

# Análisis de señales de infrarrojo para la determinación de parámetros físicos de semiconductores

Tema propuesto por: Dr. Angel Gabriel Rodríguez Vázquez

## Introducción

En la fabricación de cualquier dispositivo electrónico integrado es necesario aislar eléctricamente distintas regiones semiconductoras o contactos metálicos. En los dispositivos comerciales actuales esto se logra con capas delgadas de SiO<sub>2</sub> que físicamente separa regiones de distinta conductividad. Con la continua disminución en el tamaño de los dispositivos y el incremento en la densidad de integración, estas capas de material dieléctrico son cada vez más delgadas y muy pronto se llegará al punto donde debido al pequeño espesor se presentará tunelamiento cuántico de una región a otra y la capa de SiO<sub>2</sub> ya no funcionará como aislante. Como alternativa, el HfO es uno de los principales materiales candidatos para sustituir al SiO<sub>2</sub> en la electrónica integrada, ya que este material tiene una constante dieléctrica de 25 ofreciendo entonces un mejor aislamiento eléctrico que el SiO<sub>2</sub>. Es importante entonces estudiar la deposición de HfO sobre distintos semiconductores.

La electrónica integrada es todavía dominada por el Si y en un menor porcentaje por otros materiales como GaAs en aplicaciones de alta frecuencia.[1] Actualmente, la integración en dispositivos electrónicos del GaN sigue siendo un reto de la electrónica moderna.

El GaN es un semiconductor con perspectivas de gran importancia para la electrónica en aplicaciones de alta frecuencia y alta potencia, derivadas de sus propiedades físicas. El ancho de banda prohibido de más de 3 eV resulta en un campo eléctrico de ruptura casi diez veces mayor al del Si, lo que permite construir transistores con alto voltaje de polarización aun a altas frecuencias, y con una mejor linealidad y ancho de banda que dispositivos semejantes en base a Si o GaAs. Hasta el momento, los dispositivos electrónicos más exitosos en base a GaN/AlGaIn, son los transistores de alta movilidad de electrones (HEMT).[2-4] Sin embargo, las propiedades eléctricas a alta frecuencia de estos dispositivos son todavía afectados por trampas superficiales, [5] lo que ha impedido su aceptación por la industria.

Existen diversas técnicas de análisis de materiales, que han sido fundamentales para el desarrollo de la tecnología de dispositivos electrónicos integrados. En particular, la caracterización por espectroscopia infrarroja ha sido muy importante para la microelectrónica.[6] Mediciones en Si, SiO<sub>2</sub> y GaAs han permitido determinar espesores de capas epitaxiales, condiciones de crecimiento y la influencia de impurezas inter-sitiales y sustitucionales como oxígeno y carbón en las propiedades electrónicas y mecánicas de estos materiales.[7] Por ejemplo, los espectros de reflectancia y absorbancia en el mediano infrarrojo permitieron entender claramente el efecto de complejos de C-O y N en el deterioro de la conductividad de huecos en canales p de MOSFETs de Si.[8] En otro ejemplo, el estudio de los modos de vibración del enlace C-H por absorción en el cercano y mediano infrarrojo de GaAs hizo posible encontrar las condiciones de pasivación con hidrógeno del carbono, que forma una impureza aceptora poco profunda en GaAs.[9]

En este trabajo se realizarán simulaciones montecarlo de la reflectancia en el infrarrojo de GaN, InN e interfaces HfO/GaN y HfO/InN y se analizarán las señales experimentales para determinar la influencia de la calidad estructural en la función dieléctrica.

## Marco teórico

En la interacción de la luz con la materia, un material dieléctrico anisotrópico puede representarse por un sistema con matriz de funciones de transferencia  $\chi(\omega)$ , y vectores de entrada y salida  $E(\omega)$  y  $P(\omega)$ , respectivamente,  $\chi(\omega)$  representa la susceptibilidad eléctrica, característica de cada material,  $E(\omega)$  el vector de campo eléctrico de la radiación electromagnética incidente y  $P(\omega)$  el vector de polarización eléctrica.[10]

El índice de refracción complejo  $n = \eta + j\kappa$  de un material queda definido por las partes real e imaginaria de  $\chi = \chi' + j\chi''$  :

$$1 + \chi' = \eta^2 - \kappa^2 = \varepsilon'$$

$$\chi'' = 2\eta\kappa = \varepsilon''$$

Donde  $\varepsilon(\omega) = \varepsilon'(\omega) + j\varepsilon''(\omega)$  es la función dieléctrica. La parte real de esta función a bajas frecuencias  $\varepsilon(0)$  es lo que comúnmente llamamos constante dieléctrica.

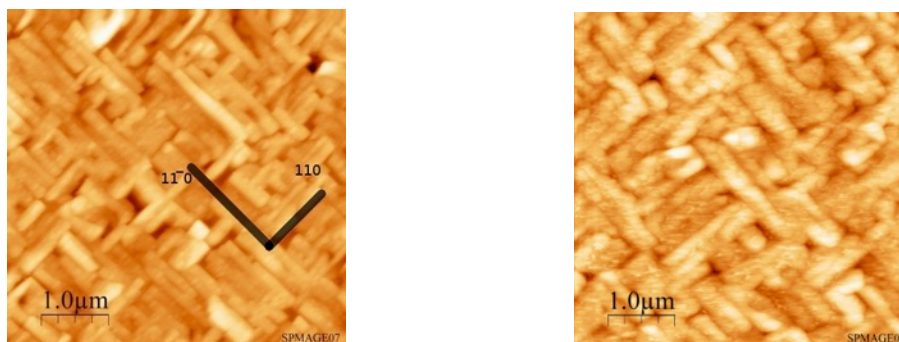
En nuestro caso utilizaremos las señales de reflectancia para estimar la función dieléctrica. Normalmente se requiere de mediciones especiales de elipsometría para medir la parte real e imaginaria del índice de refracción complejo de un material. La contribución original de este trabajo sería utilizar un arreglo experimental común de reflectancia y estimar el índice de refracción complejo analizando la respuesta en frecuencia.

