



**TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO**

**AVALIAÇÃO DE MODELOS DE INJEÇÃO DE  
CARGA PARA A ENGENHARIA DE CONTATOS EM TCAD**

**Vitor Hugo da Silva Oliveira**

**Brasília, dezembro de 2018**

**UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA**

**FACULDADE DE TECNOLOGIA**



UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA  
Faculdade de Tecnologia

TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO  
**AVALIAÇÃO DE MODELOS DE INJEÇÃO DE  
CARGA PARA A ENGENHARIA DE CONTATOS EM TCAD**

**Vitor Hugo da Silva Oliveira**

*Relatório submetido ao Departamento de Engenharia  
Elétrica como requisito parcial para obtenção  
do grau de Engenheiro Eletricista*

Banca Examinadora

Prof. Dr. Stefan Michael Blawid, ENE/UnB \_\_\_\_\_  
*Orientador*

Prof. Dr. José Camargo da Costa, ENE/UnB \_\_\_\_\_  
*Examinador interno*

Dr. Luciano Almeida Leal, Colégio Militar de \_\_\_\_\_  
Brasília (CMB)  
*Examinador externo*

## Dedicatória

*Dedico este trabalho à natureza, ela que em seu grande esplendor nos propicia as partes do quebra-cabeça para a criação do nosso mundo moderno.*

*Dedico este trabalho a todos os pesquisadores que se empenham incansavelmente em seus estudos para a criação de um mundo melhor.*

*Finalmente, dedico este trabalho à nova geração de estudantes que brilhem os olhos ao falar de eletrônica.*

*Vitor Hugo da Silva Oliveira*

## Agradecimentos

*Primeiramente, agradeço o professor Stefan por me guiar e por me orientar nessa jornada. Desde o começo, ele tem sido um acadêmico exemplar para mim, sempre com uma enorme paciência e compromisso com o trabalho aqui feito. Portanto, agradeço por ter te conhecido e por você me acolher sob a sua tutela por mais de dois anos. Obrigado.*

*Gostaria de agradecer meus pais, Manoel e Marly, pela educação à mim dada, pavimentando o meu caminho para a universidade. Agradeço meus irmãos e novamente meus pais pelo grande apoio e por suportarem as minhas angústias e dias de estresse. Vocês me ajudaram muito nesse processo e sem vocês eu não chegaria onde cheguei. Agradeço à toda minha família por sempre me acolher e me motivar a ser melhor.*

*Agradeço meus amigos pelos momentos de alegria, tristeza, afeto, medo, entre diversos outros que passamos juntos. Obrigado por sempre estarem ao meu lado e por compartilhar das suas histórias comigo. Dizem que “os amigos são a família que se escolhe” e eu não poderia concordar mais.*

*Dentre esses amigos, destaco a minha namorada Beatriz por me ajudar sempre que foi preciso, por me apoiar de todas as formas necessárias e por ser minha companheira. Agradecimentos especiais à Luisa, ao Tainan, à Ane, à Isa, o dueto de Guilhermes, à Camila, ao Said, à Backhaus e à Erika que me aconselharam e apoiaram nesses últimos meses de trabalho.*

*Por fim, agradeço ao meu chefe e amigo Gabriel por me mentorar no meu estágio e por me moldar no profissional que eu hoje sou. Eu devo muito a você pelos seus ensinamentos e pelas oportunidades que você me apresenta.*

*Vitor Hugo da Silva Oliveira*

---

## RESUMO

Materiais orgânicos emergentes trazem a promessa de eletrônicos de baixo custo e grandes áreas. Normalmente utilizados como material de camada ativa na tecnologia de transistores de filme fino, eles permitem o desenvolvimento de dispositivos eletrônicos leves, macios e flexíveis, como rótulos inteligentes, sistemas integrados vestíveis, peles artificiais e implantes médicos. No entanto, materiais orgânicos possuem uma resistência de contato com metais maior do que suas contrapartes inorgânicas, degradando o desempenho do dispositivo e impedindo o seu alocamento ao mercado. Portanto, esse trabalho visa fornecer modelos computacionais para diferentes estratégias de engenharia de contatos que englobem um grande número de fenômenos de interface. Embora o silício seja utilizado como o principal material semicondutor para as simulações, os modelos discutidos aqui também são aplicáveis a dispositivos orgânicos. Empregando o simulador de dispositivos Sentaurus TCAD, comercializado pela Synopsys, nós modelamos diferentes interfaces metal-semicondutor com e sem camadas intermediárias, avaliando os fenômenos relacionados e as estratégias correspondentes para melhorar os contatos. As curvas de corrente-tensão de diferentes resistores semicondutores foram simuladas e as respectivas resistências de contato determinadas, analisadas e discutidas.

