

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

**Estudo da Viabilidade Técnica da Mobilidade
do Semicondutor 6H-SiC para Aplicação
na Indústria de Semicondutores**

Ricardo Tadeu Ferracioli

Março de 2020

Estudo da Viabilidade Técnica da Mobilidade do semicondutor 6H-SiC para Aplicação na Indústria de Semicondutores

Ricardo Tadeu Ferracioli

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

Março de 2020

Estudo da Viabilidade Técnica da Mobilidade do semicondutor 6H-SiC para Aplicação na Indústria de Semicondutores

Ricardo Tadeu Ferracioli

Esta Dissertação julgada adequada para obtenção do título de Mestre em Engenharia de Produção e Sistemas, e em sua forma final pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Produção e Sistemas da Pontifícia Universidade Católica de Goiás em março de 2020.

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Marcos Lajóvic Carneiro.

Coordenador do Programa de Pós-Graduação em engenharia de Produção e Sistemas



Prof. Dr. Clóves Gonçalves Rodrigues,
Orientador

Prof. Dr. Marcos Lajovic Carneiro,
Avaliador Interno - PUC Goiás



Prof. Dra. Simone Souza Ramalho,
Avaliador Externo - IFG

Prof. Dra. Maria José Pereira Dantas,
Suplente - PUC Goiás

GOIÂNIA - GO
Março de 2020

F368e Ferracioli, Ricardo Tadeu

Estudo da viabilidade técnica da mobilidade do semicondutor
6H-SiC para aplicação na indústria de semicondutores
/ Ricardo Tadeu Ferracioli.-- 2020.

53 f.;

Texto em português, com resumo em inglês.

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

Inclui referências: f. 50-53

1. 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 -- 621.315.592(043)

Dedico à minha esposa, Alexandra Batistela Ferreira, e aos meus filhos, que sempre me apoiaram, acreditaram no meu esforço e abriram mão de passar um tempo comigo para a concretização deste trabalho.

Agradecimentos

Ao meu orientador, Prof. Dr. Clóves Gonçalves Rodrigues, que me acompanhou em todo tempo da minha jornada.

Aos meus colegas e companheiros do MEPROS que sempre me incentivaram.

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

Resumo

Neste trabalho estudamos a mobilidade do semicondutor 6H-SiC, o qual é de grande interesse tecnológico atual. O 6H-SiC possui várias utilidades comerciais. Inúmeras aplicações tem sido propostas com base nas suas propriedades optoeletrônicas, como: eletrônicos de alta temperatura, microestruturas, dispositivos optoeletrônicos, dispositivos de alta potência e alta frequência, eletrônicos rígidos de radiação, detectores de ultravioleta, células solares, diodos emissores de luz, etc. Neste trabalho foi deduzido teoricamente a velocidade de deriva, o deslocamento e a mobilidade dos portadores de carga no semicondutor 6H-SiC. A caracterização e o conhecimento destas propriedades são de extrema importância para a fabricação de componentes eletrônicos pela indústria de semicondutores. Para o estudo aqui realizado foi utilizada uma equação semi-clássica baseada na segunda lei de Newton. A aplicação se deu no semicondutor 6H-SiC dopado tipo n levando-se em consideração variações da temperatura ambiente e do campo elétrico aplicado no semicondutor. O principal resultado obtido é que a mobilidade eletrônica é maior quando o campo elétrico é aplicado na direção perpendicular ao eixo c da rede cristalina do semicondutor 6H-SiC. Foi obtido também que a mobilidade diminui com o aumento da temperatura de forma bem definida. Esta redução na mobilidade com a temperatura fornece a possibilidade de construção de um termômetro baseado nesta relação entre a mobilidade eletrônica e a temperatura.

Abstract

In this work we study the mobility of the 6H-SiC semiconductor, which is of great technological interest today. 6H-SiC has several commercial uses. Numerous applications have been proposed based on their opto-electronic properties, such as: high temperature electronics, microstructures, opto-electronic devices, high power and high frequency devices, rigid radiation electronics, ultraviolet detectors, solar cells, emitting diodes of light, etc. In this work, the drift speed, displacement and mobility of load carriers in the 6H-SiC semiconductor were theoretically deduced. The characterization and knowledge of these properties are extremely important for the manufacture of electronic components by the semiconductor industry. For the study carried out here, a semi-classical equation based on Newton's second law was used. The application took place in the semiconductor 6H-SiC doped type n taking into account variations of the ambient temperature and the electric field applied in the semiconductor. The main result obtained is that the electronic mobility is greater when the electric field is applied in the direction perpendicular to the c axis of the 6H-SiC semiconductor crystalline network. It was also obtained that mobility decreases with increasing temperature in a well-defined manner. This reduction in mobility with temperature provides the possibility of building a thermometer based on this relationship between electronic mobility and temperature.

Lista de ilustrações

Figura 2.1 - Estrutura de bandas de metais, semicondutores e isolante.....	14
Figura 2.2 - Valores aproximados de condutividade elétrica de materiais à temperatura ambiente	16
Figura 2.3 - Representação esquemática do deslocamento de cargas de um condutor	17
Figura 2.4 - Estrutura cristalina do 6H-SiC.....	18
Figura 2.5 - Esquema de crescimento de um cristal de SiC. Fonte: Ref. [Nakamura, 2004]	19
Figura 2.6a - Campo elétrico paralelo ao eixo c : \mathcal{E}_{\parallel}	20
Figura 2.6b - Campo elétrico perpendicular ao eixo c : E_{\perp}	20
Figura 2.7 - Célula unitária de cristal de silício com a representação das ligações químicas	22
Figura 2.8 - Átomo central com quatro átomos vizinhos.	22
Figura 2.9 - Cubos de face centrada	23
Figura 2.10 - Ligação covalente	24
Figura 2.11 - Quebra da ligação covalente	25
Figura 2.12 - Dopagem do semicondutor com adição de fosforo.....	26
Figura 2.13 - Dopagem do semicondutor com adição de boro.....	27
Figura 2.14a - Ilustra os níveis num átomo simples	28
Figura 2.14b - Banda de energia numa estrutura cristalina.....	28
Figura 3.1 - Representação do movimento dos elétrons em um meio material qualquer	30
Figura 3.2 - O processo de deriva de portadores ocorre quando se aplica ao semicondutor um campo elétrico. Os portadores são acelerados pelo campo elétrico e adquirem uma velocidade denominada por velocidade de deriva.....	31
Figura 3.3 - Representação das forças que atuam sobre o elétron quando este é submetido a um campo elétrico $\vec{\mathcal{E}}$	32
Figura 3.4 - Analogia a um sistema mecânico, do movimento dos portadores de carga na presença de um campo elétrico.	33

Figura 3.5 - Velocidade $v(t)$ conforme Equação (2.8) tornando-se $e\mathcal{E}/\alpha = 1$ e $\beta = 1$: (1) regime transiente, (2) regime estacionário.....	36
Figura 3.6 - Comportamento de $v(t)$ para dois valores de β	37
Figura 4.1 - Velocidade do elétron no estado transiente no 6H-SiC. A figura (a) refere-se ao campo elétrico aplicado perpendicularmente ao eixo c e a (b) ao campo elétrico aplicado paralelamente ao eixo c	41
Figura 4.2 - Posição do elétron no semicondutor 6H-SiC. A figura (a) refere-se ao campo elétrico aplicado perpendicularmente ao eixo c e a (b) ao campo elétrico aplicado paralelamente ao eixo c	42
Figura 4.3 - Posição do elétron em função do tempo t para um campo elétrico de 3 kV/cm	43
Figura 4.4 - Velocidade do elétron em função do campo elétrico aplicado	44
Figura 4.5 - Energia cinética por elétron, Eq. (4.3), em função do campo elétrico aplicado.....	45
Figura 4.6 - Velocidade estacionária dos portadores de carga elétrica em função da temperatura da rede cristalina. A figura (a) refere-se ao campo elétrico aplicado perpendicularmente ao eixo c e a (b) ao campo elétrico aplicado paralelamente ao eixo c	46
Figura 4.7 - Redução da mobilidade eletrônica com o aumento da temperatura para um campo elétrico de intensidade de 3 kV/cm.....	47
Figura 4.8 - Comparação da mobilidade obtida nesta dissertação (linhas cheias) com a mobilidade experimental disponível na literatura (símbolos)	48

Sumário

Capítulo 1 - Introdução.....	12
Capítulo 2 - Os Semicondutores	14
2.1 - Propriedades dos Semicondutores	14
2.2 - Lacunas	17
2.3 - O Semicondutor 6H-SiC	18
2.4 - Estrutura Cristalina	21
2.5 - Ligações Covalentes	23
2.6 - Quebra de Ligações Covalentes	24
2.7 - Dopagem (adição de impureza)	26
2.8 - Níveis de energia	27
Capítulo 3 - Obtenção das Equações de Deslocamento dos Portadores.....	30
3.1 - Introdução	30
3.2 - Equação da Velocidade $\vec{v}(t)$	32
3.3 - Equação do Deslocamento $x(t)$	37
Capítulo 4 - Resultados	40
4.1 - Estado Tansitório	40
4.2 - Estado Estacionário.....	43
4.3 - Influência da Temperatura.....	45
Capítulo 5 - Conclusões	49
Bibliografia.....	50

Capítulo 1

Introdução

Há séculos cientistas reconheceram que a matéria é constituída de átomos. A organização dos átomos na formação do estado sólido dos materiais tem consequências importantes nas propriedades eletrônicas dos mesmos [Swat, 2008].

O início da física moderna pode ser atribuído à identificação da primeira partícula sub-atômica: o elétron. Sua descoberta por J. J. Thomson em 1897 levou imediatamente à sugestão de que os elétrons seriam os portadores responsáveis pelo mecanismo microscópico da condução de eletricidade pelos metais. Thomson realizou experimentos em um tubo de raios catódicos: raios emitidos por um filamento metálico aquecido semelhante ao de uma lâmpada incandescente, e acelerados por uma grade mantida a um potencial inferior ao do filamento emissor, demonstrando que estes raios eram constituídos de partículas (os elétrons) de carga negativa. Essa descoberta foi um acontecimento que revolucionou tanto a química quanto a física e que proporcionou a constante evolução da eletrônica [Dias, 2005].

Os materiais são substâncias cujas propriedades as tornam utilizáveis em estruturas, máquinas, dispositivos ou produtos consumíveis. Todos os produtos manufaturados, de qualquer tipo, dependem das características e das qualidades dos materiais empregados, ou seja, a qualidade de um produto está diretamente relacionada com a qualidade e as propriedades dos materiais [Kittel, 2006].

As propriedades de um material originam-se na sua estrutura interna, ou seja, existe uma relação biunívoca entre propriedade e estrutura do material. A estrutura do material, no entanto, apresenta uma dependência estreita com a forma de seu processamento. Assim, há também uma relação das propriedades do material com as condições de seu processamento. A estrutura interna dos materiais envolve não apenas o tipo de átomo de sua constituição (composição), mas também como eles se associam entre si, formando cristais, moléculas ou microestruturas [Callister, 2016].

Os semicondutores são essenciais para a fabricação de componentes eletrônicos, presentes na grande maioria das atividades humanas, as quais incluem

transporte, comunicação, computação, controle de processos industriais, medicina, instrumentos de análise e de pesquisa em todas as áreas. É impossível imaginar uma atividade que não tenha alguma dependência indireta, ou mesmo direta, com algum sistema eletrônico. Com dependência indireta entende-se a produção de utensílios usados nas atividades humanas, transporte e comercialização de bens [Mello, 1980].

Todas estas maravilhas eletrônicas são baseadas em materiais semicondutores. Como consequência, a eletrônica está se tornando o maior mercado mundial, com um valor total anual acima de 1 trilhão de dólares [PIB, 2017].

Neste trabalho foi deduzido teoricamente a velocidade de deriva, o deslocamento e a mobilidade dos portadores de carga em um semicondutor dopado tipo n . Para tanto, utilizamos uma equação semi-clássica baseada na segunda lei de Newton. A aplicação se deu no semicondutor 6H-SiC, dopado tipo n e submetido a campos elétricos de baixa intensidade. A dependência destas propriedades de transporte em função da temperatura e da intensidade e direção do campo elétrico foram analisadas.

O texto da dissertação está assim organizado. No capítulo 2 apresentamos a definição e as propriedades gerais dos semicondutores. No capítulo 3 são desenvolvidas as equações de movimento de portadores de carga em um semicondutor. A contribuição original deste trabalho inicia-se no capítulo 4 onde as equações de movimento são aplicadas ao caso específico do semicondutor 6H-SiC. O capítulo 5 se reserva aos comentários finais e por fim a Bibliografia com as principais referências utilizadas neste trabalho.

Capítulo 2

Os Semicondutores

2.1. Propriedades dos semicondutores

Os semicondutores são um caso particular de matérias isolantes, cuja única diferença é a magnitude da banda proibida de energia do seu diagrama de bandas, conforme Figura 2.1. Se esta for menor ou até da ordem de 3 eV, é classificado como material semicondutor, mas, se for maior que esse valor, é classificado como isolante [Swart, 2008; Kittel, 2006].

