

Estudio de películas de GaN crecidas por epitaxia de haces moleculares sobre sustratos de Si en las direcciones (111) y (001) recubiertos con una capa delgada de SiC

M. Cervantes-Contreras, M. López-López, J. Luyo-Alvarado, M. Meléndez-Lira y M. Tamura
 Departamento de Física, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN
 Apdo. Postal 14-740, México, D. F. 07000.

Se estudiaron películas de GaN crecidas sobre sustratos de Si orientados en las direcciones (111) y (001) con capas colchón de SiC (~2.5 nm) por epitaxia de haces moleculares asistido con una fuente de plasma de nitrógeno activado con radio frecuencia. Las películas se caracterizaron por medio de difracción de rayos x en el modo θ - 2θ , microscopía electrónica de barrido, microscopía de fuerza atómica, y fotoluminiscencia a 12 K. Las películas de GaN sobre Si(111) mostraron una preferencia a crecer con la fase hexagonal, mientras que sobre Si(001) crecieron preferentemente con la fase cúbica. En las películas de GaN crecidas en la fase cúbica se obtuvo una mejor calidad cristalina.

We have studied GaN films grown by plasma-assisted molecular beam epitaxy on (001)- and (111) Si substrates with SiC (~2.5 nm) buffer layers. The films were characterized by x-ray diffraction, scanning electron microscopy, atomic force microscopy, and 12 K photoluminescence. GaN films on Si(111) presented predominately the hexagonal phase, while GaN on Si(001) presented the cubic phase. The best crystal quality was obtained in the cubic GaN.

Keywords: GaN, molecular beam epitaxy, hexagonal phase, cubic phase.

1. Introducción

Recientemente ha resurgido un gran interés científico y tecnológico en el GaN debido principalmente a su potencial como emisor de luz. Una de las aplicaciones más prometedoras se encuentra en la producción de láseres en el color azul [1]. El crecimiento de estructuras epitaxiales basadas en el GaN tales como diodos emisores de luz, fotodetectores en el ultravioleta y láseres, está dominado por la técnica de MOVPE (del inglés, metal organic vapor phase epitaxy). Sin embargo, la técnica de MBE (del inglés, molecular beam epitaxy) puede ofrecer un número de ventajas y potenciales mejorías en lo que respecta a la uniformidad de la capa, composición y control de dopaje, interfaces abruptas, así como reducir las temperaturas de crecimiento [2]. La razón fundamental por la cual la técnica de MOVPE tiene una ventaja sobre MBE es la dificultad de conseguir especies que contengan nitrógeno para el crecimiento por MBE. Este problema ha sido resuelto al desarrollarse fuentes de plasma que disocian moléculas de nitrógeno (N_2) estable para formar radicales de nitrógeno atómico altamente reactivos.

Por más de una década los científicos han intentado crecer capas de GaN por MBE de alta calidad sobre diferentes sustratos. Una de las mayores dificultades es precisamente la carencia de un sustrato que sea compatible con el GaN tanto térmicamente como en el tamaño de la constante de la red cristalina. A diferencia del GaAs, el cual existe sólo en la estructura cúbica zincblenda, el GaN existe en dos fases alotrópicas la wurtzita (α) y la zincblenda (β). El GaN se ha crecido principalmente sobre sustratos de zafiro, más comúnmente en la orientación (0001), donde el GaN crece en su fase termodinámicamente más estable, la wurtzita [3]. Sin embargo, también se ha intentado el crecimiento de

películas de alta calidad de GaN sobre Si motivados por las ventajas irremplazables ofrecidas por Si sobre otros sustratos, tales como bajo precio, alta calidad superficial y cristalina, disponibilidad de obleas de área grande, tratamiento y preparación bien establecida, estabilidad y conductividad térmica alta, entre otras [4].

