures: Interplay between Surface-, Interfaceand Device Properties", RWTH Aachen University, Aachen, Germany, July, 2003

[56] Pelá, R. R., et al. "Accurate band gaps of AlGaN, InGaN, and AlInN alloys calculations based on LDA-1/2 approach." Applied Physics Letters 98.15 (2011): 151907.

[57] Hsu, J. W. P., et al. "Surface morphology and electronic properties of dislocations in AIGaN/GaN heterostructures." Journal of electronic materials 30.3 (2001): 110-114.

[58] Ambacher, O., et al. "Two dimensional electron gases induced by spontaneous and piezoelectric polarization in undoped and doped AlGaN/GaN heterostructures." Journal of applied physics 87.1 (2000): 334-344.

[59] Xu, Xiaoqing, et al. "Dislocation scattering in Al x Ga 1− x N⁄ Ga N heterostructures." Applied Physics Letters 93.18 (2008): 182111.

[60] Kopylov, A. A. "Short-range disorder in ternary alloy semiconductors with the zincblende structure." Journal of Physics C: Solid State Physics 19.2 (1986): 93.

[61] Harris, J. J., et al. "The implications of spontaneous polarization effects for carrier transport measurements in GaN." Semiconductor science and technology 15.4 (2000): 413.

[62] Asbeck, P. M., et al. "Piezoelectric charge densities in AlGaN/GaN HFETs." Electronics letters 33.14 (1997): 1230-1231.

[63]Morkoç, Hadis, Roberto Cingolani, and Bernard Gil. "Polarization effects in nitride semiconductor device structures and performance of modulation doped field effect transistors." Solid-State Electronics 43.10 (1999): 1909-1927.

[64] Ambacher, O., et al. "Two-dimensional electron gases induced by spontaneous and piezoelectric polarization charges in N-and Ga-face AlGaN/GaN heterostructures." Journal of applied physics 85.6 (1999): 3222-3233.

[65] Ibbetson, J. P., et al. "Polarization effects, surface states, and the source of electrons in AlGaN/GaN heterostructure field effect transistors." Applied Physics Letters 77.2 (2000): 250-252.

[66]Ambacher, Oliver. "Growth and applications of group III-nitrides." Journal of Physics D: Applied Physics 31.20 (1998): 2653.

[67]Zhu, Xueliang, et al. "Improved surface morphology and mobility of AlGaN/GaN HEMT grown on silicon substrate." physica status solidi (c) 9.3-4 (2012): 473-475.

[68]Ni, Yiqiang, et al. "Effect of AIN/GaN superlattice buffer on the strain state in GaN-on-Si (111) system." Japanese Journal of Applied Physics 54.1 (2014): 015505.

[69]Mastro, M. A., et al. "MOCVD growth of thick AIN and AIGaN superlattice structures on Si substrates." Journal of crystal growth 287.2 (2006): 610-614.

[70] Chiu, Hsien-Chin, et al. "Effect of various Fe-doped AlGaN buffer layer of AlGaN/GaN HEMTs on Si substrate." Journal of Vacuum Science & Technology B, Nanotechnology and Microelectronics: Materials, Processing, Measurement, and Phenomena 35.4 (2017): 041205.
[71] Liddle, Adam J. Sensitivity Analysis of Algan/GAN High Electron Mobility Transistors to Process Variation. No. AFIT/GE/ENG/08-17. AIR FORCE INST OF TECH WRIGHT-PATTERSON AFB OH GRADUATE SCHOOL OF ENGINEERING AND MANAGEMENT, 2008.

[72]Sano, Y., et al. "High performance AlGaN/GaN HEMTs with recessed gate on sapphire substrate." Device Research Conference, 2001. IEEE, 2001.

[73] Arulkumaran, S., et al. "Characterization of different-Al-content Al x Ga 1- x N/GaN heterostructures and high-electron-mobility transistors on sapphire." Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement, and Phenomena 21.2 (2003): 888-894.

[74] Sheu, Jinn-Kong, Min-Lum Lee, and Wei-Chi Lai. "Effect of low-temperature-grown GaN cap layer on reduced leakage current of GaN Schottky diodes." Applied Physics Letters 86.5 (2005): 052103.

[75] Iniewski, Krzysztof, ed. Nano-Semiconductors: Devices and Technology. CRC Press, 2011.

[76] Javorka P. "Fabrication and Characterization of AlGaN/GaN High Electron Mobility Transistors". Institute of Thin Films and Interfaces, Research Centre Juelich, Juelich, Germany (2004).

[77] Calle, F., et al. "AlGaN/GaN HEMTS: material, processing, and characterization." Journal of Materials Science: Materials in Electronics 14.5 (2003): 271-277.

[78] Hou, Danqiong, Griff L. Bilbro, and Robert J. Trew. "Analytic model for conduction current in AIGaN/GaN HFETs/HEMTs." Active and Passive Electronic Components 2012 (2012).

[79] Mitchell, E. W. J., and J. W. Mitchell. "The work functions of copper, silver and aluminium." Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. Vol. 210. No. 1100. The Royal Society, 1951.

[80] Liu, Q. Z., and S. S. Lau. "A review of the metal–GaN contact technology." Solid-State Electronics 42.5 (1998): 677-691.

[81] Delagebeaudeuf, Daniel, and Nuyen T. Linh. "Metal-(n) AlGaAs-GaAs two-dimensional electron gas FET." Electron Devices, IEEE Transactions on 29.6 (1982): 955-960.

[82] Schubert, E. Fred. Physical Foundations of Solid-State Devices. E. Fred Schubert, 2015.

[83] Mishra, Umesh K., et al. "GaN-based RF power devices and amplifiers." Proceedings of the IEEE 96.2 (2008): 287-305.

[84] Celis García A. Tesis de Maestría: "Efectos de la hidrogenación a fuerte dosis en la corriente de oscuridad del HEMT fotoconductor AlGaN/GaN." Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN, Dpto. de Ing. Eléctrica Sec. de Electrónica del Estado Sólido, 2013.

[85] Montiel Rodriguez A.L. Tesis de Maestría: "Estudio del efecto de la longitud de compuerta en el desempeño del HEMT

AlGaN/GaN" Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN, Dpto. de Ing. Eléctrica Sec. de Electrónica del Estado Sólido, 2017.

[86] Wang, Xiaoliang, et al. "Growth and characterization of 0.8-Åm gate length AlGaN/GaN HEMTs on sapphire substrates." Science in China Series F: Information Sciences 48.6 (2005): 808-814.

[87] Storm, D. F., et al. "Microwave performance and structural characterization of MBE-grown AlGaN/GaN HEMTs on low dislocation density GaN substrates." Journal of crystal growth 305.2 (2007): 340-345.

[88] Nomoto, Kazuki, et al. "Remarkable reduction of on-resistance by ion implantation in GaN/AIGaN/GaN HEMTs with low gate leakage current." IEEE Electron Device Letters 28.11 (2007): 939-941.

[89] Cordier, Yvon, et al. "Demonstration of AlGaN/GaN high-electron-mobility transistors grown by molecular beam epitaxy on Si (110)." IEEE Electron Device Letters 29.11 (2008): 1187-1189.

[90] Wong, Yuen-Yee, et al. "Growth and fabrication of AlGaN/GaN HEMT on SiC substrate." 2012 10th IEEE International Conference on Semiconductor Electronics (ICSE). IEEE, 2012.

[91] Mukhopadhyay, Partha, et al. "Comparative DC Characteristic Analysis of AlGaN/GaN HEMTs Grown on Si (111) and Sapphire Substrates by MBE." Journal of electronic materials 43.4 (2014): 1263-1270.

[92] Ahn, Shihyun, et al. "Study of the effects of GaN buffer layer quality on the dc characteristics of AlGaN/GaN high electron mobility transistors." Journal of Vacuum Science & Technology B, Nanotechnology and Microelectronics: Materials, Processing, Measurement, and Phenomena 33.3 (2015): 031210.

[93] Nigam, Adarsh, et al. "Effect of self-heating on electrical characteristics of AlGaN/GaN HEMT on Si (111) substrate." AIP Advances 7.8 (2017): 085015.

[94] Visvkarma, Ajay Kumar, et al. "Improvement in DC and pulse characteristics of AlGaN/GaN HEMT by employing dual metal gate structure." Semiconductor Science and Technology 34.10 (2019): 105013.

▷ 2. Hidrógeno en los Semiconductores, GaN, AlGaN/GaN y HEMT

2.1 Introducción

En este capítulo, se trata la introducción de hidrógeno en los semiconductores, particularmente en el GaN, y su interacción con algunas de las impurezas presentes en este material. Se explica el mecanismo de formación de complejos neutros hidrógeno-impureza en el silicio, que también puede utilizarse para explicar su formación en otros semiconductores, como el GaN. Para este último, se menciona la dependencia del estado de carga del hidrógeno intersticial con el nivel de Fermi del semiconductor, su localización más probable, la formación de complejos con impurezas presentes en el material y la pasivación de impurezas aceptoras, incluidas las localizadas en la región de las dislocaciones de cuña. Finalmente, se describen de forma detallada los resultados experimentales obtenidos principalmente por este grupo de trabajo de la Sección de Electrónica del Estado Sólido con respecto a la hidrogenación intencional del GaN, la heteroestructura AlGaN/GaN y del transistor HEMT basado en esa estructura, en los que el comportamiento del hidrógeno es aprovechado para mejorar su desempeño.

2.2 Hidrógeno en Semiconductores

El hidrógeno puede ser introducido en los semiconductores de manera no intencional durante los procesos de crecimiento y elaboración de dispositivos, o bien intencionalmente mediante difusión controlada. La introducción no intencional es prácticamente inevitable, ya que en la mayoría de las técnicas de crecimiento y procesamiento como VPE, MOCVD, pulverización catódica (Sputtering) y decapados se manejan grandes cantidades de este elemento, además de que se desprende de las paredes de la cámara de crecimiento, como en el caso de MBE [1].

El hidrógeno tiene la capacidad de pasivar algunos defectos en semiconductores, por lo que éste es también introducido de manera intencional. Su introducción intencional y controlada en semiconductores requiere que la fuente de difusión sea iones hidrógeno; H⁺.

Por ello una de las técnicas más utilizadas es la de plasma de RF remoto de baja densidad de potencia (0.1-1 W/cm²) a baja presión (100-300 mTorr). El sistema de hidrogenación genera un plasma de hidrógeno mediante acoplamiento capacitivo a baja frecuencia (30 kHz) o mediante un oscilador de alta frecuencia (13.5 MHz). La muestra a hidrogenar es expuesta a

este plasma, controlando la potencia del mismo, la temperatura de la muestra y la duración de la hidrogenación. La concentración de H⁺ es proporcional a la potencia de RF aplicada entre los electrodos que producen el plasma. Esta técnica ocasiona daños importantes en la superficie de la muestra, especialmente si la potencia utilizada es alta, debido a que la energía de los iones que lo componen se encuentra entre los 100 y 1000 eV, suficiente para desplazar los átomos del semiconductor, ya que la energía mínima necesaria para provocar el desplazamiento atómico es ~15 eV en la mayoría de los semiconductores. Sin embargo, los daños son menores en comparación con los ocasionados por otras técnicas, como implantación iónica [2].

Por otra parte, la concentración en la que se incorpora una impureza o defecto en un semiconductor durante su crecimiento, a una temperatura determinada (*T*), depende de la energía de formación del defecto (E_{for}) conforme a:

$$c = N_{Sites} e^{-E_{for}/k_B T}$$
(2.1)

donde N_{Sites} es el número de sitios en los que puede incorporarse el defecto o impureza, y k_B la constante de Boltzmann [3]. Esto quiere decir que, a menor energía de formación del defecto, mayor será su concentración en el semiconductor, y viceversa.

Para el hidrógeno intersticial en silicio, por ejemplo, las energías de formación de sus diferentes estados de carga se ilustran en la *Figura 2.1*.



Figura 2.1. Energía de formación para el hidrógeno intersticial en silicio en función del nivel de Fermi de este último. $E_F = 0$ corresponde al máximo de la banda de valencia. [2]

Como se observa en la figura, la energía de formación para los diferentes estados de carga del hidrógeno depende del nivel de Fermi del semiconductor en el que se incorpora, es decir, que se comporta como una impureza anfótera, siendo H^+ y H^- los más probables en

equilibrio. En silicio tipo-p, H^+ es el estado de carga más probable, comportándose como donador; mientras que en silicio tipo-n es H^- , comportándose como aceptor. En varios semiconductores, tiene un comportamiento similar. H^+ minimiza su energía al ubicarse en centros de alta densidad de carga electrónica, por lo que, en algunos semiconductores, como el silicio, tendrá una ubicación centrada en el enlace (BC), y en semiconductores compuestos, se encontrará generalmente cerca del anión. De manera opuesta, H^- buscará ubicarse en las zonas con menor densidad de carga electrónica; en sitios intersticiales tetraédricos en semiconductores como el silicio, y cerca del catión en semiconductores compuestos [1].

Experimentalmente se ha observado que el hidrógeno interactúa con algunos defectos e impurezas que introducen niveles profundos en la banda prohibida de varios semiconductores, pasivándolos. En germanio, Pearton y Tavendale [4] observaron la pasivación de algunos de los niveles donadores profundos introducidos por Cd, Te, Zr y Ti. En silicio, el hidrógeno puede pasivar impurezas metálicas como Au, Fe, Ni, Cu, Pd y Pt, introducidas durante etapas de alta temperatura en su procesamiento o formando clústeres durante su crecimiento, las cuales llegan a encontrarse en concentraciones suficientes para degradar sus propiedades de transporte. También se han observado la pasivación parcial de S, Se y Te, donadores dobles cuando se encuentran aislados en el Si, y la reducción de la densidad de estados correspondientes a defectos y barreras de potencial relacionadas con fronteras de grano [2]. En semiconductores compuestos, como el GaAs e InP, también se ha conseguido reducir la densidad de niveles profundos [5 -7]. En silicio amorfo, la interacción del hidrógeno con enlaces sueltos, mejora considerablemente las propiedades de transporte de este material [8]. La pasivación de impurezas poco profundas por el hidrógeno en el silicio, GaAs y germanio, también ha sido ampliamente reportada. En el caso del GaAs, pasiva impurezas como Si, Ge, Sn, S, Se (donadores) y Be, Mg, Cd, Zn y C (aceptores) [5, 9], mientras que en silicio, los aceptores rasos (B, Al, Ga, In y Tl) son pasivados hasta en un 99%. La pasivación de donadores rasos (P, As, Sb) en este último es mucho menor o despreciable dependiendo de la concentración de portadores en el material.

El mecanismo por el cual el hidrógeno pasiva aceptores simples en silicio fue propuesto por Pantelides [10]. De acuerdo con la propuesta, en silicio tipo-p, el electrón del hidrógeno se recombina con un hueco, formando H^+ , compensando aceptores. H^+ , siendo móvil, es atraído hacia algún aceptor ionizado (A^-), formando un complejo hidrógeno-impureza al enlazarse con éste. Lo anterior se describe por las siguientes ecuaciones:

$$H^0 + h^+ \to H^+ \tag{2.2.a}$$

$$H^+ + A^- \to (HA)^0$$
 (2.2.b)

De manera análoga, en silicio tipo-n, el hidrógeno pasiva impurezas donadoras; éste se comporta como aceptor, convirtiéndose en H^- , compensando donadores. H^- es entonces atraído por algún donador ionizado (D^+), formando un complejo neutro, conforme a:

$$H^0 + e^- \to H^- \tag{2.3.a}$$

$$H^- + D^+ \to (HD)^0$$
 (2.3.b)

En semiconductores compuestos como 6H-SiC:B , 6H-SiC:AI, GaN:Mg, ZnSe:N y CdTe:As también se ha observado la formación de complejos hidrógeno-aceptor; mientras que la formación de complejos hidrógeno-donador, tanto en silicio como en semiconductores compuestos, sólo se ha observado en algunos casos [11].

2.2.1 Hidrógeno en GaN

Las energías de formación para los diferentes estados de carga del hidrógeno intersticial en el GaN dependen también del nivel de Fermi. Éstas han sido calculadas por Van de Walle et al. [12], y se muestran en la *Figura 2.2*.



Figura 2.2. Energías de formación del hidrógeno intersticial en función del nivel de Fermi del GaN. $E_F=0$ corresponde al máximo de la banda de valencia. La energía de formación se encuentra referenciada a las moléculas libres de H₂ [12].

De acuerdo con los cálculos, para niveles de Fermi inferiores a ~2.4 eV, la formación de H^+ es más favorable (menor energía de formación), mientras que, para niveles de Fermi

superiores, H^- es la especie que se incorpora. Es decir, que el hidrógeno se comporta como una impureza anfótera, actuando como donador (H^+) en GaN tipo-p y como aceptor (H^-) en GaN tipo-n.

Con respecto a su localización, cálculos realizados por Limpijumnong y Van de Walle [13], predicen que el H^+ se encuentra cerca del átomo de nitrógeno en una posición centrada en el enlace (BC) o bien en un sitio anti-enlace (AB_N); orientado de manera paralela al eje c (||), o no (denotada como perpendicular, \perp), siendo BC_{II} su posición más estable. Por otra parte, la posición más estable para H^- es al centro del canal hexagonal desplazado ~0.4 A del sitio octaedral O, hacia el plano más cercano de átomos de galio, localizándose de manera equidistante de los seis nitrógenos más cercanos; posición derivada de su repulsión con los aniones. Estas posiciones se ilustran en la *Figura 2.3*.



Figura 2.3. Representación esquemática de las principales localizaciones calculadas por Limpijumnong y Van de Walle para el H monoatómico y H_2 en el plano (11 $\overline{2}$ 0) del GaN de estructura Wurtzita. [13]

En el GaN se ha observado experimentalmente la formación de complejos neutros hidrógenoaceptor con impurezas como Mg, Zn, Be, Ca, Cd, C, etc., pasivando su actividad eléctrica [14]. Con la introducción no intencional de hidrógeno durante el crecimiento, se forman este tipo de complejos (ej. Mg-H, Zn-H), pasivando estados aceptores, ocasionando una alta resistividad en las películas y una baja intensidad de la emisión azul de fotoluminiscencia [15]. Este efecto retrasó la obtención de GaN de conductividad-p y de los diodos electroluminiscente realizados con base en éste.

En contraste con lo anterior, la pasivación de donadores en GaN no ha sido reportada ya que la formación de complejos hidrógeno-donador es poco probable. En el caso del GaN tipo-p, por ejemplo, la formación de complejos de este tipo no es posible, ya que ambos se encuentran cargados positivamente, repeliéndose entre sí [16], mientras que su difusión en GaN tipo-n es complicada, como se observa en el trabajo de Gotz et al. [17], en el que se difundió deuterio en películas de GaN tipo-p (Mg) a 600°C y 400°C y en tipo-n (Si) a 600°C. Los perfiles de concentración de deuterio obtenidos por SIMS se muestran en la *Figura 2.4*. En el caso de las películas tipo-p, el perfil de deuterio difundido a 600°C aproxima la concentración de Mg, mientras que en las películas tipo-n, su concentración en las mismas condiciones de difusión, fue inferior al límite de detección del equipo $(10^{16} \text{ cm}^{-3})$. Lo anterior tiene su explicación en las energías de migración de cada especie; la barrera de difusión estimada para H^+ es de 0.7 eV, mientras que para H^- es de ~3.4 eV [3]. Sin embargo, como se verá más adelante, Mimila et. al difundiéndolo a temperaturas más bajas reportan perfiles donde aparece claramente el mecanismo de difusión térmicamente estimulada.



Figura 2.4. Perfiles SIMS de concentración de deuterio en películas de GaN deuteradas a diferentes temperaturas [17].

El hidrógeno también puede interactuar con los defectos nativos del GaN. Se pueden enlazar hasta cuatro átomos de hidrógeno con una vacancia de galio (V_{Ga}), la cual, como se mencionó en el capítulo anterior, es un aceptor triple con baja energía de formación en GaN tipo-n, removiendo niveles aceptores conforme éstos se unen. Sin embargo, aquellas vacancias con solamente uno o dos hidrógenos mantienen un comportamiento similar al de la V_{Ga} sin hidrogenar, es decir compensando donadores y contribuyendo a la emisión de banda amarilla [12]. La formación de estos dos complejos, $V_{Ga}H y V_{Ga}H_2$, es la más probable, comportándose como aceptores dobles y sencillos, respectivamente, mientras que la formación de $V_{Ga}H_4$ y la captura de hidrógeno por vacancias existentes (cargadas negativamente) son poco probables, esto último debido a que en GaN tipo-n, H^- es el estado de carga más probable para el

hidrógeno, por lo que ambos se repelen electrostáticamente. Estos complejos se forman durante el crecimiento, dependiendo de los átomos de hidrógeno disponibles en ese momento [18].

La pasivación de algunos estados profundos en el nid-GaN por el hidrógeno fue reportada por Hierro et al. [19]. Sus películas, crecidas con impurificación no intencional tipo-n (3x10¹⁶ cm⁻³), fueron sometidas a un tratamiento de hidrogenación por plasma de RF remoto a 200°C por 30 minutos y estudiadas mediante la técnica de EBIC (Electron Beam Induced Current). Esta técnica consiste en la generación de pares electrón-hueco por un haz de electrones que se hace incidir sobre la muestra. Si la muestra es de tal forma en que existe un campo eléctrico interconstruido (ej. diodo), los pares generados son separados por éste y recolectados por el circuito de medición, utilizando esta corriente para generar una imagen conforme la muestra se escanea. La presencia de centros de recombinación ocasiona una disminución en la corriente, ya que los portadores se recombinan antes de ser separados por el campo, lo que se manifiesta como regiones obscuras en la imagen producida.

De esta forma, Hierro et al. obtuvieron imágenes, que se incluyen en la *Figura 2.5*, en las que observa una densidad de regiones obscuras de ~6x10⁸ cm⁻², correspondientes a regiones con una alta recombinación, atribuidas por los autores a dislocaciones de borde. Debido a que no se observaron cambios significativos en la densidad de regiones obscuras en las imágenes obtenidas antes y después de la hidrogenación, los autores concluyeron que el hidrógeno no había pasivado la actividad eléctrica de las dislocaciones. Sin embargo, el contraste entre las regiones obscuras y el resto del material en una misma imagen aumentó después de la hidrogenación de niveles profundos relacionados con defectos puntuales fuera de la región de las dislocaciones.



