



UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ

Centro de Ciências

Departamento de Física

Propriedades Eletrônicas de Dispositivos MOS Baseados em SiC

Erlania Lima de Oliveira

Dissertação apresentada ao Departamento de Física
da Universidade Federal do Ceará como parte
dos requisitos para a obtenção do título de
Mestre em Ciências

UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ

Centro de Ciências

Departamento de Física

**Propriedades Eletrônicas de Dispositivos MOS
Baseados em SiC**

Erlania Lima de Oliveira

Dissertação apresentada ao Departamento de Física
da Universidade Federal do Ceará como parte dos requisitos
para a obtenção do título de Mestre em Ciências.

BANCA EXAMINADORA:

Dr. Jeanlex Soares de Sousa, UFC

Dr. Valder Nogueira Freire, UFC

Dr. Eronides Felisberto da Silva Jr., UFPE

Aprovada em 18 de Janeiro de 2005

Aos meus pais pelo apoio e amizade.

"O valor das coisas não está no tempo em que elas duram, mas na intensidade com que acontecem. Por isso existem momentos inesquecíveis, coisas inexplicáveis e pessoas incomparáveis."

Fernando Pessoa

Agradecimentos

À Deus, por iluminar-me, e pela inspiração necessária para realizar esse trabalho.

Ao professor Jeanlex Soares de Sousa, dedicado e competente orientador, pela confiança, contribuição, pelo grande apoio em todos os momentos de dificuldade e pela amizade conquistada.

Ao professor Valder, por acreditar em minha capacidade.

Aos meus pais, responsáveis diretos por todos os valores morais e pessoais que tenho perseguido.

Aos meus irmãos, avós, tios, sobrinhos, primos, cunhados e cunhadas, pelo amor e carinho incondicionais. São meu suporte pra continuar lutando.

À Dory Hélio, pelo amor, carinho, apoio, pela presença na minha vida que fez com que os obstáculos apresentados fossem mais fáceis de ser superados, e por aceitar a distância.

Ao meus Professores da Universidade do Estado do Rio Grande do Norte, Manoel, Carlos Ruiz, Josildo, Valdomiro, Auta Stella, Idalmir, Raimundo, Milton e Ana Lúcia, que compartilharam meus ideais, incentivando-me a prosseguir nessa jornada.

Ao professor Josué, pela possibilidade da realização desse trabalho.

Ao Professor Gil, pelo apoio e oportunidade.

Aos professores da Pós-graduação em Física da UFC, pela oportunidade e conhecimentos compartilhados.

Ao meus amigos da UERN e na vida toda, Gilneide, Júnior, Gustavo, Roberta, Sergivan e Cícero.

Ao meu grande amigo Rivelino, pelo apoio e carinho.

Aos meus amigos, Roberval, Cristiano e Jeane, um agradecimento especial, pela convivência e carinho.

A minha companheira inseparável, Jusciane, pela amizade e companheirismo.

Aos meus amigos do grupo, pela troca de conhecimentos, Franciné, Wagner, Lucas, Felipe, Ricardo, Luciana Magal, Erivelton, José, Teldo, Andréi, Welberth e Pedro.

Aos meus amigos de mestrado, pelos bons momentos, Arian, Gilberto, Hellen, Nazareno e Wagner.

Aos meus amigos, Eduardo Bedê, Mariana, Jean, Antonio, Daniel Valim, Lena, Talita, Isaías, Elder, Euzenil, Lincol, Ideolinda, Sara e Valdeci.

À Marilza e Fabrício pela amizade conquistada.

Aos meus amigos Raimundo (Daborê) e Amilton, que agora fazem parte da minha família.

Aos meus amigos, Luciana Angélica, sempre amiga e companheira, Joelma, a quem tenho um enorme carinho e amizade, Felipão, por ter-me cedido o seu computador para trabalhar, Marília Baquil, Deusdedith, professor Carlos alberto, Daniel, Subênia, sempre amiga, King, Rosa e Fábria. Sem nossas farras esse trabalho tinha sido realizado em menos tempo, porém sem o mesmo prazer.

Às funcionárias do Departamento de Física, Rejane, D. Silva, Zenilda, Ana Cleide, Creuza e Regina.

Aos membros da banca examinadora, pela gentileza em aceitar o convite para avaliação dessa pesquisa e pelas sugestões dadas.

À agência CAPES e à rede de pesquisa NanoSemiMat pelo apoio financeiro.

Resumo

O carbeto de silício (SiC) é considerado um material promissor para aplicações que demandam altas potências, altas frequências, e para funcionamento em temperaturas elevadas e ambientes quimicamente hostis, condições nas quais as atuais tecnologias baseadas em Si e GaAs não oferecem performances satisfatórias. Esta versatilidade deve-se à características notáveis como grande *gap* de energia, alta mobilidade eletrônica, alta condutividade térmica, altos campos de ruptura dielétrica, estabilidade e resistência mecânica. Além disso, o SiC pode ser crescido em mais de 200 politipos envolvendo três estruturas cristalinas: cúbica (zincoblenda), hexagonal (wurtizita) e romboédrica. A vantagem mais significativa do SiC sobre outros semicondutores de *gap* largo é a capacidade de se crescer SiO₂ termicamente, similar a do Si. Infelizmente, dispositivos baseados em SiC não podem competir com tecnologias baseadas em Si nas áreas de baixo custo, densidade funcional e temperaturas moderadas. Embora a tecnologia do SiC esteja evoluindo rapidamente, há ainda vários problemas a serem resolvidos como crescimento cristalino em larga escala, minimização de defeitos e otimização da performance dos dispositivos.

A finalidade deste trabalho é desenvolver ferramentas teóricas e computacionais para a investigação das propriedades elétricas e eletrônicas de capacitores MOS baseados em SiC. O modelo físico utilizado baseia-se na solução das equações acopladas de Poisson e Schrödinger. Embora o modelo descrito seja geral o suficiente para ser aplicado em dispositivos mais complexos e geometrias tri-dimensionais, optou-se por um modelamento unidimensional, uma vez que os fenômenos físicos que regem o funcionamento básico de dispositivos MOSFET's podem ser perfeitamente capturados pelo

modelamento unidimensional de capacitores MOS.

Abstract

Silicon Carbide (SiC) has been considered a promising material for high-power, high-frequency, high-temperature and harsh environments electronics, where existing technologies based on Si and GaAs fail to provide any satisfactory performance. This versatility is due to remarkable characteristics like its wide band gap, high electron mobility, high thermal conductivity, high breakdown field, mechanical stability and endurance. In addition, SiC can be grown in more than 200 different polytypes, involving three different crystalline structures: cubic (zincblende), hexagonal (wurtzite) and rhombohedral. Another significant advantage over other wide bandgap semiconductors, is the ability to grow SiO₂ layers on SiC by thermal oxidation, similarly to Si. Unfortunately, SiC-based devices cannot compete with Si-based technology in the areas of low cost, functional density and moderate temperature applications. Even though SiC technology has been advanced rapidly, there are still several problems to be issued like large-scale crystal growth, defects minimization and device performance, before it can reach full potential.

This work aims the development theoretical and computational tools to investigate the electric and electronic properties of metal-oxide-semiconductor (MOS) capacitors based on SiC. The physical model adopted is based on the solution of the Poisson and Schrödinger coupled equations. The presented model is general enough to be used in more complex devices and tri-dimensional geometries. However, the basic physics that rules the operation of a full MOS Field Effect Transistor (MOSFET) can be perfectly captured by an one-dimensional modeling of MOS capacitors.

Índice

Lista de Figuras	vi
Lista de Tabelas	1
1 Introdução	1
1.1 Um Pouco de História	1
1.2 A Tecnologia MOS	3
1.3 Limites dos Dispositivos MOS	4
1.4 Propriedades Básicas do SiC	5
1.4.1 Crescimento do SiC Cristalino	7
1.4.2 Propriedades Físicas	8
1.4.3 Propriedades Eletrônicas	9
1.5 Estado da Arte em Dispositivos SiC	12
1.6 Objetivos e Organização deste Trabalho	14
2 Capacitor MOS	16
2.1 Regimes de Operação	18
2.1.1 Voltagens Alternadas	20
2.2 Alinhamento das Bandas	20
2.3 Obtenção da Energia de Fermi	23
2.4 Análise Eletrostática: Modelo Semi-Clássico	27
2.5 Efeitos Quânticos	29
2.5.1 Autoconsistência	32
2.5.2 Corrente de Tunelamento	33
3 Métodos Numéricos	36
3.1 Diferenças Finitas	37
3.1.1 Discretização da Equação de Schrödinger	38
3.1.2 Discretização da Equação de Poisson	40
3.2 Não-linearidades na Equação de Poisson	41
3.3 Soluções Individuais e Auto-consistência	43

4	Propriedades Elétricas e Eletrônicas de Capacitores SiC-MOS	45
4.1	Espessura dos Óxidos	45
4.2	Efeitos de Dopagem	49
4.3	Influência da Temperatura	53
4.4	Ionização Incompleta	56
4.5	Efeitos Quânticos	60
4.5.1	Vales de Energia e Anisotropia da Massa Efetiva	62
4.5.2	Parâmetros do Dispositivo e Estrutura Eletrônica	63
4.5.3	Importância do Modelamento Quântico	66
5	Conclusões e Perspectivas	69
5.1	Espessura do Óxido	70
5.2	Efeitos de Temperatura	70
5.3	Efeitos da Ionização Incompleta	71
5.4	Modelamento Quântico	71
5.5	Investigações Futuras	72
	Referências	73
	Trabalhos Recentes	79

Lista de Figuras

1.1	Primeiro CI fabricado pelo processo planar.	3
1.2	Evolução do tamanho e número de transistores MOS por processador [3].	6
1.3	Ilustração esquemática da técnica de crescimento de monocristais de SiC livres de defeitos de deslocamento [23].	8
1.4	Seqüências de empilhamento dos átomos de carbono (círculos menores) e silício (círculos maiores) para cinco diferentes politipos SiC (2H, 4H, 15R, 6H e 3C) [24].	9
1.5	Primeira zona de Brillouin das redes cristalinas cúbica (esquerda) e hexagonal (direita) e seus principais pontos de alta simetria [34].	11
1.6	Estrutura de banda dos politipos (a) 3C-SiC, (b) 2H-SiC, (c) 4H-SiC e (d) 6H-SiC [34].	11
1.7	Valores teóricos e experimentais do gap de energia dos politipos de SiC mais comuns em função da ortogonalidade [24].	12
2.1	(a) Capacitor de placas paralelas. (b) Circuito do capacitor de placas paralelas. (c) Capacitor MOS. (d) Circuito do capacitor MOS.	17
2.2	Comparação das curvas C-V de capacitores MOS e de placas paralelas.	17
2.3	Capacitor MOS nos regimes de (a) acumulação, (b) depleção e (c) inversão sob a ação de voltagens dc.	19
2.4	Estrutura de Bandas do Capacitor MOS Ideal	20

2.5	Estrutura de Banda do Capacitor MOS Ideal quando (a) $\Phi_M = \Phi_S$ e (b) $\Phi_M \neq \Phi_S$	22
2.6	Efeitos de quantização em capacitores MOS durante o regime de inversão.	30
2.7	Representação esquemática do tunelamento de elétrons confinados na camada de inversão de capacitores MOS através do óxido.	33
3.1	Fluxograma da estratégia de solução auto-consistente das equações acopladas de Schrodinger e Poisson.	44
4.1	Efeito da variação da espessura do óxido na banda de condução e na distribuição de campo elétrico no interior dos capacitores MOS-3C. . .	46
4.2	Dependência da intensidade do campo elétrico no interior do óxido em relação a voltagem externa aplicada para quatro capacitores de materias diferentes.	48
4.3	Efeito da variação da espessura do óxido sobre as curvas CV de capaci- tores SiC-MOS.	49
4.4	Efeito da concentração da dopagem sobre o perfil da banda de condução e do campo elétrico no interior de um capacitor MOS 3C-SiC, para $V_G=2$ V, $T_{ox}=10$ nm e $T = 300K$	51
4.5	Variação do campo elétrico no interior do óxido em capacitores MOS com a voltagem externa aplicada.	52
4.6	Concentração de elétrons n_{2D} por unidade de área na banda de condução em função da concentração de dopagem para $V_G = 3$ V, $T_{ox} = 10$ nm e $T = 300K$	53
4.7	Curvas CV de diferentes capacitores MOS para $N_A = 10^{18}\text{cm}^{-3}$ e $T_{ox} =$ 10 nm em temperatura ambiente.	53
4.8	Concentração intrínica de portadores (n_i) em função da temperatura. .	54
4.9	Densidade de carga por unidade de área na banda de condução em função da temperatura.	55

4.10	Capacitância total de dispositivos MOS (Si, SiC-3C, SiC-4H e SiC-6H) para temperaturas de 300 K, 500 K e 1000 K.	56
4.11	Dependência de V_T em relação a temperatura extraída das curvas CV mostradas na fig. 4.10 para dispositivos MOS 3C-SiC com $T_{OX} = 10$ nm e $N_A = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$	57
4.12	Comparação das concentrações de buracos e impurezas ionizadas em dispositivos MOS a 6H-SiC calculadas através das aproximações de ionização total e parcial das impurezas em função da posição para $T = 300$ K e $T = 500$ K.	58
4.13	Efeito da variação das energias de ionização sobre as concentrações de buracos e impurezas ionizadas calculadas usando-se a hipótese de ionização parcial em função da posição para alta temperatura.	59
4.14	Efeito da variação das energias de ionização e temperatura sobre as curvas CV do capacitor 6H-SiC para $T_{ox} = 10$ nm e $N_a = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$	60
4.15	Comparação das densidades de portadores minoritários calculadas com os modelos semi-clássico e quântico.	61
4.16	Quadrado da função de onda dos dois primeiros estados eletrônicos das bandas Δ_2 e Δ_4 na região de depleção de um capacitor SiC-3C MOS. a figura menor mostra a orientação dos vales de energia do SiC-3C em relação ao óxido.	63
4.17	Comportamento dos quatro primeiro estados eletrônicos das bandas Δ_2 e Δ_4 em capacitores SiC-3C e suas respectivas ocupações em função da voltagem externa aplicada. As setas indicam o sentido de crescimento dos índices dos estados eletrônicos.	64

4.18	Panorama geral do efeito da espessura do óxido (a), concentração de dopagem (b) temperatura (c) sobre o estado fundamental E_0 da camada de inversão de capacitores MOS SiC-3C em função da voltagem, e as figuras (d), (e) e (f) mostram uma correlação entre E_0 e a densidade superficial de cargas de inversão n_s sobre estes parâmetros.	65
4.19	Comparação das densidades de inversão (n_{2D}) obtidas pelo modelos semi-clássico e quântico em capacitores SiC-3C, 6H-SiC e 4H-SiC MOS para $T_{ox} = 10$ nm, $N_a = 10^{17}$ cm ⁻³ e $T = 300$ K.	67
4.20	Comparação das curvas CV de capacitores SiC-3C MOS obtidas pelo modelos modelos semi-clássico e quântico para $N_a = 10^{17}$ cm ⁻³ e $T = 500$ K.	67
4.21	Dependência do parâmetro C_{INV}/C_{OX} em função da espessura do óxido em capacitores SiC-3C e Si MOS para $V_G = 7$ V, $N_a = 10^{17}$ cm ⁻³ e $T = 500$ K.	68

Lista de Tabelas

1.1	Propriedades elétricas dos principais politipos de SiC, Si e GaAs em temperatura ambiente ($T = 300$ K) [29, 30, 31, 32].	10
2.1	Parâmetros físicos dos politipos de SiC, Si e SiO ₂	32
4.1	Principais dopantes tipo p do SiC e suas respectivas energias de ionização (em eV) [11, 78].	57

1

Introdução

1.1 Um Pouco de História

O início do século XX foi fundamental para o desenvolvimento da microeletrônica, devido ao enorme progresso da física, especificamente com o desenvolvimento da mecânica quântica, por Heisenberg, Schrödinger e outros. Paralelamente, o primeiro conceito de um transistor ¹ de efeito de campo (FET-Field Effect Transistor) do estado sólido foi proposto em 1926 por Lilienfeld, que patenteou a idéia de modular a condutividade de um semicondutor por meio de um campo elétrico [1]. No entanto, Lilienfeld não obteve sucesso na realização prática da sua proposta. Na década seguinte, houve um forte desenvolvimento das teorias quânticas em sólidos que permitiram entender os semicondutores e motivaram a pesquisa em dispositivos semicondutores com o objetivo de fabricar o transistor FET. No meio de tanta euforia, descobriu-se semicondutores do tipo P e N, cujos portadores majoritários são buracos e elétrons, respectivamente. Além disso, descobriu-se que o grau e o tipo de condutividade nestes semicondutores devia-se à presença de impurezas.

Ao final da II Guerra Mundial, o desenvolvimento da eletrônica estava baseado nos seguintes dispositivos básicos: (i) válvulas termiônicas, muito frágeis, caras e de alto consumo de energia; e (ii) relés eletromecânicos, cuja comutação era muito lenta.

¹A operação do dispositivo MOSFET baseia-se na modulação da condutividade por aplicação de voltagens.

As limitações destes dispositivos motivaram a pesquisa e desenvolvimento de novos dispositivos. Em 1946, Bardeen (Bell Labs) sugeriu uma explicação pelo insucesso na obtenção do transistor FET baseado na alta densidade de estados de superficiais presentes no interior da banda proibida. Persistindo na pesquisa que levou à invenção do FET, Bardeen e Brattain descobriram por acaso o efeito de transistor bipolar, no final de 1947.

O estudo e desenvolvimento de processos de oxidação de Si permitiram o desenvolvimento do tão sonhado transistor FET com porta isolada, ou seja, o transistor MOSFET (Metal-Oxide-Semiconductor Field Effect Transistor), ou simplesmente MOS. Ele foi inicialmente considerado apenas como uma curiosidade em vista da sua performance bastante inferior à dos transistores bipolares. Apenas na década de 60, a Bell Labs operacionalizou o transistor MOS e este passou a ser encarado como um dispositivo viável e adequado, devido sua estrutura simples, para construção de circuitos integrados (CI's) mais complexos. Em 1964, os primeiros transistores MOS foram introduzidos no mercado. No entanto, problemas como impurezas e estados de interface mantiveram restrito o uso desses dispositivos. Entre 1964 e 1969 várias técnicas foram desenvolvidas para redução dos estados de interface e identificou-se o sódio como principal impureza. Com isso, a confiabilidade e a gama de aplicações das estruturas MOS aumentaram significativamente.

No fim da década de 50 algumas importantes contribuições, tanto para a microeletrônica no geral como para o renascimento dos FET's, foram feitas: (i) J. Kilby (Texas Instruments) desenvolveu o primeiro circuito integrado (um transistor, um capacitor e três resistores colocados em uma placa de germânio)²; (ii) J. Hoerni (Fairchild Semiconductors) inventou o processo planar para fabricação de transistores. Estas realizações não representaram propriamente um avanço científico, mas sim uma forma engenhosa de conectar dispositivos cujos princípios de funcionamento já eram bem conhecidos. Entretanto, a fabricação de CI's revolucionou a eletrônica e possibilitou

²Kilby foi agraciado com o prêmio Nobel de Física no ano 2000.

um grande avanço nos equipamentos científicos e na ciência. A Figura 1.1 mostra o primeiro CI fabricado pelo processo planar. Vários aperfeiçoamentos foram posteriormente introduzidos como o uso de alumínio evaporado para realizar interconexões. O processo planar, foi fundamental para o progresso da microeletrônica, já que seu princípio básico, acrescido de várias inovações e evoluções, vem sendo usado até hoje na fabricação dos modernos CI's. A comercialização de CI's começou em 1962, não parando mais de crescer em termos de volume e da densidade de transistores por chip.

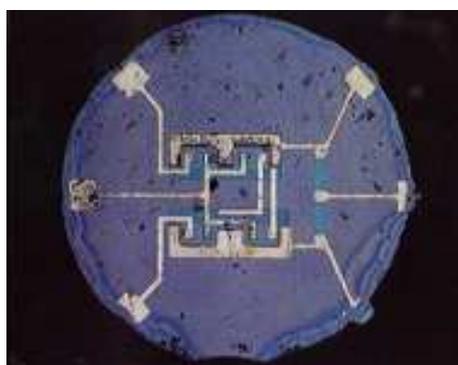


Figura 1.1: Primeiro CI fabricado pelo processo planar.

1.2 A Tecnologia MOS

Os capacitores MOS foram inicialmente concebidos para substituir os diodos de junção PN como capacitores variáveis em circuitos LC sintonizáveis, pois apresentam maior variação de capacitância com a tensão e menor corrente de fuga. A resposta da capacitância em função da voltagem aplicada (curvas CV) nos capacitores MOS é não-linear, e o aumento da não linearidade sob o efeito de iluminação pode ser usado em multiplicadores de frequência, osciladores paramétricos e em amplificadores. Capacitores MOS também são utilizados para construção de vários tipos de dispositivos que transferem ou armazenam informação digital. Dentre os mais importantes estão as memórias semicondutoras e os dispositivos de acoplamento de carga ou CCD's (Charge Coupled Devices).

As principais vantagens do capacitor MOS residem em sua relativa simplicidade de funcionamento, baixo custo de fabricação, baixo consumo de energia e pequenas dimensões. Um capacitor MOS ocupa uma área aproximadamente 50 vezes menor que os transistores bipolares. Um outro aspecto muito importante da tecnologia MOS é o fato de seus circuitos integrados não usarem resistores na sua construção. Os resistores tomam parte da área do chip ocupada pelos transistores bipolares. A alta densidade de integração de capacitores MOS em CI's permite a construção de sistemas de alta confiabilidade, em virtude da redução do número de conexões externas. Por outro lado, uma das principais desvantagens dos transistores MOS é sua baixa velocidade de operação em comparação aos transistores bipolares.

