

**CENTRO DE INVESTIGACIÓN Y DE ESTUDIOS AVANZADOS
DEL INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL**

**UNIDAD ZACATENCO
INGENIERÍA ELÉCTRICA**

SECCIÓN DE ELECTRÓNICA DEL ESTADO SOLIDO

Desarrollo de un dispositivo con materiales III-V cúbicos utilizando
templetes de GaN

T E S I S

Que presenta

JOSÉ ALFREDO SANTIS ESPINOSA

Para obtener el grado de

DOCTOR EN CIENCIAS

EN LA ESPECIALIDAD DE INGENIERIA

ELECTRICA

Director:

Dr. Víctor Manuel Sánchez Reséndiz

Ciudad de México

Julio, 2023.

Agradecimientos

Un agradecimiento especial a al Dr. Víctor Manuel Sánchez Reséndiz, asesor de esta tesis, por su apoyo incondicional en la realización de este trabajo.

A Daniel B. Ramírez por brindarme su apoyo y enseñanza en la técnica MOCVD.

Al M.C. Adolfo Tavira por su apoyo en la caracterización por difracción de rayos X

Al ing. Migue Avendaño por mediciones de AFM y espectroscopia Raman.

A la M.C. Georgina Ramírez por su apoyo en mediciones de AFM.

Al M.C. Miguel Galván por su apoyo en caracterización por efecto Hall y su apoyo en general.

A Norma I. Gonzáles por su amistad y apoyo en la evaporación de contactos metálicos para la formación de diodos Schottky.

A Edmundo Rodríguez por la fabricación de mascarillas metálicas para evaporación de contactos en los diodos.

A mis amigos que con los que conviví buenos momentos, Ángel, Isaí, José Luis, José de Jesús, Mario, Carlos y Estefanía, agradezco de su amistad y apoyo.

U agradecimiento especial al Dr. Ángel Sacramento por su apoyo en el modelado de curvas I-V y Carlos Marín por sus conocimientos compartidos para la comprensión y análisis de resultados y Dr. Víctor Balderrama por su apoyo para comprender el funcionamiento de dispositivos.

A Jessica Janeth por su paciencia y apoyo incondicional durante esta etapa.

A mi familia y especial a mi madre Virginia Espinosa por su apoyo incondicional.

A Yesenia Cervantes por su apoyo en trámites administrativos.

A Mónica Davar por su amistad y apoyo.

Al Dr. Arturo Morales y Dr. Gabriel Romero por compartir sus conocimientos en el funcionamiento de dispositivos.

A los sinodales Dr. Yuriy Kudriavtsev, Dra. Magali Estrada, Dra. María de la luz Olvera y Dr. Agustín conde, por sus observaciones que fueron de gran aporte para mejorar significativamente en la redacción del documento y mejorar el análisis de los resultados.

Al personal de la SEES en general.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por el financiamiento parcial de este trabajo mediante la beca, con numero de CVU:741944.

Al Cinvestav por todo el apoyo brindado en sus instalaciones y servicios.

ÍNDICE GENERAL

Agradecimientos	i
Índice de figuras.....	iv
Índice de tablas.....	vi
Nomenclatura	vii
Resumen.....	x
Abstract.....	xi
Capítulo I. Introducción.....	1
1.1. Motivación y justificación.....	1
1.2. Objetivo general.....	3
1.2.1. Objetivos específicos.....	3
Capítulo II. Antecedentes y fundamentos teóricos	5
2.1. Antecedentes y generalidades de Nitruro de galio (GaN).....	5
2.2. Problemática en el crecimiento de c-GaN	8
2.3. Depósito químico en fase vapor utilizando precursores metal-orgánicos (MOCVD) y cinética de crecimiento.....	17
2.4 Diodo Schottky basado en GaN.....	20
Referencias.....	28
Capítulo III. Metodología.....	35
3.1. Metodología general.....	35
3.2. Limpieza de sustrato.....	36
3.3. Sistema MOCVD	36
3.4. Sustratos	38
3.5. Nitridación y crecimiento epitaxial	39
3.6. Técnicas de caracterización utilizadas	42
3.7 Fabricación del dispositivo.....	46
Referencias.....	49
Capítulo IV. Resultados y discusión	51
4.1. Estudio de difracción de rayos-X (DRX).....	51
4.1.1. Nitridación y selección del sustrato para obtención del templete de c-GaN	51
4.1.2. Crecimiento epitaxial.....	57

4.1.3. Optimización del crecimiento epitaxial	61
4.2. Espesores de la película de GaN.....	64
4.3. Espectroscopia Raman	65
4.4. Análisis superficial mediante microscopio de fuerza atómica (AFM) y microscopio electrónico de barrido (SEM).....	68
4.5. Efecto Hall	72
4.6. Caracterización eléctrica del dispositivo	73
Referencias.....	81
Capítulo 5. Conclusiones	83
Trabajos futuros	85

ÍNDICE DE FIGURAS

Fig. 1.1	Eg del InGaN en fase cúbica y hexagonal obtenida por la relación de Vegard.	3
Fig. 2.1	Estructura cristalina del GaN tipo a) zincblende y b) wurtzite, las proyecciones muestran la secuencia de apilamiento en los planos de átomos de Ga (rojo) y N (blanco) [23].....	6
Fig. 2.2	Representación esquemática de la transición del GaN de fase hexagonal a cúbica [3].....	9
Fig. 2.3	Mecanismo de crecimiento de GaN en un sistema MOCVD [76].....	18
Fig. 2.4	Símbolo del diodo Schottky.....	20
Fig. 2.5	Diagrama de banda de energía a) de un metal y un semiconductor, y b) de una unión ideal metal-semiconductor tipo n; para $\phi_m > \phi_{sc}$	22
Fig. 2.6	Diagrama de banda de energía de una unión M-S, a) en polarización inversa y b) en polarización directa, con semiconductor tipo n y para $\phi_m > \phi_{sc}$...	23
Fig. 2.7	Esquema de transporte de portadores en la unión M-S, como función de los niveles de dopaje N_D [98].....	25
Fig. 3.1	Diagrama de flujo de la metodología general.....	35
Fig. 3.2	Esquema del proceso de limpieza de substrato de GaP.....	36
Fig. 3.3	Esquema del sistema MOCVD.....	37
Fig. 3.4	Esquema del proceso de, a) nitridación, b) templete de c-GaN, c) crecimiento epitaxial de c-GaN, d) crecimiento de capa buffer, e) recristalización y f) crecimiento epitaxial de c-GaN con capa buffer.....	40
Fig. 3.5	Esquema de dos procesos para obtención de templetes y crecimiento epitaxial de c-GaN, a) proceso sin capa buffer y b) proceso con capa buffer.....	41
Fig. 3.6	Equipo de medición I-V Keithley (laboratorio de mediciones eléctricas, SEES-Cinvestav).....	46
Fig. 3.7	Geometría de contactos óhmicos (□) y barrera Schottky (O), a) diseño de contactos y b) metalización.....	47
Fig. 3.8	Diodo Schottky horizontal a) sección transversal y b) vista superior de estructura experimental.....	48
Fig. 4.1	Difractogramas del GaP con nitridación.....	53
Fig. 4.2	Difractogramas del GaAs con nitridación y crecimiento epitaxial de GaN.....	55

Fig. 4.3	Micrografías SEM de la sección transversal de películas de c-GaN depositadas sobre substratos de a) GaP y b) GaAs.	56
Fig. 4.4	Micrografías de AFM de la superficie de película de c-GaN sobre diferente substrato, a) GaAs y b) GaP.....	56
Fig. 4.5	Difractogramas de las películas de c-GaN sin capa buffer.....	59
Fig. 4.6	Efecto de la relación V/III en las propiedades estructurales del c-GaN. ...	60
Fig. 4.7	Difractogramas de GaN con incorporación de una capa buffer antes del crecimiento epitaxial de c-GaN.....	62
Fig. 4.8	Difractogramas de las diferentes etapas, a) nitridación de substrato de GaP, b) crecimiento de capa buffer sobre nitridación, c) crecimiento epitaxial sin capa buffer sobre película nitridada y d) crecimiento epitaxial sobre capa buffer de c-GaN.	63
Fig. 4.9	Espesores de las películas de GaN en función del tiempo en los dos procesos del crecimiento epitaxial.	65
Fig. 4.10	Espectros Raman de muestras en diferentes etapas del crecimiento de c-GaN, a) nitridación, b) capa buffer, c) crecimiento epitaxial sin capa buffer y d) crecimiento epitaxial con capa buffer.	67
Fig. 4.11	Micrografías AFM de la superficie de muestras con a) nitridación, b) capa buffer y c) crecimiento epitaxial de c-GaN.....	69
Fig. 4.12	Efecto de la relación V/III de NH ₃ y TMG en la morfología superficial del c-GaN.	70
Fig. 4.13	Micrografías SEM de la sección transversal de una capa de c-GaN.	71
Fig. 4.14	Diagrama de bandas en equilibrio de la unión metal-semiconductor, con $\phi_m > \phi_{sc}$, para c-GaN tipo n.....	73
Fig. 4.15	Curva corriente-voltaje (I-V) de diodos Schottky de c-GaN y h-GaN, a temperatura ambiente; a) escala lineal y b) logarítmica.....	74
Fig. 4.16	Curva I-V en polarización directa de diodos basados en, a) c-GaN y b) h-GaN, con factores de idealidad.	78
Fig. 4.17	Circuito eléctrico de tres diodos utilizado en el modelado.....	79
Fig. 4.18	Curvas I-V experimental y modelada del diodo basado en c-GaN, en escala logarítmica.....	80

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 2.1	Propiedades del GaN en las dos fases cristalina hexagonal y cúbica.	7
Tabla 2.2	Resumen bibliográfico de trabajos sobre crecimiento de películas de c-GaN	10
Tabla 2.3	Modelos de mecanismos de transporte.	24
Tabla 3.1	Propiedades básicas del GaP y GaAs utilizados en este estudio	38
Tabla 4.1	Condiciones del proceso de nitridación de los substratos de GaP	53
Tabla 4.2	Propiedades estructurales de las capas de c-GaN depositados en substratos de GaP y GaAs.	57
Tabla 4.3	Condiciones de crecimiento epitaxial sin capa buffer (con una temperatura de nitridación de 950 °C y 15 min en todas las muestras).	59
Tabla 4.4	Parámetros estructurales de c-GaN con efecto de la relación V/III.	60
Tabla 4.5	Condiciones de crecimiento de c-GaN con capa buffer, (flujo constante de 500 sccm de NH ₃ en nitridación y con una temperatura de 900 °C y 15 min en el proceso de recristalización en todas las muestras).	61
Tabla 4.6	Parámetro de red del c-GaN comparado con los reportados en literatura, crecidos en diferentes substratos.	63
Tabla 4.7	Parámetros de las diferentes etapas del proceso, nitridación, capa buffer, crecimiento epitaxial sin capa buffer y crecimiento epitaxial con capa buffer.	64
Tabla 4.8	Rugosidad superficial de películas obtenidas en los diferentes procesos, nitridación de substrato GaP, capa buffer sobre nitridación y crecimiento epitaxial de c-GaN.	69
Tabla 4.9	Rugosidad superficial por efecto en la relación V/III de flujos de NH ₃ y TMG en el crecimiento epitaxial de c-GaN.	70
Tabla 4.10	Promedio de parámetros eléctricos de muestras de c-GaN crecidas sin y con una capa buffer.	72
Tabla 4.11	Parámetros calculados del diodo Schottky c-GaN y h-GaN a temperatura ambiente (300 K).	77

Nomenclatura

ABREVIATURA-SÍMBOLO

DEFINICIÓN

<i>AFM</i>	<i>Microscopio de fuerza atómica</i>
<i>Al</i>	<i>Aluminio</i>
<i>Au</i>	<i>Oro</i>
<i>a-GaN</i>	<i>Parámetro de red de GaN</i>
<i>c-GaN</i>	<i>Nitruro de galio cúbico</i>
<i>CL</i>	<i>Catodoluminiscencia</i>
<i>C-V</i>	<i>Capacitancia-voltaje</i>
<i>DRX</i>	<i>Difracción de rayos-X</i>
<i>GaAs</i>	<i>Arseniuro de galio</i>
<i>GaN</i>	<i>Nitruro de galio</i>
<i>GaP</i>	<i>Fosfuro de galio</i>
<i>H₂</i>	<i>Hidrogeno</i>
<i>h-GaN</i>	<i>Nitruro de galio hexagonal</i>
<i>InGaN</i>	<i>Nitruro de galio indio</i>
<i>InN</i>	<i>Nitruro de indio</i>
<i>I-V</i>	<i>Corriente-voltaje</i>
<i>MBE</i>	<i>Epitaxia de haces moleculares</i>
<i>MgO</i>	<i>Oxido de magnesio</i>
<i>MOCVD, MOVPE</i>	<i>Depósito en fase vapor utilizando precursores metal-orgánicos</i>
<i>M-S</i>	<i>Unión metal-semiconductor</i>
<i>N₂</i>	<i>Nitrógeno</i>
<i>NH₃</i>	<i>Amoniaco</i>
<i>Ni</i>	<i>Níquel</i>
<i>PL</i>	<i>Fotoluminiscencia</i>
<i>Rs</i>	<i>Resistencia en serie</i>
<i>SEM</i>	<i>Microscopio electrónico de barrido</i>

<i>Si</i>	<i>Silicio</i>
<i>SiC</i>	<i>Carburo de silicio</i>
<i>SCLC</i>	<i>Corriente limitada por carga espacial</i>
<i>sccm</i>	<i>Centímetros cúbicos estándar por minuto</i>
<i>TCLC</i>	<i>Corriente limitada por cargas atrapadas</i>
<i>TE</i>	<i>Emisión termiónica</i>
<i>TEM</i>	<i>Microscopio electrónico de transmisión</i>
<i>Ti</i>	<i>Titanio</i>
<i>TMAI</i>	<i>Trimetilaluminio</i>
<i>TMG</i>	<i>Trimetilgalio</i>
<i>T.T</i>	<i>Tratamiento térmico</i>
<i>E_g</i>	<i>Ancho de banda prohibida</i>
<i>a</i>	<i>Parámetro de red</i>
<i>n</i>	<i>Factor de idealidad</i>
<i>ρ</i>	<i>Densidad</i>
<i>u</i>	<i>Velocidad del vector</i>
<i>p</i>	<i>Presión dinámica</i>
<i>h</i>	<i>Entalpia</i>
<i>T</i>	<i>Temperatura</i>
<i>h_i</i>	<i>Entalpia de especies</i>
<i>Y_i</i>	<i>Fracción de masa molar</i>
<i>N_s</i>	<i>Número de especies</i>
<i>q_R</i>	<i>Flujo de calor por radiación</i>
<i>ω_i</i>	<i>Velocidad de producción molar de especies</i>
<i>M_i</i>	<i>Peso molar de especies</i>
<i>GR</i>	<i>Velocidad de crecimiento</i>
<i>μ</i>	<i>Viscosidad dinámica</i>
<i>C_p</i>	<i>Capacidad calorífica</i>
<i>k</i>	<i>Conductividad térmica</i>
<i>φ_m</i>	<i>Función de trabajo del metal</i>
<i>χ</i>	<i>Afinidad electrónica</i>

E_{Fm}	<i>Energía de fermi del metal</i>
E_0	<i>Nivel de vacío local</i>
ϕ_{sc}	<i>Función de trabajo del semiconductor</i>
E_{Fsc}	<i>Energía de fermi del semiconductor</i>
ϕ_{B0}	<i>Altura de barrera</i>
V_{bi}	<i>Potencial de barrera</i>
W	<i>Región de carga espacial</i>
E	<i>Campo eléctrico</i>
ND	<i>Concentración de portadores</i>
ϵ_{sc}	<i>Permitividad del semiconductor</i>
J_0	<i>Corriente de saturación</i>
A^*	<i>Constante efectiva de Richardson</i>
m^*	<i>Masa efectiva de electrones</i>
V/III	<i>Proporción de flujos de precursores de amoniacó y galio</i>
$III-V$	<i>Compuesto semiconductor formado de materiales del grupo III y del grupo V de la tabla periódica</i>

Resumen

En este trabajo de investigación, presentamos los resultados de la obtención de templates de nitruro de galio en fase cubica (c-GaN) mediante un proceso de nitrificación de substratos de fosfuro de galio (GaP) y arseniuro de galio (GaAs). El crecimiento epitaxial de películas de c-GaN se realizó sobre los templates de c-GaN obtenidos. Para realizar este proceso se utilizó el método de depósito en fase vapor utilizando precursor metal-orgánicos (MOCVD). Se optimizaron los parámetros del proceso de nitrificación para reducir o inhibir la formación de la fase hexagonal del GaN. Se analizaron dos procesos de crecimiento epitaxial: en el primero pasar al crecimiento epitaxial del c-GaN inmediatamente después de la nitrificación. El segundo, después de la nitrificación, crecer una capa buffer de c-GaN para después crecer epitaxialmente el c-GaN. Se realizaron variaciones de los tiempos, relación V-III (nomenclatura que hace referencia a la proporción de los flujos de los precursores de nitrógeno y galio) y la presión de crecimiento. Se estudiaron las muestras obtenidas a través de caracterización estructural, óptica, morfológica y eléctrica. La incorporación de la capa buffer antes del crecimiento epitaxial de c-GaN permitió obtener una mejor calidad cristalina y una superficie de c-GaN libre de esfuerzos y con menor densidad de defectos estructurales, como muestran las mediciones por DRX. Con las mediciones de espectroscopia Raman, se confirmó lo obtenido en el análisis de DRX. Las muestras revelaron la presencia de la fase hexagonal del GaN, pero esta fase solo está presente en la interfaz entre el substrato y el template de c-GaN. Al incluir la capa buffer, se produce una superficie menos rugosa, con buena nucleación y un modo de crecimiento del tipo Stranski-Krastanov. En las micrografías SEM podemos apreciar que se obtienen capas compactas en ambos procesos. Se realizaron mediciones eléctricas de efecto Hall, donde se obtuvieron concentraciones de electrones del orden de $1.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ en las muestras obtenidas en ambos procesos. Finalmente, el material de c-GaN fue evaluado mediante la fabricación de un dispositivo Schottky con geometría horizontal, con el objetivo de analizar sus características eléctricas de corriente-voltaje. El rendimiento fue comparado con el de un diodo fabricado con películas de h-GaN. Se utilizaron contactos metálicos de Ni-Au para la barrera Schottky, y Ti/Al/Ti/Au, para el contacto óhmico. En ambos diodos fabricados se observó un buen comportamiento rectificante, extrayéndose parámetros como factor de idealidad, resistencia en serie, altura de barrera. Los mejores resultados se obtuvieron en el diodo basado en c-GaN. Adicionalmente se logró el ajuste de la curva I-V de un diodo basado en c-GaN, obtenido experimentalmente y uno modelado, considerando para el transporte de portadores la teoría de emisión termiónica (TE). Se determinó que los mecanismos de transporte en ambos diodos son similares, presentando una combinación de emisión-recombinación, efecto túnel y saltos.

Abstract

In this research work, we present the results of obtaining gallium nitride templates in cubic phase (c-GaN) by means of a nitridation process of gallium phosphide (GaP) and gallium arsenide (GaAs) substrates. Epitaxial growth of c-GaN films was performed on the c-GaN templates obtained. To carry out this process, the vapor phase deposition method using metal-organic precursor (MOCVD) was used. The nitridation process parameters were optimized to reduce or inhibit the formation of the hexagonal phase of GaN. Two epitaxial growth processes were analyzed: in the first one, going to the epitaxial growth of c-GaN immediately after nitridation. The second, after nitridation, grow a buffer layer of c-GaN and then epitaxially grow c-GaN. Variations of the times, V-III ratio (nomenclature that refers to the ratio of the flows of the nitrogen and gallium precursors) and the growth pressure were made. The samples obtained through structural, optical, morphological, and electrical characterization were studied. The incorporation of the buffer layer before the epitaxial growth of c-GaN allowed to obtain a better crystalline quality and a stress-free c-GaN surface with less density of structural defects, as shown by XRD measurements. With Raman spectroscopy measurements, what was obtained in the XRD analysis was confirmed. The samples showed the presence of the hexagonal phase of GaN, but this phase is only present at the interface between the substrate and the c-GaN template. By including the buffer layer, a less rough surface is produced, with good nucleation and a Stranski-Krastanov type of growth mode. In the SEM micrographs we can see that compact layers are obtained in both processes. Hall effect electrical measurements were performed, where electron concentrations of the order of $1.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ were obtained in the samples obtained in both processes. Finally, the c-GaN material was evaluated by fabricating a Schottky device with horizontal geometry, to analyze its current-voltage electrical characteristics. The performance was compared with that of a diode made from h-GaN films. Ni-Au metallic contacts were used for the Schottky barrier, and Ti/Al/Ti/Au, for the ohmic contact. In both fabricated diodes, good rectifying behaviour was observed, extracting parameters such as ideality factor, series resistance, and barrier height. The best results were obtained in the diode based on c-GaN. Moreover, the fit of the I-V curve of a c-GaN-based diode, obtained experimentally and a modeled one, was achieved, considering the thermionic emission (TE) theory for carrier transport. It was determined that the transport mechanisms in both diodes are similar, exhibiting a combination of emission-recombination, tunnelling and hopping.

Capítulo I. Introducción

1.1. Motivación y justificación

En los últimos años, la investigación del GaN se ha centrado en la fase hexagonal, ya que es la fase estable del material [1-3]. Sin embargo, el GaN en fase cúbica (c-GaN) presenta otras características atractivas respecto a la fase hexagonal como: mayor movilidad electrónica, dada la mayor simetría cristalina en fase cúbica, ausencia de polarización espontánea y piezoeléctrica [4-6]; propiedades que son atractivas para el desarrollo de dispositivos optoelectrónicos. Por estas propiedades que presenta el c-GaN, la comunidad científica ha desviado su atención en el crecimiento del c-GaN. Una de las dificultades que se tienen para el crecimiento epitaxial de la fase cúbica es que es metaestable, lo que la hace más difícil de sintetizar, además, que no se cuenta con sustratos de GaN cúbicos nativos en los cuales se pueda realizar crecimientos que garanticen una buena calidad cristalina. Al respecto, C. Bayram y R. Liu [3] señala que de los más de 10,000 reportes sobre crecimiento de GaN, solo el 2 % corresponde a trabajos relacionados con c-GaN, por lo que esta área de investigación es de gran relevancia. Por lo que contribuir al crecimiento de c-GaN con buena calidad cristalina es de gran importancia para mejorar la eficiencia de los dispositivos.

En este trabajo se ha planteado, en primer lugar, la obtención de templetes (plantillas) de c-GaN, mediante la nitrificación de un sustrato de GaP con estructura cúbica (material termodinámicamente estable, pero con un ancho de banda (E_g) indirecta), debido a la carencia de sustratos comerciales de c-GaN. Así mismo, realizar crecimiento epitaxial de c-GaN sobre los templetes de c-GaN obtenidos por nitrificación, todo este proceso utilizando el método de depósito químico en fase vapor utilizando compuestos metal-orgánicos (MOCVD).

En este trabajo se tomará como punto de partida los resultados obtenidos por J.S. Arias-Cerón et al. [7], quienes realizaron crecimientos de películas de c-GaN, utilizando sustratos de GaP, obteniéndose películas de c-GaN con buena calidad cristalina (ver resumen de resultados en tabla 2.2). De lo anterior, en este trabajo replicaremos sus

experimentos y optimizaremos las condiciones de crecimiento que han reportado para mejorar la calidad cristalina del c-GaN. Por otro lado, en la literatura se han reportado pocos trabajos sobre diodos Schottky y dispositivos que utilicen c-GaN [8-10]. Las propiedades del c-GaN también pueden aprovecharse para la formación de compuestos ternarios o cuaternarios para aplicaciones a diferentes dispositivos. Por ejemplo, en compuestos ternarios, como el InGaN donde podemos variar el ancho de banda prohibida (E_g), cambiando la composición de indio (In) y galio (Ga) [3,11], (ya que el c-GaN presenta un E_g de 0.2 eV menor respecto al h-GaN). Esto puede entenderse mejor mediante la relación de Vegard [12],

$$[E_g(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = x \cdot E_g^{\text{InN}} + (1 - x) \cdot E_g^{\text{GaN}} - bx \cdot (1 - x)] \quad (1)$$

Donde x es la fracción molar de In, b es un parámetro de inclinación ($b=1.43$), E_g^{InN} es el ancho de banda prohibida del InN y E_g^{GaN} el ancho de banda prohibida del GaN. A partir de esta expresión se obtiene el E_g del InGaN a diferentes composiciones de In y Ga, en las fases cristalinas cúbica y hexagonal. En el ejemplo de la **fig. 1.1** podemos ver que, para obtener un E_g de 2.9 eV del ternario; utilizando el c-GaN podría obtenerse con un ~18 % de composición de In, en comparación con h-GaN se necesitaría de ~27% de composición de In. Experimentalmente, a concentraciones de In altas se presentan varios problemas como, por ejemplo, separación de fase (GaN e InN), clousterización en la capa activa, inyección de huecos ineficientes, etc. [13,14]. Por lo que la fase cúbica del GaN es adecuada para la aleación InGaN [15].

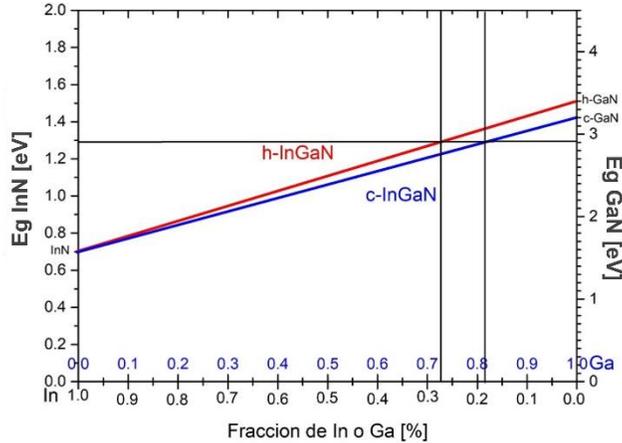


Fig. 1.1 *Eg del InGaN en fase cúbica y hexagonal obtenida por la relación de Vegard.*

A continuación, se presentan los objetivos planteados para llevar a cabo el desarrollo de este trabajo de investigación de crecimiento de c-GaN sobre sustratos de GaP y GaAs, además, la fabricación de un dispositivo.