---

## ABSTRACT

Emergent organic materials hold the promise for low-cost, large-area electronics. Used as active layer materials in thin-film transistor technology, they enable the development of light-weight, soft and flexible electronic devices like smart labels, wearable integrated systems, artificial skins and medical implants. However, organic materials possess a higher contact resistance with metals than their inorganic counterparts, degrading device performance and hindering successful market placement. Thus, this work aims to provide computational models for different contact engineering strategies that encompass a large number of interface phenomena. Although silicon is used as the main semiconductor material of the simulations, the models discussed here are applicable for organic devices too. Employing the Sentaurus TCAD device simulator, commercialized by Synopsys, we modeled different metal-semiconductor interfaces with and without intermediate layers, evaluating the related phenomena and the corresponding strategies to improve contacts. Current-Voltage curves of different semiconductor resistors were simulated and the respective contact resistances determined, analyzed and discussed.

# SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
1.1	Contextualização	1
1.2	Definição do problema	1
1.3	Objetivos do projeto	2
1.4	Apresentação do manuscrito	2
<b>2</b>	<b>Revisão Bibliográfica</b>	<b>3</b>
2.1	Introdução	3
2.2	O estado da arte da engenharia de contatos	3
2.3	Definições	5
2.3.1	Nível de Fermi	5
2.3.2	Função trabalho	5
2.3.3	Bandas de energia	5
2.4	O contato MS	6
2.4.1	O contato MSO	6
2.5	O contato ôhmico	7
2.6	O contato tipo Schottky	9
2.6.1	Camada de depleção	11
2.7	Mecanismos de injeção	12
2.7.1	Dopagem	12
2.7.2	Camadas de injeção de cargas	13
2.8	TCAD	18
2.8.1	Modelo de difusão-deriva	18
2.8.2	Equação de Poisson e equação de continuidade	19
2.8.3	Condições de contorno	20
<b>3</b>	<b>Desenvolvimento</b>	<b>21</b>
3.1	Introdução	21
3.2	<i>Software Sentaurus Device</i>	21
3.2.1	Linguagem Scheme	21
3.2.2	Geometria do dispositivo	22
3.2.3	Arquivo de comando do dispositivo	23
3.2.4	O ambiente da <i>Sentaurus</i>	24

3.3	Fluxograma .....	25
3.4	O tunelamento quântico .....	26
3.4.1	Tunelamento sobre a barreira .....	27
3.4.2	Tunelamento sobre óxido .....	27
3.4.3	Tunelamento assistido por armadilhas .....	28
3.5	MATLAB .....	28
<b>4</b>	<b>Resultados .....</b>	<b>30</b>
4.1	Introdução .....	30
4.2	O contato ôhmico .....	30
4.2.1	Teoria da emissão termiônica .....	32
4.3	O contato dopado .....	34
4.3.1	Teoria da emissão termiônica .....	34
4.3.2	Teoria da emissão termiônica com tunelamento não local .....	35
4.4	Ajustando a função trabalho .....	38
4.4.1	Teoria da emissão termiônica com tunelamento não local .....	38
4.5	Contatos oxidados .....	39
4.5.1	Teoria da emissão termiônica com tunelamento não local .....	39
4.5.2	O tunelamento de Fowler-Nordheim .....	40
4.5.3	O tunelamento assistido por armadilhas .....	42
4.5.4	A diminuição da barreira .....	45
4.5.5	A modelagem da eletroafinidade do óxido .....	46
4.6	Comparações finais .....	47
<b>5</b>	<b>Conclusões .....</b>	<b>49</b>
	<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....</b>	<b>50</b>
	<b>Anexos .....</b>	<b>52</b>