1.3 Limites dos Dispositivos MOS

Desde a invenção dos dispositivos MOS, uma contínua redução de suas dimensões tem sido observada. De modo geral, o número de transistores por circuito dobra a cada dezoito meses, enquanto o custo de produção por transistor é reduzido à metade no mesmo período. Esta tendência passou a ser conhecida como *Lei de Moore*. Embora esta "lei" seja fortemente empírica, ela provou ser válida e se transformou em uma tendência que guia os rumos da indústria de semicondutores há mais de três décadas, por razões comerciais pretende-se que continue sendo válida no início do século XXI. Atualmente, as dimensões características dos dispositivos atingem a escala de dezenas de nanômetros, e o número de transistores nos microprocessadores se aproxima de 10^9 (ver a Figura 1.2). De acordo com a lei de Moore, a partir de 2010 haverá grandes limitações na manutenção das atuais taxas de redução do tamanho dos transistores, uma vez que as camadas do matérias estão tornando-se cada vez mais estreitas. Aproximando-se das dimensões atômicas . Portanto, para evitar este futuro incerto, grandes esforços estão sendo atualmente desempenhados no sentido de tirar proveito dos fenômenos físicos observados em sistemas de baixa dimensionalidade, e criar novos

dispositivos e/ou paradigmas de desenvolvimento de circuitos [2]. A Figura 1.2 mostra a taxa de redução dos transistores MOS desde o início de sua comercialização [3].

Com a miniaturização dos dispositivos MOS, a espessura do óxido, cujo papel é agir como isolante e bloquear o transporte de corrente através da porta lógica (*gate*), também precisa ser reduzida para evitar os efeitos indesejados de canal curto [4]. Portanto, quando o tamanho característico dos transistores MOS atinge dimensões sub-micrométricas, o óxido torna-se extremamente fino possuindo apenas poucos átomos de espessura. Desta forma, as cargas confinadas no canal condutivo do substrato podem tunelar através do óxido, criando correntes de fuga no contato metálico do *gate* [5, 6, 7, 8, 9]. Esta corrente aumenta drasticamente o consumo de energia e afeta o desempenho devido ao aquecimento dos dispositivos. Atualmente o crescente número de transistores e suas interconexões está levando os circuitos MOS a temperaturas superiores ao seu limite de esfriamento. Estes fatos evidenciam a necessidade de drásticas mudanças em como circuitos integrados de alta densidade são construídos em larga escala, seja em nível de projeto de circuitos ou em nível de desenvolvimento de novos dispositivos eletrônicos e novos materiais [2, 10]. Dentro deste contexto, o carbeto de silício (SiC) foi recentemente apontado como um dos prováveis substitutos do Si em aplicações específicas.

1.4 Propriedades Básicas do SiC

Apesar do Si dominar completamente a indústria semicondutora, nos últimos anos o SiC tem recebido grande atenção, devido às suas propriedades físicas e estabilidade térmica superiores as do Si. O SiC é o único material binário composto de silício e carbono existente na fase sólida, e raramente é encontrado na natureza [11]. Em 1824, foi sugerido pela primeira vez que ligações químicas poderiam existir entre silício e carbono [12], e o primeiro cristal de SiC foi crescido em 1891 por Acheson [13]. O interesse histórico no SiC começou com o desenvolvimento de aplicações tradicionais baseadas em

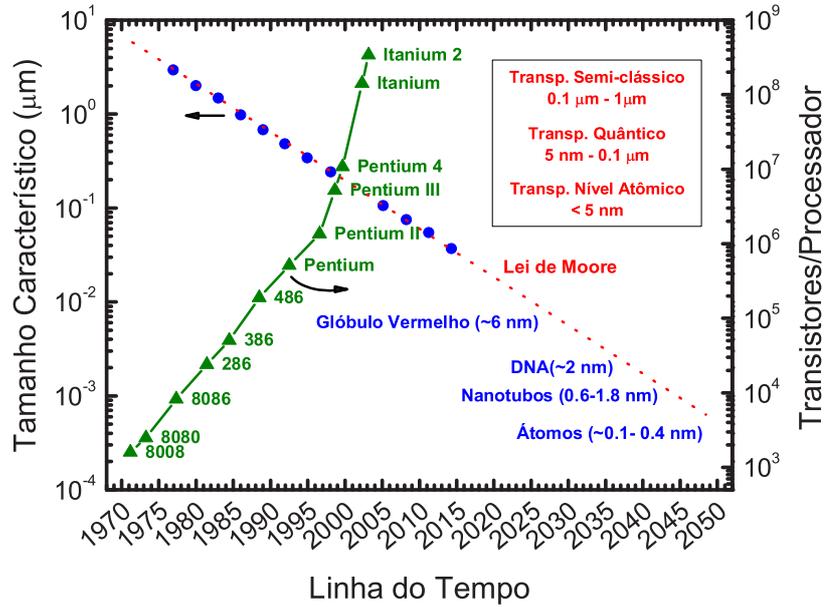


Figura 1.2: Evolução do tamanho e número de transistores MOS por processador [3].

cerâmicas [11]. Contudo, ainda em 1892 Tesla demonstrou a primeira aplicação técnica do SiC através do desenvolvimento de uma lâmpada com um material rico em SiC, sem no entanto conhecer a composição química deste [14]. Em 1907, o primeiro LED de SiC foi construído [15], mas somente em 1929 Seeman mostrou que o SiC era, de fato, um semiconductor. Além disso, a eletroluminescência e as propriedades retificadoras das junções PN foram observadas pela primeira vez em cristais de SiC. Estas propriedades são dois dos mais importantes fenômenos da eletrônica de semicondutores [11].

O SiC atualmente não pode competir com o Si em áreas como custo de produção de pastilhas, densidade superficial de dispositivos e funcionamento em temperaturas moderadas [16]. Porém, o SiC oferece a possibilidade de criação de uma gama de aplicações, devido ao interesse tecnológico em dispositivos que operam em altas temperaturas, altas potências, altas frequências e em ambientes quimicamente hostis, nos quais os semicondutores convencionais não podem funcionar. O SiC possui condutividade térmica e campo elétrico de ruptura elevados devido às fortes ligações químicas Si-C que produzem fônons de altas frequências e energias (>10 meV) [11]. Estas características

são altamente desejadas para aplicações em áreas como: indústria aeronáutica e automotiva, telecomunicações, distribuição de energia, exploração de poços petrolíferos, entre outras. Contudo, a vantagem mais significativa do SiC é possuir o SiO_2 como seu óxido nativo, similar ao Si [11]. Infelizmente, muitas das vantagens operacionais do SiC ainda não podem ser aproveitadas atualmente devido ao fato das técnicas de crescimento dos cristais de SiC ainda serem imaturas, comprometendo a fabricação de dispositivos comercialmente confiáveis. Por outro lado, a tecnologia de manipulação do Si está décadas à frente em termos de maturidade.

1.4.1 Crescimento do SiC Cristalino

Uma das características mais importantes do SiC é a sua estabilidade térmica em comparação com o Si. Porém, muitos dos processos de fabricação típicos do Si não funcionam para o SiC ou necessitam de temperaturas extremamente altas. O SiC sublima gradualmente em temperaturas acima de 2000 K. Com isto, torna-se praticamente impossível crescer cristais de SiC através do puxamento de sementes a partir do SiC fundido, como no processo Czochralski de crescimento que permite produzir cilindros massivos de Si cristalino com 200-300 mm de diâmetro [17]. Cálculos sugerem que a fusão do SiC pode ocorrer em pressões acima de 10^5 atm e temperaturas acima de 3500 K. Embora seja possível criar tais condições de crescimento, elas seriam impraticáveis para produção comercial de monocristais de SiC em larga escala [18, 19]. Atualmente, cristais de SiC são formados por um processo modificado de sublimação que limita-se a produzir cilindros de até 100 mm de diâmetro. Trata-se de um processo caro e complicado, que torna o preço das pastilhas (*wafers*) de SiC muito superiores as de Si. Ainda assim, a superioridade de desempenho dos dispositivos de potência de SiC permite que este possa competir com o Si em aplicações específicas [17]. Além dos problemas de fabricação, os cristais de SiC apresentam enorme variedade de defeitos macroscópicos, que impedem a construção de dispositivos de alta eficiência e

confiabilidade [20, 21, 22]. Contudo, Nakamura *et al.* desenvolveram uma técnica de crescimento em duas etapas de monocristais SiC na qual a redução de defeitos de deslocamento é de duas a três ordens de magnitude em comparação com os métodos tradicionais, permitindo crescer monocristais praticamente livre de defeitos [23]. A Figura 1.3 mostra um diagrama esquemático da técnica de crescimento de Nakamura *et al.*.

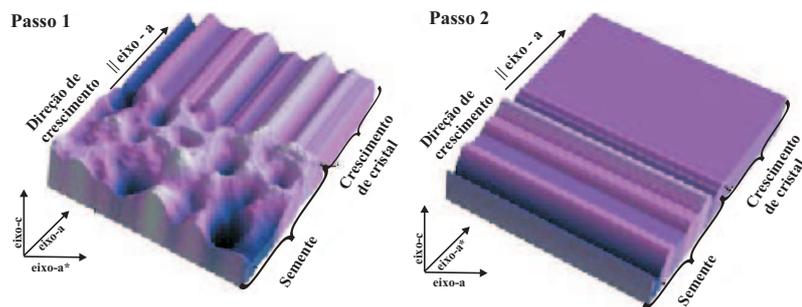


Figura 1.3: Ilustração esquemática da técnica de crescimento de monocristais de SiC livres de defeitos de deslocamento [23].

1.4.2 Propriedades Físicas

O SiC pode ser crescido em diversas estruturas cristalinas. Essa característica é chamada de *politipismo*. Todos os politipos são formados quimicamente em 50% de átomos de C ligados covalentemente a 50% de átomos de Si. Os politipos de SiC caracterizam-se por diferentes seqüências de empilhamento das camadas alternadas de Si e C (veja Figura 1.4). Há mais de 200 politipos mencionados na literatura: há a ocorrência de apenas um na estrutura cúbica (C), e várias ocorrências na estrutura hexagonal (H) e romboédrica (R). A Figura 1.4 mostra alguns possíveis modos de empilhamento que resultam em diferentes politipos de SiC. Devido a diferença no arranjo dos átomos na rede cristalina de SiC, cada politipo exibe propriedades elétricas e ópticas únicas. A Tabela 1.1 compara algumas destas propriedades em temperatura ambiente. Os tipos de SiC mais importantes são **3C-SiC**, **4H-SiC** e **6H-SiC**, os quais

serão investigados neste trabalho. Dentre estes, o 3C é o único politipo que ainda não possui tecnologia de crescimento cristalino (cristais *bulk*), mas pode ser crescido heteroepitaxialmente sobre substratos de SiC.

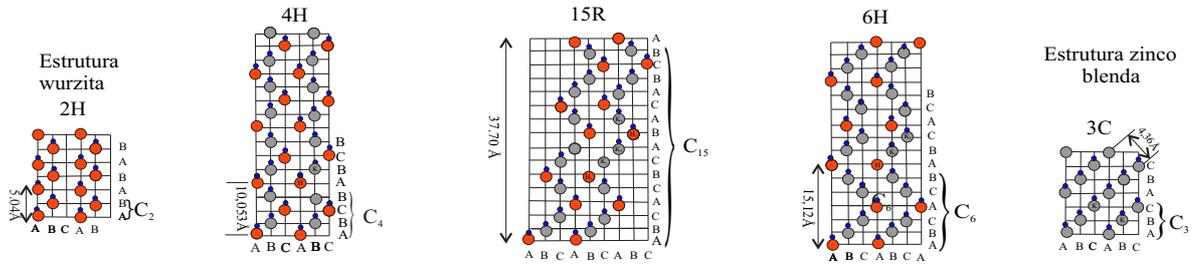


Figura 1.4: Seqüências de empilhamento dos átomos de carbono (círculos menores) e silício (círculos maiores) para cinco diferentes polítipos SiC (2H, 4H, 15R, 6H e 3C) [24].

O 3C-SiC possui gap de energia e campo de ruptura menor do que 4H-SiC e o 6H-SiC, porém tem uma alta mobilidade de elétrons. A principal diferença entre 4H-SiC e 6H-SiC é que a mobilidade dos elétrons é duas vezes maior na direção perpendicular ao eixo c e aproximadamente 10 vezes maior na direção paralela ao eixo c no 4H-SiC [25]. Este fator explica a grande importância do 4H-SiC para construção de dispositivos de alta performance. Entretanto, a mobilidade dos elétrons no canal em dispositivos MOS baseados em 4H-SiC é muito baixa. Este problema impediu a fabricação de dispositivos de baixa resistência durante vários anos [16]. A Tabela 1.1 também mostra que o grande gap de energia e a baixa concentração de portadores (n_i) do SiC intrínseco permite que o SiC apresente desempenho superior ao Si em altas temperaturas.

1.4.3 Propriedades Eletrônicas

Apesar dos avanços no crescimento de monocristais de SiC, vários problemas relativos a propriedades físicas básicas ainda necessitam de maior esclarecimento. A estrutura eletrônica do SiC tem sido calculada por vários métodos como por exemplo ondas planas

Tabela 1.1: Propriedades elétricas dos principais politipos de SiC, Si e GaAs em temperatura ambiente ($T = 300$ K) [29, 30, 31, 32].

Propriedades	Si	GaAs	4H-SiC	6H-SiC	3C-SiC
Gap de energia (eV)	1.1	1.42	3.2	3.0	2.0
Constante dielétrica	11.9	13.1	9.7	9.7	9.7
Campo de ruptura (MV/cm)	0.6	0.6	eixo-c:3.0	eixo-c:3.2	>1.5
($N_D=10^{17}\text{cm}^{-3}$)				\perp eixo-c:>1	
Condutividade térmica	1.5	0.5	3-5	3-5	3-5
($\text{W cm}^{-1} \text{K}^{-1}$)					
Concentração intrínseca	10^{10}	1.8×10^6	$\sim 10^{-7}$	$\sim 10^{-5}$	~ 10
de portadores (cm^{-3})					
Mobilidade do elétron	1.200	6500	eixo-c: 800,	eixo-c: 60,	750
($\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$) ($N_D=10^{16}\text{cm}^{-3}$)			\perp eixo-c:800	\perp eixo-c:400	
Mobilidade do buraco	450	320	115	90	40
($\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$) ($N_A=10^{16}\text{cm}^{-3}$)					
Velocidade de saturação do elétron	1.0	1.2	2.0	2.0	2.5
(10^{17}cm/s)					
Doadores e energia	P: 45,	Si: 5.8	N: 45,	N: 85	N: 50
de ionização (meV)	As: 54		P: 80		
Aceitadores e energia	B: 45	Be, Mg, C: 28	Al: 200,	Al: 200,	Al: 270
de ionização (meV)			B: 300	B: 300	
Diâmetro do wafer	30	15	5	5	nenhum
comercial em 1999(cm)					

ortogonalizadas [26], método dos pseudopotenciais [27], teoria do funcional de densidade (DFT) dentro da aproximação da densidade local (LDA) [28], entre outros. Todas essas técnicas revelam uma natureza altamente anisotrópica na estrutura da banda para todos os politipos, que foi confirmada por medidas de ressonância cyclotron [33]. As consequências dessa anisotropia no comportamento elétrico do SiC ainda estão longe de serem entendidas. Além disso, o SiC possui gap indireto cujos vales de energia mínima estão localizadas em diferentes pontos da rede recíproca, dependendo da estrutura cristalina do politipo. Por exemplo, os vales de energia mínima do politipo 4H-SiC estão localizados nos pontos M de alta simetria, cujos eixos principais do elipsóide de energia apontam nas direções $M\Gamma$, MK and ML . As Figuras 1.5 e 1.6 mostram as zonas

de Brillouin das redes cristalinas cúbica (3C-SiC) e hexagonal (2H-SiC) e suas respectivas estruturas de bandas. Cada politipo SiC exibe propriedades elétricas e ópticas únicas, como é o caso da energia do gap (E_G). A Figura 1.7 mostra a dependência do gap com o grau de hexagonalidade exibido por cada politipo medidos em diferentes pontos da zona de Brillouin. Para o gap relativo aos pontos M, os valores teóricos aumentam com a hexagonalidade enquanto para os pontos de alta simetria K o gap diminui com a hexagonalidade de tal maneira que além de 90%, o ponto K torna-se o gap de energia mínima.

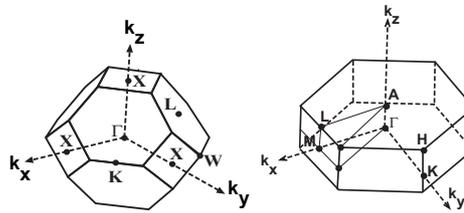


Figura 1.5: Primeira zona de Brillouin das redes cristalinas cúbica (esquerda) e hexagonal (direita) e seus principais pontos de alta simetria [34].

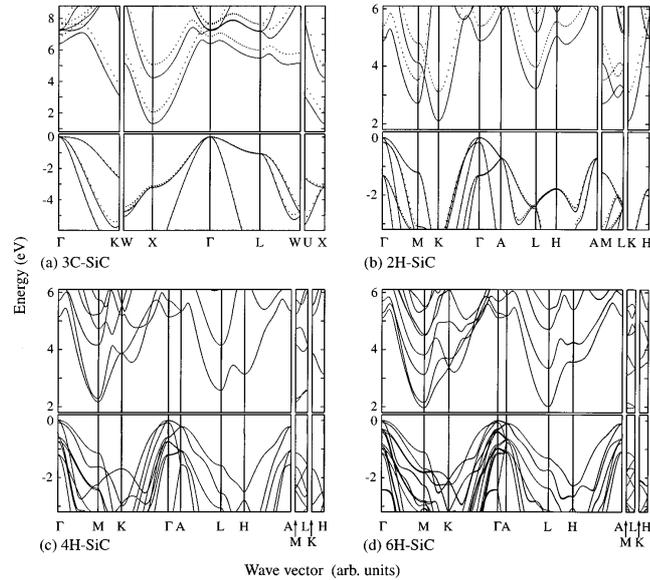


Figura 1.6: Estrutura de banda dos politipos (a) 3C-SiC, (b) 2H-SiC, (c) 4H-SiC e (d) 6H-SiC [34].

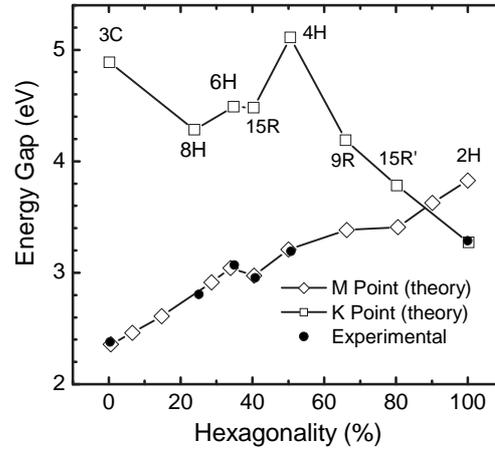


Figura 1.7: Valores teóricos e experimentais do gap de energia dos polítipos de SiC mais comuns em função da ortogonalidade [24].

1.5 Estado da Arte em Dispositivos SiC

A vasta maioria dos circuitos integrados baseiam-se dispositivos MOSFET nos quais o Si é o semicondutor ativo. A combinação das vantagens operacionais dos dispositivos MOSFET com as propriedades únicas do SiC oferece possibilidade de aplicações em condições que outros semicondutores não funcionariam. Além disso, o SiC é um material atrativo para a tecnologia MOS pois, entre os semicondutores compostos, é o único que pode ser térmicamente oxidado pra crescer filmes de SiO_2 . Entretanto o progresso dos dispositivos MOS baseados em SiC tem sido limitado por importantes diferenças qualitativas entre os óxidos crescidos sobre SiC e Si.

A performance dos MOSFET SiC é principalmente afetada pela estrutura interfacial SiO_2/SiC que exhibe níveis indesejáveis de densidade de estados interfaciais, cargas fixas no óxido, captura de cargas, tunelamento através do óxido e espalhamento das cargas no canal condutivo, devido a rugosidades na interface [16, 35, 36, 37, 38, 41]. Todos estes problemas afetam fortemente a mobilidade das cargas no canal condutivo deixando-a muito abaixo dos valores teóricos do SiC e daqueles obtidos em dispositivos baseados em Si. Estes defeitos de interfaciais estão relacionados com a presença de carbono no

SiC, que faz a química da oxidação do SiC ser mais complicada do que a do Si. Há evidências que átomos de carbono se libertam durante a oxidação térmica e fiquem próximo da interface SiO_2/SiC como átomos isolados ou agrupados. Uma outra fonte possível de defeitos são aqueles devido ao próprio óxido, como níveis de energia dentro do gap do SiC [16].

Os estados na interface SiO_2/SiC apresentam dois inconvenientes: (i) não podem ser passivados com hidrogênio, e (ii) seu comportamento elétrico é bastante diferente dos conhecidos defeitos (centros Pb) na interface (111) SiO_2/Si . A baixa mobilidade dos 4H-SiC MOSFET é devida a densidade de defeitos próximo ao fundo da banda de condução. Nesta faixa de energia, a densidade de estados atinge valores extremamente altos ($10^{14}eV^{-1}cm^{-2}$). Estes estados estão energeticamente localizados a uma distância fixa da banda de valência e são especialmente nocivos ao 4H-SiC, perdendo boa parte de seus efeitos em outros politipos com menor *gap* de energia [46]. Contudo, resultados recentes mostram que o *annealing* (tratamento térmico para diminuir estados interfaciais) usando óxido nítrico (NO) diminui a densidade de estados interfaciais em uma ordem de magnitude, e aumenta significativamente a mobilidade no canal condutivo de MOSFET's 4H-SiC [47, 48, 49]. Além disso, Schörner *et al.* demonstrou que este processo pode ser integrado aos processos padrões de fabricação de dispositivos MOSFET de alta potência [50].

Problemas à parte, a evolução da tecnologia de dispositivos baseados em SiC pode ser dividida em três etapas: (i) demonstração de protótipos, (ii) escalonamento (tentativa de construir dispositivos que sejam competitivos com os de Si) e (iii) produção comercial. Muitos tipos de dispositivos baseados em SiC apresentam performances muito superiores aos dispositivos de Si. Estes incluem retificadores cuja capacidade de bloqueio de voltagens atinge 19 kV, transistores MOSFET de alta potência e transistores de junção bipolar (BJT), cuja performance pode atingir duas ordens de magnitude em relação àqueles fabricados com Si. Vários destes dispositivos já se encontram na fase de escalonamento. Contudo, apenas uma classe de dispositivo, os diodos Schottky,

encontra-se atualmente em limitada produção comercial [17].

1.6 Objetivos e Organização deste Trabalho

Embora o SiC ofereça enormes vantagens para várias aplicações nas quais outros semicondutores falhariam, há ainda um longo caminho a ser percorrido para que uma tecnologia de fabricação de dispositivos tão desenvolvida como a do Si seja estabelecida. Entre os fatores que dificultam esta tarefa está a complexidade dos fenômenos físicos relacionados ao SiC e da interação deste com outros materiais. Portanto, modelos teóricos para o estudo da física básica e para simulação de dispositivos constituem ferramentas poderosas que podem auxiliar no entendimento e aproveitamento das características do SiC em aplicações tecnológicas.