1.2. Objetivo general

Obtener películas de c-GaN por el método de depósito químico en fase vapor utilizando precursores metal-orgánicos (MOCVD) y fabricar una unión metal-semiconductor basado en c-GaN.

1.2.1. Objetivos específicos

Crecimiento de películas

- Obtener templates de c-GaN utilizando sustratos cúbicos de GaAs y GaP
- Crecer películas delgadas de GaN mediante la técnica de MOCVD sobre templates de GaN.

Caracterización de películas

- Realizar caracterización estructural por DRX
- Realizar caracterización morfológica por SEM y AFM

- Realizar caracterización mediante espectroscopia Raman
- Realizar caracterización eléctrica por efecto Hall

Fabricación del dispositivo

- Evaporación de contactos óhmicos y el metal para formar la barrera Schottky
- Caracterización eléctrica (I-V) de la unión metal-semiconductor

Capítulo II. Antecedentes y fundamentos teóricos

En este capítulo se presenta una descripción de las características y antecedentes del GaN, además, una revisión bibliográfica de trabajos relacionados con la problemática del crecimiento del c-GaN, los substratos típicamente utilizados, una descripción de la técnica de crecimiento que se utilizara en este trabajo y finalmente los antecedentes de diodos Schottky basados en c-GaN.

2.1. Antecedentes y generalidades de Nitruro de galio (GaN)

El nitruro de galio (GaN) es un material semiconductor binario compuesto de galio del grupo III y nitrógeno del grupo V de la tabla periódica (III-V). Fue sintetizado por primera vez en 1969 por Naruska, et al. [16] sobre substratos de zafiro, determinando algunas propiedades de la fase hexagonal. S. Nakamura, et al. [17] sintetizó GaN por el método MOCVD. Desde entonces se han realizado múltiples aportes en el crecimiento [18-20], así como para diversas aplicaciones. Además, el GaN presenta un ancho de banda (E_g) amplio directo (3.2 eV para el c-GaN [21,22] y 3.4 eV para h-GaN [16]) que ha sido de gran interés para diferentes aplicaciones, desde dispositivos optoelectrónicos [23,24], diodos emisores de luz, diodos láser [25,26], transistores de alta movilidad de electrones (HEMTs) que trabajan en alta frecuencias [27], y dispositivos de potencia basados en GaN. Los últimos se fabrican en gran escala y prometen mejores características para el futuro [28-30]. En los últimos años se han aplicado en celdas solares [15,31], (resaltando que hasta la fecha los dispositivos que se han comercializado basados en GaN son en la fase hexagonal). Sin embargo, aunque se han logrado grandes avances en el crecimiento de películas con buena calidad cristalina, quedan algunos problemas a superar para obtener películas de excelente calidad cristalina, mejorar con ello sus propiedades en general, y obtener un mejor desempeño en la eficiencia de los dispositivos. Uno de los mayores problemas que se

tienen en el crecimiento del GaN es la dificultad de impurificar para obtener una conductividad tipo-p [32], este problema ha limitado ciertas aplicaciones, en la fase cúbica. Este problema podría subsanarse, puesto que la fase cúbica es más fácil de impurificar [33,34].

El GaN puede presentar una estructura cristalina hexagonal (wurtzita) estable o una fase cúbica (zincblende) metaestable [35]. En la **fig. 2.1** se ilustran las representaciones de las dos estructuras cristalinas, donde los enlaces iónicos en ambas estructuras se presentan tetraédricamente. Martin Frentrup et al. [23] describe que las estructuras y las distancias inter-iónicas dentro de los planos compactos, son aproximadamente los mismos. Además, una diferencia en las dos estructuras es el apilamiento de los átomos en los planos, presentando para la estructura wurtzita un arreglo del tipo AaBbAaBb mientras que para la zincblende es AaBbCcAaBbCc, como se observa en la **fig. 2.1**. En ambas estructuras se puede ver que, el enlace tetraédrico local es el mismo y solo difiere la disposición atómica del tercer vecino más cercano.

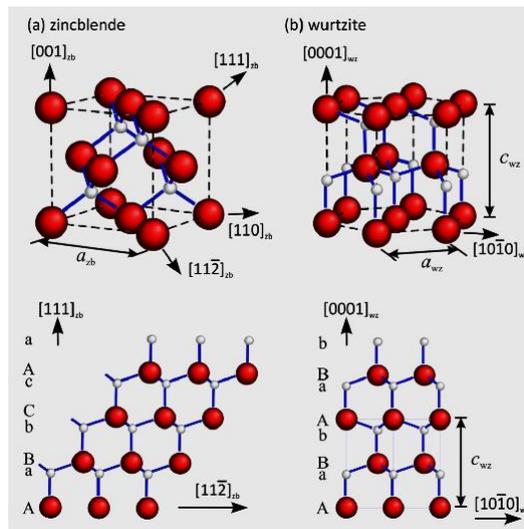


Fig. 2.1 Estructura cristalina del GaN tipo a) zincblende y b) wurtzite, las proyecciones muestran la secuencia de apilamiento en los planos de átomos de Ga (rojo) y N (blanco) [23].

En la **tabla 2.1** se presentan algunas propiedades del c-GaN y h-GaN. Podemos apreciar que aún restan por obtener experimentalmente algunos parámetros en la fase

c-GaN. Mientras tanto se ha utilizado parámetros de la fase h-GaN para extrapolar algunos parámetros del c-GaN [37, 42, 51].

Tabla 2.1 *Propiedades del GaN en las dos fases cristalina hexagonal y cúbica.*

Parámetro	h-GaN-ref.	c-GaN-ref.
Estructura cristalina	Hexagonal	Cúbica
Grupo de simetría	$C_{6v}^4-P6_3mc$ [36]	T_d^2-F43m [36]
Ancho de banda prohibida (eV)	3.4 [16]	3.2 [22]
Movilidad electrones ($\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$)	~ 1000 [37]	≤ 1200 [37]
Movilidad huecos ($\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$)	≤ 200 [37]	≤ 350 [37]
Parámetro de red (nm)	a:0.318, c:0.518 [38]	a:0.451 [39,40]
Afinidad electrónica (eV)	4.1 [37]	4.1 [37]
Densidad de estados N_c (cm^{-3})	$2.3\text{E}18$ [41]	$1.2\text{E}18$ [42]
Densidad de estados N_v (cm^{-3})	$4.6\text{E}19$ [41]	$4.1\text{E}19$ [42]
Masa efectiva de electrones	$0.22m_0$ [43]	$0.15m_0$ [45]
Masa efectiva de huecos (pesados)	$1.27m_0$ [44]	$0.8m_0$ [44]
Masa efectiva de huecos (ligeros)		$0.18m_0$ [44]
Índice de refracción en infrarrojo	2.3 [37, 42]	
Longitud de difusión de electrones (μm)	70-525 [46,47]	510 [48,49]*
Longitud de difusión de huecos (μm)	70-93 [47]	305 [48,49]*
Coeficiente de expansión térmica lineal	$\Delta a/a - 5.59\text{E}-6 \text{K}^{-1}$ [51] $\Delta c/c - 3.17\text{E}-6 \text{K}^{-1}$ [51]	

*longitud de difusión teórica a partir de la expresión: $LD = \sqrt{D\tau} \rightarrow$

$$D = \mu \frac{k_B}{T} [48,49,50]$$

2.2. Problemática en el crecimiento de c-GaN

El crecimiento de películas de GaN, así como la fabricación de dispositivos, con estos se ha centrado en la fase hexagonal, debido a que es la fase estable. No obstante, en los últimos años la fase cúbica ha atraído la atención debido a las propiedades que esta fase presenta, como se mencionó en la sección de motivación, y que pueden beneficiar la fabricación de dispositivos más eficientes.

En condiciones de crecimiento específicas es posible obtener el c-GaN [7], pero no se ha podido eliminar del todo la presencia del h-GaN [23]. El interés actual por obtener películas de c-GaN de buena calidad, es que esta fase tiene algunas ventajas sobre la fase hexagonal, como se ha mencionado en el capítulo 1, se han llevado a cabo varios trabajos para obtener películas delgadas de c-GaN con buenas propiedades cristalinas [21, 51,52].

Varios grupos de investigación en todo el mundo han reportado varios informes sobre el crecimiento de c-GaN, además de diferentes estudios teóricos que propicien el crecimiento del c-GaN con buenas características cristalinas; por ejemplo, V. A. Elyukhin, et al. [53] desarrollaron un modelo termodinámico para el crecimiento de GaN mediante la técnica MOCVD a baja temperatura. El modelo desarrollado está en función de las presiones, temperaturas y la eficiencia en la descomposición del amoníaco (NH_3), describen las afinidades termodinámicas en cada etapa considerando la fisisorción o quimisorción de los átomos de Ga, así como la fisisorción de las moléculas de NH_3 , para determinar las afinidades de reacción en el plano de crecimiento. En este, se extrapoló la temperatura de descomposición de las moléculas de NH_3 en el intervalo de $823 < T (K) < 923$, lo cual ha sido validado experimentalmente para la temperatura de crecimiento del GaN [54]. Además, en este mismo trabajo señalan que para la fase cúbica del GaN es necesario que la afinidad de reacción debe ser mayor a la diferencia entre las energías libres de las dos fases. Se espera que la diferencia entre la energía interna y las energías libres sea mayor a las estimadas entre 1.83 a 3.27 kJ/mol entre el c-GaN y h-GaN [53,55]. En consecuencia, la afinidad de reacción es aproximadamente 1.5 a 3 veces mayor que la diferencia entre

las energías libres entre las dos fases cristalinas. El exceso de energía libre explica la probabilidad termodinámica del crecimiento del c-GaN en condiciones similares al h-GaN [53]. Por otro parte, C. Bayram, et al. [56,57] proponen un método para el crecimiento de c-GaN, sobre sustratos de silicio (100). A través de un proceso complejo de oxidación, litografía y decapado con ácidos, obtiene ranuras en forma de V, donde descubre el plano (111) del silicio que es equivalente al plano (0001) del h-GaN. El proceso de crecimiento permite la unión de las dos fases cristalinas del GaN con un ángulo cristalográfico de 110° entre los enlaces de Ga-N, lo que produce la unión tetraédrica de la fase hexagonal, posteriormente se forma la fase cúbica sobre la capa de h-GaN, como se muestra en el **fig. 2.2**. En el procedimiento reportado se puede obtener el c-GaN, aunque, es un método complejo en la preparación del sustrato para llevar a cabo el crecimiento. Otros autores han optado por utilizar sustratos cúbicos, donde realizan un proceso de nitridación a los sustratos para obtener templates de GaN cúbicos y poder realizar el crecimiento epitaxial del c-GaN [7].

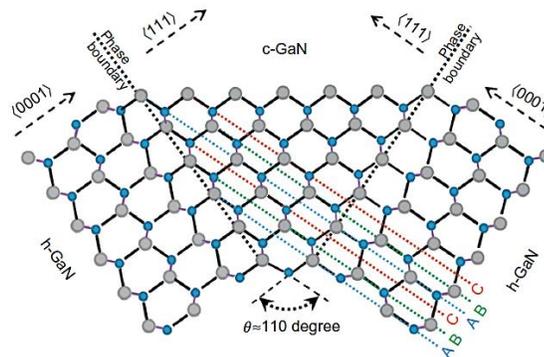


Fig. 2.2 Representación esquemática de la transición del GaN de fase hexagonal a cúbica [3].

En años recientes, diversas investigaciones experimentales han reportado el crecimiento de películas de c-GaN de buena calidad cristalina. Como se ha mencionado, existen varios inconvenientes en el crecimiento del c-GaN de buena calidad cristalina, uno de los más importantes a resolver es evitar los defectos estructurales que se generan durante el proceso de crecimiento debido a los desajustes de red por los sustratos utilizados. Por ejemplo, Martin Frentrup et al. [23] han reportado un estudio de los parámetros estructurales, a través de caracterizaciones de

DRX, obteniendo el parámetro de red, la pureza relativa entre la fase cúbica y hexagonal del GaN, además, esfuerzos causados por el proceso de crecimiento, ha mostrado que los parámetros obtenidos en c-GaN mediante MOVPE son comparables con resultados de muestras obtenidas por la técnica de crecimiento más sofisticada MBE.

En la **tabla 2.2** se muestran algunos resultados reportados en los trabajos que han aportado avances en la optimización del crecimiento del c-GaN. Se presentan las técnicas de crecimiento utilizadas, así como el problema que abordan, las técnicas de caracterización utilizadas y resultados obtenidos.

Tabla 2.2 *Resumen bibliográfico de trabajos sobre crecimiento de películas de c-GaN*

Método de crecimiento	Análisis	Técnicas de caracterización	Resultados reportados	Ref.
MOVPE	Mecanismos de crecimiento y propiedades estructurales	HR-XRD y TEM	Densidad de dislocaciones 10^7 - 10^8 cm ⁻² , temperatura de crecimiento optimizado en 960 °C para evitar la inclusión de la fase hexagonal.	[58]
MOVPE	Comparación en crecimiento en substratos de SiC y GaAs, propiedades ópticas y estructurales	XRD, PL y SEM	Incorporación de una capa buffer a baja temperatura, mejorado la calidad cristalina del crecimiento epitaxial, efecto de la relación V-III en las propiedades ópticas y estructurales.	[59]

MOCVD	Efecto en el crecimiento del c-GaN en substratos de GaAs en diferentes planos	XRD, AFM, SEM, TEM y Raman	Optimización de temperaturas de crecimiento de capa buffer, efecto en las características estructurales como esfuerzo de tensión en las capas, parámetro de red. Efecto en la morfología superficial y desplazamiento Raman del modo vibracional del c-GaN.	[60]
MBE	Efecto de temperaturas bajas de crecimiento en las propiedades estructurales y ópticas del c-GaN	RHEED, XRD, PL y AFM.	Optimización en la temperatura de crecimiento para evitar la inclusión de la fase hexagonal, crecimiento directo sobre el sustrato sin proceso de nitrificación o capa buffer. Efecto en la morfología y emisión óptica en 3.21 eV característico del c-GaN	[21]
MOVPE	Estudio de la mezcla de fases cúbico-hexagonal del GaN en substratos de GaAs y su dependencia con la temperatura de crecimiento	HR-XRD, SEM, AFM y CL	Superficie con crecimiento en granos 3D, como efecto de la temperatura, la mezcla de fases se confirma en la superficie de las películas, y las mediciones de CL están de acuerdo que la inclusión de las dos fases se encuentra sobre toda la película de GaN.	[61]
MOCVD	Propiedades luminiscentes de películas crecidas sobre 3C-SiC/Si (001)	PL	Se obtuvieron picos de emisión de las dos fases cristalinas del GaN, de 3.27 eV para el cúbico y 3.4 eV para hexagonal	[62]

MOVPE	Efecto de la temperatura y relación V/III en la morfología superficial de películas de c-GaN	XRD, AFM y TEM	Pureza relativa de fase cubica (001) de ~98%, la morfología de la superficie está determinada por la temperatura de crecimiento y la relación V/III. Temperatura de crecimiento de 880 °C y relación V/III de 38 puede evitar la inclusión de la fase hexagonal.	[63]
MOVPE	Estudio de la distribución y densidad de fallas de apilamiento en películas de c-GaN crecidas sobre 3C-SiC/Si con una desviación de 4 ° a [001]	XRD y TEM	Mediante modelo teórico y experimentalmente se observa el efecto en el crecimiento del c-GaN que causa la desviación de corte de los substratos utilizados, en este caso las fallas de apilamiento en direcciones extrañas se presentan, se logra disminuir creciendo películas gruesas mayores a 380 nm.	[64]
MBE	Estudio de la dependencia de la temperatura de crecimiento de c-GaN sobre substratos de MgO en orientaciones de corte de 2° y 3.5° en dirección [110]	AFM y RHEED	Determinaron el modelo de crecimiento Stranski-Krastanov en las muestras de c-GaN, la desviación de corte y la temperatura de crecimiento tiene efecto en la morfología superficial. Además, la inclusión de la fase hexagonal se visualiza con las desviaciones de 3.5°.	[65]

MOVPE	Caracterización de películas de c-GaN crecidas sobre GaAs. Análisis estructural, morfológico y óptico	SEM, AFM, XRD y CL	Efecto de la temperatura en las propiedades ópticas, morfológicas y estructural, temperatura óptima donde se minimiza la inclusión de la fase hexagonal de 850 °C, se corrobora con mediciones de CL, donde obtienen la emisión en 3.23 eV para el c-GaN y 3.39 eV para el h-GaN a 900 °C	[66]
MBE	Estudio de la inclusión de la fase hexagonal en películas c-GaN en substratos de GaAs, en función de los espesores de crecimiento de 5 a 50 μm .	XRD, PL, TEM y Raman	Se obtuvieron espesores de hasta 50 μm , donde se analizó la inclusión de la fase hexagonal, obteniendo un espesor crítico de $\sim 10 \mu m$ donde se minimiza la inclusión de la fase hexagonal. Se obtuvo la densidad de dislocación entre 8×10^8 y $3 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$. La fase cúbica es mayor a espesores de 5 μm , aumentando la inclusión de la fase hexagonal con espesores de 50 μm , como se confirma por mediciones en Raman.	[67]

MOCVD	Efecto de la temperatura, espesores de templetes de 3C-SiC y relación V/III en crecimiento de películas de c-GaN	AFM, SEM y XRD	Se determinaron los espesores óptimos de los templetes de 3C-SiC ($1.5 \mu m$) para el crecimiento de c-GaN libre de la inclusión de la fase hexagonal; así como la temperatura y relación V/III de crecimiento con valores de $950 \text{ }^\circ\text{C}$ y 1500 respectivamente. Con dichos valores se obtienen películas de c-GaN de hasta 91% .	[68]
MOVPE	Estudio de propiedades morfológicas, estructurales, ópticas y eléctricas de películas de c-GaN, crecidas sobre substratos de GaP.	AFM, XRD, SEM y PL	Efecto de la temperatura en la rugosidad de las capas, se optimizó el espesor y la temperatura de crecimiento de la capa buffer, se obtuvo el pico de emisión del c-GaN en 3.3 eV , así como la movilidad y concentración de portadores de $15 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ y $6.7 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ respectivamente. Además, se observaron en la interfaz del substrato y el GaN fallas de apilamiento en el plano (111) causados por la inclusión de la fase hexagonal.	[69]

MOCVD	Difusión de cristales de substrato de GaAs, durante crecimiento de c-GaN.	XRD, SEM, TEM y PL	La difusión de átomos de As se propaga hacia la superficie del GaN durante el crecimiento a temperaturas de 900 °C, se confirma por las emisiones de PL. Se observa emisiones atribuidas al substrato, pero se encuentran en la superficie de la película de GaN crecida, y estos resultados son respaldados por mediciones de XRD y TEM, además de impurezas de hidrógeno (H ₂), lo cual causa defectos extendidos en toda la red. Se evita la inclusión del As en la superficie cuando la temperatura de crecimiento alcanza los 1000 °C.	[70]
MOCVD	Crecimiento de c-GaN sobre templetes de GaN cúbicos a partir de nitridación de substratos de GaP	XRD, SEM, TEM, Raman	Obtención de templetes de c-GaN sobre un substrato de GaP. Se obtuvieron películas epitaxiales de c-GaN con buenas características estructurales, con poco esfuerzo, pequeña inclusión de la fase hexagonal (por debajo de la interfaz entre el substrato y el templete de GaN).	[7]

Como se muestra en la **tabla 2.2** los estudios realizados en los diferentes trabajos reportados sobre crecimiento de c-GaN, no se han podido evitar la inclusión de la fase hexagonal, a pesar de las variaciones en proporción o relación de los flujos de los precursores de galio y nitrógeno (V/III), temperaturas, espesores, etc. A pesar de todo

el trabajo de investigación realizado hasta la fecha aún quedan retos a superar para obtener condiciones de crecimiento óptimas que garanticen películas de c-GaN de buena calidad cristalina.

Otra cuestión relevante es el método de crecimiento utilizado en materiales del grupo III-V. Típicamente se han utilizado dos técnicas, principalmente, depósito de vapores químicos utilizando precursores metal-orgánicos (MOCVD) [71,72] y epitaxia de haces moleculares (MBE) [71,73]. Los dos métodos de crecimiento han dado lugar a la obtención de películas de buena calidad cristalina, pero, existen ventajas y desventajas entre ellos; aquí solo abordaremos las principales diferencias.

Por un lado, tenemos al MBE, que es una técnica de crecimiento muy controlada, donde el proceso de crecimiento de películas se realiza con gran eficiencia; pero en este sistema se requiere de ultra alto vacío [74], sublimando los precursores ultrapuros, ya sea mediante calentamiento o por haz de electrones. Los haces moleculares generados se dirigen al sustrato donde se realiza el crecimiento; los precursores se incorporan a la red cristalina, obteniendo un crecimiento de capas por capas o crecimiento 2D. Las temperaturas de crecimiento se encuentran alrededor de los 800 °C [75]. Uno de los inconvenientes de esta técnica es la baja velocidad de crecimiento (alrededor de 50-400 nm/hr.) [74]; pero una de las mayores ventajas es que permite un control preciso del crecimiento de las películas.

Por otro lado, el MOCVD es una técnica de crecimiento más versátil comparada con la técnica de MBE [71], en la que el transporte del vapor de los precursores requiere de una fuente de gas de arrastre, dentro del reactor los precursores presentan un flujo laminar sobre el sustrato calentado, donde se lleva a cabo las reacciones para formar la película; los precursores son adsorbidos físicamente sobre el sustrato formando enlaces en la red cristalina. Este sistema no requiere de ultra alto vacío y la velocidad de crecimiento es mayor ($> 1 \mu\text{m/hr}$ al del sistema MBE) [74]. Algunos problemas que surgen en estos reactores son las altas temperaturas de crecimiento, las reacciones de los precursores fuera de la zona de crecimiento, la falta de uniformidad de los flujos y los espesores, etc. [71], los cuales se minimizan mediante algunos componentes del

sistema. Se describe con más detalle este sistema y sus componentes, en la siguiente sección.

2.3. Depósito químico en fase vapor utilizando precursores metal-orgánicos (MOCVD) y cinética de crecimiento

El sistema MOCVD ha tenido grandes avances en la optimización del proceso de crecimiento en los últimos años, anteriormente era el método preferido para el crecimiento de materiales III-V [76,77], pero actualmente no se limita a éstos [78]. El MOCVD se ha convertido en una técnica que ha ganado terreno en la industria, teniendo una capacidad de control de los parámetros de crecimiento que han superado los inconvenientes que en el pasado se tenían. Se ha obtenido buena uniformidad en las películas, alta velocidad de crecimiento, buena eficiencia en el dopaje de materiales. Actualmente, este método de crecimiento compite en calidad de películas con una técnica tan sofisticada como lo es el MBE. Se ha convertido en el método preferido para el desarrollo de estructuras para dispositivos optoelectrónicos, principalmente basados en materiales como GaN y GaAs [76]. El proceso en MOCVD consiste en introducir en un reactor compuestos metal-orgánicos en fase de vapor que contienen los elementos químicos necesarios, que al reaccionar formarán la película deseada según sean las condiciones en el experimento. En la **fig. 2.3** se esquematiza el proceso con los pasos necesarios para llevar a cabo el crecimiento de películas de GaN [76]. En este sistema, un gas de arrastre de los precursores es necesario tales como trimetilgalio (TMG), trimetilaluminio (TMAI), etc., y generalmente se utiliza hidrógeno (H_2) o nitrógeno (N_2) de alta pureza [79]. Por otro lado, el NH_3 se introduce en la cámara, y por medio de temperatura se descomponen, obteniendo nitrógeno atómico altamente reactivo, difundándose hacia la superficie del sustrato donde se lleva a cabo las reacciones para formar una película de GaN, como se observa en la fig. 2.3 La velocidad de crecimiento estará limitada a la cantidad de suministro de precursores y al tiempo de crecimiento [76]. En lo que concierne a la capa frontera (es una capa delgada formada de fluidos de los gases presentes dentro del reactor que se

forma cerca de la superficie plana del susceptor y el sustrato) [80], estará controlada por el flujo de gas y la presión de crecimiento en el reactor.

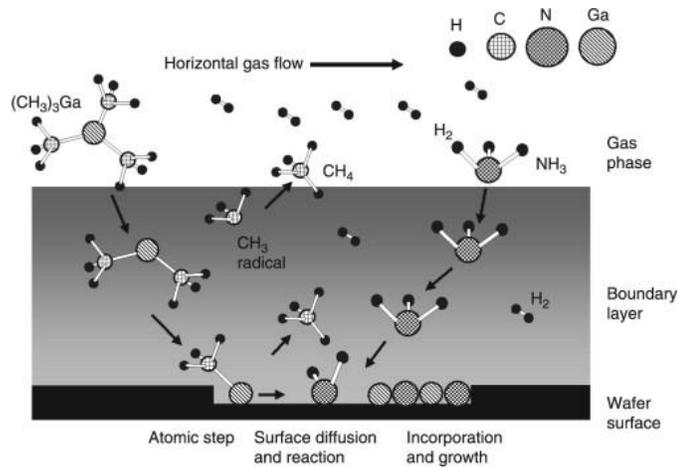
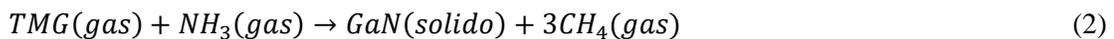


Fig. 2.3 *Mecanismo de crecimiento de GaN en un sistema MOCVD [76].*

La velocidad de crecimiento también estará limitada por la velocidad de reacción del sustrato con los precursores, ésta es una de las consideraciones importantes cuando se realiza el crecimiento en hetero-epitaxia. Este proceso se vuelve complejo debido a los procesos de absorción, reacción en la superficie, y desorción de subproductos del sustrato, además, la difusión superficial de las especies, etc. Todos estos procesos son difíciles de analizar por ello se ha utilizado una ecuación general de todo el proceso. En el caso del GaN, la reacción que se lleva a cabo para la formación de la película con los precursores TMG y NH₃, como fuente de galio y nitrógeno, respectivamente, es [81]:



En la reacción partimos de fuentes en fase gaseosa, obteniendo un material sólido en forma de película, además, residuos y restos de productos de la reacción. La velocidad de crecimiento de una capa de GaN, se denomina aquí como R_G , tendrá un comportamiento exponencial inversamente con la temperatura y estará dada por:

$$R_G = \nu M A_0 \prod_{j \text{ reactivos}} C_j \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) R_G = \nu M A_0 C_j \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (3)$$

Donde ν es el coeficiente estequiométrico del GaN, M masa molecular del GaN, C_j a concentración molar de las especies j , R la constante de los gases ideales, A_0 es un factor preexponencial que se puede entender como la frecuencia entre las moléculas de los precursores, E_a la energía de activación y T la temperatura de crecimiento. Estos dos últimos se conocen como parámetros de Arrhenius [82].