Figura 2.5. Imágenes EBIC obtenidas a) antes y b) después de un tratamiento de Hidrogenación por RF de plasma remoto. En cada caso se indica el contraste calculado a partir de $c = (I_b - I_d)/I_b$, donde I_b e I_d son las intensidades de las regiones de fondo (background) y de defectos, respectivamente, en la imagen [19]

Mimila et al. [20] estudiaron la difusión de deuterio en películas de nid-GaN crecidas sobre zafiro mediante MOCVD y deuteradas por plasma de RF remoto a una temperatura de 460 °C y 1 Wcm⁻² de potencia por tiempos de entre 5 y 360 minutos.

En los perfiles de concentración de deuterio obtenidos mediante SIMS, *Figura 2.6.a*, se observaron tres regiones con diferentes mecanismos de difusión: una cercana a la superficie (profundidad \leq 30 nm) con una alta concentración de deuterio (~10²⁰ cm⁻³), otra, con espesores de entre 100 y 300 nm según el tiempo de deuteración y con concentraciones de deuterio del orden de 10¹⁸ cm⁻³, independientemente de las condiciones de deuteración, y una tercera, en la que el deuterio se difunde en toda la película aún a tiempos de difusión tan bajos como 5 minutos. Es interesante observar que, a partir del tiempo de difusión de 90 minutos, el perfil del deuterio no profundiza más en el GaN. Este comportamiento, que no fue discutido por los autores, podría deberse a que hay una zona de vaciamiento libre de electrones en la superficie de la película. Como el hidrógeno se introduce en el estado H⁺, se difunde a través de la región en la que no hay de electrones, pero, al alcanzar la región en la que sí los hay, se carga negativamente (H⁻). Como se mencionó anteriormente, en este estado de carga, el hidrógeno prácticamente no se difunde.

Por otra parte, en los resultados de la caracterización eléctrica, mostrados en la *Figura 2.6.b*, se observa que, para tiempos menores a 90 minutos, la concentración de electrones libres disminuye conforme el tiempo de difusión incrementa, mientras que la movilidad aumenta. Para tiempos iguales o mayores a 90 minutos, la concentración incrementa ligeramente, pero la movilidad mantiene un valor similar al presentado para difusiones de ~22 minutos. Esto fue atribuido a dos procesos que ocurren simultáneamente conforme el deuterio se difunde en el material, pero a razones diferentes: la captura de electrones por el hidrógeno y la pasivación de aceptores ionizados localizados en el borde de la dislocación y en la región perturbada en torno a esta, A_d^- , conforme a las *ecuaciones (2.4)* y *(2.5)* respectivamente:

$$H + e^- \to H^- \tag{2.4}$$

$$A_d^- + H \to AH + e^- \tag{2.5}$$

El primero de estos procesos reduce la concentración de electrones libres, al mismo tiempo que el segundo reduce la capacidad de dispersión de la barrera en la dislocación y libera electrones. Aunque el primero forma un centro dispersor, H⁻, su capacidad de dispersión es mucho menor que la de la barrera interconstruida en la dislocación. El primero sería el responsable de la disminución en la concentración de electrones y el segundo del aumento en su movilidad.



Figura 2.6. a) Perfil SIMS de concentración de deuterio para la condición as-grown del nid-GaN y para diferentes tiempos de difusión: 5, 22, 90 y 360 minutos b) Movilidad en función de la concentración de electrones para diferentes tiempos de deuteración [20]

La alta concentración de deuterio en la primera región fue atribuida a la captura del mismo por los defectos superficiales generados por el plasma. La baja profundidad de la segunda es debida, probablemente, a que el deuterio captura electrones convirtiéndose en D^- , cuya energía de activación para la difusión es muy alta. Su rápida difusión en la tercera región, probablemente se lleva a cabo a través de las dislocaciones de borde, en las que una parte queda atrapada, pasivando aceptores contenidos en las dislocaciones, y otra parte se difunde hacia el resto del volumen del GaN, donde captura electrones.

De estos antecedentes, surgió la necesidad de estudiar en detalle los efectos de la deuteración de películas de GaN no intencionalmente impurificadas, para confirmar la pasivación de los estados aceptores en la región de las dislocaciones, y si es posible difundir el deuterio a profundidades mayores mediante el recocido de las películas. Por este motivo, Mimila et al. [21, 22] estudiaron las propiedades de transporte de carga; conductividad, concentración y movilidad de portadores, y fotoconductividad de películas de nid-GaN crecidas por LPMOCVD antes y después de ser sometidas a tratamientos de deuteración mediante plasma de RF remoto, y a recocidos térmicos posteriores al tratamiento.

Muestras sin tratamiento fueron caracterizadas en condiciones de obscuridad e iluminación con fotones de energías de 2.4 eV (lámpara de filamento de tungsteno a baja temperatura), inferiores a la banda prohibida, es decir, fotones que no pueden transferir electrones de la banda valencia la de conducción y dar lugar a un efecto fotoconductor. Los valores de conductividad en iluminación fueron más de tres veces mayores (330%) que los valores medidos en obscuridad, 133 mS/cm en la primera condición y 40 mS/cm en la segunda. La

concentración de electrones fue prácticamente la misma en ambas condiciones, 2.2x10¹⁶ cm⁻ ³, mientras que la movilidad en iluminación (38.2 cm²/Vs) tuvo un incremento de más de 300% con respecto a su valor en obscuridad (12.5 cm²/Vs), porcentaje equivalente al de la conductividad. Además, el tiempo de regreso al equilibrio después de retirar la iluminación fue considerable (~5 horas), es decir presentan una fotoconductividad persistente con un tiempo de retorno al equilibrio muy largo.

El comportamiento anterior se explicó a partir de que el valor de la conductividad, σ , depende directamente de la movilidad, μ_n , y la concentración de portadores, n₀,:

$$\sigma = q n_0 \mu_n \tag{2.6}$$

El incremento en la concentración de portadores fue despreciable, pero la movilidad incrementó más de 300% tras la iluminación, lo cual indica que la fotoconductividad es únicamente debida al aumento de la movilidad. Este cambio, presentado a pesar de iluminar con fotones de energías menores al ancho de banda del GaN, fue atribuido a la transferencia de electrones localizados en los sitios aceptores de las dislocaciones, disminuyendo la altura de su barrera de energía interconstruida, dando lugar a un incremento en la movilidad. La presencia de dislocaciones también explica la fotoconductividad persistente ya que, una vez retirada la iluminación, para regresar a los sitios aceptores de las dislocaciones, los electrones deben tener una energía cinética igual o mayor a la de la barrera, cuya altura incrementa conforme éstos son capturados. La concentración de electrones que cumplen esta condición disminuye exponencialmente, provocando un lento regreso al estado de equilibrio.

Posteriormente, se deuteraron muestras utilizando una potencia de plasma de 1.0 W/cm² a una temperatura de difusión de 460°C y con un tiempo de difusión de 6 horas. Con la deuteración, se presentó una disminución de la fotoconductividad; el incremento en la conductividad con la iluminación se redujo a un ~40%. La concentración de electrones libres en obscuridad se redujo 4.5 veces con respecto a la condición sin deuterar, pasando de n₀ ~ $2.2x10^{16}$ cm⁻³ a n₀ ~ $5x10^{15}$ cm⁻³, y la movilidad en obscuridad incrementó por un factor de 19 (de $\mu_n \sim 12 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ a $\mu_n \sim 230 \text{ cm}^2/\text{Vs}$). Así mismo, el cambio en la movilidad entre las condiciones de iluminación y el equilibrio se redujo para las muestras deuteradas, siendo menor al 10%. Lo anterior se observó en varias muestras, caracterizadas antes y después de la deuteración.

El material fue caracterizado mediante fotoluminiscencia a temperatura ambiente, alrededor de la región de emisión banda-banda, observándose un incremento en la intensidad de esa

transición en comparación con las muestras sin deuterar. Los resultados de movilidad y concentración de electrones, así como de los estudios de fotoluminiscencia, se incluyen en la *Figura 2.7.*



Figura 2.7. a) Movilidad de electrones para una muestra bruta de crecimiento y una deuterada. b) Espectro de fotoluminiscencia a temperatura ambiente alrededor de la región banda-banda, para las mismas muestras [21].

El comportamiento de las propiedades de transporte de carga se explica de la misma forma que para las muestras estudiadas previamente por Mimila et al. [20]: el incremento en la movilidad de los electrones en obscuridad y su fotoconductividad despreciable tras haber realizado la deuteración, en contraste con la condición sin tratamiento, en la que la movilidad incrementa, pero la concentración de electrones se mantiene, fueron atribuidos a la pasivación de los aceptores en los bordes de las dislocaciones conforme a la *reacción (2.5)*. La disminución de la concentración de portadores como resultado de la deuteración, fue atribuida a la presencia de deuterio en las regiones fuera de la zona de carga espacial de las dislocaciones, donde hay electrones libres, capturándolos conforme a (2.4).

Las mediciones de fotoluminiscencia permiten confirmar esta pasivación. Como se observa en la *Figura 2.7.b*, las muestras sin tratamiento presentan una baja intensidad en la transición banda-banda debido a que los estados en la región de las dislocaciones constituyen trayectorias de recombinación. Al pasivar estos estados, la intensidad de la emisión bandabanda incrementa en un factor superior a 50.

Posteriormente, este grupo de la SEES exploró la posibilidad de reducir el tiempo de deuteración, recociendo muestras previamente deuteradas. La deuteración se realizó a una temperatura de 350°C, por 30 minutos y con una densidad de potencia de 1 W/cm². Seguido de esto, las muestras fueron recocidas a temperaturas desde 370°C hasta 750°C, en forma incremental sobre las mismas muestras. Los tiempos de recocido variaron entre 10 y 1100 minutos, dependiendo del momento en que los valores medidos de las propiedades de

transporte de las muestras se saturaron. Con el fin de comparar y confirmar que el recocido no tenía efecto considerable sobre las características de transporte de carga del nid-GaN sin tratamiento, algunas muestras as-grown fueron recocidas a temperaturas entre 700°C y 750°C por tiempos de 10 a 15 minutos. La conductividad, movilidad y concentración de portadores de esas muestras presentaron valores muy similares a los de las películas sin recocer, tanto en iluminación como en obscuridad, con diferencias atribuibles al sistema y montaje de medición.



Figura 2.8. Evolución de la movilidad y concentración de electrones libres para las muestras sin tratamiento (as-grown), deuteradas y para diferentes temperaturas de recocido [21].

Los resultados de la caracterización de la muestra deuterada y recocida, se incluyen en la *Figura 2.8.* La figura muestra el comportamiento de la movilidad y la concentración de portadores de las muestras deuteradas, en función de la temperatura de tratamiento postdeuteración. La movilidad incrementa con el tiempo y temperatura de recocido. Es importante notar que, bajo estas condiciones de difusión (30 minutos, 350°C), la deuteración y un recocido a 700°C por 10 minutos, son equivalentes a una difusión por 6 horas, lo que resulta muy atractivo para su implementación en una línea de producción. Se propuso que el deuterio se difunde hacia el volumen de los granos a partir de la región desordenada propia a la dislocación.

2.3 Hidrógeno en la heteroestructura AlGaN/GaN

A pesar de las ventajas que las características intrínsecas del 2DEG contenido en la heterounión AlGaN/GaN, como la alta movilidad, concentración de electrones y un elevado campo eléctrico de ruptura, representan especialmente para su operación a altas frecuencias

y de potencia [23], el desempeño de los transistores HEMT se ve mermado por problemas tales como corrientes de fuga importantes, resistencia de encendido alta, colapso de corriente y de calidad de los contactos, mayormente derivados de la presencia de defectos en las interfaces y películas que conforman estos dispositivos. Después de haber estudiado los efectos positivos de la hidrogenación de películas "as-grown" de nid-GaN, idénticas a las que intervienen en el HEMT, este grupo de la SEES se enfocó en determinar si la estructura de este transistor también podía ser mejorada mediante la hidrogenación.

Con el fin de evitar el costoso procesado de la realización del HEMT, este mismo grupo de la SEES realizó una exploración preliminar del efecto de la introducción controlada de deuterio en heteroestructuras AIGaN/GaN [24]. Las muestras estudiadas fueron crecidas mediante MBE sobre sustratos de silicio resistivo (>10 KΩcm) y por MOCVD sobre SiC tipo-n⁺, con concentraciones de aluminio en la capa AlGaN de x = 0.26 (MBE) y x = 0.2 (MOCVD). La deuteración fue llevada a cabo mediante la técnica de plasma de RF remoto a diferentes tiempos, temperaturas y potencia de excitación del plasma. La Figura 2.9.a muestra perfiles SIMS de deuterio para difusiones de 30 minutos a diferentes potencias y temperaturas. En éstos se observa que, para todas las condiciones de deuteración, el deuterio se difunde hasta la interfase del GaN con el sustrato, mostrando, sistemáticamente, una elevada concentración en la película de AlGaN y en la interfase AlGaN/GaN, penetrando, para ciertas condiciones, en la región del 2DEG. Para la deuteración realizada a 300°C y 3 W de potencia, se reporta que la característica capacitancia-voltaje se mantuvo sin cambios importantes. Sin embargo, la concentración de portadores pasó de n_s = 4.7x10¹² cm⁻² en el estado as-grown a n_s = 1.7x1012 cm-2 tras la deuteración realizada a 460°C, 30 W. Mediciones de efecto Hall y resistividad realizadas a las estructuras crecidas por MBE, Figura 2.9.b, indican una reducción tanto de la movilidad como de la concentración de los portadores libres del canal; ~70% y ~50%, respectivamente. También se observó que estos cambios eran parcialmente reversibles si las muestras deuteradas eran sometidas a recocidos (RTA). Los cambios en la concentración y la movilidad de los electrones en el 2DEG fueron explicados como una consecuencia de la difusión de deuterio en la región del 2DEG, donde captura electrones, constituyendo simultáneamente un centro dispersor de portadores conforme a la ecuación (2.3.a).



Figura 2.9. a) Concentración de deuterio en la estructura. b) Movilidad electrónica del gas bidimensional para diferentes condiciones de deuteración. [24]

Estos resultados obligaron a realizar un estudio más detallado sobre las condiciones de deuteración, buscando introducir elevadas concentraciones en el AlGaN hasta su interfase con el GaN, sin penetrar en el 2DEG. De esta manera, en contraste con los resultados anteriores, en un trabajo posterior de Mimila et al. [25], se reportan los resultados de la deuteración de la estructura AlGaN/GaN utilizando una potencia de plasma de 0.1 W/cm² a 300°C durante 30 minutos. El perfil SIMS de deuterio en la estructura mostró una alta concentración en la película de AlGaN (~10²⁰ cm⁻³), que se reduce desde la superficie hacia la interfase. A partir de la integración del perfil en la región inferior a la interfase AlGaN/GaN, se obtuvo una concentración de deuterio de ~1.5x10¹² cm⁻², permitiendo confirmar que, en estas condiciones de deuteración, aunque el deuterio se difundió incluso más allá de la interfase, su concentración en la región en la que se localiza el 2DEG, es considerablemente menor que la de los electrones contenidos en éste (n_s = $1.1x10^{13}$ cm⁻²), teniendo un efecto despreciable en cuanto a captura y dispersión de portadores.

Las mediciones de resistividad y efecto Hall, *Figura 2.10*, muestran un incremento del 30% en la concentración de electrones en el 2DEG, la cual pasó de 1.1x10¹³ cm⁻² a 1.4x10¹³ cm⁻², mientras que la movilidad permaneció sin cambios detectables (~1220 cm²/Vs). Tal cambio reduce la resistencia de hoja del canal alrededor de un 30%. Este resultado cuestiona el modelo que propone que los electrones en el 2DEG provienen de los estados de superficie de la estructura [26].



Figura 2.10. a) Resistencia de hoja en función de la corriente de medición y b) movilidad electrónica contra concentración de portadores, para diferentes corrientes, de la estructura AlGaN/GaN, antes y después de deuterar [25].

Estos resultados, junto con los obtenidos por SIMS, permiten concluir que es posible deuterar la estructura para incrementar la concentración de electrones en el 2DEG, sin modificar ni agregar nuevos centros de dispersión de manera importante, por lo que la movilidad de los electrones en el canal permanece aproximadamente igual a la condición anterior a la deuteración. El incremento en la concentración de portadores libres en el canal fue atribuido a la pasivación de aceptores localizados en el AlGaN y/o en la interfase AlGaN/GaN, proceso descrito por la reacción:

$$A^- + D \to AD + e \tag{2.7}$$

en la que, al formarse un complejo entre el deuterio, D, y un aceptor ionizado, A^- , se libera un electrón atrapado previamente por este último.

Las mejoras conseguidas en las propiedades de transporte de carga del 2DEG, deberían poder transferirse a un HEMT deuterado bajo las mismas condiciones, debiendo tener una menor resistencia de encendido, mayor corriente de drenador, etc. Con base en este planteamiento, una vez validadas las mejoras que la deuteración de la estructura HEMT aporta, se decidió pasar a la realización de un transistor de 1.0 μ m y 100 μ m de largo y ancho de compuerta, respectivamente. El alto costo de realizar un HEMT, incluye el tiempo invertido en sala limpia durante todos los procesos: epitaxia, procesos fotolitográficos (en este caso, cuatro), el costo de la epitaxia misma (reactivos y equipo), fotoresinas, alineadora, decapado por plasma y evaporaciones y metales evaporados, como mínimo. En Europa, el total se aproxima a varias decenas de miles de Euros, de donde surge la necesidad de haber realizado antes el estudio aquí resumido.

Por otro lado, si se deutera la estructura en condiciones que el deuterio en la región del 2DEG alcance concentraciones iguales o superiores a la cantidad de electrones contenidos en éste, los electrones libres son capturados y localizados en el deuterio conforme a la *ecuación (2.3.a)* y el 2DEG desaparece, resultando en un excelente fotoconductor que debería responder desde el infrarrojo hasta el ultravioleta.

2.4 Hidrógeno en el transistor HEMT AlGaN/GaN

2.4.1 Hidrógeno en el HEMT fotoconductor

La incidencia de fotones con energías mayores al ancho de banda del material genera pares electrón-hueco. En la estructura del HEMT, **Figura 2.11**, el campo eléctrico interconstruido, ε_y , separa a los portadores fotogenerados, alejando de la interfase a los huecos y acercando a los electrones, incrementando la conductividad del gas bidimensional. Si la compuerta se mantiene sin conexión y se aplica una polarización entre fuente y drenador, se establecerá un campo eléctrico longitudinal, ε_x , que hará fluir una corriente proporcional a la suma de la concentración de electrones en el 2DEG en equilibrio (n_s) y aquellos fotogenerados. Como consecuencia de la separación de portadores, su probabilidad de recombinación disminuye, por lo que éstos tienen un alto tiempo de vida y, la estructura, una alta ganancia en fotocorriente. Sin embargo, la razón corriente en iluminación a corriente en obscuridad del HEMT, I_{luz}/I_{osc} , es pequeña debido a que la alta concentración y movilidad de electrones en el canal dan lugar a una importante corriente en obscuridad.



Figura 2.11. Diagrama de bandas de la heteroestructura AlGaN/GaN del HEMT fotoconductor ilustrando el mecanismo fotoconductor [27].

En el trabajo de Celis G.A. [27], se demuestra que la introducción de altas dosis de deuterio en la región del 2DEG permite reducir la corriente en obscuridad de la estructura del HEMT fotoconductor AIGaN/GaN. Los dispositivos fueron caracterizados en obscuridad y en iluminación (lámpara de tungsteno). Se observó un incremento del 3% en la corriente máxima de drenador ($V_G = 1$ V) tras la iluminación en los transistores as-grown, mientras que, para los deuterados, fue de 640%. Para este mismo voltaje, la corriente en obscuridad de los deuterados fue tres órdenes de magnitud menor. En las estructuras operadas con compuerta flotante, para las as-grown se registró una razón entre corrientes de iluminación y obscuridad menor al 3%, mientras que en las deuteradas la corriente aumentó hasta 5 órdenes de magnitud durante la iluminación. El incremento en el efecto fotoconductor fue explicado de la siguiente manera; el deuterio se difunde hasta la región del gas bidimensional, en donde captura electrones y se convierte en H^- , disminuyendo la concentración y movilidad de los electrones libres, es decir, de aquellos que no fueron capturados por el hidrógeno, y, por lo tanto, la corriente en obscuridad disminuye proporcionalmente. Algunos de los electrones capturados pueden ser excitados mediante la absorción de fotones de energía menor al ancho de banda prohibida, ya que se encuentran localizados en los niveles introducidos por el hidrógeno en la banda prohibida del GaN, aumentando la conductividad del canal. Al disminuir únicamente la corriente en obscuridad mientras que la corriente en iluminación permanece sin cambios tras la deuteración en alta dosis, se aumenta la razón corriente en iluminación a corriente en obscuridad, l_{luz}/l_{osc}, lo que se traduce en un incremento del efecto fotoconductor de la estructura, es decir, mejora el desempeño del dispositivo como fotoconductor.

2.4.2 Hidrógeno en el transistor HEMT AlGaN/GaN

La alta concentración de defectos puntuales y, especialmente, de dislocaciones, degradan las propiedades de la estructura y, en consecuencia, el desempeño del HEMT; disminuye la movilidad de los portadores del 2DEG, la corriente de drenador y el voltaje de ruptura, y se incrementan la resistencia de encendido, la corriente de fuga y el nivel de ruido, por mencionar algunos parámetros de desempeño. Con base en los resultados resumidos en las secciones anteriores, este grupo de trabajo pasó a procesar una oblea de dos pulgadas de diámetro para obtener HEMTs de 1.0 µm de largo de compuerta y 100 µm de ancho de compuerta. La oblea se dividió en dos mitades, una se sometió a un tratamiento de deuteración en una dosis tal que el deuterio no alcanzara significativamente la región del gas bidimensional de electrones, de forma en que, la captura de electrones libres en esa región fuera despreciable. La deuteración se llevó a cabo antes del depósito de la compuerta. En el trabajo de Hernandez

G.C. [28], se reportan los resultados de la caracterización completa de HEMTs as-grown y deuterados; curvas de salida, transconductancia, capacitancia-voltaje, etc. Las curvas de salida se obtuvieron en obscuridad e iluminación con una lámpara de filamento de tungsteno. En la *Figura 2.12*, se presentan las gráficas de la corriente máxima de drenador y resistencia de encendido en obscuridad obtenidas para $V_D = 10 \text{ V y } V_G = 1 \text{ V}$, para HEMTs deuterados y no deuterados, pertenecientes a una misma oblea, es decir, de estructura y procesado tecnológico idénticos, excepto por la deuteración. Los valores de corriente se encuentran normalizados con respecto al ancho de compuerta de cada transistor para permitir su comparación con otros transistores de la oblea, no reportados en el trabajo.



