# Mobilidade anisotrópica no semicondutor 6H-SiC

Anisotropic mobility in the SiC semiconductor Movilidad anisotrópica en el semiconductor SiC

### **Clóves Gonçalves Rodrigues**

Pontifícia Universidade Católica de Goiás cloves@pucgoias.edu.br

Ricardo Tadeu Ferracioli Universidade Paulista (UNIP) ricardof.planeta@gmail.com

### Resumo

Neste trabalho, foi deduzido teoricamente a velocidade de deriva, o deslocamento e a mobilidade dos portadores de carga em um semicondutor de grande interesse tecnológico atual, o semicondutor 6H-SiC. A caracterização e o conhecimento destas propriedades são de extrema importância para a fabricação de componentes eletrônicos pela indústria de semicondutores. Para o estudo aqui realizado, foi utilizada uma equação diferencial quântica de transporte. A aplicação se deu no semicondutor 6H-SIC dopado tipo n levando-se em consideração variações da temperatura (de 0º a 100°C) e da intensidade e direção do campo elétrico aplicado no semicondutor. O principal resultado obtido é que a mobilidade eletrônica é maior quando o campo elétrico é aplicado na direção perpendicular ao eixo c da rede cristalina do semicondutor 6H-SIC.

Palavras-chave: Semicondutores. Mobilidade eletrônica. Carbeto de silício. 6H-SIC.

### Abstract

In this work, the drift velocity, displacement and mobility of charge carriers were theoretically deduced in a semiconductor of great current interest, the 6H-SiC semiconductor. The characterization and knowledge of these properties are extremely important for the manufacture of electronic components by the semiconductor industry. For the study carried out here, a quantum differential transport equation was used. The application took place in the semiconductor 6H-SiC n-doped, taking into account variations in the temperature and the electric field applied in the semiconductor. The main result obtained is that the electronic mobility is greater when the electric field is applied in the direction perpendicular to the c axis of the crystalline lattice of the 6H-SiC semiconductor.

Keywords: Semiconductors. Electron mobility. Silicon carbide. 6H -SiC.

### Resumen

En este trabajo, la velocidad de deriva, el desplazamiento y la movilidad de los portadores de carga se dedujeron teóricamente en un semiconductor de gran interés tecnológico hoy, el semiconductor 6H-SiC. La caracterización y el conocimiento de estas propiedades son extremadamente importantes para la fabricación de componentes electrónicos por parte de la industria de semiconductores. Para el estudio realizado aquí, se utilizó una ecuación de transporte diferencial cuántico. La aplicación se realizó en el semiconductor dopado 6H-SIC tipo n teniendo en cuenta las variaciones de temperatura y el campo eléctrico aplicado en el semiconductor. El principal resultado obtenido es que la movilidad electrónica es mayor cuando el campo eléctrico se aplica en la dirección perpendicular al eje c de la red cristalina de semiconductores 6H-SIC.

Palabras clave: Semiconductores. Movilidad electrónica. Carburo de silicio. 6H-SiC.

# Introdução

Um semicondutor de grande interesse atual é o Carbeto de Silício (SiC). Inúmeras aplicações eletrônicas e optoeletrônicas tem sido propostas com base nas propriedades eletrônicas e ópticas básicas do SiC. Existem cinco aplicações primárias de materiais à base de SiC: 1) microestruturas, 2) dispositivos opto-eletrônicos, 3) eletrônicos de alta temperatura, 4) eletrônicos rígidos de radiação e 5) dispositivos de alta potência e alta frequência. As aplicações de microestruturas incluem máscaras de raios-X e estruturas micro-usinadas, como diafragmas de alto-falantes e ferramentas especiais de microaplicação. Aplicações optoeletrônicas incluem substratos para a família de dispositivos de nitretos, LEDs (diodos emissores de luz), detectores de ultravioleta, células solares, memórias SiC, inversores SiC, etc. (BALIGA, 2016; PERSSON; SILVA, 2005).

Devido à grande largura de banda dos SiC, quase todos os dispositivos fabricados em SiC podem ser considerados para aplicações em altas temperaturas. Eletrônica de reatores nucleares, sistemas militares e capacidade de sobrevivência de eletrônica de espaço profundo são muito aprimorados com a aplicação do SiC. A condutividade térmica e a alta mobilidade de campo dos SiC permitirão maior densidade de potência e operação de alta frequência (PERSSON; SILVA, 2005; PHAN, 2017; SADDOW, 2015).

Neste trabalho foi deduzido teoricamente a velocidade de deriva, o deslocamento e a mobilidade dos portadores de carga no semicondutor

6H-SiC dopado tipo *n* e submetido a um campo elétrico constante. A densidade de portadores de carga em um semicondutor pode ser controlada mediante a adição de impurezas na rede cristalina. Essas impurezas são átomos com valência *maior* ou *menor* que o átomo que forma a rede cristalina do cristal semicondutor. No primeiro caso estas impurezas são chamadas de *doadoras* e no segundo caso as impurezas são chamadas de *receptoras*. O processo de adição de impurezas é denominado de *dopagem*. No caso das impurezas doadoras surgem os elétrons livres de condução, por isto o semicondutor é chamado de "tipo n" (n de negativo) visto que o transporte de cargas será realizado por partículas negativas: os elétrons livres (KITELL, 1996).

E no caso das impurezas receptoras surgem os chamados *buracos*. O elétron do semicondutor que não forma ligação covalente com a impureza receptora, estará preso ao núcleo apenas pela atração iônica, e com uma pequena quantidade de energia poderá se libertar e vagar pela estrutura. Sempre que um elétron se liberta, deixará um "vazio" em uma das ligações covalentes do cristal. Esse vazio é chamado de buraco. Os buracos também podem servir para o transporte de cargas. Quando uma ligação covalente está incompleta, isto é, quando existe um buraco, o elétron de um átomo vizinho pode deixar sua ligação covalente e preencher esse "vazio". Com isso, o elétron deixa um buraco em sua posição original, que por sua vez pode ser preenchido por outro elétron de uma ligação vizinha. No que se refere ao transporte de cargas, o buraco se comporta como uma carga positiva, com o mesmo valor absoluto da carga do elétron, e neste caso o semicondutor é chamado de dopado "tipo p" (p de positivo) visto que o transporte de cargas será realizado por partículas positivas. Para considerar o buraco uma entidade real, é preciso lembrar que os buracos não passam de "vazios" nas ligações covalentes do cristal, e destacar que o movimento dos elétrons e o movimento dos buracos se realiza de modo diferente: os elétrons deslocam-se no cristal de forma mais livre e os buracos só podem passar de ligação covalente para ligação covalente (KITELL, 1996).