El crecimiento de GaN por MOCVD es complejo, durante el proceso de crecimiento donde se llevan a cabo diferentes mecanismos como transferencia de calor, transferencia de masa, reacciones químicas y flujo de fluidos. Las especies se consideran como gases ideales; donde las ecuaciones que gobiernan el proceso son descritas por las ecuaciones de continuidad de conservación de masa, momento, especies y energía [81,83,84]

$$\nabla \cdot \rho v = 0 \quad (4)$$

$$\nabla \cdot (\rho v v) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau + \rho g \quad (5)$$

$$\nabla \cdot (\rho v m_i) = \nabla \cdot J_{i,j} \quad (6)$$

$$\nabla \cdot (\rho v H) + \nabla \cdot q + p \nabla v + \nabla H J + \tau \cdot \nabla v = -S_h \quad (7)$$

Definimos los términos donde ρ es la densidad del gas, v su velocidad, p la presión estática, τ es el vector convencional de estrés, H la entalpia por unidad de masa, q la energía del flujo relativa a la velocidad media de la masa, S_h se incluye como un término que considera fuentes de entalpia debida a las reacciones, m_i la fracción de masa de la especie i y finalmente $J_{i,j}$ el flujo de difusión de la especie i en el gas portador j .

El flujo de difusión de las especies es dado por la siguiente expresión:

$$J = -\rho D_{i,m} \nabla m_i - D_i^T \frac{1}{T} \nabla T \quad (8)$$

T es la temperatura del fluido, $D_{i,m}$ es el coeficiente de difusión en la mezcla de la especie i , y D_i^T es el coeficiente de difusión térmico para la especie i , donde se tiene que este es la contribución al flujo de los fluidos del efecto Soret, lo que ocasiona la difusión de masa cuando se presentan algunos gradientes térmicos como el caso del

MOCVD, aquí se desprecia frente al coeficiente de difusión de la mezcla. Así, la velocidad de transferencia de masa desde el flujo hasta el sustrato será determinada por el flujo de difusión de las especies y proporcional a $T^{3/2}$.

Todas estas ecuaciones de Navier-Stokes son tridimensionales que describen el movimiento de fluidos viscosos, aquí solo presentamos estas ecuaciones sin una definición a detalle, para ver los detalles de éstas consultar ref. 81,83-85.

Con las ecuaciones presentadas anteriormente se pueden describir los fenómenos de transporte de la mezcla de gases y la composición de las especies reactivas en el sistema MOCVD, para el crecimiento de GaN [86].

El crecimiento de GaN requiere altas temperaturas de crecimiento, entre 800 y 1100 °C. A estas temperaturas extremadamente altas, los precursores tienden a combinarse en la cámara y precipitarse sobre la superficie del sustrato, formando efectivamente partículas de aductos sobre la misma. Las formaciones de aductos durante MOCVD obstaculizan los crecimientos de las capas subsecuentes, aumentando la cantidad de fallas de apilamiento, así como la densidad de dislocaciones [87].

Las nuevas exigencias impuestas en los dispositivos requieren de estructuras complejas de alta calidad y pureza, actualmente se desarrollan heteroestructuras complejas que mediante el método MOCVD pueden realizarse.

2.4 Diodo Schottky basado en GaN

El diodo Schottky, nombrado así por el físico alemán Walter H. Schottky, no es más que la unión de un metal con un semiconductor (M-S). En la **fig. 2.4** se presenta el símbolo para un diodo Schottky.



Fig. 2.4 Símbolo del diodo Schottky.

A partir de los diagramas de banda de energía, se analiza los parámetros básicos de una unión M-S (**fig. 2.5** y **fig. 2.6**), la descripción del funcionamiento de una barrera Schottky [88-94], así como la importancia de la función de trabajo del metal (ϕ_m) y la afinidad electrónica (χ). Por lo que se refiere a la función de trabajo, se define como la energía mínima necesaria para remover un electrón desde el nivel de fermi (E_{Fm}) fuera del metal a un nivel de vacío (E_0) [89], para la función de trabajo del semiconductor (ϕ_{sc}) es la misma analogía que ϕ_m , aquí aplicado para el semiconductor [88]. Ahora que hemos definido los parámetros que se presentan en una unión M-S, podemos mencionar algunos casos particulares que se presentan en este tipo de uniones, en función del tipo de semiconductor (n o p) y de las funciones de trabajo del metal y del semiconductor:

Para un semiconductor tipo n: $\phi_m > \phi_{sc}$ cuando la función de trabajo del metal es mayor a la del semiconductor y $\phi_m < \phi_{sc}$ cuando la función de trabajo del metal es menor a la del semiconductor. Para un material tipo p se presenta la misma analogía que para material tipo n, respecto a las funciones de trabajo del metal y el semiconductor (para más detalles en el caso de un material tipo p consultar ref. [88,89,93]).

Aquí nos limitaremos en la descripción de $\phi_m > \phi_{sc}$ para un semiconductor tipo n.

Para las características cualitativas en una unión M-S, en la **fig. 2.5a** se presenta el diagrama de bandas de energía de un metal y un semiconductor antes de ponerlos en contacto. Mientras que en la **fig.2.5b** se muestra el diagrama de banda de energía ideal entre el metal y el semiconductor, después de ponerlos en contacto, los niveles de Fermi del metal y el semiconductor se alinean, alcanzando un estado de equilibrio entre los dos materiales; los electrones en exceso del semiconductor fluyen hacia estados de menor energía del metal. Después de alcanzar el equilibrio para que los electrones puedan pasar desde el metal hacia el semiconductor, deberán tener la energía suficiente para sobre pasar una la llamada altura de barrera, ($q\phi_{bn}$) que impide el paso de los electrones que no tengan la energía suficiente para sobre pasar esta barrera, dada por;

$$q\phi_{bn} = (\phi_m - \chi) \quad (9)$$

Mientras que del lado del semiconductor se genera un doblamiento en las bandas de energía en la región cercana a la interfase entre en metal, generándose una barrera de potencial qV_{bi} para que los electrones puedan superar esta barrera deben tener la energía suficiente para moverse hacia el metal, dada por [95];

$$qV_{bi} = \phi_m - \phi_{sc} \quad (10)$$

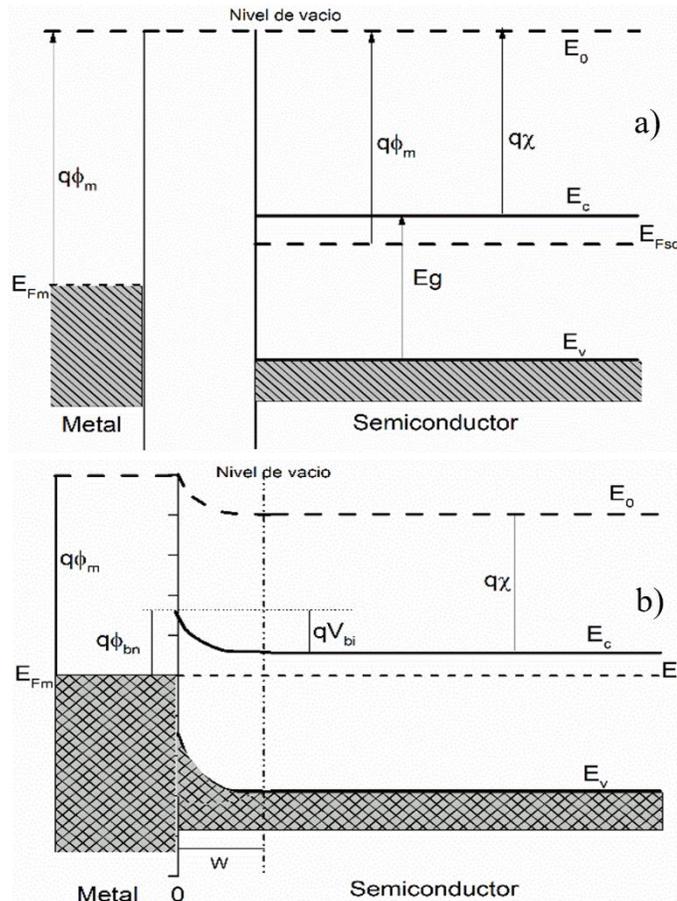


Fig. 2.5 Diagrama de banda de energía a) de un metal y un semiconductor, y b) de una unión ideal metal-semiconductor tipo n; para $\phi_m > \phi_{sc}$.

Como se muestra en la **fig. 2.6**, se presentan dos casos en los diagramas de banda de energía en función del voltaje, en los que se interrumpe el equilibrio entre la unión M-S. El primer caso (**fig. 2.6a**) al aplicar un voltaje negativo en el lado del ánodo, observando un incremento de la altura de barrera del semiconductor al metal,

manteniéndose idealmente sin alteraciones la ϕ_{bn} , esto sería en el caso de polarización inversa. Con respecto al caso de una polarización directa (**fig.2.6b**), se aplica un voltaje positivo en el lado del ánodo, observando una reducción del V_{bi} mientras que la altura de barrera ideal permanece constante; este caso los electrones pueden fluir con mayor facilidad hacia el metal.

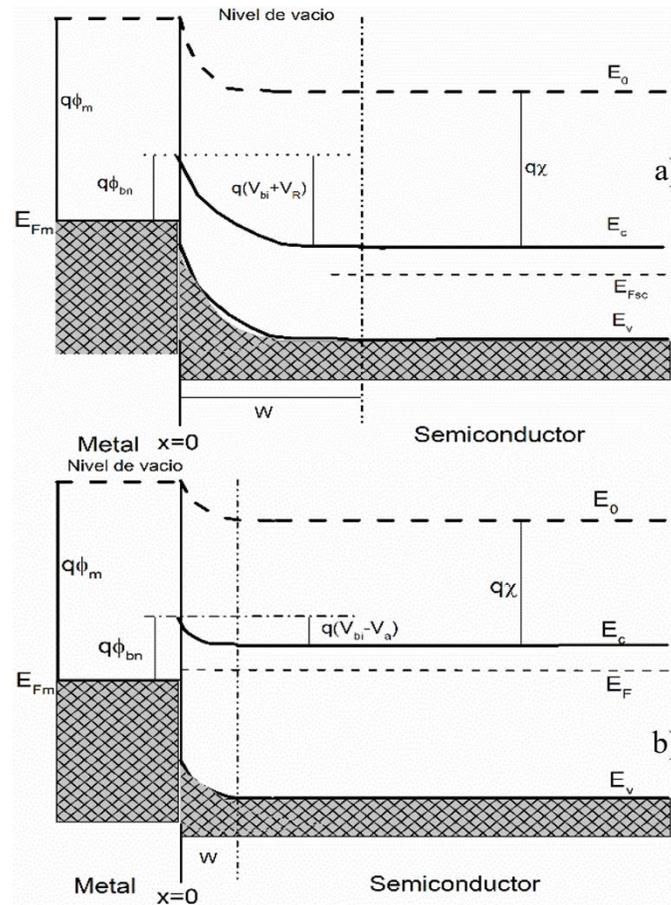


Fig. 2.6 Diagrama de banda de energía de una unión M-S, a) en polarización inversa y b) en polarización directa, con semiconductor tipo n y para $\phi_m > \phi_{sc}$

Las propiedades electrostáticas de una unión M-S se pueden determinar considerando de manera similar a una unión p-n, como el campo eléctrico (E) en la región de carga espacial (W) a partir de la ecuación de Poisson [91], asumiendo que en el semiconductor se tiene una distribución uniforme de dopado y que el campo eléctrico es cero en el borde de la región de carga espacial del semiconductor. Obteniéndose las expresiones para;

$$E = -\frac{qN_D}{\epsilon_{sc}} (x_n - x) \quad (11)$$

$$W = x_n = \left[\frac{2\epsilon_{sc}(V_{bi}+V)}{qN_D} \right]^{1/2} \quad (12)$$

Donde V es el voltaje aplicado en polarización inversa, considerando una aproximación abrupta, ϵ_{sc} es la permitividad del semiconductor y N_D la concentración de portadores [90,96].

Los diodos Schottky presentan características únicas que difieren de los diodos de unión p-n y los hacen ideales para algunas aplicaciones específicas, como por ejemplo presentan un voltaje de umbral más bajo, en polarización directa solo se requiere entre 0.3 a 0.4 V para la conducción de corriente, comparado con los 0.6 a 0.7 V que serían requeridos en una unión p-n [88].

Ahora se presentan los mecanismos de transporte de carga que ocurren en la unión M-S. Algunos mecanismos de transporte que pueden presentarse en este tipo de uniones, los cuales se presentan en la **tabla 2.3** [95-97].

Tabla 2.3 Modelos de mecanismos de transporte.

Mecanismo de transporte de carga	Modelo
Teoría de emisión termiónica	$J_{sc \rightarrow M} = A^* T^2 \exp\left(-\frac{q\phi_{bn}}{KT}\right) \exp\left(\frac{qV}{KT}\right) \quad (13)$
Teoría de difusión	$J_n = J_0 \left[\exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1 \right] \quad (14)$
Por efecto túnel	$J_t \approx \exp\left(-\frac{q\phi_{Bn}}{E_{00}}\right) \quad (15)$

Donde $A^* = \frac{4\pi q m^* k^2}{h^3}$ es la constante efectiva de Richardson para emisión termiónica; m^* es la masa efectiva de electrones libres del semiconductor, $J_0 = \left(\frac{q^2 D_n N_c}{k_B}\right) \sqrt{\frac{2q(V_D - V_a) N_D}{\epsilon_0 \epsilon_{sc}}} \exp\left(-\frac{q\phi_{Bn}}{k_B T}\right)$ es la corriente de saturación y $E_{00} = \left(\frac{q\hbar}{2}\right) \sqrt{\frac{N_D}{m^* \epsilon_0 \epsilon_{sc}}}$.

Los mecanismos de transporte mencionados anteriormente, además, son esquematizados en la **fig. 2.7**.

Por ejemplo, G. Greco et al. [98] ha reportado la influencia del nivel de dopaje N_D , en los mecanismos de transporte en la interfaz, debido al ancho de la zona de carga espacial W formado en la unión M-S. En la **fig. 2.7** se muestra una ilustración del transporte de portadores como función del nivel de dopaje del semiconductor, (para más detalles ver ref. 98).

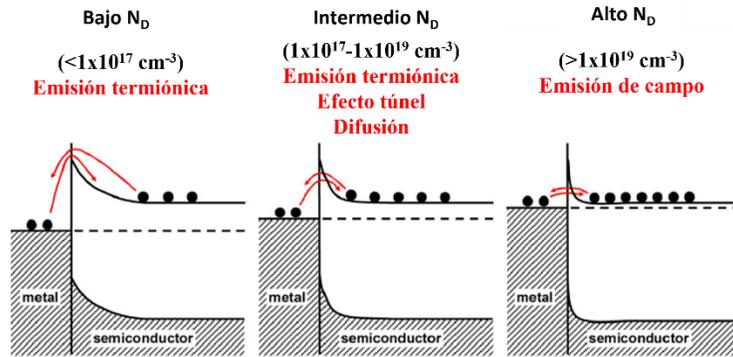


Fig. 2.7 Esquema de transporte de portadores en la unión M-S, como función de los niveles de dopaje N_D [98].

Los diodos Schottky están formados además por un contacto óhmico (ver **fig. 3.8**) uno de los competentes importantes. Un contacto óhmico ideal debe tener características lineales en corriente-voltaje con una resistencia mínima al paso de una corriente eléctrica [98].

En la actualidad el material más utilizado para aplicación a diodos Schottky es el silicio (Si), pero este material está llegando al límite teórico de eficiencia [99], lo que nos lleva en la búsqueda de nuevos materiales que presenten características similares o superiores que puedan ser explotados en las diferentes áreas que en la actualidad el Si domina, y en aplicaciones donde su uso no es factible. En la actualidad, la investigación se ha centrado en materiales semiconductores, que presenten propiedades con mayor potencial para aplicaciones a diferentes dispositivos además que puedan superar la eficiencia de dispositivos con tecnología del Si. En este caso los materiales del grupo III-V son semiconductores de E_g amplio, los cuales serían los materiales ideales para diversas aplicaciones, por ejemplo, dispositivos de alta frecuencia, alta potencia y

temperaturas de operaciones altas, donde en dispositivos de Si su eficiencia es limitada [99].

Los materiales III-V presentan características que pueden ser óptimas para el diseño de diodos Schottky. El GaN posee propiedades físicas extraordinarias como su amplio ancho de banda, concentración de portadores altas, etc., características atractivas para la fabricación de dispositivos Schottky donde se requieran aplicaciones desde bajo y altos voltajes, temperaturas y frecuencia altas de trabajo [100].

Actualmente, este campo de investigación en dispositivos basados en GaN se ha realizado en la fase estable hexagonal [101-105], aunque se han hecho grandes avances, se tienen varios problemas que resolver como las altas corrientes de fuga, lo que causa degradación de las características del control de compuerta y un consumo mayor de energía [106], variación en la altura de barrera [100]. En los últimos años, se han reportado diversos resultados en la fabricación de uniones M-S basado en GaN, utilizando metales para las barreras Schottky como Pt [107], Au [108], Pd [109], y Ni [101,105].

Generalmente, para dispositivos basados en GaN tipo n, se han utilizado contactos de Ni/Au. Por ejemplo, Y. Lei et al. [101] reportan la fabricación de diodos Schottky con una geometría vertical utilizando como barrera Schottky Ni/Au, en películas de GaN tipo n, crecida en hetero-epitaxia. El transporte de portadores se da por los defectos causados en el crecimiento, principalmente la densidad de dislocaciones. A demás, realizar mediciones de corriente-voltaje en un intervalo de temperaturas de 300 a 410 K, donde el modelo de transporte de emisión termiónica puede describir los mecanismos de transporte. Por otra parte, V. Rajagopal Reddy et al. [100] han estudiado los parámetros eléctricos y los mecanismos de transporte de un diodo Schottky incorporando una capa de Se como barrera. Mediante mediciones de I-V y C-V reportan la altura de barrera de 0.92 y 1.27 eV, respectivamente, con un factor de idealidad (n) de 1.10. La discrepancia en la altura de barrera se atribuye a que no se tiene una altura de barrera homogénea en la interfaz del diodo. Los mecanismos de transporte son descritos en polarización directa en un gráfico de $\log I$ vs $\log V$ donde se ve la dependencia del voltaje y ley de potencias ($I \propto V^m$), encontrando tres regiones

lineales identificadas por comportamiento óhmico, una corriente limitada por carga espacial y corriente limitada por cargas atrapadas.

En un contacto Schottky ideal, existen dos mecanismos de transporte de portadores que se han utilizado, emisión termiónica (TE) y emisión de campo termiónica (EFE). En el GaN tipo n, en polarización directa el transporte de portadores estará limitado por la temperatura y la concentración de dopaje. Para temperaturas bajas y una concentración de portadores altas en GaN el efecto predominante es EFE. El GaN en diodos Schottky generalmente se ha crecido con características intrínsecas o ligeramente dopado (10^{17} cm^{-3}) y la temperatura de operación generalmente estará por encima de la temperatura ambiente, en este caso el mecanismo de transporte estará dominado por TE [99]. Por lo que en diodos Schottky basados en GaN se ha usado el modelo de emisión termiónica para la descripción de los mecanismos de transporte; sin embargo, se han propuesto más de un modelo para estos. Por ejemplo, A. Ahaitouf, et al. [110] reportan el efecto de la temperatura (100 a 300 K) y el voltaje de medición de I-V, se observan dos regiones con cambios de pendientes, lo cual atribuyen que el modelo de emisión termiónica es predominante a bajos voltajes; mientras que para altos voltajes se presenta el mecanismo de transporte por efecto túnel o emisión de campo termiónico. En la literatura, los reportes de dispositivos Schottky basados en GaN, se han encontrado mayormente en la fase hexagonal y solo pocos reportes de diodos Schottky basados en GaN en fase cúbica [111-113]. Aunque el c-GaN es más difícil sintetizar, presenta ventajas en sus propiedades sobre la fase hexagonal que pueden contribuir a un mejor desempeño de los dispositivos. Por ejemplo, D. J. As, et al. [111-112] ha informado de la fabricación de un diodo Schottky basado en c-GaN, con contactos metálicos para la barrera de Ni y contactos óhmicos de indio; obteniendo mediciones de I-V, con una variación de la temperatura de medición de 50 a 300 K. Obteniéndose baja resistencia en serie y concentración de portadores de $\sim 1.0 \times 10^{16}$ cm^{-3} . Al realizar un tratamiento térmico reducen la corriente de fuga en inversa hasta 3 órdenes de magnitud. Pero no solucionan el problema de alta corriente de fuga en inversa, aún se puede mejorar el proceso de fabricación de diodos Schottky basado en c-GaN que puedan superar la eficiencia de trabajo de los diodos basados en h-GaN.

Referencias

- [1]. *B. Gill III, Nitride Semiconductors and Their Modern Devices, Oxford University Press, UK, 2013.*
- [2]. *S. Nakamura, G. Fasol, The Blue Laser Diode, Springer, 1997.*
- [3]. *C. Bayram, R. Liu, Semiconductors and Semimetals, Volume 96, 2017,*
- [4]. *C. Mietze, M. Landmann, et al., Band offsets in cubic GaN/AlN superlattices, Phys. Rev. B (2011).*
- [5]. *O. Ambacher et al., J. Phys.: Condens. Matter 14, 3399 (2002).*
- [6]. *S. Chichibu, T. Azuhata, T. Sota, and S. Nakamura, Appl. Phys. Lett. 69, 4188 (1996).*
- [7]. *J.S. Arias-Cerón, H. Vilchis, D.M. Hurtado-Castañeda, V.M. Sánchez-R, Materials Science in Semiconductor Processing 74 (2018) 98–101.*
- [8]. *D. J. As., et al. Appl phys. Lett. 88, 152112, 2006.*
- [9]. *D. J. As., et al. Materials research society, symp. Proc. Vol. 892, 2006.*
- [10]. *T. Gohil, et al. X-ray detection with zinc-blende (cubic) GaN Schottky diodes, scientific reports, 2016.*
- [11]. *Park, S.-H., Lee, Y.-T., 2010. Optical properties of zinc-blende InGaN/GaN quantum well structures and comparison with experiment. Chin. Phys. Lett. 27 (4), 044208.*
- [12]. *A. Mesrane, et al. Design and Simulation of InGaN p-n Junction Solar Cell, International Journal of Photoenergy, Article ID 594858, 9 pages.*
- [13]. *Avrutin, V., et al., H., InGaN light-emitting diodes: efficiency-limiting processes at high injection. J. Vac. Sci. Technol. A 31 (5), 050809, 2013.*
- [14]. *Lin, G.-B., et al., “U-turn” feature in the efficiency-versus-current curve of GaInN/GaN light-emitting diodes. Appl. Phys. Lett. 105, 221116, 2014.*
- [15]. *S. R. Routray, T. R. Lenka, InGaN-based solar cells: a wide solar spectrum harvesting technology for twentyfirst century, CSI Transactions on ICT ISSN 2277-9078 CSIT. 2017.*
- [16]. *H.P. Maruska, J.J. Tieljen, The preparation and properties of vapor-deposited singlecrystal- line Gan, Appl. Phys. Lett. 15 (1969) 327e329.*

- [17]. S. Nakamura, Y. Harada, M. Seno, *Novel metalorganic chemical vapor deposition system for GaN growth*, *Appl. Phys. Lett.* 58 (1991) 2021e2023.
- [18]. S. Nakamura, *GaN growth using GaN buffer layer*, *Jpn. J. Appl. Phys.* 30 (1991) L1705eL1707.
- [19]. S. Nakamura, et al., *Thermal annealing effects on P-type Mg-doped GaN films*, *Jpn. J. Appl. Phys.* 31, 1992.
- [20]. S. Nakamura, et al., *Hole compensation mechanism of P-type GaN films*, *Jpn. J. Appl. Phys.* 31 (1992) 1258e1266.
- [21]. Alanis et al. *Journal of Vacuum Science & Technology B* 34, 02L115 (2016).
- [22]. As et al., *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 76, No. 1,3, 2000.
- [23]. Martin Frentrup, et al., *J. Phys. D: Appl. Phys.* 50 433002, 2017.
- [24]. A. Denis et al. / *Materials Science and Engineering R* 50 (2006) 167–194.
- [25]. Siddha Pimputkar, *Gallium nitride, Single Crystals of Electronic Materials*, 2019.
- [26]. S. Nakamura and G. Fasol, in *The Blue Laser Diode* ~Springer, Berlin, 1997.
- [27]. M A Moram and M E Vickers 2009 *Rep. Prog. Phys.* 72 036502.
- [28]. Nakamura S., Shigefusa F. Chichibu, *Introduction to nitride semiconductor blue lasers and light emitting diodes*, CRC Press (2000) 2.
- [29]. Ben H., Wen-Ben L., Smorchkova I., Din S., *IEEE Microwave Symposium Digest MTT-S* (2010) 1218.
- [30]. Michael A. Briere, *Power semiconductor materials*, *Power Electronics Europe* (2008) 29.
- [31]. Y. Sayad / *Journal of Science: Advanced Materials and Devices 1* (2016) 379e381.
- [32]. U. Kaufmann, P. Schlotter, H. Obloh, K. Köhler and M. Maier, *Phys. Rev. B* 62, 10867 (2000).
- [33]. Dhara, et al., *Appl. Phys. Lett.* 84 (2004) 5473–5475, <https://doi.org/10.1063/1.1760593>.
- [34]. D. J. As, D. Schikora, and K. Lischka: *phys. stat. sol. (c)* 0, No. 6, 1607– 1626 (2003). DOI 10.1002/pssc.200303133

- [35]. Orton J W and Foxon C T. Group III nitride semiconductors for short wavelength light-emitting devices *Rep. Prog. Phys.* 61 1. 1998.
- [36]. Dalpian, G.M., Wei, S.-H., 2004. Hole-mediated stabilization of cubic GaN. *Phys. Rev. Lett.* 93, 216401.
- [37]. S. Rumyantsev et al., *International Journal of High-Speed Electronics and Systems* Vol. 14, NO. 1 (2004) 1-19
- [38]. L. Liu, J.H. Edgar / *Materials Science and Engineering R* 37 (2002) 61–127
- [39]. X. H. Zheng et al. / *Journal of Crystal Growth* 250 (2003) 345–348.
[https://doi.org/10.1016/S0022-0248\(02\)02465-X](https://doi.org/10.1016/S0022-0248(02)02465-X).
- [40]. S.V. Novikov, *Journal of Vacuum Science & Technology B* 28 (2010) C3B1,
<https://doi.org/10.1116/1.3276426>.
- [41]. S.D. Wolter, et al., *Electrochem. Solid-State Lett.* 2 (1999) pp. 151.
- [42]. Bougrov V., et al., “*Properties of Advanced Semiconductor Materials GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe*”. Eds. Levinshtein M.E., Rumyantsev S.L., Shur M.S., John Wiley & Sons, Inc., New York, 2001, pp. 1.
- [43]. A.M. Witowski, et al., *Appl. Phys. Lett.*, (1999). 75: p. 4154.
- [44]. S.K. Pugh, et al., *Semicond. Sci. Technol.*, (1999). 14: p. 23.
- [45]. M. Fanciulli, T. Lei, T.D. Moustakas, *Phys. Rev. B*, (1993). 48: p. 15144.
- [46]. E.B. Yakimov / *Journal of Alloys and Compounds* 627 (2015) 344–351
- [47]. Hafiz et al. *J. Appl. Phys.* 117, 013106 (2015)
- [48]. I-Lin Lu, et al., *Role of Interface Roughness on Lateral Transport in InGaN/GaN LEDs: diffusion length, dislocation spacing, and radiative efficiency*, *Proc. of SPIE* Vol. 7602 76021H-1, 2010,
- [49]. M. Beck, D., et al., *Ambipolar drift of spatially separated electrons and holes*, *Phys. Rev. B* 64 (2001) 085307.
- [50]. W.E. Bicknell, *Space charge solution of Rittner photoconductor equation for a HgCdTe detector*, *Infrared Phys. Technol.* 43 39-50, 2002.
- [51]. O.H. Kim, D. Kim, T. Anderson, *Atomic layer deposition of GaN using GaCl₃GaCl₃ and NH₃*, *J. Vac. Sci. Technol. A: Vac. Surf. Films* (2009),
- [52]. K. Yasui, K. Kanauchi, T. Akahane, *Growth of GaN films on nitrided GaAs substrates using hot-wire CVD*, *Thin Solid Films* (2003).

