

Pontifícia Universidade Católica de Goiás
Programa de Mestrado em Engenharia de Produção e Sistemas

**Estudo do Efeito do Tipo de Dopagem no
Carbeto de Silício Para Aplicação na Indústria
de Semicondutores**

Jackeline Lares Vasconcelos

24 de março de 2020

Estudo do Efeito do Tipo de Dopagem no Carbetto de Silício Para Aplicação na Indústria de Semicondutores

Jackelinne Lares Vasconcelos

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Produção e Sistemas da Pontifícia Universidade Católica de Goiás, como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Engenharia de Produção e Sistemas.

Orientador: Dr. Clóves G. Rodrigues

GOIÂNIA - GO
24 de março de 2020

Estudo do Efeito do Tipo de Dopagem no Carbetto de Silício Para Aplicação na Indústria de Semicondutores

Jackelinne Lares Vasconcelos

Esta Dissertação julgada adequada para obtenção do título de Mestre em Engenharia de Produção e Sistemas, e aprovada em sua forma final pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Produção e Sistemas da Pontifícia Universidade Católica de Goiás em xxxxxxxx de xxxx.

Prof. Dr. Marcos Lajóvic Carneiro
Coordenador do Programa de Pós-
Graduação em Engenharia de Produção e
Sistemas

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Clóves Gonçalves Rodrigues
Orientador

Prof. Dr. Wesley Pacheco Calixto
Avaliador Externo – IFG Goiás

Prof. Dr. José Elmo de Menezes
Avaliador Interno - PUC Goiás

Profa. Dra. Marta Pereira da Luz
Suplente - PUC Goiás

GOIÂNIA - GO
24 de março de 2020

Dados Internacionais de Catalogação da Publicação (CIP)
(Sistema de Biblioteca PUC Goiás)

V331e Vasconcelos, Jackeline Lares

Estudo do efeito do tipo de dopagem no Carbetto de Silício para aplicação na indústria de semicondutores / Jackeline Lares Vasconcelos.-- 2020.

45 f.; il.

Texto em português, com resumo em inglês.

Dissertação (mestrado) -- Pontifícia Universidade Católica de Goiás, Escola de Engenharia, Goiânia, 2020.

Inclui referências: f. 41-45

1. Silício. 2. Semicondutores. I. Rodrigues, Clóves Gonçalves. II. Pontifícia Universidade Católica de Goiás - Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Produção e Sistemas - 2020. III. Título.

CDU: Ed. 2007 -- 661.665.1(043)

Dedico este trabalho a Deus que me inspirou e me deu forças em todos os momentos difíceis desta trajetória.

Dedico à meus familiares, que sempre me apoiaram, que me dedicaram palavras de conforto e de motivação, que acreditaram no meu sonho e no meu esforço.

Agradecimentos

Ao meu orientador, Prof. Dr. Clóves Gonçalves Rodrigues, que me acompanhou na maior parte do tempo da minha jornada.

Aos meus amigos e colegas do MEPROS e SENAI que sempre me incentivaram.

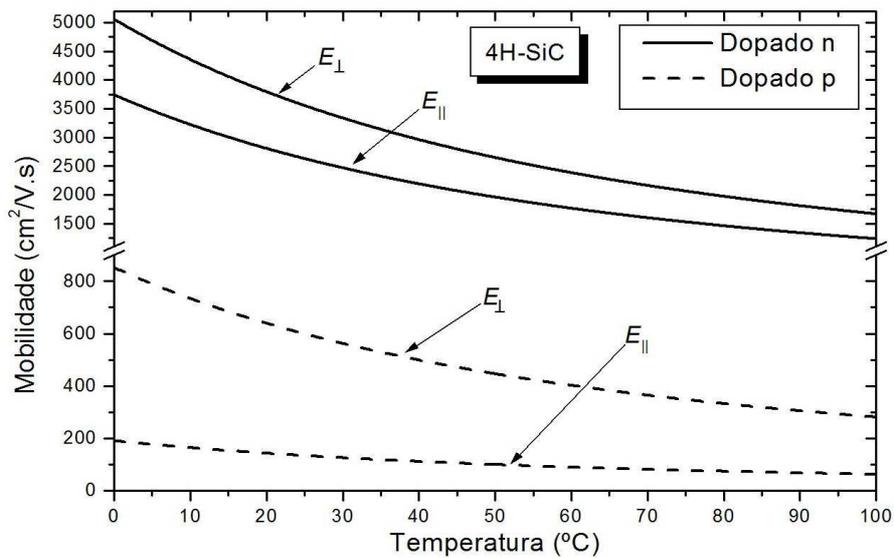
Ao Programa de Mestrado em Engenharia de Produção e Sistemas que me possibilitou realizar este trabalho.

Resumo

Neste trabalho estudamos o transporte de carga no semiconductor carbeto de silício na forma 4H-SiC dopado tipo p ou n , utilizando uma equação diferencial de movimento. A dependência do transporte de carga elétrica em função da intensidade e direção do campo elétrico aplicado, da temperatura e do tipo de dopagem (p ou n) foi analisada. Obtemos que a maior mobilidade ocorre quando o semiconductor 4H-SiC é dopado tipo n , com a direção do campo elétrico perpendicular ao eixo c do cristal.

Palavras-chave: Semicondutores; carbeto de silício; SiC; mobilidade.

Resumo Gráfico

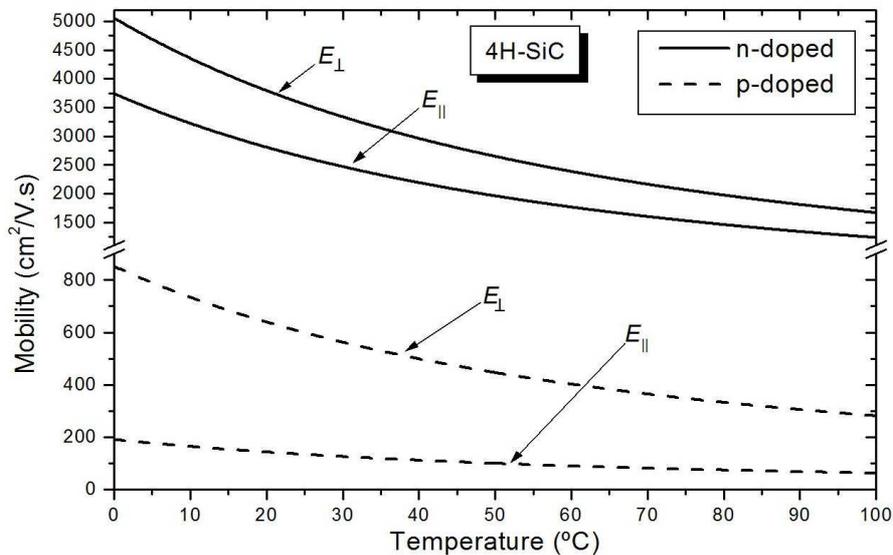


Abstract

In this work we study the charge transport in the silicon carbide semiconductor in the form of 4H-SiC, doped type p or n, using a differential equation of motion. The dependence of the electric charge transport according to the intensity and direction of the applied electric field, the crystal temperature and the type of doping (p or n) was analyzed. We obtain that the greatest mobility occurs when the semiconductor 4H-SiC is doped type n, with the direction of the electric field perpendicular to the c axis of the crystal.

Keywords: Semiconductors; silicon carbide; SiC; mobility.

Graphical Abstract



Sumário

1	Introdução.....	12
2	Os semicondutores.....	15
2.1	Introdução.....	15
2.2	Propriedades dos semicondutores.....	17
2.2.1	Ligações Covalentes.....	17
2.2.2	Elétrons e buracos.....	18
2.2.3	Dopagem.....	18
3	Equações de movimento para portadores em um semicondutor.....	20
3.1	Introdução.....	20
3.2	Resolução da equação.....	22
4	Resultados.....	25
4.1	Introdução.....	25
4.2	4H-SiC dopado tipo “p”.....	25
4.2.1	Estado transiente.....	25
4.2.2	Estado estacionário.....	28
4.3	4H-SiC dopado tipo “n”.....	31
4.3.1	Estado transiente.....	31
4.3.2	Estado estacionário.....	34
4.4	Estudo comparativo.....	37
5	Conclusão.....	38
	Referências.....	41

Lista de ilustrações

Figura 1.1 - Gráfico sobre o faturamento da indústria de semicondutores	12
Figura 1.2 - Estrutura cristalina do 4H-SiC.....	14
Figura 2.1 – Bandas de energia para materiais metálicos, semicondutores e isolantes.....	16
Figura 2.2 – Semicondutores dopados com impurezas tipo “n” e tipo “p”.....	18
Figura 3.1 – a) Esquema das forças que atuam sobre o buraco quando um campo elétrico \vec{E} passa a atuar sobre o elétron. Note que o movimento do elétron é oposto à direção do campo elétrico \vec{E}	20
Figura 3.1 – b) Esquema das forças que atuam sobre o buraco quando um campo elétrico \vec{E} passa a atuar sobre o elétron. Note que o movimento do elétron é oposto à direção do campo elétrico \vec{E}	20
Figura 4.1 - Velocidade do buraco no estado transiente no politipo Carbeto de Silício (4H-SiC). A figura (a) refere-se ao campo elétrico aplicado perpendicularmente ao eixo c. A figura (b) refere-se ao campo elétrico aplicado paralelo ao eixo c.....	25
Figura 4.2 - Posição do buraco no semicondutor no politipo Carbeto de Silício (4H-SiC). Figura (a) no campo perpendicular e Figura (b) no campo paralelo.....	26
Figura 4.3 - Comparação do deslocamento dos buracos entre os dois campos (perpendicular e paralelo) para um campo elétrico de 3 kV/cm.....	27
Figura 4.4 - A velocidade de deriva do buraco cresce de forma linear com o aumento da intensidade do campo elétrico.....	28
Figura 4.5 - Velocidade estacionária dos portadores de carga elétrica em função da temperatura da rede cristalina.....	29
Figura 4.6 - Redução da mobilidade eletrônica com o aumento da temperatura.....	30
Figura 4.7 - Velocidade do elétron no estado transiente no politipo Carbeto de Silício	

(4H-SiC). A figura (a) refere-se ao campo perpendicular no semicondutor. A figura (b) refere-se ao campo paralelo no semicondutor.....	31
Figura 4.8 - Posição do elétron no semicondutor no politipo Carbetto de Silício (4H-SiC). Figura (a) campo elétrico aplicado perpendicularmente ao eixo c e Figura (b) campo elétrico aplicado paralelamente ao eixo c.....	32
Figura 4.9 - Comparação do deslocamento dos buracos entre os dois campos (perpendicular e paralelo) para um campo elétrico de 3 kV/cm.....	33
Figura 4.10 - A velocidade do elétron no estdo estacionário.....	34
Figura 4.11 - Velocidade estacionária dos eletróns em função da temperatura da rede cristalina.....	35
Figura 4.12 - Redução da mobilidade eletrônica com o aumento da temperatura.....	36

Capítulo 1

Introdução

A indústria de semicondutores é uma das mais relevantes e dinâmicas no mundo hoje. A sua importância está relacionada às crescentes possibilidades de aplicações dos componentes semicondutores, que não se restringem mais às indústrias eletrônicas e de telecomunicações [1]. Os semicondutores estão no âmago não apenas da Era da Informação e da Comunicação, como também da Indústria 4.0, também conhecida como a Revolução da Internet das Coisas. A importância da indústria de semicondutores também está relacionada ao significativo impacto que a evolução tecnológica do setor tem sobre a produtividade de todos os demais setores da economia, uma vez que a crescente capacidade de processamento e armazenamento foi acompanhada por custo decrescente [2].