Os elétrons livres e buracos de um semicondutor são chamados de portadores, pois é através deles que se realiza o transporte de

cargas elétricas de um ponto para outro do semicondutor. Assim os semicondutores dopados em que o transporte de carga é realizado pelos elétrons livres são chamados de "tipo n", e os semicondutores dopados em que o transporte de carga é realizado pelos buracos são chamados de "tipo p".

O *Carbeto de Silício*, cuja fórmula química estável é SiC, compõe-se de uma estrutura cristalina que consiste no empilhamento fechado de camadas duplas de átomos de Si e C. Um conjunto de átomos (Si ou C) é deslocado ao longo do eixo principal de simetria por um quarto da distância entre as camadas similares mais próximas. A ligação de silício e átomos de carbono é 88% covalente e 12% iônica, com uma distância entre os átomos de Si e C de 1,89 Å. Cada átomo de Si ou C está rodeado por quatro átomos de C ou Si em ligações sp3 tetraédricas fortes. O empilhamento das camadas duplas segue uma das três possíveis posições relativas. Elas são arbitrariamente rotuladas como A, B e C, como ilustrado na Figura 1 (IZHEVSKYI, 2000).



Figura 1 – Alguns politipos do Carbeto de Silício. Fonte: (MITRIDIS, 2011).

Um aspecto único do SiC são as sequências de empilhamento dessas três camadas duplas, que é a fonte de grandes quantidades de formas cristalográficas chamadas de *politipos*. Politipismo é um polimorfismo unidimensional que é um resultado da sequência de empilhamento. A grande maioria destes politipos de SiC, possuem propriedades de transporte anisotrópicas, mas o grau de anisotropia é diferente para cada politipo (atualmente são conhecidos mais de 200 politipos de SiC). Esta anisotropia está associada às diferentes massas efetivas dos portadores que diferem significativamente entre orientações paralelas ao eixo *c*, e aquela ao longo do plano basal perpendicular ao eixo *c* (IZHEVSKYI *et al.*, 2000).

A única forma cúbica de SiC é chamada de carbeto de silício beta ( SiC), que possui uma sequência de empilhamento ABCABCABC... Outra maneira conveniente de ver esses politipos é a notação de Ramsdell, que é um número seguido por uma letra. O número representa o número de camadas duplas na sequência de empilhamento e a letra representa a estrutura cristalina. Por exemplo, temos 3C para cúbico. Todos os tipos hexagonais (H) e romboédricos (R) são comumente referidos como SiC e o cúbico por SiC. Se as camadas duplas tiverem a mesma posição adjacente, elas são hexagonais. Por exemplo, 2H com a sequência de empilhamento ABABAB é cem por cento hexagonal, ou seja, sua fração hexagonal é igual a um (IZHEVSKYI *et al.*, 2000).



Figura 2 – Estruturas cristalinas dos politipos 3C-SiC, 4H-SiC e 6H-SiC. Fonte: (JOSHUA, 2016).

Os politipos mais comuns do SiC são: o 3C-SiC, o 4H-SiC e o 6H-SiC ilustrados na Figura 2 (FRAGA *et al.*, 2014). Neste trabalho estudamos as propriedades de transporte do SiC na fase 6H, ou seja, o semicondutor 6H-SiC. Salientamos que os resultados das propriedades de transporte do SiC na fase 3C e 4H foram recentemente publicados (CORRÊA; RODRIGUES; LUZZI, 2019; VASCONCELOS; RODRIGUES; LUZZI, 2019a, 2019b).

O carbeto de silício na fase 6H, ou seja, 6H-SiC (veja Figura 3), tem se mostrado bastante promissor por suas possíveis aplicações em condições extremas como altas temperaturas, alta pressão, alta tensão, alta frequência e exposição a altos níveis de radiação (FRAGA *et al.*, 2014). O 6H-SiC possui propriedades de transporte anisotrópicas. Esta anisotropia está associada às diferentes massas efetivas dos portadores que diferem significativamente entre orientações paralelas ao eixo *c*, que chamamos de de  $m_{\parallel}$ , e aquela ao longo do plano basal perpendicular ao eixo *c*, chamada de  $m_{\perp}$ .



Figura 3 – Estrutura cristalina do 6H-SiC. Fonte: Matias (2016).

Neste trabalho estudamos o transporte de portadores no 6H-SiC quando a direção de transporte está ao longo do eixo *c*, ou quando a direção de transporte está no plano perpendicular a ele (plano formado pelos eixos *a b* da Figura 3). A direção de transporte é determinada pela direção da aplicação do campo elétrico  $\vec{E}$ . A direção de transporte é dita paralela ao eixo *c* quando o campo elétrico  $\vec{E}$  é aplicado nesta direção ( $E_{\parallel}$ ) e consequentemente se usa  $m_{\parallel}$  para os cálculos das propriedades de transporte do semicondutor. Já a direção de transporte é dita perpendicular ao eixo *c* quando o campo elétrico é aplicado nesta direção de transporte do semicondutor. Já a direção de transporte é dita perpendicular ao eixo *c* quando o campo elétrico é aplicado nesta direção ( $E_{\perp}$ ) e consequentemente se usa  $m_{\perp}$  para os cálculos das propriedades de transporte do semicondutor.

# Metodologia

Nesta seção são obtidos a velocidade, o deslocamento, e a mobilidade dos elétrons de condução em um semicondutor dopado tipo n submetido a um campo elétrico  $\vec{E}$  aplicado na direção paralela  $(E_{\parallel})$  ou perpendicular  $(E_{\perp})$  ao eixo cristalográfico c.