Por otra parte, existe una motivación para crecer la estructura zincblenda del GaN, pues estructuras cúbicas de los compuestos III-V se han dopado más fácilmente tanto tipo p como tipo n. Sin embargo, el crecimiento de β -GaN sobre Si resulta ser un reto ya que existe una enorme diferencia del 17% en los parámetros de las dos estructuras cúbicas ($a_{Si} = 5.43 \text{ \AA}$, $a_{\beta\text{-GaN}} = 4.52 \text{ \AA}$) [5], así como problemas asociados al crecimiento de un material polar sobre un sustrato no polar. Hasta ahora la mayoría de los esfuerzos por crecer β -GaN sobre Si han resultado en películas amorfas o policristalinas. En particular el crecimiento de GaN crecido directamente sobre Si(111) y sobre Si(001) ha dado como resultado películas con una mezcla de fase. El origen de esta mezcla de fases se ha atribuido a la formación de una capa amorfa de Si_xN_y durante las primeras etapas de nucleación en la interfaz GaN/Si [6]. Recientemente se ha reportado que películas de GaN cúbico se han logrado crecer epitaxialmente sobre sustratos de Si (001) cubiertos con una capa colchón de SiC cúbico [4]. En este trabajo presentamos un estudio de los efectos de la orientación del sustrato de Si cubierto con una capa colchón de SiC cúbico en el crecimiento del GaN.

2. Detalles experimentales

En el presente trabajo se utilizaron sustratos de Si con orientaciones (001) y (111), a los cuales se les realizó un tratamiento químico en una solución de HF, los

substratos fueron introducidos a un sistema MBE convencional con una fuente de plasma de nitrógeno activado con radio frecuencia. Después los substratos fueron recocidos en la cámara de preparación del sistema MBE a 900 °C por 2 minutos, bajo una presión parcial de etanol de 5×10^{-6} Torr. Esto resultó en la formación de una capa epitaxial de SiC de aproximadamente 2.5 nm de espesor de acuerdo a mediciones realizadas por microscopía electrónica de transmisión. Con esta capa esperamos reducir la fuerte reacción del nitrógeno con el substrato de Si permitiendo así un crecimiento más suave del GaN. Las películas de GaN fueron crecidas sobre los diferentes substratos usando los mismos parámetros de crecimiento: la temperatura de la celda del Ga fue de 1050 °C, para la fuente de plasma de nitrógeno se utilizó una potencia de 400 W y una razón de flujo de 2 sccm, el tiempo de crecimiento fue de 1h y el espesor de la película de GaN fue de alrededor de 0.2 μm . Mientras que la temperatura del substrato fue alrededor de 800 °C. La caracterización óptica de las capas de GaN se realizó con espectroscopía de fotoluminiscencia (FL) a 12 K. Este estudio se realizó empleando como excitación un láser de He-Cd de longitud de onda de 325 nm. La caracterización estructural incluye microscopía electrónica de barrido (MEB), microscopía de fuerza atómica (MFA) y difracción de rayos X en el modo θ - 2θ .

3. Discusión y resultados

La Figura 1 muestra los resultados de la caracterización θ - 2θ por difracción de rayos X de dos muestras típicas de GaN crecidas sobre Si(111)

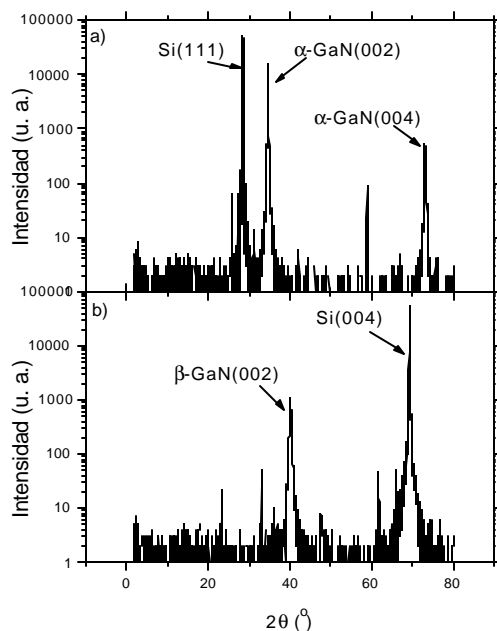


Fig.1 Difracción de rayos x en el modo θ - 2θ de películas de GaN de 0.2 μm de espesor depositados sobre una capa colchón de SiC sobre substratos de Si con orientación: a) (111), y b) (001).

(Fig. 1(a)) y sobre Si(001) (Fig. 1(b)).