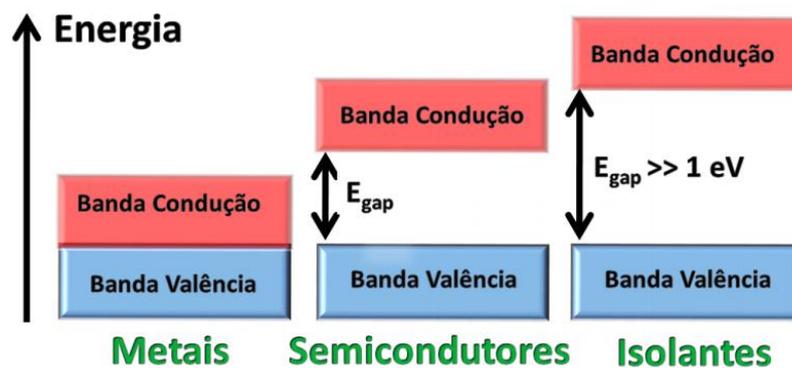


Figura 2.1 - Estrutura de bandas de metais, semicondutores e isolantes.

A temperatura de 0 K, tanto o semicondutor como o próprio isolante serão isolantes e não poderão conduzir corrente elétrica, pois, em ambos os casos, as bandas de valência encontram-se totalmente preenchidas. Com o aumento de temperatura, acima de 0 K, de um material semicondutor, com largura da banda proibida reduzida, alguns poucos elétrons da banda de valência adquirem energia térmica da rede, podendo pular dos seus estados da banda de valência para os estados vazios da banda de condução. Dessa forma, os elétrons tanto da banda de valência (banda não mais totalmente preenchida) como da banda de condução (apenas parcialmente preenchida) podem conduzir corrente elétrica. A condutividade será bem reduzida tendo em vista o número reduzido de elétrons na banda de

condução, bem como a banda de valência ainda quase preenchida. Essa situação, contudo, não ocorre em materiais isolantes que tenham largura da banda proibida de valor grande o suficiente, a não ser que elevemos muito a temperatura [Swat, 2008].

A Tabela 2.1 apresenta alguns materiais com a largura da sua banda proibida e sua correspondente classificação como isolante ou semicondutor.

Tabela 2.1: Materiais com suas respectivas larguras da banda proibida (E_G)

Material	E_G (eV) a 300 K	Classificação
Ge	0,66	Semicondutor
Si	1,12	Semicondutor
GaAs	1,42	Semicondutor
C (diamante)	5,47	Isolante
SiO ₂	9,0	Isolante
Si ₃ N ₄	5,0	Isolante

O semicondutor é um elemento com propriedades elétricas entre as do condutor e as do isolante. Entre os vários materiais que existem, a propriedade física que apresenta a maior variação é justamente a condutividade elétrica dos materiais. Esta pode variar de $10^{-18} \Omega^{-1} \text{m}^{-1}$ (quartzo) a $10^8 \Omega^{-1} \text{m}^{-1}$ (prata, cobre), ou várias ordens de grandeza maiores que isso, no caso de supercondutores. Valores típicos são apresentados na Figura 2.2; valores exatos dependem da temperatura, da estrutura interna e do processo de fabricação [Swat, 2008].

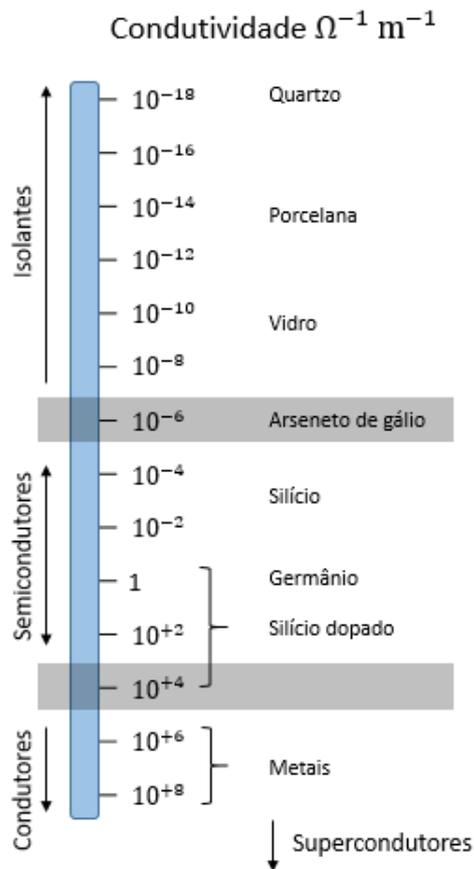


Figura 2.2 - Valores aproximados de condutividade elétrica de materiais à temperatura ambiente.

O que caracteriza o material bom condutor é o fato de os elétrons de valência (no caso do cobre, o elétron da camada N) estarem fracamente ligados ao átomo, podendo ser facilmente deslocados do mesmo. Considerando uma barra de cobre que possui um número extremamente elevado de átomos de cobre e aplicado uma diferença de potencial entre os extremos desta barra, os elétrons da camada de valência de todos os átomos facilmente se deslocarão sob a ação do campo elétrico produzido pela diferença de potencial aplicada (Figura 2.3), originando-se uma corrente elétrica no material [Callister, 2016; Mello, 1980].

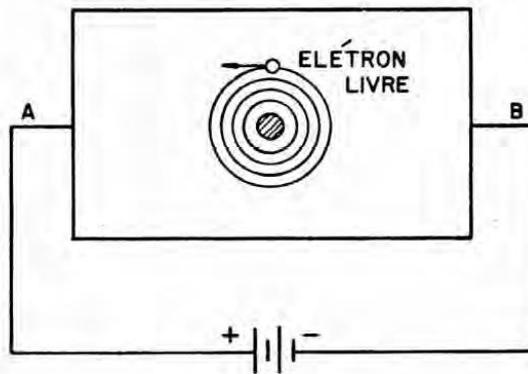


Figura 2.3 - Representação esquemática do deslocamento de cargas de um condutor.

Outros materiais que apresentam uma constituição análoga à do cobre, com um único elétron na camada de valência, são o ouro e a prata, dois outros excelentes condutores de eletricidade [Kittel, 2006].

Os materiais isolantes correspondem aos materiais que apresentam os elétrons de valência rigidamente ligados aos seus átomos. Entre os próprios elementos simples, existem vários que apresentam os elétrons de valência rigidamente ligados aos átomos. Entretanto, verifica-se que se consegue uma resistividade muito maior com substâncias compostas, como é o caso da borracha, mica, teflon e baquelita. Os átomos desta substância se combinam, formando estruturas complexas e os elétrons ficam mais fortemente ligados a estrutura [Kittel, 2006].

2.2. Lacunas

As lacunas referem-se a estados vazios da banda de valência, não preenchidos por elétrons. Elas são também chamadas de buraco ou holes. A lacuna pode ser tratada como uma partícula de carga positiva e que essa característica se deve ao comportamento dos demais elétrons da banda de valência em que se encontra a lacuna. A lacuna não existe como partícula ou como entidade isolada, mas ela é uma consequência do movimento de elétrons em um potencial periódico [Callister, 2016].

A condução através dos elétrons, de uma banda de valência quase cheia de um crista, é equivalente à condução através de partículas fictícias, correspondendo

aos estados desocupados e de massa efetiva negativa, no caso as lacunas, as quais se comportam como se fossem partículas de carga e massa de sinais positivos.

2.3. O Semicondutor 6H-SiC

O *carbeto de silício*, cuja fórmula química é SiC, foi reconhecido como um material bastante atraente para operação em dispositivos eletrônicos de alta potência, alta frequência e alta temperatura [Takahashi, 2006; Nilsson, 1996]. O SiC é também chamado de “*carborundum*”. O SiC pode se formar em muitas estruturas cristalinas distintas que são conhecidas como politipos [Izhevskiy, 1996]. Os mais comuns politipos do SiC são: o 3C-SiC, o 4H-SiC e o 6H-SiC (veja Figura 2.4), os quais tem sido utilizado para a fabricação de dispositivos eletrônicos. Estes politipos de SiC, possuem propriedades de transporte anisotrópicas, mas o grau de anisotropia é diferente para cada politipo. Esta anisotropia está associada às diferentes massas efetivas dos portadores que diferem significativamente entre orientações paralelas ao eixo c , que chamamos de m_{\parallel}^* , e aquela ao longo do plano basal perpendicular ao eixo c , que chamamos de m_{\perp}^* .

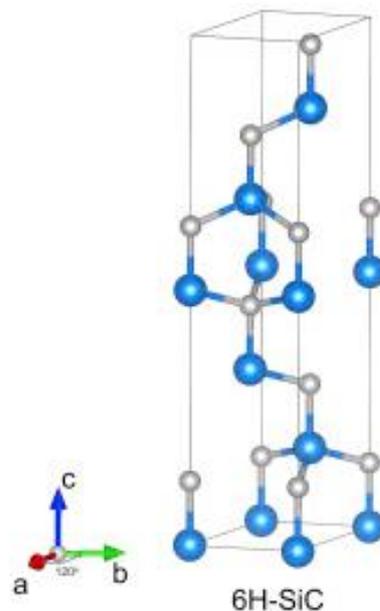


Figura 2.4 - Estrutura cristalina do 6H-SiC.

A Figura 2.5 ilustra de forma esquemática a produção de cristais de carbeto de silício através do crescimento de uma amostra inicial (*semente*) de SiC pelo deslocamento na estrutura do SiC crescida perpendicularmente ao eixo *c*. Este método foi proposto por Daisuke Nakamura e colaboradores [Nakamura, 2004] na “Toyota Central R&D Laboratories” localizada na cidade de Nagakute na província de Aichi no Japão. Este método criado por Nakamura et. al. foi pioneiro por reduzir a quantidade de falhas e defeitos na estrutura cristalina do SiC permitindo a produção de substratos que promoveram o desenvolvimento de dispositivos SiC de alta potência, reduzindo as perdas de energia dos sistemas elétricos resultantes. Assim, além de ter o domínio sob a produção de um composto muito mais eficiente, os cientistas conseguiram produzi-lo de forma mais pura.

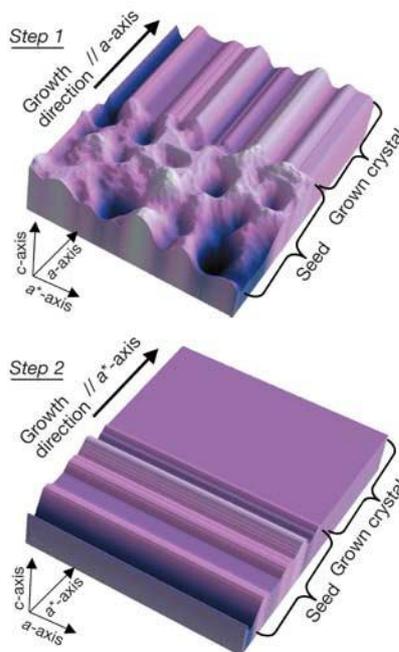


Figura 2.5 - Esquema de crescimento de um cristal de SiC. Fonte: Ref. [Nakamura, 2004].

Assim, nesta dissertação, estudamos o transporte de portadores no 6H-SiC quando a direção de transporte está ao longo do eixo *c*, ou quando a direção de transporte está no plano perpendicular a ele (plano formado pelos eixos *a* e *b* da Figura 2.6). A direção de transporte é determinada pela direção da aplicação do campo elétrico. A direção de transporte é dita paralela ao eixo *c* quando o campo elétrico \mathcal{E} é aplicado nesta direção (\mathcal{E}_{\parallel}) e consequentemente se usa m_{\parallel}^* para os

cálculos das propriedades de transporte do semiconductor. Já a direção de transporte é dita perpendicular ao eixo c quando o campo elétrico é aplicado nesta direção (ϵ_{\perp}) e conseqüentemente se usa m_{\perp}^* para os cálculos das propriedades de transporte do semiconductor (veja Figura 2.6a e 2.6b).

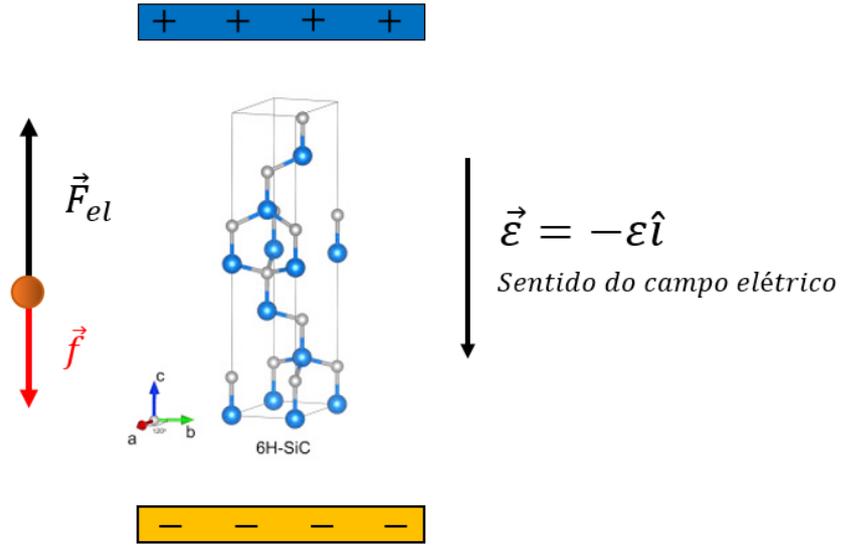


Figura 2.6a – Campo elétrico paralelo ao eixo c : ϵ_{\parallel} .