Na ausência de forças externas, em um meio material, o número de elétrons cruzando o plano imaginário em uma direção é exatamente igual ao número de elétrons cruzando na direção oposta em qualquer instante no tempo, de maneira que o fluxo líquido em qualquer direção específica é zero (veja Figura 4).



Figura 4 – Representação do movimento dos elétrons em um meio material qualquer. Fonte: Autores.

Devido ao fenômeno de agitação térmica, os elétrons no cristal possuem um movimento randômico, que indica que o elétron que abandona uma certa região (A) retorna à mesma região (A) após diversos percursos randômicos, isto é, percursos sem direção determinada. No entanto, quando um campo elétrico constante é aplicado a um material os elétrons adquirem um movimento ordenado com uma velocidade chamada de *velocidade de deriva* (veja Figura 5).



Figura 5 - Processo de deriva de portadores no semicondutor devido a um campo elétrico aplicado.

Fonte: Autores.

Na caracterização do transporte eletrônico no semicondutor 6H-SiC no estado transitório será considerado que, inicialmente, não há forças externas atuando sobre os elétrons de condução no semicondutor. Com a aplicação abrupta de um campo elétrico externo  $\vec{E}$ , passa a haver uma força atuando sobre os elétrons de condução. Como consequência da aplicação desta força, os elétrons de condução reduzem o seu movimento aleatório e começam a acelerar de forma ordenada na direção do campo elétrico  $\vec{E}$  e os elétrons de condução passam a sofrer a ação de forças de resistência ao seu movimento devido às colisões com a estrutura da rede cristalina do semicondutor.

Quando um semicondutor é submetido a um campo elétrico o movimento dos portadores de carga é governado pela força externa  $\vec{F}_{ext}$ (tendo como origem o campo elétrico aplicado) e por uma força de resistência ao movimento  $\vec{f}$ . Para descrevermos o movimento do elétron no semicondutor submetido a um campo elétrico constante, tomaremos como base a lei de força em uma forma semi-clássica, que estabelece que a variação do momento total médio,  $\langle \vec{P} \rangle$ , é diretamente proporcional à resultante das forças médias que atuam sobre ele, ou seja

$$\frac{d\langle \vec{P} \rangle}{dt} = \sum \langle \vec{F} \rangle = \vec{F}_{ext} + \vec{f} .$$
(1)

O momento total médio,  $\langle \vec{P} \rangle$ , calculado de forma quântica é (veja Apêndice A):

$$\langle \vec{P}(t) \rangle = m_e \, \vec{v}(t) \,,$$
 (2)

onde  $\vec{v}(t)$  é a velocidade e  $m_e$  é a massa efetiva dos portadores. A massa efetiva de portadores é uma massa que permite usar a segunda lei de Newton da Física Clássica. Isto porque a massa efetiva engloba os efeitos quânticos do potencial interno da rede cristalina sobre o portador. Desta forma a definição de massa efetiva permite tratar os portadores como partículas clássicas de massa igual à sua massa efetiva. Salientamos que a força de resistência ao movimento  $\vec{f}$  é também uma força média calculada de forma quântica. Substituindo a Eq. (2) na Eq. (1) temos:

$$m_e \ \frac{d\vec{v}(t)}{dt} = \vec{F}_{ext} + \vec{f}.$$
 (3)

Por ser o campo elétrico um campo vetorial, temos associado a cada ponto do espaço um vetor Campo Elétrico, portanto a força elétrica  $\vec{F}_{el}$ que atua sobre um elétron tem a mesma direção e sentido oposto à orientação do vetor campo elétrico que atua sobre o elétron, conforme ilustra a Figura 6 (os vetores não estão em escala). Isto acontece porque o elétron tem uma carga negativa.



Figura 6 – Representação das forças que atuam sobre o elétron quando este é submetido a um campo elétrico E <sup>→</sup>. Fonte: os autores.

A força elétrica é dada por:

$$\vec{F}_{el} = q\vec{E} = (-e)(-Et) = eEt.$$
(4)

Os portadores de carga (elétrons de condução) se movimentam em virtude das diferenças de potencial elétrico aplicado, e durante o deslocamento destas cargas ocorrem interações (choques e espalhamentos) entre os portadores e a cadeia de átomos da rede. Isto causa alguma resistência ao movimento destes portadores. Esta resistência à passagem das cargas portadoras é devido à resistividade do material, a qual é uma característica intrínseca de cada material, e está associado à força de resistência  $\vec{f}$  ao movimento do elétron. Essa força de resistência  $\vec{f}$  ao movimento do elétron de condução é proporcional à velocidade  $\vec{v}$  do elétron, ou seja (RODRIGUES; VASCONCELLOS; LUZZI, 2000):

$$\vec{f} = -\alpha \vec{v} , \qquad (5)$$

onde  $\alpha$  é um parâmetro que está associado à resistividade elétrica do semicondutor e é de natureza quântica (RODRIGUES; VASCONCELLOS; LUZZI, 2000). Substituindo as Eqs. (4) e (5) na Eq. (3), temos:

$$m_e \ \frac{d\vec{v}}{dt} = eE\hat{t} - \alpha\vec{v} . \tag{6}$$

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

$$m_e \, \frac{dv}{dt} = eE - \alpha v \,, \tag{7}$$

sendo  $m_e$ , e, E e  $\alpha$  quantidades positivas. Notamos aqui uma semelhança na estrutura da Eq. (7) com a equação de Newton-Langevin (TOMÉ; OLIVEIRA, 2001). A Eq. (7) pode ser solucionada de forma exata usando-se técnicas de integração, obtendo-se a seguinte expressão:

$$v(t) = \frac{eE}{\alpha} \left( 1 - e^{-\beta t} \right), \tag{8}$$

onde  $\beta = \alpha/m_e$ .

Analisemos a Eq. (8). Nota-se que para t = 0 temos v(0) = 0, como era de se esperar, pois, no instante inicial de tempo ( $t_0 = 0$ ) o campo

elétrico é ligado. Verifiquemos a taxa de crescimento ou decrescimento da função v(t). Derivando a Eq. (8) em relação ao tempo t obtemos:

$$\frac{\partial v(t)}{\partial t} = \frac{eE}{\alpha} \left( 1 + \beta e^{-\beta t} \right), \tag{9}$$

como *e*, *E*,  $\alpha$  e  $\beta$  são quantidades positivas, conclui-se da Eq. (9) que:  $\partial v(t)/\partial t > 0$ , ou seja, a função v(t) cresce continuamente em função do tempo *t*, e não possui pontos de máximo ou mínimo, já que para que isto acontecesse deveríamos ter em algum instante de tempo específico t' a condição:  $[\partial v/\partial t]_{t=t'} = 0$ .