O faturamento anual da indústria mundial de semicondutores cresceu, em 2017, 22% em relação ao ano anterior, atingindo US\$ 419,7 bilhões. Em 2018, a expectativa era que o setor crescesse 7% em relação a 2017 (veja Fig. 1.1) [3].



Figura 1.1 - Gráfico sobre o faturamento da indústria de semicondutores. O valor no ano de 2018 é estimado.[3]

De acordo com o IBGE [3], o Produto Interno Bruto (PIB) brasileiro cresceu 1,0% em 2017, na primeira alta após dois anos consecutivos de retração, em valores correntes, o PIB em 2017 foi de R\$ 6,6 trilhões. O faturamento mundial da indústria de semicondutores em relação ao PIB nacional representa cerca de 23%.

As propriedades intrínsecas dos semicondutores de banda larga, como a grande largura de gap de energia que permite temperaturas operacionais mais altas, alta velocidade de saturação dos elétrons de condução e pequena constante dielétrica tornam esses materiais particularmente atraentes para aplicações em dispositivos de alta potência. Entre estes materiais de gap largo podemos destacar o Nitreto de Gálio (GaN) o Nitreto de Alumínio (AlN), compostos de zinco (ZnS, ZnSe, ZnTe, etc.) e politipos do carbeto de silício (SiC, também chamado *carborundum*) [4].

Dos materiais candidatos para aplicações em dispositivos de alta potência os mais atraentes são o GaN e também alguns dos vários politipos do SiC. Em ambos materiais, a intensidade do campo elétrico de ruptura é cerca de quatro vezes maior que nos semicondutores Silício (Si) ou Arseneto de Gálio (GaAs). Além das propriedades similares ao GaN, como grande largura do gap de energia, alta velocidade de saturação dos portadores e constante dielétrica relativamente pequena, o SiC tem uma condutividade térmica significativamente maior. Na Ref. [5] Weitzel et al. mostraram que uma alta condutividade térmica é necessária para superar os efeitos de aquecimento do dispositivo, o que é particularmente importante em amplificadores de potência.

O carbeto de silício (SiC) pode se formar em muitas estruturas cristalinas distintas (conhecidas como politipos) [6], com alguns dos mais comuns sendo o 3C-SiC (cúbico), 4H-SiC (hexagonal) e 6H-SiC (hexagonal). Os politipos de SiC hexagonal, 4H-SiC e 6H-SiC, usados para a fabricação de dispositivos, possuem propriedades de transporte anisotrópicas, mas com grau e característica de anisotropia diferentes. A anisotropia está associada à simetria hexagonal, que faz com que as massas efetivas dos elétrons e buracos difiram significativamente entre orientações paralelas ao eixo c (que chamamos de $m_{e,h||}^*$), e aquelas ao longo do plano basal perpendicular ao eixo c (que chamamos de $m_{e,h\perp}^*$). Entre os vários politipos de SiC, o 4H-SiC (veja Fig. 1.2) foi reconhecido como o material mais atraente para operação em dispositivos eletrônicos de alta potência, alta frequência e alta

temperatura devido a seu maior gap e maior mobilidade de portadores que o de outros politipos [7-14].

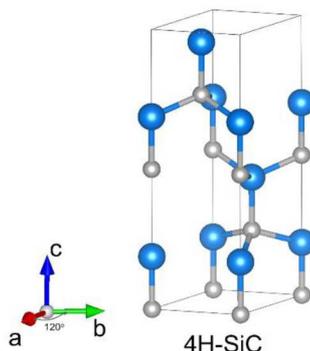


Figura 1.2 - Estrutura cristalina do 4H-SiC.

Salientamos que para desenvolver dispositivos eletrônicos de alto desempenho, além de otimizar as etapas de fabricação, é necessário um bom conhecimento das propriedades de transporte. Como exemplo, a mobilidade de portadores é uma propriedade muito importante, afetando o desempenho do dispositivo. Dependendo do dispositivo em específico, a mobilidade dos portadores, será mais interessante ao longo do eixo c ou perpendicular ao mesmo. Em particular, a mobilidade de portadores ao longo do eixo c é extremamente importante em dispositivos de potência verticais como os diodos Schottky.

As propriedades ópticas e de transporte dos semicondutores tem sido estudadas usando Técnicas de Funções de Não-Equilíbrio de Green, Simulação de Monte Carlo, Equação de Balanço, Ensembles Estatísticos de Não-Equilibrado, etc. [15-18]. Aqui, utilizaremos a segunda lei de Newton adaptada para o estudo do transporte de portadores de carga (buracos e elétrons) no semicondutor 4H-SiC.

O objetivo deste trabalho é estudar o transporte de portadores (elétrons e buracos) no 4H-SiC quando a direção de transporte está ao longo do eixo c , ou quando a direção de transporte está no plano perpendicular a ele. A velocidade de deriva dos buracos, o deslocamento, a mobilidade no estado transiente e estacionário foram obtidas, e a dependência dessas propriedades com a intensidade e a direção do campo elétrico foi analisada.

Capítulo 2

Os Semicondutores

2.1 Introdução

Os semicondutores foram analisados, inicialmente, por Alessandro Volta (1715-1827) e o seu estudo foi intensificado a partir do início do século XX, impulsionando a indústria eletrônica.

A condutividade elétrica é o caráter elétrico de um material, ou seja, sua capacidade de conduzir corrente elétrica. Do ponto de vista da propriedade da condutividade elétrica os materiais podem ser agrupados em: isolantes (ou dielétricos); condutores; supercondutores e semicondutores [19-20].

Em um cristal, os elétrons tendem a ocupar sempre os estados de menor energia. Assim, as bandas permitidas mais baixas estão sempre cheias. Suponhamos que o número de elétrons no cristal seja suficiente para encher completamente um certo número de faixas permitidas, deixando outras vazias. Nesse caso os elétrons do cristal, quando submetidos a um campo elétrico, não podem se propagar, pois qualquer movimento aumentaria sua energia, colocando-os dentro da faixa proibida. Nessa situação dizemos que o cristal é isolante. Se, por outro lado, os elétrons enchem apenas parcialmente uma das bandas permitidas, os elétrons podem mover-se com facilidade sob a ação de campos elétricos, passando para estados de energia ligeiramente maior. Assim sendo, o cristal pode ser um condutor ou um semicondutor. Em um condutor as bandas permitidas parcialmente cheias possuem um grande número de elétrons, e em um semicondutor as bandas parcialmente cheias possuem um pequeno número de elétrons ou estão quase completamente cheias (veja Fig. 2.1); em ambos os casos, a condução de corrente é menor que nos metais [19,20].

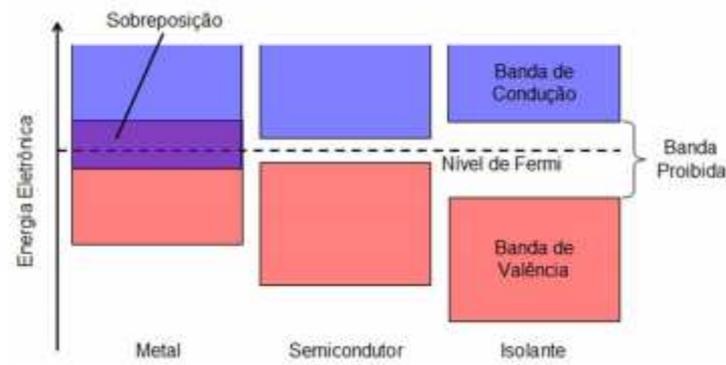


Figura 2.1 – Bandas de energia para materias metálicos, semicondutores e isolantes.

2.2 Propriedades dos semicondutores

Suas características elétricas estão situadas entre as características dos dielétricos e as características dos condutores. Os semicondutores possuem resistividade elétrica no intervalo entre 10^{-4} a $10^7 \Omega \cdot m$, que são valores intermediários entre os bons condutores ($10^{-8} \Omega \cdot m$) e bons isolantes (entre 10^{12} e $10^{20} \Omega \cdot m$).

As propriedades de um semicondutor dependem das impurezas, das excitações térmicas, dos defeitos da rede ou dos desvios de suas composições químicas. A medida que a temperatura do cristal aumenta, os elétrons que estão nos estados da banda de valência de maior energia adquirem energia suficiente para saltar a lacuna de energia e ocupar os estados menos energéticos da banda de condução, deixando espaços vazios na banda de valência. Esses espaços são denominados de buracos [19,20].

2.2.1 Ligações Covalentes

Nos cristais de germânio e silício, os átomos são unidos por um tipo de ligação, chamada ligação covalente. Tanto o silício como o germânio possuem quatro elétrons na camada de valência, através da ligação covalente é esperado que quando os átomos de um desses elementos se unem para formam um cristal, os elétrons sejam redistribuídos de maneira que cada átomo fique com 8 elétrons de valência.

2.2.2 Elétrons e buracos

Como os elétrons de valência dos semicondutores formam pares covalentes, eles não são normalmente livres como no caso dos metais. Em temperaturas muito baixas, próximas do zero absoluto, em que as ligações covalentes se mantêm praticamente intactas, o cristal se comporta como um isolante.

Entretanto, à medida que a temperatura cresce, algumas ligações covalentes se rompem, devido ao aumento do grau de agitação térmica. Em consequência, um dos elétrons ficou livre para vagar por todo cristal, e ficou um “vazio” em uma das ligações covalentes do cristal. Esse vazio é chamado de buraco. Os buracos também podem servir para o transporte de cargas.

Quando uma ligação covalente está incompleta, isto é, quando existe um buraco, o elétron de um átomo vizinho pode deixar sua ligação covalente e vir preencher esse “vazio”. Com isso, o elétron deixa um buraco em sua posição original, que por sua vez pode ser preenchido por outro elétron de uma ligação vizinha [19-21].

No que se refere ao transporte de cargas, o buraco se comporta como uma carga positiva, com o mesmo valor absoluto da carga do elétron. Para considerar o buraco uma entidade real, é preciso lembrar que os buracos não passam de “vazios” nas ligações covalentes do cristal, e destacar que o movimento dos elétrons e o movimento dos buracos se realiza de modo diferente, em que os elétrons deslocam-se no cristal de forma mais livre e os buracos só podem passar de ligação covalente para ligação covalente [19,20].

2.2.3 Dopagem

Além da energia térmica, podemos controlar a densidade de portadores de carga mediante a adição de impurezas na rede cristalina. Essas impurezas são átomos com valência maior ou menor do que o átomo que forma a rede cristalina do cristal semiconductor. Como exemplo, a adição de boro (*B*) ao silício (*Si*), na proporção de um átomo de boro para 10^5 átomos de silício, provoca um aumento de um fator de 10^3

na condutividade do silício puro para a temperatura ambiente. O processo de adição de impureza é denominado dopagem [19-21].

Os elétrons livres e buracos de um semiconductor são chamados de portadores, pois é através deles que se realiza qualquer transporte de cargas de um ponto para outro do material. Em um semiconductor intrínseco (puro) o número de elétrons é igual ao número de buracos.