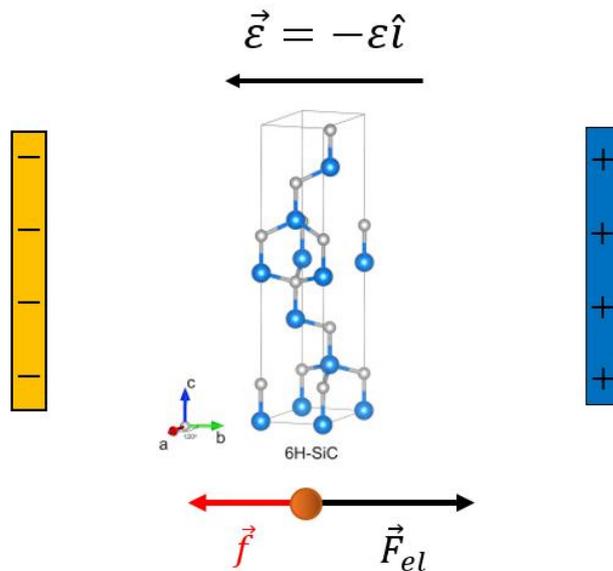


Figura 2.6b - Campo elétrico perpendicular ao eixo c : ϵ_{\perp} .

A Tabela 2.2 mostra os valores dos principais parâmetros do semicondutor 6H-SiC para o cálculo numérico do transporte de carga elétrica neste semicondutor.

Tabela 2.2 - Parâmetros do Semicondutor Carbeto de Silício 6H-SiC.

Parâmetros	Símbolo	Valor	Referência
Constante dielétrica estática	ϵ_0	9,7	[Iwataa, 2001]
Constante dielétrica óptica	ϵ_∞	6,5	[Iwataa, 2001]
Frequência de oscilação polar óptica	ω (10^{14} Hz)	1,82	[Iwataa, 2001]
Massa efetiva dos elétrons com \mathcal{E} aplicado na direção do eixo c .	$m_e^* (\epsilon_\perp)$	0,42 m_0	[Dhar, 2000]
Massa efetiva dos elétrons com \mathcal{E} aplicado perpendicular ao eixo c .	$m_e^* (\epsilon_\parallel)$	2,00 m_0	[Dhar, 2000]
Potencial de deformação acústico	E_{1e}	21,5 eV	[Iwataa, 2001]
Densidade	ρ	3,2 g/cm ³	[Dhar, 2000]
Velocidade do som no material	v_s	1,37x10 ⁶ cm/s	[Dhar, 2000]

Nas próximas capítulo obteremos a velocidade dos elétrons, o deslocamento, e a mobilidade quando o campo elétrico \mathcal{E} é aplicado na direção paralela ao eixo c , dito ϵ_\parallel , ou quando o campo elétrico é aplicado na direção perpendicular ao eixo c , ϵ_\perp , para o semicondutor 6H-SiC dopado tipo n , com uma baixa concentração de impurezas ($n < 10^{17}$ cm⁻³). Para esta condição é descartado o espalhamento dos portadores de carga (elétrons) pelas impurezas que geram a dopagem no material semicondutor [Rodrigues, 2009].

2.4. Estrutura Cristalina

Quando os átomos se agrupam formando as moléculas das diversas substâncias, o arranjo destes átomos no espaço pode ou não obedecer a uma disposição sistemática e ordenada. Todas as substâncias cujos átomos se posicionam no espaço, formam uma estrutura ordenada, são chamadas de substância cristalinas.

A Figura 2.7 ilustra a célula unitária de cristal de silício com a representação das ligações químicas entre os átomos vizinhos em arranjo tridimensional [Swart, 2008].

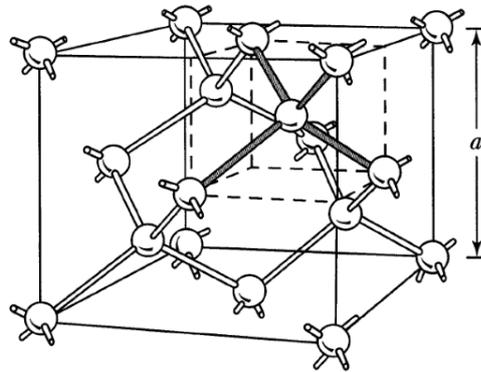


Figura 2.7 - Célula unitária de cristal de silício com a representação das ligações químicas.

Quando os átomos de silício, por exemplo, combinam-se para formar um sólido, eles se organizam num padrão ordenado chamado de cristal. Cada átomo de silício compartilha seus elétrons com quatro átomos vizinhos de tal modo que passa a existir oito elétrons na sua órbita de valência. A Figura 2.8 mostra um átomo central com quatro átomos vizinhos [Kittel, 2006].

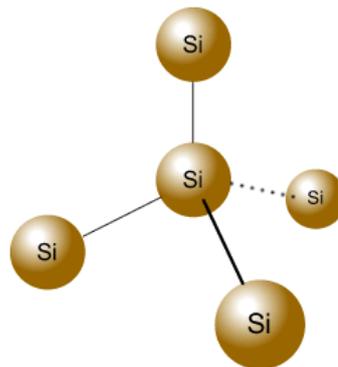


Figura 2.8 - Átomo central com quatro átomos vizinhos.

Os átomos de um mesmo elemento podem gerar diferentes substâncias, dependendo destes átomos formarem uma estrutura cristalina ou não. Por exemplo, se átomos de carbono se agruparem sem uma estrutura definida (forma amorfa), obtêm-se o material conhecido como grafita que é usado, por exemplo, para fabricar

escovas de máquinas elétricas. Por outro lado, se átomos de carbono formarem uma rede cristalina obtém-se o famoso diamante.

A Figura 2.9 ilustra a estrutura cristalina do posicionamento dos átomos de silício em uma célula unitária, padrão diamante, que transladada nas três direções, reproduz o cristal no espaço. A rede gerada pelo deslocamento dos pontos da célula unitária é chamada de rede do cristal [Kittel, 2006].

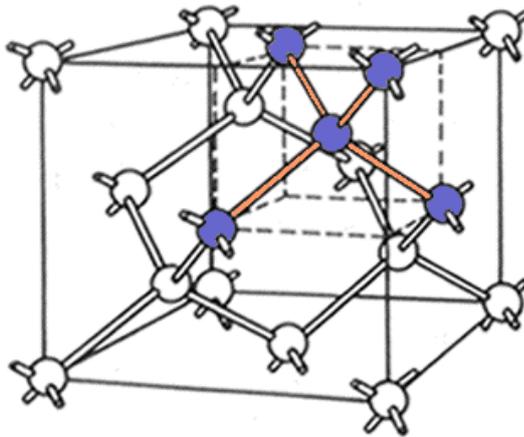


Figura 2.9 - Cubos de face centrada.

Os átomos da célula unitária estão localizados nos vértices, nos centros das faces e no interior da célula.

Um fato importante é que tanto o germânio como o silício apresentam exatamente o mesmo tipo de estrutura que o diamante, basta substituir os átomos de carbono por Ge ou Si [Kittel, 2006].

2.5. Ligações Covalentes

Quando a célula unitária se repete no espaço, cada átomo tem ligações com quatro átomos vizinhos, conforme Figura 2.9. De um modo geral, os elementos procuram ficar com oito elétrons na última camada, por ser este número de elétrons o que lhes dá maior estabilidade [Kittel, 2006].

Na Figura 2.10 um elétron do átomo *A*, além de pertencer ao próprio átomo, também pertence ao átomo *B*; da mesma forma, o elétron que pertence propriamente

ao átomo *B* é compartilhado pelo átomo *A* e assim sucessivamente. Deste modo, cada átomo possuirá dinamicamente 8 elétrons.

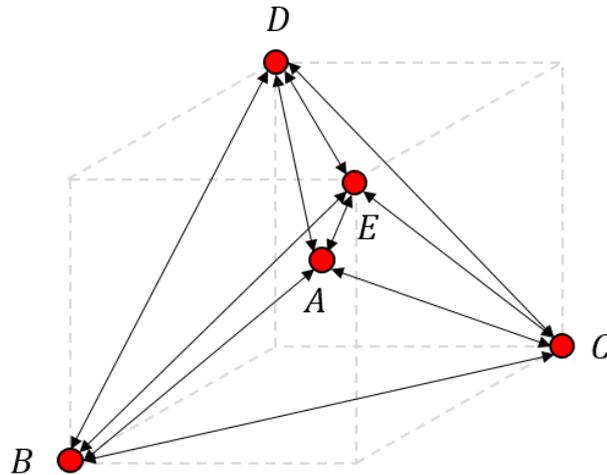


Figura 2.10 - O átomo *A* está a igual distância dos átomos *B*, *C*, *D* e *E*. As setas indicam ligações covalentes: o átomo *A*, tem 4 elétrons da sua própria camada de valência e possui mais 4 que simultaneamente pertencem aos átomos *B*, *C*, *D* e *E*.

Como cada elétron compartilhado está sendo puxado no sentido oposto, o elétron torna-se uma ligação entre os núcleos opostos, e esta ligação química é chamada de ligação covalente [Swart, 2008; Dias, 2005], conforme Figura 2.10.

2.6. Quebra de Ligações Covalentes

De acordo com a estrutura dos semicondutores puros, se não houvesse nenhum modo de romper estas ligações covalentes, estes materiais comportar-se-iam sempre como materiais isolantes, pois não existiriam elétrons passíveis de se deslocar, constituindo uma corrente elétrica [Swart, 2008; Kittel, 2006].

Considerando o efeito da temperatura no silício a $-273\text{ }^{\circ}\text{C}$ (ou seja, 0 Kelvin), as ligações covalentes ficam intactas e, conseqüentemente, o cristal se comporta como um material isolante, uma vez que não existem elétrons passíveis de se deslocar no cristal [Swart, 2008; Kittel, 2006].

Em um cristal de silício puro, a uma temperatura de $25\text{ }^{\circ}\text{C}$, a energia térmica fornecida ao elétron quebra a ligação covalente criando um número igual de elétron livre e buraco, conforme Figura 2.11.

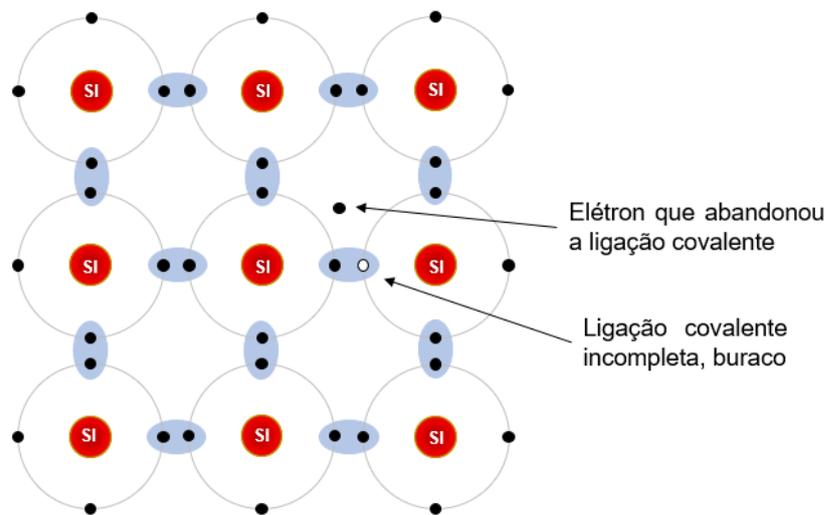


Figura 2.11 - Quebra da ligação covalente.

O elétron livre tem um movimento aleatório através do cristal. Os buracos na orbita de valência comportam-se como uma carga positiva, atraindo e capturando outro elétron imediatamente mais próximo. A recombinação é o desaparecimento do elétron e do buraco que surgiram, e esse tempo varia de alguns nanossegundos até vários microssegundos, dependendo da perfeição do cristal [Swart, 2008].

Há uma energia determinada que produz a quebra de uma ligação covalente. Para o germânio, a energia necessária (E_g) para provocar a quebra de uma ligação covalente é igual a 0,7 eV; para o silício, tal energia é de 1,11 eV [Swart, 2008].

O acréscimo da temperatura, fornece esta energia e produz a ruptura de ligações covalentes.

O fato que faz com que os semicondutores tenham propriedades tão diferentes das dos metais é que, além do elétron que ficou livre para se locomover, existe um fenômeno novo que é a existência do *buraco*.

O buraco se comporta como se fosse uma partícula de carga elétrica positiva de mesmo valor absoluto da do elétron. Isto significa que este buraco pode mover-se sob a ação de um campo elétrico do mesmo modo que o elétron, porém em sentido contrário, em virtude da sua carga oposta.

O movimento dos elétrons presos a ligação covalente é que caracteriza, para todos os efeitos, o deslocamento de uma carga positiva em sentido contrário ao do elétron.

2.7. Dopagem (adição de impureza)

Todos os elétrons externos em um cristal de silício estão envolvidos em ligações covalentes, de forma que não podem se mover entre os átomos. Um cristal de silício puro é praticamente um isolante, muito pouca eletricidade passa por ele. É possível alterar o comportamento do silício e transformá-lo em um condutor dopando-o. Na dopagem, mistura-se uma pequena quantidade de impurezas a um cristal de silício [Swart, 2008; Dias, 2005, Kittel, 2006, Mello 1980].