# LISTA DE FIGURAS

2.1	Resistência de contato de materiais orgânicos. Adaptada de [1] .....	4
2.2	Contato Schottky. Figura adaptada de [2] .....	6
2.3	Visualização da estrutura eletrônica de um contato MSO. Figura adaptada de [3] ...	7
2.4	Contato ôhmico. Figuras adaptadas de [2].....	9
2.5	Camada de depleção. Figuras adaptadas de [4].....	11
2.6	Visualização da técnica de dopagem. Figura adaptada de [1].....	13
2.7	A técnica SAM. Figuras adaptadas de [1].....	14
2.8	Configurações do tipo <i>bottom-contact</i> . Figuras adaptadas de [5].....	15
2.9	Visualização da técnica de camadas buffer. Adaptado de [6].....	16
2.10	Configurações do tipo <i>top-contact</i> . Figuras adaptadas de [5] .....	16
2.11	Influência do tempo de oxidação. Figuras adaptadas de [7] .....	17
2.12	Características IV para camadas de óxido de prata com diferentes períodos de oxidação. Figura adaptada de [7] .....	18
3.1	Esquemático .....	23
3.2	Representação visual no ambiente TCAD da <i>Sentaurus</i> .....	25
3.3	Fluxograma das estratégias utilizadas.....	25
3.4	Mecanismos de condução de corrente. Figura adaptada de [8] .....	26
3.5	Relação de energia eletrônica. Figuras adaptadas de [8] .....	27
3.6	Rotina para extração de dados.....	29
4.1	Contato ôhmico .....	32
4.2	Contato tipo Schottky.....	33
4.3	Contato tipo Schottky com o filme fino altamente dopado .....	35
4.4	Contato tipo Schottky com tunelamento não local .....	37
4.5	Contato tipo Schottky dopado com tunelamento não local .....	38
4.6	Contato tipo Schottky com tunelamento não local para diferentes funções trabalho .	39
4.7	Contato tipo Schottky com tunelamento não local sobre uma camada de óxido.....	40
4.8	Contato tipo Schottky com tunelamento Fowler-Nordheim com 1 nm de óxido .....	41
4.9	Contato tipo Schottky com tunelamento não local sobre uma camada de óxido sem o tunelamento assistido por armadilhas.....	44
4.10	Contato tipo Schottky com tunelamento não local sobre uma camada de óxido com o tunelamento assistido por armadilhas.....	45

4.11 Contato tipo Schottky 1 nm oxidado com tunelamento não local para diferentes funções trabalho .....	45
4.12 Contato tipo Schottky 0.2 nm oxidado com tunelamento não local para diferentes funções trabalho .....	46
4.13 Contato tipo Schottky com tunelamento não local e um óxido diferente.....	47
1 Contato ôhmico dopado.....	52

# LISTA DE TABELAS

3.1	Características do $Si$ e $SiO_2$ .....	23
4.1	Tabela de resistências.....	47



# LISTA DE SÍMBOLOS

## Símbolos

$\phi$	Potencial Eletrostático	[eV]
$\phi_F$	Potencial de Fermi	[eV]
$\phi_B$	Altura da barreira	[eV]
$n$	Densidade de elétrons	[cm <sup>-3</sup> ]
$p$	Densidade de buracos	[cm <sup>-3</sup> ]
$n_{i,\text{eff}}$	Densidade efetiva intrínseca	[cm <sup>-3</sup> ]
$\vec{J}_n$	Densidade de corrente de elétrons	[A cm <sup>-2</sup> ]
$\vec{J}_p$	Densidade de corrente de buracos	[A cm <sup>-2</sup> ]
$n_0^B$	Densidade de equilíbrio de elétrons	[cm <sup>-3</sup> ]
$p_0^B$	Densidade de equilíbrio de buracos	[cm <sup>-3</sup> ]
$n_0$	Concentração de equilíbrio de elétrons	[cm <sup>-3</sup> ]
$p_0$	Concentração de equilíbrio de buracos	[cm <sup>-3</sup> ]
$N_D$	Densidade de doadores ionizados	[cm <sup>-3</sup> ]
$N_A$	Densidade de aceitadores ionizados	[cm <sup>-3</sup> ]
$N_C$	Densidade de estados da banda de condução	[cm <sup>-3</sup> ]
$N_V$	Densidade de estados da banda de valência	[cm <sup>-3</sup> ]
$v_n$	Velocidade de emissão termoiônica de elétrons	[cm s <sup>-1</sup> ]
$v_p$	Velocidade de emissão termoiônica de buracos	[cm s <sup>-1</sup> ]
$E_{g,\text{eff}}$	Banda de gap efetiva	[eV]
$E_F$	Nível de Fermi	[eV]
$E_C$	Banda de condução	[eV]
$E_V$	Banda de valência	[eV]
$T$	Temperatura	[K]
$k$	Constante de Boltzmann	[kg m <sup>2</sup> s <sup>-2</sup> K <sup>-1</sup> ]
$q$	Carga elétrica	[C]
$j_{FN}$	Densidade de corrente de tunelamento	[A cm <sup>-2</sup> ]
$A$	Constante física	[A V <sup>-2</sup> ]
$B$	Constante física	[V cm <sup>-1</sup> ]
$F_{\text{ins}}$	Campo elétrico do isolante na interface	[N C <sup>-1</sup> ]
$\mu_n$	Mobilidade do elétron	[cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> ]
$\mu_p$	Mobilidade do buraco	[cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> ]
$D_n$	Difusividade do elétron	[m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> ]
$D_p$	Difusividade do buraco	[m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> ]
$m_n$	Massa efetiva do elétron	[m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> ]
$m_p$	Massa efetiva do buraco	[m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> ]
$V_{ds}$	Tensão entre dreno e fonte	[V]