Figura 2.12. a) Corriente máxima de drenador y b) resistencia de encendido para los transistores HEMT as-grown (azul) y deuterados (rojo), en obscuridad, para V_G=1V. Algunos transistores no pudieron ser caracterizados, ya que se alcanzó la corriente de compliancia del equipo [27,28].

Tras la deuteración a esta dosis, se reporta un incremento promedio de la corriente máxima de drenador en obscuridad del 35%, una disminución del voltaje de saturación (V_{DS}) del 27%, y una reducción de la resistencia de encendido con $R_{ON_{AG}}/R_{ON_{Deut}} = 1.64$, lo que representa una considerable mejora en estos parámetros del HEMT. Además, como se observa en la figura, existe una dispersión importante entre esos parámetros para los diferentes transistores as-grown, la cual se reduce considerablemente tras la deuteración. La razón entre las corrientes de obscuridad e iluminación, I_{luz}/I_{obs} , pasó de ser de alrededor de 1.06 a 1.01, lo que implica una menor concentración de defectos en los transistores deuterados. La transconductancia máxima, $g_m = \partial I_D / \partial V_G |_{V_D=cnt}$, obtenida a partir de la función de transferencia, fue mayor para los transistores deuterados que para los as-grown, lo que significa un mayor control de la corriente de drenador por parte del voltaje de compuerta. El voltaje de apagado incrementó tras el tratamiento, aumento compatible con el incremento de la concentración de portadores en el canal, observado previamente por el grupo (*Figura 2.10*)

y confirmado mediante curvas capacitancia-voltaje. Estas mediciones también permitieron confirmar la disminución de la carga atrapada en los defectos del dispositivo, siendo indicativa la reducción considerable del cambio en la capacitancia tras la iluminación de los transistores. Con base en los perfiles SIMS de deuterio en estructuras testigo, se calculó la concentración de aceptores residuales en el AlGaN que fueron pasivados, siendo de 3x10¹² cm⁻², correspondiente a 1.5x10¹⁸ cm⁻³.

2.5 Resumen

En muchos semiconductores, como el Si y GaN, el hidrógeno intersticial se comporta como una impureza anfótera: su estado de carga depende del nivel de Fermi del semiconductor en que se introduce. En GaN, cuando este nivel es menor a ~2.4 eV, el estado más favorable es H^+ , y para energías de Fermi mayores, H^- . En varios semiconductores, incluidos estos dos, se ha observado que pasiva diversas impurezas. Pantelides [10] propuso un mecanismo para explicar la formación de complejos neutros hidrógeno-impureza para el silicio, pero que puede ser extendido al GaN. Para semiconductores tipo-p, el hidrógeno se convierte en H^+ mediante la captura de un hueco y es atraído electrostáticamente hacia un aceptor ionizado negativamente, formando un complejo neutro. En tipo-n, se ioniza en H^- y es atraído hacia un donador ionizado (D^+). En el GaN, únicamente se ha observado la formación de complejos con aceptores.

Conforme a lo reportado previamente por este grupo de trabajo de la SEES, la deuteración de películas de nid-GaN crecidas por LPMOCVD, además de reducir fuertemente la fotoconductividad persistente, incrementa la movilidad electrónica y disminuye ligeramente la concentración de electrones libres debido a la pasivación de defectos aceptores en la región de las dislocaciones de borde y a la captura de electrones en el volumen. En cuanto al HEMT AlGaN/GaN, este grupo ha reportado que cuando se introduce en dosis tales que no alcance el 2DEG, la concentración de electrones en el canal incrementa hasta un 30%, mientras que su movilidad permanece aproximadamente constante. En consecuencia, la corriente máxima de drenador y la transconductancia incrementan, y el voltaje de saturación, resistencia de encendido y corriente de fuga en apagado, disminuyen. La mejora en las propiedades de transporte de este HEMT mediante el proceso de deuteración, el cual es sencillo y económico, es tan importante que requiere establecer su confiabilidad (reliability) que es el objetivo planteado para esta tesis.

64

Referencias

[1] Van de Walle, Chris G., and Jörg Neugebauer. "Hydrogen in semiconductors."Annu. Rev. Mater. Res. 36 (2006): 179-198.

[2] Pearton, Stephen J., James W. Corbett, and Michael Stavola. Hydrogen in crystalline semiconductors. Springer Science & Business Media.

[3] Neugebauer, Jörg, and Chris G. Van de Walle. "Role of hydrogen in doping of GaN." Applied physics letters 68.13 (1996): 1829-1831.

[4] Pearton, S. J., and A. J. Tavendale. "Hydrogen passivation of deep metal-related donor centers in germanium." Journal of applied physics 54.2 (1983): 820-823.

[5] Omeljanovsky, E. M., A. V. Pakhomov, and A. Y. Polyakov. "Hydrogen passivation of defects and impurities in GaAs and InP." Journal of electronic materials 18.6 (1989): 659-670.

[6] Stavola, Michael. "Hydrogen in silicon and germanium." 5th Int. Symp. Advances on Science and Technology of silicon materials. 2008.

[7] Dautremont-Smith, W. C., et al. "Passivation of deep level defects in molecular beam epitaxial GaAs by hydrogen plasma exposure." Applied physics letters49.17 (1986): 1098-1100.

[8] Van de Walle, Chris G., and Noble M. Johnson. "Hydrogen in III-V nitrides." Semiconductors and Semimetals 57 (1998): 157-184.

[9] Stavola, M. "Hydrogen Passivation in Semiconductors." Acta Physica Polonica A 82.4 (1992): 585-598.

[10] Pantelides, Sokrates T. "Effect of hydrogen on shallow dopants in crystalline silicon." Applied physics letters 50.15 (1987): 995-997.

[11] Chevallier, Jacques, and B. Pajot. "Interaction of hydrogen with impurities and defects in semiconductors." Solid State Phenomena. Vol. 85. 2001.

[12] Van de Walle, Chris G., and Jörg Neugebauer. "First-principles calculations for defects and impurities: Applications to III-nitrides." Journal of Applied Physics 95.8 (2004): 3851-3879.

[13] Limpijumnong, Sukit, and Chris G. Van de Walle. "Stability, diffusivity, and vibrational properties of monatomic and molecular hydrogen in wurtzite GaN."Physical Review B 68.23 (2003): 235203.

[14] Pearton, Stephen J., et al. "Properties and effects of hydrogen in GaN."MRS Proceedings. Vol. 595. Cambridge University Press, 1999.

[15] Nakamura, Shuji, et al. "Hole compensation mechanism of p-type GaN films." Japanese Journal of Applied Physics 31.5R (1992): 1258.

[16] Matsubara, Masahiko, and Enrico Bellotti. "A first-principles study of carbon-related energy levels in GaN. II. Complexes formed by carbon and hydrogen, silicon or oxygen." Journal of Applied Physics 121.19 (2017): 195702.

[17] Götz, W., et al. "Hydrogen passivation of Mg acceptors in GaN grown by metalorganic chemical vapor deposition." Applied physics letters 67.18 (1995): 2666-2668.

[18]Van de Walle, Chris G. "Interactions of hydrogen with native defects in GaN." Physical Review B 56.16 (1997): R10020.

[19] Hierro, A., et al. "Carrier Trapping and Recombination at Point Defects and Dislocations in MOCVD n-GaN." physica status solidi (b) 228.3 (2001): 937-946.

[20] Mimila-Arroyo, J., et al. "Deuterium passivation of electrically active defects in nonintentionally doped n-Ga N." Applied physics letters 90.7 (2007): 072107.

[21] Morales Santillán, E.O., Tesis de Doctorado: "Efecto de Deuterar Películas de nid-GaN en sus Propiedades de Transporte de Carga", Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN, Dpto. de Ing. Eléctrica Sec. de Electrónica del Estado Sólido, 2012.

[22] Mimila-Arroyo, J., E. Morales, and A. Lusson. "Method to probe the electrical activity of dislocations in non-intentionally doped n-GaN." Materials Science and Engineering: B 177.16 (2012): 1487-1490.

[23] Mishra, Umesh K., et al. "GaN-based RF power devices and amplifiers." Proceedings of the IEEE 96.2 (2008): 287-305.

[24] J. Mimila-Arroyo et al. "Effect of Deuterium Diffusion on the Electrical Properties of AlGaN/GaN Heterostructures". Semiconductor Defect Engineering-Materials, Synthetic Structures and Devices (Materials Research Society Symposium Proceedings 864) (2005).

[25] Mimila-Arroyo, J., F. Jomard, and J. Chevallier. "Improvement of AlGaN/GaN/Si high electron mobility heterostructure performance by hydrogenation." Applied Physics Letters 102.9 (2013): 092104.

[26] Ibbetson, J. P., et al. "Polarization effects, surface states, and the source of electrons in AIGaN/GaN heterostructure field effect transistors." Applied Physics Letters 77.2 (2000): 250-252.
[27] Celis García A. Tesis de Maestría: "Efectos de la hidrogenación a fuerte dosis en la corriente de oscuridad del HEMT fotoconductor AIGaN/GaN." Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN, Dpto. de Ing. Eléctrica Sec. de Electrónica del Estado Sólido, 2013.

[28] Hernandez Gutierrez C.A. Tesis de Maestría: "Efecto de Deuterar HEMTs de estructura Ni/AIGaN/GaN/Si de 1.0µm de compuerta en sus propiedades de transporte." Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN, Dpto. de Ing. Eléctrica Sec. de Electrónica del Estado Sólido, 2013.

▶ 3. Desarrollo experimental

3.1 Propuesta experimental

Con el fin de determinar la estabilidad de la deuteración del HEMT AlGaN/GaN, éste se sometió a recocidos acumulativos, comparando la evolución de sus parámetros de transporte con la presentada por HEMTs no deuterados. La metodología empleada consistió en recocer simultáneamente HEMTs de ambos tipos, as-grown (AG) y deuterados (DEUT), caracterizándolos en su estado inicial y después de cada recocido, esperando encontrar alguno de los comportamientos siguientes:

Hipótesis:

- Retorno de los parámetros característicos de los HEMTs deuterados a los de los HEMTs no deuterados (as-grown), sin presentarse cambios en los de los as-grown, lo que significaría que el deuterio se habría exodifundido, como ocurre en las películas de GaN:Mg [1,2].
- Que ambos tipos de HEMTs evolucionaran de la misma forma, es decir que la estructura se degradara paralelamente en ambos HEMTs, independientemente de la presencia de deuterio en uno de ellos. Ya que los as-grown no tienen deuterio, los cambios observados no podrían atribuirse a su exodifusión.
- iii) Que los HEMTs as-grown presentaran un mayor deterioro que los deuterados, lo que significaría que el deuterio no sólo mejora las propiedades de transporte de carga del HEMT, sino que incrementa la estabilidad de la estructura.

La caracterización comprendió:

- Curvas de salida; $I_D(V_G, V_D)$
- Función de transferencia; $I_D(V_G, V_D = constante)$
- Curva I-V de compuerta; $I_{GS}(V_{GS})$
- Curva I-V del canal aislado (compuerta flotante); $I_D(V_D)$
- Mediciones capacitancia-voltaje.

De estas curvas, se extrajeron los parámetros característicos más importantes y estudió su evolución en función de la temperatura de recocido. Estos parámetros comprenden; corriente

I_{DS} máxima, transconductancia máxima, resistencia del canal, corriente de saturación y altura de la barrera, entre otros. De manera complementaria, inicialmente, se estudiaron la morfología y propiedades estructurales de una heterounión AlGaN/GaN crecida en condiciones similares a las estructuras de los HEMT estudiados. Esta exploración se realizará mediante Microscopía de Fuerza Atómica (AFM), Microscopía Electrónica de Barrido (SEM) y Difracción de Rayos-X (XRD).

3.2 Preparación de muestras

Como se mencionó en las secciones anteriores, la disponibilidad limitada de sustratos nativos de GaN obliga a utilizar otros materiales, por lo que, en este trabajo, se usa el silicio, a pesar de la alta densidad de dislocaciones con la que resultan las películas de GaN crecidas sobre éste. Se utilizaron: una heteroestructura no procesada ("L893") para realizar los estudios estructurales y de morfología, y HEMTs basados en la heterounión Al_xGa_{1-x}N/GaN (estructura procesada), para estudiar la estabilidad de la deuteración. Ambos tipos de estructura fueron crecidos por Epitaxia de Haces Moleculares (MBE) sobre sustratos de Si (111), de 10 cm de diámetro para la estructura y 5 cm para los transistores. Las estructuras consisten en una serie de películas de adaptación, una capa activa de GaN (~1.5 µm), una capa de Al_xGa_{1-x}N (~20 nm) y una película cubierta ("cap") de GaN de ~1nm, ninguna impurificada intencionalmente (nid).

Para la oblea de los HEMTs, su procesado comprende: realización de mesas de aislamiento por ICP (Inductive Coupled Plasma), depósito de contactos óhmicos (Au /Al /Ti:2µm /200 nm / 20 nm) por evaporación con cañón de electrones (10⁻¹⁰ Torr) y recocido de ohmicidad (800°C, 30 s). La *Figura 3.1.a* muestra una representación de los dispositivos hasta este punto de su procesamiento. Posteriormente, la oblea fue cortada en dos partes para deuterar sólo una de ellas, *Figura 3.1 b*. La deuteración se llevó a cabo mediante la técnica de plasma de RF remoto (13.56 MHz), cuyas generalidades se mencionaron en la *Sección 2.2*, con una potencia de plasma de 0.1 W/cm², a 350°C, durante 30 minutos, con una presión de deuterio de 1 mbar. La mitad de la oblea a deuterar no se coloca en el electrodo utilizado para producir el plasma mediante RF, sino que se coloca en uno adyacente, separado 2 cm del electrodo activo. De esta manera, se reduce considerablemente la introducción de defectos por el plasma, sin reducir la difusión de deuterio en la muestra.

Una vez hecha la deuteración de la mitad de la oblea, ambas mitades fueron terminadas al mismo tiempo: se aplicó fotoresist a cada mitad en las mismas condiciones, una después de la otra. Se alineó la compuerta en cada una de esas mitades, una después de la otra, revelando

el fotoresist simultáneamente, es decir, en el mismo baño y al mismo tiempo. Después del riguroso enjuague, se colocaron ambas mitades en el portamuestras de la cámara de vacío (mismas condiciones de vacío en que se realizaron los contactos óhmicos), una al lado de la otra, realizando el depósito del Ni (200 nm) que constituye la compuerta de los HEMTs. De esta forma, se obtuvieron dos conjuntos de HEMT; as-grown (AG) y deuterados (DEUT). El HEMT as-grown y deuterado después del depósito del contacto de compuerta como etapa final del procesado, se muestran en la *Figura 3.1 c* y *d*, respectivamente.



Figura 3.1. a) Estructura sin deuterar, antes de realizar el depósito del contacto de compuerta. b) Estructura deuterada, antes de realizar el depósito del contacto de compuerta. c) HEMT as-grown (sin deuterar) finalizado. d) HEMT deuterado finalizado.

La *Figura 3.2.a* muestra la oblea que contiene a los transistores, antes de ser dividida para deuterar una de sus mitades. Fotografías del equipo utilizado para la deuteración se muestran en la *Figura 3.2.b*.


Figura 3.2. a) Oblea conteniendo los transistores HEMT estudiados en este trabajo, antes de ser dividida. La línea discontinua separa la mitad que se deuteró de la que se mantuvo sin tratamiento (as-grown). b) Equipo utilizado para llevar a cabo la deuteración.

La oblea procesada fue cortada en dados, cada uno conteniendo múltiples transistores y estructuras de caracterización. La *Figura 3.3* muestra uno de los dados con tres transistores, todos de longitud de compuerta $L_G = 1 \mu m$, y T1 con ancho de compuerta 100 μm , T2; 150 μm y T3; 220 μm). Los dados utilizados en este estudio contienen dos transistores adicionales, T12 y T13, no visibles en la foto. A continuación, se presentan las condiciones de deuteración y se discute el resultado del perfil del deuterio en la estructura del HEMT.

a)



Figura 3.3. Tres de los transistores contenidos en un dado. "*S*": fuente, "*D*": drenador, "*G*": compuerta. Para los transistores dobles T2 y T3, los subíndices "*I*" y "*D*" indican Izquierdo y derecho, respectivamente. Los HEMT T12 y T13, estudiados en este trabajo, no se observan en la imagen.

3.2.1 Estudio por SIMS de la deuteración

La *Figura 3.4*, muestra un perfil típico de deuterio, realizado por SIMS (Secondary Ion Mass Spectroscopy) con un equipo Cameca 4F, con haz primario de Cs, utilizando patrones calibrados (muestras de GaN implantadas con deuterio a dosis conocidas) para cuantificar los perfiles. El perfil permite diferenciar cada una de las películas que componen la estructura; 1 nm de GaN en la superficie, 19-20 nm de AlGaN y la película principal de GaN. Contrastando con la teoría de difusión, la concentración tiene dos máximos. En el primer nanómetro (GaN), la concentración de deuterio es de ~10²⁰ cm⁻³, la cual incrementa hasta alcanzar su primer máximo (10²¹ cm⁻³) en la interfase GaN(cap)/AlGaN. En la siguiente película (AlGaN), en ~17 nm, decrece abruptamente hasta alcanzar un mínimo (~10¹⁹ cm⁻³), a unos nanómetros de la interfase AlGaN/GaN. A partir de este mínimo, aumenta nuevamente hasta llegar a la interfase del 2DEG, alcanzando un segundo máximo, dos décadas menor que el primero. Finalmente, a partir de este punto, disminuye aún más, para alcanzar una concentración residual de 10¹⁶ cm⁻³, a 40 nm de esta última interfase.



Figura 3.4 a) Perfil SIMS de concentración de deuterio en la estructura HEMT. b) Acercamiento del perfil en la región del gas bidimensional de electrones. c) Equipo SIMS utilizado para su obtención. d) Imagen del cráter obtenida por microscopio óptico (~100 µm de lado).

Como se observa en el perfil, el deuterio sí alcanza la interfase AlGaN/GaN, y se difunde más allá de la misma en la capa de GaN. Sin embargo, su concentración en la región del gas es, por lo menos, dos órdenes de magnitud menor que la concentración de electrones en el mismo, la cual generalmente es de 10^{21} cm⁻³ [3]. Esto significa que, aunque todo el deuterio de esa región hubiese capturado un electrón libre (convirtiéndose en H^-) en lugar de ligarse a aceptores, a lo mucho habría capturado un electrón de cada cien, ocasionando una reducción despreciable en su concentración. Es necesario considerar que la cuantificación por SIMS tiene limitaciones debido a la naturaleza misma de la técnica: la resolución en profundidad es afectada de manera importante porque, cuando el haz primario (Cs+) incide sobre la muestra, desplaza los átomos de la superficie en ambas direcciones, deformando la interfase, ensanchándola en ambas direcciones hacia la superficie y hacia el sustrato [4]. Por lo tanto, la concentración real de deuterio después de la interfase es menor que la observada en la gráfica, ya que el perfil está distorsionado. Por otra parte, el incremento de la concentración en la

región del AlGaN cercana a la interfase y en la interfase misma, se debe, probablemente, a que la concentración de defectos de naturaleza aceptora con los que se liga es mayor en esas regiones específicas.

Finalmente, con base en el perfil, se obtuvo la dosis total de deuterio a partir de su integral, lo que corresponde a la cantidad de átomos de deuterio contenidos en la estructura en un área de 1 cm². La dosis, calculada en todo el rango de profundidad del perfil es de 5.97x10¹⁴ cm⁻².

3.3 Estudio de la morfología de la muestra L893

Antes de presentar los resultados de la caracterización morfológica y cristalográfica de la estructura AlGaN/GaN, a partir de la cual la se obtuvieron parámetros tales como; rugosidad de la película, densidad de granos, densidad de depresiones nanométricas, ancho de picos de difracción, etcétera, es necesario aclarar que estos estudios, constituyen un ejercicio puramente académico, pues, ante la imposibilidad de tener estructuras HEMT crecidas bajo diferentes condiciones y los parámetros del HEMT correspondientes a cada una de esas condiciones, no es posible establecer correlaciones entre los resultados de esta caracterización y el desempeño de los dispositivos, el cual es el objetivo de toda caracterización de este tipo, de forma que se pueda optimizar globalmente el dispositivo en cuestión, en este caso, el HEMT.

3.3.1 Microscopía de Fuerza Atómica

Se estudió la morfología superficial de la muestra L893 utilizando un Microscopio de Fuerza Atómica NT-MDT Solver Next en el modo de semicontacto (1 Hz, 250 líneas)^{*2}. En todas las imágenes adquiridas se observan granos poligonales de alrededor de 1 µm de diámetro con una altura promedio de ~8 nm, altura máxima medible por el equipo utilizado. Dicha característica se señala en la *Figura 3.5.a* mediante un círculo punteado. La densidad de estos granos poligonales es aproximadamente 1.2x10⁸ cm⁻².



Figura 3.5. a) Imagen AFM en un área de 5x5 µm de la muestra L893. b) Imagen AFM en un área de 3x3 µm, en la que se indican "nanopozos" (depresiones de \emptyset ~20 nm) mediante flechas. La vista tridimensional de a) y b) se incluye como inset de cada imagen.

En la *Figura 3.5.b*, es posible observar la presencia de características similares a pequeñas depresiones de tamaño nanométrico distribuidas de manera aleatoria sobre los granos mencionados anteriormente. Éstas se indican mediante flechas y sus diámetros están en el orden de los 20 nm, con una densidad aproximada de 3.9x10⁸ cm⁻².

La rugosidad r.m.s. permite conocer el grado de variación de las alturas de una superficie, y está dada por la raíz cuadrada del promedio del cuadrado de la desviación de las alturas de dicha superficie con respecto a la altura promedio [5]. La rugosidad de la muestra fue calculada mediante el software de análisis desarrollado por el proveedor del equipo de AFM para cada una de las regiones y áreas escaneadas. Ésta se resume en la *Tabla 3.1*. Como se puede notar en la tabla, los valores de rugosidad son similares entre sí a pesar de haberse obtenido en diferentes áreas y de diferentes regiones, indicando la homogeneidad de las características superficiales de la muestra.