A finalidade deste trabalho é desenvolver ferramentas teóricas e computacionais para a investigação das propriedades elétricas e eletrônicas de capacitores MOS baseados em SiC. O modelo físico utilizado baseia-se na solução das equações acopladas de Poisson e Schrodinger. Embora o modelo descrito seja geral o suficiente para ser aplicado em dispositivos mais complexos e geometrias tri-dimensionais, optou-se por um modelamento unidimensional, já que os fenômenos físicos que regem o funcionamento básico de dispositivos MOSFET's completos podem ser perfeitamente capturados pelo modelamento unidimensional de capacitores MOS. Portanto, para o propósito deste trabalho, um modelamento tridimensional não traria benefícios adicionais, apenas aumentaria a complexidade e o esforço computacional durante a resolução das equações envolvidas.

Esta dissertação está organizada da seguinte forma: o Capítulo 2 discute as características elétricas básicas dos capacitores MOS quando estes são submetidos a tensões externas e descreve um modelo físico que explica o comportamento destas estruturas. O Capítulo 3 descreve os métodos numéricos empregados na solução das equações que simulam as propriedades dos capacitores MOS. No Capítulo 4, apresenta-se os resul-

tados da investigação das propriedades eletrônicas dos capacitores MOS SiC em várias condições de temperatura, dopagem, espessura do óxido e as consequências do modelamento quântico. Finalmente, o Capítulo 5 apresenta as conclusões e perspectivas deste trabalho.

2

Capacitor MOS

O capacitor MOS é a estrutura básica para o estudo dos dispositivos MOSFET. Ele é formado por uma fina camada de óxido isolante (SiO_2 , HfO_2 , etc) localizado entre um substrato semicondutor e uma placa metálica também conhecida como *gate* [51, 52, 53]. Os materiais mais comuns utilizados para fabricar o *gate* são o alumínio (Al) e o silício policristalino (poli-Si) altamente dopado. Intuitivamente, a única diferença entre um capacitor MOS e um capacitor de placas paralelas é a inclusão do substrato semicondutor entre uma das placas metálicas e a camada isolante. Assim, obtém-se uma capacitância adicional (devido ao semicondutor) que está em série com a capacitância do óxido. Esta simples diferença altera profundamente o comportamento da capacitância total do sistema quando submetido a voltagens externas. A Fig. 2.1 compara os capacitores MOS e de placas paralelas, e mostra os respectivos circuitos equivalentes.

A Fig. 2.2 mostra qualitativamente a diferença entre a capacitância de dispositivos MOS ideais e de um capacitor de placas paralelas em função da tensão aplicada (curva CV). A capacitância de um capacitor de placas paralelas é dada por

$$C_{OX} = \frac{\epsilon_{OX} A}{T_{OX}} \quad (2.1)$$

onde ϵ é a constante dielétrica do material isolante que compõe o capacitor, A e T_{OX} representam a área e a espessura do capacitor, respectivamente. Assim, a capacitância de um capacitor de placas paralelas independe da voltagem aplicada nos seus terminais. Por outro lado, a capacitância dos dispositivos MOS varia em função da voltagem

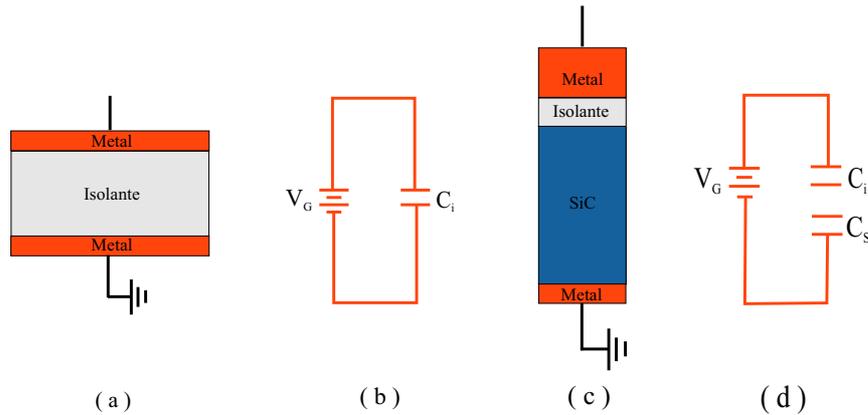


Figura 2.1: (a) Capacitor de placas paralelas. (b) Circuito do capacitor de placas paralelas. (c) Capacitor MOS. (d) Circuito do capacitor MOS.

aplicada devido a presença da camada de semicondutor dopado. É este efeito que permite o controle do funcionamento dos transistores MOSFET.

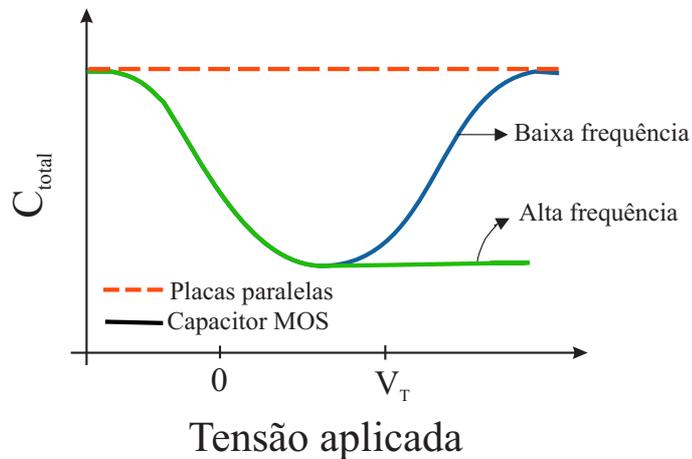


Figura 2.2: Comparação das curvas C-V de capacitores MOS e de placas paralelas.

Antes de prosseguir com a descrição mais detalhada do modelo teórico das propriedades eletrônicas de dispositivos MOS, deve-se atentar para a definição de um capacitor MOS ideal e os elementos que o tornam não ideal. Uma estrutura MOS ideal possui as seguintes propriedades: (i) o *gate* metálico é suficientemente espesso para ser considerado um região equipotencial sob o efeito de voltagens externas contínuas (dc) e/ou alternadas (ac); (ii) o óxido é um isolante perfeito que impede a passagem

de corrente sob qualquer condição de voltagem externa; (ii) não há cargas de nenhuma espécie (fixas ou móveis) no óxido ou na interface óxido/semicondutor, nem estados localizados devido a ligações químicas não saturadas [53]; (iv) o semicondutor está uniformemente dopado; (v) o semicondutor é espesso o suficiente para que, independente da voltagem externa, haja uma região (região *bulk*) com campo elétrico nulo antes do contato metálico aterrado oposto ao *gate*; (vi) um contato ôhmico seja estabelecido entre o semicondutor e o contato metálico aterrado; (vii) o capacitor MOS é uma estrutura unidimensional com todas as suas variáveis dependendo apenas da coordenada x perpendicular à interface óxido/semicondutor (veja Fig. 2.1(c)).

2.1 Regimes de Operação

O comportamento qualitativo da curva CV de dispositivos MOS é mostrado na Fig. 2.2. Este comportamento pode ser explicado por três regimes físicos distintos que serão brevemente descritos a seguir sob a ação de voltagens dc. Considerando-se um substrato do tipo p e aplicando-se uma tensão negativa no contato metálico ($V_G < 0$), os buracos no substrato (portadores majoritários) são atraídos em direção a interface óxido/semicondutor causando aumento da concentração de buracos próximo à interface, como mostra a Fig. 2.3(a). Este regime é chamado de *acumulação*. Neste caso, toda a carga negativa no contato metálico e as cargas positivas no substrato estão separadas apenas pelo isolante. Logo, a capacitância total do dispositivo MOS é aproximadamente igual a de um capacitor de placas paralelas de mesma espessura.

Aumentando-se V_G , uma menor quantidade de buracos acumula-se na interface resultando em uma diminuição discreta da capacitância total. Porém, quando $V_G > 0$ os buracos são repelidos enquanto os elétrons (portadores minoritários) são atraídos em direção a interface. Neste regime, os processos de repulsão dos buracos e atração de elétrons diminuem a quantidade total de cargas móveis (elétrons e buracos) na região próxima à interface, criando uma camada de depleção (esvaziamento de cargas móveis).

O semiconductor ainda é predominantemente tipo p, mas os buracos começam a migrar para regiões do substrato mais distantes da interface. Portanto, a carga líquida total (positiva e negativa) armazenada no capacitor MOS estarão separadas pela combinação da camada isolante e de depleção, aumentando assim a espessura efetiva do capacitor e diminuindo sua capacitância total. Este processo é mostrado na Fig. 2.3(b).

Aumentando-se ainda mais a tensão $V_G > 0$, ocorre um deslocamento ainda maior dos buracos para regiões distantes da interface enquanto uma quantidade cada vez maior de elétrons se "acumula" na região da interface. No limite em que a densidade de elétrons for maior que a densidade de buracos nesta região ocorre a "inversão" de papéis entre os portadores majoritários e minoritários. Este regime de operação é chamado de *inversão* (Fig. 2.3(c)). Novamente, as cargas armazenadas nas extremidades do capacitor estão separadas somente pela camada de isolante. Logo, a capacitância total do dispositivo torna-se aproximadamente igual a de um capacitor de placas paralelas.

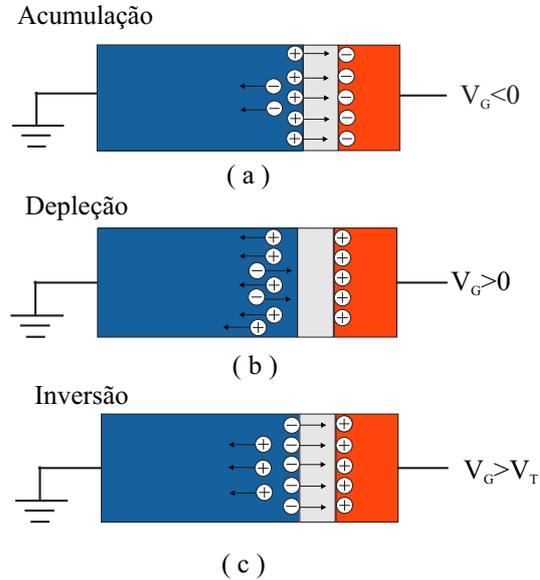


Figura 2.3: Capacitor MOS nos regimes de (a) acumulação, (b) depleção e (c) inversão sob a ação de voltagens dc.

2.1.1 Voltagens Alternadas

Quando uma voltagem ac é aplicada no *gate* os portadores majoritários respondem instantaneamente, diferente dos portadores minoritários que possuem um tempo de resposta muito maior. Como o papel dos portadores minoritários é mais importante principalmente na inversão, diferentes tempos de resposta alteram as características C-V do capacitor MOS em regimes ac. Como os portadores majoritários respondem imediatamente a voltagem ac, a capacitância total do capacitor MOS na acumulação e na depleção é igual a de um capacitor de placas paralelas (ver fig 2.2). A discussão das razões físicas para a diferença dos tempos de resposta dos portadores majoritários e minoritários está fora dos objetivos deste trabalho, mas pode ser encontrada em grande detalhe na referência [53].

Contudo, a diferença significativa da curva C-V é observada. A capacitância neste regime torna-se fortemente dependente da frequência do sinal ac, e para frequências muito altas a inversão de cargas não ocorre, como mostra a fig [53].

2.2 Alinhamento das Bandas

Cada um dos materiais do capacitor MOS (metal, óxido e semiconductor) possui uma estrutura de bandas, como mostrado na Fig. 2.4.

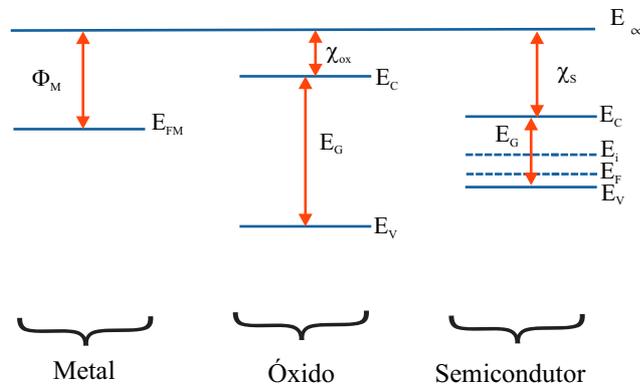


Figura 2.4: Estrutura de Bandas do Capacitor MOS Ideal

A linha horizontal superior é conhecida como o nível de energia do vácuo E_∞ , e sua diferença em relação ao nível de energia de Fermi (E_F) representa a energia mínima que deve ser dada a um elétron para livrá-lo completamente do material, ou seja, torná-lo "livre". Esta diferença é conhecida como a função trabalho dos materiais ($\Phi = E_\infty - E_F$). Ainda na mesma figura, E_C representa a energia mínima da banda de condução, E_V representa a energia máxima na banda de valência, e E_i indica o nível de Fermi do semiconductor intrínseco (não dopado). A figura não mostra $E_{C(V)}$ para o metal porque, neste tipo de material, as bandas de condução e valência se misturam perdendo seu significado, enquanto o nível de Fermi e a função trabalho tornam-se os únicos parâmetros relevantes. Além disso, o nível de Fermi no óxido torna-se um parâmetro irrelevante, já que não há cargas nesta região, sendo desconsiderada na Fig. 2.4. Em materiais isolantes e semicondutores, E_F está geralmente localizado no interior da banda proibida (*gap de energia*), e sua posição em relação às bandas de valência e condução depende da dopagem e da temperatura do semiconductor. Portanto, a função trabalho nestes materiais também depende dos mesmos parâmetros. Para auxiliar o posicionamento de E_F em relação ao nível do vácuo, define-se a afinidade eletrônica ($\chi = E_\infty - E_C$) como sendo a diferença entre os níveis de energia do vácuo e a energia mínima da banda de condução E_C . Assim, a função trabalho é convenientemente escrita como $\Phi = \chi + E_C - E_F$.

Os materiais mostrados na Fig. 2.4 são crescidos ou depositados um sobre outro formando um único componente. Portanto, as estruturas de bandas individuais tornam-se dependentes da posição tendo o nível de energia do vácuo como referência para todos os materiais. Além disso, os níveis de Fermi do metal e do semiconductor devem alinhar-se devido às condições de equilíbrio, uma vez que o dispositivo encontra-se desligado ($V_G = 0$). Um fator importante para o alinhamento das bandas é a relação entre as funções trabalho do metal e semiconductor. Podemos destacar os seguintes casos: (i) $\Phi_M = \Phi_S$ e (ii) $\Phi_M \neq \Phi_S$. No primeiro caso, os níveis de Fermi no metal e no semiconductor já se encontram naturalmente alinhados e a estrutura de banda ao longo

do dispositivo é completamente plana. Em relação ao segundo caso, uma voltagem interna permanente V_{FB} deverá surgir para alinhar os níveis de Fermi no metal e no semiconductor. Esta voltagem é dada por:

$$-qV_{FB} = \Phi_{MS} = \Phi_M - \Phi_S \quad (2.2)$$

Um diagrama esquemático da estrutura de bandas de dispositivos MOS para os dois casos citados é mostrado na Fig. 2.5. Para o caso em que há voltagem aplicada nos terminais do capacitor MOS ($V_G \neq 0$), E_{FS} não é afetada e permanece invariante em relação a posição dentro do semiconductor. Isto é uma consequência direta do fato de que não há correntes fluindo através do dispositivo. Em suma, o semiconductor permanece em equilíbrio independentemente de V_G . Porém, a separação dos níveis de Fermi no metal e no semiconductor, levando-se em conta a diferença de função trabalho entre os dois materiais, torna-se:

$$E_{FM} - E_{FS} = -q(V_G + V_{FB}) \quad (2.3)$$

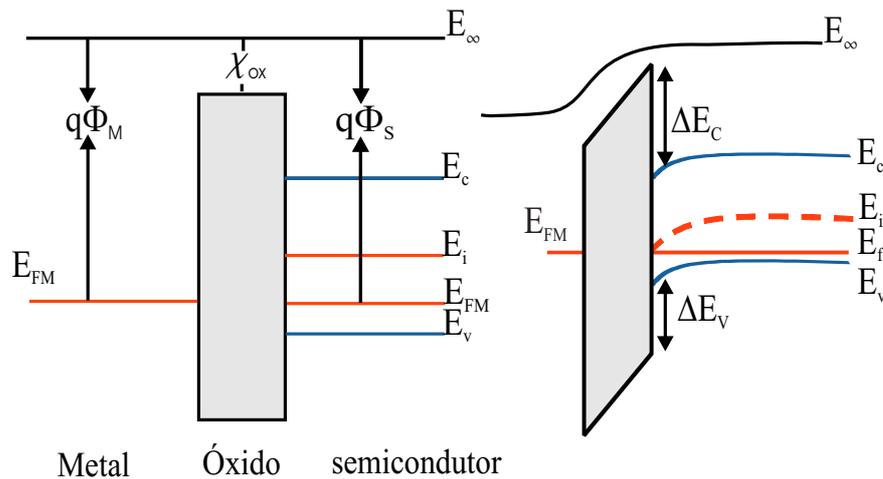


Figura 2.5: Estrutura de Banda do Capacitor MOS Ideal quando (a) $\Phi_M = \Phi_S$ e (b) $\Phi_M \neq \Phi_S$.

2.3 Obtenção da Energia de Fermi

A energia de Fermi é o nível de energia acima do qual não há estados de energia ocupados quando a temperatura é $T = 0K$. Quando impurezas (dopagem) são introduzidas no semiconductor, o nível de Fermi deve se adaptar pra preservar a neutralidade de cargas dada por

$$n + N_A^- = p + N_D^+ \quad (2.4)$$

N_A^- e N_D^+ representam, respectivamente, as concentrações de impurezas aceitadoras e doadoras ionizadas, n e p representam as concentrações de elétrons e buracos nas bandas de condução e valência. No equilíbrio térmico, a probabilidade de achar um elétron na banda de condução em um estado com energia E é dada pela distribuição de Fermi-Dirac [54, 55, 56]:

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{(E-E_F)/k_B T}} \quad (2.5)$$

onde E_F representa o nível de Fermi, T é a temperatura e k_B é a constante de Boltzmann. Para encontrar-se o valor da concentração de elétrons n , multiplica-se $f(E)$ com a densidade de estados na banda de condução $g_C(E)$

$$g_C(E) = 4\pi \left(\frac{m_{DE}}{2\pi^2 \hbar^2} \right)^{3/2} (E - E_C)^{1/2} \quad (2.6)$$

e integra-se sobre todos estados de energia da banda de condução

$$n = \int_{E_C}^{\infty} G_C(E) f(E) dE \quad (2.7)$$

Esta integral pode ser simplificada fazendo-se

$$x = \frac{E - E_C}{k_B T} \quad (2.8)$$

que resulta em

$$n = 2 \left(\frac{m_{DE} k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{x^{1/2} dx}{1 + \exp\left(x - \frac{E_F - E_C}{k_B T}\right)} \quad (2.9)$$

$$n = N_C(T) \frac{2}{\sqrt{\pi}} F_{1/2}(\eta_C) \quad (2.10)$$

$$\eta_C = \frac{E_F - E_C}{k_B T} \quad (2.11)$$

$N_C(T)$ é conhecido como densidade efetiva de estados na banda de condução. Para semicondutores com k vales de energia nesta banda, $N_C(T)$ é dada por:

$$N_C(T) = k 2 \left(\frac{m_{DE} k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \quad (2.12)$$

A integral $F_{1/2}$ é conhecida como integral de Fermi-Dirac de ordem 1/2 [54]. Esta integral não possui solução analítica, sendo normalmente solucionada através de métodos numéricos ou aproximações. Contudo, para os casos em que $E_C - E_F > 3KT$, temos que:

$$f(E) \simeq e^{-\frac{(E-E_F)}{KT}} \quad (2.13)$$

e a Eq. 2.9 torna-se simplesmente:

$$n = N_c e^{-(E_C - E_F)/k_B T} \quad (2.14)$$

Repetindo-se um procedimento análogo, a concentração de buracos na banda de valência pode ser calculada por:

$$p = \int_{-\infty}^{E_V} G_V(E) (1 - f(E)) dE \quad (2.15)$$

$$p = 2 \left(\frac{m_{DH} k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{x^{1/2} dx}{1 + \exp\left(x - \frac{E_V - E_F}{k_B T}\right)} \quad (2.16)$$

$$p = N_V(T) \frac{2}{\sqrt{\pi}} I_{1/2}(\eta_V) \quad (2.17)$$

$$\eta_V = \frac{E_V - E_F}{k_B T} \quad (2.18)$$

onde

$$N_V(T) = 2 \left(\frac{m_{DH} k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \quad (2.19)$$

representa a densidade efetiva de estados na banda de valência. Vale ressaltar que esta expressão deve incluir as bandas de buracos leve, pesado e spin-órbita. Nos casos em que para $E_F - E_V > 3k_B T$, temos:

$$1 - f(E) \simeq e^{(E - E_F)/k_B T} \quad (2.20)$$

$$p = N_V e^{(E_V - E_F)/k_B T} \quad (2.21)$$

Até aqui foram demonstradas as expressões para as concentrações de elétrons (n) e buracos (p) nas suas respectivas bandas, e nada foi dito sobre as quantidades N_D^+ e N_A^- . Em temperaturas altas ($T = 300K$), é comum considerar que todos os dopantes estejam totalmente ionizados. Nestas condições, estas duas quantidades tornam-se $N_D^+ = N_D$ e $N_A^- = N_A$, onde N_D e N_A representam as concentrações totais de átomos dopantes presentes no semiconductor. Contudo, estes átomos são ionizados basicamente pela excitação térmica. Portanto, a concentração de átomos ionizados depende fundamentalmente de dois parâmetros: (i) a temperatura e (ii) a energia de ionização. Estas concentrações são [54]:

$$N_D^+ = \frac{N_D}{1 + g_D e^{(E_F - E_C + E_D)/k_B T}} \quad (2.22)$$

$$N_A^- = \frac{N_A}{1 + g_A e^{(E_V + E_A - E_F)/k_B T}} \quad (2.23)$$

onde E_D e E_A representam, respectivamente, as energias de ionização dos átomos doadores e aceitadores, e g_D e g_A são os fatores de multiplicidade dos respectivos átomos.