No entanto, nota-se que a função v(t) possui um limite quanto  $t \rightarrow \infty$ . Tomando o limite de v(t) com  $t \rightarrow \infty$  na Eq. (8) obtêm-se:  $\lim_{t \rightarrow \infty} v(t) = e E/\alpha$ . Assim a velocidade v(t) alcança um valor máximo,  $v_{max} = e E/\alpha$ , e é dito que o sistema atingiu o *estado estacionário*; já o intervalo de tempo em que o sistema possui uma forte dependência temporal é chamado de *estado transiente*. Para exemplificar, a Figura 7 ilustra o comportamento da função v(t).



Figura 7 – Velocidade v(t) conforme a Eq. (8) tomando-se o caso particular:  $eE/\alpha=1 e \beta=1.(1)$ regime transiente, (2) regime estacionário.

Fonte: Autores.

O intervalo de tempo  $t_s$  que o sistema leva para atingir o estado estacionário irá depender do valor de  $\beta$ , ou seja, do parâmetro  $\alpha$  e da massa efetiva  $m_e$ , conforme ilustrado na Figura 8.



Figura 8 – Comportamento de v(t) para dois valores de  $\beta$ . Fonte: Autores.

Numa grossa análise, o sistema atinge o estado estacionário quando a exponencial da Eq. (8) obedecer à condição:  $e^{-\beta t_s} \ll 1 \Rightarrow t_s \gg 1/\beta \Rightarrow t_s \gg m_e /\alpha$ . Em experimentos de espectroscopia temporal ultra-rápida, verifica-se que este tempo  $t_s$  é ultra-curto, aproximadamente da ordem de picosegundos (ps), para o caso de semicondutores submetidos a campos elétricos (ALFANO, 1984). A velocidade dos portadores no semicondutor no estado estacionário ( $v_{est}$ ) é, portanto, igual a  $v_{max}$ , ou seja:

$$v_{est} = \frac{eE}{\alpha},$$
 (10)

Uma importante propriedade de transporte dos materiais semicondutores é a mobilidade eletrônica  $\mu$ , definida como:

$$\mu = \frac{v_{est}}{E},\tag{11}$$

Isto é, a razão entre a velocidade dos elétrons de condução no estado estacionário e o campo elétrico aplicado.

A partir da Eq. (8) podemos encontrar a equação da posição do elétron, lembrando que v = dx/dt. Dessa forma, após alguns desenvolvimentos matemáticos, temos a expressão:

$$x(t) = \frac{eE}{\alpha} \left[ t - \frac{m_e}{\alpha} \left( 1 - e^{-\alpha t/m_e} \right) \right].$$
 (12)

Analisemos a Eq. (12) para pequenos e grandes valores de tempo t. Para pequenos valores de t podemos utilizar a expansão em série de Taylor (RODRIGUES, 2017) da função exponencial:

$$e^{-y} = 1 - y + \frac{y^2}{2!} - \cdots$$

Tomando  $y = \alpha t/m_e$ , temos:

$$e^{-\alpha t/m_e} \approx 1 - \frac{\alpha t}{m} + \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{\alpha t}{m_e}\right)^2.$$
 (13)

Substituindo (13) em (12) obtêm-se:

$$x(t) \approx \frac{eE}{2m_e} t^2, \tag{14}$$

a qual, relembramos, é válida somente para tempos pequenos. Notase pela Eq. (14) que x(t) neste caso possui um comportamento quadrático em relação a t e o interessante fato que é independente do parâmetro  $\alpha$ . Isto significa que para tempos muito pequenos o deslocamento do elétron ocorre livremente sem ainda ter sentido o efeito da resistência elétrica do meio material.

Analisemos a Eq. (12) para tempos t grandes. Neste caso a exponencial que aparece na Eq. (12) fica:

$$\lim_{t\to\infty}e^{-\alpha t/m_e}\approx 0. \tag{15}$$

Substituindo (15) em (12) temos:

$$x(t) = \frac{-eEm_e}{\alpha^2} + \frac{eE}{\alpha}t,$$
 (16)

ou seja, para tempos muito grandes o comportamento de x(t) é linear em relação a t. Nas Eqs. (8) e (12), as quais serão utilizadas na próxima seção, o parâmetro  $\alpha$  é dado por (RODRIGUES; VASCONCELLOS; LUZZI, 2000):

$$\alpha = \frac{e^2 \omega^2 \Gamma}{3} \sqrt{\frac{2(m_e)^2}{\pi(\kappa_B T)^3} \frac{2e^y K_1(y)}{e^{2y} - 1} + \frac{(2\pi)^4 E_{1e}^2 \sqrt{(m_e)^2 (2\kappa_B T/\pi)^3}}{3h^4 \rho(v_s)^2}}$$
 7)

sendo  $\Gamma = 1/\epsilon_{\infty} - 1/\epsilon_0$  e  $y = h\omega/4\pi k_B T$ , onde *e* é a carga elementar do elétron,  $\omega$  a frequência dos fônons ópticos,  $m_e$  a massa efetiva do elétron,  $\epsilon_0$  a constante eletrostática estática,  $\epsilon_{\infty}$  a constante eletrostática de alta frequência, *T* a temperatura da rede cristalina,  $K_1(y)$  a função modificada de segunda espécie de Bessel com argumento *y*,  $\rho$  a densidade do material,  $v_s$  a velocidade do som no material,  $E_{1e}$  o potencial de deformação acústico,  $\kappa_B$  a constante de Boltzmann, e *h* a constante de Planck. Os valores destes parâmetros para o semicondutor 6H-SiC são apresentados na Tabela 1.

Na próxima seção utilizaremos as Eqs. (8), (11) e (12) para determinar a velocidade, o deslocamento e a mobilidade dos elétrons de condução no semicondutor 6H-SiC dopado tipo n submetido a um campo elétrico constante.