Ároa	Rugosidad
Alea	r.m.s [nm]
20x20 µm	2.64 nm
5x5 µm	2.42 nm
3x3 µm	2.31 nm

Tabla 3.1. Rugosidad r.m.s. de las diferentes áreas analizadas por AFM.

Como se observa en la tabla, para áreas de escaneo menores a 20x20 μ m, la rugosidad calculada es mayor que aquella reportada en las referencias [6-8], en las cuales su valor es de 0.38 nm, 0.76 nm y 1 nm en áreas de 10x10 μ m, 3x3 μ m y 2x2 μ m, respectivamente.

Los pozos y montículos en espiral observados en la superficie de películas de estos materiales son comúnmente relacionados con la terminación superficial de diferentes tipos de dislocaciones. Pozos de diámetros pequeños de alrededor de 20 nm y 30 nm, generalmente se asocian con la terminación de dislocaciones de borde en la superficie [6, 7], mientras que aquellos mayores a 100 nm se han asociado con la terminación superficial de dislocaciones mixtas y de tornillo [6, 9]. Por otra parte, los montículos en espiral, también se han asociado con la terminación superficial de dislocaciones de tornillo [8].

En las imágenes obtenidas, no se identificaron montículos en espiral que pudieran ser asociados con dislocaciones de tornillo, sin embargo, las pequeñas depresiones de ~20 nm de diámetro ubicadas sobre los granos poligonales tienen dimensiones similares a los pozos reportados en las referencias [6-9], y que han sido atribuidos a la terminación superficial de dislocaciones de borde, por lo que pudieran estar relacionadas con éstas.

3.3.2 Microscopía Electrónica de Barrido

Para su caracterización mediante SEM, la muestra L893 fue clivada con el fin de obtener imágenes tanto de la vista de plano (superficie) como de la vista de corte transversal de la misma. Dos fragmentos de la muestra fueron estudiados utilizando un microscopio Carl Zeiss AURIGA 3916 – FESEM, cada fragmento utilizado para la obtención de las imágenes de cada una de las vistas. Las regiones estudiadas se seleccionaron de manera arbitraria.

Las imágenes obtenidas de la vista de plano para varias magnificaciones en diferentes regiones de la superficie de la muestra se incluyen en la *Figura 3.6.* En estas imágenes se observan motivos con diámetros de alrededor de 1 µm, cuya forma y dimensiones son similares a las de los granos observados previamente mediante AFM. Esto demuestra que la película no está conformada por granos separados, tal como aparenta en las imágenes AFM, sino que es continua, siendo más adecuado denominar "mesetas" a dichos motivos poligonales [10]. Además, es posible observar múltiples características con apariencia de cavidades de alrededor de 20 nm de diámetro distribuidas aleatoriamente en la superficie. Se estima que se encuentran presentes en una densidad en el orden de 7x10⁸-1x10⁹ cm⁻². Estas características se señalan mediante flechas en las *figuras 3.6.c* y *3.6.d* y, probablemente, corresponden a las depresiones de dimensiones similares observadas mediante AFM que pudieran asociarse a la terminación superficial de dislocaciones. Es necesario considerar que

no todas las dislocaciones alcanzan la superficie de las películas formando los pozos y depresiones generalmente reportados [11], por lo que la densidad real de dislocaciones presentes en la película podría ser mayor que la de las características observadas.

Por otra parte, en la superficie de la película, se observa una serie de defectos como los que se indican por flechas discontinuas en la *Figura 3.6.b*. Éstos se encuentran esparcidos por toda la película, y tienden a agruparse en franjas sobre la misma, fuera de las cuales, se presentan de forma dispersa. Algunos de estos defectos también fueron observados durante la obtención de las imágenes AFM, ocasionando múltiples rayones en las mismas, impidiendo observar con claridad la morfología de las regiones en las que éstos se presentaban con mayor abundancia. Se desconoce su origen.



Figura 3.6. Imágenes SEM de vista de plano de diferentes regiones de la muestra. a) Región libre de defectos de origen desconocido. b) Región con defectos desconocidos señalados por flechas discontinuas. c) Amplificación en la que se indica mediante flechas las características con apariencia de cavidades de alrededor de 20 nm de diámetro que pudieran estar asociadas con la terminación superficial de dislocaciones de borde. d) Recorte de imagen c) para mejor apreciación de dichas características.

En la *Figura 3.7.a*, correspondiente a la vista transversal de la estructura, se observan el sustrato, y sobre éste, tres regiones correspondientes a las películas de transición; una delgada región de alrededor de 30-40 nm de espesor (1) seguida de dos regiones de alrededor de 300 nm de espesor, (2) y (3). El espesor de la película activa de GaN es de alrededor de 1.5 µm. La *Figura 3.7.b* muestra un acercamiento a la superficie de la estructura. Debido a la irregularidad de la superficie y a su facilidad para cargarse por el haz de electrones, no es posible observar con detalle esta región, en la que se encuentra la película de Al_xGa_{1-x}N. Por otra parte, las imágenes de vista de plano y transversal permiten confirmar que las regiones obscuras observadas entre las mesetas de la *Figura 3.5* (obtenidas por AFM) son regiones con profundidades tales que no fue posible alcanzarlas por la punta de medición. Esto confirma la continuidad de la película a lo largo de toda la muestra.



Figura 3.7. Imágenes SEM de vista transversal de dos diferentes regiones de la muestra, cada una a diferente magnificación.

3.3.3 Propiedades estructurales de la muestra L893 (XRD)

Las principales características estructurales de la muestra L893 fueron estudiadas utilizando un difractómetro de Rayos-X PANAlytical X'pert-Pro Cu-K α (K α_1 = 1.54060 Å, K α_2 = 1.54443 Å; K $\alpha_2/K\alpha_1$ Ratio = 0.5), a temperatura ambiente. Se obtuvo información a partir de algunas de las difracciones simétricas y asimétricas de las películas de la estructura. Los resultados de esta caracterización se presentan a continuación.

- Difractograma

Para evaluar las características cristalinas de la muestra, se obtuvo un difractograma 2Theta-Omega en el rango de 20°-100° (20), sin monocromador (K α_1 y K α_2). En éste, *Figura 3.8*, se observan un pico correspondiente al sustrato de silicio (111) y picos correspondientes a las difracciones (00.2) y (00.4) del GaN y a alguna capa de AIN. Los valores de los ángulos permiten confirmar que su fase cristalina corresponde a la Wurtzita y que se encuentran orientadas con la dirección-c perpendicular a la superficie [12]. Se observan también un pico en 20 = 74.14°, correspondiente a la difracción (00·4) de una capa de Al_xGa_{1-x}N presente en la estructura, así como otros que pudieran provenir de las películas de transición. Debido a que el difractograma no se obtuvo en alta resolución, en esta figura se puede observar un ensanchamiento de los picos hacia valores de 20 menores al máximo de cada uno, así como algunos dobletes en los picos para ángulos 20 altos, relacionados con la utilización de dos longitudes de onda distintas, $K\alpha_1 y K\alpha_2$. Los máximos de los picos de difracción del sustrato y las películas de GaN y AIN son ligeramente diferentes a las posiciones de referencia de la base de datos del software de análisis del equipo. Estas diferencias pueden deberse a la falta de precisión en las mediciones o errores de determinación de los máximos de cada pico, diferencias en la temperatura de medición, la presencia de esfuerzos en los materiales que conforman la estructura, etc. Cambios en la temperatura o esfuerzos que ocasionen un aumento de la distancia entre los planos atómicos de las películas paralelos a la superficie de la muestra, ocasionan un desplazamiento de los picos hacia ángulos menores, y viceversa. Esto se verá reflejado como diferencias entre los parámetros de red calculados, los parámetros reales de las películas y los reportados como valores de referencia.



Figura 3.8. Difractograma de Rayos-X de la muestra. a) Escala lineal b) Escala logarítmica.

A partir de la posición 20 de los picos de difracción de la *Figura 3.8*, es posible hacer una estimación del parámetro de malla "c", obteniendo la distancia interplanar "d" mediante la ley de difracción de Bragg:

$$n\lambda = 2dsin\theta \tag{3.1}$$

En donde n = 1, $\lambda = 1.5406$ Å y $\theta = 2\theta/2$.

Una vez obtenida la distancia interplanar, el parámetro de malla será igual a dos veces la distancia interplanar de la difracción (00·2) y cuatro veces la distancia interplanar de la difracción (00·4), es decir:

$$c = 2d_{0002} = 4d_{0004} \tag{3.2}$$

En la *Tabla 3.2* se resume la posición 2 θ de los principales picos del difractograma de Rayos-X de la *Figura 3.8*, su FWHM, la distancia interplanar obtenida a partir de la ley de difracción de Bragg, y el parámetro de malla "*c*" estimado para las películas conforme a la *ecuación (3.2)*.

	Posición [°20]	FWHM	d [Å]	c [Å]
Si (111)	28.46°	0.21°	3.13	-
GaN(002)	34.57°	0.23°	2.59	5.19
AIN (002)	36.15°	0.24°	2.48	4.97
Si (222)	58.87°	0.24°	1.57	-
GaN(004)	72.87°	0.34°	1.30	5.19
Al _x Ga _{1-x} N (004)	74.16°	0.43°	1.28	5.11
AIN(004)	76.7°	0.46°	1.24	4.97
Si (333)	94.93°	0.20°	1.05	-

Tabla 3.2. Posición y FWHM de los principales picos del difractograma de Rayos X de la *Figura 3.8*, distancia interplanar y constante de red calculada a partir del mismo.

Considerando que la capa de $AI_xGa_{1-x}N$ se encuentra completamente relajada, la fracción de aluminio en la misma, calculada mediante la Ley de Vegard [13, 14] es:

$$x \approx \frac{c_{AlGaN} - c_{GaN}}{c_{AlN} - c_{GaN}}$$

$$x \approx 0.36$$
(3.3)

Adicionalmente, con el fin de corroborar la información del parámetro "c", se obtuvo un mapa de red de la difracción (00·2), incluido en la *Figura 3.9.a*. Debido a que las mediciones

realizadas para las difracciones simétricas únicamente permiten estudiar aquellos planos paralelos a la superficie de la muestra, para determinar la constante de red "*a*", también es necesario realizar mediciones de difracciones asimétricas. Dichas difracciones son aquellas que provienen de planos no paralelos a la superficie de la muestra, y para su medición, es necesario que el ángulo del haz incidente y el difractado no sean iguales con respecto a la superficie de la muestra, es decir que la muestra sea inclinada con respecto a su posición de las difracciones simétricas [15]. De esta manera, para obtener el parámetro "*a*", se obtuvieron mapas de red recíproca alrededor de las difracciones (01·5) y ($\overline{2}$ 1·4), los cuales se presentan en la *Figura 3.9.b* y *3.9.c*, respectivamente.



Figura 3.9. Mapa de red recíproca alrededor de a) (00.2), b) (01.5), c) $(\overline{2}1.4)$.

De los mapas, se calculó la distancia entre planos utilizando la ley de difracción de Bragg (ecuación (3.1)). Una vez obtenida esta distancia, utilizando el valor del parámetro "c", obtenido

de las difracciones simétricas, se obtiene el valor de "a" a partir de la expresión para la distancia entre planos de una red hexagonal [16]:

$$\frac{1}{d^2} = \frac{4}{3} \left(\frac{h^2 + hk + k^2}{a^2} \right) + \frac{l^2}{c^2}$$
(3.4)

Los resultados de los cálculos de las distancias interplanares y los parámetros de malla, a partir de los mapas de red recíproca, se resumen en la *Tabla 3.3*.

	2θ°	d [Å]	c [Å]	a [Å]
GaN (00·2)	34.666°	2.586 Å	5.171 Å	-
AIN (00-2)	36.251°	2.476 Å	4.952 Å	-
Al _x Ga₁- _x N (00·2)	35.138°	2.552 Å	5.104 Å	-
GaN (01.5)	404.939°	0.971 Å	-	3.266 Å
AIN (01-5)	111.4°	0.932 Å	-	3.194 Å
Al _x Ga₁- _x N (01·5)	106.9°	0.959 Å	-	3.229 Å
GaN (-21·4)	100.065°	1.005 Å	-	3.196 Å
AIN (-21·4)	104.913°	0.972 Å	-	3.135 Å
Al _x Ga _{1-x} N (-21·4)	101.156°	0.997 Å	-	3.197 Å

Tabla 3.3. Parámetro de malla "*c*" obtenido a partir del mapa de red recíproca alrededor de (00.2). Parámetro de malla "*a*" obtenido a partir de los mapas de red recíproca alrededor de (01.5) y (-21.4)

En esta tabla se han incluido los resultados de las difracciones que podrían provenir de la capa de Al_xGa_{1-x}N, cuya concentración de aluminio estimada mediante la Ley de Vegard, *ecuación* (3.3), utilizando el valor 20° del mapa de red recíproca de la difracción (00·2), *Figura 3.9.a*, *Tabla 3.3*, es de $x \approx 0.4$.

Como se puede notar en la tabla anterior, existen diferencias entre los valores calculados para "a", a partir de ambos mapas de red recíproca de las difracciones asimétricas (hasta 0.07 Å). Es necesario considerar que en la aproximación rápida de los parámetros aquí presentados, hay muchas fuentes de error, tales como errores en la determinación de la posición de los picos, cambios de temperatura, variaciones del parámetro de malla en las películas, la propagación de errores entre los análisis, errores de calibración etc. [13]. Además, los mapas de red recíproca aquí presentados no fueron adquiridos con la máxima resolución permitida por el equipo debido a que el tiempo requerido para la obtención de cada uno podría ser de varias horas. Generalmente, las películas que conforman este tipo de estructuras se encuentran sometidas a esfuerzos. Considerando que las películas de la estructura aquí estudiada se encuentran sometidas a esfuerzos homogéneos, y tomando $a_0 = 3.1891$ Å, $c_0 = 5.1855$ Å [17] y $a_0 = 3.1114$ Å, $c_0 = 4.9792$ Å [18] como los parámetros de malla del GaN y AlN completamente relajados, respectivamente, el esfuerzo calculado para las capas de GaN y AlN de la muestra está dado por [13,14]:

$$\varepsilon_{c} = \frac{c_{meas} - c_{0}}{c_{0}} * 100\%$$
(3.5.a)

$$\varepsilon_{cGaN} = -0.278\%$$

$$\varepsilon_{cAlN} = -0.544\%$$

$$\varepsilon_{a} = \frac{a_{meas} - a_{0}}{a_{0}} * 100\%$$
(3.5.b)

$$\varepsilon_{aGaN} = 1.322\%$$

$$\varepsilon_{aAlN} = 1.703\%$$

Con c_{meas} y a_{meas} siendo los parámetros c y a obtenidos experimentalmente. Para la obtención de ε_a , se utilizaron valores promedio del parámetro "a" obtenido a partir del mapa de red recíproca de las difracciones asimétricas (01·5) y (-21·4). Los resultados indican que ambas películas se encuentran bajo esfuerzos. Con base en lo anterior, se puede esperar que la película de Al_xGa_{1-x}N, para la cual se ha estimado una concentración de aluminio de alrededor de x = 0.36 y x = 0.4 mediante la Ley de Vegard, también se encuentre sometida a algún tipo de esfuerzo, por lo que estos valores no son correctos, ya que para su obtención por este método fue asumida una condición de relajación total.

- Omega-Scan (XRD)

En la *Figura 3.10* se incluyen los omega-scan (rocking curve) de las difracciones simétricas alrededor de $2\theta = 28.44^{\circ}$ (silicio 111), $2\theta = 34.56^{\circ}$ (GaN 002), $2\theta = 36.13^{\circ}$ (AlN 002) y $2\theta = 35.09^{\circ}$ (Al_xGa_{1-x}N 002), respectivamente, así como en torno a la difracción (10·2) de las películas de GaN y AlN. En esta misma figura se indica el FWHM correspondiente a cada una de las gráficas. El ancho medio de los omega-scan de las películas permite conocer la calidad cristalina de las mismas. El FWHM de las curvas de las películas de la muestra es considerable, especialmente para la película de AlN, indicando que en éstas se encuentra presente una cantidad importante de defectos, situación probablemente debida al hecho de

que forma parte del conjunto de películas de transición en la estructura. En el caso del GaN, el FWHM es mayor al usualmente reportado, el cual generalmente tiene valores alrededor de 100-500 arcsecs para la difracción (00.2) y entre 200-1500 arcsecs para (10.2), dependiendo de la técnica y condiciones de crecimiento [19, 20].



Figura 3.10. Omega-scan alrededor de las difracciones (00·2) de a.1) silicio, a.2) GaN, a.3) AlGaN y a.4) AlN, y de las difracciones (10·2) de b.1) GaN y b.2) AlN.

Además del ensanchamiento introducido por el equipo de medición, factores como la curvatura de la muestra, tamaño de cristal y la presencia de dislocaciones contribuyen al ensanchamiento de las curvas de los omega-scan de las películas. Dependiendo de la densidad de dislocaciones y espesor de las películas, generalmente las contribuciones al FWHM medido del ancho intrínseco de los omega-scan del material, curvatura, y tamaño de cristal, pueden ser despreciables [21].

Se ha observado que el ensanchamiento de los omega-scan de difracciones simétricas $(00 \cdot l)$ está relacionado con la densidad de dislocaciones de tornillo de la película, mientras que el FWHM de las difracciones asimétricas, como (10·2), es sensible la densidad de dislocaciones de borde [12, 13, 22]. Diversos equipos de trabajo [12, 13, 19] han realizado estimaciones rápidas de la densidad de dislocaciones por medio de las expresiones de Kurtz et al [23], basadas en la propuesta de P.Gay et al. [24] por medio de los FWHM de los omega-scan. Conforme a esta propuesta, en la que se considera al cristal como un arreglo de bloques ligeramente inclinados uno con respecto al otro y separados por las dislocaciones, la densidad estimada de dislocaciones está dada por [12]:

$$D_{screw} \sim \frac{\beta_{0002}^2}{9b_{screw}^2} \tag{3.6.a}$$

$$D_{edge} \sim \frac{\beta_{10\bar{1}2}^2}{9b_{edge}^2}$$
 (3.6.b)

$$D_{dis} = D_{screw} + D_{edge} \tag{3.7}$$

En donde D_{screw} es la densidad de dislocaciones de tornillo, D_{edge} la densidad de dislocaciones de borde, β el FWHM de la rocking-curve (omega-scan) y *b* la longitud del vector de Burger ($b_{screw} = 0.5185nm$, $b_{edge} = 0.3189nm$ para GaN).

Utilizando las *expresiones (3.6)*, y considerando que el ensanchamiento de las rocking curve es únicamente debido a la presencia de dislocaciones, la densidad estimada de dislocaciones de tornillo en la película de GaN es de 6.6x10⁸ cm⁻², y de 3.4x10⁹ cm⁻² para las dislocaciones de borde. Si bien estos valores se encuentran dentro del rango comúnmente reportado, es muy probable que la densidad real de dislocaciones sea mucho mayor. Existen otras expresiones y métodos propuestos para calcular la densidad de dislocaciones a partir de las rocking-curve, sin embargo, la precisión de todos, incluyendo las expresiones aquí utilizadas, es cuestionable. Por ejemplo, Pelzmann et al. [25] realizaron estimaciones a partir del método propuesto por Ayers [21], el cual permite obtener la densidad de dislocaciones por dos vías

diferentes a partir de la información del FWHM de tres o más omega-scans (barridos en omega) alrededor de diferentes ángulos. La densidad de dislocaciones calculada por este método fue hasta un orden de magnitud menor que aquella obtenida a partir de las imágenes TEM, diferencia atribuida por los autores a la sobre simplificación del método.

Si bien sí existe una relación entre el ensanchamiento de las curvas y la densidad de dislocaciones presentes en las películas [26], para fines cuantitativos, es preferible recurrir a otras técnicas de caracterización, tales como microscopía electrónica de transmisión TEM.

3.3.4 Resumen: Propiedades de la estructura AlGaN/GaN

En esta sección se presentaron imágenes AFM de la superficie de una estructura AlGaN/GaN en áreas de escaneo de entre 3x3 µm y 20x20 µm para diferentes regiones de la misma. La superficie de las regiones estudiadas y, dada la homogeneidad, de toda la película, está constituida por mesetas poligonales ($\emptyset \sim 1 \mu m$) y depresiones nanométricas ($\emptyset \sim 20 nm$), y tiene rugosidades de entre 2.31 nm y 2.64 nm dependiendo del área y región escaneada. Así mismo, se presentaron imágenes SEM de vista de plano y transversal de la estructura. En las imágenes de vista de plano se aprecian las características observadas previamente por AFM; mesetas poligonales y depresiones nanométricas. Las depresiones nanométricas observadas en la película podrían corresponder a nanopozos reportados en la literatura y que son generalmente asociados con la terminación superficial de dislocaciones de borde. En estas mismas imágenes, se observan, además, múltiples defectos sobre la superficie de las muestras, cuyo origen se desconoce.

En esta misma sección también se presentaron los resultados de la caracterización por rayos-X de la estructura AlGaN/GaN. El difractograma y los mapas de red obtenidos permiten confirmar que las películas fueron crecidas con la dirección-*c* orientada hacia el plano superficial y que se encuentran sometidas a esfuerzos. Los altos valores del ancho medio de los omega-scan que presentan las películas indican una alta concentración de defectos en las mismas, entre ellos dislocaciones de borde y de tornillo. La densidad de dislocaciones en la película de GaN fue estimada conforme a las expresiones de Kurtz et al., observando que el cálculo de la densidad de dislocaciones a partir de los omega-scan es poco confiable, siendo muy probable que la densidad de en la película sea mayor.

Habiendo estudiado de forma general las características de esta estructura AlGaN/GaN, idéntica a aquella en la que se basan los dispositivos de este trabajo, a continuación, se presentan los resultados del estudio de la estabilidad de la deuteración de los transistores.

3.4 Recocidos y caracterización eléctrica de HEMTs AG y Deuterados

En trabajos de tesis realizados por este grupo y cuyos resultados se han resumido en el Capítulo 2, se ha establecido que la pasivación de defectos con hidrógeno en la estructura del HEMT AlGaN/GaN conduce a una considerable mejora de sus propiedades de transporte de carga. Sin embargo, su estabilidad no ha sido estudiada hasta ahora. En esta sección se presentan los resultados de la exploración de su estabilidad, recociendo y caracterizando HEMTS de geometría idéntica; T1, T12 y T13 de dados as-grown y deuterados, "AG" y "DEUT", respectivamente. Como se mencionó anteriormente, se compara la evolución de las propiedades de transporte de carga de los HEMTs por efecto de los tratamientos térmicos a los que son sometidos. Los recocidos isócronos (1 hora) se realizaron en atmosfera de nitrógeno (N₂) a temperaturas de entre 300 y 700 °C, con un incremento de 100°C entre cada una, de forma acumulativa, es decir que se realizaron sobre los mismos dispositivos. Los transistores fueron caracterizados a temperatura ambiente, en obscuridad, antes y después de cada tratamiento térmico.