**Hipótesis:** Es posible estimar la función dieléctrica compleja de semiconductores inhomogéneos y anisotrópicos analizando la respuesta en frecuencia del material.

**Objetivo:** Simular y analizar la reflectancia en el infrarrojo de semiconductores con una distribución de dominios inhomogénea y anisotrópica.

### Metodología

Se realizarán mediciones de reflectancia en el infrarrojo con luz polarizada a lo largo de dos direcciones independientes. Para cada una de estas direcciones se obtendrá una respuesta espectral de reflectancia. La diferencia entre estos dos espectros, está relacionada con la calidad estructural del material. [11] Para InN y GaN sintetizados en el laboratorio se observan dominios cristalinos orientados a lo largo de los ejes cristalinos cúbicos y hexagonales. Imágenes de microscopía muestran que a medida que la calidad estructural del material disminuye aumenta el desorden en el tamaño y orientación de los dominios, Figura 1. En la Figura 1a, se observa que aunque hay una distribución en el tamaño de los dominios, las orientaciones alrededor de  $90^\circ$  están bien definidas. En cambio en la Figura 1b se tiene que a medida que disminuye la calidad estructural aumenta el desorden en la orientación de los dominios. Estos cambios se modelarán proponiendo distintas funciones de transferencia en el sistema que reproduzcan los espectros experimentales de reflectancia.



**Figura 1. Imágenes de microscopía de fuerza atómica de InN , a) muestra con mayor calidad estructural, b) en la muestra con menor calidad estructural aumenta el desorden en la orientación de los dominios.**

Las señales simuladas se obtendrán considerando distintas posibilidades para las funciones de transferencia, dependiendo de la estructura de dominios cristalinos en el material. Primero se obtendrán las señales de referencia en un sistema sin desorden. Después se modelará el efecto del desorden en el tamaño de los dominios cristalinos, realizando una simulación montecarlo al considerar valores aleatorios en el tamaño de los dominios. Después se modelará el efecto de la distribución de orientaciones cristalinas,

considerando direcciones aleatorias de las fronteras de los dominios. Finalmente se modelará el sistema considerando una distribución aleatoria de el tamaño y la orientación de los dominios cristalinos.

A partir de la comparación de las señales simuladas y las experimentales obtenidas para dos estados de polarización independientes, se estimarán la parte real e imaginaria de la función dieléctrica sin necesidad de realizar mediciones de elipsometría.

La polarización eléctrica del  $i$ -ésimo dominio será entonces:

$$P_{ki} = \epsilon_0 (1 + \epsilon_{kli}) E_{ii}$$

Donde  $E_{ii} = \vec{E} \cdot \hat{e}_{ii}$  será la proyección del campo eléctrico incidente a lo largo de la orientación aleatoria de cada dominio.

Y la susceptibilidad eléctrica efectiva  $\chi(\omega)$  para una muestra con N dominios se obtendrá de

$$P(\omega) = \sqrt{\sum_k \left( \sum_{i=1}^N P_{ki} \right)^2} = \epsilon_0 \chi(\omega) E(\omega)$$

Lo que permitirá finalmente simular la reflectancia R como

$$R = \frac{(\eta - 1)^2 + \kappa^2}{(\eta + 1)^2 + \kappa^2}$$

Así se podrá determinar la influencia de la inhomogeneidad y la anisotropía en la distribución de los dominios en la respuesta en frecuencia de las interfaces HfO/GaN y HfO/InN que se estudiarán. Esta información podrá utilizarse como retroalimentación en la síntesis de semiconductores para mejorar la calidad estructural, y estimar la función dieléctrica en este tipo de materiales.

## Referencias

- [1] S.N. Vainshtein, V.S. Yuferev, J.T. Kostamovaara, J. Appl. Phys. **97**, 024502 (2005).
- [2] V.O. Turin, A.A. Balandin, Electron. Lett. **40**, 81 (2004).
- [3] C.T. Rodenbeck, R. Follmann, Electrón. Lett. **43**, 590 (2007).
- [4] Yuh-Renn Wu, Jasprit Singh, J. Appl. Phys. **101**, 113712 (2007).
- [5] D.S. Katzer et al, ECS Trans. **3**, 151 (2006).
- [6] W.S. Lau, *Infrared Characterization for Microelectronics* (World Scientific, New York, 2000).
- [7] T. Fukuda, M. Koizuka, A. Ohsawa, J. Electrochem. Soc. **141**, 2216 (2004)
- [8] T.S. Chao et al, Appl. Phys. Lett. **69**, 1781 (1996).
- [9] W.S. Hobson et al, Mat. Science and Engineering **B20**, 266 (1993).
- [10] R. Loudon, *The Quantum Thoery of Light* (Oxford Science Publications, New York, 2000)
- [11] M. C. Rodríguez, A. G. Rodríguez, H. Navarro-Contreras, M. A. Vidal, "Infrared reflectance anisotropy of wurzite GaN", J. Appl. Phys. 106, 063523-1 – 063523-4, (2009)

## Materias optativas:

- Procesamiento digital de imágenes
- Reconocimiento de patrones
- Optimización