Na dopagem tipo n , conforme Figura 2.12, o fósforo ou o arsênio é adicionado ao silício em pequenas quantidades. O fósforo e o arsênio possuem cinco elétrons externos cada um, de forma que ficam fora de posição quando entram no reticulado de silício. O quinto elétron não tem a que se ligar, ganhando liberdade de movimento. Apenas uma pequena quantidade de impurezas é necessária para criar elétrons livres o suficiente para permitir que uma corrente elétrica flua pelo silício. O silício tipo n é um bom condutor. Os elétrons possuem uma carga negativa, daí o nome tipo n [Swart, 2008; Dias, 2005, Kittel, 2006, Mello 1980].

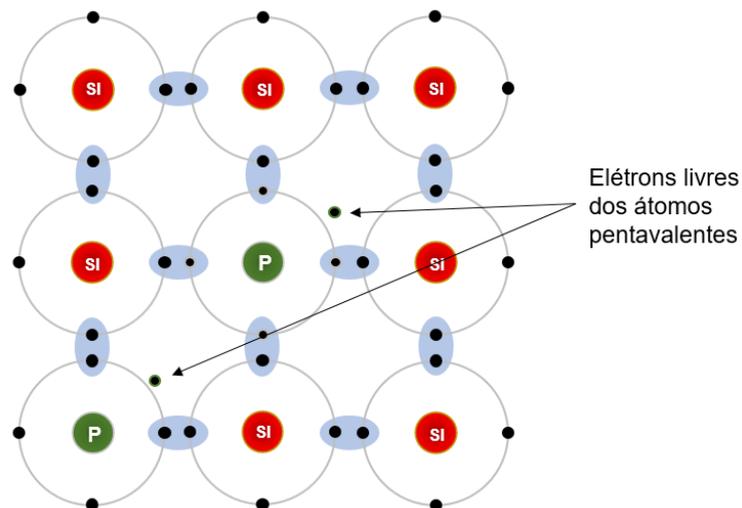


Figura 2.12 - Dopagem do semiconductor com adição de fosforo.

Na dopagem tipo p , conforme Figura 2.13, o boro ou o gálio é o dopante. O gálio e o boro possuem apenas três elétrons externos cada um. Quando misturados no reticulado de silício, formam "buracos" ou "lacunas" na treliça e um elétron do silício não tem a que se ligar. A ausência de elétron cria o efeito de uma carga positiva, daí o nome tipo p . Lacunas podem conduzir corrente. Uma lacuna aceita muito bem um

elétron de um vizinho, movendo a lacuna em um espaço. O silício tipo p é um bom condutor.

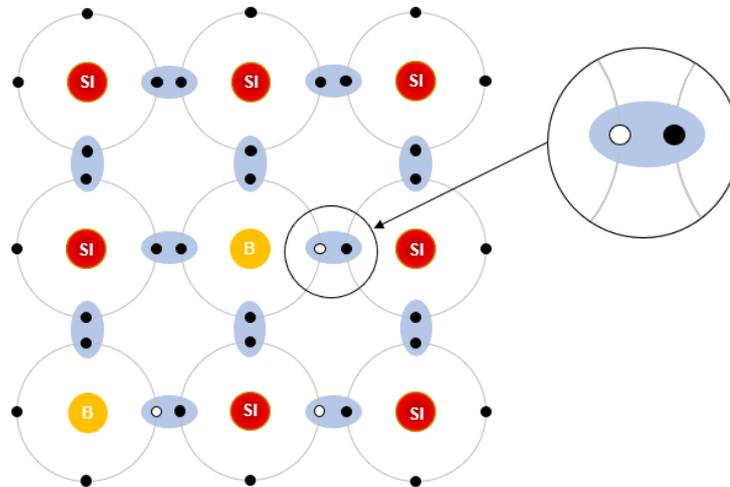


Figura 2.13 - Dopagem do semiconductor com adição de boro

2.8. Níveis de energia

Os portadores de carga (e^-) de um determinado átomo se encontram dispostos em camadas eletrônicas, distribuídos de acordo com a energia potencial associada a cada um deles, existindo níveis discretos de energia para cada uma das camadas eletrônicas, o que implica em dizer que um elétron pertencente a um átomo não pode apresentar qualquer valor de energia potencial, mas sim, níveis bem definidos pela estrutura atômica [Swart, 2008; Dias, 2005, Kittel, 2006, Mello 1980].

Os níveis discretos de energia associados a cada uma das camadas eletrônicas, implica em se dizer que um elétron pertencente a um átomo não pode apresentar qualquer valor de energia potencial, mas sim níveis bem definidos pela estrutura atômica. Isso faz com que existam, entre as camadas eletrônicas, bandas de energia proibidas, ou seja, as quais nunca serão ocupadas por elétrons.

Uma banda proibida entre duas camadas eletrônicas é chamada de *Gap de energia*. O gap determina a quantidade de energia necessária para que um elétron de uma determinada camada possa “pular” para uma outra camada.

Normalmente a energia associada a um elétron é medida em eV (elétron-volt), onde: $1 \text{ eV} \cong 1,6 \times 10^{-19} \text{ J}$.

A Figura 2.14a ilustra os níveis de energia associados a um átomo simples, isolado. Os átomos costumam se dispor em redes cristalinas, formadas pela associação de diversos átomos. A interação de um átomo com os seus vizinhos na rede cristalina altera a composição dos níveis de energia, uma vez que estes também dependem da posição de cada átomo na rede. Essa alteração age no sentido de se expandir o nível de energia, formando bandas de energia, como ilustra a Figura 2.14b.

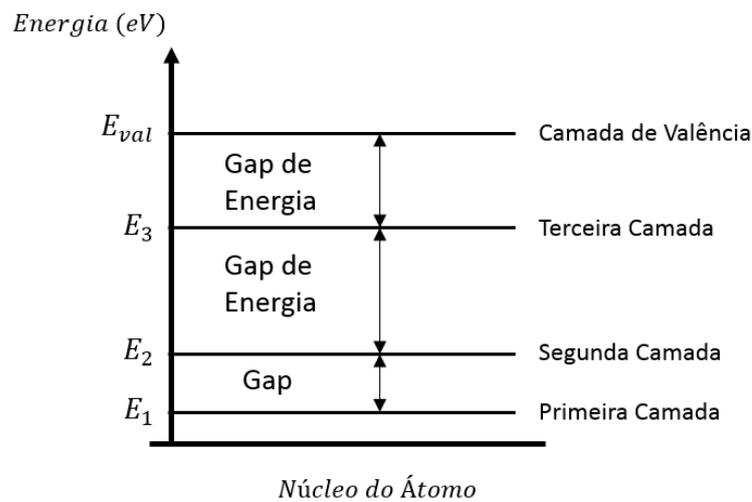


Figura 2.14a - Ilustra os níveis de energia num átomo simples.

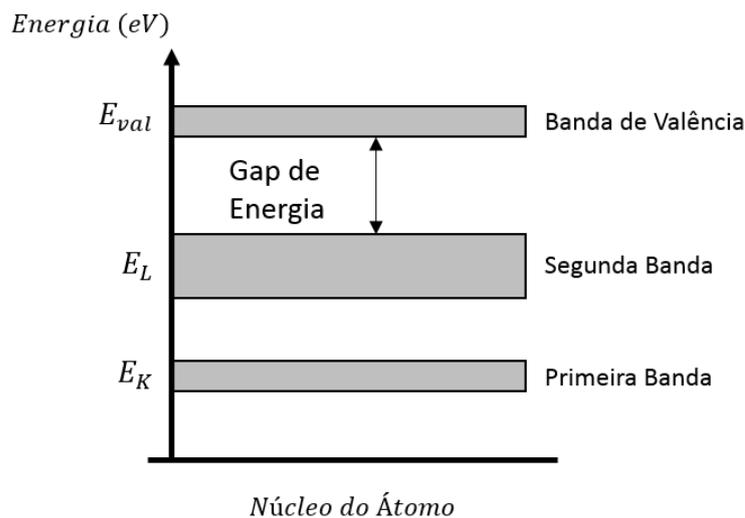


Figura 2.14b - Banda de energia numa estrutura cristalina.

Os elétrons da banda de valência são aqueles que menos sentem a força de atração exercida pelos seus respectivos núcleos.

Caso estes elétrons recebam uma quantidade de energia suficientemente grande para vencer essa força de atração, eles irão se tornar elétrons livres, isto é, não estarão mais ligados ao seu átomo de origem, podendo então circular pela rede cristalina livremente.

Esse estado de energia no qual um elétron se torna um elétron livre é tratado como uma nova banda de energia, acima da banda de valência, chamada de banda de condução.

Os elétrons na banda de condução estão mais suscetíveis à ação de campos elétricos, podendo portanto participar na condução de corrente elétrica. Quando um elétron atinge a banda de condução, tornando-se livre, ele deixa um buraco na sua ligação covalente de origem. Esse buraco ou lacuna pode ser ocupado eventualmente por um elétron próximo, o que produzirá uma nova lacuna em um outro ponto do material. Essa produção de novas lacunas no material é vista como uma corrente de lacunas na banda de valência.

A quantidade de elétrons livres presentes na banda de condução, para um determinado material, depende principalmente do gap de energia existente entre a banda de condução e a de valência. Cada material possui um perfil de gap diferente, o que influi diretamente na condutividade do material.

Capítulo 3

Obtenção das Equações de Deslocamento dos Portadores

3.1 Introdução

No modelo clássico da condução elétrica em materiais, os elétrons de valência são admitidos como completamente livres para se moverem entre os centros de íons positivos (átomos sem os elétrons de valência) na rede cristalina. À temperatura ambiente, os centros de íons positivos possuem energia cinética e oscilam em torno de sua posição na rede. Com o aumento da temperatura, estes íons oscilam com amplitudes ainda maiores, havendo uma troca constante de energia entre os centros de íons e os seus elétrons de valência. Na ausência de qualquer potencial elétrico, a movimentação dos elétrons de valência é aleatória e limitada, de modo que não haja nenhum fluxo líquido de elétrons em qualquer direção e, portanto, nenhuma corrente elétrica (veja Figura 3.1) [Smith, 2012].

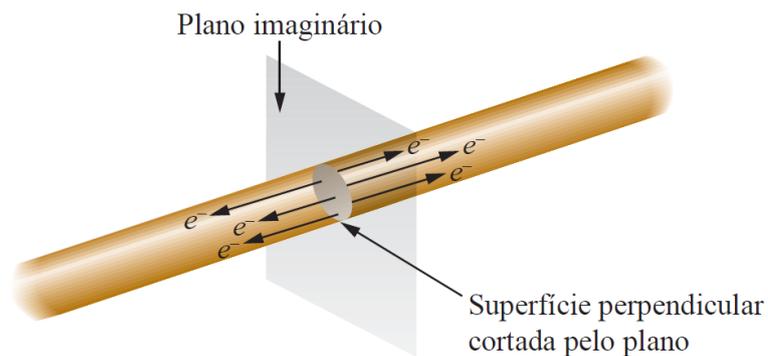


Figura 3.1 – Representação do movimento dos elétrons em um meio material qualquer.

Devido ao fenômeno de agitação térmica, os elétrons no cristal possuem um movimento randômico, que indica que o elétron que abandona uma certa região (A) retorna à mesma após diversos percursos randômicos, ou seja, percursos sem direção determinada. No entanto, quando um campo elétrico constante é aplicado a

um material os elétrons adquirem um movimento ordenado com uma velocidade chamada de *velocidade de deriva* (veja Figura 3.2) [Smith, 2012].

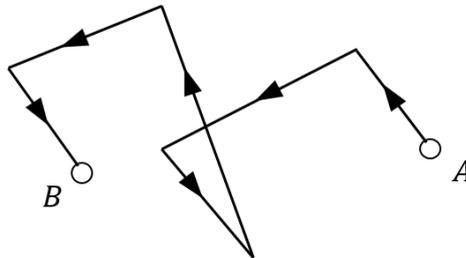


Figura 3.2 - O processo de deriva de portadores ocorre quando se aplica ao semicondutor um campo elétrico. Os portadores são acelerados pelo campo elétrico e adquirem uma velocidade denominada por velocidade de deriva.

Quando um semicondutor é submetido a um campo elétrico o movimento dos portadores de carga são governados pela força externa \vec{F}_{ext} e por uma força de resistência ao movimento \vec{f} . Para descrevermos o movimento do elétron no semicondutor submetido a um campo elétrico constante, tomaremos como base a segunda lei de Newton, que estabelece que a aceleração adquirida por um corpo é diretamente proporcional à resultante das forças que atuam sobre ele.

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

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

O momento \vec{P} é dado por:

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

onde $\vec{v}(t)$ é a velocidade e m_e^* é a massa efetiva dos portadores. A massa efetiva m_e^* leva em conta os efeitos quânticos existentes no sistema físico. Substituindo a Equação (3.2) na Equação (3.1) temos:

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

3.2 Equação da velocidade $\vec{v}(t)$

Por ser o Campo Elétrico um campo vetorial, temos associado a cada ponto do espaço um vetor Campo Elétrico, portanto a força elétrica \vec{F}_{el} que atua sobre um elétron tem a mesma direção e sentido oposto à orientação do vetor campo elétrico que atua sobre o elétron, conforme ilustra a Figura 3.3. Isto acontece porque o elétron tem uma carga negativa.