Nos semicondutores tipo n, ou seja, que contém impurezas doadoras, o número de elétrons é maior que nos semicondutores intrínsecos. Além disso, o número de buracos é menor, pois com o excesso de elétrons, os buracos têm oportunidade de se recombinarem. Nos semicondutores tipo p, contendo impurezas aceitadoras, ocorre o oposto, como a concentração de buracos é maior que a concentração de elétrons, o número de elétrons é menor que no material intrínseco [19-21].

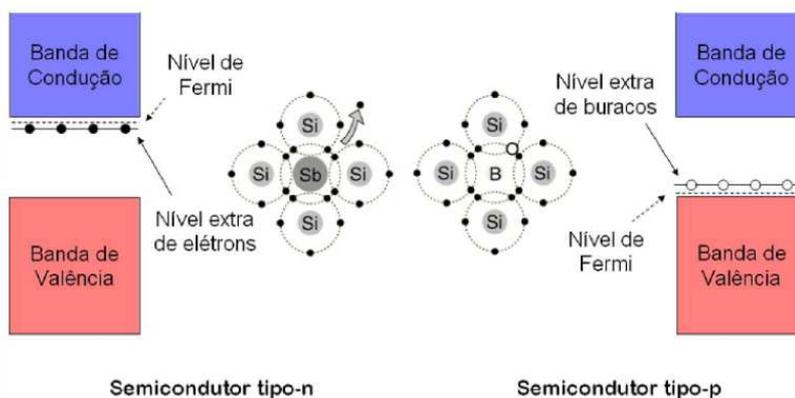


Figura 2.2 – Semicondutores dopados com impurezas tipo “n” e tipo “p”.

Capítulo 3

Equações de Movimento para Portadores em um Semicondutor

3.1 Introdução

Consideraremos um semicondutor polar de *gap* direto dopado tipo *n* com concentração de impurezas $< 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Nesta condição não é necessário levar em consideração o espalhamento dos portadores de carga (elétrons ou buracos) pelas impurezas dopantes introduzidas na rede cristalina [22]. O movimento dos portadores será governado por uma força externa aplicada \vec{F}_{ext} e por uma força de resistência ao movimento \vec{f} . Para descrever tal situação utilizaremos uma equação semi-clássica baseada na segunda lei de Newton, ou seja:

$$\frac{d\vec{P}}{dt} = \sum \vec{F}$$

$$\frac{d\vec{P}}{dt} = \vec{F}_{ext} + \vec{f} \quad (3.1)$$

Na Equação (3.1) aplicaremos a forma quântica do momento total \vec{P} e utilizaremos a expressão quântica para \vec{f} . A forma quântica do momento total \vec{P} é idêntica à clássica. Assim:

$$\vec{P}(t) = m^* \vec{v}(t) \quad (3.2)$$

onde m^* é a massa efetiva dos portadores. A massa efetiva dos portadores é uma massa que permite usar a segunda lei de Newton da Física Clássica. Isto porque a massa efetiva engloba os efeitos quânticos do potencial interno da rede cristalina sobre os portadores. Desta forma a definição de massa efetiva permite

tratar os portadores como partículas clássicas de massa igual à sua massa efetiva.

Substituindo a Equação (3.2) na Equação (3.1) temos que:

$$m^* \frac{dv(t)}{dt} = \vec{F}_{ext} + \vec{f} \quad (3.3)$$

A força externa \vec{F}_{ext} será decorrente da aplicação de um campo elétrico \vec{E} . A força elétrica é dada por:

$$\begin{aligned} \vec{F}_{el} &= q\vec{E} = (+e)(+E\hat{i}) \\ \vec{F}_{el} &= eE\hat{i} \end{aligned} \quad (3.4)$$

Como o elétron está se movendo dentro do material semiconductor, há uma *força de resistência* \vec{f} ao movimento do elétron. Consideraremos que essa força é proporcional à velocidade \vec{v} do elétron, ou seja:

$$\vec{f} = -\alpha\vec{v} \quad (3.5)$$

onde α é um parâmetro que está associado à resistividade elétrica do semiconductor [23]. As Figuras 3.1a e 3.1b mostram, respectivamente, as forças atuantes em uma carga positiva e negativa.

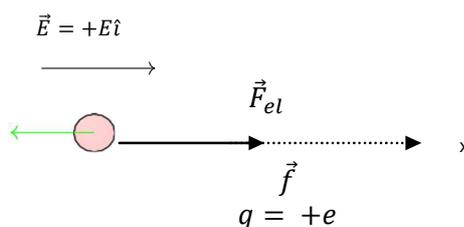


Figura 3.1a - Esquema das forças que atuam sobre o buraco quando um campo elétrico passa a atuar sobre ele.

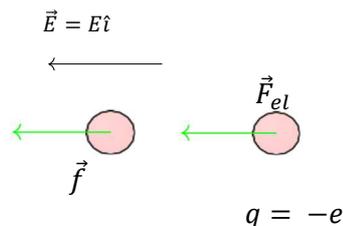


Figura 3.1b - Esquema das forças que atuam sobre o elétron quando um campo elétrico passa a atuar sobre o elétron. Note que o movimento do elétron é oposto à direção do campo elétrico \vec{E} .

Substituindo as Equações (3.4) e (3.5) na Equação (3.3), temos:

$$\begin{aligned}\vec{F} &= eE\hat{i} - \alpha\vec{v} \\ m_e^*\vec{a} &= eE\hat{i} - \alpha\vec{v}\end{aligned}\quad (3.6)$$

Como o movimento ocorre somente ao longo do eixo X podemos escrever a equação anterior como:

$$\begin{aligned}m^*a &= eE - \alpha v \\ m^* \frac{dv}{dt} &= eE - \alpha v\end{aligned}\quad (3.7)$$

Notamos aqui uma semelhança da Equação (3.7) com a equação de Newton-Langevin [24].

3.2 Resolução da Equação (3.7)

A Equação (3.7) pode ser solucionada de forma exata da seguinte maneira:

$$m^* dv = (eE - \alpha v)dt \Rightarrow \frac{m^* dv}{eE - \alpha v} = dt$$

$$\frac{m^* dv}{eE(1 - \frac{\alpha}{eE}v)} = dt \Rightarrow \frac{dv}{1 - \frac{\alpha}{eE}v} = \frac{eE}{m^*} dt$$

Definindo $\Gamma = \frac{\alpha}{eE}$, temos:

$$\begin{aligned}\frac{dv}{1 - \Gamma v} &= \frac{eE}{m^*} dt \Rightarrow \int_0^v \frac{dv}{1 - \Gamma v} = \int_0^t \frac{eE}{m^*} dt \Rightarrow -\frac{\ln(1 - \Gamma v)}{\Gamma} + \frac{\ln(1)}{\Gamma} = \frac{eE t}{m^*} \\ -\frac{\ln(1 - \Gamma v)}{\Gamma} &= \frac{eE t}{m^*} \Rightarrow \ln(1 - \Gamma v) = -\frac{\Gamma eE t}{m^*} \Rightarrow 1 - \Gamma v = e^{-\Gamma eE t/m^*} \Rightarrow\end{aligned}$$

$$\Gamma v = 1 - e^{-\Gamma eE t/m^*} \Rightarrow v = \frac{1}{\Gamma} (1 - e^{-\Gamma eE t/m^*})$$

Lembrando que $\Gamma = \frac{\alpha}{eE}$, temos finalmente :

$$v = \frac{eE}{\alpha} [1 - e^{-at/m^*}] \quad (3.8)$$

Utilizando a Equação (3.8) podemos encontrar a equação da posição do elétron, lembrando que $v = \frac{dx}{dt}$. Dessa forma,

$$\frac{dx}{dt} = \frac{eE}{\alpha} [1 - e^{-at/m^*}] \Rightarrow dx = \frac{eE}{\alpha} [1 - e^{-at/m^*}] dt \Rightarrow \int_0^x dx = \frac{eE}{\alpha} \int_0^t [1 - e^{-at/m^*}] dt$$

$$x = \frac{eE}{\alpha} \left[t + \frac{m^*}{\alpha} e^{-at/m^*} \right]_0^t \Rightarrow x = \frac{eE}{\alpha} \left[t + \frac{m^*}{\alpha} e^{-at/m^*} - 0 - \frac{m^*}{\alpha} e^0 \right]$$

$$x = \frac{eE}{\alpha} \left[t + \frac{m^*}{\alpha} e^{-at/m^*} - \frac{m^*}{\alpha} \right] \Rightarrow x = \frac{eE}{\alpha} \left[t + \frac{m^*}{\alpha} (e^{-at/m^*} - 1) \right]$$

$$x(t) = \frac{eE}{\alpha} \left[t - \frac{m^*}{\alpha} (1 - e^{-at/m^*}) \right] \quad (3.9)$$

O parâmetro α que aparece nas Equações (3.8) e (3.9) está associado à resistividade elétrica do semiconductor [23]. A Equação (3.10) a seguir mostra a expressão matemática do parâmetro α [23]:

$$\alpha = \frac{e^2 \omega^2 \gamma}{3} \sqrt{\frac{2m^*}{\pi(k_B T)^3}} e^z \{ [w - (1+w)e^{-2z}] k_0(z) - [w + (1+w)e^{-2z}] k_1(z) \} \quad (3.10)$$

onde e é a carga elementar do elétron, ω é a frequência de vibração da rede cristalina, γ é uma constante, k_B é a constante de Boltzmann, T é a temperatura da rede cristalina, $k_0(z)$ e $k_1(z)$ são funções modificadas de segunda espécie de Bessel e w é a função de distribuição dos fônons ópticos dada por:

$$w = \frac{1}{e^{2z} - 1} \quad (3.11)$$

sendo γ e z dados por:

$$\gamma = \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \quad (3.12)$$

$$Z = \frac{\hbar\omega}{2k_B T} \quad (3.13)$$

Na Equação (3.12) ε_0 é a constante eletrostática estática e ε_∞ é a constante eletrostática de alta frequência. Na Equação (3.13) k_B é a constante de Boltzmann cujo valor é aproximadamente $1,38 \times 10^{-16}$ erg/K, T é a temperatura da rede cristalina e \hbar é $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ onde $h \approx 6,626 \times 10^{-17}$ erg.s é a constante de Planck.