- [53]. V. A. Elyukhin, et al., *J. Appl. Phys.*, Vol. 91, No. 11, 1 June 2002.
- [54]. C. Guarneros, V. Sa´nchez / *Vacuum* 84 (2010) 1187–1190.
- [55]. P. E. Van Camp, V. E. van Doren, and J. T. Devreese, *Solid State Commun.* 81, 23, 1993.
- [56]. Bayram, C., et al., 2014. Cubic phase GaN on nano-grooved Si (100) via maskless selective area epitaxy. *Adv. Funct. Mater.* 24 (28), 4492.
- [57]. Bayram, C., et al., 2015a. Dual phase gallium nitride material formation on (100) silicon. U.S. Patent 9,048,173 (2015).
- [58]. S. Sanorpim et al. / *Journal of Crystal Growth* 275 (2005) e1023–e1027.
- [59]. T. Onuma et al. / *Journal of Crystal Growth* 298 (2007) 193–197.
- [60]. P.Saengkaewetal./*JournalofCrystalGrowth*411(2015)76–80
- [61]. J. Laiji et al. / *Vacuum* 138 (2017) 8e14
- [62]. S. A. Church et al., *Phys. Status Solidi B*, 1600733 (2017).
- [63]. Lee et al., *Journal of Applied Physics* 124, 105302 (2018)
- [64]. Lok Yi Lee, et al., *J. Appl. Phys.* 125, 105303 (2019).
- [65]. K. Okura et al., *Jpn. J. Appl. Phys.* 58, SC1051 (2019).
- [66]. I. Daldoul et al., *Materials Science in Semiconductor Processing* 132 (2021) 105909.
- [67]. S.N. Waheeda et al. / *Applied Surface Science* 317 (2014) 1010–1014
- [68]. C.H. WEI, et al., *Journal of Electronic Materials*, Vol. 29, No. 3, 2000.
- [69]. D.-S. Wu et al. / *Journal of Crystal Growth* 221 (2000) 286-292.
- [70]. E. Gastellóu et al. *Optical Materials* 88 (2019) 277–281278.
- [71]. Shiji Nakamura and shigefusa, introduction to nitride semiconductor blue lasers and light emitting diodes, CRC press, 2000. N.W.
- [72]. P. Deb, et al., Faceted and vertically aligned GaN nanorod arrays fabricated without catalysts or lithography, *Nano Lett.* 5 (2005) 1847–1851.
- [73]. B. Janjua, et al., Self-planarized quantumdisks- in-nanowires ultraviolet-B emitters utilizing pendeo-epitaxy, *Nanoscale* 9 (2017) 7805–7813.
- [74]. Lok Yi Lee, Cubic zincblende gallium nitride for green wavelength lightemitting diodes, *Materials Science and Technology*, 2017.

- [75]. C. G. Van de Walle and J. Neugebauer, *Journal of Applied Physics* 95, 3851 (2004)
- [76]. F.H. Yang, *Materials, Technologies and Applications, 2014, Pages 27-65*
- [77]. Koh Matsumoto, *MOCVD growth of nitride Semiconductors, Copyright © 2018 Elsevier Ltd. All rights reserved*
- [78]. A. Sarangan, *Fundamentals and Applications of Nanophotonics 2016, Pages 149-184.*
- [79]. J. Li, et al., *Advances in III-V Semiconductor Nanowires and Nanodevices, Bentham Science Publishers, United Arab Emirates, 2011.*
- [80]. Schlichting H, Gersten K (2017). Boundary-layer theory. <https://doi.org/10.1007/978-3-662-52919-5>.
- [81]. Omar Jumaah and Y. Jaluria, *Journal of Heat Transfer* 141(8), 2019.
- [82]. Hirako, et al., *Japanese journal of applied physics*, 44(2R), p. 874, (2005).
- [83]. Z. Zhang et al. / *Journal of Crystal Growth* 454 (2016) 87–95
- [84]. Jiandong Meng Yogesh Jaluria, *International Mechanical Engineering Congress & Exposition, Proceedings of the ASME 2011.*
- [85]. Omar Jumaah and Y. Jaluria, *3rd Thermal and Fluids Engineering Conference (TFEC), 2018 Fort Lauderdale, FL, USA.*
- [86]. Moscatelli D., and Cavallotti C., “A Kinetic Study of the MOCVD of GaN,” *NSTI, Santa Clara, USA, pp. 536–539, 2007.*
- [87]. *Crecimiento de los compuestos II-VI mediante MOCVD: aplicación al crecimiento de CdTe, HgTe y Hg_{1-x}Cd_xTe, tesis doctoral, IVÁN MORA SERÓ, Departament de Física Aplicada y Electromagnetismo, universidad de valencia, 2004.*
- [88]. J.P. Colinge and C.A. Colinge. *Physics of semiconductor devices. Kluwer Academic Publishers. 2002.*
- [89]. Ben G. Streetman and Sanjay Kumar Banerjee, *Solid state electronic devices, 6th Ed. New Jersey 07458, USA, 2009.*
- [90]. Neamen, Donald A. *Semiconductor Physics and Devices: Basic Principles. 4th ed. New York, NY: McGraw-Hill, 2012.*

- [91]. Karl W. Böer, *Survey of Semiconductor Physics: Volume II Barriers, Junctions, Surfaces, and Devices*. Springer Dordrecht, 1992.
- [92]. A. G. Milnes and D. L. Feucht, *Heterojunctions and metal-semiconductor junctions*, ACADEMIC PRESS, New York, 1972.
- [93]. John P. Mckelvey, *Física del estado sólido y de semiconductores*, Editorial Limusa, Mexico 1976.
- [94]. Rodolf E. and Norman J. M. Horing. *Fundamental of semiconductor physics and devices*. World Scientific, Singapore, 1997.
- [95]. E. H. Rhoderick. *Metal-semiconductor contacts*. IEE PROC, Vol. 129, Pt. I, No. 1, 1982.
- [96]. Sheng S. Li. *Semiconductor physical electronics, second edition*. Springer Science. 2006.
- [97]. S. M. SZE and Kwok K- Ng., *Physics of Semiconductor Devices, third edition*, Jhon Wiley & Sons, Inc. 2007.
- [98]. G. Greco et al. *Applied Surface Science* 383 (2016) 324–345.
- [99]. Yaqi Wang, GaN-based Schottky diode, <http://dx.doi.org/10.5772/intechopen.77024>, 2018.
- [100]. V. Rajagopal Reddy, et al., *SolidStateCommunications*179(2014)34–38.
- [101]. Y. Lei et al. / *Solid-State Electronics* 82 (2013) 63–66.
- [102]. M. Siva Pratap Reddy et al. / *Superlattices and Microstructures* 86 (2015) 157–165.
- [103]. Wei Lu, *IEEE TRANSACTIONS ON ELECTRON DEVICES*, VOL. 58, NO. 7, JULY 2011.
- [104]. P. Kruszewski, et al. *Materials Science in Semiconductor Processing* 96 (2019) 132–136.
- [105]. H. Gu et al. / *Journal of Alloys and Compounds* 780 (2019) 476e481.
- [106]. V. Adivarahan, G. Simin, J.W. Yang, A. Lunev, M. Asif Khan, N. Pala, M. Shur and R. Gaska, *Appl. Phys. Lett.* 77 (6), 863 (2000).
- [107]. Y. Zhou, et al., *J. Appl. Phys.* 101, 024506.
- [108]. L. Wang, et al., *Appl. Phys. Lett.* 68 (1996) 1267.
- [109]. H. Kim, et al., *Appl. Phys. Lett.* 93, 032105 (2008).

- [110]. A. Ahaitouf et al. / *Thin Solid Films* 522 (2012) 345–351
- [111]. D. J. As, et al., *Mater. Res. Soc. Symp. Proc. Vol. 892* © 2006.
- [112]. D. J. As, *APPLIED PHYSICS LETTERS* 88, 152112, 2006.
- [113]. Gohil, T., Whale, J., Lioliou, G. et al. X-ray detection with zinc-blende (cubic) GaN Schottky diodes. *Sci Rep* 6, 29535 (2016).

Capítulo III. Metodología

En este capítulo se describe el proceso de limpieza de los substratos, así como el proceso de nitrificación de los substratos para la obtención de los templates que se usaran para el crecimiento epitaxial del c-GaN. Finalizando con la descripción del proceso de formación del dispositivo, que para nuestro estudio será una barrera Schottky.

3.1. Metodología general

En la **fig. 3.1** se presenta el diagrama de flujo de la metodología general seguido en el trabajo del trabajo experimental de esta investigación.

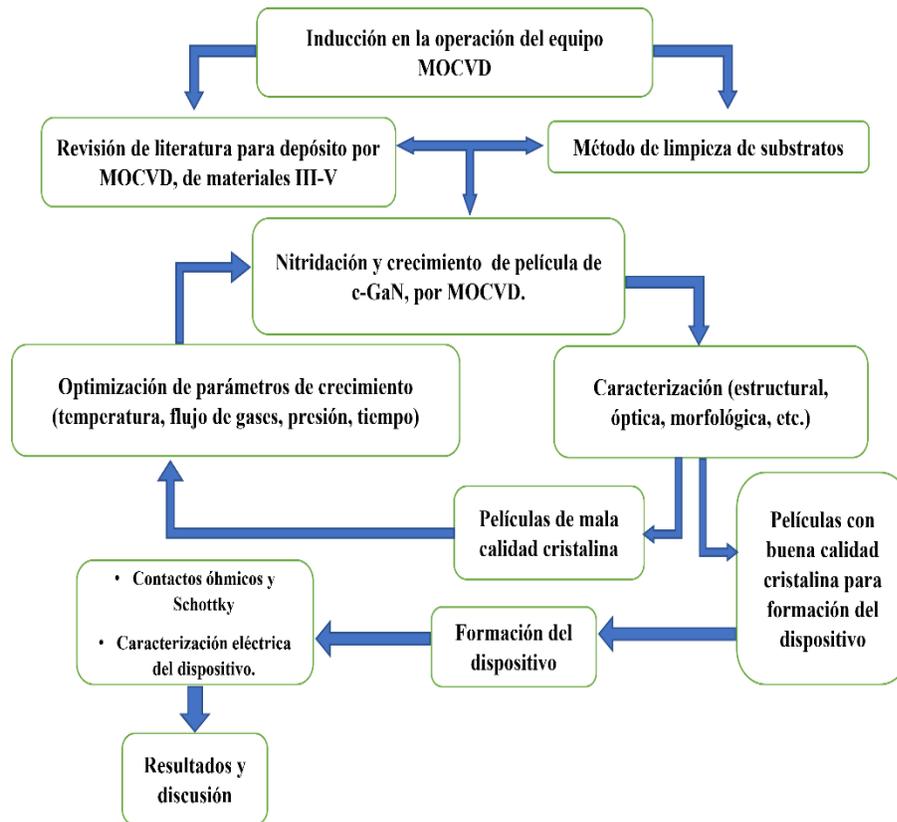


Fig. 3.1 Diagrama de flujo de la metodología general.

3.2. Limpieza de sustrato

Para la limpieza de los sustratos de GaP se utilizaron solventes y ácidos, como se presenta en la **fig.3.2**. Mientras que los detalles de la limpieza de sustratos de GaAs se dan en la ref. [1]. Las muestras son sumergidas en tricloroetileno a 70 °C por 5 minutos para desengrasar las muestras, posteriormente son sumergidas en solventes como acetona y metanol para eliminar contaminación de las muestras; esto se realiza en ultrasonido para facilitar la eliminación de residuos no deseables. Para el paso final se realiza un ataque químico para la eliminación de residuos remanentes de los pasos anteriores, HCl:H₂O, en una relación de 1:1 por 2 minutos. Después, es llevado inmediatamente al reactor MOCVD, donde se realiza una limpieza térmica a 500 °C en un ambiente de H₂ de alta pureza [2,3].

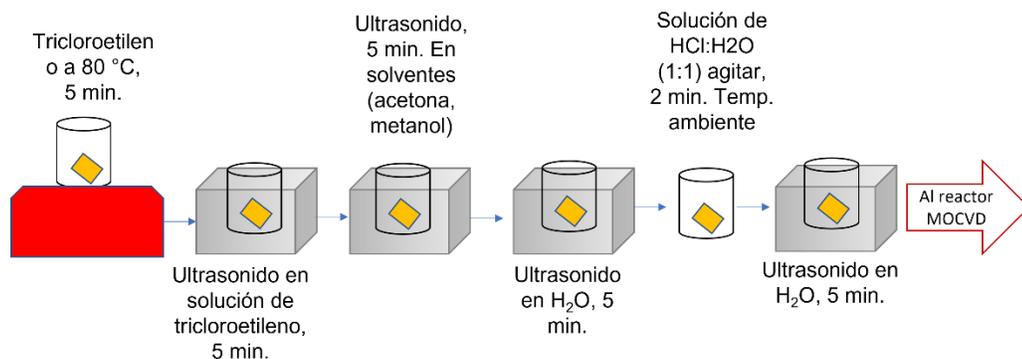


Fig. 3.2 Esquema del proceso de limpieza de sustrato de GaP.

3.3. Sistema MOCVD

En la **fig. 3.3** se observa un esquema del sistema MOCVD empleado con sus componentes básicos y que físicamente se encuentra en el Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional, diseñado por el Dr. Víctor Manuel Sánchez Reséndiz, [4].

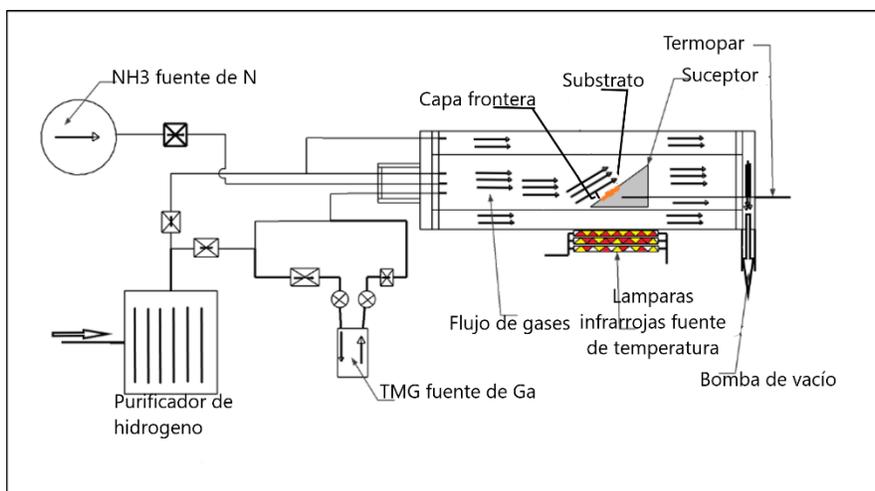


Fig. 3.3 Esquema del sistema MOCVD.

En la **fig. 3.3**, se esquematizan los principales componentes de un equipo de MOVPE como son: las lámparas infrarrojas que son la fuente de calor, el susceptor donde se coloca el sustrato para realiza todo el proceso de nitrificación hasta crecimiento epitaxial (fabricado de grafito con una cubierta de carburo de silicio), una bomba de vacío que nos ayuda a controlar la presión interior del reactor, así como la capa frontera. Las fuentes de precursores utilizados de galio (TMG) y nitrógeno (NH_3). Finalmente, el de gas de arrastre H_2 de los precursores metal-orgánicos, se hace pasar por un purificador con celdas de paladio, para obtener H_2 de alta pureza de 7N [5].

Respecto a la fuente de galio existe otra fuente que ha sido poco utilizada para el proceso de síntesis de GaN que es el trietilgalio (TEG). Algunos autores han realizado estudios comparativos sobre el uso de estas dos fuentes, por ejemplo, Alevli et al.[6] realizan crecimiento usando las dos fuentes de galio TMG y TEG, obteniendo mejores propiedades ópticas usando TMG, pero una superficie más rugosa. Aunque otras investigaciones afirman que el uso de TEG es superior en las condiciones de crecimiento específicas [7], principalmente con altas temperaturas ($>1000\text{ }^\circ\text{C}$). El uso de la fuente de TEG es más adecuada para el crecimiento del compuesto ternario InGaN [8]. Mientras que para el GaN generalmente se ha utilizado la fuente de TMG. Además, por años se ha optimizado las condiciones de crecimiento del GaN, utilizando el TMG en los cientos de trabajos reportados, por ejemplo, en este trabajo todas las referencias citadas referente al crecimiento de GaN son a partir del uso del TMG. Además, la

utilización del material adecuado depende también de las características propias de cada sistema de crecimiento.

3.4. Substratos

La carencia de substratos para el crecimiento homoepitaxial de GaN ha sido una de las mayores dificultades que se tienen en la actualidad. En años recientes se ha comercializado substratos de GaN en la fase hexagonal, pero debido a que el c-GaN es la fase metaestable y difícil de obtener, actualmente no se cuentan con substratos comerciales. Lo que ha llevado a los grupos de investigación a realizar el crecimiento hetero-epitaxial de c-GaN en substratos como: GaAs [9,10], GaP [2,3], MgO [11], 3C-SiC [12,13] y Si [14].

En la **tabla 3.1** se presentan algunos parámetros básicos de los substratos que fueron utilizados en este trabajo, como es el GaP y GaAs. El substrato de GaP presenta una desviación de 10° en la dirección (110) debido al proceso de fabricación, aquí no presentamos otros datos técnicos del substrato debido a que no fueron especificados por el fabricante.

Tabla 3.1 Propiedades básicas del GaP y GaAs utilizados en este estudio

Propiedades	GaP (100) desviado 10° en la dirección (110)	GaAs (100)
Estructura cristalina	Cúbica	Cúbica
Eg (eV)	2.26	1.423-1.430
Grupo de simetría	Td ² -F43m	Td ² -F43m
Constante de red (Å)	5.4505	5.6536
Movilidad electrones (cm ² /Vs)	≤250	8500
Movilidad huecos (cm ² /Vs)	≤150	400
Coefficiente de expansión térmica	4.65x10 ⁻⁶ °C ⁻¹	6.03x10 ⁻⁶ °C ⁻¹
Índice de refracción	3.02	3.66

Los efectos de realizar crecimiento de c-GaN en hetero-epitaxia será la calidad cristalina de las películas, la cual estará en función de las propiedades de los sustratos utilizados, como la diferencias en los parámetros de red y los coeficientes de expansión térmica, así como las propiedades de las primeras capas crecidas, como la rugosidad. Para el caso de los sustratos utilizados se ha realizado el cálculo de los desajustes de red con el c-GaN crecido sobre estos, observando que entre el sustrato de GaP y el c-GaN presentan un desajuste de alrededor de 17 %; mientras que para el sustrato de GaAs y el c-GaN es de alrededor de 24 %; además el coeficiente de expansión térmica del GaP es 18 % más bajo que el GaAs [2].

3.5. Nitridación y crecimiento epitaxial

En el siguiente esquema (**fig. 3.4**) podemos apreciar el proceso de obtención del templete de GaN mediante nitridación del sustrato de GaP (a). Este proceso genera una película de c-GaN delgado, de aproximadamente 500 nm (b), sobre el cual se realiza el crecimiento epitaxial de c-GaN (c), minimizando el desajuste de red entre el sustrato y el c-GaN [2].

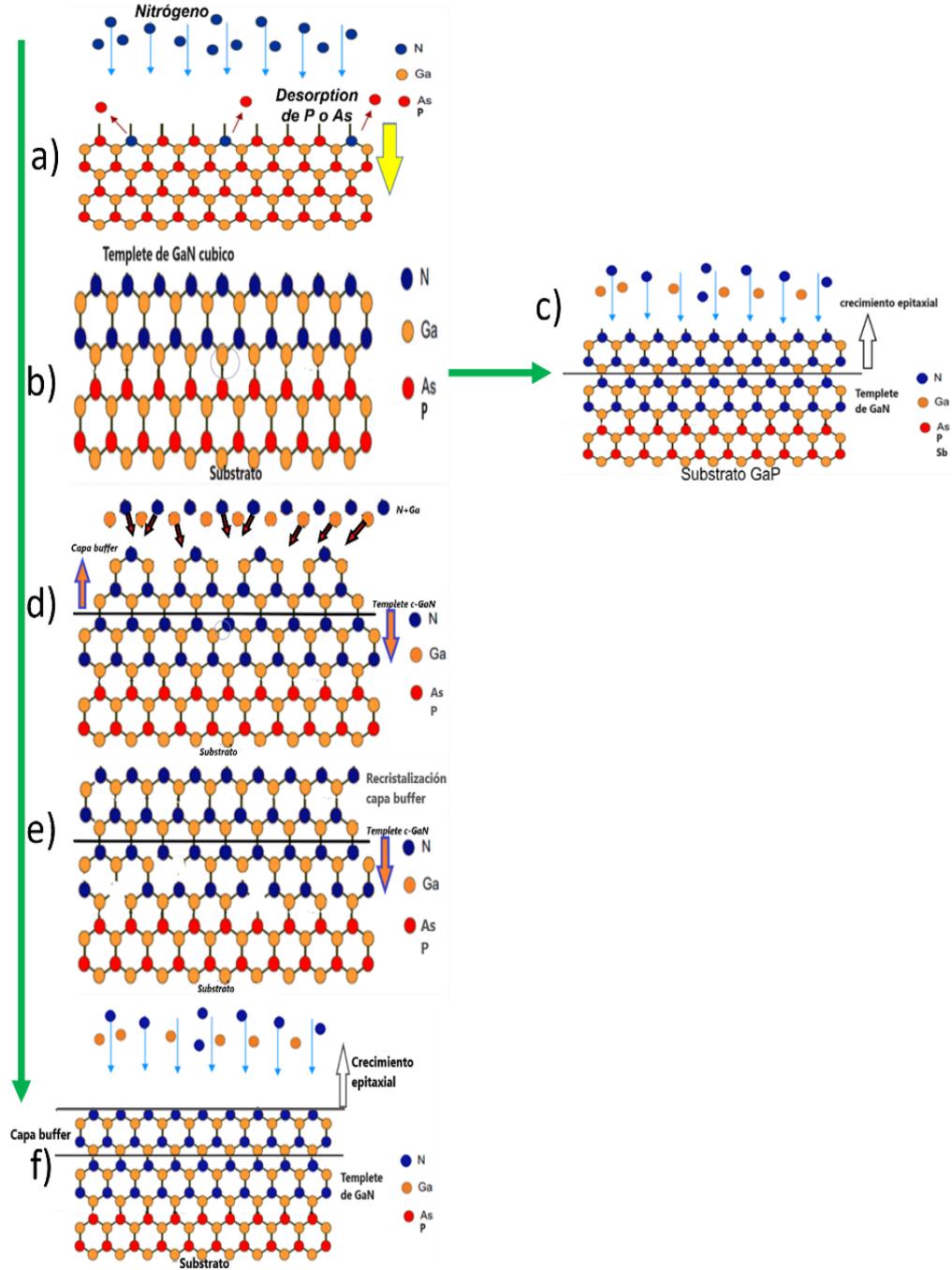


Fig. 3.4 Esquema del proceso de, a) nitridación, b) template de c-GaN, c) crecimiento epitaxial de c-GaN, d) crecimiento de capa buffer, e) recristalización y f) crecimiento epitaxial de c-GaN con capa buffer.