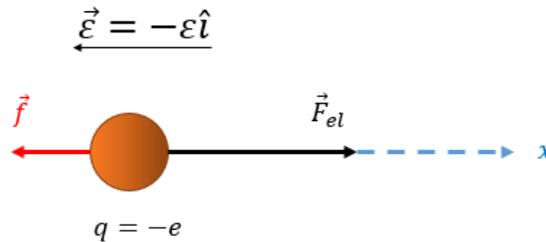


Figura 3.3 - Representação das forças que atuam sobre o elétron quando este é submetido a um campo elétrico \vec{E} . O movimento do elétron é de mesma direção e sentido oposto do campo elétrico \vec{E} . Os vetores não estão em escala.

A força elétrica é dada por:

$$\vec{F}_{el} = q \vec{E} = (-e)(-E\hat{i})$$

$$\vec{F}_{el} = e E \hat{i} \quad (3.4)$$

Os portadores (elétrons) se movimentam em virtude das diferenças de potencial elétrico aplicado, e durante o deslocamento destas cargas ocorrem interações (choques e espalhamentos) entre os portadores e a cadeia de átomos da rede, isto causa alguma resistência ao movimento destes portadores. Esta resistência à passagem das cargas portadoras é devido à resistividade, que é uma característica de cada material, e está associado à força de resistência \vec{f} ao movimento do elétron. A Figura 3.4 mostra um análogo mecânico a este movimento elétrico: uma diferença de potencial gravitacional faz com que a bolinha desça a rampa chocando-se com as hastas verticais, que provocam uma certa resistência (mecânica) ao movimento da bolinha.

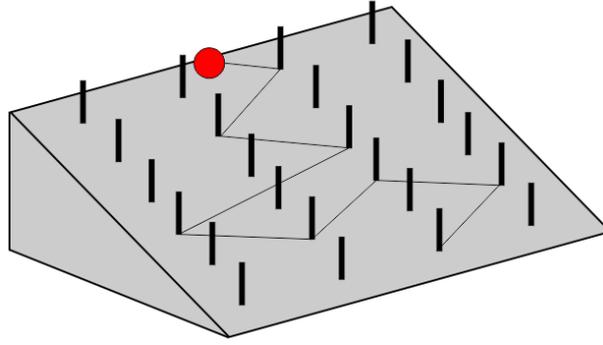


Figura 3.4 - Analogia a um sistema mecânico, do movimento dos portadores de carga na presença de um campo elétrico.

Consideraremos que essa força de resistência ao movimento do elétron \vec{f} 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 semicondutor e é de natureza quântica [Rodrigues, 2020].

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

$$m_e^* \frac{d\vec{v}}{dt} = e \mathcal{E} \hat{i} - \alpha \vec{v} \quad (3.6)$$

Como o movimento ocorre ao longo do eixo x podemos escrever a equação anterior sem a simbologia vetorial da seguinte maneira:

$$m_e^* \frac{dv}{dt} = e \mathcal{E} - \alpha v \quad (3.7)$$

sendo m_e^* , e , \mathcal{E} e α quantidades positivas.

Nota-se aqui uma semelhança na estrutura da Equação (3.7) com a equação de Newton-Langevin [Tomé, 2001]. A Equação (3.7) pode ser solucionada de forma exata da seguinte maneira:

$$m_e^* dv = (e \mathcal{E} - \alpha v) dt \Rightarrow dt = \frac{m_e^* dv}{e \mathcal{E} - \alpha v} \Rightarrow dt = \frac{m_e^* dv}{-(-e \mathcal{E} + \alpha v)}$$

$$-dt = \frac{m_e^* dv}{(-e \mathcal{E} + \alpha v)} \Rightarrow -dt = \frac{m_e^* dv}{(\alpha v - e \mathcal{E})} \Rightarrow -dt = \frac{m_e^* dv}{e \mathcal{E} \left(\frac{\alpha v}{e \mathcal{E}} - 1 \right)}$$

$$-dt = \frac{m_e^*}{e \mathcal{E}} \frac{dv}{\left(\frac{\alpha v}{e \mathcal{E}} - 1\right)} \Rightarrow \frac{dv}{\left(\frac{\alpha v}{e \mathcal{E}} - 1\right)} = -\frac{e \mathcal{E}}{m_e^*} dt$$

Definindo $\Gamma = \frac{\alpha}{e \mathcal{E}}$ temos:

$$\frac{dv}{(\Gamma v - 1)} = -\frac{e \mathcal{E}}{m_e^*} dt$$

integrando,

$$\int_0^v \frac{dv}{(\Gamma v - 1)} = -\int_0^t \frac{e \mathcal{E}}{m_e^*} dt$$

temos:

$$\frac{\ln(\Gamma v - 1)}{\Gamma} \Big|_0^v = -\frac{e \mathcal{E}}{m_e^*} t$$

$$\frac{1}{\Gamma} [\ln(\Gamma v - 1) - \ln(\Gamma \cdot 0 - 1)] = -\frac{e \mathcal{E}}{m_e^*} t$$

$$[\ln(\Gamma v - 1) - \ln(-1)] = -\frac{e \mathcal{E} \Gamma}{m_e^*} t$$

$$\ln\left(\frac{\Gamma v - 1}{-1}\right) = -\frac{e \mathcal{E} \Gamma}{m_e^*} t$$

$$\ln(1 - \Gamma v) = -\frac{e \mathcal{E} \Gamma}{m_e^*} t \Rightarrow 1 - \Gamma v = e^{-\frac{e \mathcal{E} \Gamma}{m_e^*} t} \Rightarrow \Gamma v = 1 - e^{-\frac{e \mathcal{E} \Gamma}{m_e^*} t}$$

Lembrando que $\Gamma = \frac{\alpha}{e \mathcal{E}}$:

$$\frac{\alpha}{e \mathcal{E}} v = 1 - e^{-\frac{\alpha t}{m_e^*}}$$

Isolando v , teremos a equação:

$$v(t) = \frac{e \mathcal{E}}{\alpha} \left[1 - e^{-\frac{\alpha t}{m_e^*}} \right]$$

$$v(t) = \frac{e \mathcal{E}}{\alpha} (1 - e^{-\beta t}) \quad (3.8)$$

onde $\beta = \frac{\alpha}{m_e^*}$

Analisando a Equação (3.8), nota-se que para $t = 0$ temos:

$$v(0) = \frac{e \mathcal{E}}{\alpha} (1 - e^0) \Rightarrow v(0) = \frac{e \mathcal{E}}{\alpha} (1 - 1) \Rightarrow v(0) = 0,$$

como era de se esperar pois na integração usamos o limite inferior $t_0 = 0$. Assim a velocidade é nula para o instante de tempo inicial $t_0 = 0$. Verifiquemos a taxa de crescimento ou decrescimento da função $v(t)$. Derivando a Equação (2.8) em relação ao tempo t .

$$\begin{aligned} \frac{\partial v(t)}{\partial t} &= \frac{e \mathcal{E}}{\alpha} [1 - (-\beta)e^{-\beta t}] \\ \frac{\partial v(t)}{\partial t} &= \frac{e \mathcal{E}}{\alpha} [1 + \beta e^{-\beta t}] \end{aligned} \quad (3.9)$$

como e, \mathcal{E}, α e β são quantidades positivas, conclui-se da Equação (3.9) que:

$$\frac{\partial v(t)}{\partial t} > 0 \quad (3.10)$$

ou seja, a função $v(t)$ cresce continuamente em função do tempo t , e não possui pontos de máximo ou mínimo já que para que isto acontecesse deveríamos ter em algum instante de tempo específico t' a condição:

$$\left[\frac{\partial v}{\partial t} \right]_{t=t'} = 0.$$

No entanto, nota-se que a função $v(t)$ possui um limite quando $t \rightarrow \infty$. Tomemos o limite de $v(t)$ com $t \rightarrow \infty$ na Equação (3.8):

$$\lim_{t \rightarrow \infty} v(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} \left[\frac{e \mathcal{E}}{\alpha} (1 - e^{-\beta t}) \right]$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} v(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} \left[\frac{e \mathcal{E}}{\alpha} \left(1 - \frac{1}{e^{\beta t}} \right) \right]$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} v(t) = \frac{e \mathcal{E}}{\alpha},$$

assim a velocidade $v(t)$ alcança um valor máximo:

$$v_{max} = \frac{e \mathcal{E}}{\alpha} \quad (3.11)$$

e é dito que o sistema atingiu o “estado estacionário”; já o intervalo de tempo em que o sistema possui uma forte dependência temporal é chamado de “estado transiente”.

Para exemplificar, a Figura (3.5) ilustra o comportamento da função $v(t)$ fazendo-se na Equação (3.8) $e\mathcal{E}/\alpha = 1$ e $\beta = 1$

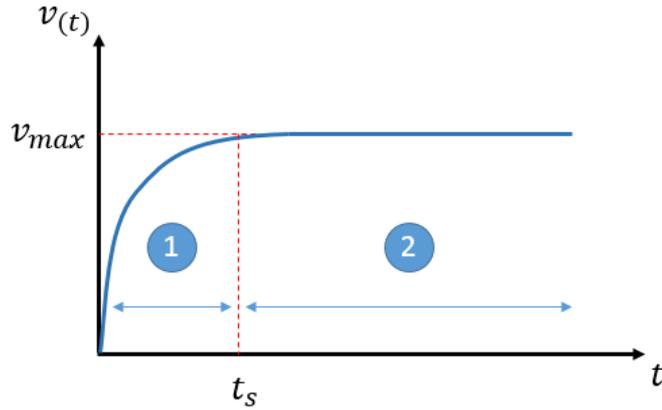


Figura 3.5 - Velocidade $v(t)$ conforme Equação (3.8) tornando-se $e\mathcal{E}/\alpha = 1$ e $\beta = 1$: (1) regime transiente, (2) regime estacionário.

O intervalo de tempo aproximado t_s que o sistema leva para atingir o estado estacionário irá depender do valor de β , ou seja, do parâmetro α e da massa efetiva m_e^* , conforme mostrado na Figura (3.6). Numa grossa análise, isto acontece quando o argumento βt da exponencial da Equação (3.8) obedecer a condição:

$$\beta t_s > 1 \Rightarrow t_s > \frac{1}{\beta} \Rightarrow t_s > \frac{1}{\alpha/m_e^*} \Rightarrow t_s > \frac{m_e^*}{\alpha} \quad (3.12)$$

Em simulações computacionais, como por exemplo Monte Carlo Quântico, e em experimentos de espectroscopia temporal ultra-rápida, verifica-se que este tempo t_s é ultra-curto, aproximadamente da ordem de picosegundos (ps), para o caso de semicondutores submetidos a campos elétricos [Chang, 1969; Ziman, 1960].

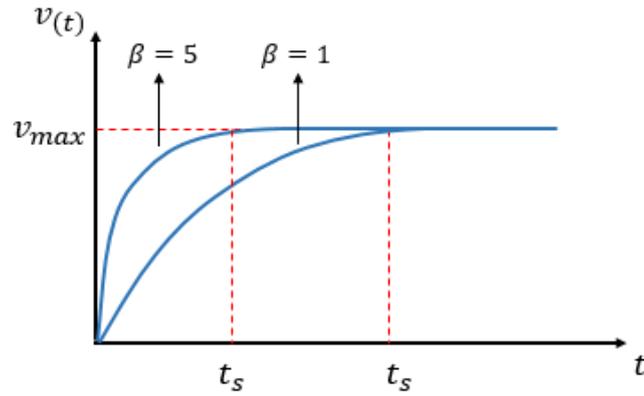


Figura 3.6 - Comportamento de $v(t)$ para dois valores de β .

Pela Equação (3.11) pode-se escrever:

$$v_{est} = \frac{e \mathcal{E}}{\alpha} \quad (3.12)$$

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

Sabe-se que a mobilidade eletrônica μ é dada por:

$$\mu = \frac{v_{est}}{\mathcal{E}} \quad (3.13)$$

3.3 Equação do Deslocamento $x(t)$

A partir da Equação (3.8) podemos encontrar a equação da posição do elétron, lembrando que $v = dx/dt$. Dessa forma,

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

$$x = \frac{e\mathcal{E}}{\alpha} \left[t + \frac{m_e^*}{\alpha} e^{-at/m_e^*} \right] \Big|_0^t \Rightarrow x = \frac{e\mathcal{E}}{\alpha} \left[t + \frac{m_e^*}{\alpha} e^{-at/m_e^*} - 0 - \frac{m_e^*}{\alpha} e^0 \right]$$

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

$$x(t) = \frac{e\mathcal{E}}{\alpha} \left[t - \frac{m_e^*}{\alpha} (1 - e^{-at/m_e^*}) \right] \quad (3.14)$$

Analisemos a Equação (3.14) para pequenos e grandes valores de t . Para pequenos valores de t podemos utilizar a expansão em série de Taylor [Rodrigues, 2017] da função exponencial:

$$e^{-x} = 1 - x + \frac{x^2}{2!} - \dots$$

$$e^{-at/m_e^*} \approx 1 - \frac{at}{m_e^*} + \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{at}{m_e^*}\right)^2 \quad (3.15)$$

Substituindo (3.15) em (3.14):

$$x(t) \approx \frac{e\mathcal{E}}{\alpha} \left[t - \frac{m_e^*}{\alpha} \left(1 - 1 + \frac{at}{m_e^*} - \frac{1}{2} \frac{\alpha^2 t^2}{m_e^{*2}} \right) \right]$$

$$x(t) \approx \frac{e\mathcal{E}}{\alpha} \left[t - \frac{m_e^*}{\alpha} \left(\frac{at}{m_e^*} - \frac{1}{2} \frac{\alpha^2 t^2}{m_e^{*2}} \right) \right]$$

$$x(t) \approx \frac{e\mathcal{E}}{\alpha} \left[t - t + \frac{1}{2} \frac{\alpha t^2}{m_e^*} \right]$$

$$x(t) \approx \frac{e\mathcal{E}}{2 m_e^*} t^2 \quad (3.16)$$

a qual, relembramos, é válida somente para tempos pequenos. Notamos que $x(t)$ neste caso possui um comportamento quadrático em relação a t e o interessante fato que é independente do parâmetro α . Isto significa que para tempos muito pequenos o deslocamento do elétron ocorre livremente sem ainda ter sentido o efeito da resistência elétrica do meio material.