Até aqui foram mostradas individualmente as expressões para as concentrações de elétrons (n), buracos (p) e impurezas ionizadas (N_D^+ e N_A^-). Uma análise cuidadosa das Eqs. 2.14, 2.21, 2.22 e 2.23 revela que precisaríamos conhecer E_F para encontrarmos os valores destas expressões. Contudo, o valor de E_F ainda é desconhecido, e precisamos encontrá-lo através da Eq. 2.4. Há várias simplificações para resolver esta equação que resultam em soluções analíticas [?], mas tentaremos descrever uma estratégia geral de solução. Para isso, substituímos as quantidades η_C e η_V nas Eqs. 2.22 e 2.22, e reescrevemos a Eq. 2.4 da seguinte forma

$$\frac{N_D}{1 + g_D \exp(\eta_C + E_D/k_B T)} - \frac{N_A}{1 + g_A \exp(\eta_V + E_A/k_B T)} = 0 \quad (2.24)$$

Daí, fazemos:

$$\eta_V = \frac{E_V - E_F}{k_B T} = \frac{(E_C - E_G) - E_F}{k_B T} = -\eta_C - \frac{E_G}{k_B T} \quad (2.25)$$

substituindo esta expressão na Eq. 2.26, obtemos:

$$\frac{N_D}{1 + g_D \exp(\eta_C + E_D/k_B T)} - \frac{N_A}{1 + g_A \exp(-\eta_C + (E_A - E_G)/k_B T)} = 0 \quad (2.26)$$

Obtemos então uma expressão cuja solução é a quantidade η_C que indica a posição do nível de Fermi em relação à banda de condução, e é válida para qualquer posição

deste nível. Esta equação pode ser solucionada computacionalmente usando-se vários algoritmos de cálculo de raízes de funções, sendo um dos mais comuns o método de Newton-Raphson [57].

2.4 Análise Eletrostática: Modelo Semi-Clássico

Nas secções anteriores foram discutidos alguns elementos básicos para o estudo das propriedades elétricas de capacitores MOS. Basicamente, um capacitor armazena cargas quando submetido a voltagens externas em seus terminais, e estas cargas são originadas basicamente de excitações elétricas no interior do semicondutor dopado. Como foi discutido nas Secção 2.2, a estrutura de bandas em função da posição no interior do capacitor MOS encurva-se sob a ação de voltagens (internas ou externas) devido a redistribuição das cargas (móveis e estáticas) no interior do dispositivo. Além disso, o nível de Fermi permanece constante em função da posição, uma vez que este é uma função da dopagem e temperatura. O potencial eletrostático $\phi(x)$ no interior do dispositivo é obtido através da equação de Poisson [52]:

$$\nabla \cdot [\epsilon(x)\nabla\phi(x)] = -q[p(x) - n(x) + N_D^+(x) - N_A^+(x)] \quad (2.27)$$

onde q é o módulo da carga elementar do elétron, $p(x)$ e $n(x)$ representam as cargas móveis dos elétrons e buracos, enquanto $N_D^+(x)$ e $N_A^+(x)$ representam as cargas fixas de átomos doadores e receptores ionizados, respectivamente. Enquanto a Eq. 2.27 apenas informa o potencial eletrostático $\phi(x)$, as modificações nas bandas de condução e valência em função de $\phi(x)$ são obtidas através de:

$$E_C(x) = \Delta E_C(x) - q\phi(x) \quad (2.28)$$

$$E_V(x) = E_C(x) - E_G(x) = \Delta E_V(x) + q\phi(x) \quad (2.29)$$

Além disso, as concentrações de carga dadas nas Eqs. 2.14, 2.21, 2.22 e 2.23 mostram que estas concentrações dependem da energia das bandas de valência e condução em relação ao nível de Fermi. Portanto, se devido a ação de voltagens externas as bandas de valência e condução se curvam em relação ao nível de Fermi, sabemos afirmar que estas são funções da posição $E_C(x)$ e $E_V(x)$. Logo, as Eqs. 2.14, 2.21, 2.22 e 2.23 tornam-se também dependentes da posição e podem ser substituídas diretamente na Eq. 2.27:

$$n(x) = N_c e^{-(E_C(x) - E_F)/k_B T} \quad (2.30)$$

$$p(x) = N_c e^{(E_V(x) - E_F)/k_B T} \quad (2.31)$$

$$N_D^+(x) = \frac{N_D}{1 + g_D e^{(E_F - E_C(x) + E_D)/k_B T}} \quad (2.32)$$

$$N_A^-(x) = \frac{N_A}{1 + g_A e^{(E_V(x) + E_A - E_F)/k_B T}} \quad (2.33)$$

As condições de contorno aplicadas na Eq. 2.27 dependem do grau de realismo a ser simulado. Lembrando-se que em um capacitor MOS ideal o *gate* é feito de um material metálico, no qual o campo elétrico em seu interior é nulo, e que deseja-se aplicar voltagens externas (V_G) em suas extremidades, sendo que a extremidade oposta ao *gate* está aterrada, deve-se impor as condições de Dirichlet nas extremidades do dispositivo:

$$\begin{aligned} \phi(0) &= V_G + V_{FB} \\ \phi(L) &= 0 \end{aligned} \quad (2.34)$$

onde $x = 0$ é posição do contato do metálico do *gate*, $x = L$ é a extremidade aterrada oposta ao *gate*, L é o tamanho total do dispositivo. V_G é a voltagem externa aplicada no capacitor MOS e V_{FB} é a voltagem interna devido a diferença de função trabalho Φ_{MS} entre metal e semicondutor. Deve-se ressaltar que Φ_{MS} é uma função de dois materiais e normalmente só é conhecido para um conjunto muito restrito de combinações. Como

o papel de Φ_{MS} nas curvas CV de dispositivos MOS é somente um deslocamento horizontal CV, deve-se assumir $V_{FB} = 0$. Este caso é normalmente conhecido com **condição de banda plana**. Além disso, um capacitor MOS ideal não possui nenhum tipo de carga (móvel ou fixa) no interior do óxido. A partir desta restrição, obtem-se as seguintes condições de contorno:

$$\begin{aligned}
 n(0 \leq x \leq T_{OX}) &= 0 \\
 p(0 \leq x \leq T_{OX}) &= 0 \\
 N_D^+(0 \leq x \leq T_{OX}) &= 0 \\
 N_A^-(0 \leq x \leq T_{OX}) &= 0
 \end{aligned} \tag{2.35}$$

2.5 Efeitos Quânticos

Considerando-se um capacitor MOS do tipo p, temos que à medida que os portadores minoritários (elétrons) concentram-se perto da interface óxido/semicondutor no regime de inversão, a banda de condução curva-se em direção ao nível de Fermi. Os elétrons encontram-se aprisionados a distâncias muito pequenas da interface por um potencial energético aproximadamente triangular, formando um gás de elétrons bi-dimensional, cujas propriedades eletrônicas apresentam efeitos de quantização [60]. Em contraste com a descrição semi-clássica da concentração de elétrons dada pela Eq. 2.14, cuja forma exponencial indica que os elétrons estão localizados exatamente na interface com a camada dielétrica, os elétrons aprisionados num gás bi-dimensional possuem uma função de onda bem definida cuja valor esperado (posição média do elétron) está ligeiramente afastada da interface, como mostrado na Fig. 2.6. Esta diferença é suficiente para que o cálculo correto da concentração de elétrons e dos valores de tensão limiar V_T sejam afetados durante o regime de inversão. Assim, independentemente de quem sejam os portadores minoritários, uma descrição quântica destes no regime

de inversão para o cálculo das propriedades eletrônicas de capacitores MOS torna-se necessário, principalmente para baixas temperaturas, altos campos elétricos e altas densidades dos mesmos.

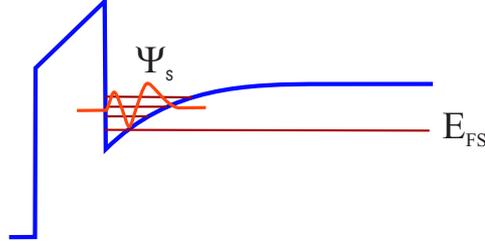


Figura 2.6: Efeitos de quantização em capacitores MOS durante o regime de inversão.

Devido ao confinamento quântico, os níveis de energia $E_{n,i}$ na região de inversão são obtidos pela equação de Schrödinger escrita dentro da aproximação da massa efetiva:

$$\left[-\frac{\hbar}{2} \left(\nabla \frac{1}{m_{i\parallel}(x)} \nabla \right) + V_i(x) \right] \Psi_{n,i}(x) = E_{n,i} \Psi_{n,i}(x) \quad (2.36)$$

onde n indica o índice do estado quântico, $i = (e, h)$ representa o tipo de portador, $m_{i\parallel}$ é a massa efetiva paralela à direção de confinamento. $V_i(x)$ é o potencial de confinamento dado por $E_C(x)(E_V(x))$ para elétrons (buracos) e $\Psi_{n,i}(x)$ é a função de onda referente ao n -ésimo estado confinado. Dentro do modelamento quântico, a densidade de portadores minoritários, para o caso dos elétrons, é dada por:

$$n(x) = \sum_n N_n V |\Psi_n(x)|^2 \quad (2.37)$$

onde N_n é o número de ocupação por unidade de volume do n -ésimo estado quântico. A forma completa da função de onda de um estado quântico confinado unidimensionalmente na direção x é

$$|\Psi_n(x)|^2 \implies \left| \frac{e^{i\mathbf{k}_t \cdot \mathbf{r}_t}}{\sqrt{A}} \Psi_n(x) \right|^2 = \frac{1}{A} |\Psi_n(x)|^2$$

$$\int |\Psi_n(x)|^2 dx = 1$$

Portanto, $|\Psi_n(x)|^2$ possui unidades de $[V]^{-1}$ e a Eq. 2.37 está dimensionalmente correta. Lembrando-se que a energia total dos elétrons em um gás bi-dimensional em bandas parabólicas e isotrópicas é dada por [58]:

$$E_n(k_t) = E_n + \frac{\hbar^2 k_t^2}{2m_{e\perp}} \quad (2.38)$$

onde k_t é momento do elétron na direção transversal à direção de confinamento e $m_{e\perp}$ é a massa efetiva na mesma direção, as ocupações N_n (em número absoluto) são calculadas por:

$$N_n = \frac{2}{V} \sum_{k_t} \frac{1}{1 + \exp(E_n(k_t) - E_F)/k_B T} \quad (2.39)$$

Levando-se em conta que

$$\frac{2}{V} \sum_{k_t} \implies \frac{2}{AL_x} \frac{A}{4\pi^2} \int d^2 \mathbf{k}_t = \int dE_t \rho_e^{2D} \quad (2.40)$$

$$\rho_e^{2D} = \frac{m_{e\perp}}{\pi \hbar^2 L_x} \quad (2.41)$$

$$E_t = \frac{\hbar^2 k_t^2}{2m_{e\perp}}$$

obtemos

$$\begin{aligned} N_n &= \rho_e^{2D} \int \frac{dE_t}{1 + \exp(E_n + E_t - E_F)/k_B T} \\ &= \frac{m_{e\perp} k_B T}{\pi \hbar^2 L_x} \ln(1 + \exp(E_F - E_n)/k_B T) \end{aligned} \quad (2.42)$$

Finalmente, lembrando-se que $V = A.L_x$, obtemos que a densidade do gás de elétrons bi-dimensional formado na região próxima da interface de um capacitor MOS é:

$$n(x) = \sum_n \left(\frac{m_{e\perp} k_B T}{\pi \hbar^2} \right) \ln \left[1 + \exp \left(\frac{E_F - E_n}{k_B T} \right) \right] |\Psi_n(x)|^2 \quad (2.43)$$

Vale ressaltar que esta expressão é aplicável a qualquer sistema quântico de cargas confinadas unidimensionalmente. Assim, deve-se utilizar expressões do tipo da Eq. 2.43 em vez de expressões do tipo da Eq. 2.14 na solução da equação de Poisson Eq. 2.27. Os parâmetros físicos usados nas simulações estão listadas na Tabela 2.1.

Tabela 2.1: Parâmetros físicos dos politipos de SiC, Si e SiO₂.

	6H-SiC	4H-SiC	Si	3C-SiC	SiO ₂
m_1	0.580	0.770	0.916	0.670	0.400
m_2	0.280	0.240	0.190	0.250	0.400
m_3	0.310	1.420	0.190	0.250	0.400
m_{lh}	0.840	1.180	0.160	1.060	2.000
m_{hh}	2.580	2.900	0.490	3.750	2.000
ΔE_C (eV)	2.750	2.980	3.200	3.100	-
ΔE_v (eV)	3.00	3.000	4.600	3.700	-
E_G (eV)	3.25	3.02	1.12	2.20	9.00
ε	9.70	9.66	11.7	9.72	3.90

2.5.1 Autoconsistência

Uma análise detalhada das Eqs. 2.27 e 2.30 mostra que a equação individual de Poisson possui um comportamento não-linear, uma vez que as concentrações de cargas dependem da própria solução do potencial eletrostático. Portanto, a solução da Eq. 2.27 requer um procedimento iterativo no qual a convergência deve ser monitorada a cada passo. Além disso, a necessidade de inclusão dos efeitos quânticos requer a solução da equação de Schrödinger (Eq. 2.36). Desta forma, o estudo das propriedades eletrônicas de capacitores MOS (e dispositivos eletrônicos em geral que apresentem algum grau de quantização) requer a solução das equações de Poisson e Schrödinger acopladas através

do potencial eletrostático $\phi(x)$. Como não há solução analítica para este problema, um procedimento iterativo ainda é a melhor estratégia, e a solução da equação de Schrödinger deve ser incluída como uma etapa intermediária. Os métodos de solução computacional deste problema serão descritos com maior profundidade no Capítulo 3.

2.5.2 Corrente de Tunelamento

À medida que os dispositivos MOSFET diminuem de tamanho, a espessura do óxido também deve diminuir. Em consequência, os efeitos quânticos na região de inversão tornam-se também mais importantes [59]. Além disso, sabe-se que devido a natureza ondulatória das partículas quantizadas, há uma pequena penetração das funções de onda em barreiras finitas, cuja profundidade é inversamente proporcional à altura da barreira. Portanto, se os óxidos nos dispositivos MOS forem estreitos o suficiente haverá tunelamento dos elétrons, gerando uma corrente de tunelamento através do óxido. Esta corrente causa inconveniência, como o aumento do consumo de energia e de aquecimento do dispositivo.

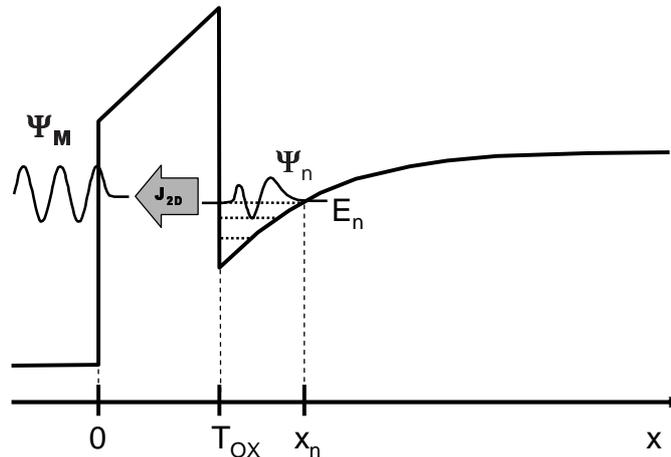


Figura 2.7: Representação esquemática do tunelamento de elétrons confinados na camada de inversão de capacitores MOS através do óxido.

Vários cálculos desta corrente de tunelamento foram propostos e testados [61, 62, 63, 64, 65, 66]. Entretanto, o modelo adotado neste trabalho assume que a densidade da

corrente de tunelamento de elétrons confinados na camada de inversão de dispositivos MOS pode ser escrita como [63] (veja Fig. 2.7):

$$J_{2D}^{(e)} = \sum_n \frac{Q_n}{\tau_n} \quad (2.44)$$

onde Q_n é a concentração de cargas na n -ésimo estado confinado da região de inversão, dada por

$$Q_n = -qN_n \quad (2.45)$$

sendo N_n dado pela Eq. 2.42, e o sinal negativo serve apenas para indicar o sentido correto da corrente. Na Eq. 2.44, τ_n representa o tempo de vida do elétron no mesmo estado. Baseando-se no método WKB [61], τ_n pode-se escrito como:

$$\tau_n = T_{WKB}(E_n)f_n \quad (2.46)$$

onde $T_{WKB}(E_n)$ é a probabilidade de tunelamento de um elétron confinado no estado E_n da região de inversão, e f_n é a taxa com que um elétron neste estado se choca contra a interface semiconductor/óxido. Estas quantidades são calculadas através das seguintes expressões:

$$T_{WKB}(E_n) = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_0^{T_{ox}} \sqrt{2m_{e||}|E_n - E_C(x)|} dx\right) \quad (2.47)$$

$$f_n = \left(2 \int_0^{x_n} v_n^{-1}(x) dx\right)^{-1}, 0 \quad (2.48)$$

onde x_n representa o análogo quântico do ponto de retorno da mecânica clássica de um elétron confinado no estado quântico E_n obtido através da solução de

$$E_n - E_C(x_n) = 0 \quad (2.49)$$

e $v_n(x)$ é a velocidade do elétron neste estado em função da posição, dada por:

$$v_n(x) = \sqrt{2(E_n - E_C(x))/m_{e\parallel}} \quad (2.50)$$

3

Métodos Numéricos

Os modelos matemáticos que descrevem a maioria dos processos físicos são baseados em equações diferenciais parciais (EDP). Frequentemente, uma solução analítica direta só é possível para casos simples ou sob condições muito restritas. Para a solução de modelos realísticos, métodos numéricos são normalmente a única alternativa disponível. O principal objetivo de um método numérico é encontrar a solução de uma EDP em um conjunto discreto de pontos no domínio da solução. Este processo é chamado de discretização. Para isto, o domínio da solução é dividido em sub-domínios tendo os pontos de discretização como seus vértices. Este conjunto de pontos de discretização é chamado, entre outras denominações, de malha computacional. A EDP é então aproximada, ou discretizada, para obter-se um conjunto de equações algébricas, onde as quantidades desconhecidas são os valores da solução nos pontos de discretização. Este sistema de equações algébricas pode ser solucionado utilizando-se computadores através de técnicas diretas ou iterativas. É importante ressaltar que o processo de discretização substitui a equação original por uma nova equação, cuja solução mesmo sendo exata, é apenas uma aproximação da EDP original, devido aos erros de discretização.

São vários os métodos usados para a discretização das EDP originais. Os mais importantes podem ser classificados como: (i) diferenças finitas, (ii) elementos finitos e (iii) métodos espectrais. Esta classificação está diretamente relacionada com as características da malha computacional. A escolha desta malha é baseada na análise do custo-benefício da relação entre versatilidade e o esforço de codificação. Malhas com-

putacionais retangulares (método das diferenças finitas) são recomendadas para dispositivos com geometrias retangulares, enquanto malhas computacionais não-estruturadas (elementos finitos) são mais apropriados para geometrias arbitrárias [67]. Estes últimos possuem difícil implementação. Felizmente, as malhas retangulares são suficientes para os propósitos deste trabalho.

No Capítulo anterior, foi discutida a física e o modelamento teórico de capacitores MOS, cujas principais equações são as equações de Poisson e Schrödinger. Na seções seguintes, iremos discutir a discretização destas equações e o método de solução utilizado.

3.1 Diferenças Finitas

A discretização das PDE's requer uma forma de escrever os operadores diferenciais sobre a malha computacional. Partindo-se da expansão de uma função qualquer em séries de Taylor, temos:

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + h \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{x_0} + \frac{h^2}{2} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right)_{x_0} + \dots; \quad (3.1)$$

$$f(x_0 - h) = f(x_0) - h \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{x_0} + \frac{h^2}{2} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right)_{x_0} - \dots \quad (3.2)$$

Os termos de ordem maior que h^2 podem ser desprezados se o valor de h for suficientemente pequeno. Subtraindo-se as Eqs. (3.1) e (3.2), encontramos uma aproximação para a derivada de primeira ordem de um função:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{x_0} \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} \quad (3.3)$$

Ao somarmos as Eqs. (3.1) e (3.2), obtemos uma aproximação para a derivada de segunda ordem:

$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_{x_0} \approx \frac{f(x_0 + h) + f(x_0 - h) - 2f(x_0)}{h^2} \quad (3.4)$$

As Eqs. (3.3) e (3.4) são o ponto de partida para a discretização de EDP's em uma dimensão, um procedimento análogo pode ser usado para a discretização de EDP's em espaços multi-dimensionais.