Tabela 1 – Parâmetros do semicondutor 6H-SiC.

Parâmetros	Símbolo	Valor	Referência
Constante dielétrica estática	$\epsilon_{0}$	9,7	10
Constante dielétrica óptica	$\epsilon_{\infty}$	6,5	10
Frequência de oscilação polar óptica	ω	1,82x10 <sup>14</sup> Hz	10
Massa efetiva do elétron ( $E_{\perp}$ )	$m_{e\perp}$	0,42 m <sub>0</sub>	11
Massa efetiva do elétron ( $E_{_{\parallel}}$ )	$m_{e\parallel}$	2,0 m <sub>0</sub>	11
Potencial de deformação acústico	E <sub>1e</sub>	21,5 eV	12
Densidade	ρ	3,2 g/cm <sup>3</sup>	11
Velocidade do som	$v_s$	1,37x10 <sup>6</sup> cm/s	11

## **Resultados e discussão**

Utilizamos as Eqs. (8) e (12), e os dados contidos na Tabela 1 da seção anterior para plotar a velocidade e a posição dos elétrons de condução em função do tempo no semicondutor 6H-SiC dopado tipo *n*, quando o campo elétrico é aplicado paralelo ao eixo cristalográfico *c*,  $E_{\parallel}$ , ou quando o campo elétrico é aplicado perpendicular ao eixo cristalográfico *c*,  $E_{\perp}$ . As evoluções temporais das Eqs. (8) e (12) foram realizadas utilizando-se o software Mathematica versão 11.0 e os gráficos utilizando o software Origin versão 8.5. Para cada evolução temporal foi utilizado um valor de campo elétrico, a saber: 1 kV/cm, 2 kV/cm e 3 kV/cm.

Observando a Figura 9 nota-se que a velocidade do elétron de condução com o campo elétrico aplicado paralelo ao eixo c do semicondutor 6H-SiC é menor que a velocidade do elétron com o campo elétrico aplicado perpendicular ao eixo c. Além disso, de 0 a 0.5 ps, a velocidade cresce rapidamente e atinge um valor máximo, tornando-se constante conforme previsto pela Eq. (10).



Figura 9 – Velocidade do elétron no estado transiente no 6H-SiC. A Figura (a) refere-se ao campo elétrico aplicado perpendicularmente ao eixo *c* e a Figura (b) ao campo elétrico aplicado paralelamente ao eixo c.

Fonte: Autores.

Utilizando a Eq. (12), foi determinada a posição do elétron no semicondutor, em função do tempo, conforme ilustrado na Figura 10, para três valores de campo elétrico: 1 kV/cm, 2 kV/cm e 3 kV/cm. Analisando a Figura 10, nota-se que o elétron percorre uma distância maior no cristal semicondutor 6H-SiC quando o campo elétrico é aplicado perpendicularmente ao eixo *c*. Verifica-se também que, como indicado pela Eq. (14), para pequenos valores de tempo o comportamento de x(t) é quadrático em função de *t*, conforme previsto pela Eq. (14), e para tempos grandes é linear conforme a Eq. (16).



Figura 10 – Posição do elétron no semicondutor 6H-SiC. A Figura (a) refere-se ao campo elétrico aplicado perpendicular ao eixo c e a Figura (b) ao campo elétrico aplicado paralelo ao eixo c. Fonte: Autores.

A Figura 11 mostra a comparação entre os deslocamentos dos elétrons para um campo elétrico de intensidade de 3 kV/cm aplicado

perpendicular  $(E_{\perp})$  ou paralelo  $(E_{\parallel})$  ao eixo *c*. Nota-se que para  $E_{\perp}$  os elétrons percorrem um distância de 0.0374 µm em 2 ps enquanto que para  $E_{\parallel}$  uma distância de 0.00187 µm, isto é, com o campo elétrico aplicado perpendicularmente ao eixo *c* a distância percorrida pelo elétron é aproximadamente 20 vezes a distância percorrida com o campo elétrico aplicado paralelo ao eixo *c*.



Figura 11 – Posição do elétron, no estado estacionário, em função do tempo t para um campo elétrico de 3 kV/cm.

Essas informações são importantes porque possibilitam construir dispositivos com tamanhos específicos que podem levar ao dimensionamento mais eficiente dos custos de produção destes dispositivos.

No estado estacionário a velocidade de deslocamento do elétron torna-se constante, conforme vimos na Eq. (10), ou seja,  $v_{est} = e E/\alpha$ . Utilizando os dados do semicondutor 6H-SiC da Tabela 1, plotamos o comportamento da velocidade de deriva do elétron no estado estacionário em função do campo elétrico, fornecido pela Eq. (10), conforme apresentado na Figura 12. Observa-se que com o campo elétrico aplicado perpendicularmente ao eixo *c* a velocidade do elétron é maior que com o campo elétrico aplicado paralelamente ao eixo *c*. Verifica-se que neste intervalo de 0 a 3 kV/cm a velocidade estacionária dos elétrons de condução no semicondutor 6H-SiC aumenta de forma linear com o aumento da intensidade do campo elétrico aplicado, exibindo um comportamento ôhmico nesta faixa de campo elétrico aplicado. A mobilidade  $\mu$  pode ser obtida pela Figura 12 calculando-se a declividade da reta.



Figura 12 – Velocidade do elétron no estado estacionário em função do campo elétrico. Fonte: Autores.

Utilizando a Eq. (11) e os dados da Figura 12 obtemos que a mobilidade do elétron para o campo elétrico aplicado perpendicular ao eixo *c* é de 678,2 cm<sup>2</sup>/v.s, e para o campo elétrico aplicado paralelo ao eixo *c* é de 31,7 cm<sup>2</sup>/v.s, isto é, a mobilidade eletrônica perpendicular é aproximadamente 21,4 vezes a mobilidade eletrônica paralela ao eixo *c*.