La caracterización fue realizada utilizando un Analizador de Parámetros de Semiconductores HP 4145B conectado a una máquina de puntas. El analizador cuenta con una serie de SMUs (Source Measurement Unit) que pueden utilizarse como fuentes de voltaje o corriente y, simultáneamente, como medidores de voltaje o corriente, además de dos medidores de voltaje de alta impedancia. Éstos son conectados a los dispositivos a través de la máquina de puntas. Con este montaje de medición se obtuvieron las curvas de salida, función de transferencia, curva I-V en modo de resistor (con compuerta flotante) y característica I-V de la compuerta (barrera Schottky) de los dispositivos. Para las curvas de salida, se aplica un voltaje variable en la terminal de drenador, midiendo simultáneamente la corriente de esa terminal para una serie de voltajes de compuerta fijos, con la fuente conectada al común, como muestra la Figura 3.11.a. Esta misma configuración fue utilizada para la obtención de la función de transferencia, corriente de drenador en función del voltaje de compuerta para un voltaje de drenador fijo. La caracterización del dispositivo en modo de resistor fue realizada de forma similar a las curvas de salida, pero manteniendo la terminal de compuerta sin conexión. Para la caracterización de la barrera, Figura 3.11.b, el drenador permanece sin conexión, aplicando un voltaje entre compuerta y fuente, midiendo la corriente de compuerta.



Figura 3.11. Esquema simplificado de los transistores HEMT en el que se muestran las conexiones realizadas para la obtención de a) las curvas de salida y función de transferencia, utilizando la SMU de compuerta únicamente como fuente de voltaje para esta última, y b) I-V para la caracterización de la barrera. Las curvas I-V en modo de resistor se obtuvieron utilizando la disposición ilustrada en a) pero sin conectar la compuerta.

Debido a la presencia de resistencias parásitas introducidas por la aleatoriedad mecánica del montaje de medición, existen caídas de voltaje adicionales que ocasionan que el voltaje aplicado entre los contactos del dispositivo no corresponda al de referencia. El método de cuatro puntas permite disminuir este efecto al utilizar vóltmetros de alta impedancia para medir el voltaje que realmente recae entre las terminales, obteniendo curvas en las que éste constituye la variable independiente, en vez del voltaje nominal.

Considerando lo anterior, las mediciones fueron realizadas por el método de cuatro puntas. El vóltmetro "V_{m2}", y la SMU1 fueron utilizados para medir la caída de potencial entre el drenador o la compuerta y la terminal de fuente, dependiendo de cada curva. El diagrama eléctrico de las mediciones se ilustra en la *Figura 3.12*. Para todas las mediciones, la SMU4 y el vóltmetro V_{m2} se mantuvieron conectados a la terminal de fuente como común y como medidor de voltaje, respectivamente. Para las curvas de salida y función de transferencia, la SMU3 fue conectada al contacto de drenador, mientras que la SMU2 fue conectada a la compuerta, ambas fungiendo como fuente de voltaje y medidor de corriente. Esta misma configuración fue utilizada para la obtención de la curva I-V en modo de resistor, con la SMU2 (compuerta) sin conexión. Para la curva I-V de la barrera, la SMU2 configurada como fuente de voltaje y medidor de corriente, y la SMU1 como medidor de voltaje, fueron conectadas a la compuerta.



Figura 3.12. Diagrama de conexiones realizadas para la obtención de las curvas I-V de los transistores en modo de resistor (Líneas continuas, azul obscuro) y de las curvas de salida (Líneas continuas y discontinuas).

Las condiciones de cada medición son las siguientes:

• Curvas de salida: Las curvas de salida, $I_D(V_{DS}, V_G)$, se obtuvieron para $-5V \le V_{GS} \le 1V$ con $\Delta V_{GS} = -1 V$ y, simultáneamente para cada V_{GS} , rampas de voltaje de $0V \le V_{DS} \le 7V$ con $\Delta V_{DS} = 0.2 V$, midiendo simultáneamente las corrientes de; fuente, drenador y compuerta. De estas se extrajo la corriente de drenador máxima, I_{DSMax} , el voltaje de saturación, V_{DSat} , la resistencia de encendido, R_{ON} , y la corriente de fuga I_{DS} en apagado para $V_G = -4 V$.

• Función de transferencia: Se obtuvo $I_G(V_G, V_{DS} = 10 V)$ para $-4V \le V_{GS} \le 1V$ y $\Delta V_{GS} = 0.005 V$. Posteriormente, se extrajeron la transconductancia máxima y el voltaje de apagado a partir de la curva.

• Propiedades de transporte de la compuerta: La curva corriente voltaje de la compuerta se obtuvo polarizándola a través de los electrodos de fuente y compuerta en un rango de $-8V \le V_{GS} \le 2V$, extrayendo de ella la corriente de saturación, J_{SS} [A/cm^2], la altura de la barrera electrostática, ϕ_{bn} , con base en la teoría de la emisión termoiónica y las resistencias parásitas en serie y paralelo, R_S Y R_p , respectivamente.

• Caracterización del canal de conducción: Se obtuvo la curva I-V del canal $I_{DS}(V_G = flotada)$ de $0V \le V_{DS} \le 15V$ con $\Delta V_{DS} = 0.05V$, obteniendo la corriente máxima y la conductancia del canal de los dispositivos. Con fines comparativos, la corriente ha sido normalizada con respecto al ancho de compuerta de los dispositivos en las curvas de salida, función de transferencia y resistencia del canal (compuerta flotante), mientras que las curvas I-V para la caracterización de la barrera se normalizaron respecto al área de esta terminal. A continuación, se presentan y discuten los resultados más relevantes.

3.4.1 Curvas de salida

La *Figura 3.13.a* muestra curvas de salida típicas de los transistores as-grown y deuterados para $V_G = 1 V y - 1 V$, antes del primer recocido y después de los recocidos a 600°C y 700°C. A partir de estas curvas, se obtuvo la corriente máxima de drenador para diferentes voltajes de compuerta. La evolución de dicha corriente con la temperatura de recocido, para un voltaje de compuerta de $V_G = 1 V$, normalizada respecto a su valor inicial, se muestra en la *Figura 3.13.b*.

La *Tabla 3.4* resume sus valores iniciales y finales, así como la razón entre la corriente en el estado inicial de los transistores y después de los recocidos: $700^{\circ}C/R_0 = \frac{I_{DS_{Max}}(700^{\circ}C)}{I_{DS_{Max}}(R_0)}$.

En concordancia con lo reportado previamente por este grupo de trabajo, antes de cualquier tratamiento térmico, la corriente máxima de drenador, $I_{DSMax}(@V_G = 1 V)$, de los transistores deuterados era, en promedio, 7% mayor que la de los as-grown. Tras el último tratamiento (700°C), la capacidad de manejo de corriente de los transistores as-grown disminuyó alrededor de 31% y, para los deuterados, 18%, como se observa en la *Figura 3.13.b*. En esta condición, la I_{DSMax} de los deuterados es 32% mayor que la de los as-grown.





Figura 3.13. a) Curvas de salida del transistor T12 del dado 3450-AG (líneas discontinuas) y del 4546-DEUT (líneas continuas), para V_G=1V y -1V temperaturas 600°C(---) y 700°C(---).

b) Evolución con la temperatura de recocido de la corriente máxima de drenador para V_G=1V de los transistores T1 (♦), T12 (▲) y T13 (■), dados 3450-AG (símbolos huecos) y 4546-DEUT (símbolos rellenos).

	DSMa	I _{DSMax} (V _G =1V) [A/mm]					
	AG	AG DEUT DEUT/A					
T1 R0	0.412	0.482	1.17				
T1 700ºC	0.324	0.411	1.27				
700°C/R0	0.79	0.85	-				
T12 R0	0.435	0.455	1.05				
T12 700°C	0.314	0.367	1.17				
700ºC/R0	0.72	0.81	-				
T13 R0	0.438	0.428	0.98				
T13 700°C	0.248	0.378	1.52				
700ºC/R0	0.57	0.88	-				
Prom. 700ºC/R0 (T1,T2,T3)	0.69	0.85	-				

Tabla 3.4. Corriente máxima de drenador para V_G=1V inicial (sin recocer, "R0") y final (tras recocido a 700°C) de los transistores T1, T12 y T13 de los dados 3450-AG y 4546-DEUT. Razón entre los valores inicial y final, 700°C/R0, de la corriente máxima de drenador, y promedio de las razones de los tres transistores de cada dado.

3.4.2 Función de Transferencia

- Transconductancia máxima (gm)

La gráfica de la transconductancia de los transistores T12 as-grown y deuterado, antes del primer recocido y para los recocidos a 600°C y 700°C, se muestra en la *Figura 3.14.a.* Se observa que la degradación de la transconductancia del transistor as-grown después del recocido a 700°C es considerablemente mayor que la presentada por el deuterado. La evolución con la temperatura de recocido de la transconductancia máxima de todos los transistores estudiados, normalizada respecto a su valor inicial, se presenta en la *Figura 3.14.b.* Los valores iniciales y finales de *g*_m para cada transistor se resumen en la *Tabla 3.5.* En ésta, se incluye también la razón entre la transconductancia final e inicial $\left(700^{\circ}C/R_{0} = \frac{g_{m_{Max}}(700^{\circ}C)}{g_{m_{Max}}(R0)}\right)$ y el promedio de las razones de los tres transistores de cada dado. En estas gráficas, se observa que el comportamiento de la transconductancia máxima es semejante, en términos cualitativos, al presentado por la corriente de drenador de los dispositivos operados con la compuerta conectada, degradándose más para los as-grown que para los deuterados.





Figura 3.14. a) Transconductancia en función del voltaje compuerta-fuente del transistor T12 del dado 3450-AG (líneas discontinuas) y del 4546-DEUT (líneas continuas) antes del primer recocido (—) y para las temperaturas 600°C(—) y 700°C(—).

b) Evolución con la temperatura de recocido de la transconductancia máxima de los transistores T1 (♦), T12 (▲) y T13 (■), normalizada respecto a su valor inicial, de los dados 3450-AG (símbolos huecos) y 4546-DEUT (símbolos rellenos).

	g _{mmax} [S/mm]					
	AG	DEUT	DEUT/AG			
T1 R0	9.92E-02	1.18E-01	1.18			
T1 700⁰C	8.25E-02	1.03E-01	1.25			
700ºC/R0	0.83	0.88	-			
T12 R0	1.08E-01	1.13E-01	1.05			
T12 700°C	7.92E-02	9.00E-02	1.14			
700ºC/R0	0.74	0.8	-			
T13 R0	1.05E-01	1.05E-01	1.00			
T13 700°C	6.10E-02	9.50E-02	1.56			
700ºC/R0	0.58	0.91	-			
Prom. 700°C/R0	0.72	0.86	-			

Tabla 3.5. Transconductancia máxima inicial y final de los transistores T1, T12 y T13 de los dados 3450-AG y 4546-DEUT. Razón entre los valores inicial y final, 700°C/R0, de la transconductancia máxima, y promedio de las razones de los tres transistores de cada dado.

3.4.3 Transporte de carga en el 2DEG (Curva I-V con compuerta flotante)

Cuando la compuerta se mantiene flotante, es decir, sin conexión, el canal constituye un resistor que, para V_{DS} pequeños, se comporta óhmicamente y la velocidad de los portadores, $v(\mathcal{E})$, depende linealmente del campo eléctrico, \mathcal{E} , con la movilidad, μ , como constante de proporcionalidad [27]:

$$v(\mathcal{E}) = \mu \mathcal{E} \tag{3.8}$$

Sin embargo, a campos eléctricos (voltajes) suficientemente altos, la velocidad se mantiene prácticamente constante o disminuye, dependiendo de la estructura de la banda de conducción y de la temperatura del canal, ocasionando que la corriente a través del 2DEG tenga este mismo comportamiento. En esta condición, la densidad lineal de corriente del 2DEG está dada por [27]:

$$J = -qn_s v_s \tag{3.9}$$

En donde *J* es la densidad lineal de corriente con respecto al ancho de la compuerta [A/cm], *q* la carga elemental en *Coulombs*, n_s la densidad superficial de portadores del canal en cm^{-2} y

 v_s la velocidad promedio de saturación de los electrones en cm/s. Nótese que en la *ecuación* (3.9), J es una densidad lineal de corriente dada en Amperes por unidad de longitud. Esto se debe a que, a diferencia de un conductor tridimensional, en el que la corriente atraviesa un área, en el caso del HEMT, el canal es un gas bidimensional de electrones y la corriente pasa a través de una línea, correspondiente al ancho de compuerta.

La curva I-V del estado inicial y para los recocidos a 600°C y 700°C de los transistores T12 se muestra en la *Figura 3.15.a.* En ésta se observa una diferencia importante en el comportamiento de la corriente en el 2DEG, la cual se degrada considerablemente más en el transistor as-grown. La evolución de la corriente máxima de los tres transistores: T1, T12 y T13, de los dos dados estudiados: as grown y deuterado, normalizada respecto a su valor inicial, se presenta en la *Figura 3.15.b* y la de la conductancia del canal en la región óhmica, $G_{Ch} = 1/R_{ch}$, donde R_{ch} es la resistencia del canal, normalizada respecto a su valor inicial, en la *Figura 3.15.c*. La *Tabla 3.6* resume el contenido de las figuras anteriores, presentando los valores iniciales y finales de cada parámetro, así como el campo eléctrico al que se obtiene la corriente máxima en el 2DEG. La tabla incluye también la razón entre el valor final e inicial de cada parámetro: $\frac{I_{DSCh_{Max}}(700°C)}{I_{DSCh_{Max}}(R0)}$, $\frac{\mathcal{E}_{S}(700°C)}{\mathcal{E}_{S}(R0)}$, $\frac{G_{Ch}(700°C)}{G_{Ch}(R0)}$ y el promedio de razones de los tres transistores de cada dado.

Como muestra la *Tabla 3.6*, la diferencia promedio entre la corriente de ambos tipos de HEMT en su estado inicial es del 6% y, después del último recocido (700°C), ésta es de 60%. Mientras que la corriente de los transistores as-grown se degradó en promedio 40%, la de los deuterados lo hizo únicamente en un 11%. Esto nuevamente indica que el HEMT es más estable tras la deuteración. Por otra parte, conforme a la *Figura 3.15.a*, las conductancias iniciales de ambos tipos de transistor son muy similares entre sí, la razón entre ambas es de $G_{Ch}(Deut)/G_{Ch}(AG) = 1.06$. En su estado final, esta razón es de 1.11. Tal como se observa en la *Figura 3.15.c*, aunque los transistores deuterados muestran una degradación ligeramente mayor que los as-grown para los primeros recocidos, después del último (700°C), la degradación final es similar para ambos, lo cual contrasta considerablemente con lo ocurrido para la corriente del 2DEG. Este comportamiento será discutido más adelante.





Figura 3.15. a) Curvas I-V del transistor T12 del dado 3450-AG (líneas discontinuas) y del 4546-DEUT (líneas continuas) antes del primer recocido (—) y para las temperaturas 600°C (—) y 700°C (—).

b) Evolución con la temperatura de recocido de la corriente I_{DSCh} de los transistores T1 (◆), T12 (▲) y T13 (■) en modo de resistor, normalizada respecto a su valor inicial, de los dados 3450-AG (símbolos huecos) y 4546-DEUT (símbolos rellenos).



c) Evolución con la temperatura de recocido de la conductancia del canal, G_{ch}, de los transistoresT1 (♦), T12 (▲) y T13 (■) en modo de resistor, normalizada respecto a su valor inicial, del dado 3450-AG (símbolos huecos) y 4546-DEUT (símbolos rellenos).

	I _{DSCh} [A/mm]		\mathcal{E}_s [V/cm]			G _{Ch} [S/mm]			
	AG	DEUT	DEUT/AG	AG	DEUT	DEUT/AG	AG	DEUT	DEUT/AG
T1 R0	0.614	0.657	1.07	1.72E+04	1.44E+04	0.84	0.116	0.127	1.10
T1 700ºC	0.448	0.612	1.36	1.84E+04	1.65E+04	0.90	0.092	0.097	1.05
700ºC/R0	0.73	0.93	-	1.07	1.15	-	0.79	0.76	-
T12 R0	0.599	0.6289	1.05	1.17E+04	1.26E+04	1.08	0.125	0.131	1.05
T12 700°C	0.293	0.513	1.75	6.08E+03	1.56E+04	2.57	0.089	0.094	1.06
700ºC/R0	0.49	0.82	-	0.52	1.24	-	0.71	0.72	-
T13 R0	0.57	0.608	1.07	1.35E+04	1.35E+04	1.00	0.113	0.118	1.04
T13 700°C	0.33	0.562	1.68	1.64E+04	1.58E+04	1.8E+06	0.075	0.091	1.22
700ºC/R0	0.58	0.92	-	1.22	1.17	-	0.66	0.77	-
Prom. 700°C/R0	0.6	0.89	-	0.94	1.19	-	0.72	0.75	-

Tabla 3.6. Corriente máxima de drenador, campo eléctrico del máximo de corriente, y conductancia del canal inicial y final de los transistores T1, T12 y T13 con compuerta flotante de los dados 3450-AG y 4546-DEUT. Razón entre los valores inicial y final, 700°C/R0, de cada parámetro, y promedio de las razones de los tres transistores de cada dado.

La *Figura 3.16* muestra la gráfica del cambio de la conductancia del canal en función del inverso de la temperatura de recocido de los dados as-grown y deuterado. El cambio fue calculado restando la conductancia normalizada a la unidad, es decir, $1 - G_{Ch}(Normalizada)$, para cada una de las temperaturas de recocido. Los valores de esta gráfica corresponden al promedio del cambio en la conductancia de los transistores T1, T12 y T13 de cada dado. Se observa que los cambios tienen un comportamiento exponencial con el inverso de la temperatura, correspondiente a un proceso térmicamente estimulado.

La teoría de las colisiones considera que, para que una reacción se lleve a cabo, los elementos involucrados deben colisionar entre sí con la energía cinética suficiente. Conforme a esta teoría, la rapidez con las que se lleva a cabo una reacción es proporcional a la frecuencia con la que ocurren las colisiones, la cual depende directamente de la temperatura. La ecuación de Arrhenius establece la relación entre la razón a la que sucede una reacción y la temperatura. Esta expresión permite describir de manera empírica un proceso físico o químico que se comporta exponencialmente en función de la temperatura. Su forma general es [28]:

$$k = Ae^{-\frac{Ea}{k_B T}}$$
(3.10)

En donde k es la razón de cambio del parámetro estudiado, A el factor pre-exponencial o de frecuencia, k_B la constante de Boltzmann, Ea la energía de activación y T la temperatura. La parte exponencial de la expresión anterior representa la fracción de los elementos involucrados

que cuentan con la energía cinética suficiente para reaccionar, mientras que el factor pre exponencial representa el factor que limita la razón a la que se lleva a cabo el proceso, es decir, la frecuencia a la que ocurren las colisiones. Finalmente, la energía de activación representa la energía cinética mínima que los elementos deben adquirir para que inicie la reacción. Ésta puede ser vista como una barrera de energía que deben sobrepasar los elementos para poder reaccionar. [29, 30]

La ley de acción de masas es un ejemplo que permite ilustrar este tipo de procesos [27]:

$$n_i^2 = N_V N_C e^{-\frac{E_G}{k_B T}}$$
(3.11)

En donde N_V es la densidad efectiva de estados en la banda de valencia, es decir, la concentración de estados que contienen electrones que pueden ser transferidos a la banda de conducción, si, tal como sucede en las reacciones químicas clásicas, una colisión les proporciona la energía necesaria. Similarmente, la densidad efectiva de estados en la banda de conducción, N_C , es la concentración de sitios disponibles para recibir esos electrones transferidos. La parte exponencial, con E_G siendo el ancho de banda, es la probabilidad de que ocurra esa transferencia.

Las energías de activación de los mecanismos involucrados en la degradación de la conductancia del canal para cada tipo de transistor se obtuvieron conforme a la ecuación de Arrhenius.

La energía de activación obtenida para los transistores as-grown es de 1.37 eV y 0.63 eV para los deuterados, con un factor pre-exponencial de 1.6×10^6 y 496.5, respectivamente.

Debido a que la corriente de algunos transistores tuvo un ligero aumento después del primer recocido, el ajuste a la *expresión (3.10)* sólo incluye algunos puntos de la gráfica de la *Figura 3.16*, los cuales corresponden al rango de temperaturas en el que se presentó una degradación cuantificable.



Figura 3.16. Cambio en la conductancia del 2DEG en función de la temperatura, 1/T, para los transistores as-grown \diamond y deuterados \blacklozenge .

3.4.4 Propiedades de Transporte de la compuerta

La *Figura 3.17* presenta las curvas I-V típicas de la compuerta bajo polarización *a*) directa y *b*) inversa de los transistores T12 de los dados as-grown y deuterado, antes del primer recocido y para los recocidos a 600°C y 700°C. La evolución en función de la temperatura de recocido de *a*) la altura de la barrera, *b*) el factor de idealidad y *c*) la corriente de compuerta para $V_G = -6 V$, obtenidos a partir de las curvas que se muestran en la *Figura 3.18*. La altura efectiva de la barrera de energía y el factor de idealidad fueron obtenidos a partir de la región de polarización directa de la curva I-V, con base en la teoría de la emisión termoiónica, cuya ecuación fundamental es [27]:

$$J_G(V_G) = J_S\left[e^{\left(\frac{q}{\eta KT}V_G\right)} - 1\right]$$
(3.12.a)

Con:

$$J_S = A^* T^2 \exp\left(-\frac{q\phi_{Bn}}{k_B T}\right)$$
(3.12.b)

En donde J_G es la densidad de corriente en [A/cm²], J_S la densidad de corriente de saturación en [A/cm²], V_G el voltaje aplicado en [V], q la carga elemental, k_B la constante de Boltzmann en [eV/K], T la temperatura en [K], η el factor de idealidad, A^* la constante de Richardson (para el GaN: 26.4 A/cm²K² [31]) y ϕ_{Bn} la altura de la barrera en [eV].