3.1.1 Discretização da Equação de Schrödinger

A discretização da equação na forma independente do tempo da equação de Schrödinger:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{m(x)} \frac{\partial}{\partial x}\right) + V(x)\right] \Psi(x) = E_n \Psi(x) \quad (3.5)$$

em uma malha computacional contendo conjunto de pontos discretos representados pelo conjunto $\{x_i\}$ requer que esta equação também seja válida sobre todos os pontos x_i . Logo, a seguinte equação também deve ser válida:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{m(x_i)} \frac{\partial}{\partial x}\right) + V(x_i)\right] \Psi(x_i) = E_n \Psi(x_i) \quad (3.6)$$

onde $i = 1, 2, \dots, n_x$, e n_x é o número de pontos na malha computacional. Usando-se a Eq. 3.3 no operador diferencial da Eq. (3.6), obtemos:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{m(x)} \frac{\partial \Psi}{\partial x}\right)_i = \frac{\left(\frac{1}{m} \frac{\partial \Psi}{\partial x}\right)_{i+1/2} - \left(\frac{1}{m} \frac{\partial \Psi}{\partial x}\right)_{i-1/2}}{x_{i+1/2} - x_{i-1/2}} \quad (3.7)$$

$$= \frac{\frac{1}{m_{i+1/2}} \frac{\Psi_{i+1} - \Psi_i}{x_{i+1} - x_i} - \frac{1}{m_{i-1/2}} \frac{\Psi_i - \Psi_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}}{x_{i+1/2} - x_{i-1/2}} \quad (3.8)$$

Assumindo-se

$$x_{i+1/2} = \frac{x_{i+1} + x_i}{2} \quad (3.9)$$

$$\Delta_i = x_{i+1} - x_i \quad (3.10)$$

$$m_{i+1/2} = \frac{m_{i+1} + m_i}{2} \quad (3.11)$$

obtemos:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{m(x)} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right)_i = A_i^+ \Psi_{i+1} - (A_i^+ + A_i^-) \Psi(i) + A_i^- \Psi(i-1) \quad (3.12)$$

onde, incluindo-se a constante multiplicativa $\left(\frac{-\hbar^2}{2}\right)$ do operador diferencial temos:

$$A_i^+ = \left(\frac{-\hbar^2}{2}\right) \frac{4}{(m_{i+1} + m_i)} \frac{1}{\Delta_i(\Delta_i + \Delta_{i-1})} \quad (3.13)$$

$$A_i^- = \left(\frac{-\hbar^2}{2}\right) \frac{4}{(m_{i-1} + m_i)} \frac{1}{\Delta_{i-1}(\Delta_i + \Delta_{i-1})} \quad (3.14)$$

Finalmente, a equação de Schrödinger totalmente discretizada em um ponto x_i qualquer torna-se:

$$A_i^+ \Psi_{i+1} - (A_i^\pm - V_i) \Psi_i + A_i^- \Psi_{i-1} = E_n \Psi(i) \quad (3.15)$$

$$A_i^\pm = A_i^+ + A_i^- \quad (3.16)$$

A equação acima deve ser solucionada simultaneamente para todos os pontos x_i . Vale ressaltar que nos pontos $i = 0$ e $i = n_x$ levamos em conta as seguintes condições de contorno $\Psi_0 = \Psi_{n_x} = 0$, respectivamente. Desta forma, a equação de onda será nula fora dos domínios de simulação da equação de Schrödinger. Daí a Eq. 3.15 tem a seguinte forma matricial:

$$\begin{bmatrix} -(A_1^\pm - V_1) & A_1^+ & & & \\ A_2^- & -(A_2^\pm - V_2) & A_2^+ & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & A_{n_x}^- & -(A_{n_x}^\pm - V_{n_x}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \vdots \\ \Psi_{n_x} \end{bmatrix} = E_n \begin{bmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \vdots \\ \Psi_{n_x} \end{bmatrix}$$

Assim substituímos a equação original de Schrödinger por um conjunto de equações algébricas, cuja forma matricial é tri-diagonal e todos os elementos fora das três diagonais principais são nulos.

3.1.2 Discretização da Equação de Poisson

A equação de Poisson unidimensional é dada por:

$$\frac{d}{dz} \left(\varepsilon(z) \frac{d}{dz} \phi(z) \right) = -\rho(z) \quad (3.17)$$

Observa-se que o operador diferencial é semelhante ao operador na equação de Schrödinger. Logo, podemos utilizar um procedimento semelhante de discretização. Desta forma, a equação de Poisson discretizada em um ponto x_i qualquer da malha computacional torna-se:

$$B_i^+ \phi_{i+1} - B_i^\pm \phi_i + B_i^- \phi_{i-1} = -\rho_i \quad (3.18)$$

onde

$$B_i^\pm = B_i^+ + B_i^- \quad (3.19)$$

$$B_i^+ = \frac{\epsilon_{i+1} + \epsilon_i}{\Delta_i(\Delta_i + \Delta_{i-1})} \quad (3.20)$$

$$B_i^- = \frac{\epsilon_{i-1} + \epsilon_i}{\Delta_{i-1}(\Delta_i + \Delta_{i-1})} \quad (3.21)$$

Novamente, as equações acima devem ser solucionadas simultaneamente para todos os pontos x_i . No caso do capacitor MOS, usamos condições de contorno de Dirichlet nos terminais do dispositivo dadas por:

$$\phi_0 = V_G + V_{FB} \quad (3.22)$$

$$\phi_{n_x} = 0 \quad (3.23)$$

$$(3.24)$$

onde V_G é a voltagem externa aplicada nos terminais do capacitor MOS e V_{FB} é a voltagem interna existente devido a possíveis diferenças de função trabalho entre o metal e o semiconductor. Assim, a forma matricial da Eq. 3.18 torna-se:

$$\begin{bmatrix} -B_1^\pm & B_1^+ & & & \\ B_2^- & -B_2^\pm & B_2^+ & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & B_{n_x}^- & -B_{n_x}^\pm \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_{n_x} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \rho_1 - B_1^- \phi_0 \\ \rho_2 \\ \vdots \\ \rho_{n_x} - B_{n_x}^+ \phi_{n_x} \end{bmatrix}$$

Na forma compacta, esta expressão assume a forma:

$$AX = B$$

3.2 Não-linearidades na Equação de Poisson

A equação de Poisson a ser solucionada em uma estrutura MOS (Eq. 2.27) exige que a densidade de carga seja descrita em função do próprio potencial eletrostático $\phi(x)$. Devido a esta característica, esta equação é dita não-linear e uma solução da equação de Poisson como descrito na seção anterior, não conduz à solução verdadeira. Em geral não é possível obter a solução de equações não-lineares em apenas uma etapa, sendo necessário utilizar métodos iterativos não-lineares. Uma das estratégias mais comuns é utilizar a técnica de linearização das equações [69, 70], que será descrita a seguir. Este método encontra a solução de qualquer equação escrita da forma

$$f(x) = b(x) \quad (3.25)$$

No caso da equação de Poisson, obtemos a seguinte forma matricial:

$$S(\phi) = \mathbf{A} \cdot \phi + \rho(\phi) = 0 \quad (3.26)$$

Expandindo-se $S(\phi)$ em torno de uma função tentativa qualquer ϕ_0 e desconsiderando-se contribuições de altas ordens, temos:

$$S(\phi) \simeq S(\phi_0) + \left(\frac{\partial S}{\partial \phi} \right)_{\phi_0} (\phi - \phi_0) \quad (3.27)$$

onde

$$\frac{\partial S}{\partial \phi} = A + \frac{\partial \rho}{\partial \phi} \quad (3.28)$$

Supondo que a solução real seja $\bar{\phi}$, a expansão torna-se:

$$S(\phi_0) + \left(\frac{\partial S}{\partial \phi} \right)_{\phi_0} (\bar{\phi} - \phi_0) = 0 \quad (3.29)$$

Após algumas manipulações matemáticas, obtemos:

$$\left[A + \left(\frac{\partial \rho}{\partial \phi} \right)_{\phi_0} \right] \bar{\phi} = -\rho(\phi_0) + \left(\frac{\partial \rho}{\partial \phi} \right)_{\phi_0} \phi_0 \quad (3.30)$$

Na prática, esta equação pode ser solucionada iterativamente de acordo com o esquema

$$\left[A + \left(\frac{\partial \rho}{\partial \phi} \right)_{\phi^{(k-1)}} \right] \phi^{(k)} = -\rho^{(k)} + \left(\frac{\partial \rho}{\partial \phi} \right)_{\phi^{(k-1)}} \phi^{(k-1)} \quad (3.31)$$

que deve ser repetido até que a convergência do potencial eletrostático ϕ e/ou densidade de carga ρ seja alcançado. Assim como a Eq. 3.1.2, a equação acima pode ser escrita na forma $\mathbf{A}'\mathbf{X}=\mathbf{B}$ onde

$$\mathbf{A}' = A + \left(\frac{\partial \rho}{\partial \phi} \right)_{\phi^{(k-1)}} \quad (3.32)$$

$$\mathbf{X} = \phi^{(k)} \quad (3.33)$$

$$\mathbf{B} = -\rho^{(k)} + \left(\frac{\partial \rho}{\partial \phi} \right)_{\phi^{(k-1)}} \phi^{(k-1)} \quad (3.34)$$

Em problemas não lineares como a solução do capacitor MOS, a estratégia correta é discretizar a equação de Poisson linearizada (Eq. 3.31) em vez da equação original (Eq. 3.18). Contudo, a forma discretizada (Eq. 3.31) sofre modificações em relação a Eq. 3.18, tornando-se:

$$B_i^+ \phi_{i+1}^{(k)} - \left[B_i^\pm - \left(\frac{\partial \rho^{(k-1)}}{\partial \phi^{(k-1)}} \right)_i \right] \phi_i^{(k)} + B_i^- \phi_{i-1}^{(k)} = -\rho_i^{(k)} + \left(\frac{\partial \rho^{(k-1)}}{\partial \phi^{(k-1)}} \right)_i \phi_i^{(k-1)} \quad (3.35)$$

A velocidade de convergência para a solução real do problema está diretamente relacionada ao jacobiano $\partial \rho / \partial \phi$. Quando as densidades de carga são expressas na forma semi-clássica, o jacobiano possui forma analítica, do contrário outros esquemas de cálculo do jacobiano devem ser considerados.

3.3 Soluções Individuais e Auto-consistência

Como a equação de Poisson um problema de condições de contorno e a equação de Schrödinger um problema de autovalores, os métodos matemáticos de solução destas equações são bastante diferentes. No caso da equação de Schrödinger, há vários métodos computacionais usados para extrair os autovalores e autofunções a partir de matrizes diagonais esparsas [72, 73]. Contudo, para um número arbitrário de estados, o método de Arnoldi implicitamente re-iniciado é o melhor método disponível [73], sendo este método usado nas soluções da equação de Schrödinger ao longo deste trabalho. Em relação a equação de Poisson, sua versão linearizada (Eq. 3.35) deve ser solucionada a cada iteração usando-se vários métodos computacionais disponíveis [74]. Especificamente, o método ILU (Incomplete Lower Upper Factorization) foi utilizado neste trabalho.

Além das soluções individuais das equações de Schrödinger e Poisson, a Secção 2.5.1 mostrou que estas equações estão acopladas não-linearmente através do potencial eletrostático $\phi(z)$, nos casos em que a densidade de carga dos portadores minoritários é descrita quanticamente. Devido à não-linearidade, não há maneira óbvia de resolver estas equações simultaneamente, e devem ser solucionadas de maneira auto-consistente. A equação de Poisson sozinha já requer a utilização da auto-consistência. Assim, a solução da equação de Schrödinger deve ser incluída dentro do processo de iteração.

A estratégia geral é escolher uma densidade de carga inicial, que será repassada a um *loop* externo no qual a equação de Poisson é resolvida inicialmente (ver Fig. 3.3). Esta solução é utilizada na equação de Schrödinger, cuja solução é usada para corrigir a densidade de cargas nas regiões em que ela deve ser modelada quanticamente. Ao final de cada iteração, a convergência do potencial eletrostático e da densidade de carga deve ser testada. Se a convergência não for obtida, a densidade de carga atualizada será usada de novo como parâmetro de entrada para a próxima interação que começa com a solução da equação de Poisson. Este procedimento deve ser repetido até que a convergência seja alcançada. Devido à forte não linearidade do acoplamento entre as duas equações, a iteração direta não garante a convergência, e técnicas mais sofisticadas devem ser empregadas [75, 76, 77].

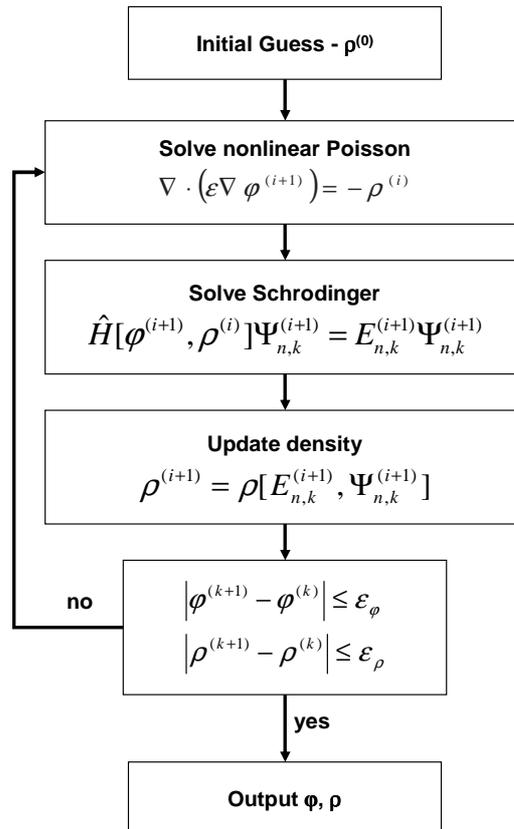


Figura 3.1: Fluxograma da estratégia de solução auto-consistente das equações acopladas de Schrodinger e Poisson.

4

Propriedades Elétricas e Eletrônicas de Capacitores SiC-MOS

Este capítulo dedica-se a discutir os resultados numéricos das simulações de capacitores MOS fabricados com os principais politipos do SiC: 3C, 4H e 6H. A secção 4.1 discute o efeito da espessura do óxido sobre as propriedades elétricas e eletrônicas do capacitor MOS, enquanto a secção 4.2 descreve os efeitos de dopagem. Nestas duas secções, considera-se a ionização total das impurezas, ou seja, 100% dos átomos dopantes estão ionizados. Como esta condição depende principalmente das energias de ionização das impurezas e da temperatura, elas podem afetar as propriedades do dispositivo. Por esta razão, as Secções 4.3 e 4.4 discutem os efeitos da ionização incompleta das impurezas e de temperatura. As secções iniciais descrevem os portadores de modo semi-clássico, enquanto a secção 4.5 mostra as consequências do modelamento quântico dos portadores minoritários nas propriedades eletrônicas do capacitor MOS.

4.1 Espessura dos Óxidos

A Figura 4.1 mostra o efeito da variação da espessura do óxido na banda de condução e na distribuição do campo elétrico no interior dos capacitores MOS-3C.

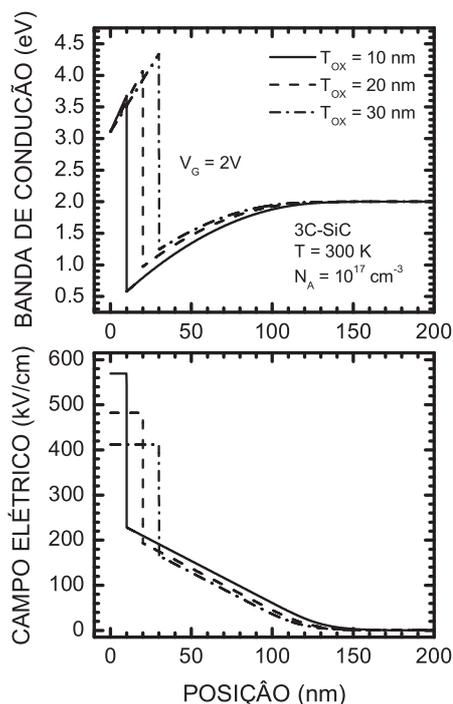


Figura 4.1: Efeito da variação da espessura do óxido na banda de condução e na distribuição de campo elétrico no interior dos capacitores MOS-3C.

Observa-se claramente que a espessura do óxido afeta fortemente o campo elétrico em seu interior (ver painel inferior), enquanto o campo elétrico no interior do semicondutor (mas próximo a interface) é afetado em menor intensidade. Além disso, a figura mostra o comportamento distinto entre os campos elétricos nestas duas regiões. No óxido, o campo elétrico é constante devido a ausência de cargas. No semicondutor, o campo elétrico diminui de maneira linear à medida que se afasta da interface. Estes dois comportamentos estão de acordo com os modelos analíticos de descrição do capacitor MOS [51, 52, 53]. Esta re-distribuição de campos (e potencial eletrostático) devido a diferentes espessuras de óxidos afeta o encurvamento da banda de condução, e conseqüentemente da banda de valência, causando modificações consideráveis nas cargas armazenadas no capacitor MOS. As eqs. (2.30) mostram que a densidade de carga (positiva e negativa) está exponencialmente relacionada com a diferença de energia entre a banda de condução (e valência) e o nível de Fermi. Este último é considerado ao

longo deste trabalho como a referência de energia ($E=0$). A Fig. 4.1 (painel superior) mostra que quanto maior a espessura do óxido, maior é a diferença entre a banda de condução e o nível de Fermi. Conclui-se que, para uma dada voltagem externa, a densidade de elétrons na região de depleção também diminuirá com o aumento da espessura do óxido. Além disso, a Fig. 4.1 mostra que a espessura do óxido é inversamente proporcional ao campo elétrico em seu interior.

A intensidade do campo elétrico no interior do óxido (F_{OX}) é um importante parâmetro a ser monitorado em dispositivos MOS. O papel do óxido é agir como isolante e evitar o fluxo de corrente através do *gate*. Contudo, campos elétricos muito intensos podem degradar a propriedade isolante dos óxidos e diminuir a vida útil e confiabilidade dos dispositivos. A Fig. 4.2 mostra o comportamento de F_{OX} em função da voltagem externa aplicada. No caso do óxido de 10 nm de espessura, percebe-se que o campo elétrico para os capacitores MOS formados por semicondutores diferentes é praticamente igual para voltagens menores que $V_G < 1.5$ V, correspondente aos regimes de acumulação e depleção. Para voltagens maiores, a diferença entre os capacitores torna-se mais visível, ressaltando o comportamento do regime de inversão. Observa-se que para voltagens relativamente baixas e óxidos finos, F_{OX} pode alcançar intensidades da ordem de alguns MV/cm, aproximando-se dos valores de ruptura dielétrica. Por outro lado, em óxidos mais espessos ($T_{OX}=30$ nm) observa-se intensidades três vezes menor para o mesmo intervalo de voltagens aplicadas.

Para uma dada espessura de óxido, o regime de inversão é alcançado primeiramente no dispositivo feito de Si ($V_G \approx 1.5$ V, $T_{OX}=10$ nm), para depois ser alcançada pelos dispositivos feitos de SiC-3C, SiC-6H e SiC-4H, nesta ordem. A voltagem para a qual a inversão é alcançada é chamada voltagem limiar (V_T). Para óxidos mais espessos, V_T aumenta como mostrado na Fig. 4.2 (painel inferior). V_T pode ser estimada em capacitor MOS ideais com dopagem do tipo p através da expressão:

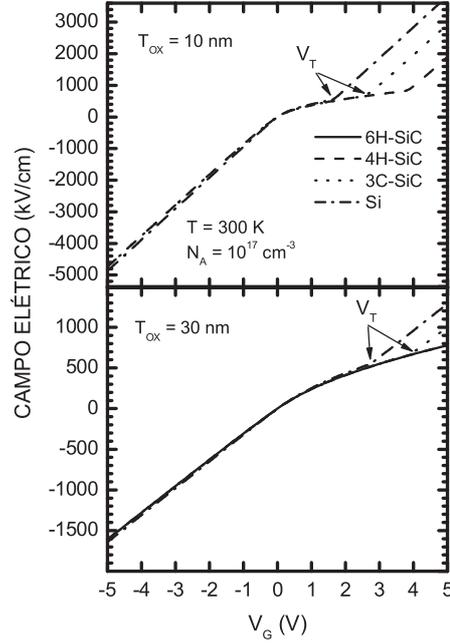


Figura 4.2: Dependência da intensidade do campo elétrico no interior do óxido em relação a voltagem externa aplicada para quatro capacitores de materias diferentes.

$$V_T = 2\phi_F + \frac{\epsilon_S}{\epsilon_{OX}} T_{OX} \sqrt{\frac{4q}{\epsilon_S} \phi_F} \quad (4.1)$$

onde

$$\phi_F = \frac{k_B T}{q} \ln \frac{N_A}{n_i} \quad (4.2)$$

$$n_i = \sqrt{N_C N_V} e^{-E_G/2k_B T} \quad (4.3)$$

Segundo a Eq. 4.1, V_T depende principalmente dos seguintes parâmetros: T_{OX} , N_A e E_G . A dependência linear em relação a T_{OX} é comprovada pela Fig. 4.2 (painel inferior). Já dependência em relação a E_G , embora mais complicada, também comporta-se diretamente proporcional. Isto explica as diferentes V_T para os capacitores de diversos materiais. Entre os quatro materiais usados na Fig. 4.2, o Si possui menor E_G , e conseqüentemente menor V_T . Uma comparação entre os valores de V_T extraídos da Fig. 4.2 e os obtidos com a Eq. 4.1, mostram que os resultados numéricos estão de

acordo com as estimativas analíticas.

A Fig. 4.3 mostra as curvas CV dos capacitores MOS usados na Fig. 4.2. Observa-se que as características CV entre o Si e os politipos SiC são bastante diferentes. Como discutido anteriormente, o Si atinge a inversão para voltagens consideravelmente menores em relação ao SiC. Comparando-se as curvas CV para duas espessuras de óxidos, percebe-se que a capacitância de acumulação diminui para óxidos mais espessos, estando de acordo com o fato que $C_{AC} \approx C_{OX} = \epsilon_{OX}A/T_{OX}$.

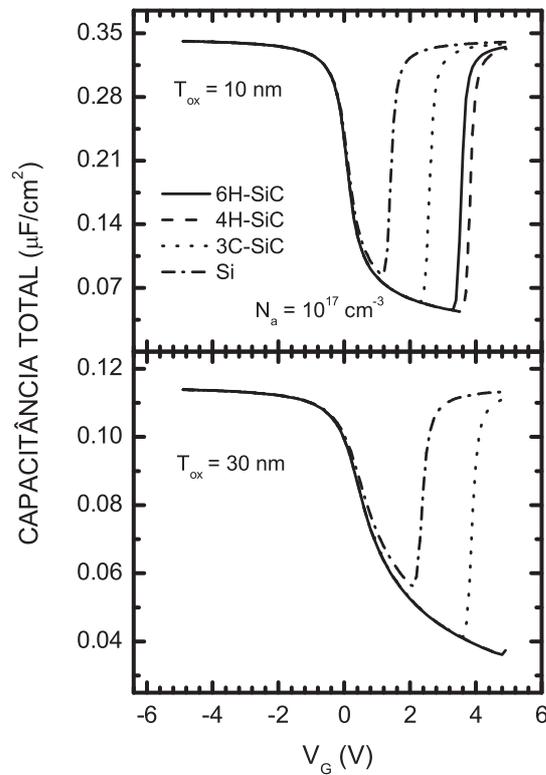


Figura 4.3: Efeito da variação da espessura do óxido sobre as curvas CV de capacitores SiC-MOS.

4.2 Efeitos de Dopagem

A adição de pequenas quantidades de outras substâncias a um semiconductor pode modificar consideravelmente as propriedades do material. Estas impurezas podem

substituir os átomos da rede cristalina (impurezas substitucionais) ou ocupar posições vazias entre os átomos da rede (impurezas intersticiais).

As propriedades elétricas dos semicondutores podem ser controladas através da adição de impurezas em concentrações medidas cuidadosamente. Semicondutores intrínsecos são pouco utilizados em dispositivos, pois a concentração de cargas móveis depende exponencialmente da temperatura, e em temperatura ambiente esta concentração é baixa. Além disso, a condutividade dos semicondutores depende fortemente da concentração de cargas móveis. Através da dopagem, é possível aumentar esta concentração e melhorar as propriedades de transporte, de forma que a condutividade dependa mais fracamente da temperatura.