A Figura 13 mostra a energia cinética por elétron,  $E_{cin}$ , no estado estacionário

$$E_{cin} = \frac{1}{2}m_e \ v_{est}^2, \tag{18}$$

em função do campo elétrico aplicado com intensidade de 0 a 3 kV/cm, sendo aplicado na direção paralela  $(E_{\parallel})$  ou perpendicular  $(E_{\perp})$  ao eixo *c*. A unidade da energia cinética está em meV (mili elétron-Volts), a qual é a unidade de energia mais adequada para as dimensões envolvidas. Nota-se da Figura 13 que no estado estacionário a energia cinética possui uma dependência quadrática com o campo elétrico. Isto pode ser verificado analiticamente substituindo a Eq. (10) na Eq. (18), resultando em:  $E_{cin} = (m_e \ e^2/2 \ \alpha^2)E^2$ .

Verifica-se pela Figura 13 que esta energia é da ordem de sub mev. Para uma simples comparação, a energia térmica por elétron de um gás de elétrons a uma temperatura de 300 kelvin é de aproximadamente 38,8 meV, enquanto que a energia de separação da primeira para a segunda banda de condução do semicondutor 6H-SiC é da ordem de eV (HEBALI *et al.*, 2019).



Figura 13 – Energia cinética por elétron em função do campo elétrico aplicado. Fonte: Autores.

A comparação desta energia cinética com esta energia de separação é importante porque se o elétron adquirir uma energia maior que esta energia de separação de banda do semicondutor ele pode sofrer uma transição para uma banda de energia mais elevada mudando consideravelmente o valor de sua massa efetiva  $m_e$ .

Nas Figs. de 9 a 13 utilizamos a temperatura ambiente com um valor fixo de 300 K. No entanto o parâmetro  $\alpha$  possui uma dependência com a temperatura da rede cristalina. A Figura 14 ilustra o comportamento da velocidade estacionária dos portadores de carga em função da temperatura da rede cristalina para as duas direções do campo elétrico ( $E_{\perp}$  e  $E_{\parallel}$ ) no 6H-SiC, com intensidades de campos elétricos de 1, 2 e 3 kV/cm. Com o aumento da temperatura, aumentase a vibração da rede cristalina, aumentando a possibilidade de colisão dos portadores de carga com os átomos da rede. Dessa forma, os portadores de carga perdem parte de sua energia de movimento,

fazendo com que a intensidade da velocidade seja reduzida com o aumento da temperatura da rede.

Apesar da mobilidade eletrônica não depender da intensidade do campo elétrico, nas condições aqui estudadas (baixos valores de campo elétrico – regime ôhmico), ela é influenciada pela temperatura da rede cristalina.



Figura 14 – Velocidade estacionária dos portadores de carga elétrica em função da temperatura da rede cristalina. A Figura (a) refere-se ao campo elétrico aplicado perpendicular ao eixo c e a Figura (b) ao campo elétrico aplicado paralelo ao eixo c. Fonte: Autores.

De forma análoga à velocidade, a mobilidade eletrônica também diminui com o aumento da temperatura. Para um campo elétrico de 3 kV/cm a mobilidade eletrônica tem uma redução de aproximadamente 67% de 0 a 100 °C, conforme ilustrado na Figura 15.



Figura 15 – Mobilidade eletrônica em função da temperatura para um campo elétrico com intensidade de 3 kV/cm. Fonte: Autores.

A Figura 16 apresenta a mobilidade eletrônica em função da temperatura obtida neste trabalho comparada com resultados experimentais encontrados na literatura (DHAR; GHOSH, 2000; IWATA; ITOH, 2001; IWATA; ITOH; PENSL, 2000). Na Figura 16 as mobilidades eletrônicas obtidas neste trabalho para campos elétricos aplicados na direção paralela ( $E_{\parallel}$ ) e perpendicular ( $E_{\perp}$ } ao eixo c estão representadas por linhas cheias, enquanto que os resultados experimentais estão representados por símbolos. Nota-se uma concordância relativamente boa entre os resultados obtidos aqui e os valores experimentais. A variação no valor experimental para a mobilidade eletrônica acontece por uma não padronização das amostras produzidas por diferentes laboratórios devido a diferentes níveis de imperfeições que ocorrem no controle do crescimento do cristal, tais como: defeitos na rede cristalina, deslocamentos, vacâncias, impurezas indesejadas, etc.



Figura 16 – Comparação da mobilidade obtida neste trabalho (linhas cheias) com a mobilidade experimental disponível na literatura (símbolos). Fonte: Autores.

Segundo trabalhos atuais o valor aceito para a mobilidade eletrônica no semicondutor 6H-SiC está entre 400 e 800 cm2/v.s (HEBALI *et al.*, 2019). De acordo com Meng *et al.* (2019), devido à abundância de variados dados na literatura, tanto experimentais quanto teóricos, as propriedades elétricas de transporte do semicondutor SiC não tem sido muito bem conhecidas em nível microscópico. Pelo crescente interesse pelo semicondutor Carbeto de Silício acreditamos que esforços de laboratórios que produzem o semicondutor 6H-SiC deverão ter em alguns anos amostras mais puras e padronizadas deste material semicondutor.

Finalizando, verificou-se neste trabalho a grande influência na condutividade elétrica conforme a direção de aplicação do campo elétrico em relação aos eixos *a*, *e bc* do cristal semicondutor 6H-SiC. A condutividade elétrica é muito menor ao longo do eixo *c* que ao longo do plano perpendicular a este. Isto se deve ao fato que a massa efetiva dos portadores na direção do eixo *c* é cerca de 4,8 vezes a massa efetiva dos portadores no plano perpendicular ao eixo *c* (veja a Tabela 1). O ponto importante é que um elétron em um potencial periódico do cristal semicondutor é acelerado em relação à rede, na presença de um campo elétrico aplicado, como se a massa do elétron fosse igual a uma massa efetiva. A massa efetiva dos elétrons de condução  $m_e$  é determinada pela curvatura da função energia  $\epsilon$ , a qual depende do vetor de onda dos

elétrons, ou seja,  $\epsilon(\vec{k})$ . Para levar em conta a existência de superfícies de energia constantes anisotrópicas, como é o caso do semicondutor 6H-SiC, deve-se introduzir as componentes de um tensor que representa o recíproco da massa efetiva *m* da seguinte forma (MADELUNG, 1996)

$$\left(\frac{1}{m}\right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2}{dk_i dk_j} \epsilon(\vec{k})$$

onde os índices i e j podem assumir os valores x, y e z. A Figura 17 ilustra, como exemplo, uma superfície de energia constante a qual é anisotrópica.