Substituindo a Equação (3.11) na Equação (3.10) temos:

$$\alpha = \frac{e^2 \omega^2 \gamma}{3} \sqrt{\frac{2m^{*3}}{\pi(k_B T)^3}} e^z \left\{ \left[\frac{1}{e^{2z}-1} + \left(1 + \frac{1}{e^{2z}-1}\right) e^{-2z} \right] k_1(z) - \left[\frac{1}{e^{2z}-1} - \left(1 + \frac{1}{e^{2z}-1}\right) e^{-2z} \right] k_0(z) \right\}$$

$$\alpha = \frac{e^2 \omega^2 \gamma}{3} \sqrt{\frac{2m^{*3}}{\pi(k_B T)^3}} e^z \left\{ \left[\frac{1}{e^{2z}-1} + \left(\frac{e^{2z}-1+1}{e^{2z}-1}\right) e^{-2z} k_1(z) \right] - \left[\frac{1}{e^{2z}-1} - \left(\frac{e^{2z}-1+1}{e^{2z}-1}\right) e^{-2z} \right] k_0(z) \right\}$$

$$\alpha = \frac{e^2 \omega^2 \gamma}{3} \sqrt{\frac{2m^{*3}}{\pi(k_B T)^3}} \left\{ \left[\frac{1}{e^{2z}-1} + \frac{e^{2z}}{e^{2z}-1} e^{-2z} \right] k_1(z) - \left[\frac{1}{e^{2z}-1} - \frac{e^{2z}}{e^{2z}-1} e^{-2z} \right] k_0(z) \right\}$$

$$\alpha = \frac{e^2 \omega^2 \gamma}{3} \sqrt{\frac{2m^{*3}}{\pi(k_B T)^3}} e^z \left\{ \left[\frac{1}{e^{2z}-1} + \frac{1}{e^{2z}-1} k_1(z) - \frac{1}{e^{2z}-1} - \frac{1}{e^{2z}-1} \right] k_0(z) \right\}$$

$$\alpha = \frac{e^2 \omega^2 \gamma}{3} \sqrt{\frac{2m^{*3}}{\pi(k_B T)^3}} e^z \left\{ \left[\frac{1}{e^{2z}-1} + \frac{1}{e^{2z}-1} \right] k_1(z) \right\}$$

$$\alpha = \frac{e^2 \omega^2 \gamma}{3} \sqrt{\frac{2m^{*3}}{\pi(k_B T)^3}} e^z \frac{2}{e^{2z}-1} k_1(z) \quad (3.14)$$

A Tabela 3.1 mostra os principais parâmetros do semicondutor 4H-SiC utilizados nesta tese. Na Tabela 3.1 m_0 é a massa de repouso do elétron ($m_0 = 9,109 \times 10^{-31}$).

Tabela 3.1 - Parâmetros do semicondutor 4H – SiC [25-28].

ε_0	ε_∞	$\omega (10^{14} \text{ Hz})$	$m_h^* (E_\perp)$	$m_h^* (E_\parallel)$	$m_e^* (E_\perp)$	$m_e^* (E_\parallel)$
10,0	6,7	1,82	0,59 m_0	1,6 m_0	0,18 m_0	0,22 m_0

Capítulo 4

Resultados

4.1 Introdução

Inicialmente, não há forças externas atuando sobre os portadores no semicondutor. Com a aplicação de um campo elétrico externo \vec{E} passa a haver uma força atuando sobre os portadores. Como consequência da aplicação desta força, os portadores reduzem o seu movimento aleatório e começam a acelerar na direção do campo elétrico \vec{E} . Ao mesmo tempo, os portadores passam a sofrer a ação de forças dissipativas devido à colisões com a estrutura cristalina do semicondutor.

Utilizamos as Equações (3.8) e (3.9), demonstradas no Capítulo 3 e os dados contidos na Tabela 3.1 do Capítulo 3 para determinar a velocidade e o deslocamento dos portadores em duas direções no semicondutor 4H-SiC: quando o campo elétrico é aplicado na direção paralela ao eixo c (E_{\parallel}) ou quando o campo elétrico é aplicado na direção perpendicular ao eixo c (E_{\perp}). Aplicaremos nosso estudo para o caso do semicondutor 4H-SiC dopado tipo “p” (Seção 4.2) e para o caso do 4H-SiC dopado tipo “n” (Seção 4.3).

4.2 4H-SiC dopado tipo “p”

4.2.1 Estado Transiente

Observando a Figura 4.1 notamos que a velocidade do buraco com o campo elétrico aplicado paralelo ao eixo c do semicondutor 4H-SiC é menor que a velocidade do buraco com o campo elétrico aplicado perpendicular ao eixo c . Além disso, nos primeiros 0,5 ps, a velocidade cresce rapidamente e, após 0,5 ps, a velocidade tende a se tornar constante.

Utilizando a Equação (3.9), determinamos a posição do buraco no semicondutor,

em função do tempo, conforme ilustrado na Figura 4.2. Analisando a Figura 4.2 notamos que o buraco percorre uma distância maior no cristal semiconductor 4H-SiC com o campo elétrico aplicado perpendicular ao eixo c . Essas informações possibilitam construir dispositivos com tamanhos específicos que podem levar ao dimensionamento mais eficiente dos custos de produção destes dispositivos.

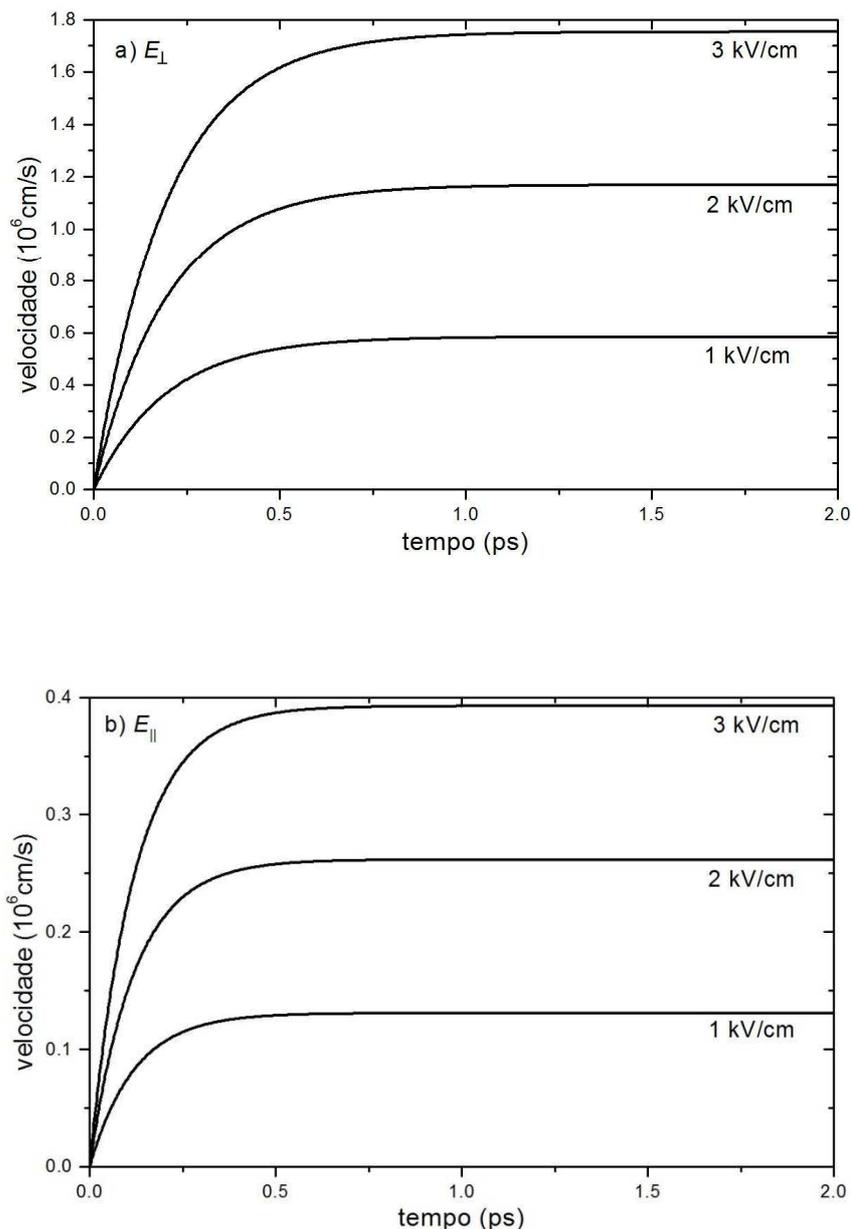


Figura 4.1 - Velocidade do buraco no estado transiente no 4H-SiC. A figura (a) refere-se ao campo elétrico aplicado perpendicularmente ao eixo c . A figura (b) refere-se ao campo elétrico aplicado paralelo ao eixo c .

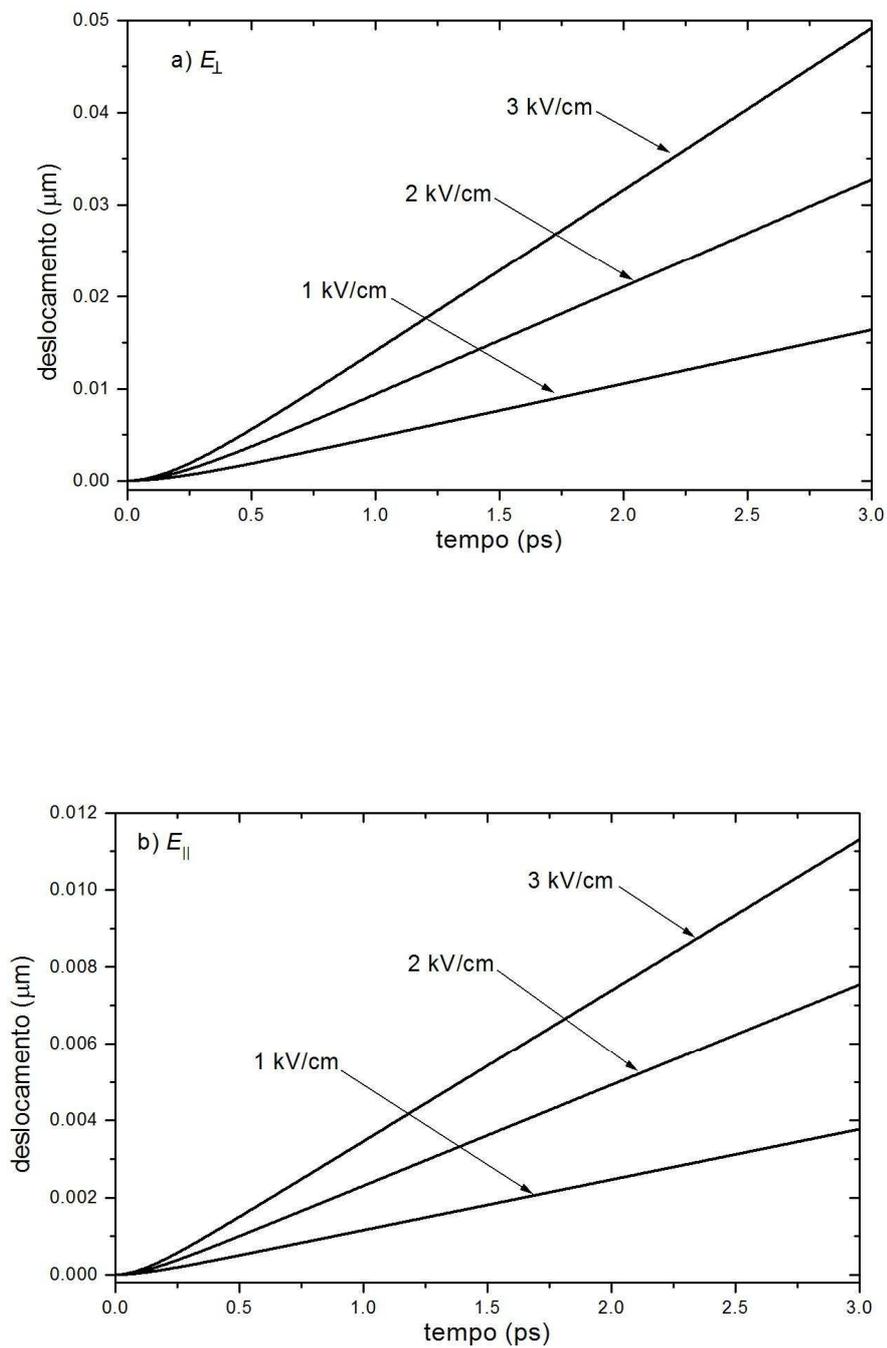


Figura 4.2 - Posição do buraco no semiconductor 4H-SiC. A figura (a) refere-se ao campo elétrico aplicado perpendicularmente ao eixo c . A figura (b) refere-se ao campo elétrico aplicado paralelo ao eixo c .