Analisemos agora a Equação (3.14) para tempos grandes. Neste caso a exponencial que aparece na Equação (3.14) fica:

$$e^{-at/m_e^*} = \frac{1}{e^{at/m_e^*}} \approx 0 \quad (3.17)$$

para $t \rightarrow \infty$. Substituindo (3.17) em (3.14) temos:

$$x(t) = \frac{e\mathcal{E}}{\alpha} \left[t - \frac{m_e^*}{\alpha} (1 - 0) \right]$$

$$x(t) = \frac{e\mathcal{E}}{\alpha} \left[t - \frac{m_e^*}{\alpha} \right]$$

$$x(t) = -\frac{e\mathcal{E}m_e^*}{\alpha^2} + \frac{e\mathcal{E}}{\alpha} t \quad (3.18)$$

ou seja, para tempos muito grandes o comportamento de $x(t)$ é linear em relação a t .

Nas Equações (3.8) e (3.14) o parâmetro α é dado por [Rodrigues, 2020]:

$$\alpha = \frac{e^2 \omega^2 \Gamma}{3} \sqrt{\frac{2(m_e^*)^2}{\pi(k_B T)^3}} \frac{2e^y K_1(y)}{e^{2y} - 1} + \frac{(2\pi)^4 E_{1e}^2 \sqrt{(m_e^*)^2 (2k_B T / \pi)^3}}{3h^4 \rho (v_s)^2} \quad (3.19)$$

sendo $\Gamma = 1/\varepsilon_\infty - 1/\varepsilon_0$ e $y = h\omega/4\pi k_B T$, onde e é a carga elementar do elétron, ω a frequência dos fônons ópticos, m_e^* é a massa efetiva do elétron, ε_0 é a constante eletrostática estática e ε_∞ é a constante eletrostática de alta frequência, T é a temperatura da rede cristalina, $K_1(y)$ é a função modificada de segunda espécie de Bessel, k_B é a constante de Boltzmann cujo valor é aproximadamente $1,38 \times 10^{-16}$ erg/kelvin, $h = 6,626 \times 10^{-17}$ erg.s é a constante de Planck, ρ a densidade do material, v_s velocidade do som no material e E_{1e} é o potencial de deformação acústico.

Capítulo 4

Resultados

4.1 Estado Transitório

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

Utilizamos as Equações (3.8) e (3.14), demonstradas no Capítulo 3 e os dados contidos na Tabela 2.2 da seção 2.3 para plotar a velocidade e a posição do elétron em função do tempo em duas direções no semicondutor. As evoluções temporais da Eq. (3.8) e da Eq. (3.14) foram realizadas utilizando-se o software Mathematica versão 11.0 e os gráficos utilizando o software Origin versão 8.5. Para cada evolução temporal foi utilizado um valor de campo elétrico, a saber: 1 kV/cm, 2 kV/cm e 3 kV/cm.

Observando a Figura 4.1 notamos que a velocidade do elétron com o campo elétrico aplicado paralelo ao eixo *c* do semicondutor 6H-SiC é menor que a velocidade do elétron com o campo elétrico aplicado perpendicular ao eixo *c*. Além disso, de 0 a 1 ps, a velocidade cresce rapidamente e, após 1 ps, a velocidade tende a se tornar constante.

Utilizando a Equação (3.14) da seção 3.3, determinamos a posição do elétron no semicondutor, em função do tempo, conforme ilustrado na Figura 4.2. Analisando a Figura 4.2, notamos que o elétron percorre uma distância maior no cristal semicondutor 6H-SiC quando o campo elétrico é aplicado perpendicularmente ao eixo *c*. A Figura 4.3 mostra a comparação entre os deslocamentos dos elétrons para um campo elétrico de intensidade de 3 kV/cm aplicado perpendicularmente (\mathcal{E}_{\perp}) ou paralelo (\mathcal{E}_{\parallel}) ao eixo *c*. Essas informações possibilitam construir dispositivos com

tamanhos específicos que podem levar ao dimensionamento mais eficiente dos custos de produção destes dispositivos.

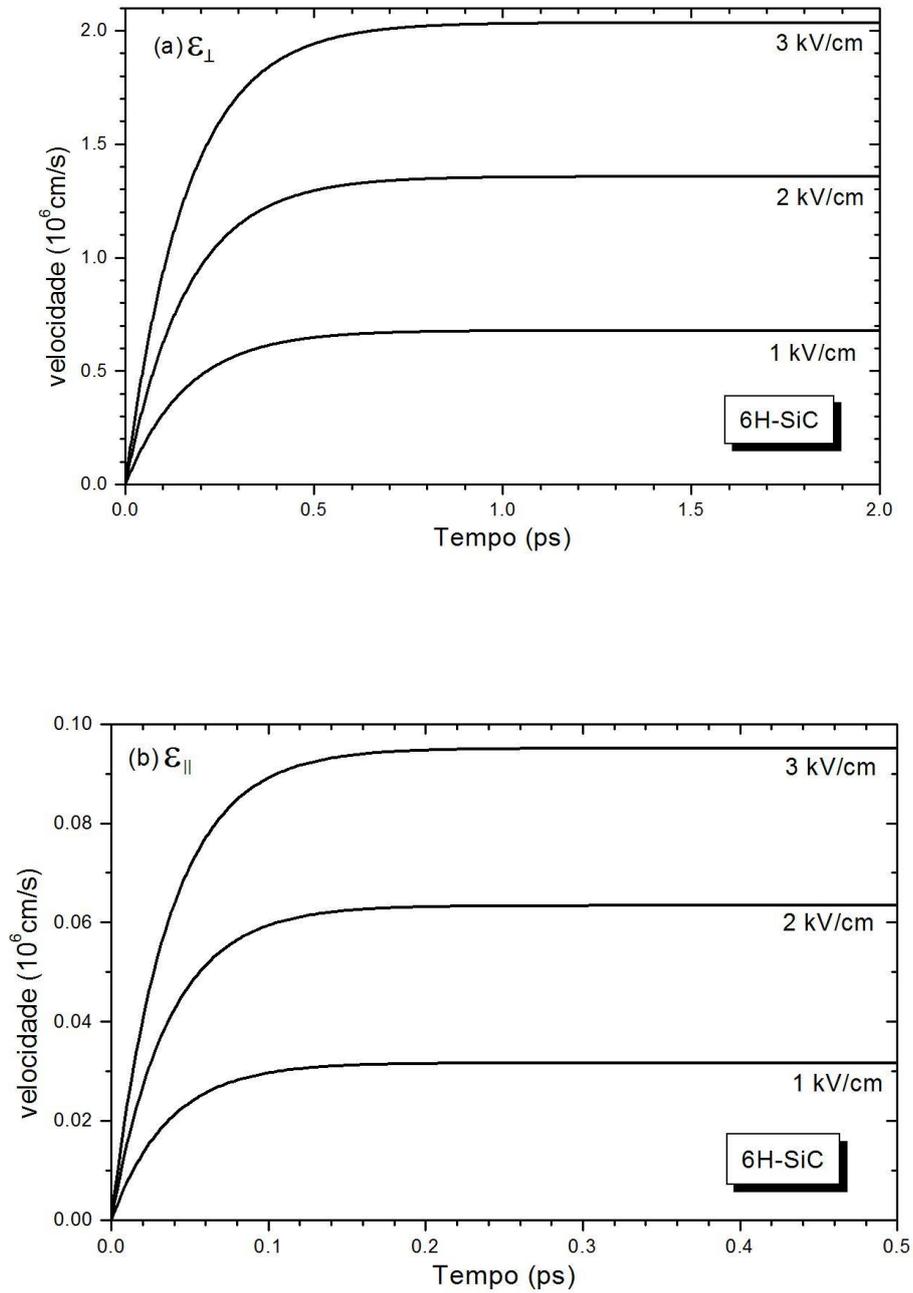


Figura 4.1 - Velocidade do elétron no estado transiente no 6H-SiC. A figura (a) refere-se ao campo elétrico aplicado perpendicularmente ao eixo c e a (b) ao campo elétrico aplicado paralelamente ao eixo c .

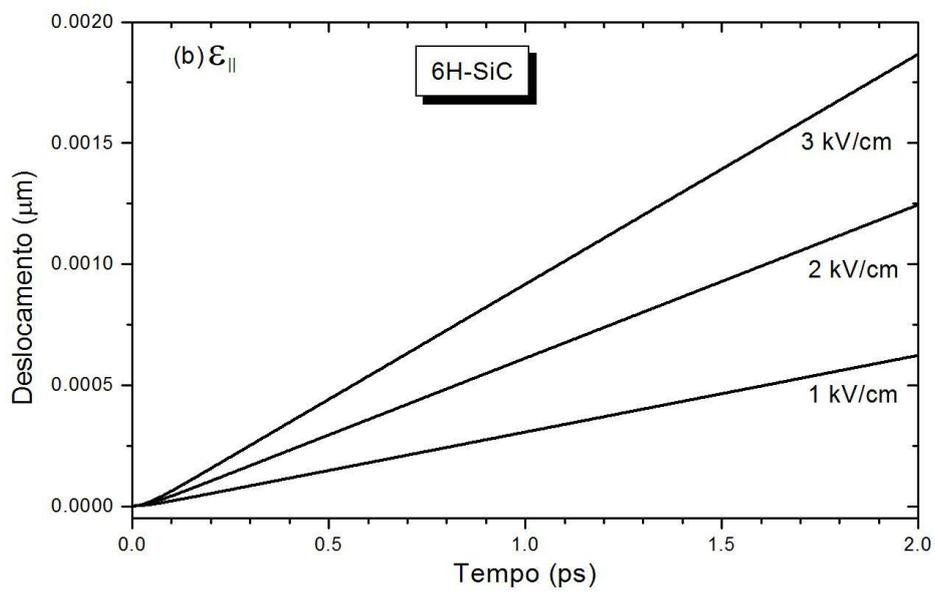
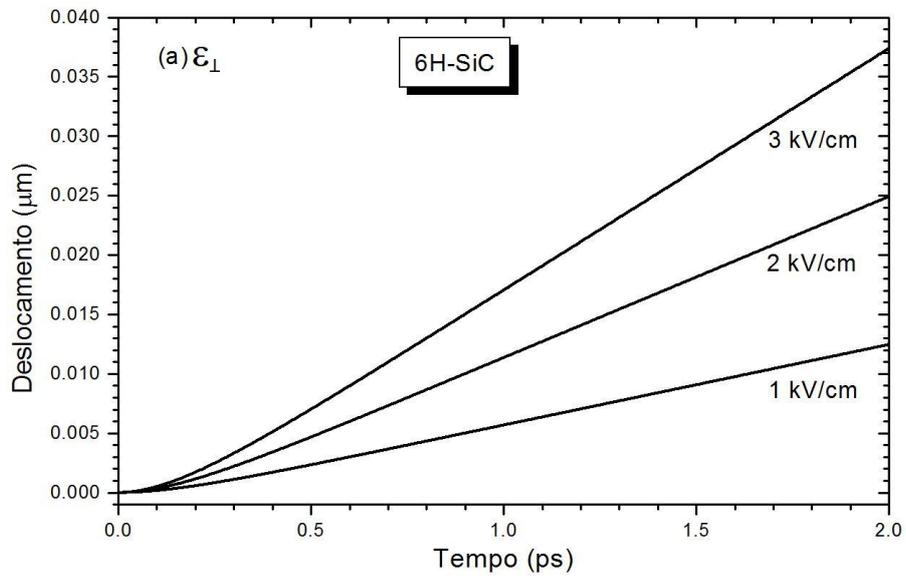


Figura 4.2 - Posição do elétron no semicondutor 6H-SiC. A figura (a) refere-se ao campo elétrico aplicado perpendicularmente ao eixo c e a (b) ao campo elétrico aplicado paralelamente ao eixo c .