Existem dois tipos principais de dopantes: tipo p e tipo n. Os dopantes do tipo n para o SiC são os elementos do grupo V da tabela periódica como, por exemplo, o nitrogênio (N), que é o principal dopante tipo n do SiC. O átomo de N ocupa o lugar do átomo de carbono (C) no cristal [11] devido sua camada eletrônica ser igual a do C, mas com cinco elétrons de valência em vez de quatro. Os dopantes do tipo p são trivalentes. O alumínio (Al) é o dopante tipo p mais comum no SiC. Ele ocupa o lugar do Si [11] pois tem uma camada eletrônica interna igual ao do Si, além de outros três elétrons de valência que podem estabelecer ligações covalentes.

A Fig 4.4 mostra o efeito da concentração da dopagem sobre o perfil da banda de condução e do campo elétrico no interior de um capacitor MOS. Percebe-se que variações de uma ordem de magnitude influenciam fortemente o perfil da banda de condução. O aumento da concentração afasta a banda de condução do nível de Fermi, diminuindo a concentração de elétrons. Conseqüentemente, espera-se que V_T também aumente. Além disso, percebe-se que a extensão da região de depleção diminui. Devido às fortes modificações na banda de condução (e conseqüentemente na banda de valência), o perfil do campo elétrico ao longo do dispositivo também é fortemente afetado. A Fig. 4.5 mostra a variação do campo dentro do óxido em capacitores MOS com $N_A=10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Em comparação com a Fig. 4.2, observa-se o mesmo comportamento

físico. Contudo, a intensidade do campo elétrico aumenta para $V_G > V_T$, enquanto permanece praticamente inalterado nos regimes de acumulação e depleção. Além disso, percebe-se que há um deslocamento negativo de aproximadamente 1 V de V_T para todos os materiais.

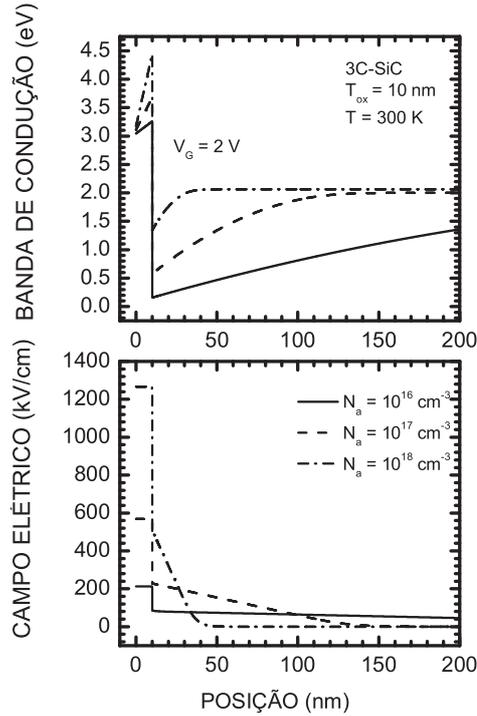


Figura 4.4: Efeito da concentração da dopagem sobre o perfil da banda de condução e do campo elétrico no interior de um capacitor MOS 3C-SiC, para $V_G=2 \text{ V}$, $T_{ox} = 10 \text{ nm}$ e $T = 300 \text{ K}$.

A Fig. 4.6 mostra a concentração de elétrons n_{2D} por unidade de área na banda de condução em função da concentração de dopagem. O aumento de N_A no semiconductor diminui a concentração de elétrons devido a seguinte razão: Os elétrons da banda de valência possuem maior probabilidade de serem excitados termicamente para os níveis aceitadores do que para a banda de condução devido a menor energia de transição. Assim quanto maior a concentração N_A , menor a concentração de elétrons na banda de condução devido a lei de ação das massas que diz que $np = n_i^2$. Portanto, espera-se também que quanto maior E_G menor a probabilidade de transição dos elétrons para

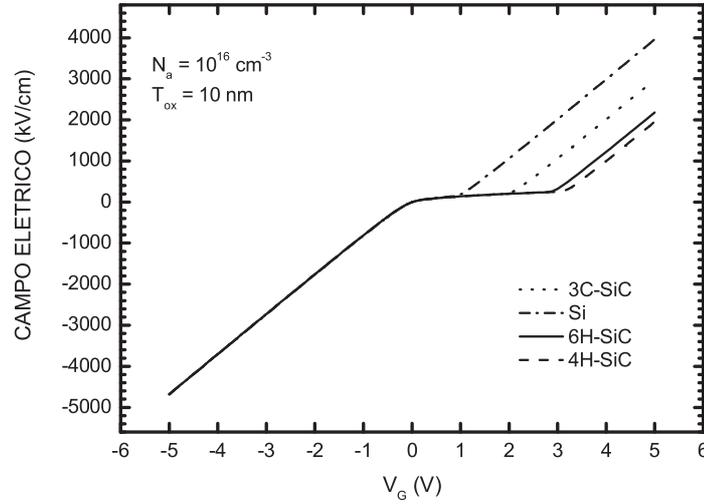


Figura 4.5: Variação do campo elétrico no interior do óxido em capacitores MOS com a tensão externa aplicada.

a banda de condução. Este fato explica as imensas variações de concentração dos diferentes materiais. Por exemplo, o Si possui menor E_G , assim $n_{2D(Si)}$ depende muito fracamente de N_A . Contudo, no caso do SiC-4H, $n_{2D(SiC-4H)}$ diminui várias ordens de grandeza com o aumento de apenas uma ordem de grandeza em N_A . Além disso, em comparação com $n_{2D(Si)}$ ($N_A=10^{18} \text{ cm}^{-3}$), $n_{2D(SiC-4H)}$ é aproximadamente 30 ordens de grandeza menor em temperatura ambiente. Em outras palavras, praticamente não há elétrons de condução no semicondutor. Devido ao *gap* de energia ser muito grande para os politipos SiC em geral, praticamente não há elétrons de condução na temperatura ambiente, tornando alta a resistência do material. Por esta razão o SiC é considerado apropriado para aplicações em altas temperaturas.

A Fig 4.7 mostra as curvas CV para vários dispositivos MOS nos quais a concentração de dopagem é $N_A=10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Em comparação com a Fig. 4.3 observa-se que tanto o ponto mínimo da curva CV como V_T aumentam com a concentração de dopantes. Além disso, observa-se que a capacitância no regime de depleção é bastante distinta.

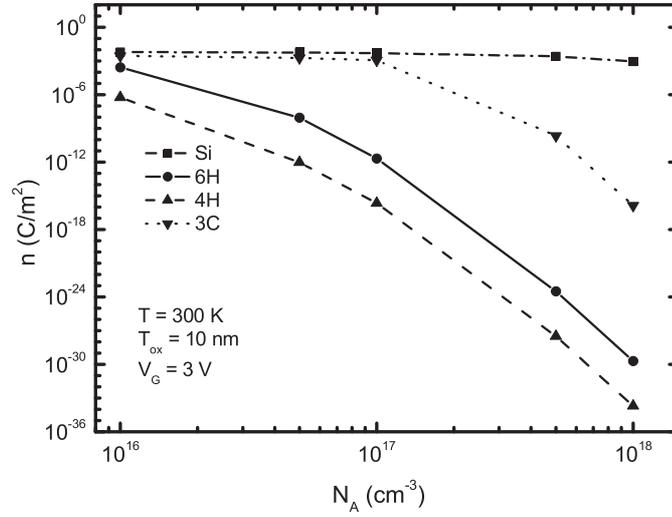


Figura 4.6: Concentração de elétrons n_{2D} por unidade de área na banda de condução em função da concentração de dopagem para $V_G = 3 \text{ V}$, $T_{ox} = 10 \text{ nm}$ e $T = 300 \text{ K}$.

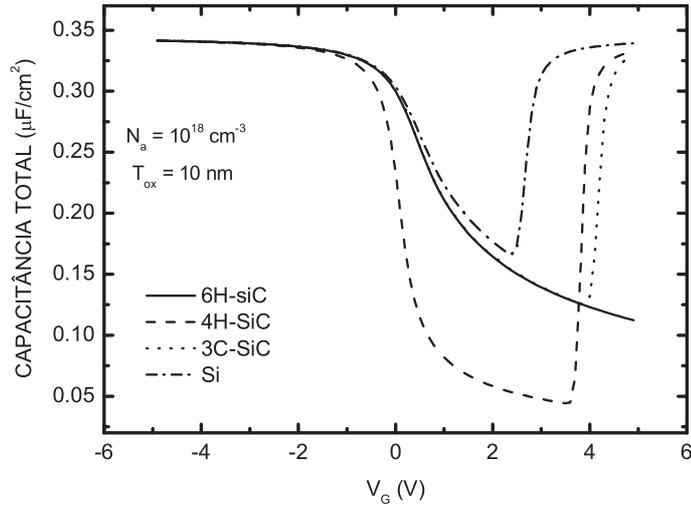


Figura 4.7: Curvas CV de diferentes capacitores MOS para $N_A = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ e $T_{ox} = 10 \text{ nm}$ em temperatura ambiente.

4.3 Influência da Temperatura

Os politipos do SiC possuem *gap* de energia muito maiores que o Si. Isto faz com que a concentração de portadores na temperatura ambiente no semiconductor puro (elétrons e buracos), dada por n_i (veja Eq. 4.3), seja muito baixa. A Fig. 4.8 mostra a dependência

em relação a temperatura da concentração intrínseca (n_i) de portadores. No geral, $n_{i(SiC)}$ é várias ordens grandeza menor que $n_{i(Si)}$ para uma dada temperatura. Esta diferença aumenta com gap. Chama atenção o fato de que na temperatura ambiente $n_{i(Si)} \approx 10^{10} \text{ cm}^{-3}$, mas somente para temperaturas acima de 600 K o SiC-3C atinge concentrações da mesma ordem, enquanto os politipos SiC-4H e SiC-6H necessitam de temperaturas da ordem 900 K.

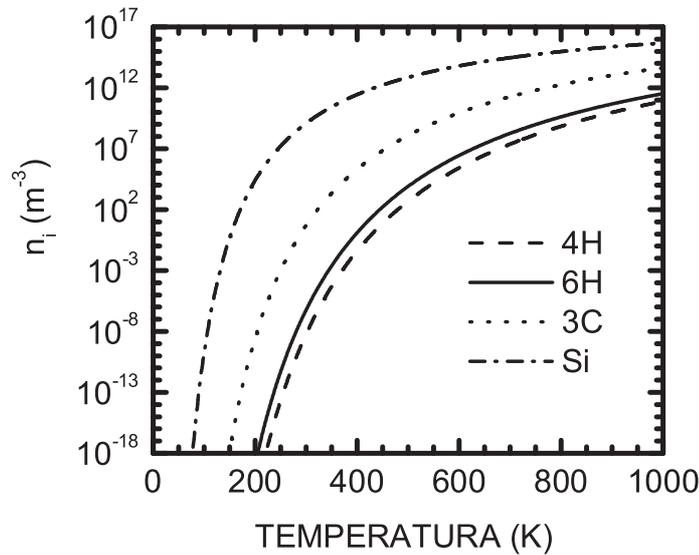


Figura 4.8: Concentração intrínseca de portadores (n_i) em função da temperatura.

Considerando-se a ionização completa das impurezas receptoras, a presença de elétrons na banda de condução depende exclusivamente da temperatura. O aumento da temperatura favorece a probabilidade dos elétrons sofrerem transições para a banda de condução. Contudo, quanto maior a energia do *gap* do semiconductor, maior é a energia que o elétron necessita para fazer sofrer esta transição. Vale lembrar que a formação da camada de inversão em capacitores MOS do tipo p requer uma quantidade considerável de elétrons na proximidade da interface. Portanto, devido a forte dependência em relação a temperatura, espera-se que as propriedades elétricas do capacitor SiC-MOS também sejam afetadas por este parâmetro. A Fig. 4.9 mostra a densidade de carga por unidade de área n_{2D} na banda de condução em função da temperatura para

$V_G=3$ V. Primeiramente observa-se que n_{2D} pouco varia no Si, e que no SiC-3C n_{2D} é aproximadamente uma ordem de grandeza inferior ao Si no intervalo de temperatura mostrado. Contudo, n_{2D} nos politipos SiC-4H e SiC-6H é muito baixo (10^{-12} C/m²) em temperatura ambiente mas aumenta exponencialmente com a temperatura atingindo a ordem de 10^{-5} C/m² para temperaturas próximas a 600 K, apenas duas ordens de grandeza inferior ao Si. Embora trata-se de um aumento extraordinário, a resistência no canal ainda é muito alta.

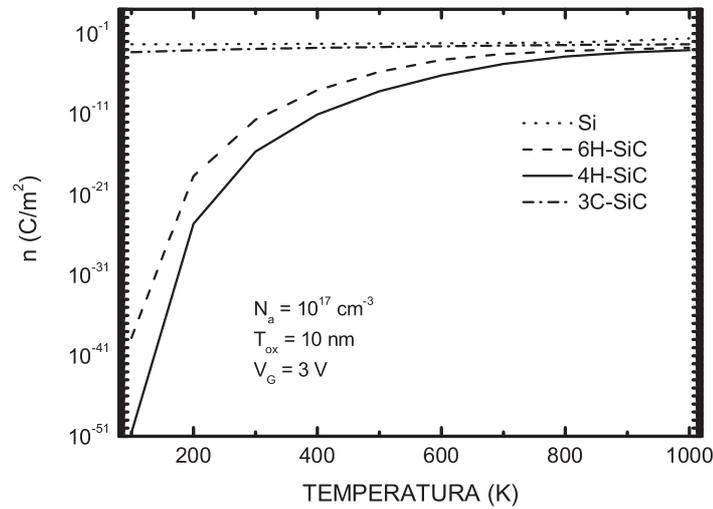


Figura 4.9: Densidade de carga por unidade de área na banda de condução em função da temperatura.

Como a capacitância depende das cargas móveis, espera-se também que a temperatura afete as curvas CV. A Fig. 4.10 mostra a variação da capacitância com a temperatura. O principal efeito observado sobre as curvas CV é uma diminuição no ponto mínimo da curva CV e da voltagem limiar V_T com o aumento da temperatura. Este deslocamento parece ser maior para *gaps* de energia menores. No caso do Si, as diferenças são bastante perceptíveis devido a elevada concentração de elétrons em virtude do seu menor *gap* de energia. Contudo, no caso dos politipos de SiC, as mudanças são mais efetivas para temperaturas acima de 300 K. Isto é uma consequência da baixa concentração de elétrons na banda de condução para temperaturas inferiores

à ambiente. A Fig. 4.11 confirma a dependência de V_T com a temperatura, observa-se

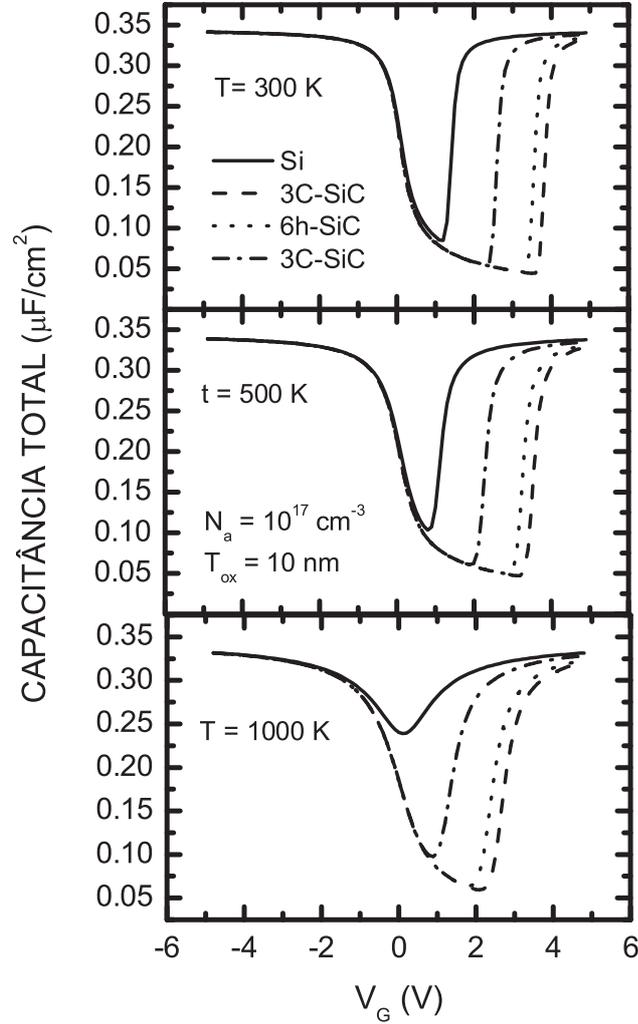


Figura 4.10: Capacitância total de dispositivos MOS (Si, SiC-3C, SiC-4H e SiC-6H) para temperaturas de 300 K, 500 K e 1000 K.

que V_T diminuir linearmente com o aumento da temperatura. A dependência de V_T com a temperatura é confirmada pela estimativa analítica dada pela Eq. 4.1.

4.4 Ionização Incompleta

Nas seções anteriores, todas as simulações foram realizadas considerando-se todas impurezas dopantes 100% ionizadas. Como a excitação eletrônica via energia térmica

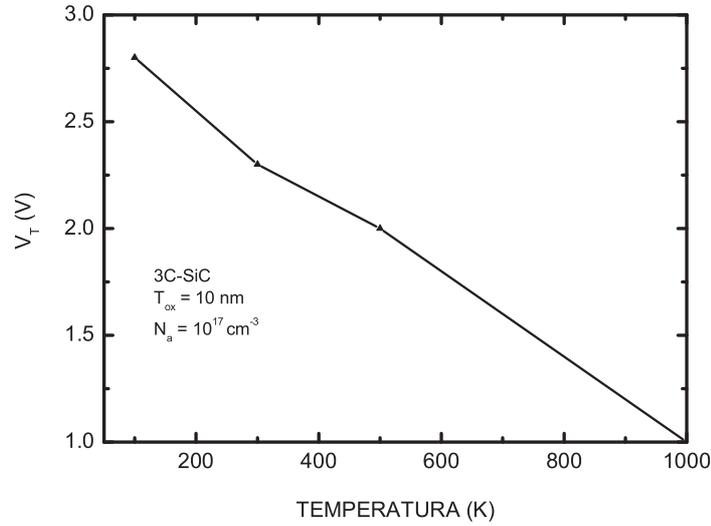


Figura 4.11: Dependência de V_T em relação a temperatura extraída das curvas CV mostradas na fig. 4.10 para dispositivos MOS 3C-SiC com $T_{OX} = 10$ nm e $N_A = 10^{17}$ cm^{-3}

possui natureza puramente estatística, esta aproximação é válida quando a energia de transição é aproximadamente igual à energia térmica dada $k_B T$. As principais impurezas dopantes do SiC possuem energia de ionização muito superiores à energia térmica em temperatura ambiente [11, 78]. A Tabela 4.1 mostra as energias de ionização das principais impurezas tipo p usadas para dopar o SiC. Com exceção do P, todas

Tabela 4.1: Principais dopantes tipo p do SiC e suas respectivas energias de ionização (em eV) [11, 78].

	6H-SiC	4H-SiC
Al	0.18-0.27 eV	0.16-0.23 eV
B	0.35 eV	0.29 eV
Ga	0.35 eV	0.29 eV
P		0.05-0.09 eV

as energias de ionização são altas em comparação com a energia térmica. Portanto,

espera-se que concentração de portadores majoritários (buracos) também seja afetada pela temperatura.

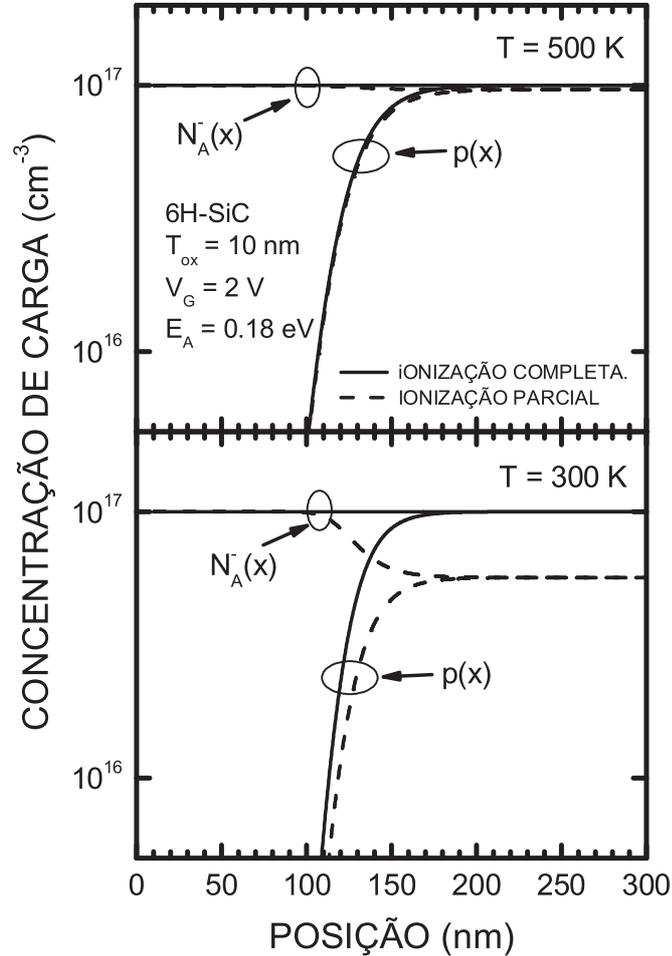


Figura 4.12: Comparação das concentrações de buracos e impurezas ionizadas em dispositivos MOS a 6H-SiC calculadas através das aproximações de ionização total e parcial das impurezas em função da posição para $T = 300$ K e $T = 500$ K.