Los valores inicial y final de la corriente de compuerta en polarización inversa, la densidad de la corriente de saturación, la altura de la barrera y el factor de idealidad se resumen en la *Tabla*



3.7, en la cual se incluye la razón entre el valor final e inicial de cada parámetro: $\frac{J_G(700^{\circ}C)}{J_G(R0)}$, $\frac{J_{ss}(700^{\circ}C)}{\phi_{bn}(R0)}$, $\frac{\phi_{bn}(700^{\circ}C)}{\phi_{bn}(R0)}$, $\frac{\eta(700^{\circ}C)}{\eta(R0)}$, y el promedio de razones de los tres transistores de cada dado.



Figura 3.17. a) Curva I_{GS} del transistor T12 del dado 3450-AG (líneas discontinuas) y del 4546-DEUT (líneas continuas) para V_G<0V antes del primer recocido (—) y para las temperaturas $600^{\circ}C(-)$ y 700°C(—).

b) Curva I_{GS} para V_G>0V del transistor T12 del dado 3450-AG (líneas discontinuas) y del 4546-DEUT (líneas continuas) antes del primer recocido (—) y para las temperaturas 600°C(—) y 700°C(—).



Figura 3.18. a) Evolución con la temperatura de recocido del factor de idealidad de los transistores T1 (♦), T12 (▲) y T13 (■), del dado 3450-AG (símbolos huecos) y 4546-DEUT (símbolos rellenos).



b) Evolución con la temperatura de recocido de la corriente de compuerta para V_{G} =-6V de los transistores T1 (\diamond), T12 (\blacktriangle) y T13 (\blacksquare), de los dados 3450-AG (símbolos huecos) y 4546-DEUT (símbolos rellenos).





c) Evolución con la temperatura de recocido de la corriente de saturación de los transistores T1 (◆), T12 (▲) y T13 (■) en modo de resistor, normalizada respecto a su valor inicial, del dado 3450-AG (símbolos huecos) y 4546-DEUT (símbolos rellenos).

d) Evolución con la temperatura de recocido de la altura de la barrera de los transistores T1 (♦), T12
(▲) y T13 (■), normalizada respecto a su valor inicial, de los dados 3450-AG (símbolos huecos) y 4546-DEUT (símbolos rellenos),

	Jo	∋(V _G =-6V)	[A/cm ²]	J _{ss} [A/cm ²]		
	AG	DEUT	DEUT/AG	AG	DEUT	DEUT/AG
T1 R0	0.02	0.34	14.94	5.9E-13	1.3E-11	22.28
T1 700°C	3.08	0.08	0.03	6.1E-11	3.4E-12	0.06
700ºC/R0	134	0.24	-	1.03	0.26	-
T12 R0	0.14	6.95	48.34	2.8E-12	1.2E-10	43.03
T12 700℃	4.86	0.03	0.01	5.8E-03*	9.5E-09*	1.7E-06
700ºC/R0	33.8	4.3E-03	-	2E+09	79.2	-
T13 R0	0.13	6.95	52.03	2.7E-12	1.2E-10	44.83
T13 700⁰C	0.17	0.04	0.25	2.1E-05*	3.4E-09*	1.6E-04
700°C/R0	1.30	5.8E-03	-	8E+06	28.3	-
Prom. 700ºC/R0	56.4	0.08	-	7E+08	36.1	-

	Φ _{bn} [eV]				η	
	AG	DEUT	DEUT/AG	AG	AG DEUT DI	
T1 R0	1.10	1.02	0.93	1.81	1.98	1.10
T1 700°C	0.98	1.05	1.08	1.82	1.68	0.92
700ºC/R0	0.89	1.03	-	1.01	0.85	-
T12 R0	1.05	0.96	0.92	1.80	1.68	0.93
T12 700°C	0.51*	0.85*	1.68	3.13	1.73	0.55
700ºC/R0	0.49	0.89	-	1.75	1.03	-
T13 R0	1.05	0.96	0.91	1.82	1.68	0.93
T13 700°C	0.65*	0.88*	1.35	3.67	2.24	0.61
700ºC/R0	0.62	0.92	-	2.02	1.33	-
Prom. 700ºC/R0	0.66	0.94	-	1.59	1.07	-

Tabla 3.7. Corriente de fuga de compuerta J_{GS} para V_{G} =-6V, corriente de saturación, altura de la barrera y factor de idealidad de los transistores T1, T12 y T13 de los dados 3450-AG y 4546-DEUT. Razón entre el valor final e inicial, 700°C/R0, de cada parámetro, y promedio de las razones de los tres transistores de cada dado.

Como se observa en la *Figura 3.17.b*, la curva I-V de los dispositivos se deforma de manera importante a partir del recocido a 600°C, difiriendo cada vez más de aquella predicha por el modelo de la emisión termoiónica para una barrera Schottky. En consecuencia, los valores de la corriente de saturación y la altura de la barrera extraídos mediante el ajuste de la curva ya no son totalmente confiables. Aquellos valores para los que la deformación de la curva dificultó más el ajuste se encuentran representados por símbolos semi-rellenos en la *Figura 3.18* y se indican mediante asteriscos en la *Tabla 3.7*.

De las figuras y tabla anterior, la degradación de la compuerta de los transistores as-grown resulta evidente; la altura de la barrera decrece, lo cual es un signo de la degradación, ya que cuando esto sucede, la corriente de fuga a través de esta terminal incrementa. Así mismo, incrementa el factor de idealidad. Para los HEMTs deuterados, el comportamiento se da en dirección contraria, indicando una barrera con mejores parámetros característicos. En cuanto a la corriente de saturación, después del último recocido, ésta incrementa hasta nueve órdenes de magnitud para los as-grown, pero para los deuterados, sólo lo hace en, máximo, dos órdenes. En consecuencia, el valor de la barrera calculada a partir de esta corriente disminuye 34% en los as-grown y sólo 6% en los deuterados. La *Figura 3.18.a* muestra la evolución del factor de idealidad de los seis transistores. La deuteración disminuyó este parámetro prácticamente en un 10% en dos de los tres transistores. Más aún, con los recocidos, aunque el factor de idealidad se modifica en ambos tipos de HEMT, en los as-grown tiene un

incremento promedio del 60%, mientras que, en los deuterados, su variación promedio es despreciable.

3.4.5 Capacitancia-Voltaje

Además de las mediciones anteriores, se obtuvieron curvas capacitancia-voltaje entre las terminales de compuerta y fuente, extrayendo, a partir de éstas, el perfil de concentración de portadores libres en la región ubicada por debajo de la compuerta.

Como se mencionó previamente, la compuerta es una barrera Schottky, que, al tener una región de vaciamiento, presenta una capacitancia. La capacitancia, C(V), de la zona de vaciamiento está dada por [27]:

$$C(V) = \frac{dQ_{sc}}{dV} = \frac{\epsilon_s}{W(V)} = \sqrt{\frac{q\epsilon_s N_D}{2(V_{bi} - V)}}$$
(3.13)

En donde *V* es el voltaje aplicado, Q_{sc} la carga de la región de vaciamiento, ϵ_s la permitividad del semiconductor, *W* es el ancho de la región de vaciamiento, *q* la carga del electrón, N_D es la densidad de donadores ionizados en el semiconductor y V_{bi} el potencial interconstruido.

La expresión anterior es válida para estructuras en las que la densidad de portadores libres en el extremo de la zona de vaciamiento es igual a la concentración de impurezas que da lugar a esos portadores. Cuando se efectúa una medición de capacitancia, se aplica una señal de voltaje alterno entre los electrodos de la capacitancia a medir (por convención a 1.0 MHz), con amplitud de 15 mV. Esta señal ocasiona el desplazamiento de los portadores libres en los extremos de la zona de vaciamiento y, lo que se mide en realidad, es la concentración de esos portadores, no la de impurezas ionizadas. Sin embargo, generalmente, se aproximan como iguales, lo cual no es el caso de la estructura HEMT.

A partir de la *expresión (3.13)*, se determina la concentración de portadores libres en el borde de la zona de vaciamiento:

$$N_D = \frac{2}{q\epsilon_s} \left[-\frac{1}{\frac{d(1/c^2)}{dV}} \right]$$
(3.14)

Las mediciones fueron realizadas utilizando un capacitómetro Boonton 72B conectado al equipo de caracterización HP4142B y a cada transistor a través de la máquina de puntas. Los perfiles de concentración de portadores en la región bajo la compuerta de la estructura, extraídos con base en las *ecuaciones (3.13)* y *(3.14)* se presentan en la *Figura 3.19*.



Figura 3.19. Perfiles de concentración de portadores de los transistores T1 a) as-grown y b) deuterado en función de la profundidad, en su estado sin recocer (\circ) y después del último recocido (\diamond).

De estas figuras se observa una mayor concentración y mejor confinamiento de los electrones en el 2DEG para los transistores deuterados, corroborando resultados previos reportados por este grupo de trabajo. En la imagen se destaca que, en ambos tipos de transistor, la concentración no presenta cambios considerables respecto a sus condiciones iniciales, aún después del último recocido, lo que se discutirá y relacionará con el resto de los resultados más adelante.

3.4.6 Discusión de Resultados de los recocidos y caracterización de HEMTs

Con base en los resultados reportados en esta sección, es posible llegar a la conclusión principal de este trabajo: la pasivación de defectos aceptores producida por la deuteración de la estructura de este HEMT no sólo mejora considerablemente sus propiedades de transporte de carga, sino que, además, éstos se degradan con una menor rapidez que los as-grown (no deuterados).

Antes de comenzar con un análisis detallado, es importante mencionar que, a pesar de que todos los parámetros característicos de los transistores se degradaron con los recocidos, ninguno de los dos tipos de dispositivo dejó de operar como transistor. Esto se puede observar en las *Figuras 3.13* y *3.14*; aunque la corriente máxima y la transconductancia de los HEMT

se encuentran disminuidas con respecto a su valor inicial, la corriente de las curvas de salida de los dispositivos permanece siendo claramente distinguible para cada voltaje de compuerta, incluso después del recocido a 700°C. A continuación, se discuten los resultados, tratando de encontrar y explicar el posible origen de los cambios observados en los parámetros estudiados. La degradación observada en las características eléctricas de los HEMTs se debe necesariamente al deterioro de una o varias de las películas que los componen, las interfases entre ellas y los contactos. La interfase AlGaN/GaN, la película de GaN que contiene al 2DEG, así como los contactos óhmicos y de compuerta y su interfase con el AlGaN, son los de mayor importancia para el siguiente análisis.

En cuanto a los contactos óhmicos, la máxima temperatura a la que se recocieron los dispositivos para evaluar su estabilidad es menor que aquella a la que se realizaron los recocidos de ohmicidad, la cual fue de 800°C (30s). Además, aun después del recocido a 700°C, a campos eléctricos bajos, en las curvas con compuerta flotante, se observa un comportamiento óhmico, lo que permite descartar alguna pérdida de ohmicidad en los contactos de fuente y drenador. Sin embargo, las curvas I-V de la barrera sí presentaron cambios con los recocidos, especialmente a las temperaturas más altas. Esta diferencia en la evolución de ambos tipos de contacto es común en las pruebas de estabilidad térmica de los dispositivos, en las que el contacto de compuerta es generalmente el primero en presentar signos de degradación, los cuales se atribuyen comúnmente a fenómenos de interdifusión entre los materiales que los componen [32-34].

Como se mencionó anteriormente, la caracterización con compuerta flotante permite evaluar las propiedades de transporte del canal sin la intervención de dicho contacto, por lo que el siguiente análisis se centra en estos resultados. En un transistor ideal, cuando la compuerta se encuentra flotante (o bien, para voltajes V_{DS} menores al de saturación), la densidad lineal de corriente del canal, J_{Ch} , sigue la relación:

$$J_{Ch}(V) = \sigma_{Ch} \mathcal{E}(V) \tag{3.15.a}$$

(3.15.b)

$$\sigma_{Ch} = q\mu_n n_s$$

Con

En donde J_{ch} es la densidad lineal de corriente por unidad de distancia del ancho del canal en [A/cm], σ_{ch} la conductividad del canal en [S], μ_n la movilidad de los electrones en $[cm^2/Vs]$, $[n_s]$ la densidad de portadores del canal en $[cm^{-2}]$, y \mathcal{E} el campo eléctrico aplicado en [V/cm], el cual, en este caso, corresponde al campo eléctrico a lo largo del canal ocasionado por la polarización entre fuente y drenador. Debe recordarse que, en el caso del HEMT, el canal es

un gas bidimensional de electrones, por lo que *J* es una densidad lineal de corriente dada en Amperes por unidad de longitud.

Como se observa en la *expresión (3.15.a)*, para un campo eléctrico determinado, la densidad de corriente depende del producto $n_s \cdot \mu_n$, por lo que la degradación que presentan los transistores como consecuencia de los recocidos puede deberse a la disminución del valor de cualquiera de estos dos parámetros, o de ambos.

Los resultados para la concentración y distribución de electrones libres en el 2DEG, reportados en la *Figura 3.19*, permiten suponer que, si hay una disminución en el valor de n_s ocasionada por los recocidos, ésta debe ser prácticamente despreciable. Sin embargo, a pesar de esta observación, la posibilidad de una reducción de este valor se considerará para el análisis siguiente.

En el caso de los transistores as-grown, los electrones del canal provienen de donadores en el AlGaN y en la superficie de la estructura, mientras que, en los deuterados, hay, además de estos, electrones provenientes de aceptores pasivados con deuterio, localizados en esas mismas regiones, conforme a la *reacción (2.7)*.

Para los HEMTs as-grown, si n_s disminuyó, podría deberse a que tanto en el AlGaN, incluida su superficie, como en la interfase AlGaN/GaN, se hubiera presentado un aumento en la concentración de aceptores, o a que la concentración de donadores esté decreciendo, o bien, a ambos procesos.

Los defectos puntuales, aceptores y donadores pueden ser intrínsecos (vacancias, intersticiales, antisitios, etc.) o impurezas químicas. Como se sabe, la concentración y actividad eléctrica de los defectos intrínsecos puede modificarse con los recocidos. En el caso de las impurezas químicas, aunque su concentración no se modifica con los recocidos, su actividad eléctrica sí podría hacerlo mediante cambios en su localización, por ejemplo, mediante la reacción:

$$A^0 \stackrel{\Delta T}{\to} A^0_{activo} \tag{3.16.a}$$

$$A^0_{activo} + e^- \to A^- \tag{3.16.b}$$

En la que una impureza cambia de posición, activándose y capturando un electrón libre, como se ilustra en la *Figura 3.20*. De esta manera, los cambios en la concentración y actividad eléctrica de los diferentes defectos contenidos en el AlGaN y la interfase pudieran ser los responsables de la disminución de portadores del canal de estos transistores, suponiendo que ésta existe.

Para los transistores deuterados, la concentración de portadores en el canal también podría disminuir por el mecanismo descrito para los HEMTs as-grown, así como debido a una modificación en la localización y actividad eléctrica del deuterio. Por ejemplo, al romperse un complejo formado con un aceptor, (A⁻D⁺)⁰. El complejo se rompe por la excitación térmica y el electrón que mantenía ionizado al aceptor, pasa a neutralizar al donador:

$$(A^{-}D^{+})^{0} \to A^{0} + D^{0}$$
 (3.17.a)

Una vez separado el complejo, cada una de las impurezas neutras resultantes captura un electrón libre, convirtiéndose en A^- y D^- . De esta manera el gas de electrones pierde a dos electrones por cada ruptura del complejo (A^-D^+)⁰, conforme a:

$$A^0 + D^0 + 2e_{E_c}^- \to A^- + D^-$$
 (3.17.b)



Figura 3.20. Esquema que representa los átomos de una sección de semiconductor cualquiera con una impureza a) inicialmente inactiva que b) al cambiar su posición, se comporta como un aceptor eléctricamente activo, c) que captura un electrón libre. Los átomos del semiconductor se representan por esferas grandes, la impureza, por una esfera pequeña, y los electrones de valencia, por puntos sólidos.

Debe insistirse en que, aunque los procesos descritos anteriormente disminuyen la concentración de electrones en el 2DEG, en los resultados se observa que ésta permanece sin cambios relevantes después de los recocidos, lo que indica que la principal responsable de la degradación de la conductancia del canal es la reducción del segundo factor del producto n_{s} · μ_n , es decir, la movilidad.
En la *Figura 3.15.a* se observa que, a campos eléctricos pequeños, el producto $\mu_n \cdot n_s$ es casi idéntico para ambos tipos de transistor, independientemente de la condición de recocido. Sin embargo, para campos eléctricos elevados, los recocidos dan lugar a comportamientos radicalmente diferentes. Tal como se menciona en la Sección 1.5.2, la movilidad de los electrones es afectada por varios mecanismos de dispersión. Todos esos, excepto el debido a la interacción fonón-electrón dependen de las propiedades físicas del espacio en que los electrones se mueven, en este caso, entre 140-200 nm de GaN localizado justo debajo de la interfase AlGaN/GaN. A partir de los resultados SIMS, Figura 3.4.a, se sabe que sólo una pequeña cantidad de deuterio alcanza la región del 2DEG, por lo tanto, se puede considerar que las regiones de ambos tipos de transistor son idénticas, poseyendo los mismos mecanismos de dispersión de electrones. Sin embargo, la interfase AlGaN/GaN de los deuterados es diferente: los defectos de naturaleza aceptora han sido pasivados por el deuterio, el cual se encuentra en grandes concentraciones en esa región, como se observa en el perfil SIMS. Esta pasivación no existe en los transistores as-grown, por lo que la rugosidad y los defectos puntuales y extendidos (dislocaciones) de su interfase AlGaN/GaN se encuentran tal como resultaron del crecimiento, aumentando su efecto nocivo con cada recocido. Esto sugiere que el origen de la disminución de la movilidad es la degradación de la interfase, muy probablemente debido al aumento de su rugosidad, incrementando la dispersión de portadores que ésta ocasiona. El comportamiento presentado por los diferentes parámetros estudiados parece indicar entonces que, aunque la interfase AIGaN/GaN de los transistores deuterados también se degrada, es mucho más estable.

La diferencia de energías de activación para la evolución de la conductancia del canal entre un tipo y otro de transistores indica que hay dos mecanismos responsables de la degradación, uno para cada tipo de transistor. Resulta interesante que, a pesar de que la energía de activación de los dispositivos as-grown es mayor, el factor preexponencial de los deuterados es varios órdenes de magnitud menor, lo que explica su mejor desempeño. Además, como se observa en la *Figura 3.15*, para temperaturas de recocido por debajo de 600°C, la conductancia del canal de los HEMTs deuterados es sólo 3% menor que su valor inicial, lo que representa una degradación despreciable.

En el análisis de la confiabilidad del HEMT, también es necesario tomar en cuenta las limitaciones de la ley de Arrhenius. La principal limitación es que, si hay varios mecanismos de degradación ocurriendo en paralelo, la exploración experimental sólo evidenciará al que ocurra con la mayor razón en el rango de temperaturas explorado. El mecanismo que se manifestará primero, será el de menor energía de activación. Esto representa una desventaja al momento de extrapolar los resultados para estimar el tiempo de vida de los dispositivos en

condiciones de operación reales, ya que, al ser un sistema complejo con múltiples elementos operando simultáneamente (contactos óhmicos, contacto rectificante de la compuerta, el gas bidimensional de electrones, la interfase AlGaN/GaN, etc.), habrá diversos mecanismos de degradación ocurriendo al mismo tiempo y no necesariamente todos serán térmicamente estimulados [35,36]. Para obtener una imagen más adecuada de la degradación, es necesario realizar un estudio completo del dispositivo que incluya también condiciones de estrés durante la operación en corriente directa y alterna a temperaturas de operación típicas, así como otras técnicas de caracterización e inspecciones visuales [37]. A pesar de que este tipo de estudios representaría un complemento importante a los resultados aquí mostrados, va más allá del alcance de este trabajo, cuyo objetivo es determinar si las mejoras ocasionadas por la deuteración del dispositivo se mantienen estables después de tratamientos térmicos.

Por otra parte, en el trabajo de Hernández Pérez F. [38] se demuestra que, a temperaturas menores o iguales a 300K, el mecanismo de conducción dominante en la barrera Schottky de estos transistores es el de tuneleo asistido por defectos en la película de AlGaN. Una de las consecuencias de lo anterior es que los dispositivos presentan una corriente de fuga importante por la terminal de compuerta, ocasionada por la presencia de estados permitidos dentro del ancho de banda del AlGaN que permiten el paso de los electrones a través de los mismos. Esto se ilustra en la *Figura 3.21*.

El incremento en las corrientes de saturación y de fuga de la compuerta observado en los HEMTs as-grown, consecuencia del recocido a 700°C, *Figuras 3.17* y *3.18* y *Tabla 3.7*, puede ser explicado por un aumento en la concentración de defectos aceptores en el volumen del AlGaN y/o en la superficie del dispositivo. En el caso de los HEMTs deuterados, para los que la corriente de fuga disminuye, los recocidos podrían haber ocasionado que el deuterio en el volumen del AlGaN que permaneció sin ligarse a algún aceptor continuara difundiéndose o relocalizándose, pasivando más defectos responsables de esta corriente.

Los valores elevados del factor de idealidad que presentan algunos transistores as-grown tras los recocidos a las temperaturas más elevadas, indican una desviación importante del comportamiento de la barrera conforme a lo predicho por el modelo de emisión termoiónica.

Esto podría deberse a que las dislocaciones y la región desordenada en torno a ellas constituyen una trayectoria con una conducción diferente a la del volumen [39,40], por lo que existen dos corrientes distintas en el material. Con los recocidos, la región desordenada por las dislocaciones se modifica de forma que, tanto la corriente de saturación como del factor de idealidad incrementan. En el caso de los transistores deuterados, aunque la curva I-V se deforma, no presentan un cambio tan importante en estos parámetros gracias a la pasivación ocasionada por el deuterio, el cual disminuye la actividad de la región de las dislocaciones. No

obstante, tal como se mencionó anteriormente, a pesar del deterioro de la barrera, los dos tipos de transistor continúan siendo funcionales, lo cual deja en evidencia la robustez de estos dispositivos.

A partir del estudio de la evolución de las propiedades de transporte de la compuerta, es posible concluir que, de forma similar a lo observado en el resto de los parámetros estudiados, la barrera Schottky de los transistores as-grown también se degrada con mayor rapidez que la de los deuterados.