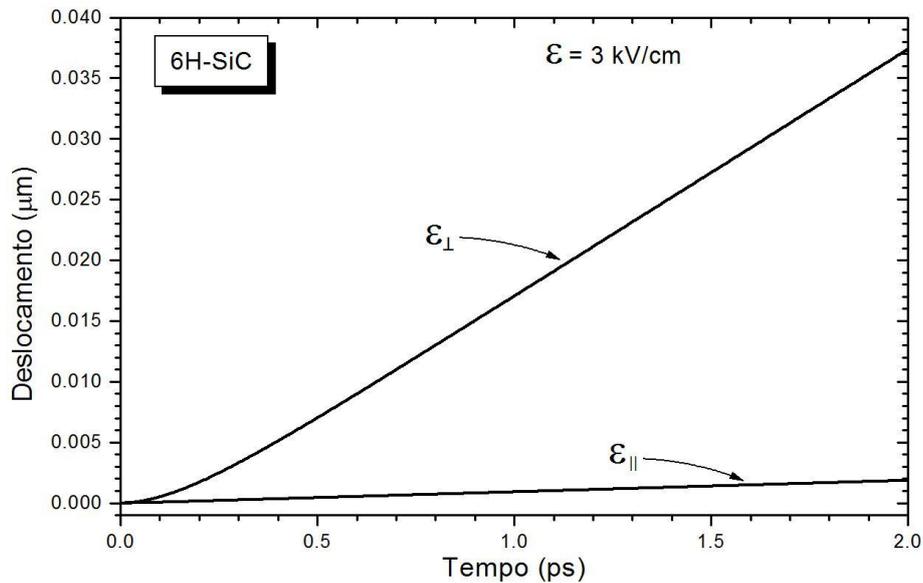


Figura 4.3 – Posição do elétron em função do tempo t para um campo elétrico de 3 kV/cm.

4.2 Estado Estacionário

No estado estacionário a velocidade de deslocamento do elétron torna-se constante, conforme vimos na Equação (3.12) ou seja:

$$v_{est} = \frac{e \mathcal{E}}{\alpha} \quad (4.1)$$

Utilizando os dados do semiconductor 6H-SiC da Tabela 2.2, plotamos o comportamento da velocidade de deriva do elétron no estado estacionário em função do campo elétrico, fornecido pela Equação (4.1), conforme apresentado na Figura 4.4. Observamos que com o campo elétrico aplicado perpendicularmente ao eixo c a velocidade do elétron é maior que com o campo elétrico aplicado paralelamente ao eixo c .

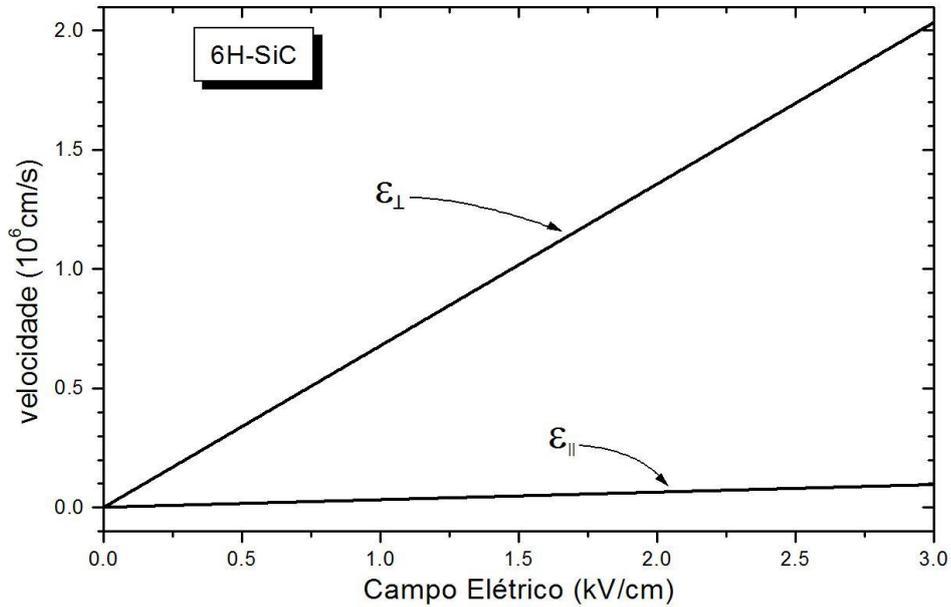


Figura 4.4 – Velocidade do elétron em função do campo elétrico aplicado.

Utilizando a equação (3.13) e os dados da Figura 4.4 obtemos que a mobilidade do elétron para o campo elétrico aplicado perpendicular ao eixo c é de $678,2 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$, e para o campo elétrico aplicado paralelo ao eixo c é de $31,7 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$.

A Figura 4.5 mostra a energia cinética por elétron, E_{cin} , no estado estacionário

$$E_{cin} = \frac{1}{2} m_e^* v_{est}^2 \quad (4.2)$$

em função do campo elétrico aplicado com intensidade de 0 a 3 kV/cm, sendo aplicado na direção paralela (ϵ_{\parallel}) ou perpendicular (ϵ_{\perp}) ao eixo c . A unidade da energia cinética está em mili elétron-Volts, a qual é a unidade de energia mais adequada para as dimensões envolvidas. A energia cinética possui uma dependência quadrática com o campo elétrico, isto pode ser verificado substituindo a Eq. (4.1) na Eq. (4.2), resultando em

$$E_{cin} = \frac{m_e^* e^2}{2\alpha^2} \epsilon^2. \quad (4.3)$$

Nota-se pela Figura 4.5 que esta energia é da ordem de sub meV. Para uma simples comparação, a energia térmica por elétron de um gás de elétrons a uma temperatura de 300 kelvin é de aproximadamente 38,8 meV, enquanto que a energia de separação

da primeira para a segunda banda de condução do semicondutor 6H-SiC é da ordem de eV [Hebali, 2019]. A comparação desta energia cinética com esta energia de separação é importante porque se o elétron adquirir uma energia maior que esta energia de separação de banda do semicondutor ele pode sofrer uma transição para uma banda de energia mais elevada mudando consideravelmente o valor de sua massa efetiva m_e^* .

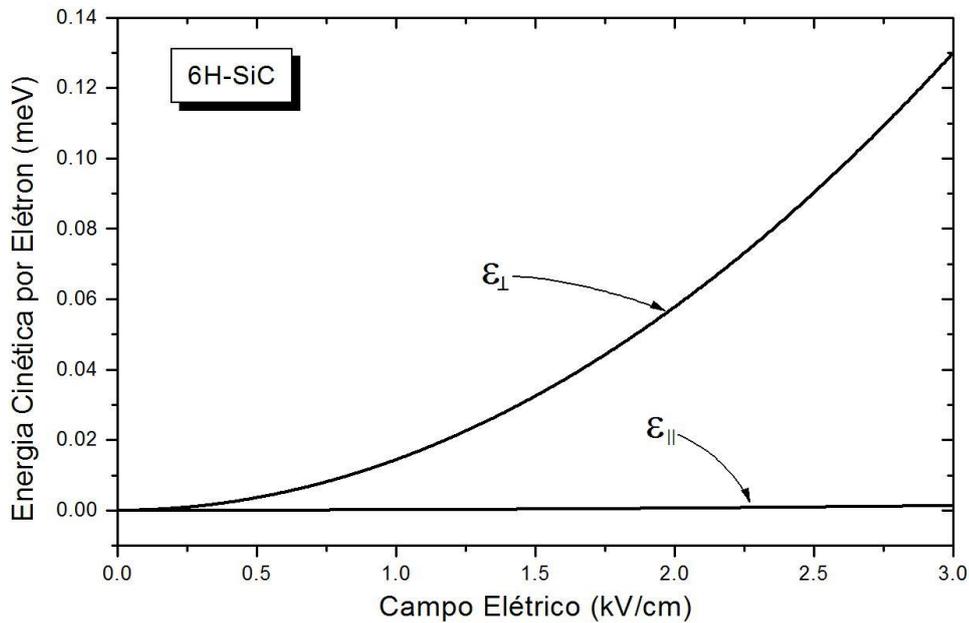


Figura 4.5 – Energia cinética por elétron, Eq. (4.3), em função do campo elétrico aplicado.

4.3 Influência da Temperatura

Nas Seções 4.1 e 4.2 utilizamos a temperatura ambiente com valor de 300 K. No entanto o parâmetro α possui uma dependência com o inverso da raiz quadrada do cubo da temperatura da rede cristalina.

A Figura 4.6 ilustra o comportamento da velocidade estacionária dos portadores de carga em função da temperatura da rede para as duas direções do campo elétrico no 6H-SiC. Com o aumento da temperatura, aumenta-se a vibração da rede cristalina, aumentando a possibilidade de colisão 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 com o aumento da temperatura da rede.

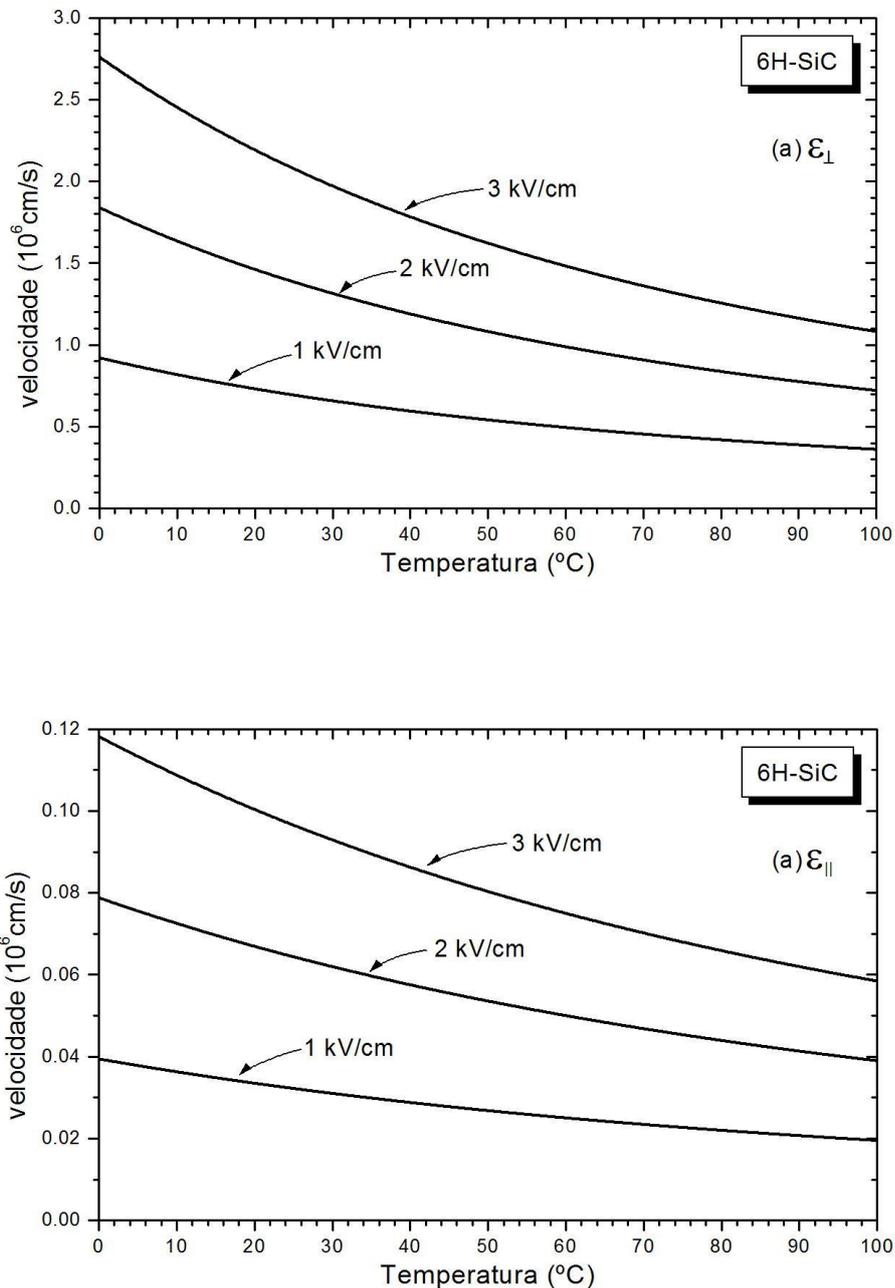


Figura 4.6 - Velocidade estacionária dos portadores de carga elétrica em função da temperatura da rede cristalina. A figura (a) refere-se ao campo elétrico aplicado perpendicularmente ao eixo c e a (b) ao campo elétrico aplicado paralelamente ao eixo c .

Apesar da mobilidade eletrônica não depender da intensidade do campo elétrico, nas condições aqui estudadas, ela é influenciada pela temperatura. De forma análoga

à velocidade, a mobilidade eletrônica também diminui com o aumento da temperatura. Para um campo elétrico de 3 kV/cm a mobilidade eletrônica tem uma redução de aproximadamente 67% de 0 a 100 °C, conforme ilustrado na Figura 4.7.