Figura 17 – Ilustração de uma superfície de energia constante anisotrópica. Fonte: Autores.

Somente a título de conhecimento, não só a condutividade elétrica, mas outras propriedades físicas também são afetadas pela anisotropia cristalina, dentre elas a condutividade térmica. A condutividade térmica é a medida da capacidade de um material em conduzir calor. Ela é uma propriedade vetorial e depende da estrutura interna do cristal. Todos os sistemas cristalinos, exceto o sistema cúbico, são anisotrópicos, ou seja, o calor propaga-se com maior velocidade numa direção que em outra. Cabe aqui um pequeno relato. O físico e mineralogista francês Henri Hureau de Sénarmont (1808-1862), através de uma experiência simples foi quem constatou pela primeira vez esta anisotropia na condução do calor. Ele cobriu com cera um cristal de gipsita e com a ponta de uma agulha aquecida tocou esse cristal. Formaram-se elipses provando que o calor propagou-se com maior velocidade numa direção e menor em outra. Quando fez o mesmo teste com o vidro, formaram-se círculos, ou seja, o calor propagou-se igualmente em todas as direções (UFRGS, 2020).

# Conclusão

Resumindo, neste trabalho determinamos teoricamente a velocidade de deriva, o deslocamento e a mobilidade dos portadores de carga (elétrons) no semicondutor 6H-SiC dopado tipo n e submetido a campos elétricos de baixa intensidade aplicados paralelamente ao eixo c ou aplicados perpendicularmente ao eixo c. Para tanto foi utilizada uma equação diferencial de transporte. Foi verificado neste trabalho que a maior velocidade de deriva e, consequentemente, a maior mobilidade ocorre quando o campo elétrico é aplicado perpendicularmente ao eixo cristalográfico c do semicondutor 6H-SiC. É extremamente importante do ponto de vista de aplicações em dispositivos eletrônicos a comparação das propriedades de diferentes direções de transporte de um material em particular.

Uma direção pode ser mais conveniente que a outra em algumas aplicações tecnológicas, sendo mais atrativa para certas aplicações em determinados dispositivos. Foi também determinada a variação da velocidade e da mobilidade em função da temperatura da rede, observando-se que ambas sofrem redução, com o aumento da temperatura. Para um campo elétrico de intensidade de 3 kV/cm esta redução foi de aproximadamente 67% de 0 a 100°C. Esta redução da mobilidade com a temperatura afeta diretamente na eficiência de dispositivos semicondutores. Quanto à comparação com resultados experimentais, existe uma boa concordância dos resultados obtidos neste trabalho com os valores experimentais encontrados na literatura. Uma boa concordância entre experimento e teoria é fundamental para a validação do método teórico empregado. Enfatizamos que valores experimentais para a mobilidade variam muito de uma amostra para outra, variação esta que está intimamente relacionada com a qualidade e com as condições de crescimento do cristal.

# Apêndice A. Momento médio $\langle \vec{P}(t) \rangle$

O módulo da quantidade de movimento  $\vec{p}$  de uma partícula é  $p = h/\lambda$ , onde h é a constante de Planck. Um elétron livre tem uma função de onda plana do tipo  $\Psi(x, t) = Ce^{i(kx-\omega t)}$ , sendo C uma constante arbitrária,  $k = 2\pi/\lambda$  o número de onda angular e  $\omega = 2\pi\nu$  a frequência angular, sendo  $\nu$ a frequência. Com isso, podemos reescrever o módulo do momento p da seguinte maneira:  $p = \hbar k$ , e de forma vetorial:  $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ , sendo  $\hbar = h/2\pi$ . Usando o formalismo quântico, o momento total médio  $\langle \vec{P} \rangle$  dos portadores no semicondutor é dado por (RODRIGUES, 2000)

$$\left\langle \vec{P}(t) \right\rangle = \sum_{\vec{k}} \hbar \vec{k} f_{\vec{k}}(t),$$
 (A.1)

onde  $f_{\vec{k}}(t)$  é a função de distribuição dos elétrons calculada de forma quântica sendo dada por (RODRIGUES, 2000)

$$f_{\vec{k}}(t) = Ae^{-b}, \qquad (A.2)$$

onde tomamos  $\vec{v} \equiv \vec{v}(t)$ , A = 4 e  $b = \hbar^2/(2m_e \kappa_B T)$ , sendo  $\kappa_B$  a constante de Boltzmann,  $m_e$  a massa efetiva do elétron, T a temperatura e V o volume da amostra. A Equação (A.2) é chamada de função de distribuição tipo Maxwell-Boltzmann. Substituindo a Eq. (A.2) na Eq. (A.1) temos

$$\left\langle \vec{P}(t) \right\rangle = \hbar A e^{-b}$$

A soma em  $\vec{k}$  nesta última expressão pode ser transformada em uma integral:

$$\left\langle \vec{P}(t) \right\rangle = \hbar A e^{-b}$$
 (A.3)

Por questões de maior simplicidade nos cálculos, mas sem perder a generalização, define-se o campo elétrico  $\vec{E}$  na direção do eixo z, ou seja,  $\vec{E} = E\hat{z}$ , sendo E a intensidade do campo elétrico  $\vec{E}$ , isto é:  $E = \vec{E} \vee 0$  vetor de onda  $\vec{k}$  em três dimensões em coordenadas cartesianas é:  $\vec{k} = k_x \hat{x} + k_y \hat{y} + k_z \hat{z}$ . A integração em (A.3) é mais facilmente resolvida utilizando-se coordenadas esféricas. As componentes cartesianas estão relacionadas com as componentes esféricas pelas seguintes expressões (RODRIGUES, 2017):  $k_x = ksin\theta cos\varphi$ ,  $k_y = ksin\theta sin\varphi$ , e  $k_z = kcos\theta$ . O

produto escalar  $\vec{k} \cdot \vec{v}$  torna-se  $kvcos\theta$  e a parte diferencial  $d^3k$  passa a ser  $k^2sin\theta dkd\theta d\varphi$ . Com estas considerações a Eq. (A.3) fica