## Subscritos e Siglas

<i>SDevice</i>	Sentaurus Device
<i>TAT</i>	Trap assistet tunneling
<i>FN</i>	Fowler-Nordheim
<i>TCAD</i>	Technology Computer-Aided Design
<i>TGBC</i>	Top-gate bottom-contact
<i>TGTC</i>	Top-gate top-contact
<i>BGBC</i>	Bottom-gate bottom-contact
<i>BGTC</i>	Bottom-gate top-contact
<i>SAM</i>	Self-assembled monolayer
<i>CIL</i>	Charge injection layer
<i>MS</i>	Metal-semiconductor
<i>MOS</i>	Metal-oxide-semiconductor
<i>OFET</i>	Organic Field-effect transistor
<i>OSC</i>	Organic semiconductor
<i>OLED</i>	Organic light-emitting diode
<i>OPV</i>	Organic photovoltaics

# Capítulo 1

## Introdução

### 1.1 Contextualização

O mundo altamente tecnológico em que hoje vivemos depende fortemente de um componente eletrônico criado em 1947 por John Bardeen, William Shockley e Walter Brattain no Bell Laboratories [9]. Essa invenção é o transistor. O transistor é, sem sombra de dúvidas, o componente mais importante no que tange as vidas de todos os seres humanos que hoje vivem. Os transistores são responsáveis pela revolução de vários pilares essenciais na nossa sociedade, alguns deles são: os sistemas de comunicação, transporte, saúde, entretenimento, publicidade, esporte, a economia mundial entre outros. Para termos uma noção de perspectiva, o número de transistores hoje é maior do que 20.000.000.000.000.000.000 (bilhão de bilhão), sendo que a população atual é pouco mais do que 7 bilhões de pessoas. Isso revela uma razão de aproximadamente 2,857,142,857 (2.8 bilhões) de transistores por cada ser humano e, não obstante, esses 2.8 bilhões de transistores cabem com facilidade na palma de uma mão [9].

### 1.2 Definição do problema

A eletrônica inorgânica já está estabelecida no mercado global, porém existe um outro ramo da eletrônica que trata de materiais orgânicos, ou seja, materiais derivados de carbono que merece atenção. A principal motivação para se persuadir o caminho desta nova tecnologia é a produção em massa de dispositivos com baixos custos e em substratos maleáveis com relação aos materiais inorgânicos. Tal tecnologia pode viabilizar a criação de roupas inteligentes (funcionalidades eletrônicas aplicadas a um tecido que continuamente é dobrado), células solares dobráveis, *smartphones* flexíveis entre outros. Entretanto, para se criar um dispositivo orgânico, é necessário que o semicondutor orgânico entre em contato com um metal, porém esse contato heterogêneo não é um bom condutor de eletricidade. Desta forma, o mundo da eletrônica orgânica foca em novas pesquisas que melhorem este contato, fazendo com que essa tecnologia se torne mais acessível no futuro.

### **1.3 Objetivos do projeto**

O objetivo deste projeto é avaliar um simulador comercial para modelar e realizar desenhos de contatos auxiliados por computador (TCAD - Technology Computer-Aided Design). Os objetivos do trabalho são:

- Simular as características elétricas de resistores semicondutores
- Comparar e identificar as vantagens e desvantagens de diferentes modelos de contatos
- Entender os fenômenos que ocorrem na interface de um contato
- Modelar estratégias já conhecidas que comprovem a melhoria da resistência de contato

### **1.4 Apresentação do manuscrito**

No capítulo 2 é feita uma revisão bibliográfica sobre diversos conceitos e definições sobre contatos e os fenômenos que permeiam sobre os contatos. Em seguida, o capítulo 3 descreve os métodos empregados no desenvolvimento do projeto, explicando o passo-a-passo que foi seguido para se chegar aos resultados obtidos. Os resultados das simulações realizadas são discutidos no capítulo 4, seguido das conclusões no capítulo 5. Os anexos contêm material complementar.