Durante la nitridación, un flujo de 500 sccm de NH_3 se introduce a presión y temperatura constante, de 70 torr y 900 a 950 °C, respectivamente. En estas condiciones ocurre la migración del fósforo del GaP, y el nitrógeno atómico ocupará estos espacios vacíos para formar los enlaces de Ga-N [2,10]. Un segundo proceso se puede realizar al incorporar un crecimiento a baja temperatura de GaN (capa buffer) de unos pocos minutos (d) [10,15], posteriormente se realiza un proceso de recristalización a alta temperatura para obtener una coalescencia uniforme de c-GaN [16] (e), ya que a bajas temperaturas se obtiene una distribución del GaN en forma de islas y con la recristalización, este proceso nos genera una superficie uniforme para poder realizar el último paso, el crecimiento epitaxial de c-GaN (f). En todos los pasos anteriores se encuentra presente un flujo constante de H_2 de alta pureza como gas de arrastre.

En la **fig. 3.5** se muestran los esquemas térmicos utilizados en el crecimiento de c-GaN.

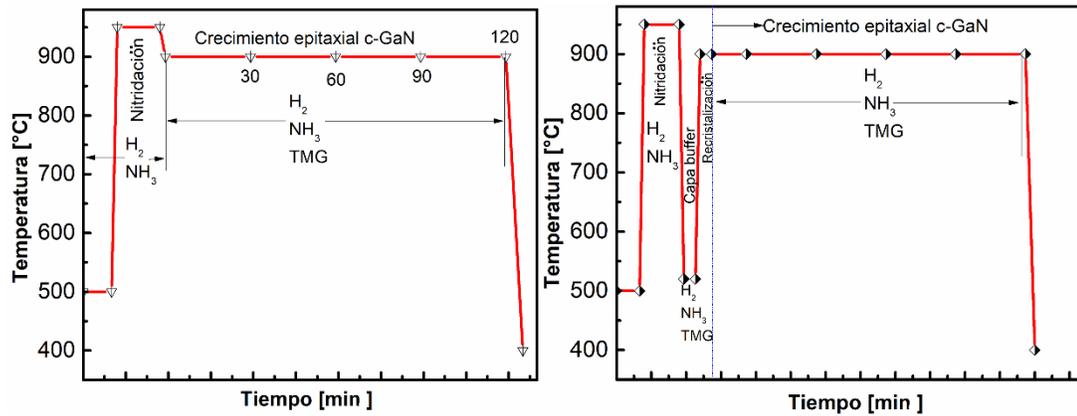


Fig. 3.5 Esquema de dos procesos para obtención de templates y crecimiento epitaxial de c-GaN, a) proceso sin capa buffer y b) proceso con capa buffer.

3.6. Técnicas de caracterización utilizadas

En esta sección se mencionan las diferentes técnicas de caracterizaciones empleadas para determinar las condiciones óptimas del crecimiento, así como la técnica de medición I-V del diodo Schottky. (todos los equipos utilizados se encuentran físicamente en la SEES-Cinvestav y en otros departamentos del Cinvestav-Zacatenco).

Las propiedades estructurales fueron determinadas mediante mediciones de difracción de rayos-X, en un equipo PANalytical X'Pert PRO MRD con una fuente de $\text{CuK}_{\alpha 1}$ ($\lambda=1.541 \text{ \AA}$). Esta técnica de caracterización es un método para el análisis de la estructura cristalina en materiales cristalinos, a partir de los difractogramas obtenidos, se pueden identificar materiales desconocidos, textura del material, determinar el parámetro de red, etc. En el método de Bragg de DRX utiliza la radiación monocromática dependiendo del equipo utilizado la fuente de esta puede variar. Al incidir un haz colimado sobre la superficie de nuestra muestra, paralela a un plano cristalino, para que estos haces difractados interfieran constructivamente debe ser igual al número entero de longitudes de onda, conocida también como la ley de Bragg el cual está dado por [17]:

$$n\lambda = 2d\sin\theta \quad (16)$$

Donde d es la distancia interplanar que corresponde a la familia de planos (hkl) o mejor conocidos como índices de Miller, λ es la longitud de onda de los rayos X, θ es el ángulo de difracción y n representa un índice entero, u orden de la reflexión.

A partir de los difractogramas característicos de cada material podemos identificar los diferentes planos de difracción del material analizado, y con ellos determinar el parámetro de red, en función de la distancia interplanar, que este estará determinado por el ángulo de difracción (ec. 16) y los índices de Miller; calculados a partir de las siguientes expresiones [18]:

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2} \quad (17)$$

Para el estudio de la deformación de la red (strain) fue a partir de las expresiones [19]

$$\varepsilon_a = \frac{a_{measured} - a_0}{a_0} \quad (18)$$

Donde $a_{measured}$ es el parámetro de red determinado experimentalmente, a_0 es el parámetro de red teórico y ε_a la deformación. Para el cálculo de esfuerzo esta dado por:

$$\sigma = \frac{\varepsilon_a * E}{(1 - \nu)} \quad (19)$$

Donde ε_a es el strain, ν la relación de Poisson, E el módulo de Young y σ el stress de la película de GaN. La relación de Poisson y el módulo de Young se obtienen a partir de las constantes elásticas del GaN cúbico [20]. Además, se realizó una estimación de la densidad de dislocaciones a partir del ancho medio a la mitad del pico (FWHM) característico del c-GaN (200) mediante la expresión [20]:

$$D = \frac{\beta^2}{4.35(b_a)^2} \quad (20)$$

Donde β es el FWHM, b_a es la longitud del vector de Burgers, ($b_a=0.3189$ nm) y D la densidad de dislocaciones por unidad de volumen.

Mediciones de Raman fueron realizadas usando un sistema NTEGRA SPECTRA II, con una longitud de onda de excitación de 473 nm, láser azul con diámetro de alrededor 1 μ m y con un tiempo de adquisición de datos de 10 minutos. La espectroscopia Raman es una técnica de interacción de la luz con la materia, la cual nos proporciona información sobre la composición relativa de un material. Esta técnica nos proporciona información sobre vibraciones en la red cristalina, o también llamada modos vibracionales, en frecuencias específicas para cada material. A partir de los espectros Raman obtenidos podemos determinar algunas características de los materiales analizados; en el caso de películas delgadas podemos analizar y determinar esfuerzos generados en el proceso de crecimiento de las películas [21]. Para el estudio de los esfuerzos en las películas de c-GaN, se realizó en base a los desplazamientos de las frecuencias Raman del c-GaN. Para el caso del GaN generalmente el modo E2 de la fase hexagonal se ha utilizado para estimar los esfuerzos en las películas, este modo

vibracional tiene mayor sensibilidad a los cambios en los esfuerzos en la película, teniendo un valor de 567.6 cm^{-1} en una estructura relajada [22-24].

Para determinar los esfuerzos en las películas fue utilizada la siguiente expresión:

$$\sigma = \frac{\Delta\omega}{k} \text{ (cm}^{-1} \text{ GPa}^{-1}\text{)} \quad (21)$$

Donde $\Delta\omega$ es el desplazamiento de la frecuencia del fonón Raman, k es el coeficiente de esfuerzo Raman ($4.3 \text{ cm}^{-1} \text{ GPa}^{-1}$) y σ es el esfuerzo [25].

La morfología de la superficie fue analizada mediante microscopio de fuerza atómica (AFM), con un equipo Ntegra NT-MDT con el modo de no-contacto. Esta técnica utiliza puntas para monitorear la superficie de las muestras, estas presentan un radio de curvatura de 20 a 60 nm, que está localizado el final de un cantiléver. La interacción de la punta y la muestra provoca una deflexión del cantiléver por las fuerzas de Van del Waals, esta deflexión es medida por un detector a medida que la punta se desplaza en la superficie de una muestra, generando imágenes micrográficas [26]. Se estudiaron por esta técnica las características topográficas en 2D y 3D de la superficie de las películas del c-GaN, en un área de $1 \times 1 \mu\text{m}$ hasta $20 \times 20 \mu\text{m}$, obteniendo información cuantitativa como la rugosidad promedio de la superficie de las películas. Esta técnica de caracterización, además, proporciona características morfológicas de las muestras como: tamaños de granos, densidad de granos, altura y ancho de granos, etc.

El análisis de la sección transversal de las muestras fue observado mediante microscopio electrónico de barrido (SEM) de alta resolución en un equipo HRSEM-Zeiss Auriga. Esta técnica nos proporciona información de la morfología a más alta resolución, donde puede observarse con más detalles la topografía de la superficie, etc. [27], Para nuestro caso solo fue utilizado para observar una sección transversal de nuestras muestras y poder observar las capas crecidas en los diferentes procesos.

Los espesores fueron determinados mediante elipsometría, con un equipo GAERTNER-SCIENTIFIC Corporation (Chicago), con dos haces de longitudes de onda de 632.8 y 824.3 nm. Esta técnica de caracterización óptica. Que nos proporciona información como espesores, índice de refracción, coeficiente de extinción, basada en

la medida del cambio de la polarización de la luz al reflejarse o transmitirse en un medio. Mediante el cociente de reflexión complejo de Fresnel (ρ) [28],

$$\rho = \frac{r_p}{r_s} \quad (22)$$

Donde r_p es el coeficiente de reflexión de polarización paralela al plano de incidencia y r_s es la polarización al plano perpendicular. (Para más detalles de la teoría de la técnica ver ref. 28)

Las propiedades eléctricas de las películas de GaN fueron medidas por efecto Hall-Van der Paw ; utilizando un electroimán de campo magnético fijo de 0.55 T. utilizando una base de cuatro puntas, se colocó la muestra de aproximadamente 1x1 cm², con una corriente de 1 mA. Este método fue empleado para determinar las características eléctricas de las muestras, tales como: movilidad electrónica (μ), resistividad (ρ), concentración electrónica (N_D-N_A) y tipo de conductividad del semiconductor (n o p). esta técnica mide el voltaje de Hall al aplicar un diferencial de voltaje o corriente, acompañado de un campo magnético. Donde entran en juego las fuerzas magnéticas de Lorentz el cual genera un desequilibrio produciendo un campo eléctrico vertical y alcanzando un estado estacionario. Con el uso de voltímetros se miden los cambios en los campos eléctricos, observando que el voltaje positivo o negativo dependerá de la acumulación de electrones o huecos, todo este proceso es conocido como el método de Van der Pauw [29, 30]. Presentamos las expresiones para obtener los diferentes parámetros por esta técnica que están dadas por [31]:

$$\rho = r_{sq}d \quad (23)$$

$$n, p = \frac{r_H}{eR_H(n,p)} \quad (24)$$

$$\mu_n, \mu_p = \frac{R_H(n,p)}{\rho} \quad (25)$$

Donde r_{sq} es la resistencia de hoja, $R_H(n, p)$ es el coeficiente de Hall, d es espesor de la película, ρ la resistividad, μ_n, μ_p son la movilidad de los portadores (electrones o huecos) y n, p son la concentración de portadores mayoritarios electrones o huecos.

Las características de corriente-voltaje (I-V) de las estructuras c-GaN/Ni/Au, se midieron con un sistema de caracterización de semiconductores Keithley, modelo 4200-SCS. Se realizaron las mediciones en una caja oscura mediante una máquina de puntas (**fig. 3.6**) a temperatura ambiente.

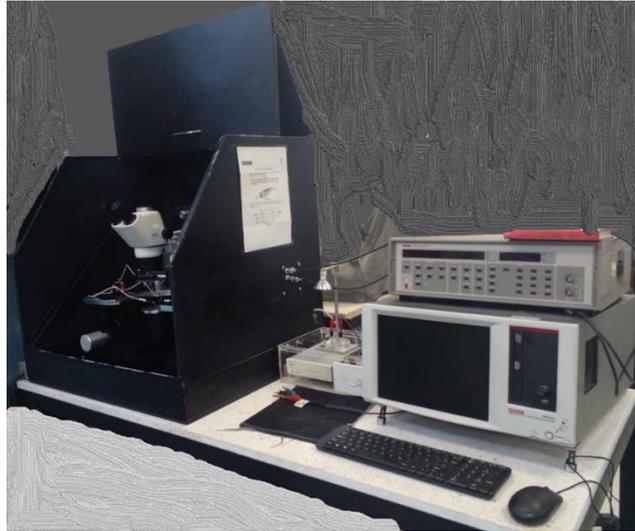


Fig. 3.6 Equipo de medición I-V Keithley (laboratorio de mediciones eléctricas, SEES-Cinvestav)

3.7 Fabricación del dispositivo

Para la formación del dispositivo se seleccionaron algunas muestras representativas, las cuales se les evaporaron los contactos óhmicos y Schottky. Las muestras seleccionadas tienen un área de 0.5x1.0 cm.

El proceso de formación del dispositivo consta de dos pasos: primero se crecieron las películas de c-GaN para formar la barrera Schottky con (Ni) [32,33] con círculos de 2 milímetros de diámetro, y posteriormente se evapora el contacto óhmico (Ti/Al/Ti/Au) [34,35] cuadrados de 2 x 2 milímetros. Las mascarillas metálicas (**fig. 3.7**) que se utilizaron para la formación de la geometría de los contactos tienen, espacios entre contactos de 1.5 mm. En la **fig. 3.7b** se muestra la mascarilla metálica utilizada de 1 x 1 cm.

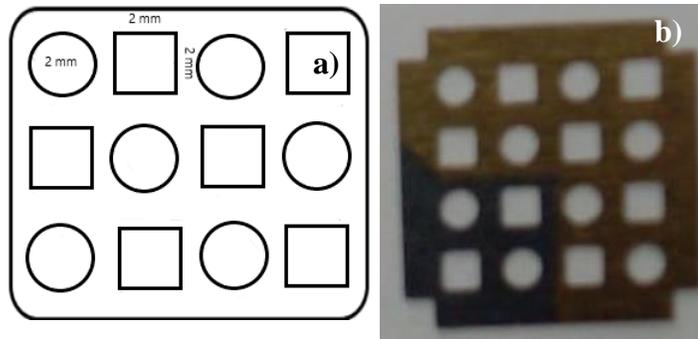


Fig. 3.7 Geometría de contactos óhmicos (□) y barrera Schottky (O), a) diseño de contactos y b) metalización.

La evaporación de contactos óhmicos se realizó en un equipo UNIVEX 300-Leybol. La primera capa de Ti (30 nm) se depositó sobre la película de c-GaN, posteriormente una capa de Al (150 nm) (equipo Edwards E306) continuando con una segunda capa de Ti (30 nm), y finalmente una capa de Au (200 nm), ésta última se utiliza para protección contra la oxidación y una mejor conducción de corriente. Posterior al depósito se precedió a realizar un tratamiento térmico de 500 °C por 2 min en un ambiente de nitrógeno [36] para garantizar una mejor adherencia a la película de c-GaN.

En la **fig. 3.8a** se muestra un esquema de la vista transversal del dispositivo, donde se esquematiza las capas del GaN y los contactos Schottky y óhmicos. Mientras que en la **fig. 3.8b** se muestra una vista superior de la estructura con los contactos Schottky con una geometría circular, formado por una capa de 40 nm de níquel (Ni) y una capa más gruesa de 250 nm de oro (Au).

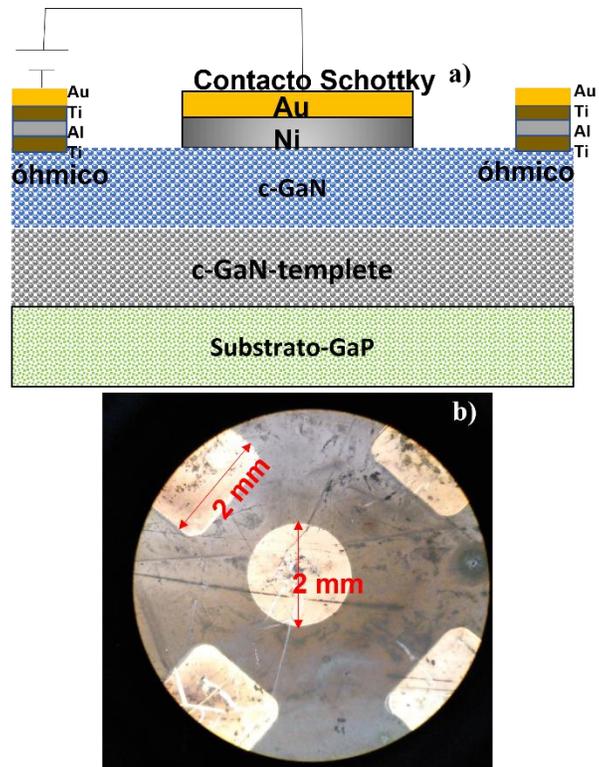


Fig. 3.8 *Diodo Schottky horizontal a) sección transversal y b) vista superior de estructura experimental.*

Referencias

- [1]. H. Vilchis et al., *Thin Solid Films* 520 (2012) 5191–5194.
- [2]. J.S. Arias-Cerón, H. Vilchis, D.M. Hurtado-Castañeda, V.M. Sánchez-R. *Materials Science in Semiconductor Processing* 74 (2018) 98–101.
- [3]. J.A. Santis, C.A. Marín-García, V.M. Sánchez-R., *Journal of Crystal Growth* 601(2023)126944.
- [4]. V.M. Sanchez-R, (2005), *Method for obtaining gallium nitride films by convesting gallium arsenide by means of nitridation, Mexico PA04004036A.*
- [5]. Héber Vilchis Bravo, " *Realización y caracterización de estructuras epitaxiales sobre substratos de GaN en fase cúbica para diodos emisores de luz*", *Tesis doctoral, Departamento de Ingeniería Eléctrica, CINVESTAV-IPN* 2012.
- [6]. Alevli et al., *comparison of TMG and TEG, J- vac. Sci. Techonol. A* 34, 01A137, 2016.
- [7]. A. Saxler et al., *Appl. Phys. Lett.* 71, 3272 (1997).
- [8]. K.-H. Lee et al., *Materials Chemistry and Physics* 134 (2012) 899e904
- [9]. H. Vilchis et al., *Thin Solid Films* 520 (2012) 5191–5194
- [10]. L. Liu, J.H. Edgar, *Materials Science and Engineering R* 37 (2002) 61–127
- [11]. M. Pérez-Caro, et al., *In situ measurements of the critical thickness for strain relaxation in β -GaN/MgO structures, J. Cryst. Growth* (2009).
- [12]. C.H. WEI, et al., *Journal of Electronic Materials*, Vol. 29, No. 3, 2000.
- [13]. R.M. Kemper, et al., *Anti-phase domains in cubic GaN, J. Appl. Phys.* (2011).
- [14]. Ozgit, et al., *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films* 30, 01A124 (2012).
- [15]. L. Liu, J.H. Edgar, *Materials Science and Engineering R* 37 (2002) 61–127
- [16]. C. A. Marín-García, J. S. Arias Cerón, V. M. Sánchez-R, *Journal of Materials Science: Materials in Electronics* (2020) 31:7455–7460.
- [17]. Paul F. Fewster, *X-RAY SCATTERING FROM SEMICONDUCTORS (2nd Edition)*, PANalitycal research center, UK, 2003,
- [18]. B.D. Cullity, S.R. Stock, *Elements of X-Ray Diffraction, 3rd edn, Prentice-Hall*, (Englewood Cliffs, NJ, 2001).

- [19]. *Martin Frentrup, et al., J. Phys. D: Appl. Phys.* 50 433002, 2017.
- [20]. *S.V. Novikov, Journal of Vacuum Science & Technology B* 28 (2010) C3B1.
- [21]. *Nancy L. Jestel, Process Analytical Technology: Spectroscopic Tools and Implementation Strategies for the Chemical and Pharmaceutical Industries, Second Edition, Edited by Katherine A. Bakeev, John Wiley & Sons, Ltd. ISBN: 978-0-470-72207-7, 2010.*
- [22]. *WEN LI et al. Optical Materials Express/Vol. 9, No. 4/1 April 2019.*
- [23]. *E Alarcon-Llado et al., Semicond. Sci. Technol.* 24 (2009) 115019.
- [24]. *K. Hiramatsu, et al., Jpn. J. Appl. Phys.* 32 (Pt. 1) (1993) 1528–1533.
- [25]. *Zhang, L., Yu, J., Hao, X. et al. Influence of stress in GaN crystals grown by HVPE on MOCVD-GaN/6H-SiC substrate. Sci Rep* 4, 4179 (2014).
- [26]. *Mary Cruz Reséndiz González y Jesús Castellón-Uribe, Microscopio de Fuerza Atómica, Encuentro de Investigación en Ingeniería Eléctrica. Zacatecas, Mexico, 2005*
- [27]. *G Salviati, T Sekiguch, et al. Assessment of Semiconductors by Scanning Electron Microscopy Techniques, Elsevier B.V. All rights reserved, 2011.*
- [28]. *Jesper Jung et al., ellipsometry, institute of physics and nanotechnology, 2004.*
- [29]. *Florian Werner, JOURNAL OF APPLIED PHYSICS* 122, 135306 (2017)
- [30]. *John P. Mckelvey, Física del estado sólido y de semiconductores, Editorial Limusa, Mexico 1976.*
- [31]. *W. Goetz et al., Materials Science and Engineering B*59 (1999) 211–217
- [32]. *As, D., Potthast, S., Fernandez, J. et al. Mechanism of current leakage in Ni Schottky diodes on cubic GaN and Al_xGa_{1-x}N epilayers. MRS Online Proceedings Library* 892, 1304 (2005).
- [33]. *As, D. J., et al., Applied Physics Letters*, 88(15), 152112.
- [34]. *B. J. Zang, et al., Appl. Phys. Lett.* 79, 2567 (2001).
- [35]. *A. Ahaitouf, et al., Thin Solid films* 522(2012) 345-351.
- [36]. *Y. Lei et al., Solid-State Electronics* 82 (2013) 63-66.

Capítulo IV. Resultados y discusión

En este capítulo se presenta el análisis de los resultados de las muestras obtenidas. Las películas de c-GaN fueron crecidas mediante depósito químico en fase vapor utilizando precursores metal-orgánicos (MOCVD). Las condiciones de nitridación de los substratos fueron optimizadas para la obtención de templates cúbicos de GaN, como se detalló anteriormente; así como las condiciones del crecimiento epitaxial de c-GaN después de obtener los templates. Estudios de DRX, espectroscopia Raman, microscopia electrónica de barrido y fuerza atómica se utilizaron para la obtención de las propiedades de las películas de c-GaN. Finalmente, se realizaron caracterizaciones eléctricas, de efecto Hall y mediciones de I-V en el diodo Schottky.

4.1. Estudio de difracción de rayos-X (DRX)

4.1.1. Nitridación y selección del sustrato para obtención del template de c-GaN

Antes de dar comienzo al proceso de crecimiento se procedió a realizar un tratamiento térmico (TT) de limpieza del sustrato GaP, este nos sirve para obtener una mejor superficie, libre de impurezas que no fueron removidas en el proceso de limpieza con solventes y ácidos, para los subsecuentes pasos para el proceso de crecimiento epitaxial. El TT se realizó en un intervalo de temperaturas de 400 a 600 °C con un flujo de H₂ y NH₃. Se determinó que la temperatura de 500 °C era la idónea, obteniéndose la muestra RNA2053N con las mejores condiciones (**tabla 4.1**).

Seguido del TT se realizó la nitridación incrementando la temperatura hasta los 950 °C para favorecer la evaporación de átomos de fósforo (P) de la superficie del sustrato durante un tiempo relativamente corto para obtener un template de GaN de alrededor

de 450 nm (± 40 nm) de espesor. El control de la presión en la cámara es para obtener un flujo laminar y también nos sirve para controlar el espesor de la capa frontera de los elementos responsables para el crecimiento de la película.

Para el análisis de DRX se seleccionaron lotes de muestras representativas de cada etapa del proceso, los parámetros que se tomaron en cuenta fueron: efecto de la presión, temperatura, flujos de NH_3 , etc. En las **fig. 4.1** y **4.2** se presentan los difractogramas de las muestras con nitrificación de substratos de GaP y GaAs, en ambos se presenta el pico característico del c-GaN en $\sim 40^\circ$ y $\sim 39.9^\circ$ para los substratos de GaP y GaAs, respectivamente [1,2].

En la **fig. 4.1**, se muestran los espectros de rayos-X de muestras con nitrificación sobre substratos de GaP (carta cristalográfica No: 00-032-0397), se observan dos picos de c-GaN con orientaciones en el plano (200) a 40° y (400) a 87° , además de un pico en $\sim 37^\circ$ que puede corresponder a los planos (111) y (101) del GaN cúbico y hexagonal, respectivamente. Ambos concuerdan con las cartas cristalográficas No: 01-075-9555 CSD: 157513(ICSD) y No: 03-065-3410 CSD: N AL5036(NIST). Para este proceso de nitrificación se observó que los parámetros críticos en la formación de un templete de GaN cúbico de buena calidad cristalina son la temperatura y los flujos de NH_3 [3], como se presenta en la **tabla 4.1**. Una vez optimizadas las condiciones se procedió a realizar el crecimiento de una capa buffer (GaN a baja temperatura) pasar directamente después de la nitrificación al crecimiento epitaxial de c-GaN.