Figura 3.21 a) Heteroestructura AlGaN/GaN en equilibrio. b) Transporte de carga desde el 2DEG hacia la compuerta en polarización directa, y c) transporte de carga por tuneleo en polarización inversa, a través de estados permitidos dentro del ancho de banda del AlGaN [38].

Los resultados aquí expuestos en detalle indican que, aunque ambos tipos de transistor se degradan con los recocidos, la degradación de los as-grown es considerablemente mayor. El trabajo aquí presentado permite concluir que el deuterar los HEMT en las condiciones adecuadas, además de mejorar sus propiedades de transporte, tal como había sido demostrado previamente por este grupo de trabajo, los vuelve más robustos ante la degradación térmica. Lo anterior cierra, parcialmente, la parte más importante de este trabajo integral de investigación sobre el efecto de la pasivación de defectos aceptores contenidos en la estructura AIGaN/GaN del transistor de alta movilidad electrónica.

Referencias

[1] Myers, S. M., et al. "Diffusion, release, and uptake of hydrogen in magnesium-doped gallium nitride: Theory and experiment." Journal of Applied Physics 89.6 (2001): 3195-3202.

[2] Nakagawa, Yoshinori, et al. "Hydrogen dissociation from Mg-doped GaN." Japanese journal of applied physics 43.1R (2004): 23.

[3] Charfeddine, Manel, et al. "Electrical characterization of traps in AlGaN/GaN FAT-HEMT's on silicon substrate by CV and DLTS measurements." Journal of Modern Physics 2011 (2011).

[4] Wittmaack, Klaus. "Beam-induced broadening effects in sputter depth profiling." Vacuum 34.1-2 (1984): 119-137.

[5] Raposo, M., Q. Ferreira, and P. A. Ribeiro. "A guide for atomic force microscopy analysis of softcondensed matter." Modern research and educational topics in microscopy 1 (2007): 758-769.

[6] Zhang, A. P., et al. "Correlation of device performance and defects in AlGaN/GaN high-electron mobility transistors." Journal of electronic materials 32.5 (2003): 388-394.

[7] Sasaki, Hitoshi, et al. "Investigation of surface pits originating in dislocations in AlGaN/GaN epitaxial layer grown on Si substrate with buffer layer."Japanese journal of applied physics 45.4R (2006): 2531.

[8] Manfra, M. J., et al. "Dislocation and morphology control during molecular-beam epitaxy of AlGaN/GaN heterostructures directly on sapphire substrates." Applied physics letters 81.8 (2002): 1456-1458.

[9] Chen, Z., et al. AFM application in III-nitride materials and devices. INTECH Open Access Publisher, 2012.

[10] Le Louarn, A., et al. "AIN buffer layer growth for GaN epitaxy on (111) Si: Al or N first?." Journal of Crystal Growth 311.12 (2009): 3278-3284.

[11] Henley, S. J., and D. Cherns. "Cathodoluminescence studies of threading dislocations in InGaN/GaN as a function of electron irradiation dose." Journal of applied physics 93.7 (2003): 3934-3939.

[12] Arslan, Engin, et al. "Buffer optimization for crack-free GaN epitaxial layers grown on Si (1 1 1) substrate by MOCVD." Journal of Physics D: Applied Physics 41.15 (2008): 155317.

[13] Moram, M. A., and M. E. Vickers. "X-ray diffraction of III-nitrides." Reports on Progress in Physics 72.3 (2009): 036502.

[14] Hussein, A. SH, et al. "Effect of Al mole fraction on structural and electrical properties of Al x
 Ga 1- x N/GaN heterostructures grown by plasma-assisted molecular beam epitaxy." Applied
 Surface Science 257.9 (2011): 4159-4164.

[15] "X-Ray Diffraction Analysis for thin Film Samples." X-ray Diffraction & Elemental Analysis. THE BRIDGE Materials Analysis eNewsletter Iss. 8. Rigaku. 2014.

[16] Waseda, Yoshio, Eiichiro Matsubara, and Kozo Shinoda. X-ray diffraction crystallography: introduction, examples and solved problems. Springer Science & Business Media, 2011.

[17] Balkas C., Basceri C., Davis R., Powder Diffraction 10, 266, (1995).

[18] Natl. Bur. Stand. (US) Monogr. 25, 12, 5, (1975).

[19] Shen, X. Q., H. Matsuhata, and H. Okumura. "Reduction of the threading dislocation density in GaN films grown on vicinal sapphire (0001) substrates." Applied Physics Letters 86.2 (2005): 021912.

[20] Drechsel, Philipp, et al. "Impact of buffer growth on crystalline quality of GaN grown on Si (111) substrates." physica status solidi (a) 209.3 (2012): 427-430.

[21] Ayers, J. E. "The measurement of threading dislocation densities in semiconductor crystals by X-ray diffraction." Journal of Crystal Growth 135.1 (1994): 71-77.

[22] Heying, B., et al. "Role of threading dislocation structure on the x-ray diffraction peak widths in epitaxial GaN films." Applied Physics Letters 68.5 (1996): 643-645.

[23] Kurtz, A. D., S. A. Kulin, and B. L. Averbach. "Effect of dislocations on the minority carrier lifetime in semiconductors." Physical Review 101.4 (1956): 1285.

[24] Gay, P., P. B. Hirsch, and A. Kelly. "The estimation of dislocation densities in metals from X-ray data." Acta metallurgica 1.3 (1953): 315-319.

[25] Pelzmann, A., et al. "Determination of the dislocation densities in GaN on c-oriented sapphire." MRS Internet Journal of Nitride Semiconductor Research1 (1996): e40.

[26] Kaganer, V. M., et al. "X-ray diffraction peak profiles from threading dislocations in GaN epitaxial films." Physical Review B 72.4 (2005): 045423.

[27] S.M Sze. Physics of Semiconductor Devices. 2nd Ed. Wiley-Interscience (1981).

[28] Wu, Yufei, Chia-Yu Chen, and Jesús A. del Alamo. "Activation energy of drain-current degradation in GaN HEMTs under high-power DC stress." Microelectronics Reliability 54.12 (2014): 2668-2674.

[29] R. Chang. Química. 11 Edición. McGraw-Hill (2013).

[30] C. P Schaller. The Arrhenius Law. Introduction to Reaction Kinetics. Physical & Theoretical Chemistry. Supplemental Modules. Physical and Theoretical Chemistry. chem.libretexts.org (2020).
[31] Reddy, M. Siva Pratap, A. Ashok Kumar, and V. Rajagopal Reddy. "Electrical transport characteristics of Ni/Pd/n-GaN Schottky barrier diodes as a function of temperature." Thin Solid Films 519.11 (2011): 3844-3850.

[32] Marcon, Denis, et al. "GaN-based HEMTs tested under high temperature storage test." Microelectronics Reliability 51.9-11 (2011): 1717-1720.

[33] Chaturvedid, N., R. Lossyd, and J. Wuerfld. "Reliability investigation of gallium nitride HEMT." Microelectronics Reliability 44 (2004): 1369-1373. [34] Lee, Jong-Min, et al. "High temperature storage test and its effect on the thermal stability and electrical characteristics of AlGaN/GaN high electron mobility transistors." Current Applied Physics 17.2 (2017): 157-161.

[35] Coutu, Ronald A., et al. "Benefits of considering more than temperature acceleration for GaN HEMT life testing." Electronics 5.3 (2016): 32.

[36] Trew, Robert J., Daniel S. Green, and Jeffrey B. Shealy. "AlGaN/GaN HFET reliability." IEEE Microwave magazine 10.4 (2009): 116-127.

[37] Cheney, David J., et al. "Degradation mechanisms for GaN and GaAs high speed transistors." Materials 5.12 (2012): 2498-2520.

[38] Hernandez Perez F. Tesis de maestría "Estudio de las Propiedades de Transporte de Carga en Función de la Temperatura de la estructura Ni/AlGaN/GaN/Si: Compuerta del Transistor de Alta Movilidad Electrónica (HEMT)". Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN, Dpto. de Ing. Eléctrica Sec. de Electrónica del Estado Sólido, 2012.

[39] Besendörfer, Sven, et al. "The impact of dislocations on AlGaN/GaN Schottky diodes and on gate failure of high electron mobility transistors." Scientific reports 10.1 (2020): 1-12.

[40] Yan, Dawei, et al. "Forward current transport mechanisms in Ni/Au-AlGaN/GaN Schottky diodes." Journal of Applied Physics 114.14 (2013): 144511.

▷ 4. Conclusiones y trabajo a futuro

4.1 Conclusiones

Los resultados presentados y su discusión permiten concluir no solamente que la deuteración es estable, sino que ésta estabiliza la estructura y la hace mucho más robusta en comparación con su condición "as grown", es decir no hidrogenada, reduciendo considerablemente la rapidez a la que ocurre su degradación térmica.

Los mecanismos que dan lugar a la degradación son térmicamente estimulados, con una energía de activación estimada de 1.37 eV para los transistores as-grown y 0.63 eV para los deuterados. Aunque la energía de activación de los deuterados es menor que la de los as-grown, el factor pre-exponencial del ajuste conforme a la ecuación de Arrhenius es varios órdenes de magnitud menor, siendo 1.6x10⁶ para los as-grown y 496.5 para los deuterados, lo que explica su mayor estabilidad.

Es posible que, como consecuencia de los recocidos, se creen defectos en la interfase de la estructura AlGaN/GaN sin deuterar, mismos que son altamente efectivos para la dispersión de portadores y que tienen un efecto considerable sobre la velocidad de saturación de los electrones.

La deuteración y posterior recocido del transistor HEMT ocasiona una reducción considerable de su corriente de fuga de compuerta. Es probable que, el hidrógeno que haya permanecido de forma intersticial, sin ligarse, después de su introducción, sufriera un reacomodo con el recocido, pasivando aceptores cercanos.

Estos resultados muestran, igualmente, que la energía de enlace entre en hidrogeno y los aceptores contenidos en la estructura es suficientemente grande dado que se mantienen estables a temperaturas tan elevadas como 700°C.

Sabiendo que la deuteración pasiva la actividad eléctrica de las dislocaciones, aunque los resultados no permiten determinar con certeza los mecanismos involucrados, muestran que las dislocaciones podrían estar jugando un papel importante en la degradación térmica de la estructura AIGaN/GaN.

4.2 Trabajo a Futuro

Finalmente, este trabajo ofrece un primer indicio de las ventajas que trae consigo la deuteración adecuada del HEMT con respecto a su estabilidad. Para una mejor comprensión de las causas de la degradación térmica de los transistores, es necesario realizar estudios

más profundos sobre la evolución de la movilidad y concentración de los electrones del canal, así como dar seguimiento a la degradación de los contactos del dispositivo mediante técnicas de caracterización eléctrica, tales como TLM (Transmission Line Measurements), e inspecciones visuales mediante SEM. Para esto, se deberá contar con estructuras elaboradas, deuteradas y recocidas en las mismas condiciones que los transistores estudiados.

Así mismo, los estudios realizados por este grupo de la SEES se centran en la caracterización en DC de los dispositivos, por lo que aún falta realizar estudios complementarios del efecto de la deuteración sobre su desempeño y confiabilidad en AC. Por ejemplo, es interés de estas pruebas determinar su rapidez de respuesta, sometiéndolos comúnmente a transitorios de los voltajes de compuerta y drenador para observar el retraso en la respuesta de la corriente de drenador, relacionados con el atrapamiento de cargas.

De manera similar, también es necesario realizar pruebas de stress estático a tiempos prolongados y temperaturas elevadas, someter a los dispositivos a condiciones de ruptura, y pruebas de stress dinámico para evaluar y comparar el desempeño de los HEMT deuterados con el de los as-grown.

▷ ANEXO

Publicación de resultados.

A continuación, se incluye el artículo en el que se reportan los resultados de este trabajo de tesis:

Arreola-Pina, A. S., and J. Mimila-Arroyo. "Thermal reliability of deuterated AlGaN/GaN HEMTs." *Materials Science in Semiconductor Processing* 123 (2021): 105482. DOI: https://doi.org/10.1016/j.mssp.2020.105482

Materials Science in Semiconductor Processing xxx (xxxx) xxx

Contents lists available at ScienceDirect



Materials Science in Semiconductor Processing

journal homepage: http://www.elsevier.com/locate/mssp



Thermal reliability of deuterated AlGaN/GaN HEMTs

A.S. Arreola-Pina*, J. Mimila-Arroyo

Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional, Dpto. de Ing. Eléctrica SEES, Av. Instituto Politécnico Nacional No 2508, Ciudad de México, CP 07360, Mexico

ARTICLE INFO	A B S T R A C T
Keywords: HEMT Reliability Deuterium Thermal degradation GaN	The reliability of the deuterated AlGaN/GaN High Electron Mobility Transistor (HEMT), which has an improved performance due to the deuterium passivation of point and extended defects, has been studied and compared to that of as-grown (non-deuterated), otherwise identical devices. The HEMT structure was grown by molecular beam epitaxy on Si substrates, and deuterium was in-diffused between the source and drain contacts, prior to the deposition of the gate. As-grown and deuterated transistors were simultaneously annealed at temperatures ranging from 300 °C to 700 °C, monitoring their charge transport properties after each anneal. It was observed that, even though both types of devices degraded, the degradation of the deuterated ones was less important. The evolution of their channel conductance reveals a different thermally stimulated degradation mechanism for each type of HEMT, with activation energies of 1.37 eV for the as-grown and 0.63 eV for the deuterated ones. Contrastingly, the pre-exponential term of the as-grown transistors was considerably higher than that of the deuterated ones, which explains their faster degradation. This study confirms that a proper deuteration improves the HEMT charge transport properties. making it more stable and reliable.

1. Introduction

The remarkable high-power handling and high-frequency performance of the AlGaN/GaN High Electron Mobility Transistor (HEMT) stems from the physical properties of its base materials; gallium nitride and aluminium gallium nitride, and the heterostructure itself [1–4]. The two-dimensional electron gas (2DEG), spontaneously formed at the AlGaN/GaN interface, completely contained in the GaN side, confined against the interface, has a high free electron density, in the order of 10^{13} cm⁻², and an electron mobility as high as ~2000 cm²/Vs [5,6], which allow it to carry high current densities and to handle high-frequency signals.

Due to the high cost and low availability of native substrates for growing GaN and AlGaN layers, extrinsic substrates like sapphire, silicon and silicon carbide are used instead, resulting in highly dislocated epitaxial films that display dislocation densities in the range of 10^8-10^{11} cm⁻² [7–9]. In n-GaN and n-AlGaN, a threading dislocation constitutes a line of acceptor-like defects which capture electrons from the conduction band, leading to the formation of a built-in barrier with a high electron-scattering efficiency [10]. The detrimental effect of threading dislocations on the physical properties of the AlGaN/GaN structure significantly degrades the performance of the devices based on

it, leading to devices with a performance lower than expected and originating reliability issues. For instance, the maximum drain current and transconductance, as well as the RF performance of the HEMT are strongly reduced, especially when dislocation densities are higher than 10^{10} cm⁻² [9]. HEMT degradation usually starts at the edge of the gate metal, where high electric fields are developed. Their interaction with surface steps, pits or any other morphological or structural defect triggers a mechanism that erodes the top layer, which is in contact with the gate edge, leading to the device performance degradation and, eventually, its failure [11,12]. Therefore, attaining low defect densities or reducing their electrical activity is necessary for improving the performance and reliability of these devices.

On the other hand, hydrogen and its isotope, deuterium, are known to passivate some defects in various semiconductors such as silicon, germanium and gallium arsenide [13]. As for gallium nitride, its charge transport and optical properties can be strongly improved by its deuteration, increasing the photoluminescence yield and electron mobility, as well as reducing the free electron concentration of n-type unintentionally doped GaN films grown on foreign substrates. A reduction in the persistent photoconductivity, usually displayed by these layers, can also be achieved, indicating that defects surrounded by an energy barrier have been passivated [14–16]. These improvements

https://doi.org/10.1016/j.mssp.2020.105482

Received 4 June 2020; Received in revised form 23 August 2020; Accepted 27 September 2020 1369-8001/© 2020 Elsevier Ltd. All rights reserved.

Please cite this article as: A.S. Arreola-Pina, J. Mimila-Arroyo, Materials Science in Semiconductor Processing, https://doi.org/10.1016/j.mssp.2020.105482

^{*} Corresponding author. E-mail address: aarreola@cinvestav.mx (A.S. Arreola-Pina).

A.S. Arreola-Pina and J. Mimila-Arroyo

were attributed to the passivation of acceptor states in the threading dislocations core, and the free electron decrease was related to the capture of electrons by interstitial deuterium in the bulk, that is, outside the dislocations core.

This research group has also studied the diffusion of deuterium into the AlGaN/GaN heterostructure, optimizing the deuteration parameters in order to improve the charge transport properties of its 2DEG. Such study allowed to achieve a 30% increase in its sheet electron concentration and a slight increase in their mobility [17]. The SIMS profile of the HEMT structures, deuterated under the optimized conditions, showed that deuterium can be in-diffused in the AlGaN thin layer without a significant diffusion beyond its interface with the GaN active layer. Therefore, the additional electrons in the 2DEG necessarily come from passivated acceptors at the threading dislocations core or from point defects in the AlGaN layer and in the AlGaN/GaN interface, as described by the reaction:

$$A^- + D \rightarrow AD + e$$
 (1)

The negligible variation in mobility was also explained by the fact that deuterium did not reach the electron gas region in an important concentration, allowing for the main scattering mechanisms to remain unchanged. Had deuterium reached the 2DEG region, it would have become ionized according to:

$$D + e \rightarrow D^-$$
(2)

constituting a scattering centre.

Expecting similar results, this workgroup proceeded with the deuteration of AlGaN/GaN HEMTs; an up to 30% higher drain-to-source current, transconductance and on-conductance were obtained. Moreover, the dispersion between parameters of different devices from the same wafer was minimized [18]. Nevertheless, studies assessing the stability of the defect passivation, helpful for establishing the potential applications of the deuterated devices, to the best of our knowledge, have not been carried out yet.

Therefore, here we present the last part of an integral study on the behaviour of the AlGaN/GaN HEMT, which has an improved performance due to its controlled deuteration. The previous studies comprised the determination of the deuteration experimental conditions: plasma power, sample temperature, and in-diffusion duration to improve the physical properties of; firstly, single GaN epitaxial layers, then, the HEMT structure alone and of a finished HEMT [14–18]. In this last study, we explored the reliability of the deuterated HEMT and the thermal stability of its in-diffused deuterium and compared it to that of the same, but non-deuterated devices.

2. Experimental methods

The devices studied in this work were MBE-grown AlGaN/GaN HEMTs on a (111) silicon wafer. They consisted of a set of buffer layers, a $1.5 \,\mu$ m GaN active layer, a $20 \,$ nm Al_xGa_{1-x}N layer with an aluminium

Materials Science in Semiconductor Processing xxx (xxxx) xxx

content of x = 0.3, and a 1 nm GaN cap layer, all of which were n-type conductivity unintentionally doped (uid) layers. From the characterisation of similar GaN layers, an electron concentration of $n_0 \sim 10^{16} cm^{-3}$ and a $\mu_n \sim 50 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ electron mobility were obtained. Likewise, for similarly grown AlGaN/GaN heterostructures, a sheet electron concentration of $n_s = 4-8 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ and a mobility of $\mu_n = 1100-1200 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ were obtained for their as-grown, non-deuterated, condition. Once the HEMT structure had been grown, that is, after the deposition of the AlGaN layer, the isolation mesas were defined and the source (S) and drain (D) contacts, Au/Al/Ti: 2 µm/200 nm/20 nm, were deposited and annealed at 800 °C for 30 s in nitrogen atmosphere. Fig. 1(a) shows a schematic representation of the devices up to this step of the process. After this, the wafer was cut in half. One of the halves was deuterated by the remote RF-plasma technique at a plasma power of 0.1 W/cm², 1 mbar, 350 °C, for 30 min, obtaining gateless deuterated structures, as pictured in Fig. 1(b). In agreement with our previous results, an increase of up to 30% in the 2DEG electron concentration and a negligible change in their electronic mobility were achieved after the deuteration. Finally, both halves were processed simultaneously, depositing the gate (G) contacts (Ni, 200 nm), obtaining two different sets of dices; as-grown (non-deuterated) and deuterated, otherwise equal, each containing multiple transistors. Fig. 1(c) shows a schematic of the finished deuterated devices, ready for their thermal stability to be studied.

In order to determine the reliability of the deuterium-passivated devices, as-grown and deuterated transistors were electrically characterised at their initial state at room temperature, and then annealed simultaneously in N₂ atmosphere for 1 h at 300 °C. The transistors were characterised again at room temperature and annealed at 400 °C. This process was repeated increasing the annealing temperature by 100 °C each step, up to 700 °C. The maximum annealing temperature was chosen to be well below the growth temperature of the structure of the HEMTS studied here.

Characterisation was carried out under dark conditions with a HP4145–B Semiconductor Parameter Analyser, using the four-point probe method, obtaining the output curves, transfer function, floating-gate current-voltage curve and gate-source Schottky barrier I–V curve of the devices. A Boonton 72B capacitance meter was used for the gate-source capacitance-voltage measurements. All the studied devices have the same dimensions; a gate width of W_G = 100 µm, a gate length of $L_G = 1 \mu m$ and a source-drain distance of $L_{SD} = 8 \mu m$.

3. Results

Fig. 2(a) shows typical output curves of the as-grown and deuterated transistors before (initial state) and after the annealing process (last anneal at 700 °C) for a gate voltage of $V_G = 1 V$. For this bias condition, the evolution of the maximum drain current and on-conductance $(G_{ON} = 1/R_{ON})$ as a function of the annealing temperature, normalised to their initial value, are shown in Fig. 2(b). In agreement with the previous results of this workgroup, mentioned in Section 1, the



Fig. 1. Schematics of a) an AlGaN/GaN structure with ohmic contacts before deuteration, b) a transistor after deuteration between the source and drain contacts, before gate deposition and c) a finished deuterated transistor. As-grown transistors are the same as in c), but without the deuterated region.