A Fig. 4.12 compara o cálculo das concentrações de buracos ($p(x)$) e de aceitadores ionizados $N_A^-(x)$ (veja as Eqs. 2.30) para os casos de ionização total e parcial. A energia de ionização considerada é de $E_A=0.18$ eV (substrato dopado com Al). Em altas temperaturas (500 K), percebe-se que não há diferenças de concentração para os dois modos de cálculo, ou seja, a hipótese de ionização total é válida. Contudo, em temperatura ambiente as diferenças entre os modelos de cálculo tornam-se bastante

evidentes. As concentrações de buracos e impurezas ionizadas são menores nas regiões além da zona de depleção do que prevê a hipótese de ionização completa. Mesmo em altas temperaturas, estas diferenças devem ser relevantes para energias de ionização superiores a 0.18 eV. Estes resultados são mostrados na Fig. 4.4. Observa-se que as concentrações $p(x)$ e $N_A^-(x)$ nas regiões além da zona de depleção tornam-se consideravelmente menores à medida que as energias de ionização das impurezas aumentam. Neste caso, temperaturas ainda maiores que 500 K seriam necessárias para que a hipótese de ionização completa torne-se válida.

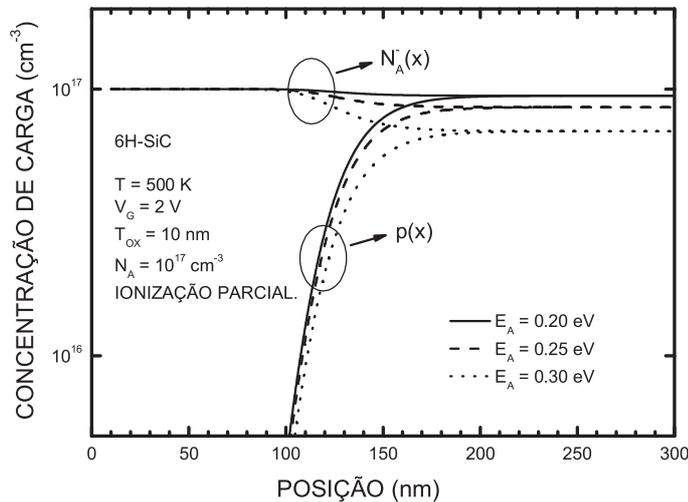


Figura 4.13: Efeito da variação das energias de ionização sobre as concentrações de buracos e impurezas ionizadas calculadas usando-se a hipótese de ionização parcial em função da posição para alta temperatura.

Com a diminuição das concentrações em algumas regiões do dispositivos, espera-se que as curvas CV serão afetadas pela ionização incompleta das impurezas. Estes resultados são mostrados na Fig. 4.14. Ao contrário do que se esperava, o aumento das energias de ionização de 0.2 eV para 0.3 eV em altas temperaturas não causou mudanças perceptíveis nas curvas CV. Neste caso, a diminuição nas concentrações $p(x)$ e $N_A^-(x)$ não eram significantes o suficiente para compensar o aumento da concentração de elétrons devido à alta temperatura. Contudo, em temperaturas menores estes efeitos

tornam-se mais perceptíveis.

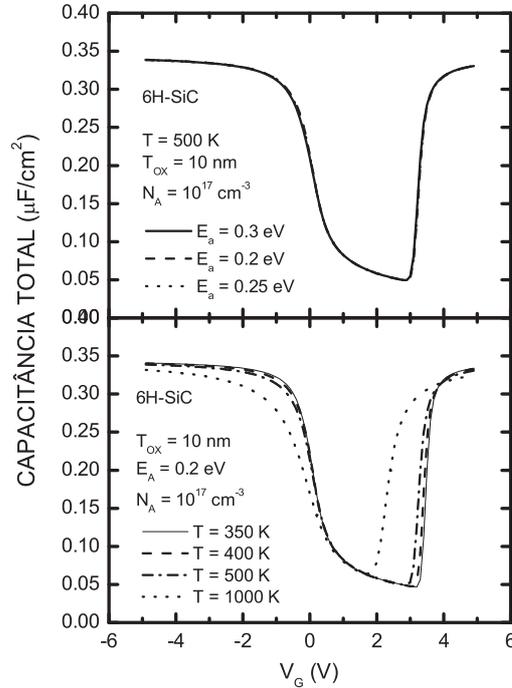


Figura 4.14: Efeito da variação das energias de ionização e temperatura sobre as curvas CV do capacitor 6H-SiC para $T_{ox} = 10$ nm e $N_a = 10^{17}$ cm $^{-3}$.

4.5 Efeitos Quânticos

Os efeitos quânticos tornam-se importantes quando o potencial de confinamento torna-se comparável ao comprimento de onda térmico, dado por $\lambda = \frac{h}{\sqrt{3m_e k_B T}}$ que, em temperatura ambiente, é aproximadamente 15 nm. Quando um capacitor MOS do tipo p é submetido a voltagens próximas a V_T , forma-se um potencial de confinamento triangular próximo a região da interface, cuja largura é da mesma ordem de λ , sendo necessário modelar a densidade de portadores minoritários quanticamente (ver Seção 2.5). A principal consequência deste modelamento quântico é o formato da distribuição de elétrons na camada de inversão, mostrada na Fig. 4.15. No modelamento semi-clássico a distribuição de elétrons cai exponencialmente à medida que se afasta

da interface com o óxido, tendo o ponto máximo da distribuição localizado na interface. No modelamento quântico, a distribuição assemelha-se ao formato da função de onda do estado fundamental do poço triangular, tendo seu ponto máximo deslocado da interface. Este resultado é intuitivamente esperado, uma vez que na modelagem quântica a densidade de cargas de um determinado estado eletrônico é proporcional ao quadrado da função de onda.

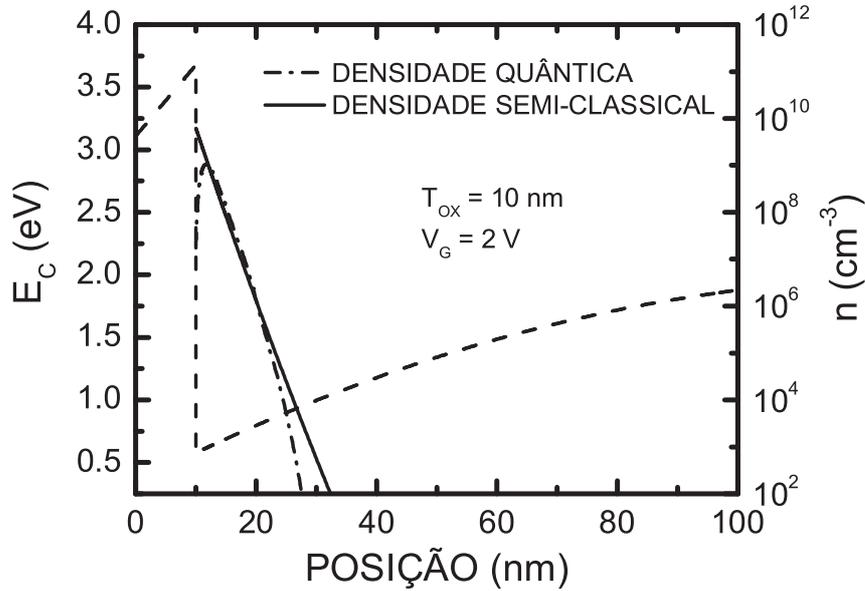


Figura 4.15: Comparação das densidades de portadores minoritários calculadas com os modelos semi-clássico e quântico.

O ponto máximo da distribuição localiza-se no seu valor médio $\langle x \rangle_M$, que pode ser obtido através de:

$$\langle x \rangle_M = \int x \rho_Q(x) dx \quad (4.4)$$

onde ρ_Q representa densidade de cargas modelada quanticamente, dada pela Eq. 2.43. O fato de que o ponto máximo da distribuição não estar localizado na interface possui as seguintes consequências: (i) a separação efetiva entre as cargas no *gate* e no semicondutor torna-se superior a espessura do óxido T_{OX} no regime de inversão, sendo dada por $T'_{OX} \rightarrow T_{OX} + \langle x \rangle_M$; (ii) surge uma capacitância adicional em série com a capacitância

do óxido devido a $\langle x \rangle_M$, fazendo com que a capacitância efetiva na inversão C_{INV} seja inferior a C_{OX} , contrariando os modelos semi-clássicos. Estes efeitos tornam-se mais pronunciados à medida que a espessura do óxido diminui; (iii) a voltagem limiar V_T aumenta como consequência do aumento efetivo do óxido.

4.5.1 Vales de Energia e Anisotropia da Massa Efetiva

Devido à multiplicidade dos vales de energia na banda de condução do SiC e da anisotropia da massa efetiva dos mesmos, os níveis de energia na região de inversão dividem-se em grupos. Em particular, quando a direção cristalográfica $\langle 100 \rangle$ do SiC-3C está perpendicular ao óxido, os 6 vales de energia do SiC-3C dividem-se em 2 grupos de sub-bandas, um cuja massa efetiva na direção de confinamento é m_l e com multiplicidade 2, e outro grupo com massa efetiva m_t e multiplicidade 4, como mostra o gráfico menor na Fig. 4.16. Uma simples análise de Eq. de Schrodinger (Eq. 2.36) mostra que os níveis de energia são afetados pelo valor da massa efetiva, e consequentemente afetam a ocupação das subbandas e carga total na região de inversão. A Fig. 4.16 mostra os dois primeiros estados eletrônicos das bandas Δ_2 e Δ_4 . Devido a diferença de energia destes vales, suas ocupações são diferentes. O efeito de divisão de sub-bandas na região de inversão, e é muito importante para a determinação dos seguintes parâmetros da: (i) carga total no dispositivo, (ii) V_T e (iii) corrente de tunelamento através do *gate* [8, 9, 63, 64, 65]. Este efeito já foi profundamente investigado em dispositivos baseados em Si, mas tem sido pouco explorado no SiC, em parte devido à concentração de esforços em crescer dispositivos com baixa densidade de estados interfaciais, uma vez que estes podem dominar o comportamento dos dispositivos durante a inversão. Além disso, a investigação teórica em dispositivos formados com outros politipos do SiC (hexagonal) torna-se difícil devido à configuração mais complexa dos vales de energia [79]. Este tema será abordado em estudos futuros.

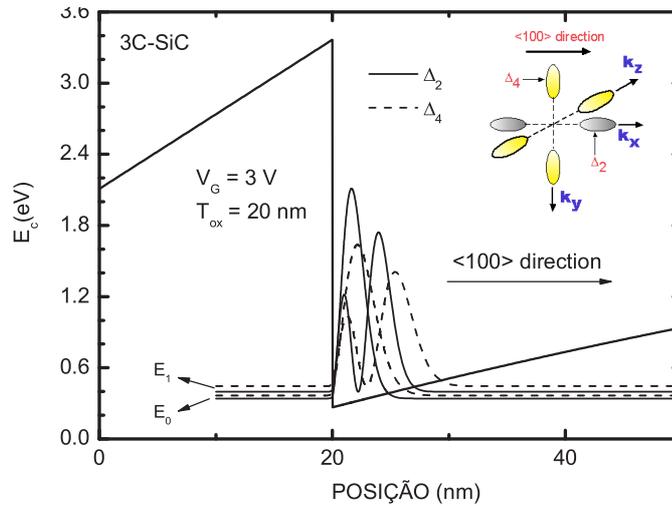


Figura 4.16: Quadrado da função de onda dos dois primeiros estados eletrônicos das bandas Δ_2 e Δ_4 na região de depleção de um capacitor SiC-3C MOS. a figura menor mostra a orientação dos vales de energia do SiC-3C em relação ao óxido.

4.5.2 Parâmetros do Dispositivo e Estrutura Eletrônica

Nas secções anteriores vimos que os parâmetros do dispositivo como voltagem aplicada, espessura do óxido, temperatura e dopagem afetam a carga total nos capacitores MOS. Esta secção dedica-se a investigar como estes parâmetros afetam o estado fundamental da região de inversão.

A Fig. 4.17 mostra o comportamento dos quatro primeiros estados eletrônicos das bandas Δ_2 e Δ_4 e suas respectivas ocupações em função de V_G . À medida que a V_G aumenta, os estados eletrônicos caem de forma aparentemente linear em direção à E_F (referência da energia) como consequência do encurvamento da banda de condução. A partir de $V_G \approx V_T$, os estados eletrônicos mudam abruptamente de comportamento e sua dependência em relação à V_G torna-se mais fraca, indicando que a banda de condução parou de encurvar-se em direção à E_F , ou seja, o dispositivo atingiu o regime de inversão, e qualquer aumento adicional em V_G será sentido quase inteiramente na região do óxido. No sentido oposto, a ocupação destes estados eletrônicos crescem exponencialmente à medida que V_G cresce, devido a maior proximidade em relação

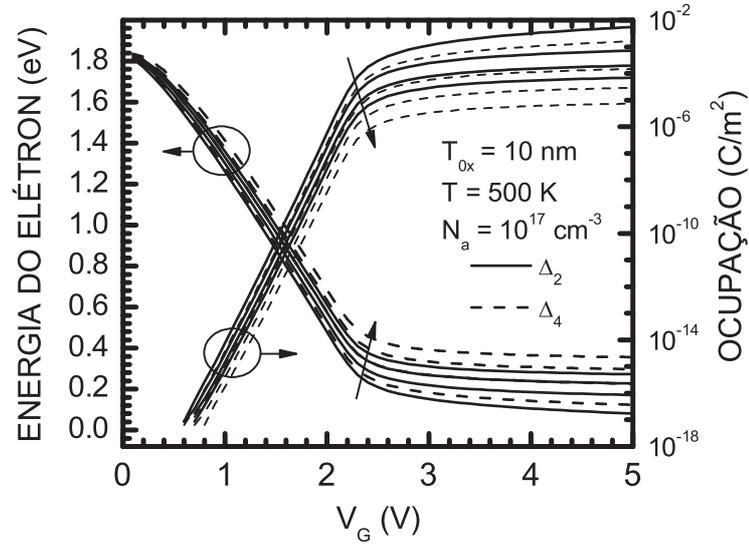


Figura 4.17: Comportamento dos quatro primeiros estados eletrônicos das bandas Δ_2 e Δ_4 em capacitores SiC-3C e suas respectivas ocupações em função da voltagem externa aplicada. As setas indicam o sentido de crescimento dos índices dos estados eletrônicos.

a E_F . No entanto, a ocupação praticamente para de crescer a partir de $V_G \approx V_T$, indicando uma saturação na ocupação dos estados. Além disso, a ocupação das bandas Δ_4 é várias ordens de grandeza inferior à ocupação das bandas Δ_2 devido sua massa efetiva menor.

Em relação ao efeito dos outros parâmetros do dispositivo, a Fig. 4.18 mostra um panorama geral da influência da espessura do óxido, da concentração de dopagem no substrato e da temperatura sobre o estado fundamental (E_0) da camada de inversão (banda Δ_2). A Fig. 4.18(a) mostra como a espessura do óxido afeta fortemente a dependência de E_0 em relação a V_G , fazendo com que este possua ocupação significativamente menor para voltagens intermediárias quando T_{OX} é relativamente espesso. Este resultado também confirma a forte dependência que V_T possui em relação à T_{OX} . No caso da concentração de dopagem (Fig. 4.18(b)), um aumento desta também diminui a ocupação de E_0 para voltagens intermediárias, contudo estas mudanças são aparentemente menos significativas do que as variações em T_{OX} . Finalmente, a

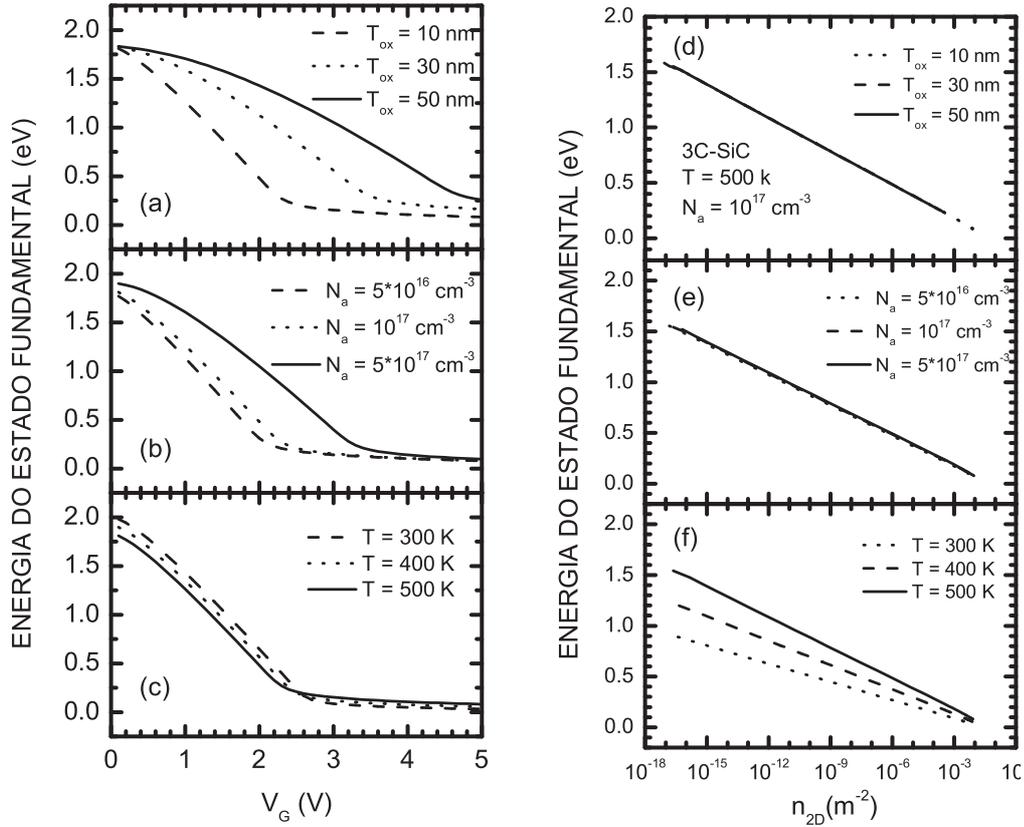


Figura 4.18: Panorama geral do efeito da espessura do óxido (a), concentração de dopagem (b) temperatura (c) sobre o estado fundamental E_0 da camada de inversão de capacitores MOS SiC-3C em função da voltagem, e as figuras (d), (e) e (f) mostram uma correlação entre E_0 e a densidade superficial de cargas de inversão n_s sobre estes parâmetros.

Fig. 4.18(c) mostra que E_0 é fracamente afetado pela temperatura. Contudo, observa-se uma inversão da ocupação do estado fundamental em relação à temperatura: (i) para $V_G \lesssim V_T$ quanto maior a temperatura maior é a ocupação do estado fundamental; (ii) para $V_G \gtrsim V_T$, temperaturas elevadas diminuem a ocupação de E_0 . Embora as Figs. 4.18(a), (b) e (c) intuitivamente induzam o leitor a achar que a espessura do óxido e a concentração da dopagem possuem efeitos maiores sobre a ocupação do estado fundamental do que a temperatura, a correlação entre este e a densidade superficial de cargas de inversão n_{2D} (Figs. 4.18(d), (e) e (f)) mostra o contrário. Para uma dada

carga de inversão, a temperatura exerce uma influência maior em E_0 do que os outros parâmetros, que diminui à medida que a concentração de inversão aumenta.

4.5.3 Importância do Modelamento Quântico

O papel dos efeitos quânticos sobre as propriedades elétricas dos capacitores MOS foi discutido qualitativamente no início desta seção. Uma comparação numérica da estimativa da densidade superficial de inversão armazenada no capacitor MOS obtida através dos modelos semi-clássico e quântico é mostrada na Fig. 4.19. Observa-se que o modelo quântico prevê uma quantidade menor de carga. Embora esta variação pareça desprezível em princípio, a curva CV na Fig. 4.20 mostra um comportamento distinto para o regime de inversão. C_{INV} no modelo quântico é menor e ainda diminui V_T da ordem de mV. Embora tal variação pareça pequena, ela aumenta à medida que a espessura do óxido diminui [59]. A Fig 4.21 estima a importância do modelamento quântico em função da espessura através do parâmetro C_{INV}/C_{OX} . No modelamento semi-clássico $C_{INV} \approx C_{OX}$, logo teríamos $C_{INV}/C_{OX} \approx 1$ para qualquer espessura de óxido. Contudo, a Fig. 4.21 mostra que C_{INV}/C_{OX} diminui com a espessura do óxido, fazendo com que estimativas clássicas da carga armazenada nos capacitores MOS desviem fortemente do valor real e afetem todo o processo de projeto de circuitos. Além disso, a figura também mostra que estas variações são ainda mais fortes no SiC do que no Si.

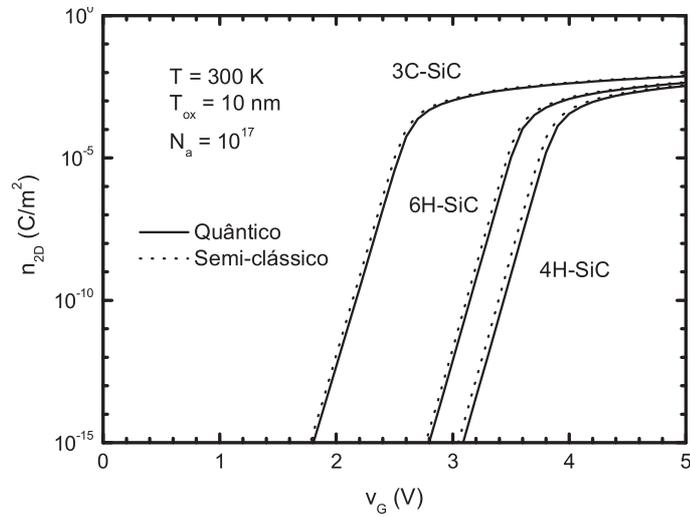


Figura 4.19: Comparação das densidades de inversão (n_{2D}) obtidas pelo modelos semi-clássico e quântico em capacitores SiC-3C, 6H-SiC e 4H-SiC MOS para $T_{ox} = 10\text{ nm}$, $N_a = 10^{17}\text{ cm}^{-3}$ e $T = 300\text{ K}$.

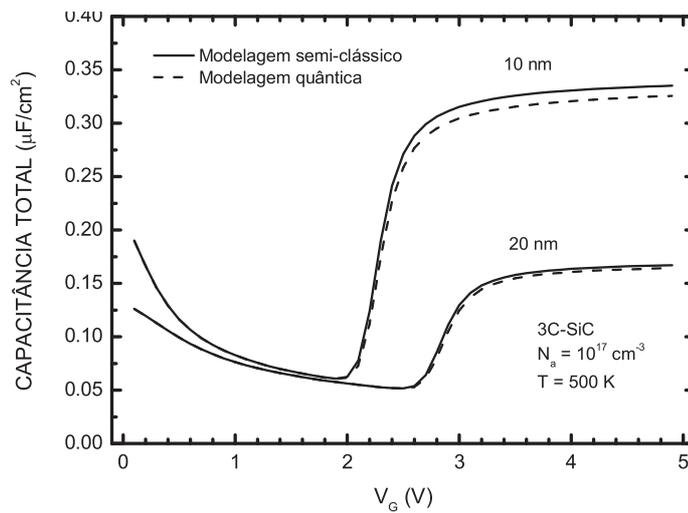


Figura 4.20: Comparação das curvas CV de capacitores SiC-3C MOS obtidas pelo modelos semi-clássico e quântico para $N_a = 10^{17}\text{ cm}^{-3}$ e $T = 500\text{ K}$.