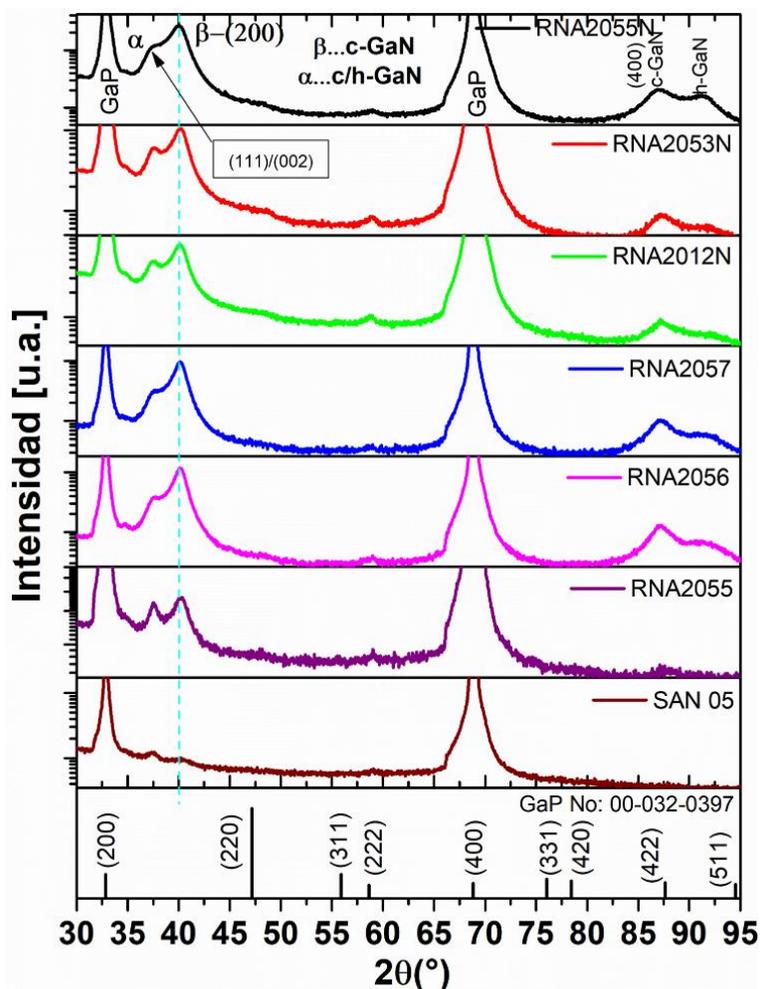


Fig. 4.1 Difractogramas del GaP con nitridación.

Tabla 4.1 Condiciones del proceso de nitridación de los substratos de GaP

Muestra	TT (°C/min)	Flujo de NH ₃ en TT (sccm)	Nitridación (°C/min)	Flujo de NH ₃ (sccm)	Presión (torr)
SAN05	400/10	-	900/05	500	70
RNA2055	600/10	500	900/60	500	100
RNA2056	400/10	500	950/60	500	100
RNA2057	600/10	500	950/60	500	70
RNA2012N	500/10	500	950/15	500	70
RNA2053N	500/10	500	950/60	500	70
RNA2055N	500/10	750	950/60	750	70

En la **fig. 4.2** se presentan los espectros de DRX obtenidos de películas de GaN crecidos sobre substratos de GaAs, donde se observa el pico característico de c-GaN a $\sim 39.9^\circ$,

sobre este tipo de sustratos el crecimiento ha sido reportado anteriormente [2]. Además, se presenta los patrones de DRX del GaAs tomado de la carta cristalográfica No: 01-080-0016.

Al comparar los DRX de las nitridaciones en los dos sustratos se observa que en el sustrato de GaAs se presenta en mayor magnitud picos correspondientes a la fase hexagonal, estas inclusiones están presentes por debajo de la interfaz cúbica obtenida por este proceso. La superficie de nuestra nitridación presenta solo la fase cúbica, la cual es utilizada para realizar los subsecuentes pasos de crecimiento, (**fig. 4.2**). Otro aspecto interesante es que con GaP se obtienen películas más densas comparadas con GaAs, lo cual genera una mejor calidad cristalina. Se calculo la densidad de dislocaciones ideal* en función de los parámetros de red de los dos sustratos y el c-GaN. A partir del FWHM del pico característico del c-GaN en el plano (200) se determinó la densidad de dislocaciones observando una reducción en 2 y 3 órdenes de magnitud para sustratos de GaP y GaAs, respectivamente, como se observan estos valores en la **tabla 4.2**.

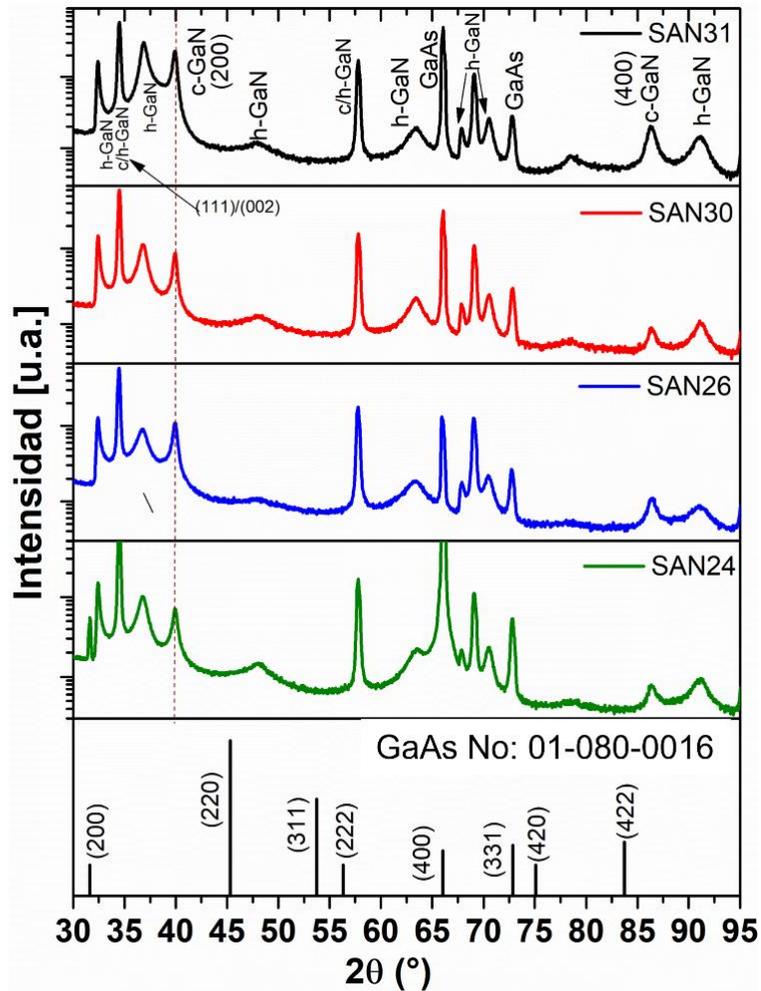


Fig. 4.2 Difractogramas del GaAs con nitridación y crecimiento epitaxial de GaN.

Adicionalmente, se realizó el análisis de la sección transversal y superficie (**fig. 4.3 y fig. 4.4**) de las muestras crecidas sobre los dos sustratos, donde se obtuvieron micrografías de las capas obtenidas en los diferentes procesos. Para el caso de los sustratos de GaP en la **fig. 4.3a** se observa capas compactas desde el proceso de nitridación, así como en el crecimiento epitaxial del c-GaN. Para las muestras obtenidas a partir de sustratos de GaAs (**fig. 4.3b**), se observa una capa porosa por debajo de la superficie nitridada, por lo que fue necesario crecer una capa buffer para disminuir los defectos causados en el proceso de nitridación, los cuales son perjudiciales para el funcionamiento de los dispositivos.

En la **fig. 4.4** se observan imágenes tomadas por AFM de las superficies de las películas de c-GaN obtenidas en los dos sustratos, donde se observa una mayor rugosidad en más de un 80 % en sustratos de GaAs con respecto al GaP.

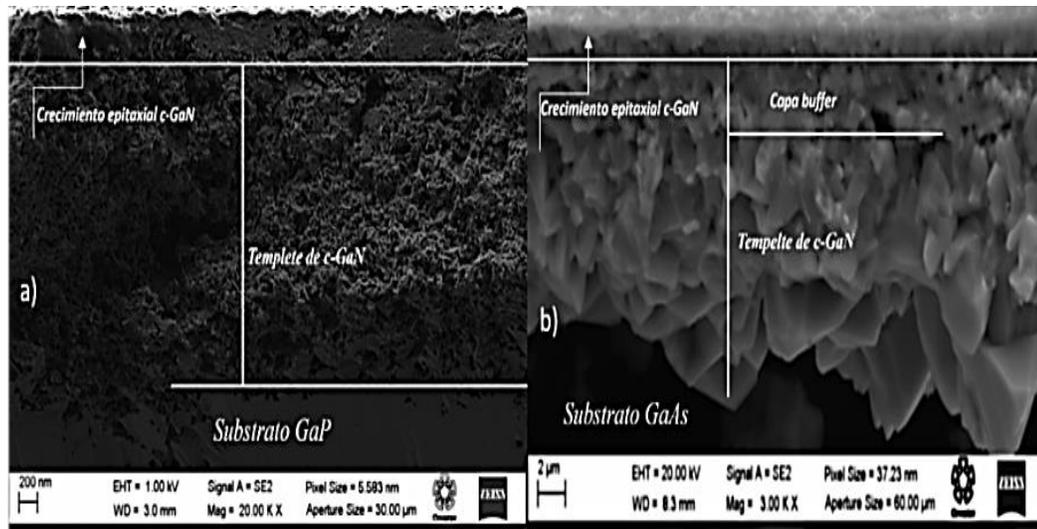


Fig. 4.3 Micrografías SEM de la sección transversal de películas de c-GaN depositadas sobre sustratos de a) GaP y b) GaAs.

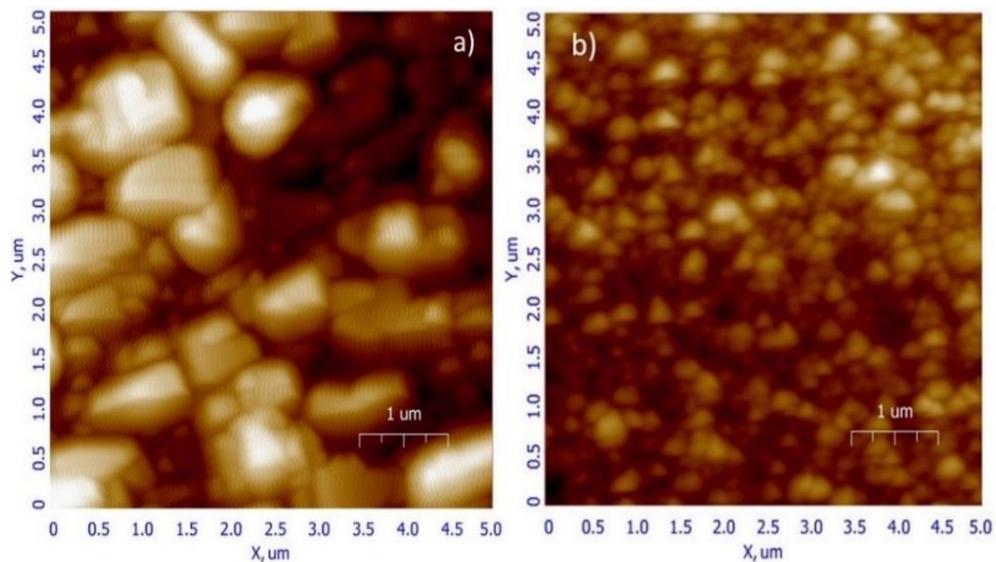


Fig. 4.4 Micrografías de AFM de la superficie de película de c-GaN sobre diferente sustrato, a) GaAs y b) GaP.

Al observar las propiedades estructurales por DRX, y estudios de SEM y AFM, en los templates de GaN se decidió el uso de sustratos de GaP.

Un resumen de las características de las muestras estudiadas se presenta en la **tabla 4.2**. La distancia interplanar y el parámetro de red fueron obtenidas para el pico de difracción (200). Así mismo, fueron determinados los esfuerzos y deformaciones en la red cristalina.

Tabla 4.2 *Propiedades estructurales de las capas de c-GaN depositados en substratos de GaP y GaAs.*

Muestra	P. red-GaN (nm)	Rugosidad (nm)	D. Dislocaciones cm^2 – ideal/FWHM*	Deformación (ϵ)	Esfuerzo DRX GPa.	Esfuerzo Raman (GPa.)
c-GaN/GaP	0.4499	18	$1.72 \times 10^{12}^*$ / 3.315×10^{10}	0.177	0.49	Compresión +0.054
c-GaN/GaAs	0.4506	100	$1.96 \times 10^{13}^*$ / 1.25×10^{10}	0.311	0.87	Tensión - 2.182

4.1.2. Crecimiento epitaxial

El primer paso del proceso de crecimiento epitaxial del c-GaN se describe enseguida. A partir de los templates de GaN pasamos inmediatamente al crecimiento epitaxial de c-GaN, introduciendo un flujo de TMG y NH_3 , como fuentes de galio y nitrógeno, respectivamente. En la **fig. 4.5** se muestran los difractogramas de algunas muestras con el proceso descrito en la **fig. 3.4a**. El pico alrededor de 40° del c-GaN que se presenta en la nitrificación, se observó que se mantiene en el mismo ángulo de difracción, pero con mayor intensidad. De acuerdo con la ley de Bragg, $n\lambda = 2d\sin\theta$, las reflexiones en el plano (200) incrementan debido al incremento de las capas atómicas por el crecimiento epitaxial de c-GaN y por ende las reflexiones en el plano refuerzan la intensidad del pico [4]. Además, se observa el pico en $37.3^\circ (\pm 0.2^\circ)$ que atribuimos a los planos (111) o (101) del GaN cúbico o hexagonal, respectivamente. Esta fase

hexagonal en el plano (101) no tan común puede atribuirse a la desviación que presenta el sustrato de 10° hacia la dirección (110), causando fallas de apilamiento en las primeras capas, las cuales irán disminuyendo a medida que el espesor incrementa [5]. Además, dos picos de segundo orden en 87° y 91° corresponden a las reflexiones de la fase cúbica y hexagonal de GaN, respectivamente. En general, se obtiene el mismo patrón que el templete obtenido del sustrato de GaP, por lo tanto, podemos afirmar que el crecimiento es homoepitaxial alineado con la estructura cúbica del templete de c-GaN. Mejorando las características en la superficie de las muestras, como se observa en los valores de deformación, esfuerzos y densidad de dislocaciones que se presentan en la **tabla 4.4**.

En la **tabla 4.3** observamos que el tiempo de nitrificación fue de tan solo 15 minutos, ya que la nitrificación se da en la superficie hacia el volumen del sustrato, como se presentó en la **fig. 3.3**, obteniéndose un templete de GaN de alrededor de 450 nm que son suficientes para realizar el crecimiento epitaxial de c-GaN, con ello minimizamos el tiempo de crecimiento que son reflejados en menor consumo de energía y gases utilizados en el proceso.

Un estudio sobre el efecto que tiene la relación V/III sobre las características estructurales (**fig. 4.6**), como: el parámetro de red, deformación, esfuerzo y densidad de dislocaciones. Para una relación de 1000 se observó una mejor calidad cristalina, con menores esfuerzos y deformación de la red cristalina en las capas superficiales alejadas del sustrato, como algunos reportes han informado utilizando este valor [6,7]. Pero las mejores características se obtuvieron con una relación de 1500.

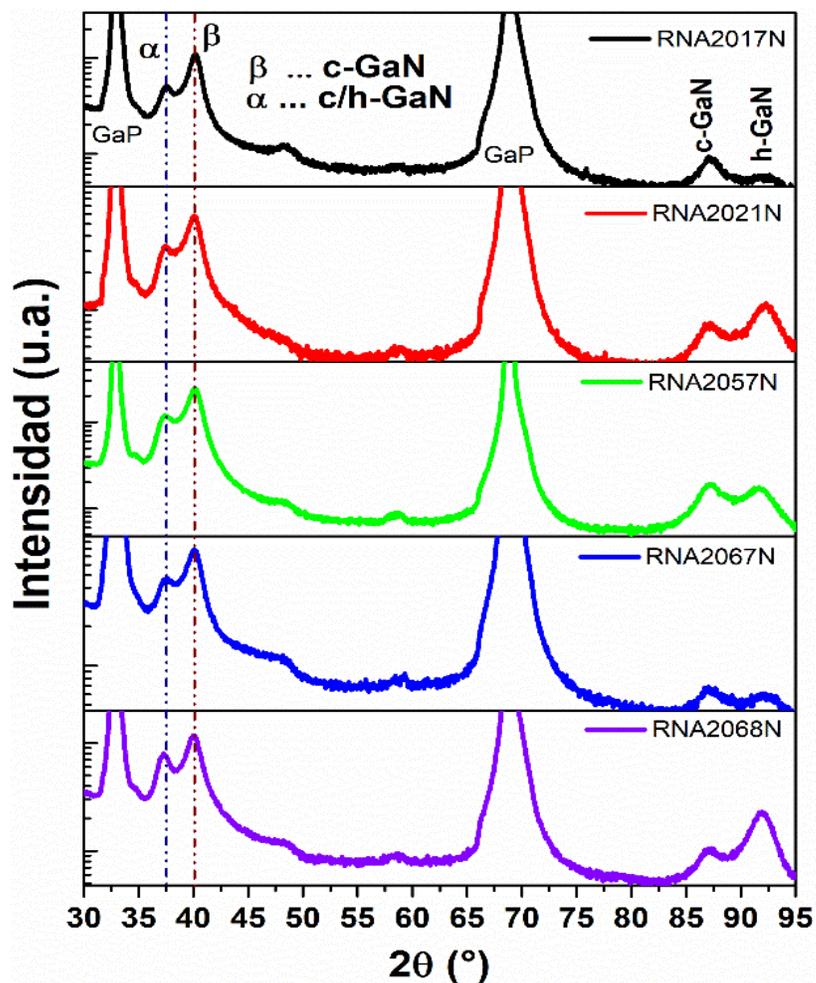


Fig. 4.5 Difractogramas de las películas de c-GaN sin capa buffer.

Tabla 4.3 Condiciones de crecimiento epitaxial sin capa buffer (con una temperatura de nitrificación de 950 °C y 15 min en todas las muestras).

Muestra	Flujo NH ₃ (sccm)	Crecimiento epitaxial (°C/min)	Flujos NH ₃ /TMG (sccm)/(sccm)
RNA2017N	400	900/60	500/0.5
RNA2021N	400	900/60	400/0.5
RNA2057N	500	900/65	500/0.5
RNA2067N	750	900/60	750/0.5
RNA2068N	500	900/60	500/0.5

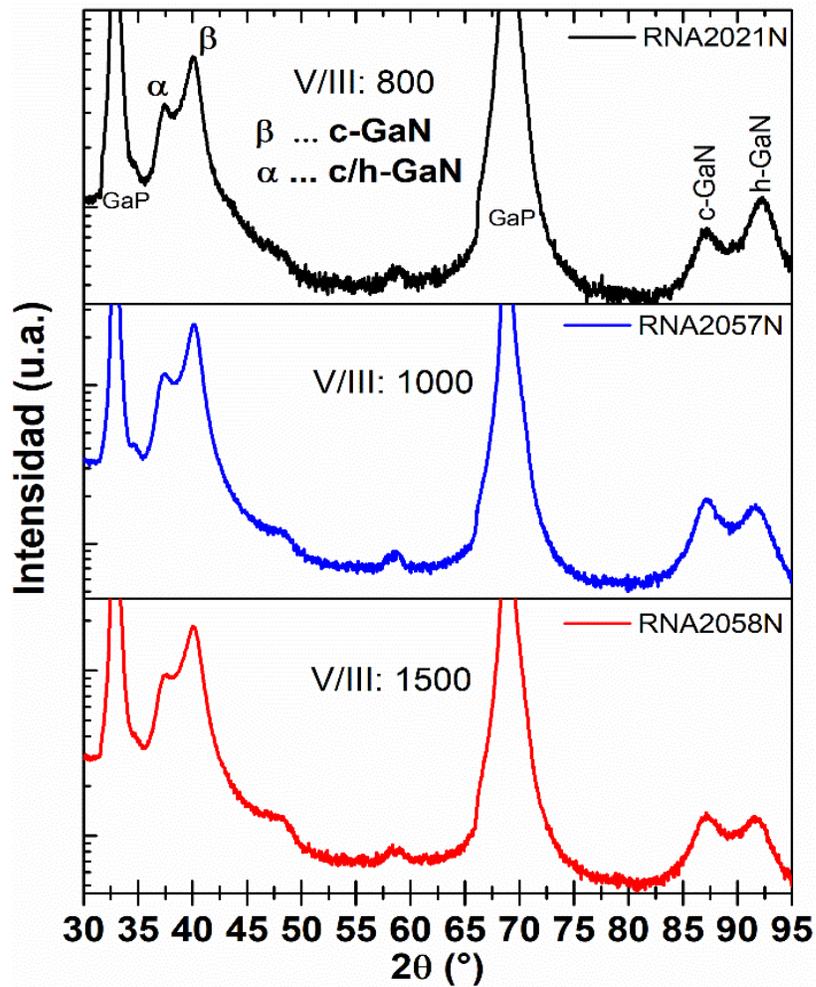


Fig. 4.6 Efecto de la relación V/III en las propiedades estructurales del c-GaN.

Tabla 4.4 Parámetros estructurales de c-GaN con efecto de la relación V/III.

Relación V/III	P. de red-GaN (nm)	Deformación (ϵ)	Esfuerzo (GPa)	Densidad de dislocación (cm^{-2})	FWHM
800	0.4506	0.08	0.022	7.25E+10	1.02
1000	0.4499	0.02	0.062	6.82E+10	0.99
1500	0.4507	0.05	0.015	7.97E+10	1.07

4.1.3. Optimización del crecimiento epitaxial

El segundo proceso de crecimiento epitaxial (**fig. 3.4b**) consistió en crecer una capa buffer, después del proceso de nitrización. En la **Tabla 4.5** se muestran las condiciones de crecimiento de algunas muestras. La capa buffer nos ayuda a detener o disminuir la propagación de defectos hacia la superficie del crecimiento epitaxial de c-GaN, así como mejorar la nucleación de GaN cuando se realiza el crecimiento epitaxial [8].

Tabla 4.5 Condiciones de crecimiento de c-GaN con capa buffer, (flujo constante de 500 sccm de NH₃ en nitrización y con una temperatura de 900 °C y 15 min en el proceso de recristalización en todas las muestras).

Muestra	Nitrización (°C/min)	Capa buffer (°C/min)	Flujos NH ₃ /TMG (sccm/sccm)	C. epi. (°C/min.)	Flujos NH ₃ /TMG (sccm/sccm)
RNA2089N	950/15	520/04	500/0.6	900/30	500/0.5
RNA2095N	950/60	520/05	500/0.6	900/60	500/0.5
RNA2099N	950/60	520/05	500/0.6	900/120	500/0.5
RNA2100N	950/15	520/05	500/0.6	900/60	500/0.5
RNA2101N	950/20	520/05	500/0.6	900/90	500/0.5
RNA2104N	950/10	520/05	500/0.6	900/60	500/0.5
RNA2105N	950/08	520/05	500/0.6	900/60	500/0.5

Utilizando las condiciones optimizadas en el crecimiento epitaxial sin capa buffer de la sección anterior, se ajustaron los tiempos de crecimiento para obtener películas de c-Ga de buena calidad cristalina, con bajos defectos y menor cantidad de esfuerzos en la red.

En la **fig. 4.7** se presentan los difractogramas de DRX de las muestras con capa buffer de GaN, observamos el incremento del pico del c-GaN en 40° correspondiente al plano (200), manteniendo el mismo patrón que las muestras analizadas en la **fig. 4.2** con mayor intensidad.

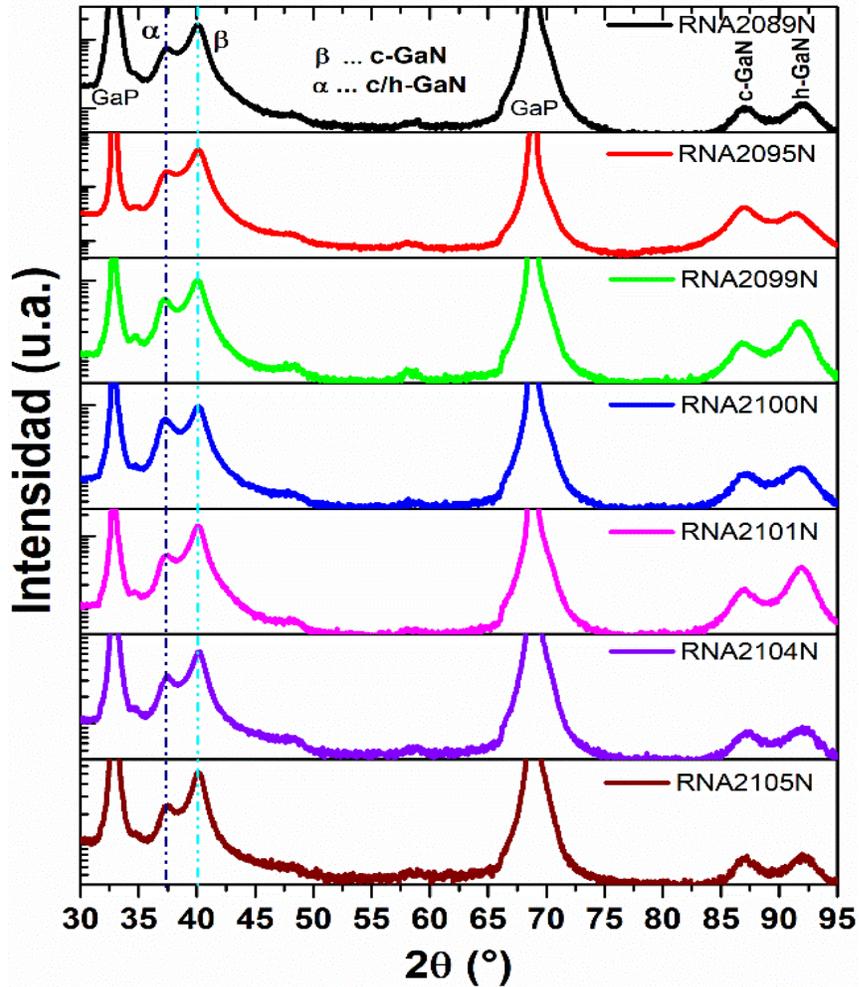


Fig. 4.7 Difractogramas de GaN con incorporación de una capa buffer antes del crecimiento epitaxial de c-GaN

Se tomaron muestras representativas de cada proceso para el estudio de las propiedades estructurales del c-GaN, en la **fig. 4.8** se pueden ver los espectros de DRX de muestras con los diferentes procesos. En la **Tabla 4.7** se presentan los resultados de las propiedades estructurales que las muestras presentan como parámetros de red, deformación, esfuerzo, así como densidad de dislocaciones.