En la Fig. 1(a) se observan principalmente tres picos alrededor de 28.42, 34.6 y 73°, los cuales corresponden a los planos (111) del substrato del Si, a los planos (002) de la fase α -GaN y a los planos (004) de la fase α -GaN respectivamente. Por otro lado en la Fig. 1(b) se observan principalmente dos picos, alrededor de 40.1 y 69.17°, estas señales corresponden a la difracción correspondiente a los planos (002) de la fase β -GaN y a los planos (004) del substrato del Si, respectivamente. Estos resultados nos muestran claramente que el GaN sobre Si(111) crece preferentemente en la fase hexagonal, mientras que para películas de GaN crecidas sobre substratos de Si(001) se obtiene preferentemente la fase cúbica.

Los resultados obtenidos por medio de MEB se presentan en la Figura 2 donde se observan las imágenes de las superficies de GaN para las muestras crecidas sobre Si(111) (Fig. 2(a)) y sobre Si(001) (Fig. 2(b)). Nótese la gran diferencia en la morfología de ambas superficies. En la Fig. 2(b) se observa una morfología de tipo mosaico con geometría rectangular, mientras que en la Fig. 2(a) se observa una morfología más irregular. En ambas muestras se observa que el proceso de coalescencia de las diferentes islas sobre el substrato no ha terminado. Observamos además en la Fig. 2(b) unos hoyos de dimensiones laterales de 0.5 μm los cuales se asocian con zonas en el substrato donde la nucleación del GaN es muy pobre.

Un análisis más detallado de la morfología superficial nos lo proporciona MFA. En la Figura 3 se muestra la morfología superficial de las epicapas de GaN crecidas sobre Si(111) (Fig. 3(a)) y sobre Si(001) (Fig. 3(b)), ambas micrografías se muestran a una escala de $3\mu\text{m} \times 3\mu\text{m}$. Se realizó un análisis estadístico de los valores de la rugosidad en ambas muestras. El valor raíz

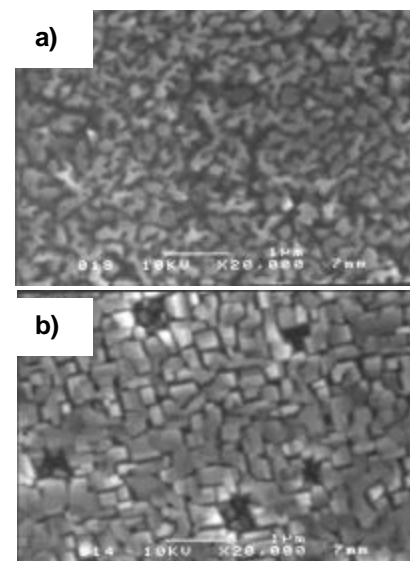
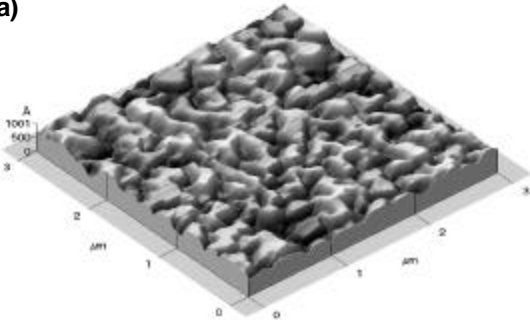


Fig. 2 Imágenes de MEB de películas de GaN de 0.2 μm de espesor depositados sobre una capa colchón de SiC sobre substratos de Si con orientación: a) (111), y b) (001).

cuadrático medio (rcm) de rugosidad correspondiente a las epicapas de GaN crecidas sobre el sustrato de Si(111) resultó ser de 13 nm, mientras que para las epicapas de GaN crecidas sobre Si(001) obtuvimos una rugosidad rcm de 14.2 nm. En la Fig. 3(b) se realizó un barrido sobre una región tratando de evitar los hoyos que se observan en la micrografía de MEB (Fig. 2(b)). Podemos decir entonces que tomando una región donde no hay hoyos para la muestra crecida sobre el sustrato Si(001) se obtiene una rugosidad comparable con la correspondiente a la superficie de las epicapas de GaN crecidas sobre el sustrato de Si(111). Las características topográficas sugieren que las condiciones de crecimiento empleadas favorecen un crecimiento más ordenado para los sustratos (001).