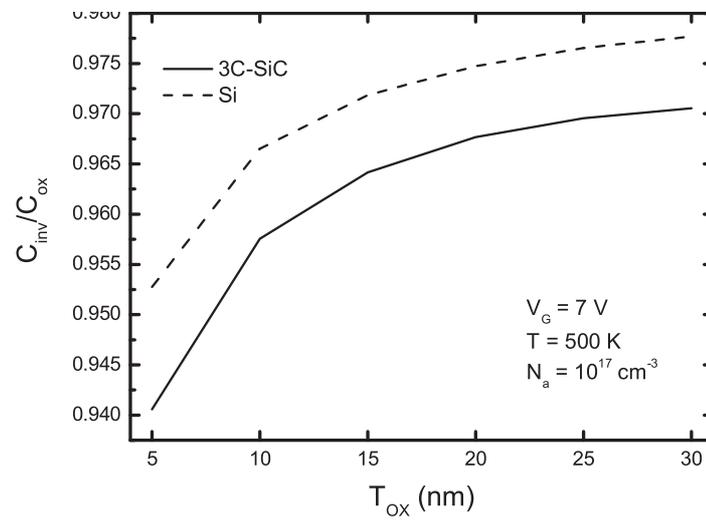


Figura 4.21: Dependência do parâmetro C_{INV}/C_{OX} em função da espessura do óxido em capacitores SiC-3C e Si MOS para $V_G = 7$ V, $N_a = 10^{17}$ cm⁻³ e $T = 500$ K.

5

Conclusões e Perspectivas

Atualmente, o Si é o material dominante na indústria eletrônica e versatilidade desta tecnologia continua gerando inovações em um ritmo que parece não ter fim. Contudo, o Si não é material ideal para aplicações em condições extremas nos quais os semicondutores convencionais não podem funcionar: (i) altas temperaturas, (ii) altas potências, (iii) altas frequências e (iv) ambientes quimicamente hostis. Talvez a propriedade mais importante que torne o SiC um material potencialmente tão importante seja o fato de que SiO₂ pode ser crescido termicamente sobre o SiC. Devido a estas características, o SiC tem recebido crescente atenção nos últimos anos. Contudo, ainda há um longo caminho antes do SiC se tornar comercialmente viável em suas aplicações. Isto se deve principalmente ao (i) caro processo de fabricação dos monocristais de SiC, (ii) a alta densidade de estados presentes na interface SiC/SiO₂ e as (iii) complexas propriedades eletrônicas apresentadas pelos diferentes politipos. Além destas dificuldades representarem um empolgante campo de pesquisa, deve-se ressaltar que a tecnologia do Si enfrentou desafios semelhantes antes de se tornar o motor da tecnologia atual.

Neste trabalho, foram propostas ferramentas teóricas e computacionais para a investigação das propriedades elétricas e eletrônicas de capacitores MOS baseados em SiC. O modelo utilizado foi dividido em duas partes: (i) modelamento semi-clássico de todas as cargas presentes no dispositivo MOS e (ii) modelo quântico dos portadores minoritários nos regimes de depleção e inversão. O primeiro baseia-se na descrição dos portadores segundo a estatística de Boltzmann, que requer a solução de equações

não-lineares de Poisson. Já o segundo baseia-se na solução das equações acopladas de Poisson e Schrödinger. As principais conclusões deste trabalho serão comentadas a seguir:

5.1 Espessura do Óxido

Variações na espessura do óxido afetam fortemente o campo elétrico em seu interior, enquanto o campo elétrico no interior do semiconductor próximo a interface é afetado em menor intensidade. Observa-se que para voltagens relativamente baixas e óxidos finos, F_{OX} pode alcançar intensidades da ordem de alguns MV/cm, aproximando-se dos valores da ruptura dielétrica. Por outro lado, em óxidos mais espessos ($T_{OX}=30$ nm) observa-se intensidades três vezes menor para o mesmo intervalo de voltagens aplicadas. Para uma dada espessura de óxido, o regime de inversão é alcançado primeiramente no dispositivo feito de Si ($V_G \approx 1.5$ V, $T_{OX}=10$ nm), para depois ser alcançada pelos dispositivos feitos de SiC-3C, SiC-6H e SiC-4H, nesta ordem. O gap de energia largo dos politipos do SiC induz a voltagens limiaries maiores.

5.2 Efeitos de Temperatura

Os politipos do SiC possuem *gap* de energia muito maiores que o Si, diminuindo drasticamente a concentração de elétrons de condução em temperatura ambiente e tornando alta a resistência do material. No geral, $n_{i(SiC)}$ é várias ordens grandeza menor que $n_{i(Si)}$ para uma dada temperatura. Esta diferença aumenta com o gap. Chama atenção o fato de que em temperatura ambiente $n_{i(Si)} \approx 10^{10}$ cm⁻³, mas somente para temperaturas acima de 600 K que o SiC-3C atinge concentrações da mesma ordem, enquanto os politipos SiC4H e SiC-6H necessitam de temperaturas da ordem 900 K. Por esta razão o SiC, é considerado o semiconductor apropriado para aplicações em altas temperaturas. E se tratando das cargas armazenadas no capacitor MOS, n_s nos politipos

SiC-4H e SiC-6H é muito baixo (10^{-12} C/m²) em temperatura ambiente mas aumenta exponencialmente com a temperatura chegando a ordem 10^{-5} C/m² para temperaturas próximas a 600 K, apenas duas ordens de grandeza inferior ao Si. Embora trata-se de um aumento extraordinário, a resistência no canal condutivo ainda é muito alta. O principal efeito sobre as curvas CV é uma diminuição da voltagem limiar com o aumento da temperatura. Este deslocamento parece ser maior para *gaps* de energia menores. No caso do Si, as diferenças são bastante perceptíveis devido a elevada concentração de elétrons em virtude do seu *gap* de energia menor. Contudo, no caso dos politipos de SiC, as mudanças são mais efetivas para temperaturas acima de 300 K.

5.3 Efeitos da Ionização Incompleta

Uma aproximação comum na simulação de dispositivos MOS é considerar a ionização total das impurezas. Contudo, as energias de ionização das principais impurezas dopantes do SiC são altas em comparação com a energia térmica. Portanto, espera-se que concentração de portadores majoritários (buracos) também seja afetada pela temperatura. Em altas temperaturas (500 K), percebe-se que não há diferenças de concentração para os dois modos de cálculo, ou seja, a hipótese de ionização total é válida. Por outro lado, em temperatura ambiente as diferenças entre os modelos de cálculo tornam-se bastante evidentes. As concentrações de buracos e impurezas ionizadas são menores nas regiões além da zona de depleção do que prevê a hipótese de ionização completa.

5.4 Modelamento Quântico

Embora o modelo descrito seja geral o suficiente para ser aplicado em dispositivos mais complexos e geometrias tri-dimensionais, optou-se por um modelamento unidimensional, já que os fenômenos físicos que regem o funcionamento básico de dispositivos

MOSFET's completos possa ser perfeitamente capturada pelo modelamento unidimensional de capacitores MOS. Portanto, para o propósito deste trabalho, um modelamento tridimensional não traria benefícios adicionais, apenas aumentaria a complexidade e o esforço computacional durante a resolução das equações envolvidas. Além disso, os efeitos quânticos tornam-se importantes de forma que não podem ser desprezados para capacitores MOS com óxidos muito estreitos por causa da menor capacitância apresentada pelo dispositivo no regime de inversão. Esta diferença resulta em alterações na carga total armazenada no dispositivo e a voltagem limiar.

5.5 Investigações Futuras

Embora a qualidade da interface SiC/SiO₂ seja atualmente um dos principais problemas que impede dispositivos de SiC tornarem-se comercialmente disponíveis, as investigações conduzidas neste trabalho foram baseadas em aproximações ideais da interfaces SiC/SiO₂. Portanto, uma das direções futuras deste trabalho é desenvolver modelos físicos e computacionais para a simulação das propriedades elétricas e eletrônicas dos capacitores MOS em condições reais. Além disso, o estudo da mobilidade no canal incorporando os principais mecanismos de espalhamento será realizado, pois trata-se de um parâmetro crucial para a performance dos dispositivos e estudar também o efeito da voltagem externa alternda (ac) nas propriedades eletrônicas de dispositivos MOS baseados em SiC.

Referências

- [1] J.E. Lilienfeld, US Patent 1745175 (1926).
- [2] L. Geppert, IEEE Spectrum, October 2002, pp. 28.
- [3] <http://www.intel.com/research/silicon/mooreslaw.htm>.
- [4] Y. Taur *et al.*, Proc. IEEE **85**, 486 (1997).
- [5] H. Momose *et al.*, IEEE Trans. Electron Devices **43**, 1233 (1996).
- [6] S. Lo, D. Buchanan and Y. Taur, IBM J. Res. Dev **43**, 327 (1999).
- [7] M. Städele, B. R. Tuttle and K. Hess, J. Appl. Phys. **89**, 348 (2001).
- [8] R. Clerc, A. Spinelli, G. Ghibaudo and G. Pananakakis, J. Appl. Phys. **91**, 1400 (2002).
- [9] F. Jimenez-Molinos, F. Gamiz, A. Palma, P. Cartujo and J. A. Lopez-Villanueva, J. Appl. Phys. **91**, 5116 (2002).
- [10] Y. Takahashi, Y. Ono, A. Fujiwara and H. Inokawa, J. Phys: Condens. Matter **14**, 995 (2002).
- [11] A. Fissel, Physics Reports **379**, 149 (2003).
- [12] J. J. Berzelius *et al.*, Ann. Phys. Chem. **169**, 208 (1824).
- [13] E. G. Acheson, Chem. News **68**, 179 (1893).

-
- [14] T. C. Martin, *Nikola Tesla's Untersuchungen uber Mehrphasenstrome höherer Spannung und Frequenz*, German translation of collected lectures by H.Maser, (Halle/Saale,1895), pp.136-255.
- [15] N. J. Round, A note on Carborundum, *Electr. World* **30**, 309 (1907).
- [16] S. Dimitrijevic and P. Jamet, *Microelectronics Reliability* **43**, 225 (2003).
- [17] J. A. Cooper Jr. and A. Agarwal, *Proc. of IEEE* **90**, 956 (2002).
- [18] R. I. Scace and G. A. Slack, *J. Chem. Phys.* **30**, 1551 (1959).
- [19] V. F. Tsvetkov, S. T. Allen, H. S. Kong, and C. H. Carter, Jr., *Recent Progresses in SiC Crystal Growth, in Silicon Carbide and Related Materials, ser. 142*. Bristol, U.K.: Inst. of Physics, 1996, Inst. of Physics Conference Series.
- [20] P. G. Neudeck, W. Huang and M. Dudley, *Solid-State Electron.***42**, 2157 (1998).
- [21] H. Lendenmann *et al.*, *Mater. Sci. Forum* **353–356**, 727 (2001).
- [22] R. K. Malhan, H. Nakamura, S. Onda, D. Nakamura and K. Hara, *Mater. Sci. Forum* **433436**, 917 (2003).
- [23] D. Nakamura *et al.*, *Nature* **430**, 1009 (2004).
- [24] A. R. Powell and L. B. Rowland, *Proc. IEEE* **90**, 942 (2002).
- [25] W.J. Schaffer, G. H. Negley, K. G. Irvine, J. W. Palmour, *Conductivity Anisotropy in Epitaxial 6H and 4H SiC. Diamond SiC Nitride Wide Bandgap Semicond* 1994; 339:5957.
- [26] F. Herman, J. P. Van Dyke and R. L. Kortum, *Mat. Res. Bull.***4**, 5167 (1969).
- [27] L. A. Hamstreet and C. Y. Fong, in *Silicon Carbide-1973*, edited by R. C. Marshall, J. W. Faust and C. E. Ryan (Univ. of South Carolina Press, Columbia, South Carolina 1974), pp. 284.

-
- [28] W. R. L. Lambrecht, S. Limpijumnong, S. N. Rashkeev and B. Seagall, *Phys. Stat. Sol.* **202**, 5 (1997).
- [29] S M Sze, *Physics of Semiconductor Devices*, 2nd edition. Wiley-Interscience, New York (1981).
- [30] G L Harris, *Properties of SiC*. Institute of Electrical Engineers, London (1995).
- [31] W J Choyke, H Matsunami and G Pensl, *Silicon Carbide (A Review of Fundamental Questions and Applications to Current Device Technology)*. Wiley-VCH, Berlin (1997)
- [32] G Pensl, H Morkoc, B Monemar and E Janzen, *Materials Science Forum* **264**, 1606 (1998).
- [33] W. R. L. Lambrecht and B. Seagall, *Phys. Rev.* **52**, 2249 (1995).
- [34] C. Persson and U. Lindefelt, *J. Appl. Phys.* **82**, 5496 (1997).
- [35] Weber et al, *Microelectronics Engineering* **22**, 253 (1993).
- [36] H. Matsunami, Fellow, T. kimoto and H. Yano, *IEICE Trans. Electron* **E86-c**, 1943 (2003).
- [37] M. Maekawa, A. Kawasuso, M. Yoshikawa and H. Itoh, *Appl. Surf. Science* **216**, 365 (2003).
- [38] K. Fukuda, W. J. Cho, K.Arai, S. Suzuki, J. Senzaki and T. Tanaka, *Appl. Phys. Lett.* **77**, 866 (2002).
- [39] V. V. Afanas'ev, M. Bassler, G. pensl and M. J schulz, *Microelectronic Engineering* **28**, 197 (1995).
- [40] V. V. Afanas'ev, Atesmans, M. Bassler, G. Pensl and M. J. schulz, *Appl. Phys. Lett.* **76**, 336 (2000).

-
- [41] S. Suzuki, H. Shinsuke, R. Kosugi, J. Senzaki, W.-J. Cho and K. Fukuda, *J. Appl. Phys.* **92**, 6230 (2002).
- [42] P. Godignon, E. Morvan, X. Jordá, M. Vellvehi, D. Flores and J. Rebollo, *Microelectronic Journal* **32**, 503 (2001).
- [43] J. N. Shenoy, J. A. Cooper and M. R. Melloch, *IEEE Electron Dev. Lett.* **18**, 93 (1997).
- [44] H. J. Seemann, *Phys.Z* **30**, 1929 (1929).
- [45] V. V. Afanas'ev, A. Stesmans and C. I. Harris, *Mater. Sci. Forum* **264–268**, 857 (1998).
- [46] R. Schörner, P. Friedrichs, D. Peters and D. Stephani, *IEEE Electron Dev. Lett.* **20**, 241 (1999).
- [47] G. Y. Chung, C. C. Tin, J. R. Williams, K. McDonald, M. Di Ventra, S. T. Pantelides, L. C. Feldman and R. A. Weller, *Appl. Phys. Lett.* **76**, 1713 (2000).
- [48] G. Y. Chung, C. C. Tin, J. R. Williams, K. McDonald, R. K. Chanana, R. A. Weller, S. T. Pantelides, L. C. Feldman, O. W. Holland, M. K. Das and J. W. Palmour, *IEEE Electron Dev. Lett.* **22**, 176 (2001).
- [49] C.-Y. Lu, J. A. Cooper Jr., G. Y. Chung, J. R. Williams, K. McDonald and L. C. Feldman, *Mater. Sci. Forum* **389–393**, 997 (2001).
- [50] R. Schörner, P. Friedrichs, D. Peters, D. Stephani, S. Dimitrijević and P. Jamet, *Appl. Phys. Lett.* **80**, 4253 (2002).
- [51] R. F. Pierret, *Field Effect Devices, Modular Series On Solid State Devices Vol. IV*, Addison Wesley, Reading, MA (1990).
- [52] R. S. Muller and T. I. Kamins, *Device Electronics for Integrated Circuits 2nd edition*, Wiley (1986).

-
- [53] E. H. Nicollian and J. R. Brews, *MOS (Metal Oxide Semiconductor) Physics and Technology*, Wiley Interscience (1982).
- [54] R. F. Pierret, *Advanced Semiconductor Fundamentals, Modular Series On Solid State Devices Vol. VI*, Addison Wesley (1996).
- [55] B. K. Ridley, *Quantum Processes in Semiconductors 4th edition*, Oxford Press (1999).
- [56] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics*, Saunders College Pub. (1976).
- [57] R. L. Burden and J. D. Faires, *Análise Numérica*, Ed. Thomson (2003).
- [58] S. L. Chuang, *Physics of Optoelectronic Devices, J. W. Goodman Ed., Series in Pure and Applied Optics*, Wiley (1995).
- [59] D. Vasileska, *J. of Modeling and Simulation of Microsystems* **1**, 49 (1999).
- [60] T. Ando, A. B. Fowler and F. Stern, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 437 (1982).
- [61] Y. T. Hou, M. F. Li, Y. Jin and W. H. Lai, *J. Appl. Phys.* **91**, 258 (2002).
- [62] F. Jiménez-Molinos, F. Gámiz, A. Palma, P. Cartujo and J. A. López-Villanueva, *J. Appl. Phys.* **91**, 5116 (2002).
- [63] L. F. Register, E. Rosenbaum and K. Yang, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 457 (1999).
- [64] Khairurrijal, W. Mizubayashi, S. Miyazaki and M. Hirose, *J. Appl. Phys.* **87**, 3000 (2000).
- [65] W. Magnus and W. Schoenmaker, *J. Appl. Phys.* **88**, 5833 (2000).
- [66] A. Rahman and A. Haque, *Solid-State Electronics* **45**, 755 (2001).
- [67] K.-J. Bathe, *Finite Element Procedures*, Prentice Hall (1996).

-
- [68] Z. Bai, J. Demmel, J. Dongarra, A. Ruhe and H. van der Vorst, *Templates for the Solution of Algebraic Eigen-value Problems: A Practical Guide*, SIAM Publications, Philadelphia.
- [69] H. K. Gummel, *IEEE Trans. on Electron Devices* ED-11, 455 (1964).
- [70] J. W. Slotboom, *Electronics Letters* 5, 677 (1969).
- [71] C. E. Korman and I. D. Mayergoyz, *J. Appl. Phys.* 68, 1324 (1990).
- [72] L. N. Trefethen and D. Bau III, *Numerical Linear Algebra*, SIAM Publications, Philadelphia (1997).
- [73] R. B. Lehoucq, D. C. Sorensen and C. Yang, *ARPACK Users Guide: Solution of Large-Scale Eigenvalue Problems with Implicitly Restarted Arnoldi Methods*, SIAM Publications, Philadelphia, (1998).
- [74] R. Barret, M. Berry, T. F. Chan, J. Demmel, J. Donato, J. Dongarra, V. Eijkhout, R. Pozo, C. Romine and H. Van der Vorst, *Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods*, Siam Publications, Philadelphia (1994).
- [75] T. Kerkhoven, A. T. Galick, U. Ravaioli, J. H. Arends and Y. Saad, *J. Appl. Phys.* **68**, 3461 (1990).
- [76] T. Kerkhoven, M. W. Raschke and U. Ravaioli, *J. Appl. Phys.* **74**, 1199 (1993).
- [77] F. Stern, *Journal of Comp. Phys.* **6**, 56 (1970).
- [78] C. Raynaud and J.-L. Autran, *J. Appl. Phys.* **86**, 2232 (1999).
- [79] J. S. de Sousa, V. N. Freire and E.F. da Silva Jr., *Appl. Surf. Science* **237**, 533 (2004).

Trabalhos Recentes

PARTICIPAÇÃO CONGRESSOS NACIONAIS E INTERNACIONAIS

[1] *The Role of Nonabrupt Interfaces in SiC/SiO₂ MOS Devices*, E. L. de Oliveira, J. S. de Sousa, V. N. Freire and E. F. da Silva Jr., **III Encontro da Rede Cooperativa NANOSEMIMAT**, Salvador, Bahia, Brazil, Março de 2003.

[2] *The Role of Nonabrupt Interfaces in SiC/SiO₂ MOS Devices*, E. L. de Oliveira, J. S. de Sousa, V. N. Freire and E. F. da Silva Jr., **XXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada**, Poços de Caldas, Minas Gerais, Brasil, Maio de 2004.

[3] *Numerical Simulation of Si_{1-x}Ge_x/HfO₂/Si MOS Devices*, J. Costa e Silva, E. L. de Oliveira, J. A. K. Freire, J. S. de Sousa, V. N. Freire, G. A. Farias and E. F. da Silva Jr., **XII International Conference on Superlattices, Nanostructures and Nanodevices**, Cancun, Mexico, Julho de 2004.

[4] *The Role of Nonabrupt SiO₂/SiC Interfaces in SiC MOS Devices: Quantum Mechanical Simulations and Experiments*, E. L. de Oliveira, J. S. de Sousa, V. N. Freire, E. A. de Vasconcelos and E. F. da Silva Jr., **27th International Conference on the Physics of Semiconductors**, Flagstaff, Arizona, USA, Julho de 2004.

ARTIGOS ACEITOS E SUBMETIDOS PARA PUBLICAÇÃO

[1] *Numerical Simulation of $Si_{1-x}Ge_x/HfO_2/Si$ MOS Devices*, J. Costa e Silva, E. L. de Oliveira, J. A. K. Freire, J. S. de Sousa, V. N. Freire, G. A. Farias and E. F. da Silva Jr., aceito para publicação no periódico *Physica Statu Solidi* (c).

[2] *The Role of Nonabrupt SiO_2/SiC Interfaces in SiC MOS Devices: Quantum Mechanical Simulations and Experiments*, E. L. de Oliveira, J. S. de Sousa, V. N. Freire, E. A. de Vasconcelos and E. F. da Silva Jr., aceito para publicação no 27th ICPS Proceedings.

[3] *Gate Inversion Effeect in $Si_{1-x}Ge_x/HfO_2/Si$ MOS Devices*, J. Costa e Silva, E. L. de Oliveira, J. S. de Sousa, J. A. K. Freire, V. N. Freire and G. A. Farias, submetido ao periódico *Applied Physics Letters*.