Se obtuvieron valores de parámetro de red entre 0.449 y 0.4511 nm, que son consistentes con los valores reportados en la literatura como se observa en la **tabla 4.6** [1,9,10,11]; además se obtuvo el parámetro de red del GaP de 0.545 nm, por lo tanto, obtuvimos un desajuste de red del GaN y el sustrato de ~17 %. Se observa que el

mejor procedimiento para el crecimiento epitaxial de GaN es cuando se utiliza una capa buffer.

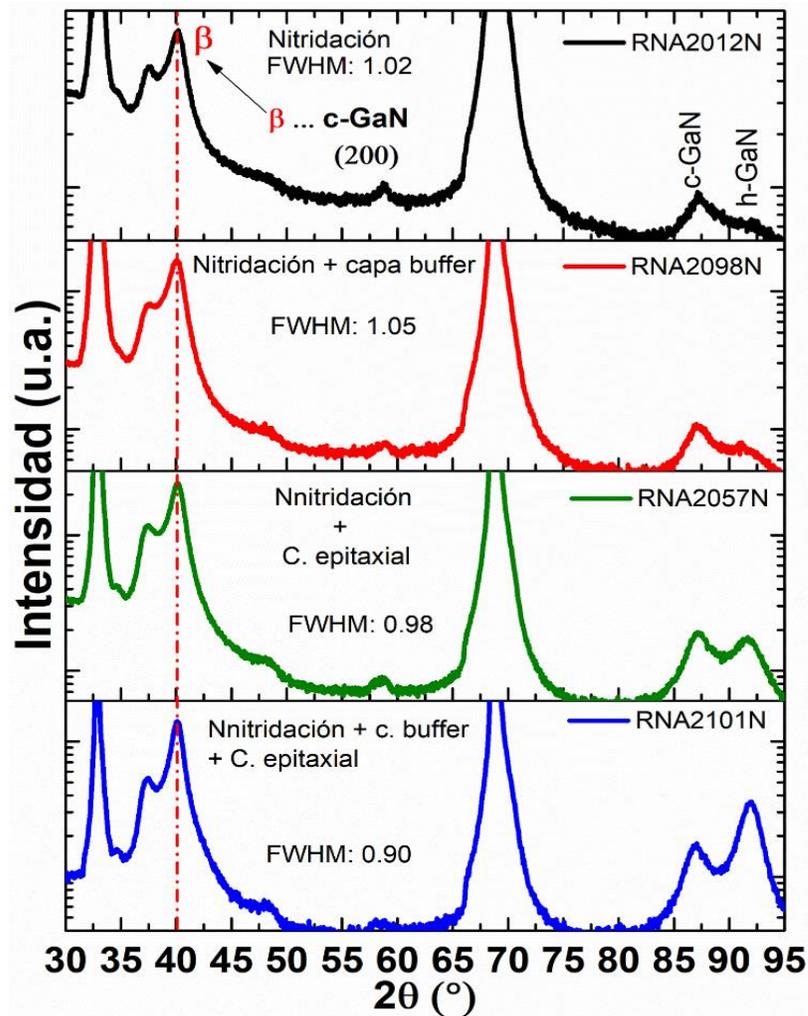


Fig. 4.8 Difractogramas de las diferentes etapas, a) nitrificación de sustrato de GaP, b) crecimiento de capa buffer sobre nitrificación, c) crecimiento epitaxial sin capa buffer sobre película nitrificada y d) crecimiento epitaxial sobre capa buffer de c-GaN.

Tabla 4.6 Parámetro de red del c-GaN comparado con los reportados en literatura, crecidos en diferentes sustratos.

Substrato	P. de red c-GaN (nm)	Referencias
GaP	0.449-0.451	En este trabajo
3C-SiC	0.450	[9]
GaAs	0.451	[10,11]
GaP	0.446	[1]

Tabla 4.7 *Parámetros de las diferentes etapas del proceso, nitrificación, capa buffer, crecimiento epitaxial sin capa buffer y crecimiento epitaxial con capa buffer.*

Etapas del Proceso	P. de red-GaN (nm)	Deformación (ϵ)	Esfuerzo (GPa)	Densidad de dislocaciones (cm^{-2})	FWHM
Nitrificación	0.4501	0.02	0.060	7.024E+10	1.01
Capa buffer	0.4511	0.04	0.120	7.592E+10	1.05
Crecimiento epitaxial sin capa buffer	0.4499	0.02	0.053	6.613E+10	0.98
Crecimiento epitaxial con capa buffer	0.4501	0.02	0.060	5.578E+10	0.90

4.2. Espesores de la película de GaN

Los espesores fueron determinados por mediciones mediante la técnica de elipsometría. Para un tiempo de nitrificación del sustrato de 15 min se obtuvieron espesores de alrededor de 490 nm (± 25 nm), mientras que para 60 min fue mayor 1800 nm (± 40 nm). También observamos, a un tiempo de 15 min eran necesarios para obtener un template adecuado para realizar el crecimiento epitaxial de c-GaN.

La velocidad de crecimiento epitaxial de las películas de GaN fue de alrededor de 1 μm por hora. En la **fig. 4.9** se presentan los espesores obtenidos para los diferentes tiempos de crecimiento, incluyendo todas las capas obtenidas en el proceso, alcanzando alrededor de 2 μm de espesor en un tiempo de 120 min. En tiempos mayores a 90 min se observa una reducción de la velocidad de crecimiento. En tiempos de crecimiento largos la temperatura ya no se encuentra focalizada en la región del suscepto, extendiéndose a lo largo de todo el reactor y como consecuencia ocurre una descomposición de los precursores antes de llegar al área de crecimiento.

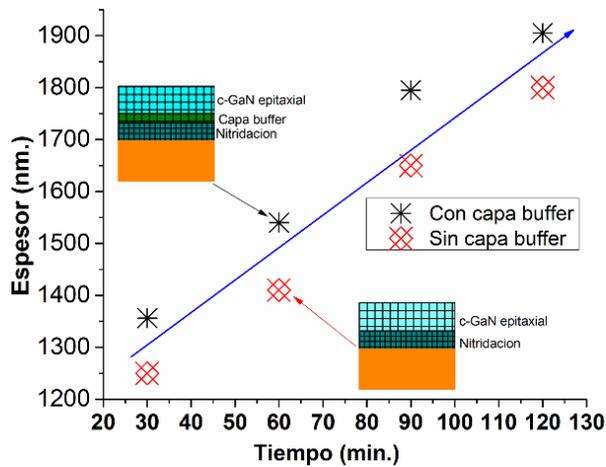


Fig. 4.9 *Espesores de las películas de GaN en función del tiempo en los dos procesos del crecimiento epitaxial.*

En el proceso de crecimiento epitaxial sin capa buffer se observó espesores menores comparados con las muestras con capa buffer.

4.3. Espectroscopia Raman

El análisis de la composición relativa de las películas, cubica y hexagonal, se realizó mediante espectroscopia Raman, utilizando un láser azul, con una longitud de onda de excitación de 473 nm. Las muestras fueron seleccionadas en función de los diferentes procesos realizados como nitrificación del sustrato, crecimiento epitaxial, crecimiento de una capa buffer después de la nitrificación y crecimiento epitaxial después de la capa buffer. En la **fig. 4.10** se muestran los espectros Raman obtenidos de 4 diferentes muestras, una con nitrificación (RNA2012N) donde se presenta un pico en 555 cm^{-1} que corresponde al fonón TO del c-GaN [1,12,13], además de la presencia del fonón E_2 del h-GaN en 569 cm^{-1} [16], (**fig. 4.10a**). Para la segunda muestra se observó el mismo patrón de los picos de ambas fases cristalinas; se observa una menor intensidad de los picos ya que el proceso de nitrificación se realizó con un tiempo más corto. Además, en

esta muestra se observa la separación de dos picos, causado por la separación de fases de cúbico a hexagonal [14,15] por los espesores más gruesos en esta etapa del proceso, **(fig. 4.10b)**.

En la muestra con crecimiento epitaxial inmediatamente después de la nitridación (RNA2057N) se observa una mayor definición del pico TO para el c-GaN, además del fonón E_2 del h-GaN, pero con un desplazamiento hacia el azul debido a los esfuerzos generados por el proceso de crecimiento **(fig.4.10c)**.

Para la muestra RNA2101N se optimizaron las condiciones en todos los procesos, lo cual confirma que obtenemos un crecimiento epitaxial en la fase cubica, presentando un solo pico del fonón TO del c-GaN, teniendo una superficie con la ausencia de la fase hexagonal. (Al realizar las mediciones con un láser azul con una longitud de onda de 473 nm la profundidad de penetración es menor en el GaN). Aunque la fase hexagonal se encuentra presente, se encuentra por debajo de la interfaz del sustrato y el templete de GaN obtenido por nitridación.

Se realizó el cálculo del esfuerzo en películas de las muestras obtenidas en las diferentes etapas, en la **fig. 4.10** observamos el desplazamiento del modo vibracional E_2 de h-GaN hacia el azul (este modo vibracional tiene mayor sensibilidad a los cambios en los esfuerzos en la película, teniendo un valor de 567.6 cm^{-1} en una estructura relajada [14,15,16]) alrededor de 1.4 cm^{-1} , lo cual indica un esfuerzo de compresión [1,3] de 0.32 GPa entre el c-GaN y el sustrato de GaP; señalado en las muestras RNA2012N, RNA2098N Y RNA2057N.

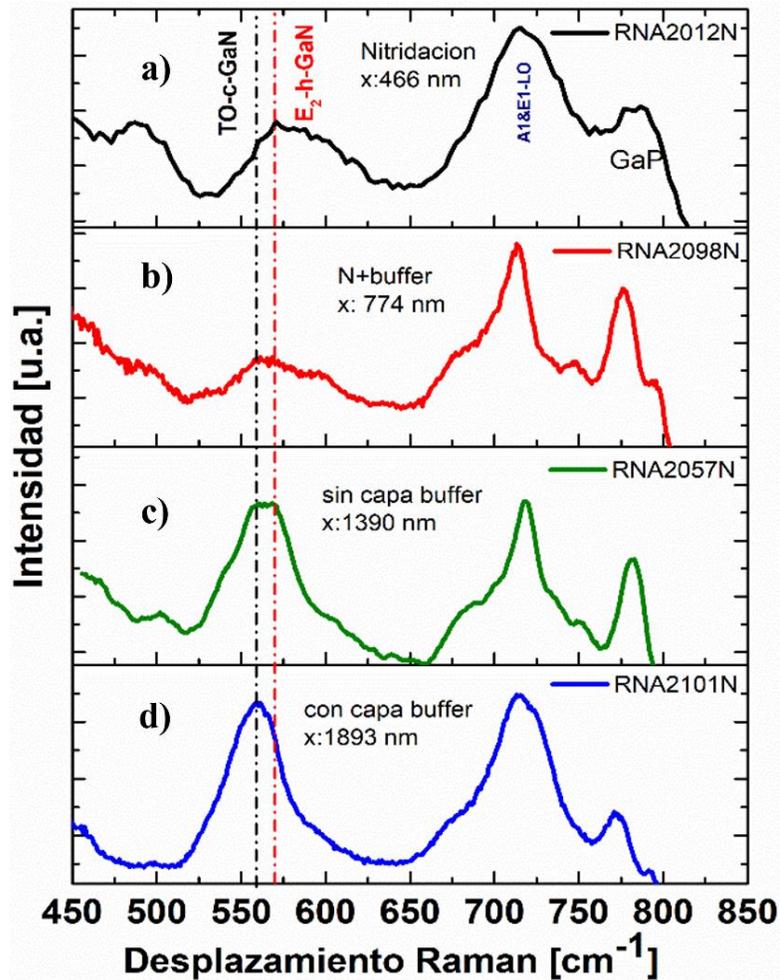


Fig. 4.10 Espectros Raman de muestras en diferentes etapas del crecimiento de *c*-GaN, a) nitridación, b) capa buffer, c) crecimiento epitaxial sin capa buffer y d) crecimiento epitaxial con capa buffer.

Observamos que para RNA2101N (fig. 4.10d), que corresponde a la muestra con una capa buffer antes del crecimiento epitaxial de *c*-GaN, solo obteniendo el pico del *c*-GaN. La ausencia de la fase hexagonal (modo vibracional E_2 de *h*-GaN) en la superficie obtenemos una capa de *c*-GaN más relajada, es decir, libre de esfuerzos residuales. El estudio de los esfuerzos en las películas se realizó mediante el desplazamiento de la frecuencia del fonón Raman de la fig. 4.10 [17]. De los resultados se concluye que con el crecimiento de una capa buffer después de la nitridación se obtiene una capa superficial de *c*-GaN con mejores propiedades estructurales.

4.4. Análisis superficial mediante microscopio de fuerza atómica (AFM) y microscopio electrónico de barrido (SEM)

El análisis de la morfología superficial de las muestras en los diferentes procesos se observa en la **fig. 4.11** obtenidas por microscopio de fuerza atómica. Se determinó la rugosidad de las muestras. Como se visualiza en la superficie de la muestra con nitridación esta presenta el modelo de crecimiento Stranski-Krastanov [8], continuando con el crecimiento del GaN a baja temperatura (capa buffer), realizando posteriormente una recristalización a altas temperaturas, continuando con el crecimiento a través de los centros de nucleación y coalescencia de las islas.

La **fig. 4.11b** se pueden observar lugares vacíos debido al crecimiento a baja temperatura, pero al realizar la recristalización térmica a alta temperatura se obtiene una nucleación más uniforme, apta para realizar el crecimiento epitaxial de c-GaN. Con lo cual se obtiene una mejor superficie en las películas superiores como se observa en la **fig. 4.11c**. Los valores de rugosidad se presentan en la **tabla 4.8**.

En la **fig. 4.12** se muestran las micrografías AFM de las superficies obtenidas al varias la relación V/III de los flujos de NH_3 y TMG en 800, 1000 y 1500 durante el proceso de crecimiento.

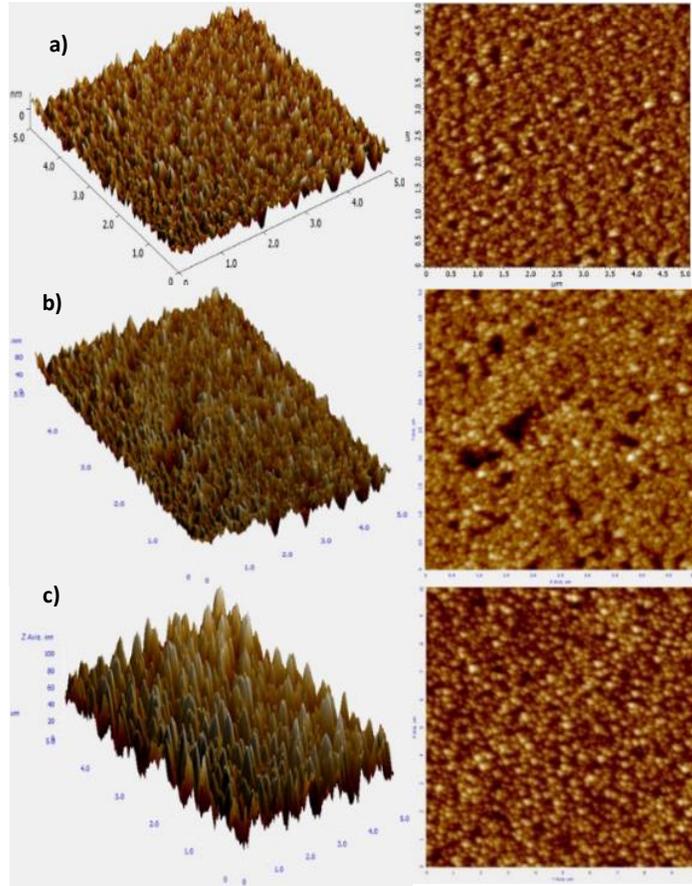


Fig. 4.11 Micrografías AFM de la superficie de muestras con a) nitridación, b) capa buffer y c) crecimiento epitaxial de c-GaN.

Tabla 4.8 Rugosidad superficial de películas obtenidas en los diferentes procesos, nitridación de sustrato GaP, capa buffer sobre nitridación y crecimiento epitaxial de c-GaN.

Proceso	Espesor de GaN (nm)	Rugosidad (nm)
Nitridación	450	14
Capa buffer	770	12
C. epitaxial c-GaN	1800	14.6

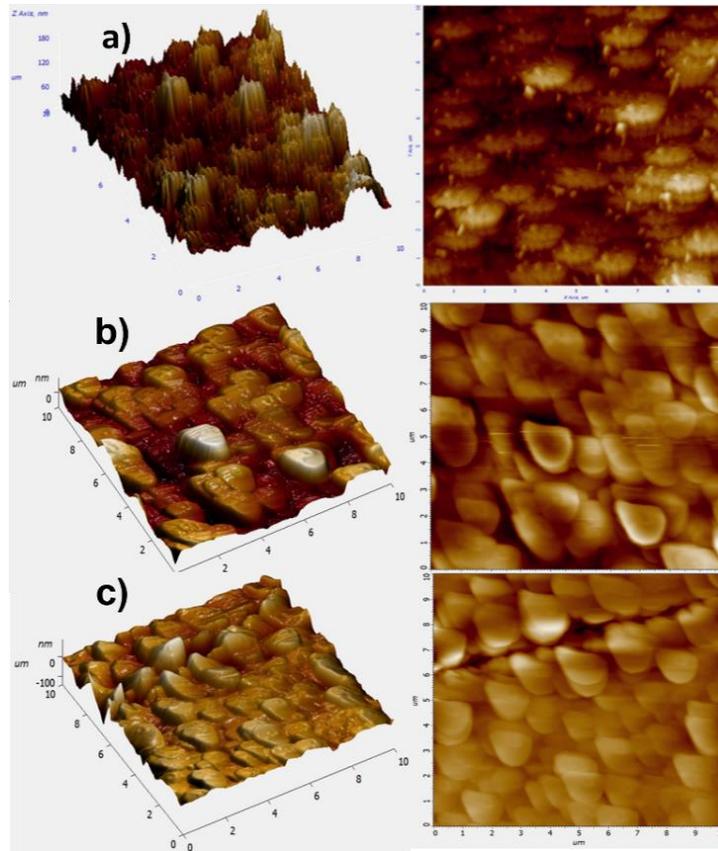


Fig. 4.12 Efecto de la relación V/III de NH_3 y TMG en la morfología superficial del c-GaN.

Tabla 4.9 Rugosidad superficial por efecto en la relación V/III de flujos de NH_3 y TMG en el crecimiento epitaxial de c-GaN.

Relación V-III	Espesor de GaN (nm)	Rugosidad (nm)
800	1340	37.92
1000	1343	32.86
1500	1333	37.63

En la **tabla 4.8** se presentan los valores de rugosidad, espesores y tamaños de granos. Para una relación de 1000 se observó una rugosidad menor. Para una relación de 1500, el tamaño de grano fue el menor, donde la mayor concentración de NH_3 induce una mejor nucleación en la superficie. Además, se puede observar en la tabla los valores de rugosidad disminuye en más de un 50 %, al incorporar la capa buffer comparado con las muestras donde se realiza el crecimiento epitaxial inmediatamente después de la

nitridación. Los espesores que se presentan en la tabla son los obtenidos durante todo el proceso, desde nitridación hasta crecimiento epitaxial.

En la **fig. 4.13** se observa la sección transversal de las capas de los procesos para la obtención de c-GaN, la muestra analizada (RNA2095N) es con las condiciones optimizadas con capa buffer y crecimiento epitaxial de c-GaN (ver tabla 4.5 para las condiciones de crecimiento). Podemos observar una superficie compacta desde la nitridación hasta la capa epitaxial. Pueden observarse algunos huecos en la interfaz del sustrato y el templete de GaN formado en el proceso de nitridación del sustrato. La muestra analizada contenía evaporación de contactos metálicos de Ni/Au, y se observa en la parte superior esta capa metálica, con una separación de la película de c-GaN, esto debido a una mala adherencia a la superficie de nuestra película de c-GaN. Además, se ha realizado otro estudio donde comparan el crecimiento de GaN en sustratos de GaP y GaAs, donde se le atribuye el efecto de las diferencias de energías de enlace favoreciendo al sustrato de GaP para el crecimiento de c-GaN con mejores propiedades estructurales [3,18].

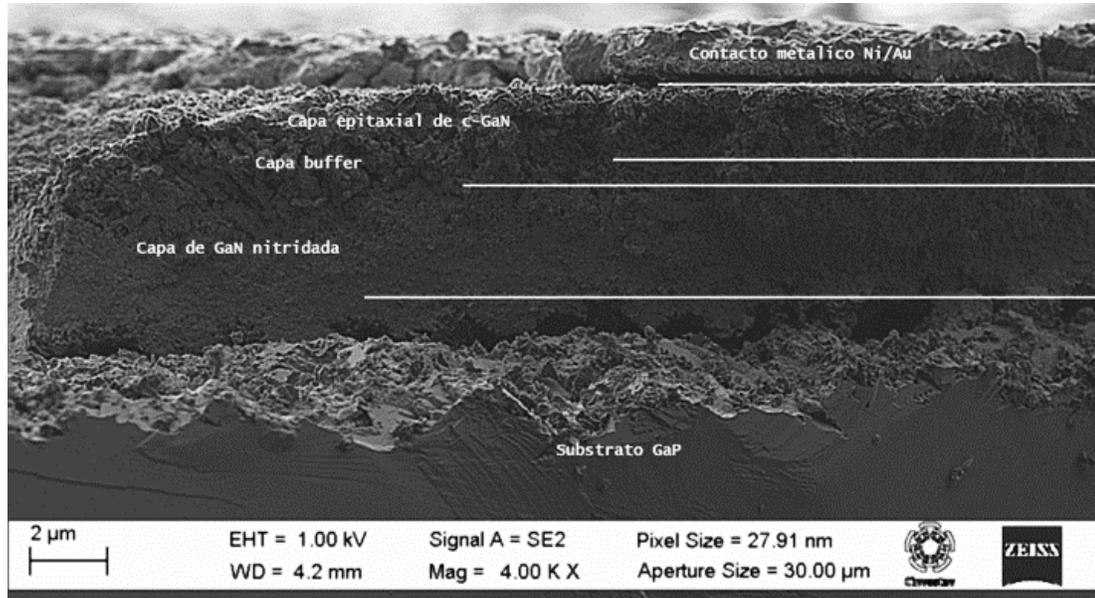


Fig. 4.13 Micrografías SEM de la sección transversal de una capa de c-GaN.

4.5. Efecto Hall

Mediante la técnica de efecto Hall se determinaron las concentraciones de portadores mayoritarios. Se obtuvieron los valores de movilidad, resistividad y concentración de portadores mayoritarios, en los dos procesos de crecimiento epitaxial. En la **Tabla 4.9** se presentan los promedios obtenidos en dos lotes de 6 muestras cada uno, donde se observaron valores similares, pero con mejor movilidad en las muestras crecidas con una capa buffer, confirmando que la incorporación de esta capa mejora las características eléctricas del c-GaN. La concentración de portadores no se ve afectado, ya que la relación V/III se mantuvo en 1500 para ambos lotes de muestras.

Tabla 4.10 Promedio de parámetros eléctricos de muestras de c-GaN crecidas sin y con una capa buffer.

Muestra	Resistividad ($\Omega \cdot \text{cm}$)	Movilidad (cm^2/Vs)	Concentración de electrones (cm^{-3})	Espesores de c-GaN (nm)
Sin capa buffer	0.243 (± 0.1)	12.69 (± 2.1)	3.10E+18 (± 1.12)	1380 (± 130)
Con capa buffer	0.155 (± 0.05)	14.32 (± 3.3)	3.35E+18 (± 8.23)	1580 (± 158)

Además, se observó que los espesores tienen una influencia mínima en la concentración de portadores mayoritarios de electrones. Mientras que en la resistividad observamos una diferencia significativa de casi el 50 % mayor en las muestras sin capa buffer. En todas las muestras se obtuvo una conductividad tipo n, atribuido a las vacancias de Ga, ya que se comportan como impurezas donadoras lo que aumenta la concentración de electrones.

4.6. Caracterización eléctrica del dispositivo

Al determinar las características de las películas de c-GaN obtenidas, como parámetros estructurales, morfológicos y eléctricos se decidió realizar la fabricación de un dispositivo tipo diodo Schottky, como se detalló en el capítulo anterior (sección 3.5). En la **fig. 4.14** se presenta el diagrama de bandas de la unión metal-semiconductor de c-GaN en equilibrio. Se muestran algunos valores calculados como la altura de barrera ($q\phi_{bn}$), la barrera de potencial (qV_{bi}) y el ancho de la región de carga espacial (W), utilizando las ec. 9, 10 y 12 .