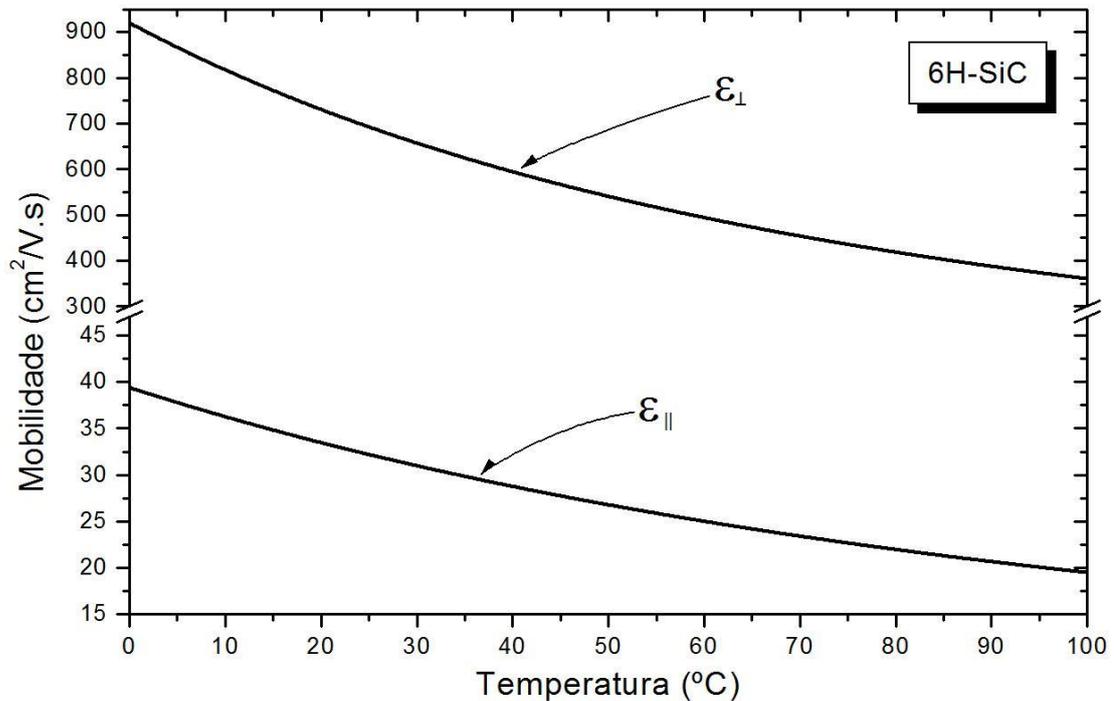


Figura 4.7 - Redução da mobilidade eletrônica com o aumento da temperatura para um campo elétrico de intensidade de 3 kV/cm.

A Figura 4.8 apresenta novamente a mobilidade eletrônica mostrada na Figura 4.7 comparada com resultados experimentais encontrados na literatura [Iwata, 2001; Iwata, 2000; Roccaforte, 2003]. As mobilidades eletrônicas obtidas nesta dissertação para campos elétricos aplicados na direção paralela ϵ_{\parallel} e perpendicular (ϵ_{\perp}) ao eixo c estão representadas por linhas cheias, enquanto que os resultados experimentais estão representados por símbolos. Nota-se uma concordância relativamente boa entre os resultados obtidos aqui e os valores experimentais. A variação no valor experimental para a mobilidade acontece por uma não padronização das amostras produzidas por diferentes laboratórios devido a diferentes níveis de imperfeições que ocorrem no controle do crescimento do cristal, tais como: defeitos na rede cristalina, deslocamentos, vacâncias, impurezas indesejadas, etc. Segundo trabalhos atuais o valor aceito para a mobilidade eletrônica no semiconductor 6H-SiC está entre 400 e

800 cm²/V.s [Hebali, 2019]. Pelo crescente interesse pelo semicondutor Carbetto de Silício acreditamos que esforços de laboratórios que produzem o semicondutor 6H-SiC deverão ter em alguns anos amostras mais puras e padronizadas deste material semicondutor.

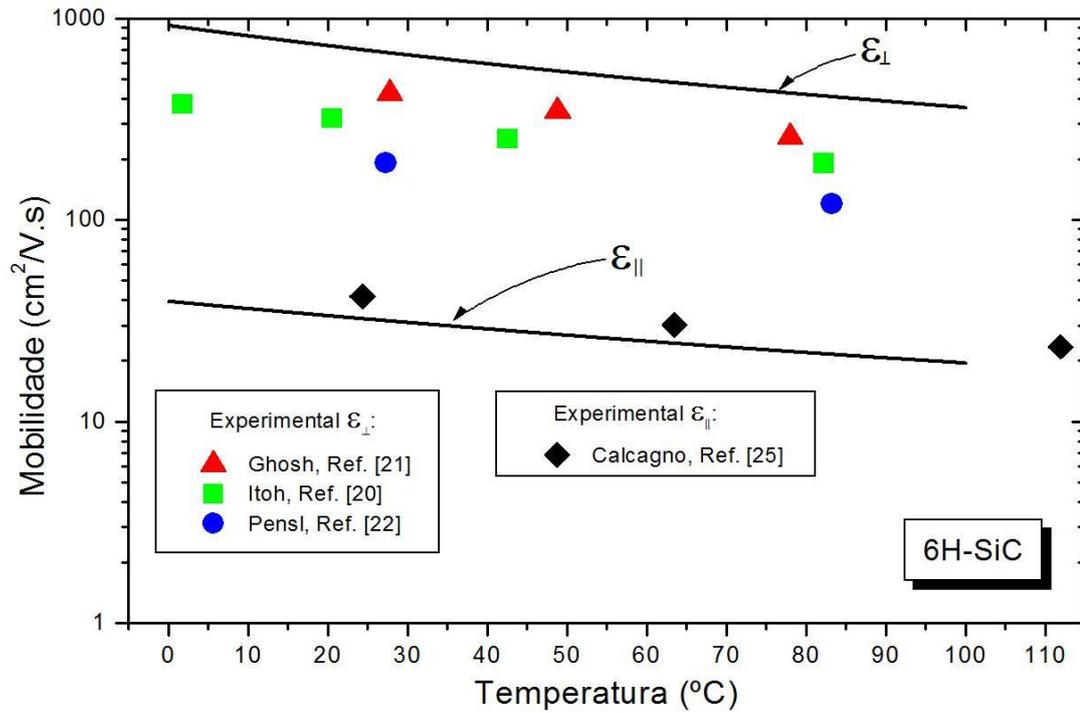


Figura 4.8 - Comparação da mobilidade obtida nesta dissertação (linhas cheias) com a mobilidade experimental disponível na literatura (símbolos).

Capítulo 5

Conclusões

Resumindo, neste trabalho determinamos teoricamente a velocidade de deriva, o deslocamento e a mobilidade dos portadores de carga (elétrons) no semicondutor 6H-SiC dopado tipo n e submetido a campos elétricos de baixa intensidade aplicados paralelamente ao eixo c ou aplicados perpendicularmente ao eixo c . Para tanto foi utilizada uma equação semi-clássica baseada na segunda lei de Newton. Foi verificado aqui neste trabalho que a maior velocidade de deriva e, conseqüentemente, a maior mobilidade ocorre com o campo elétrico aplicado perpendicularmente ao eixo cristalográfico c do semicondutor 6H-SiC. É extremamente importante do ponto de vista de aplicações em dispositivos eletrônicos a comparação das propriedades de diferentes direções de transporte de um material em particular. Uma direção pode ser mais conveniente que a outra em algumas aplicações tecnológicas, sendo mais atrativa para certas aplicações em determinados dispositivos. 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. Para um campo elétrico de intensidade de 3 kV/cm esta redução foi de aproximadamente 67% de 0 a 100 °C. Esta redução da mobilidade com a temperatura afeta diretamente na eficiência de dispositivos semicondutores. Como proposta de pesquisa futura, ainda seguindo nesta linha de pesquisa da dissertação, serão determinados o coeficiente de difusão eletrônica e o comprimento de difusão eletrônica no semicondutor 6H-SiC dopado tipo n .

Os resultados desta dissertação foram aceitos para publicação nas seguintes revistas:

- Anisotropic Carrier Transport in n -Doped 6H-SiC, Physics of the Solid State, vol. 20, ISSN: 1063-7834, Springer editora, 2020
- Applied Physics A (ISSN: 0947-8396, Springer editora, 2020)

Bibliografia

Bellotti, E.; Nilsson, H. E.; Brennan, K. F.; Ruden, P. P.; Trew, R.. Monte Carlo calculation of hole initiated impact ionization in 4H phase SiC, *Journal of Applied Physics*, vol. 87, p. 3864, 2000.

Callister Jr., W. D.; Rethwishch, D. G.. *Ciência e engenharia de materiais*. 9 Ed. Rio de Janeiro: LTC, 2016.

Chang, R. K.; Ralston J. M.; Keating, D. E.. *Ligth scattering spectra of solids I*, Springer, New York, pp. 369-379 (1969).

Dhar, S; Ghosh S.. Low field electron mobility in 6H- SiC. *Journal of Applied Physics*, vol. 88, n. 11, pp. 6519-6525, 2000.

<http://dx.doi.org/10.1063/1.1321794>

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

Flores, M. Z. S.; Maia, F. F.; Freire, V. N.; Costa, J. A. P.; Silva, E. F.. Band structure anisotropy effects on the hole transport transient in 4H–SiC, *Microelectronics Journal*, vol. 34, nos. 5-8, p. 717, 2003.

Hebali, M.; Bennaoum, M.; Berka, M; Bey, A. B.; Benzohra, M.; Chalabi, D; Saidane, A. A high electrical performance of DG-MOSFET transistors in 4H-SiC and 6H-SiC 130 nm technology by BSIM3v3 model, *Journal of Electrical Engineering*, vol. 70, no. 2, pp. 145–151, 2019.

Hjelm, M.; Bertilsson, K.; Nilsson, H. E.. Full band Monte Carlo study of bulk and surface transport properties in 4H and 6H–SiC, *Applied Surface Science*, vol. 184, p. 194, 2001.

Iwata, H.; Itoh, K. M.. 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, no. 11, pp. 6228-6234, 2001.

Iwata, H.; Itoh, K. M., Pensl, G.. Theory of the anisotropy of the electron Hall mobility in n-type 4H- and 6H-SiC. *Journal of Applied Physics*, vol. 88, n. 4, pp. 1956-1961, 2000.

<https://dx.doi.org/10.1063/1.1305556>

Izhevskiy, V. A.; Genova, L. A.; Bressiani, J. C.; Bressiani, A. H. A.. Review article: Silicon Carbide. Structure, Properties and Processing, *Cerâmica*, vol. 46, no. 297, 2000. <http://dx.doi.org/10.1590/S0366-69132000000100002>

Joshi, R. P.. Monte Carlo calculations of the temperature- and field-dependent electron transport parameters for 4H-SiC, *Journal of Applied Physics*, vol. 78, p. 5518, 1995.

Kittel, C.. *Introdução à Física do Estado Sólido*. 8. Ed. Rio de Janeiro: LTC, 2006.

Mello, A. H.. *Dispositivos Semicondutores*, 4. Ed. Rio de Janeiro, Editora Livros Técnicos e Científicos, 1980.

Nakamura, D.; Gunjishima, I.; Yamaguchi, S.; Ito, T.; Okamoto, A.; Kondo, H.; Onda, S.; Takatori, K.. Ultrahigh-quality silicon carbide single crystals, *Nature*, vol. 430, pp. 1009-1012, 2004.

[doi:10.1038/nature02810](https://doi.org/10.1038/nature02810)

Nilsson, H. E.; Martinez, A.; Sannemo, U.; Hjelm, M.; Bellotti, E.; Brennan, K.. 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.

Nilsson, H. E.; Sannemo, U.; Petersson, C. S.. Monte Carlo simulation of electron transport in 4H-SiC using a two-band model with multiple minima, *Journal of Applied Physics*, vol. 80, p. 3365, 1996.

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 13.

Rodrigues, C. G.; Silva, C. A. B.; Vaconcellos, A. R.; Ramos, J. G.; Luzzi, R.. Semiconductor Nonequilibrium Statistics: Applications to far-from equilibrium situations, IOP Publishing Ltda., Bristol, UK, 2020 (in press).

Rodrigues, C. G.. 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.

Rodrigues, C. G.. Tópicos de Física Matemática para Licenciatura, editora LF, São Paulo, 2017.

Roccafore, F.; Via, F. L; Raineri, V.; Mangano, F; Calcagno, L.. Temperature dependence of the c-axis mobility in 6H-SiC Schottky diodes. Applied Physics Letters vol. 83, n. 20, pp. 4181-4183, 2003.
<http://dx.doi.org/10.1063/1.1628390>

Smith, F. W.. Fundamentos de Engenharia e Ciência dos Materiais. Ed. AMGH. Porto Alegre, RS, 2012.

Swart, W. J.. Semicondutores, fundamentos técnicos e aplicações. Campinas, SP: Ed. Unicamp, 2008.

Takahashi, K.; Yoshikawa, A.; Sandhu, A.. Wide Bandgap Semiconductors (Springer, Berlin, Germany, 2006).

Tsukioka, K.; Vasilesk, D.; Ferry, D. K.. An ensemble Monte Carlo study of high-field transport in beta-SiC, Physica B, vol. 185, p. 466, 1993.

Tomé, T.; Oliveira, M. J.. Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade, ed. USP, São Paulo, 2001.

Ziman, J. M.. Electrons and phonons, Oxford Univ. Press, Oxford (1960)