Para um campo elétrico de 3 kV/cm a Fig. 4.3 mostra em um único gráfico o deslocamento dos buracos para o campo elétrico aplicado perpendicular e paralelo ao eixo c . Nota-se que para E_{\perp} os buracos percorrem um distância de 49,15 nm em 3 ps enquanto que para E_{\parallel} uma distância de 11,30 nm, isto é, com o campo elétrico aplicado perpendicularmente ao eixo c a distância percorrida pelo buraco é aproximadamente 4,4 vezes a distância percorrida com o campo elétrico aplicado paralelo ao eixo c .

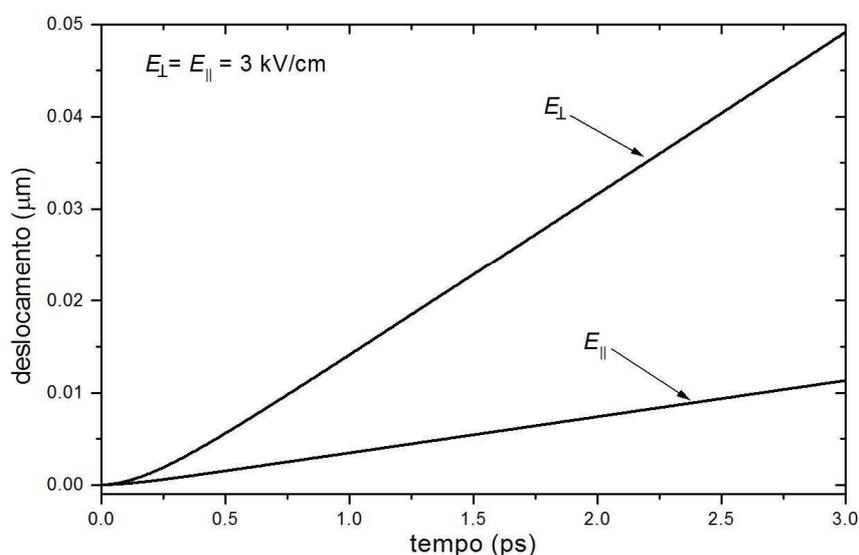


Figura 4.3 - Comparação do deslocamento dos buracos entre os dois campos (perpendicular e paralelo) para um campo elétrico de 3 kV/cm.

4.2.2 Estado Estacionário

No estado estacionário a velocidade de deslocamento do portador torna-se constante, ou seja, a aceleração total do portador é nula. Dessa forma a Equação (3.7) torna-se:

$$0 = eE - \alpha v \quad (4.1)$$

que nos fornece:

$$v_{est} = \frac{eE}{\alpha} \quad (4.2)$$

onde v_{est} é a velocidade no estado estacionário.

Utilizando os dados do semiconductor 4H-SiC da Tabela 3.1, plotamos o comportamento da velocidade de deriva do buraco no estado estacionário em função do campo elétrico, fornecido pela Equação (4.2), conforme apresentado na Figura 4.4. Observamos que com o campo elétrico aplicado perpendicularmente ao eixo c a velocidade do buraco é maior que com o campo elétrico aplicado paralelo ao eixo c refletindo o comportamento do elétron no estado transitório, conforme a Figura 4.1.

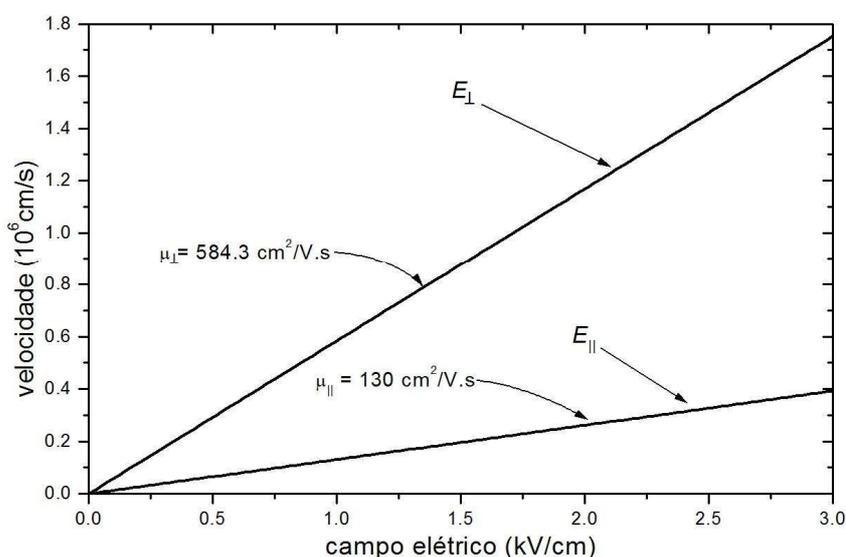


Figura 4.4 - A velocidade de deriva do buraco cresce de forma linear com o aumento da intensidade do campo elétrico.

Uma importante propriedade de transporte dos semicondutores é a mobilidade elétrica μ , definida como a velocidade de deriva dos portadores no estado estacionário dividida pelo valor do campo elétrico aplicado, ou seja, $\mu = v/E$. Assim no 4H-SiC temos dois valores para a mobilidade elétrica: uma quando o campo elétrico é aplicado paralelamente ao eixo c , μ_{\parallel} , e outra quando o campo elétrico é aplicado perpendicularmente ao eixo c , μ_{\perp} . Calculando-se a declividade das retas apresentadas na Fig. 4.4 obtemos: $\mu_{\perp} = 584,3 \text{ cm}^2 / \text{V} \cdot \text{s}$ e $\mu_{\parallel} = 130,9 \text{ cm}^2 / \text{V} \cdot \text{s}$.

A Figura 4.5 ilustra o comportamento da velocidade estacionária dos buracos

em função da temperatura da rede para as duas direções do campo elétrico aplicado no 4H-SiC para campos elétricos aplicados de 1 kV/cm, 2 kV/cm e 3 kV/cm. Com o aumento da temperatura, aumenta-se a vibração da rede cristalina, aumentando a possibilidade de colisões dos portadores de carga com os átomos da rede. Dessa forma, os portadores de carga perdem parte de sua energia de movimento, fazendo com que a intensidade da velocidade seja diminuída.

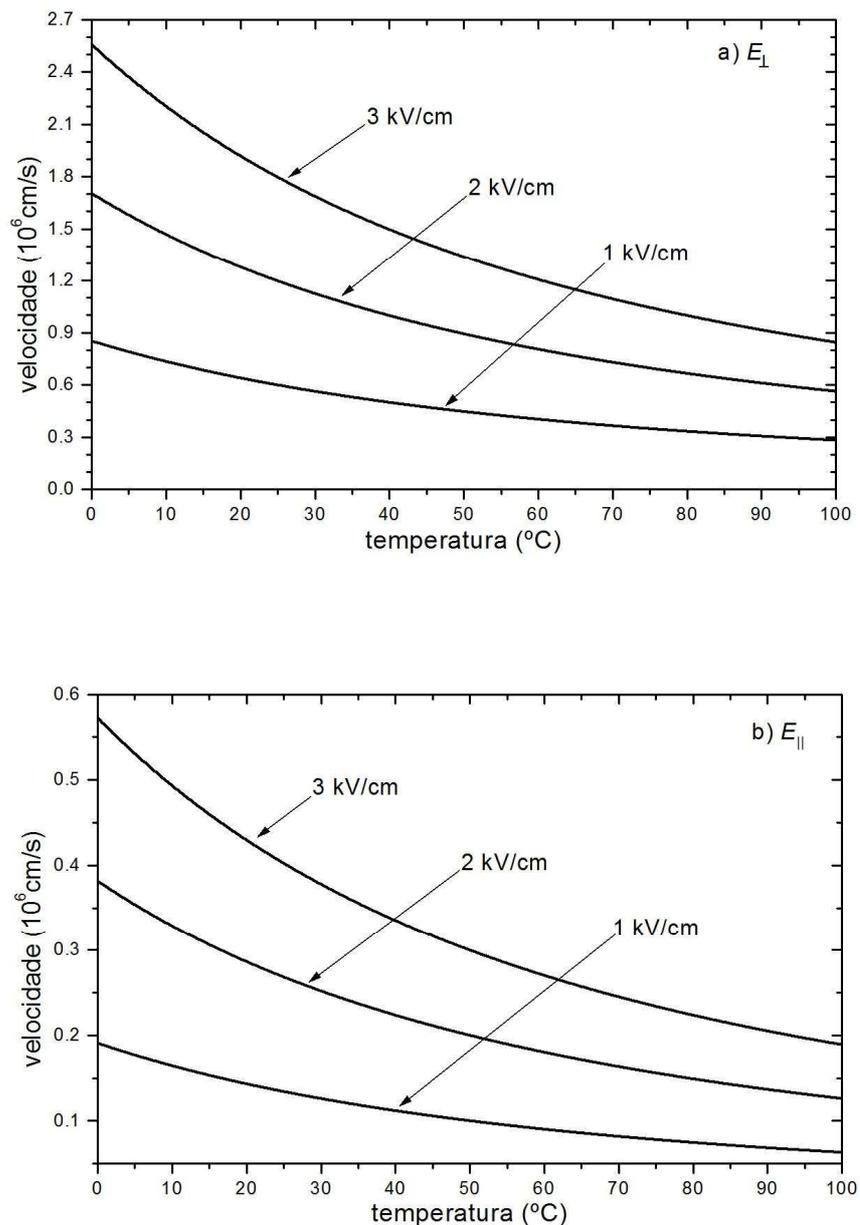


Figura 4.5 - Velocidade estacionária dos buracos em função da temperatura da rede cristalina.

Para um campo elétrico de 3 kV/cm a Fig. 4.6 mostra em um único gráfico a mobilidade dos buracos em função da temperatura para o campo elétrico aplicado perpendicular e paralelo ao eixo c . Apesar da mobilidade não depender da intensidade do campo elétrico, ela é influenciada pela temperatura. De forma análoga à velocidade, a mobilidade dos buracos também diminui com o aumento da temperatura. A mobilidade tem uma redução de aproximadamente 33% de 0 a 100°C.