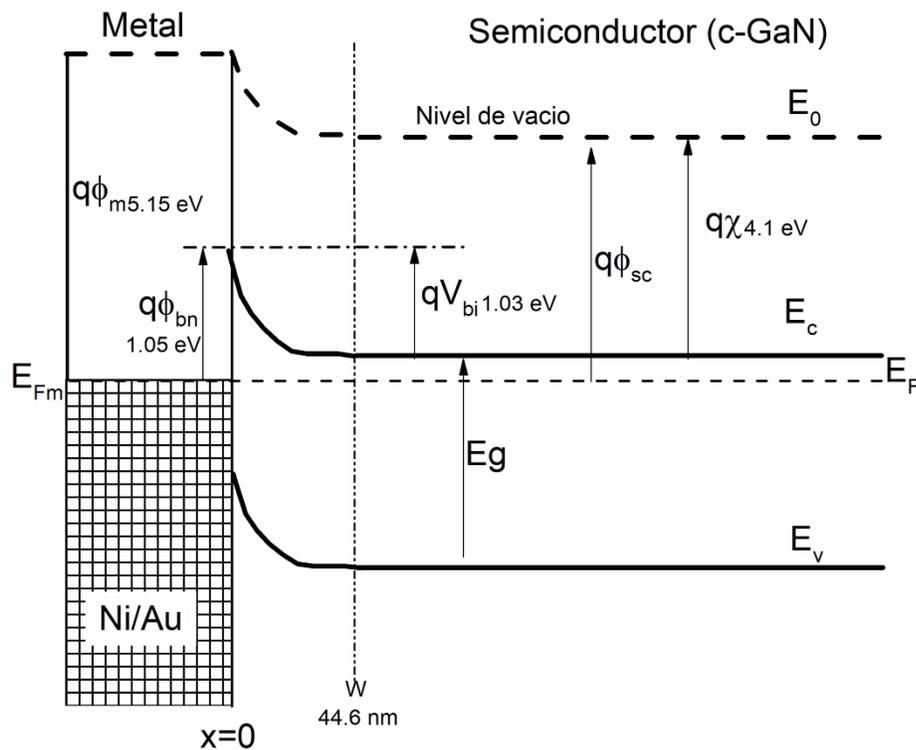


Fig. 4.14 Diagrama de bandas en equilibrio de la unión metal-semiconductor, con $\phi_m > \phi_{sc}$, para c-GaN tipo n.

Analizaremos el comportamiento del diodo Schottky sobre nuestras películas de c-GaN. La curva corriente-voltaje (I-V) se presenta en la **fig. 4.15**, en ésta se muestran las curvas I-V de dos diodos tipo Schottky formadas a partir de GaN en fase cúbica y hexagonal, ambas tipo-n, con una concentración de electrones alrededor de 5.0×10^{17}

cm^{-3} para c-GaN y de aproximadamente $1.0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ para h-GaN. La muestra de h-GaN se realizó sobre sustrato de zafiro. Las mediciones se realizaron con las mismas condiciones de fabricación y medición I-V. Cabe resaltar que se realizaron cuantiosas pruebas para la fabricación de la unión M-S, aquí solo presentamos un ejemplo de una unión típica utilizando el semiconductor c-GaN tipo n.

Con las curvas I-V se determinaron los voltajes de umbral o voltaje de codo (V_c), de los dos diodos, obteniendo un valor de 0.83 V para c-GaN y 0.41 V para el h-GaN. Esto fue determinado a partir de la pendiente de la corriente en polarización directa con el intercepto en el eje de las abscisas (fig. 4.15a). A partir del voltaje de umbral obtenido en los diodos, se observa que presentan la característica de una unión M-S.

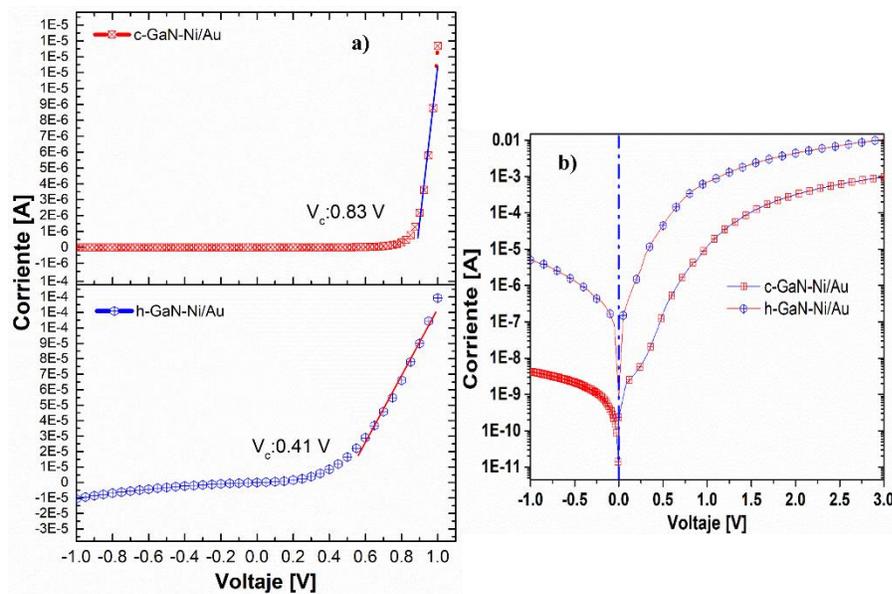


Fig. 4.15 Curva corriente-voltaje (I-V) de diodos Schottky de c-GaN y h-GaN, a temperatura ambiente; a) escala lineal y b) logarítmica.

La diferencia tan grande en los voltajes de codo de los diodos es atribuida a la dependencia de las concentraciones de portadores y la altura de barrera dado por [19,20]:

$$V_c = \frac{q\phi_{bn}}{q - V_n} \quad (26)$$

$$\text{Donde } V_n = \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{N_c}{N_D}\right),$$

La extracción de los parámetros eléctricos de los diodos se obtiene a partir de la gráfica I-V de la **fig. 4.15b**. Ésta se realizó en un intervalo de voltaje más amplio en polarización directa (-1 a +3 V), para poder observar el comportamiento a voltajes más altos.

En la **fig. 4.15b** observamos que la corriente de fuga para el diodo basado en h-GaN es alrededor de 10^{-6} A, mientras que en el diodo de c-GaN obtuvimos una corriente de fuga mucho menor hasta 4 órdenes de magnitud más bajo, atribuimos esto a las características eléctricas, morfológicas y estructurales de las películas de GaN. Aunque en el diodo basado en h-GaN presenta una mayor corriente de hasta los 10 mA.

Los diodos presentan un buen comportamiento de rectificación, lo cual nos sugiere que el transporte de corriente podemos describirla con el modelo de emisión termiónica (ET), como otros autores sugieren estudiar este tipo de dispositivos, utilizando este material (GaN) [21-25]. Con el modelo de ET, cuando se considera un diodo Schottky no ideal, considerando el efecto de resistencia en serie con respecto a los voltajes en polarización directa ($V > \frac{3kT}{q}$), la corriente del diodo estará determinado por [20,26]:

$$I = I_0 \exp\left(\frac{qV}{nkT}\right) \left[1 - \exp\left(-\frac{qV}{kT}\right)\right] \quad (27)$$

Donde $V = V - IR_s$ es el voltaje aplicado, k constante de Boltzmann, T es la temperatura, I_0 es la corriente de saturación, n es el factor de idealidad del diodo, estos dos últimos están dados por [28]:

$$I_0 = AA * T^2 \exp\left(-\frac{q\phi}{kT}\right) \quad (28)$$

$$n = \frac{q}{kT} \left(\frac{dv}{d \ln I} \right) \quad (29)$$

Aquí A es el área del diodo, A^* es la constante efectiva de Richardson ($26.4 \text{ A cm}^{-2}\text{K}^{-2}$ para GaN tipo n) [27] y Φ es la altura de barrera del diodo, que está determinado por [28]:

$$\phi_{bn} = \frac{kT}{q} \ln \left(\frac{AA^*T^2}{I_0} \right) \quad (30)$$

A partir de las curvas I-V, aplicando el modelo ET se extrajeron los parámetros de los dos diodos, los resultados se presentan en la **Tabla 4.11**.

Respecto al factor de idealidad obtenido a partir de la Ec. (29) utilizando los datos experimentales de la **fig. 4.15**, se calcularon los factores de idealidad en tres regiones para el diodo de c-GaN; la primera y tercera región se obtuvo un n de alrededor de 4, y la segunda región un valor de 2.6. por otro lado, en el diodo basado en h-GaN, dos factores de idealidad se calcularon con valores de n de 2.59 y 3.92 (**fig. 4.16**), valores similares en los dos diodos, con la diferencia que en el diodo de c-GaN se presentan otros efectos en el la interfaz del semiconductor y el metal, o generación de una capa interfacial.

Al obtener valores de n mucho mayores a los de un diodo ideal (1), los mecanismos de transporte estarán limitados por una combinación de mecanismos de generación-recombinación, efecto túnel y por saltos o también llamado hopping [29,30]. otros factores que se le atribuye a los altos valores de n son una mala homogeneidad de los contactos en el material GaN, un área muy grande de contacto (0.0314 cm^2), defectos superficiales en el material debido al proceso de crecimiento y en general un proceso de fabricación deficiente de los diodos [31-33]. Además, se determinaron valores de R_s a partir de las curvas de la fig. 4.15b se observa el efecto de la resistencia en serie en voltajes mayores a 1.8 V, obteniendo este valor a partir de esta pendiente. Mientras que para la corriente de saturación la ec.(28) fue utilizada (tabla 4.11). No obstante, se obtuvieron resultados similares a los reportados en literatura [33,34].

Por otra parte, al tener una alta concentración de portadores ($> 10^{17} \text{ cm}^{-3}$), el ancho de la barrera es delgada, por lo que los electrones puedan atravesar por efecto túnel, entonces podemos asumir que este mecanismo de transporte está presente [35,36].

En cuanto a la resistencia en serie (R_s) extraída en ambos dispositivos presentan en este parámetro la mayor diferencia. A bajos voltajes generalmente se tiene una característica de corriente-voltaje lineal en polarización directa, se puede apreciar en los gráficos en escala logarítmica, pero se presenta una desviación a mayores voltajes causados por los efectos de la R_s . El efecto de R_s mayor en el diodo basado en c-GaN se debe a la baja corriente de polarización directa con respecto al diodo de h-GaN.

Tabla 4.11 *Parámetros calculados del diodo Schottky c-GaN y h-GaN a temperatura ambiente (300 K).*

Parámetro	c-GaN	h-GaN
Altura de barrera (Φ) [eV]	0.99	0.76
Factor de idealidad (n)	n ₁ :3.93 n ₁ :2.6 n ₂ :4.09	n ₁ :2.59 n ₂ :3.9
Resistencia en serie (R_s) [Ω]	1100	180
Corriente de saturación (I_0) [A]	8.5×10^{-13}	8.51×10^{-8}
Corriente de fuga (I)[A]	1×10^{-9}	5×10^{-6}

En polarización inversa se observa que la corriente no satura. Aquí el mecanismo de conducción es por efecto túnel, como otros autores han reportado, en diodos basados en GaN [37], incluso a altos voltajes (> 20 V) no satura.

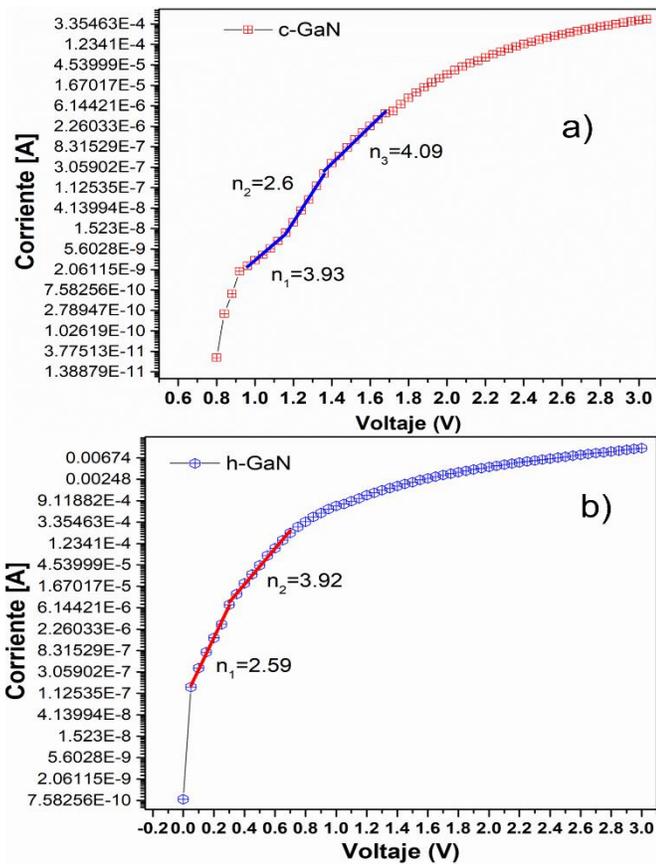


Fig. 4.16 Curva I-V en polarización directa de diodos basados en, a) c-GaN y b) h-GaN, con factores de idealidad.

Además, debido a las bajas movilidades de los portadores de nuestras muestras (ver tabla 4.10) la corriente estará limitada por la zona de carga espacial (SCLC). Movilidades obtenidas mediante mediciones de efecto Hall, donde los portadores inyectados encuentran centros de recombinación y/o trampas, lo que limita la conducción del dispositivo [38]. Estas trampas son causadas por el proceso de crecimiento de los materiales, defectos estructurales que se generan mayormente por dislocaciones.

Utilizando un circuito de tres diodos **fig. 4.17** [39,40], se realizó el modelado de la curva I-V del diodo formado con c-GaN. En la **fig. 4.18**, se presentan las curvas obtenidas experimentalmente y modelada. Obteniéndose un buen ajuste con los valores de factor de idealidad y resistencia R_s calculados a partir de las curvas experimentales. Con el uso de este circuito de tres diodos se ajustó a la curva experimental, ya que se presenta un fenómeno no ideal en el diodo Schottky, lo cual nos permite ajustar los cambios de pendientes en la curva I-V experimental, como se observa en la fig. 4.16a. este efecto podría atribuirse a la formación de estados interfaciales entre en la unión M-S y los diferentes mecanismos de transporte presentes.

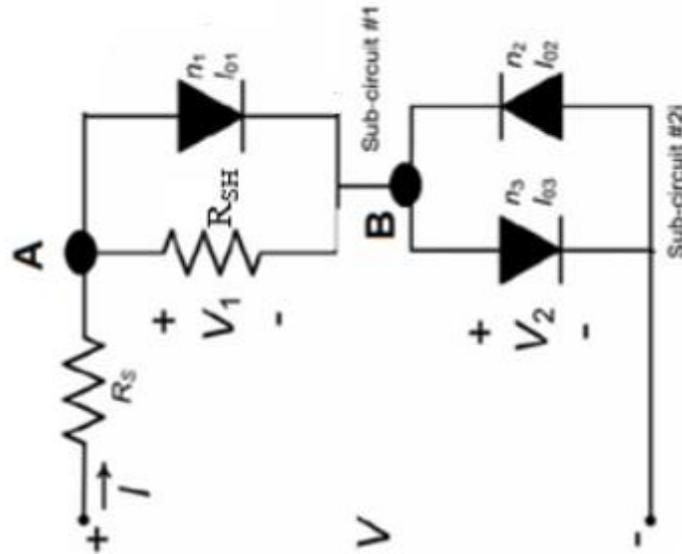


Fig. 4.17 Circuito eléctrico de tres diodos utilizado en el modelado.

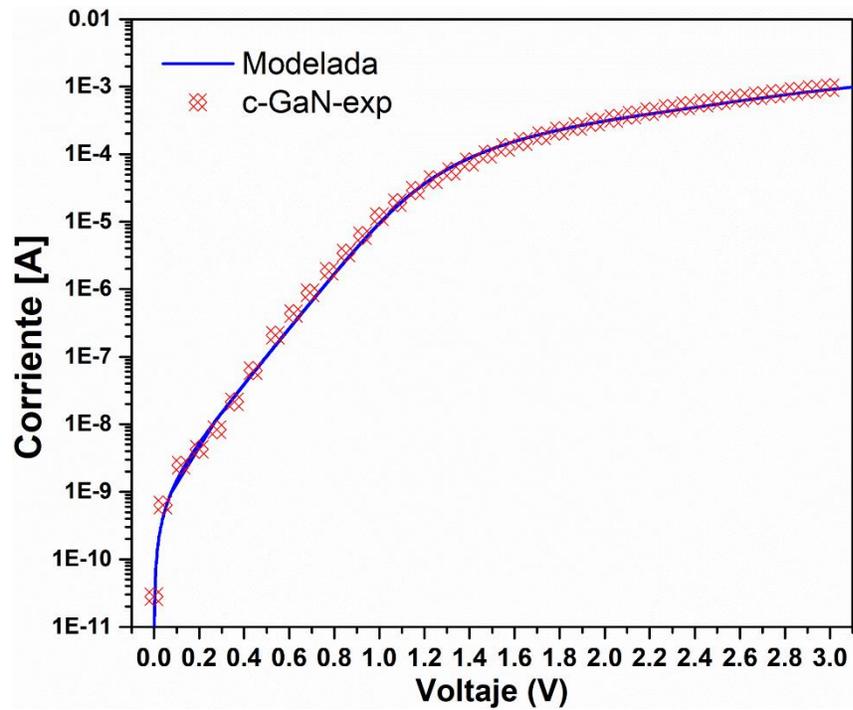


Fig. 4.18 Curvas I-V experimental y modelada del diodo basado en c-GaN, en escala logarítmica.

Se concluyó que el c-GaN para aplicaciones a dispositivos tiene gran potencial, pero se necesitan resolver varios detalles técnicos, en cuanto a crecimiento del material, y el control en el proceso de fabricación de los dispositivos que nos garanticen un buen funcionamiento.

Referencias

- [1]. J.S. Arias-Cerón, H. Vilchis, D.M. Hurtado-Castañeda, V.M. Sánchez-R, *Materials Science in Semiconductor Processing* 74 (2018) 98–101.
- [2]. H. Vilchis et al., *Thin Solid Films* 520 (2012) 5191–5194
- [3]. J.A. Santis, C.A. Marín-García, V.M. Sánchez-R., *Journal of Crystal Growth* 601(2023)126944.
- [4]. L.Y. Lee, et al., *Journal of Crystal Growth* 524 (2019), 125167.
- [5]. Lok Yi Lee, et al., *J. Appl. Phys.* 125, 105303 (2019).
- [6]. M. Moret, et al., *Phys. Stat. Sol. (a)* 176, 493 (1999)
- [7]. C.H. WEI, et al., *Journal of Electronic Materials*, Vol. 29, No. 3, 2000.
- [8]. C. A. Marín-García, J. S. Arias Cerón, V. M. Sánchez-R, *Journal of Materials Science: Materials in Electronics* (2020) 31:7455–7460.
- [9]. Martin Frentrup, et al., *J. Phys. D: Appl. Phys.* 50 433002, 2017.
- [10]. X. H. Zheng et al., *Journal of Crystal Growth* 250 (2003) 345–348.
- [11]. S.V. Novikov, *Journal of Vacuum Science & Technology B* 28 (2010) C3B1.
- [12]. P. Saengkaew et al. *Journal of Crystal Growth* 411 (2015) 76–80.
- [13]. Tabata et al., *Journal of Applied Physics* 79, 4137 (1996)
- [14]. WEN LI et al. *Optical Materials Express*/Vol. 9, No. 4/1 April 2019.
- [15]. E Alarcon-Llado et al., *Semicond. Sci. Technol.* 24 (2009) 115019.
- [16]. K. Hiramatsu, et al., *Jpn. J. Appl. Phys.* 32 (Pt. 1) (1993) 1528–1533.
- [17]. Zhang, L., Yu, J., Hao, X. et al. *Influence of stress in GaN crystals grown by HVPE on MOCVD-GaN/6H-SiC substrate. Sci Rep* 4, 4179 (2014).
- [18]. Lacklison, et al., *Journal of Applied Physics* 78, 1838 (1995).
- [19]. Suzue et al., *Journal of Applied Physics* **80**, 4467 (1996); doi: 10.1063/1.363408
- [20]. S. M. Sze and Kwok K. Ng, *physics of semiconductor devices*, Third edition, New Jersey, John Wile & Sons, Inc. 2007.
- [21]. H. Gu, et al., *Journal of Alloys and Compounds* 780 (2019) 476-481.
- [22]. P. Kruszewski, et al., *Materials Science in Semiconductor Processing* 96 (2019) 132-136.

- [23]. S. Ghimire and J. Dho, *Physica B: Condensed Matter* 564 (2019) 1-4.
- [24]. D. J. As, *APPLIED PHYSICS LETTERS* 88, 152112, 2006.
- [25]. Gohil, T., Whale, J., Lioliou, G. et al. X-ray detection with zinc-blende (cubic) GaN Schottky diodes. *Sci Rep* 6, 29535 (2016).
- [26]. E.H. Rhoderick, R.H. Williams, *Metal-Semiconductor Contacts*, 2nd ed., Clarendon, Oxford, 1988
- [27]. M. Drechsler, *Jpn. J. Appl. Phys.* 34 (1995) L1178.
- [28]. S. Aydogan et al. / *Microelectronic Engineering* 87 (2010) 2525–2530
- [29]. V. S. Balderrama et al., *IEEE Journal of Photovoltaics*, vol. 6, no. 2, pp. 491-497, 2016.
- [30]. T. Kirchartz, F. Deledalle, P. S. Tuladhar, J. R. Durrant, and J. J. T. J. o. P. C. L. Nelson, "On the differences between dark and light ideality factor in polymer: fullerene solar cells," *The Journal of Physical Chemistry Letters*, vol. 4, no. 14, pp. 2371-2376, 2013.
- [31]. M Ravinandan et al., *Semicond. Sci. Technol.* **24** (2009) 035004.
- [32]. Jürgen H. Werner, Herbert H. Güttler, *J. Appl. Phys.* 69 (1991) 1522.
- [33]. V. Rajagopal Reddy, et al., *Solid State Communications* 179 (2014) 34–38.
- [34]. Yaqi Wang, *GaN-Based Schottky Diode*, 2018,
- [35]. G. Greco et al. / *Applied Surface Science* 383 (2016) 324–345.
- [36]. LU et al., *IEEE TRANSACTIONS ON ELECTRON DEVICES*, VOL. 58, NO. 7, 2011.
- [37]. Chiguvare, et al., *J. Appl. Phys.* 2003, 94, 2440–2448.
- [38]. Roslan, N.A. et al., *Investigation of Charge Transport Properties in VTP: PC71BM Organic Schottky Diode. Electronics* 2022, 11, 3777.
- [39]. F. J. García-Sánchez et al., "Modelling solar cell S-shaped IV characteristics with DC lumped-parameter equivalent circuits a review," *Facta Universitatis, Series: Electronics and Energetics*, vol. 30, no. 3, pp. 327-350, 2017.
- [40]. F. J. García-Sánchez, et al., "Lumped parameter modeling of organic solar cells' S-shaped I–V characteristics," *IEEE Journal of Photovoltaics*, vol. 3, no. 1, pp. 330-335, 2012.

Capítulo 5. Conclusiones

Se obtuvieron templates de c-GaN a partir de nitrificación de substrato de GaP con buena calidad cristalina, utilizándose para el crecimiento epitaxial de c-GaN.

Se optimizaron las condiciones de nitrificación, como: el flujo de NH₃, tiempo de nitrificación y temperatura.

Se estudiaron dos variantes de crecimiento epitaxial fueron estudiadas para la obtención de c-GaN, con el crecimiento de una capa buffer después de la nitrificación se obtiene una mejor calidad cristalina del c-GaN.

De la caracterización estructural mostro que se presenta rastros de la fase hexagonal, pero esta se presenta por debajo de la interfaz entre el substrato y la superficie del template de GaN obtenido por nitrificación.

Los parámetros de red del c-GaN son consistentes con los reportados en literatura. El desajuste de red entre los substratos y el GaN sigue siendo un desafío que nos garantice una densidad de dislocaciones bajas, así como los esfuerzos en las películas. Mediante DRX se observó que el valor del esfuerzo en las películas oscila entre 0.31 a 0.87 GPa, observamos una reducción de estos en función de los espesores de la capa de GaN.

Mediante análisis Raman se comprueba que la fase cúbica es predominante en la superficie, obteniendo el modo vibracional TO característico de c-GaN.

Las características eléctricas, como movilidad y resistividad tienen una mejora de un 11 y 36 %, respectivamente, al incorporar en el crecimiento una capa buffer. La concentración de electrones fue de $1.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ para las dos variantes de crecimiento empleadas.

Fueron fabricados diodos Schottky a partir de películas de c-GaN y h-GaN crecidas mediante MOCVD. Para la barrera se utilizaron contactos de Ni/Au. A partir de las mediciones de I-V se obtuvieron los parámetros de los diodos, donde el mayor aporte se observa en la corriente de fuga menor a los valores reportados en literatura, siendo menor para el diodo formado por c-GaN.

En cuanto a los efectos de resistencia en serie son mayores en el dispositivo de c-GaN lo cual limita la corriente. Se determinaron los mecanismos de transporte involucrados en los dispositivos, en función de los valores de factores de idealidad en polarización directa, prevaleciendo una combinación en los mecanismos de transporte por generación-recombinación, efecto túnel y saltos o también llamados hopping.

Los altos valores en los factores de idealidad nos indican que se tiene un mal proceso en la fabricación del dispositivo, así como defectos en la superficie de nuestras películas de GaN.

En general, hemos demostrado que puede obtenerse GaN en fase metaestable, a partir de nitrificación de substratos de GaP, en condiciones específicas como el control de la temperatura, flujos de precursores. Mostrando un método viable para la obtención de películas de c-GaN con buena calidad cristalina. Por lo que puede ser aplicado a diferentes campos en dispositivos optoelectrónicos. A pesar de que nosotros tuvimos dificultades en la fabricación del diodo, se puede mejorar el proceso de fabricación y obtener mejores resultados.

Trabajos futuros

Con base a los resultados obtenidos en el estudio de las muestras obtenidas de c-GaN y el dispositivo diodo Schottky se plantean algunos trabajos futuros para complementar este estudio, con un análisis más detallado en algunos puntos como a continuación se plantea.

Realizar estudio con técnicas ópticas, con el objetivo de determinar los parámetros ópticos del c-GaN.

Realizar impurificación del c-GaN tipo p y estudiar sus propiedades.

En cuanto a los diodos fabricados, hacer mediciones a diferentes temperaturas para estudiar el comportamiento de los parámetros extraídos.

Optimizar la fabricación del diodo, utilizando técnicas más elaboradas, para garantizar una mejor calidad del dispositivo. Por otra parte, realizar fabricación de diodos con muestras que presentan diferentes características ópticas, estructurales, etc.

Finalmente, usar otros modelos para validar nuestros resultados de I-V, donde consideren otros mecanismos de transporte en el dispositivo.