# Capítulo 2

## Revisão Bibliográfica

### 2.1 Introdução

Neste capítulo serão introduzidos alguns conceitos chave para o melhor entendimento do tema proposto por este trabalho, desde a definição de função trabalho até a explicação do efeito de tunelamento quântico assistido por armadilhas. Neste trabalho, todo o número 0 denotado em qualquer equação se refere à equivalente da variável no equilíbrio, todo o índice “n” se refere à elétrons e todo o índice “p” se refere à buracos.

### 2.2 O estado da arte da engenharia de contatos

As interfaces entre metais e semicondutores orgânicos de hoje possuem uma alta resistência de contato e por isso, são desenvolvidos vários métodos que tem por objetivo reduzir essa resistência de contato. A estratégia ideal para reduzir a resistência de contato ainda não é conhecida, logo existem várias técnicas a serem analisadas e estudadas. A Figura 2.1 mostra algumas técnicas (que serão explicadas com mais profundidade adiante) que tentam mitigar este problema. Nesta Figura, a primeira informação apresentada é o nome do método de engenharia de contatos utilizado, posteriormente é revelada a estrutura do material de contato e em sequência o tipo do semicondutor. A função trabalho do metal  $\Phi_m$  sofre uma alteração a partir da técnica aplicada, sendo o valor entre parênteses o valor antes da engenharia de contatos e o valor fora dos parênteses o novo valor da variável. Por fim, são apresentadas a estrutura do dispositivo e a resistência de contato antes (dentro do parênteses) e após (fora do parênteses) a técnica de engenharia de contatos. É possível ver que a resistência de contato pode diminuir drasticamente, dependendo da técnica aplicada, chegando até ao valor de  $10 \text{ k}\Omega \text{ cm}$ , porém este valor ainda está longe do valor da resistência de contato do silício que é da ordem de  $0.1 \Omega \text{ cm}$  [1][10][11]. Por meio destes resultados experimentais, vemos que existe uma grande melhoria na engenharia de contatos de dispositivos, mas ainda assim existe um grande caminho a ser percorrido até alcançarmos o valor da resistência de contato de componentes inorgânicos. Vale ressaltar o grafeno como um possível eletrodo no dispositivo, dado que ele é um material orgânico que possui uma alta força mecânica

e flexibilidade [12] em conjunto com uma baixa resistência de folha [13] (a resistência de folha é uma resistência usada para caracterizar finas camadas de semicondutores).

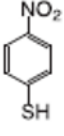
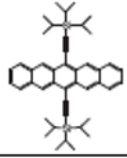
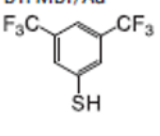
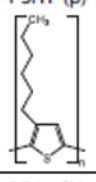
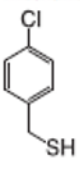
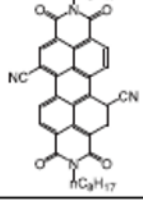

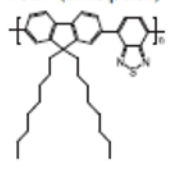
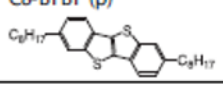
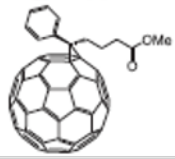
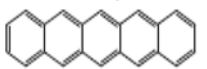
Engenharia de contatos	Materiais de contato	Semicondutor (tipo de portadores)	$\phi_m$ (Au)	Estrutura do dispositivo	$R_c$ (k $\Omega$ cm)
SAM (tipo p)	NOTP/Au 	TIPS-Pentacene (p) 	4.84 (4.75)	TGBC	291 (998)
SAM (tipo p)	BTFMBT/Au 	P3HT (p) 	5.8 (5.0)	TGBC	180 (610)
SAM (tipo n)	4-Chlorobenzene-methanethiol/Au 	PDI-8CN2 (n) 	-	BGBC	32 (130)
SAM (ambipolar)	1DT/Au 	F8BT (ambipolar) 	4.0-4.2 (4.7-4.9)	TGBC	330 M $\Omega$ (560 M $\Omega$ ) (p)/670 M $\Omega$ (2050 M $\Omega$ ) (n)
CIL (óxido metálico, tipo n)	MoO <sub>3</sub> /Au	C8-BTBT (p) 	-	BGTC	10 (5000) <sup>a</sup>
CIL (óxido metálico, tipo n)	TiO <sub>x</sub> /Au	PC <sub>61</sub> BM (n) 	-	BGTC	300 (15,000)
Baseado em carbono	Grafeno	Pentacene (p) 	4.71 (4.46)	BGBC	560 (850)