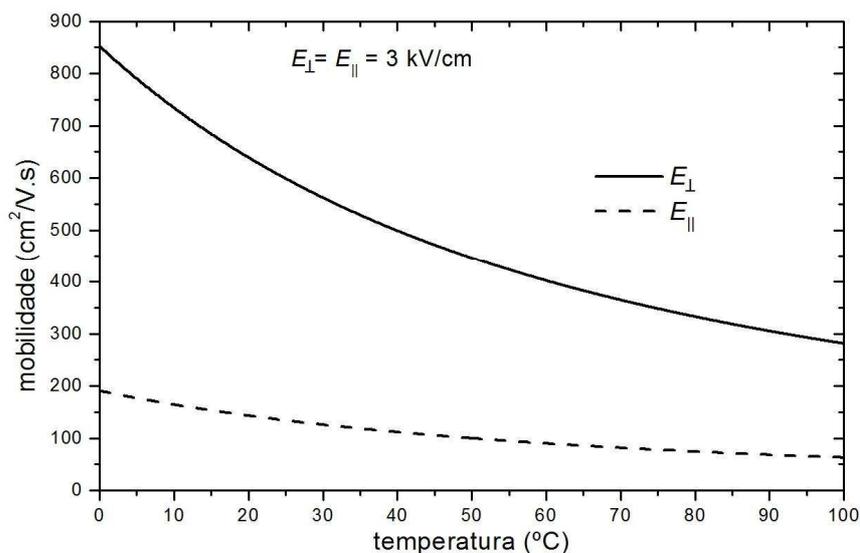


Figura 4.6 - Redução da mobilidade eletrônica com o aumento da temperatura.

4.3 4H-SiC dopado tipo “n”

Passamos agora para o caso do semicondutor 4H-SiC dopado tipo “n”. Utilizamos as Equações (3.8) e (3.9), demonstradas no Capítulo 3 e os dados contidos na Tabela 3.1 do Capítulo 3 para determinar a velocidade e a posição do elétron em duas direções no semicondutor 4H-SiC: quando o campo elétrico é aplicado na direção paralela ao eixo c (E_{\parallel}) ou quando o campo elétrico é aplicado na direção perpendicular ao eixo c (E_{\perp}).

4.3.1 Estado Transiente

Observando a Figura 4.7 notamos que a velocidade do elétron com o campo elétrico aplicado paralelamente ao eixo c do semicondutor 4H-SiC é menor que a

velocidade do elétron com o campo elétrico aplicado perpendicularmente ao eixo c . Além disso, nos primeiros 1,5 ps, a velocidade cresce rapidamente e, após 1,5 ps, a velocidade tende a se tornar constante.

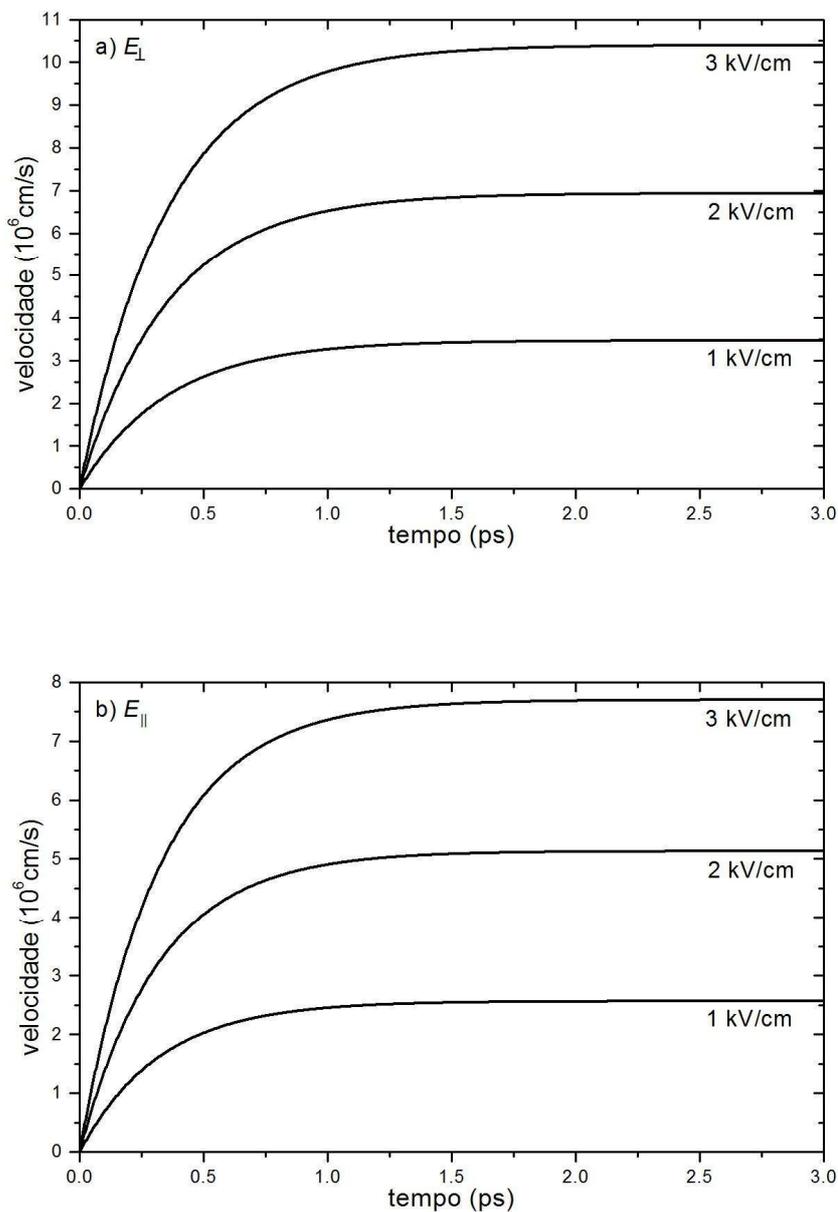


Figura 4.7 - Velocidade do elétron no estado transiente no 4H-SiC. A figura (a) refere-se ao campo perpendicular no semicondutor. A figura (b) refere-se ao campo paralelo no semicondutor.

Utilizando a Equação (3.9), determinamos a posição do elétron no semicondutor, em função do tempo, conforme ilustrado na Figura 4.8. Analisando a Figura 4.8

notamos que o elétron percorre uma distância maior no cristal semiconductor 4H-SiC com o campo elétrico aplicado perpendicularmente ao eixo c . Essas informações possibilitam construir dispositivos com tamanhos específicos que podem levar ao dimensionamento mais eficiente em semicondutores dopados tipo n .

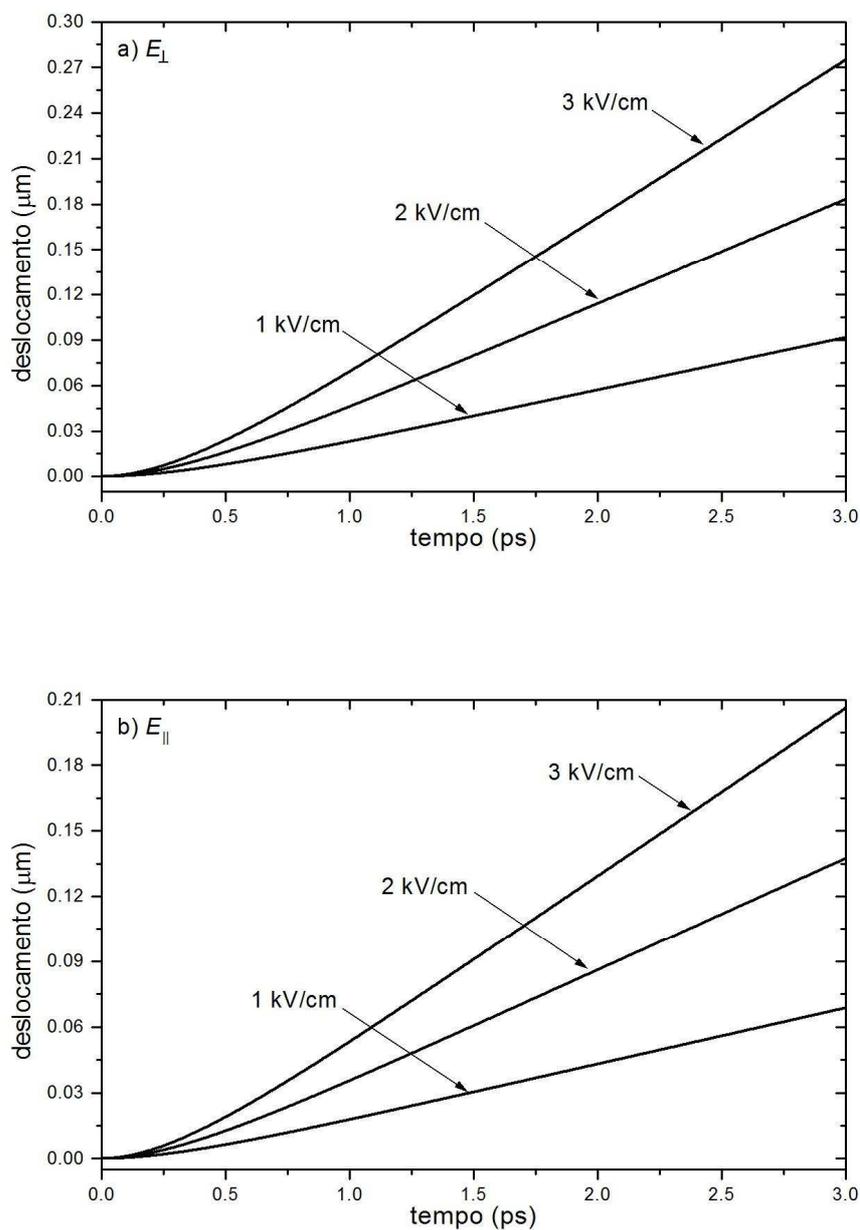


Figura 4.8 - Posição do elétron no semiconductor 4H-SiC. Figura a) campo elétrico aplicado perpendicularmente ao eixo c e Figura (b) campo elétrico aplicado paralelamente ao eixo c .

Para um campo elétrico de 3 kV/cm a Fig. 4.9 mostra em um gráfico o deslocamento dos elétrons para o campo elétrico aplicado perpendicular e paralelo ao eixo c . Nota-se que para E_{\perp} os elétrons percorrem um distância de $0,27 \mu\text{m}$ em 3 ps enquanto que para E_{\parallel} uma distância de $0,20 \mu\text{m}$, isto é, com o campo elétrico aplicado perpendicularmente ao eixo c a distância percorrida pelo elétron é aproximadamente 1,35 vezes a distância percorrida com o campo elétrico aplicado paralelo ao eixo c .

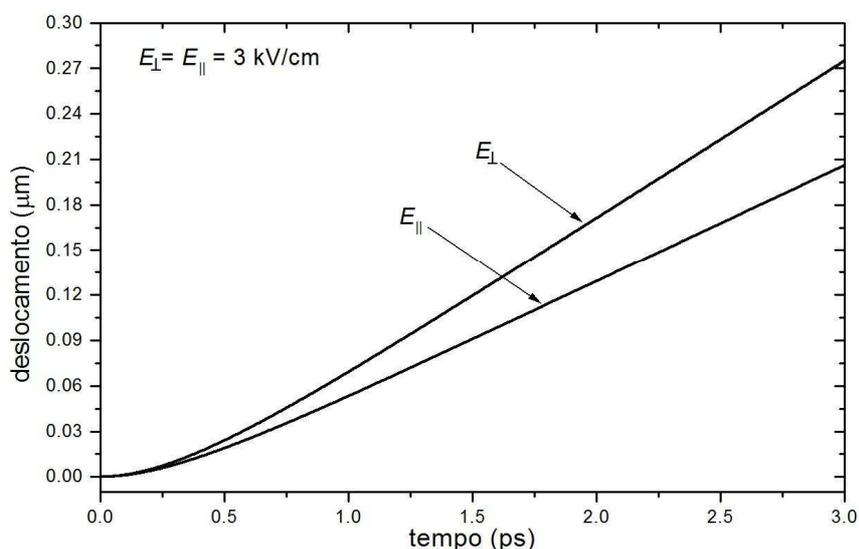


Figura 4.9 - Comparação do deslocamento dos elétrons entre os dois campos (perpendicular e paralelo) para um campo elétrico de 3 kV/cm.