$$\left\langle \vec{P}(t) \right\rangle = \hbar A e^{-b}$$
$$\left( \hat{x} \int_{0}^{2\pi} \cos\varphi d\varphi + \hat{y} \int_{0}^{2\pi} \sin\varphi d\varphi + \hat{z} \int_{0}^{2\pi} d\varphi \right),$$

onde  $a = 2m_e bv/\hbar$ . As duas primeiras integrais dentro do parêntesis desta última expressão são nulas, fazendo com que momento médio  $\langle \vec{P} \rangle$  tenha componente somente na direção 2, que é justamente a direção do campo elétrico aplicado. Assim resolvendo as integrais ficamos com

$$\left\langle \vec{P}(t) \right\rangle = 2\hbar \frac{A}{a} e^{-b}$$

Substituindo os valores de *A*, *b*, e *a*, temos finalmente:

$$\left\langle \vec{P}(t) \right\rangle = m_e \, \vec{v}(t)$$
 (A.4)

com  $\vec{v}(t)$  na direção do campo elétrico  $\vec{E}$ .

### Referências

ALFANO, R. R. Semiconductors probed by ultrafast laser spectroscopy. New York: Academic, 1984. v. 1 e 2.

BALIGA, B. J. Gallium nitride and silicon carbide power devices. Singapore: World Scientific Phublishing, 2016.

CORRÊA, A. M. D.; RODRIGUES, C. G.; LUZZI, R. Electron transport in bulk n-doped 3C-SiC by using a non-equilibrium quantum kinetic theory. European Physics Journal B, v. 92, p. 261, 2019.

DHAR, S.; GHOSH, S. Low field electron mobility in 6H-SiC. Journal of Applied Physics, v. 88, n. 11, p. 6519, 2000.

FRAGA, M. A.; PESSOA, R. S.; MASSI, M.; MACIEL, H. S. Carbeto de silício como material base para sensores MEMS de uso aeroespacial: uma visão geral. Revista Matéria, v. 19, p. 274, 2014.

HEBALI, M.; BENNAOUM, M.; BERKA, M.; BEY, A. B.; BENZOHRA, M.; CHALABI, D.; SAIDANE, A. A high electrical performance of DG-MOSFET transistors in 4H-SiC and 6H-SiC 130 nm technology by BSIM3v3 model. Journal of Electrical Engineering, v. 70, p. 145, 2019.

IWATA, H.; ITOH, K. M. Donor and acceptor concentration dependence of the electron Hall mobility and the Hall scattering factor in n-type 4H-and 6H-SiC. Journal of Applied Physics, v. 89, n. 11, p. 6228, 2001.

IWATA, H.; ITOH, K. M.; PENSL, G. Theory of the anisotropy of the electron Hall mobility in n-type 4H- and 6H-SiC. Journal of Applied Physics, v. 88, p. 1956, 2000.

IZHEVSKYI, V. A.; GENOVA, L. A.; BRESSIANI, J. C.; BRESSIANI, A. H. A. Review article: silicon carbide: structure, properties and processing. Cerâmica, v. 46, p. 297, 2000.

JOSHUA, T. Characterization of 4H-SiC MOSFETs. 2016. Disponível em: <u>https://www.joshuataillon.com/project/silicon-carbide</u>. Acesso em: 2 abr. 2020.

KITELL, C. Introduction to solid state physics. 7. ed. New York: John Wiley & Sons, 1996.

MADELUNG, O. Introduction to solid-state theory. Berlin: Springer, 1996.

MATIAS, P. C. Produção de carbeto de silício reforçado por óxido de grafeno. 2016. Disponível em: <u>https://docplayer.com.br/50845730-Philipe-cardoso-matias.html</u>. Acesso em: 2 abr. 2020.

MENG, F.; MA, J.; HE, J.; LI, W. Phonon-limited carrier mobility and temperature-dependent scattering mechanism of 3C-SiC from first principles. Physical Review B, v. 99, p. 45201, 2019.

MITRIDIS, S. Determination of lattice site location of impurities in compound semiconductors, by transmission electron microscopy. Physics of Advanced Materials Winter School 2008, p. 1-17, 2011. Disponível em:

https://www.researchgate.net/publication/274719826. Acesso em: 2 abr. 2020.

PERSSON, C.; SILVA, A. F. Electronic properties of intrinsic and heavily doped 3C-, nH-SiC (n = 2, 4, 6) and III-N (III = B, Al, Ga, In). In: HENINI, M.; RAZEGHI, M. (ed.). Optoelectronic devices: III-nitrides. London: Elsevier, 2005. v. 1, cap. 17, p. 479-559.

PHAN, H. P. Piezoresistive effect of p-type single crystalline 3C-SiC: silicon carbide mechanical sensors for harsh environments. Berlin: Springer, 2017.

RODRIGUES, C. G. Tópicos de física matemática para licenciatura. São Paulo: LF, 2017.

RODRIGUES, C. G.; VASCONCELLOS, A. R.; LUZZI, R. A kinetic theory for nonlinear quantum transport. Transport Theory and Statistical Physics, v. 29, p. 733, 2000.

SADDOW, S.; VIA, F. L. Advanced silicon carbide devices and processing. London: IntechOpen, 2015.

TOMÉ, T.; OLIVEIRA, M. J. Dinâmica estocástica e irreversibilidade. São Paulo: Ed. USP, 2001.

UFRGS (Universidade Federal do Rio Grande do Sul). Instituto de Geociências. Museu de Mineralogia e Petrologia "Luiz Englert". Propriedades físicas. Disponível em:

http://www.ufrgs.br/museumin/MINPropFisicas.htm. Acesso em: 10 maio de 2020.

VASCONCELOS, J. L.; RODRIGUES, C. G.; LUZZI, R. Anisotropic hole drift velocity in 4H-SiC. Materials Science and Engineering B, v. 249, p. 114426, 2019a.

VASCONCELOS, J. L.; RODRIGUES, C. G.; LUZZI, R. Study of electron transport in 4H-SiC by using nonequilibrium statistical ensemble formalism. Brazilian Journal of Physics, v. 49, p. 494, 2019b.