Figura 2.1: Resistência de contato de materiais orgânicos. Adaptada de [1]

Realizar a modelagem de um contato real não é um feito fácil, devido à grande gama de fenômenos físicos que o englobam. Desta forma é necessário estudar os principais fenômenos e os diversos conceitos teóricos que ocorrem no contato, revelando os melhores métodos de engenharia de contatos. Este trabalho propõe o estudo de várias técnicas de modelagem de engenharia de contatos, propiciando uma melhor visão dos desafios enfrentados ao tentar se programar esse tipo

de fenômenos em um simulador de dispositivos.

## 2.3 Definições

### 2.3.1 Nível de Fermi

O nível de Fermi é um parâmetro muito importante que analisa a probabilidade de distribuição energética de elétrons em um metal ou semicondutor. Elétrons em sólidos obedecem às estatísticas de Fermi-Dirac, logo o argumento simplificado dessas estatísticas é a função de distribuição de Fermi-Dirac representada pela equação (2.1) [2].

$$f(E) = \frac{1}{(1 + e^{(E-E_F)/kT})} \quad (2.1)$$

Onde  $k$  é a constante de Boltzmann,  $T$  é a temperatura,  $E$  é o nível de energia e  $E_F$  é o nível de Fermi. Essa equação representa a distribuição de elétrons sobre um intervalo de níveis de energia permitidos no equilíbrio térmico, ou seja, a função  $f(E)$  apresenta a probabilidade de um estado de energia  $E$  será ocupado por um elétron à temperatura absoluta  $T$ . Notamos então que para a energia  $E = E_F$ , temos:

$$f(E_F) = \frac{1}{(1 + e^{(E_F-E_F)/kT})} = \frac{1}{1 + 1} = \frac{1}{2} \quad (2.2)$$

Portanto, um estado de energia no nível de Fermi tem uma probabilidade de 50% de estar ocupado por um elétron.

### 2.3.2 Função trabalho

A função trabalho é a diferença de energia entre o nível do vácuo e o nível de Fermi. A função trabalho é denotada por  $q\phi_m$  para um metal e  $q(\chi + \phi_n) = q\phi_s$  para um semicondutor, onde  $q\chi$  é a afinidade do elétron (medida do nível do vácuo até a banda de condução do semicondutor) e  $q\phi_n$  é a diferença de energia entre a banda de condução e o nível de Fermi. A altura da barreira  $q\phi_{Bn0}$  é então definida pela diferença entre a função trabalho do metal e a afinidade eletrônica do semicondutor, como mostra a equação (2.3) [8].

$$q\phi_{Bn0} = q(\phi_m - \chi) \quad (2.3)$$

Neste trabalho, a maioria das simulações é feita a partir do silício, portanto um dado muito utilizado é a afinidade eletrônica do silício  $\chi$  de 4.05 eV.

### 2.3.3 Bandas de energia

As bandas de energia em um semicondutor são os níveis de energia discretos que permitem ser ocupados por um elétron. A banda de energia imediatamente superior ao nível de Fermi é chamada de banda de condução  $E_c$  e a banda imediatamente inferior ao nível de Fermi é chamada

de banda de valência  $E_v$ , sendo elas separadas por um espaço chamado de banda de *gap*  $E_g$ . A  $E_g$  não contém nenhum nível de energia que permita ser ocupado, dando *jus* ao seu nome de “banda proibida” [2]. A banda de *gap*  $E_g$  do silício, sem considerar efeitos térmicos, é de aproximadamente 1.17 eV.