4.3.2 Estado Estacionário

Utilizando os dados do semicondutor 4H-SiC da Tabela 3.1 plotamos o comportamento da velocidade de deriva do elétron no estado estacionário em função do campo elétrico, fornecido pela Equação (4.2), conforme apresentado na Figura 4.10. Observamos que com o campo elétrico aplicado perpendicularmente ao eixo c a velocidade do elétron é maior que com o campo elétrico aplicado paralelo ao eixo c refletindo o comportamento do elétron no estado transitório, conforme a Figura 4.7. Calculando a declividade das retas da Fig. 4.10 obtemos que a mobilidade eletrônica com o

campo elétrico aplicado perpendicularmente ao eixo c é de $\mu_{\perp} = 3476.4 \text{ cm}^2 / \text{V.s}$ e para o campo elétrico aplicado paralelamente ao eixo c a mobilidade eletrônica é $\mu_{\parallel} = 2566.1 \text{ cm}^2 / \text{V.s}$.

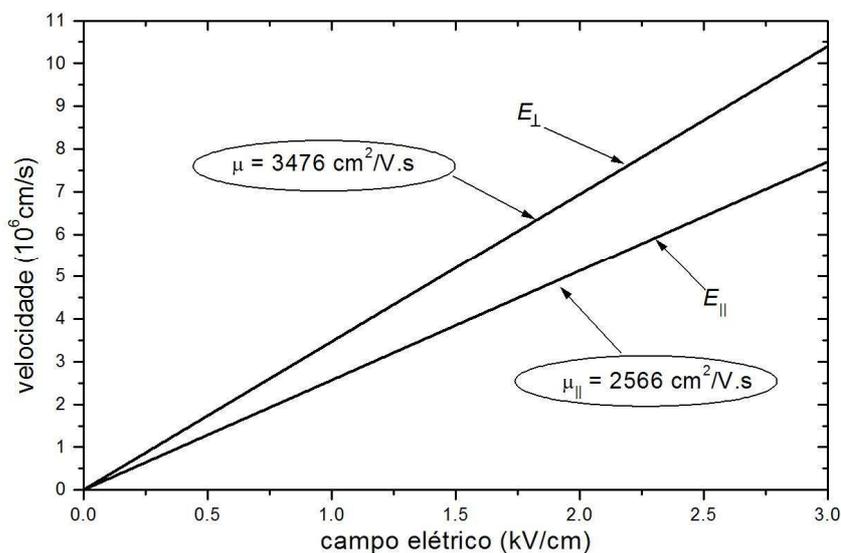


Figura 4.10 - A velocidade dos elétrons no estado estacionário.

Nas figuras 4.1 a 4.10 utilizamos a temperatura ambiente, com valor de 300 K. A Equação (3.14) apresenta que o parâmetro α possui uma dependência com a temperatura da rede cristalina.

A Figura 4.11 ilustra o comportamento da velocidade estacionária dos elétrons em função da temperatura da rede para as duas direções aplicadas do campo elétrico no 4H-SiC. Com o aumento da temperatura, aumenta-se a vibração da rede cristalina, aumentando a possibilidade de colisões dos portadores de carga com os átomos da rede. Dessa forma, os portadores de carga perdem parte de sua energia de movimento, fazendo com que a intensidade da velocidade seja diminuída. A redução da velocidade de 0 a 100°C para cada intensidade de campo elétrico aplicado é de aproximadamente 33%.

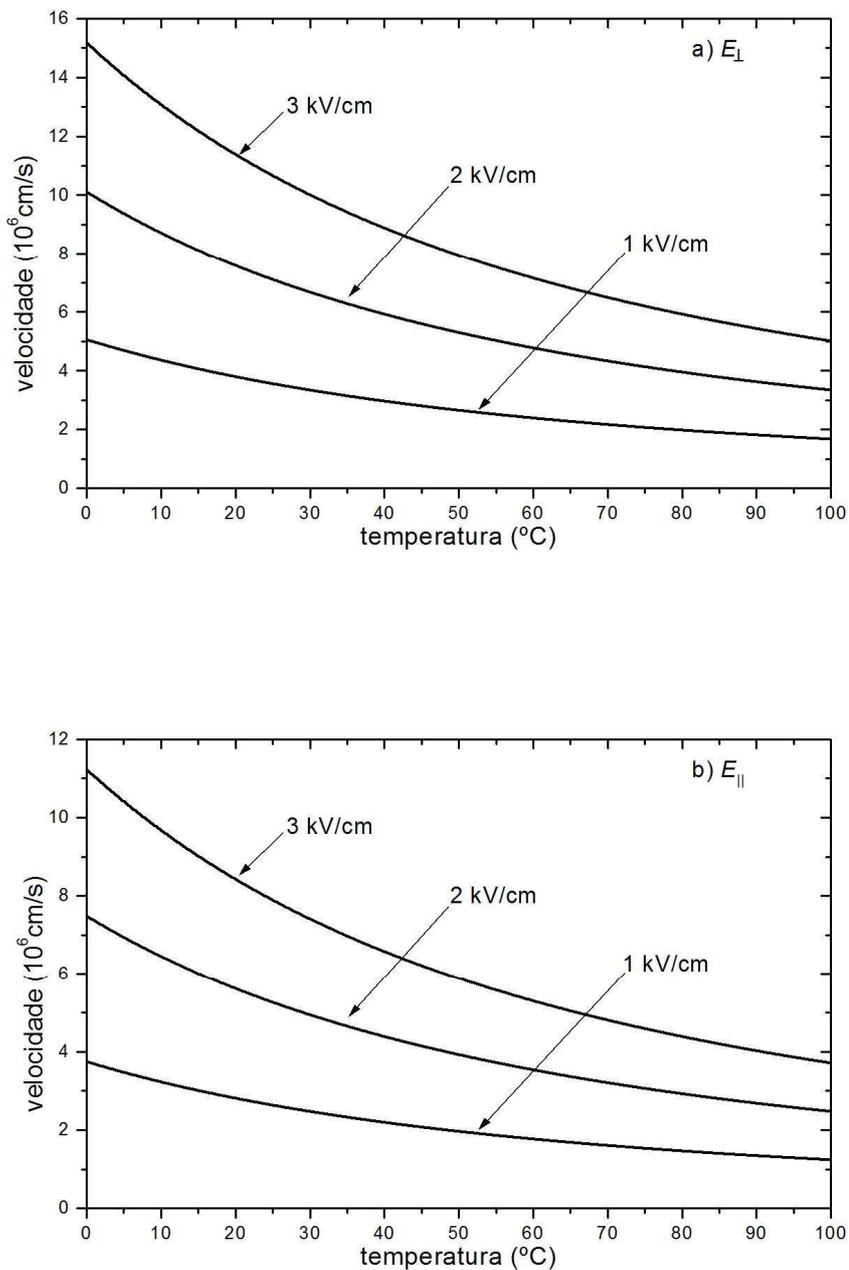


Figura 4.11 - Velocidade estacionária dos elétrons em função da temperatura da rede cristalina.

De forma análoga à velocidade, a mobilidade eletrônica também diminui com o aumento da temperatura. A mobilidade eletrônica tem uma redução de aproximadamente de 33% de 0 até 100° C.

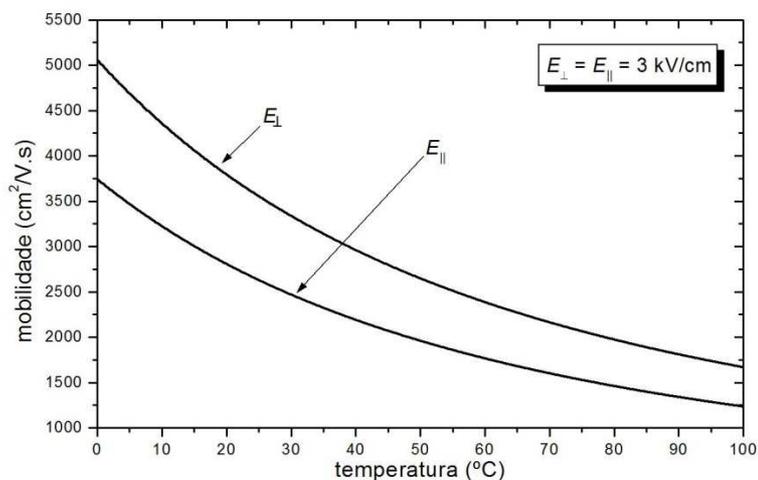


Figura 4.12 - Redução da mobilidade eletrônica com o aumento da temperatura.

4.4 Estudo Comparativo

A Figura 4.13 mostra uma comparação das mobilidades do semiconductor 4H-SiC, determinados neste trabalho, variando-se a temperatura de 0 a 100°C para um campo elétrico aplicado de 3 kV/cm. A linha cheia corresponde ao 4H-SiC dopado tipo n e a linha tracejada ao 4H-SiC dopado tipo p. A mobilidade para o caso dopado tipo n é maior devido aos portadores neste caso terem uma massa efetiva menor que o dopado tipo p. Os resultados mostram que para dispositivos que necessitem de uma alta mobilidade, o semiconductor 4H-SiC dopado tipo n, com o campo elétrico aplicado perpendicularmente ao eixo *c*, seria então o mais viável.

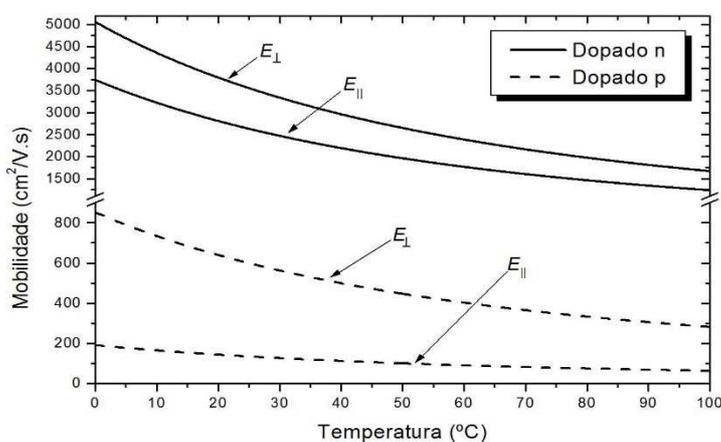


Figura 4.13 - Comparação da mobilidade do semiconductor 4H-SiC dopado tipo n e dopado tipo p.

A Tabela 4.1 mostra um resumo das mobilidades da Figura 4.13 para uma temperatura ambiente, enquanto que a Tabela 4.2 mostra a mobilidade conhecida de portadores de alguns dos semicondutores mais utilizados comercialmente (silício e germânio), também à temperatura ambiente. Verifica-se que o semicondutor 4H-SiC seria tecnicamente viável em relação à mobilidade, visto que possui valores de mobilidade próximos ou melhores (conforme a situação) que aos semicondutores mais utilizados comercialmente.

Tabela 4.1 - Mobilidades obtidas neste trabalho para o 4H-SiC à temperatura ambiente em $\text{cm}^2/\text{V.s}$.