En la Fig. 4 se muestran los espectros de PL a 12 K para las películas de GaN crecidas sobre los sustratos Si(111) y Si(001). En el espectro correspondiente a las películas de GaN crecidas sobre Si(111) se observan claramente dos picos centrados en ~ 2.34 y ~ 3.05 eV. En contraste, el espectro de la película crecida sobre el sustrato Si(001) muestra un sólo pico centrado en ~ 3.05 eV. Asociamos los picos alrededor de 3.05 eV a una transición par donador-aceptor [6], mientras que el pico adicional alrededor de 2.34 eV lo asociamos a defectos cristalinos. Adicionalmente, la intensidad de FL para la muestra con sustrato de Si(001) es claramente mayor. Basándose en estos resultados podemos decir que las

a)



b)

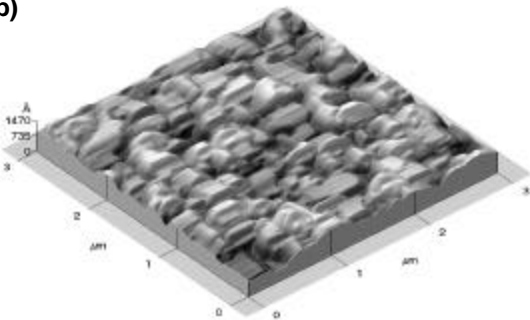


Fig. 3 Imágenes de MFA de películas de GaN de $0.2\mu\text{m}$ de espesor depositados sobre una capa colchón de SiC sobre sustratos de Si con orientación: a) (111), y b) (001).

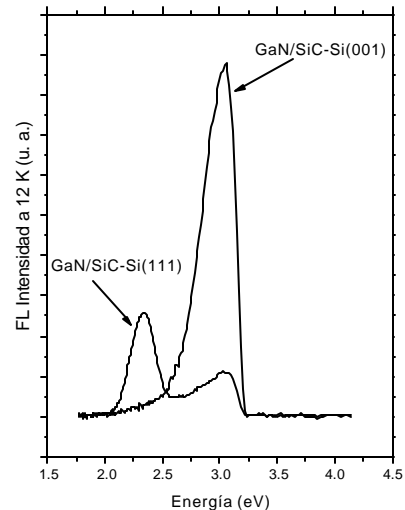


Fig. 4 Espectros de fotoluminiscencia a 12 K de películas de GaN de $0.2\mu\text{m}$ de espesor depositados sobre una capa colchón de SiC sobre sustratos de Si con orientación: a) (111), y b) (001).

películas crecidas sobre el sustrato Si(001) resultaron tener una mejor calidad cristalina.

4. Conclusión

Se estudiaron películas de GaN sobre sustratos de Si en la dirección (111) y (001) crecidas en un sistema MBE convencional con una fuente de plasma de nitrógeno activado con RF. Estas muestras se caracterizaron por las técnicas de difracción de rayos X en el modo θ -2 θ , MEB, MFA y espectroscopía de FL a 12 K. Se encontró que las películas de GaN crecidas en la dirección (001) crecen preferentemente en la fase cúbica, mientras que las crecidas en la dirección (111) crecen preferentemente en la fase hexagonal. Los resultados indican que la calidad de las películas de GaN crecidas en la fase cúbica tienen una mejor calidad cristalina que aquellas crecidas en la fase hexagonal.

Agradecimientos

Los autores agradecen el apoyo brindado por A. Guillen, Z. Rivera, R. Frago y Ana Berta Soto. Este trabajo fue parcialmente apoyado por Conacyt.

Referencias

- [1] G. Wicks, *Compound Semiconductor* **7**, 17 (1998).
- [2] Dixon and T. Whitaker, *Compound Semiconductor* **5**, 20 (1999).
- [3] S. Strite and H. Morkoc, *J. Vac. Sci. Technol. B* **10**, 1237 (1992).
- [4] Y. Hiroshima and M. Tamura, *Jpn. J. Appl. Phys.* **37**, L630 (1998).
- [5] S. N. Basu, T. Lei and T. D. Moustakas, *J. Mater. Res.* **9**, 2370 (1994).
- [6] B. Yang, A. Trampert, O. Brandt, B. Jenichen, and K. H. Ploog, *J. Appl. Phys.* **83**, 3800 (1998).