## 2.4 O contato MS

Quando um metal entra em contato com um semicondutor, é então formada uma barreira na interface entre o metal e o semicondutor. Esta barreira controla tanto a corrente de condução do contato, como o seu comportamento capacitivo. Neste trabalho, o contato metal-semicondutor (MS) a ser retratado é ideal, ou seja, não possui estados na sua superfície e nenhuma outra anomalia. A Figura 2.2a detalha as relações de energia eletrônica entre um metal (presente no lado esquerdo da figura) e um semicondutor do tipo “n” (presente no lado direito da figura) fora de contato e em ambientes separados. Ocorrido o contato, haverá uma transferência de cargas do semicondutor para o metal e logo o equilíbrio térmico será estabelecido no sistema, como ilustrado na Figura 2.2b. Ainda nesta figura, os níveis de Fermi do metal e do semicondutor tendem a se alinhar, logo o nível de Fermi do semicondutor será abaixado, com relação ao nível de Fermi do metal, em uma quantidade equivalente à diferença das funções trabalho dos dois [8].

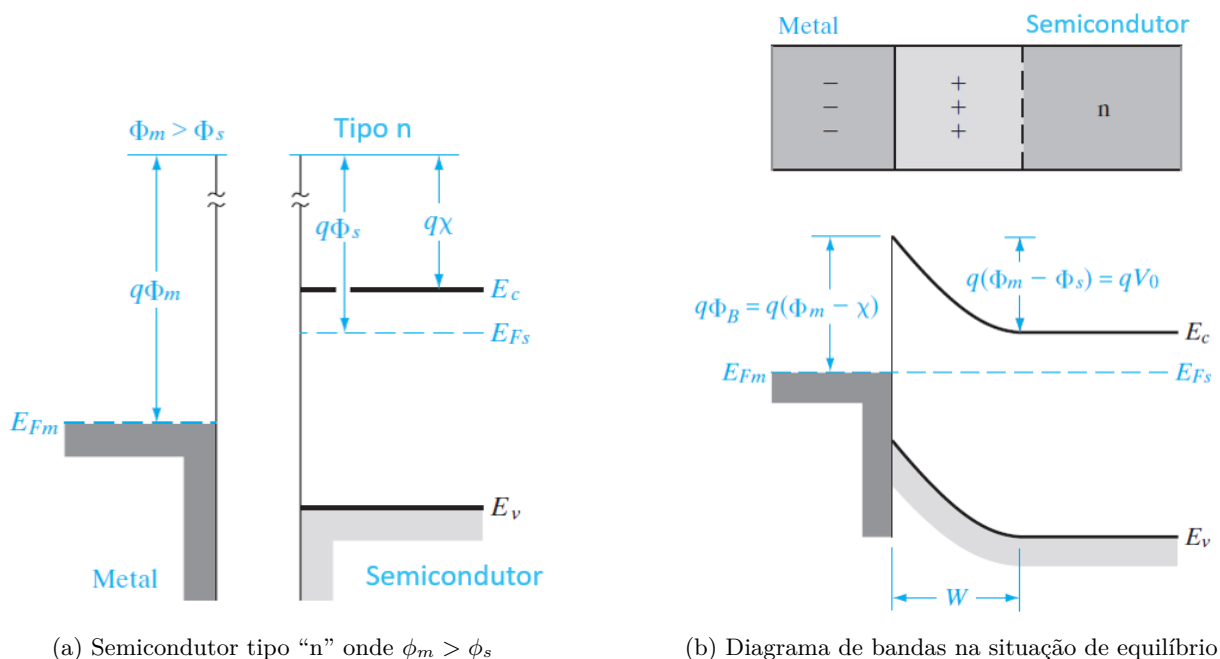


Figura 2.2: Contato Schottky. Figura adaptada de [2]

### 2.4.1 O contato MSO

O contato entre um metal e um semicondutor orgânico (MSO) possui diversas similaridades com o contato metal-semicondutor inorgânico, tanto que para falar de contatos orgânicos é nor-

malmente utilizada uma abordagem com base de comparação inorgânica, porém não devemos negligenciar as suas diferenças. A Figura 2.3 revela a estrutura eletrônica de interface em um contato orgânico típico.

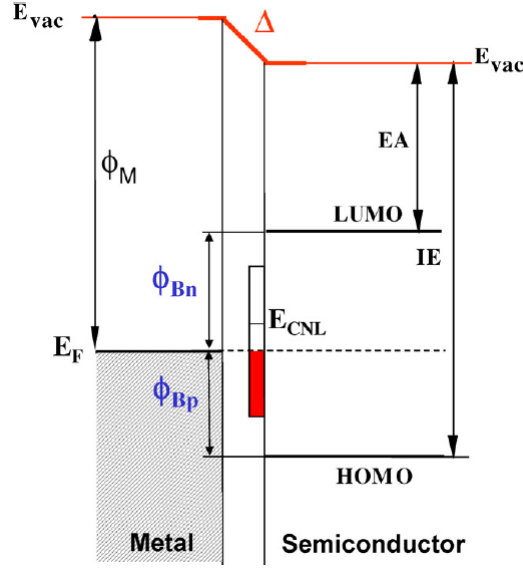


Figura 2.3: Visualização da estrutura eletrônica de um contato MSO. Figura adaptada de [3]