Fig. 2. a) Drain current for $V_{GS} = 1$ V of an as-grown (AG) and a deuterated (Deut.) transistor at their initial condition and after annealing at 700 °C. b) Evolution with annealing temperature of the maximum drain current, I_{DS} , at $V_G = 1$ V and on conductance, G_{ON} , normalised to their initial values. The inset shows the evolution of their maximum transconductance, g_{mmax} . c) Transfer curves of an as-grown (AG) and a deuterated (Deut.) transistor at their initial condition and after annealing at 700 °C. Inset shows the evolution of the off voltage.

deuterated devices at their initial state showed a higher drain current and a lower on resistance than their as-grown counterparts. This difference remained the same even after the last annealing step at 700 °C. In fact, the maximum current of the deuterated transistors in their initial condition was about 10% higher than for the as-grown ones, but after the last anneal, it became 32% higher. Moreover, the maximum drain current of the as-grown transistors decreased by 30%, whereas for the deuterated devices, the reduction was only 18%. The decrease of the channel conductance was not too different from that of the current; 26% and 22%, for the as-grown and deuterated transistors, respectively. This behaviour indicates that the annealing process degrades the currenthandling ability of both types of devices, but the degradation of the as-grown transistors is twice as important as for the deuterated ones.

The inset of Fig. 2(b) displays the evolution of the normalised maximum transconductance. It was observed that the maximum transconductance of the as-grown devices decreased around 30% and only 14%, for the deuterated ones. The maximum transconductance of the as-grown HEMTs decreased from around 104 mS/mm at their initial state to 74 mS/mm after the 700 °C anneal, whereas for the deuterated, it decreased from 112 mS/mm to 96 mS/mm. A decrease of 30% and 15%, respectively.

Fig. 2(c) shows typical transfer curves of the as-grown and deuterated HEMTs. The evolution of the off voltage with the annealing temperature is included in the inset. The initial off voltage of the as-grown transistors, $|V_{off}|$, was 2.96 V, and for the deuterated devices, 3.05 V. After the 700 °C anneal, it was 2.94 V and 2.95 V respectively. The off voltage underwent changes during the annealing process, but it always remained within 6% its initial value for both types of transistors. This behaviour demonstrates that the electron concentrations in their respective 2DEG remained almost unchanged. In gathering the data of the above parameters, the three terminals of the HEMT are involved; the gate Schottky barrier, and the source and drain ohmic contacts. The activation of the gate involves the following elements of the device; the metal(gate)-GaN(cap) interface, the GaN cap layer, the GaN(cap)-AlGaN interface, the AlGaN layer itself, along with all of its point and extended defects, and the AlGaN/GaN interface that is in contact with the 2DEG, including its point defects and roughness. This means that there are several elements that can undergo a variety of changes as consequence of the thermal anneals, affecting the transistor charge transport parameters.

A simple way to explore the 2DEG's stability is by obtaining sourcedrain current-voltage curves without a gate biasing (floating-gate), allowing the study of the isolated charge transport properties of the 2DEG. In this bias condition, the resulting current is function only of the 2DEG's free electron concentration and mobility, which involves the interaction of the 2DEG electrons with the AlGaN/GaN interface. It is worth mentioning that interface roughness has been proposed to be the scattering mechanism that determines the 2DEG mobility [19,20]. Fig. 3 (a) shows typical floating-gate current-voltage curves of the as-grown and deuterated transistors at their initial and final conditions. Fig. 3 (b) shows the evolution with temperature of the maximum drain current and channel conductance of each type of device. In these figures, it is seen that the maximum 2DEG current of the as-grown devices decreased 30% and only 6% for the deuterated ones, whereas the conductance of both types of transistors suffered a reduction of around 30%. The difference between the thermal performance of each type of device can easily be observed in Fig. 3(a), where, after the anneal at 700 °C, not only is the maximum current of the as-grown transistors considerably lower, but also the shape of their IV curve is different; the IDS curve of the as-grown HEMT flattens at an electric field of 5×10^3 V/cm, which is not



Fig. 3. a) Floating-gate IV-curves of the as-grown (AG) and deuterated (Deut.) transistors in their initial state and after the anneal at 700 °C. b) Maximum drain current, I_{DSCH}, and 2DEG conductance, G_{ch}, vs annealing temperature, normalised to their initial values.

the case for the deuterated one. This means that there is a scattering mechanism in the as-grown device that is not present in the deuterated one.

Figs. 2 and 3 show that the drain current from the output curves and from the floating gate measurements, as well as the transconductance of the as-grown HEMTs increased slightly after the 300 °C and 400 °C anneals, evidencing that these transistors have initial instabilities. This contrasts with the degradation shown by the deuterated transistors for such temperatures. However, for the whole annealing temperature range, the parameters of the deuterated devices remained better than that of the as-grown ones and the difference in their degradation was negligible up to the anneal at 500 °C. For higher temperatures, the difference in their performance becomes evident. Hence, the following discussion will focus on the highest annealing temperatures, for which the degradation of both types of transistor is clearly quantifiable.

Fig. 4 displays the change of the normalised 2DEG conductance, Δ_{Gch} , as a function of the annealing temperature. The data follow an exponential behaviour, corresponding to a thermally stimulated process. The activation energy of the processes responsible for the degradation of the channel conductance was extracted from these data, being 1.37 eV for the as-grown devices and 0.63 eV for the deuterated ones, with pre-exponential factors of 1.55×10^6 and 496.49, respectively.

The electron concentration profiles were extracted from the gatesource capacitance-voltage measurements. Fig. 5 shows the initial and final condition concentration profiles of both types of transistor. It is observed that there was a higher 2DEG carrier concentration as well as a better electron confinement in the deuterated transistors, which held true even after the last anneal. No important change in the profiles can be observed as consequence of the annealing process, therefore, up to the maximum temperature, its effect on the free electron concentration is insignificant.

As for the Schottky barrier, current-voltage curves were obtained for both types of device and conditions. The ideality factor, η , and Schottky



 AG before annealing 10 [c-m-3] AG 700°C Deut. before annealing centration Deut. 700°C 10 con 10 Electron 10 2.3x10-08 1.9x10-0 2.1x10-00 2.5x10-0 Depth [cm]

Fig. 5. 2DEG electron concentration profiles obtained from Capacitance-Voltage curves for an as-grown (AG) and a deuterated (Deut.) transistor before any thermal treatment and after the anneal at 700 °C.

barrier saturation current, I_{ss}, were estimated from the forward-region of the curves, according to the thermoionic emission theory. The ideality factor of the as-grown devices increased almost two times after the anneals, evidencing a strong degradation of the barrier ($\eta \sim 1.8$ before annealing). In contrast, for the deuterated devices, it remained almost constant ($\eta \sim 1.7$ before and after 700 °C annealing). The saturation current of the as-grown devices increased up to nine orders of magnitude, from 2×10^{-12} A/cm² to 1.9×10^{-3} A/cm², whereas that of the deuterated ones increased around two orders of magnitude, from 8.4×10^{-11} A/cm² to 4.3×10^{-9} A/cm², in the worst case. Interestingly, the gate leakage current for the deuterated transistors, decreased as a consequence of the annealing process.

4. Discussion

For the sake of clarity and simplicity, we will begin by studying the behaviour of the HEMT floating-gate conductance and saturation current as a function of the annealing temperature. It is important to remember that, when the gate terminal is biased (output curves), drain current saturation occurs when the channel is pinched-off. In contrast, when the gate terminal is not connected (floating-gate), for low electric fields, drain current is [21]:

$$J_{Ch}(V_{DS}) = \sigma_{Ch} \varepsilon(V_{DS}) \qquad (3)$$

with $\sigma_{Ch} =$

$$c_h = q\mu_n n_s$$
 (4)

where J_{Ch} is the current density, ε , the electric field due to the sourcedrain biasing (V_{DS}), σ_{ch} , channel conductivity, q, the electron charge, μ_n , the 2DEG electron mobility and n_s , the 2DEG electron density. However, for a sufficiently high electric field, current saturates when

Fig. 4. Arrhenius plot for the channel conductance change of the as-grown (AG) and deuterated (Deut.) devices.

A.S. Arreola-Pina and J. Mimila-Arroyo

carriers reach their saturation velocity, vs:

$$J_{Ch_s} = -qn_s v_s \qquad (5)$$

As seen in Figs. 3(a) and 5, the devices chosen for this study had similar current-voltage curves and 2DEG distribution profiles at their initial state, before any thermal treatment. Specifically, their 2DEG low electric field conductance and saturation currents were similar. Then, their low electric field mobility, μ_{ns} , high electric field saturation velocity, v_s and, thus, their main scattering mechanisms were also similar. After the full thermal treatment, the carrier concentration profiles from Fig. 5 show that the 2DEG electron concentration and distribution remained almost unchanged in both types of device. The low-field conductance remained approximately similar for both, but their saturation current was quite different. This can be explained as follows.

According to Eq. (4) and the insignificant change in the electron concentration profiles, the 2DEG low-field conductance diminution of the transistors must be due to a corresponding decrease in their electron mobility. The similarity between the final conductance of the two types of HEMTs indicates that, at these fields, the main scattering mechanism of the as-grown transistors is the same as that of the deuterated ones. On the other hand, Fig. 3(a) shows that, for electric fields higher than 5×10^3 V/cm, the current of the as-grown device becomes almost flat, at a much lower value than at its initial condition, whereas that of the deuterated HEMT almost reaches its initial, not-annealed, value. Since the change in their electron profile was negligible, the reduction in their 2DEG saturation current implies that the electrons saturation velocity has decreased, Eq. (5). From the different saturation velocities and dominant high-field scattering mechanism are not the same.

Now, let us recall that all the devices were fabricated on the same wafer and underwent the same technological processes except for the deuteration treatment, and finally, that deuterium did not reach the 2DEG region in an important concentration. This way, the scattering mechanisms that are present in the GaN region where the 2DEG is located should be the same for both types of HEMTs, even after the thermal anneals. When deuterating, high concentrations of deuterium are introduced into the structure surface, AlGaN layer and AlGaN/GaN interface, so, the only difference between the as-grown and the deuterated devices relies on their AlGaN layer and AlGaN/GaN interface. Since there are almost no free carriers in the AlGaN laver, the drain current from these measurements is mainly due to transport along the GaN-side of the interface, where electrons interact with all its point defects and interface roughness. Hence, the high-field scattering mechanism that affects the as-grown transistors arises from the degradation of the interface in which defects might have been created or activated by the annealing process. A similar degradation could also be occurring in the deuterated devices but at a slower rate or without constituting the main scattering mechanism. For the deuterated HEMT, deuterium might have bonded to some defects at the interface, passivating them, stabilizing the interface and inhibiting the appearance of that scattering mechanism.

From the activation energies calculated for the 2DEG conductance degradation, the fact that they differ from each other suggests that there are two different dominant degradation mechanisms, one for each type of transistor. It is interesting to notice that, despite the activation energy of the as-grown devices being higher, the pre-exponential term of the deuterated devices is considerably lower, which explains their better performance at the end of the annealing. Secondly, for temperatures below 600 °C, the conductance of the deuterated HEMTs was only 3% lower than its initial value, a completely negligible degradation. The difference between the overall degradation of both types is also negligible up to this temperature.

As for the Schottky barrier, the gate contact and its interface are generally reported to be the first to present thermal degradation signs, commonly attributed to interdiffusion phenomena [22,23]. Additionally, the high reverse leakage current of the gate has been widely attributed to defects in the AlGaN layer [24]. The better performance shown by the deuterated HEMTs might be due to deuterium improving the metal-semiconductor interface, making it more stable against thermal degradation, as well as passivating some of the defects responsible for the leakage current. The decrease in their leakage current caused by the anneals was probably due to a slight deuterium relocation that did not affect the rest of the transistor parameters considerably.

Finally, this analysis considers that the floating-gate drain current behaves according to theory and saturates due to the carrier velocity saturation. Nevertheless, the saturation electric field is around one order of magnitude smaller than the maximum predicted value for the AlGaN/ GaN structure [25]. A possible explanation is that charged traps in the AlGaN layer, mainly acceptor surface states, act as the so-called "virtual gate", partially pinching-off the channel, resembling an actual gate bias [26]. The discussion assumes that relevant changes in the concentration or electrical activity of surface states would impact the 2DEG concentration of the HEMTs [27,28]. Since no quantifiable change was observed neither in the off-voltage, nor in the CV carrier concentration profiles of any of the HEMT types after the annealing process, it was considered that the distribution and charge state of surface states were practically unaffected by such process.

From the previous results of this workgroup, summarised in Section 1, it was shown that it is the passivation of acceptor defects in the AlGaN layer that gives rise to an increase in the 2DEG concentration, according to Eq. (1). Deuteration might also have contributed to reduce this virtual-gate effect by passivating surface states. Other issues commonly attributed to deep levels in the AlGaN layer, like the current collapse and gate-lag phenomena, are expected to have been minimized as well. Further studies regarding the effect of a proper deuteration on these common HEMT reliability issues are needed and will be carried out.

5. Conclusions

The reliability of non-deuterated and deuterated GaN/AlGaN/GaN/ Si High Electron Mobility Transistors (HEMTs) has been studied. Both types of HEMT came from the same wafer and were processed simultaneously, except for the in-diffusion of deuterium. HEMTs of each type were simultaneously annealed for 1 h, from 300 °C to 700 °C, studying their charge transport properties after each annealing step. Our results confirm that a 30-min deuteration, under the proper experimental conditions, not only improves its charge transport properties by passivating acceptor defects, but also makes it more stable against thermal effects and increases its reliability. An additional high-field scattering mechanism that appears in the as-grown devices after the deuteration is likely to be due to the degradation of the AlGaN/GaN interface.

CRediT author statement

- A.S. Arreola-Pina
- Conceptualization: formulation of research goals.
- Investigation. Formal analysis.
- formal analysis.

Writing (Original Draft): Writing of the initial draft. Preparation, creation and presentation of the work.

- Visualization: Preparation and submission of the work.
- J. Mimila-Arroyo
- Conceptualization: formulation of research goals.
- Methodology: experimental methods design.
- Investigation.
- Validation.
- Formal analysis.
- Writing (Original Draft): Preparation of the work.

A.S. Arreola-Pina and J. Mimila-Arroyo

Declaration of competing interest

The authors declare that they have no known competing financial interests or personal relationships that could have appeared to influence the work reported in this paper.

Acknowledgments

This work was partly supported by CONACYT [Grant number 4203251

The authors wish to express their deepest gratitude to Ph.D. F. Jomard from Univérsité de Versailles, GEMaC for the SIMS measurements and M. en C. R. Huerta Cantillo for their valuable technical assistance.

References

- [1] A.A. Fletcher, D. Nirmal, A survey of gallium nitride HEMT for RF and high power applications, Superlattice. Microst. 109 (2017) 519-537, https://doi.org/10.1016/ ni 2017 05 042
- [2] H. Amano, et al., The 2018 GaN power electronics roadmap, final published org/10.1088/ version, J. Phys. D Appl. Phys. 51 (16) (2018) 163001, https://do 1361-6463
- [3] K.J. Chen, et al., GaN-on-Si power technology: devices and applications, IEEE Trans. Electron. Dev. 64 (3) (2017) 779-795, https://doi.org/10.1109/ ED 2017
- [4] D.C. Look, J.R. Sizelove, Predicted maximum mobility in bulk GaN, Appl. Phys.
- Lett. 79 (8) (2001) 1133–1135, https://doi.org/10.1063/1.1394954.
 R.S. Pengelly, S.M. Wood, J.W. Milligan, S.T. Sheppard, W.L. Pribble, A review of GaN on SiC high electron-mobility power transistors and MMICs, IEEE Trans. Microw. Theor. Tech. 60 (6) (2012) 1764-1783, https://doi.org/10.1109/ TMTT.2012.21875
- [6] O. Ambacher, J. Smart, J.R. Shealy, N.G. Weimann, K. Chu, M. Murphy, W. J. Schaff, L.F. Eastman, R. Dimitrov, L. Wittmer, M. Stutzmann, W. Reiger, J. Hilsenbeck, Two-dimensional electron gases induced by spontaneous and piezoelectric polarization charges in N-and Ga-face AlGaN/GaN heterostructures, J. Appl. Phys. 85 (6) (1999) 3222-3233, https://doi.org/10.1063/1.369
- [7] L. Liu, J.H. Edgar, Substrates for gallium nitride epitaxy, Mater. Sci. Eng. R Rep. 37 (3) (2002) 61-127, https://doi. g/10.1016/S0 X(02)00008-
- [8] S. Keller, G. Parish, J.S. Speck, S.P. DenBaars, U.K. Mishra, Dislocation reduction in GaN films through selective island growth of InGaN, Appl. Phys. Lett. 77 (17) (2000) 2665-2667, https://doi.org/10.1063/1.1319
- F.A. Marino, N. Faralli, T. Palacios, D.K. Ferry, S.M. Goodnick, M. Saraniti, Effects [9] of threading dislocations on AlGaN/GaN high-electron mobility transistors, IEEE Trans. Electron. Dev. 57 (1) (2009) 353-360. https://10.1109/TED.2009.20
- [10] J.L. Farvacque, Z. Bougrioua, I. Moerman, Free-carrier mobility in GaN in the presence of dislocation walls, Phys. Rev. B 63 (11) (2001) 115202, https://doi.org/ 0.1103/ RevB.63.115202.
- [11] J. Joh, J.A. Del Alamo, K. Langworthy, S. Xie, T. Zheleva, Role of stress voltage on structural degradation of GaN high-electron-mobility transistors, Microelectron Reliab, 51 (2) (2011) 201-206, https://doi.org/10.1016/j.micro 1 2010 08 021.
- [12] N. Killat, M. Montes Bajo, T. Paskova, K.R. Evans, J. Leach, X. Li, Ü. Özgür, H. Morkoc, K.D. Chabak, A. Crespo, J.K. Gillespie, R. Fitch, M. Kossler, D.

Materials Science in Semiconductor Processing xxx (xxxx) xxx

E. Walker, M. Trejo, G.D. Via, J.D. Blevins, M. Kuball, Reliability of AlGaN/GaN high electron mobility transistors on low dislocation density bulk GaN substrate: implications of surface step edges, Appl. Phys. Lett. 103 (19) (2013) 193507, s://doi.org/10.1063/

- [13] S.J. Pearton, J.W. Corbett, M. Stavola, Hydrogen in Crystalline Semiconductors 16, Springer Science & Business Media, Berlin, 1992, https://doi.org/10.1007/978 1778-3
- [14] J. Mimila-Arrovo, M. Barbé, F. Jomard, J. Chevallier, M.A. di Forte-Poisson, S. L. Delage, C. Dua, Deuterium passivation of electrically active defects in nonintentionally doped n-Ga N, Appl. Phys. Lett. 90 (7) (2007), 072107, https:// oi.org/10.1063/1.2 539542
- [15] J. Mimila-Arroyo, E. Morales, A. Lusson, Method to probe the electrical activity of dislocations in non-intentionally doped n-GaN, Mater. Sci. Eng. B Adv. 177 (16) (2012) 1487–1490, https://doi.org/10.1016/j.mseb.2012.02.013.
- J. Mimila-Arroyo, E. Morales, A. Lusson, J.M. Laroche, F. Jomard, M. Tessier, [16] Improving the electrical properties of non-intentionally doped n-GaN by deuteration, Superficies y Vacio 23 (4) (2010) 31-34.
- [17] J. Mimila-Arroyo, F. Jomard, J. Chevallier, Improvement of AlGaN/GaN/Si high electron mobility heterostructure performance by hydrogenation, Appl. Phys. Lett. 102 (9) (2013), 092104, https://doi.org/10.1063/1.4794401.
- [18] C.A. Hernández-Gutierrez, Efecto de Deuterar HEMTs de estructura Ni/AlGaN/ GaN/Si de 1.0um de compuerta en sus propiedades de transporte (M.S. Thesis), CINVESTAV-IPN, Departamento de Ingenieria Electrica, Mexico City, Mexico, 2013.
- [19] X. Xu, X. Liu, X. Han, H. Yuan, J. Wang, Y. Guo, H. Song, G. Zheng, H. Wei, S. Yang, Q. Zhu, Dislocation scattering in Al x Ga 1- x N/ Ga N heterostructures, Appl. Phys. Lett. 93 (18) (2008) 182111, https://doi.org/10.1063/1.3013836
- [20] F. Carosella, J.L. Farvacque, Effect of threading dislocations on carrier mobility in AlGaN/GAN quantum wells, J. Phys. Condens. Matter 20 (32) (2008) 325210, https://doi.org/10.1088/0953-8984/20/32/325210.
- [21] S. M Sze, Physics of Semiconductor Devices, second ed., Wiley-Interscience, New York 1981.
- [22] D. Marcon, X. Kang, J. Viaene, M. Van Hove, P. Srivastava, S. Decoutere, R. Mertens, G. Borghs, GaN-based HEMTs tested under high temperature storage test, Microelectron. Reliab. 51 (9-11) (2011) 1717-1720, https://doi.org/ 10.1016/i.microrel.2011.06.0
- [23] A. Sozza, C. Dua, E. Morvan, B. Grimbert, V. Hoel, S.L. Delage, N. Chaturvedid, R. Lossy, J. Wuerfld, Reliability investigation of gallium nitride HEMT, Microelectron. Reliab. 44 (2004) 1369–1373, https://doi.org/10.1016/j orel.2004.07.018
- [24] H.R. Mojaver, P. Valizadeh, Reverse gate-current of AlGaN/GaN HFETs: evidence of leakage at mesa sidewalls, IEEE Trans. Electron. Dev. 63 (4) (2016) 1444-1449, oi.org/10.1109/TED.2016.2529301
- [25] J.M. Barker, D.K. Ferry, S.M. Goodnick, D.D. Koleske, A. Allerman, R.J. Shul, High field transport in GaN/AlGaN heterostructures, J. Vac. Sci. Technol. B Microelectron. Nanometer Struct. Process. Meas. Phenom. 22 (4) (2004) 2045–2050, https://doi.org/10.1116/1.1775199.
- [26] J. Kuzmík, S. Bychikhin, D. Pogány, C. Gaquière, E. Morvan, Current conduction and saturation mechanism in Al Ga N/ Ga N ungated structures, J. Appl. Phys. 99 (12) (2006) 123720, https://doi.org/10.1063/1.2207572.
- [27] J.M. Tirado, J.L. Sanchez-Rojas, J.I. Izpura, 2D simulation of static surface states in AlGaN/GaN HEMT and GaN MESFET devices. Semicond. Sci. Technol. 20 (8) (2005) 864, https://doi.org/10.1088/0268-1242/20/8/042.
- [28] K. Nishiguchi, T. Hashizume, Surface charging effects on current stability of AlGaN/GaN HEMTs, in: 2014 IEEE International Meeting for Future of Electron Devices, Kansai (IMFEDK), 2014, pp. 1-3, https://doi.org/10.1109/ IMFEDK 2014 6867067

6