Campo Elétrico	Elétrons	Buracos
Perpendicular ao eixo c	3467,4	584,3
Paralelo ao eixo c	2566,1	130,9

Tabela 4.2 - Mobilidade de portadores de alguns semicondutores à temperatura ambiente, em $\text{cm}^2/\text{V.s}$ [29]

Semicondutor	Elétrons	Buracos
Si (silício)	1350	480
Ge (germânio)	3600	1800

A Tabela 4.3 mostra uma comparação de valores da mobilidade do semicondutor 4H-SiC dopado tipo p para uma temperatura de 300 kelvin e para baixos valores de campos elétricos aplicados (ou seja, em regime Ôhmico). Nota-se que nosso valor aproxima-se do valor obtido por simulação computacional por Stefanakis et. al. [30] e um acordo que pode ser considerado razoável quanto ao valor experimental obtido por J. Pernot et. al. [31]. Nós enfatizamos que valores experimentais para a mobilidade variam muito de uma amostra para outra, variação esta que está intimamente relacionada com a qualidade e com as condições de crescimento do cristal. De acordo com F. Meng et al. [32], devido à abundância de variados dados na literatura, tanto experimentais quanto teóricos, as propriedades elétricas de transporte do semicondutor SiC não tem sido muito bem conhecidas em nível microscópico.

Tabela 4.3 Valores da mobilidade do semicondutor 4H-SiC dopado tipo p.

Referência	Método	Mobilidade (cm ² /V.s)
[30]	Experimental	96,6
[31]	Simulação	123,6
Este trabalho	Teórico	130,9

Capítulo 5

Conclusão

Para o desenvolvimento de dispositivos de alta velocidade torna-se necessário conhecer em detalhes as propriedades dinâmicas dos elétrons e buracos em semicondutores, nas escalas de tempo de picosegundos (10^{-12} s) e de femtossegundos (10^{-15} s). A investigação de fenômenos ultra-rápidos em semicondutores é de grande interesse, uma vez que tem se tornado indispensável a utilização tecnológica de dispositivos que operem nessas condições ultra-rápidas como, por exemplo, detectores utilizados em aceleradores de partículas e circuitos que operam em sistemas de airbag em automóveis.

Resumindo, nesta tese determinamos teoricamente a velocidade de deriva, o deslocamento e a mobilidade de buracos e elétrons no semicondutor 4H-SiC dopado tipo p ou n, submetido a campos elétricos de baixa intensidade aplicados perpendicularmente ou paralelamente ao eixo *c*. Para tanto utilizamos uma equação semi-clássica baseada na segunda lei de Newton a qual conduz a uma equação de evolução do tipo Newton-Langevin.

Foi verificado que a maior velocidade de deriva e conseqüentemente, a maior mobilidade ocorre quando o campo elétrico é aplicado perpendicularmente ao eixo *c*. Foi também determinada a variação da velocidade e da mobilidade em função da temperatura da rede, observando-se que ambas sofrem redução, com o aumento da temperatura.

É extremamente importante do ponto de vista de aplicações em dispositivos eletrônicos comparar as propriedades de direções diferentes de um particular material. Uma direção pode ser mais conveniente que a outra em alguma aplicação tecnológica, sendo mais atrativa para certas aplicações em determinados dispositivos.

As investigações realizadas nesta tese resultaram na publicação de dois artigos científicos, o primeiro referente ao 4H-SiC dopado tipo p e o segundo ao 4H-SiC dopado tipo n, a saber:

1. J. L. Vasconcelos, C. G. Rodrigues, R. Luzzi. Anisotropic Hole Drift Velocity in 4H-SiC. *Materials Science and Engineering B: Advanced Functional Solid-State Materials*, vol. 249, p. 114426, 2019.
2. J. L. Vasconcelos, C. G. Rodrigues, R. Luzzi. Study of Electron Transport in 4H-SiC by Using Nonenquilibrium Statistical Ensemble Formalism. *Brazilian Journal of Physics*, vol. 49, pp. 494-501, 2019.

Referências

- [1] C. G. Rodrigues, C. A. B. Silva, A. R. Vaconcellos, J. G. Ramos, R. Luzzi. The role of nonequilibrium thermo-mechanical statistics in modern technologies and industrial processes: an overview. *Brazilian Journal of Physics*, v. 40, pp. 63-91, 2010.
- [2] F. Filippin, *Estado e desenvolvimento: a indústria de semicondutores no Brasil*, UNICAMP, Campinas, 2016.
- [3] PIB avança 1,0% em 2017 e fecha ano em R\$ 6,6 trilhões. IBGE, março.2018. Disponível em: <<https://agenciadenoticias.ibge.gov.br/agencia-sala-de-imprensa/2013-agencia-de-noticias/releases/20166-pib-avanca-1-0-em-2017-e-fecha-ano-em-r-6-6-trilhoes>>. Acesso em: 24 out.2018. Citado na página 14.
- [4] S. J. Pearson, Ed., articles in *GaN and Related Materials*, in the series: Optoelectronic Properties of Semiconductors and Superlattices, Gordon and Breach, New York, USA, 1997.
- [5] C. Weitzel, L. Pond, K. Moore, M. Bhatnagar, Effect of device temperature on RF FET power density, *Mater. Sci. Forum*, vol. 264, p. 969, 1998.
- [6] V. A. Izhevskiy, L. A. Genova, J. C. Bressiani, A. H. A. Bressiani. Review article: Silicon Carbide. Structure, Properties and Processing, *Cerâmica*, vol. 46, p. 297, 2000, <http://dx.doi.org/10.1590/S0366-69132000000100002>.
- [7] K. Takahashi, A. Yoshikawa, A. Sandhu (Eds.), *Wide Bandgap Semiconductors*, Springer, Berlin, Germany, 2006.

- [8] M. Z. S. Flores, F. F. Maia Jr., V. N. Freire, J. A. P. Costa, E. F. Silva Jr., Band structure anisotropy effects on the hole transport transient in 4H-SiC, *Microelectronics Journal*, vol. 34, nos. 5-8, p. 717, 2003.
- [9] H. E. Nilsson, A. Martinez, U. Sannemo, M. Hjelm, E. Bellotti, K. Brennan, Monte Carlo simulation of high field hole transport in 4H-SiC including band to band tunneling and optical interband, *Physica B*, vol. 314, p. 68, 2002.
- [10] M. Hjelm, K. Bertilsson, H. E. Nilsson, Full band Monte Carlo study of bulk and surface transport properties in 4H and 6H-SiC, *Applied Surface Science*, vol. 184, p. 19, 2001.
- [11] K. Tsukioka, D. Vasileska, D. K. Ferry, An ensemble Monte Carlo study of high-field transport in β -SiC, *Physica B*, vol. 185, p. 466, 1993.
- [12] E. Bellotti, H. E. Nilsson, K. F. Brennan, P. P. Ruden, R. Trew, Monte Carlo calculation of hole initiated impact ionization in 4H phase SiC, *J. Appl. Phys*, vol. 87, p. 3864, 1993.
- [13] R. P. Joshi, Monte Carlo calculations of the temperature- and field-dependent electron transport parameters for 4H-SiC, *J. Appl. Phys*, vol. 78, p. 5518, 1995.
- [14] H. E. Nilsson, U. Sannemo, C. S. Petersson, Monte Carlo simulation of electron transport in 4H-SiC using a two-band model with multiple minima, *J. Appl. Phys*, vol. 80, p. 3365, 1996.
- [15] M. H. Kalos and P. A. Whitlock. *Monte Carlo Methods*, Wiley-Interscience, New

York, USA, 2007.

[16] P. Kalashnikov, Equations of motion, Green's functions, and thermodynamic relations in theories of linear relaxation. *Theoretical and Mathematical Physics*, vol. 35, pp. 362-370, 1978.

[17] J. C. Vaissiere, J. P. Nougier, M. Fadel, L. Hlou and P. Kocevar. Numerical solution of coupled steady-state hot-phonon–hot-electron Boltzmann equations in InP, *Physical Review B*, vol. 46, no. 20, p. 13082, 1992.

[18] R. Luzzi, A. R. Vaconcellos, J. G. Ramos, C. G. Rodrigues. *Statistical Irreversible Thermodynamics in the Framework of Zubarev's Nonequilibrium Statistical Operator Method*. *Theoretical and Mathematical Physics*, v. 194, pp. 4-29, 2018.

[19] W. J. Swart. *Semicondutores, fundamentos técnicos e aplicações*. Campinas: Unicamp, 2008.

[20] H. Mello, R. Biasi. *Introdução à física dos semicondutores*. São Paulo: INL, 1975.

[21] I. F. L. Dias, J. L. Duarte, R. C. Teixeira. *Introdução aos semicondutores e suas aplicações tecnológicas*. Londrina: Eduel, 2005.

[22] C. G. Rodrigues, Influence of the concentration, temperature and electric field intensity on the electron mobility in n-doped zinc sulphide. *European Physical Journal B*, v. 72, pp. 405-408, 2009.

[23] C. G. Rodrigues, R. Luzzi. *Semiconductor Nonequilibrium Statistics: Applications to far-from equilibrium situations*, IOP Publishing Ltda., Bristol, UK, 2019 (in press).

[24] T. Tomé, M. J. Oliveira, *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade*, ed. USP, São Paulo, 2001.

[25] W. Götz, A. Schöner, G. Pensl, W. Suttrop, W.J. Choyke, R. Stein, S. Leibenzeder, Nitrogen donors in 4H-silicon carbide, *Journal of Applied Physics*, vol. 73, pp. 3332-3338 (1993).

<https://doi.org/10.1063/1.352983>

[26] C. Persson, U. Lindefelt, Relativistic band structure calculation of cubic and hexagonal SiC polytypes, *Journal of Applied Physics*, vol. 82, no. 11, pp. 5496-5508 (1997).

<https://doi.org/10.1063/1.365578>

[27] H. Iwataa, K. M. Itohb, Donor and acceptor concentration dependence of the electron Hall mobility and the Hall scattering factor in n-type 4H- and 6H-SiC, *Journal of Applied Physics*, vol. 89, pp. 6228-6234 (2001).

<https://doi.org/10.1063/1.1366660>

[28] E. Bellotti, H. E. Nilsson, K. F. Brennan, P. P. Ruden, R. Trew, Monte Carlo calculation of hole initiated impact ionization in 4H phase SiC, *Journal of Applied Physics*, vol. 87, no. 8, pp. 3864-3871 (2000).

<https://doi.org/10.1063/1.372426>

[29] C. Kittel. *Introduction to Solid State Physics*, 7^a edição, ed. John Wiley e Sons, New York, USA, 1996.

[30] D. Stefanakis. K. Zekentes. TCAD models of the temperature and oping dependence of the bandgap and low field carrier mobility in 4H-SiC. *Microelectron. Eng.*,v. 116, pp. 65-71, 2014.

<http://dx.doi.org/10.1016/j.mee.2013.10.002>.

[31] J. Pernot, W. Zawadzki, S. Contreras, J. L. Robert, E. Neyret, L. Di Cioccio. Electrical transport in 4H silicon carbide. *Journal of Applied Physics*, v. 90, pp. 1869-1878, 2001.

<http://doi.org/10.1063/1.1382849>

[32] F. Meng, J. Ma, J. He, W. Li. Phonon-limited carrier mobility and temperature-dependent scattering mechanism of 3C-SiC from first principles. *Physical Review B*, v. 99, p. 045201, 2019.