Onde  $E_{vac}$  é o nível de vácuo do material, IE é a energia de ionização, EA é a afinidade do elétron, HOMO e LUMO são, respectivamente, os níveis de transporte de buracos e elétrons e, finalmente, a barreira de dipolo das interfaces é denotada por  $\Delta$ . Desta forma, a altura da barreira é dada pela seguinte equação.

$$\phi_{Bn} = S(\phi_m - EA) + (1 - S)E_{CLN} \quad S = \frac{1}{1 + 4e^2 D_{is} \delta \pi} \quad (2.4)$$

Onde  $D_{is}$  é a densidade de estados de *gap* na interface,  $\delta$  é a distância efetiva entre metal e semicondutor e  $E_{CLN}$  é o nível de neutralidade de carga dos estados de interface. Desta forma, a altura de barreira em materiais orgânicos é o valor obtido em materiais inorgânicos reajustando alguns parâmetros. A física da interface nesses materiais se torna, então, altamente dependente de barreiras de injeção de carga com relação à natureza e à função trabalho do eletrodo [3]. Apesar de observarmos diferenças entre os materiais orgânicos e inorgânicos, vemos também as suas similaridades. Justificando, desta forma, a comparação de materiais orgânicos usando uma base de materiais inorgânicos, comparação feita em grande parte dos artigos que envolvem eletrônica orgânica.

## 2.5 O contato ôhmico

O contato ôhmico é um contato ideal entre um metal e um semicondutor, por isso suas características IV (características de corrente e tensão) são lineares em ambas as direções de ida e de volta. Desta forma, este contato possui resistência de canal muito pequena e, na maioria

das vezes, negligenciável entre o contato MS, não retificando nem limitando qualquer corrente. O desafio da teoria de contatos é se criar um contato real que se aproxime de um contato ôhmico. Para simularmos um contato ôhmico, existem duas premissas: (i) Neutralidade de carga e (ii) equilíbrio de carga. Essas premissas são, respectivamente, descritas a partir das equações (2.5) e (2.6) [2][8].

$$n_0 - p_0 = N_D - N_A \quad (2.5)$$

$$n_0 p_0 = n_{i,\text{eff}}^2 \quad (2.6)$$

A equação (2.5) afirma que até quando átomos impuros são adicionados ao semiconductor (processo de dopagem), há a preservação da neutralidade de carga, ou seja, o número total de cargas negativas (elétrons e aceitadores ionizados) deve ser igual ao número total de cargas positivas (buracos e doadores ionizados). Desta forma, mesmo dopado, o dispositivo continua eletricamente neutro. A partir da equação (2.6), assumindo o equilíbrio térmico e que o semiconductor não é degenerado (termo dado a semicondutores que possuem o nível de Fermi muito próximo às bandas de valência e de condução), vemos que o produto da concentração de equilíbrio de elétrons e buracos livres  $n_0$  e  $p_0$ , respectivamente, é constante e igual ao quadrado da densidade intrínseca efetiva de portadores  $n_{i,\text{eff}}^2$ . Vale ressaltar que, em semicondutores, os elétrons e buracos livres são os responsáveis pelo processo de condução de energia elétrica. Com as equações acima satisfeitas, a ferramenta TCAD do simulador Sentaurus Device parte das equações (2.7), (2.8) e (2.9) para definir as condições de contorno em um contato ôhmico [8].

$$\phi = V_{\text{aplicada}} + \frac{kT}{q} \operatorname{arcsinh}\left(\frac{N_D - N_A}{2n_{i,\text{eff}}}\right) \quad (2.7)$$

$$n = n_0 = \sqrt{\frac{(N_D - N_A)^2}{4} + n_{i,\text{eff}}^2} + \frac{N_D - N_A}{2} \quad (2.8)$$

$$p = p_0 = \sqrt{\frac{(N_D - N_A)^2}{4} + n_{i,\text{eff}}^2} - \frac{N_D - N_A}{2} \quad (2.9)$$

Onde  $k$  é a constante de Boltzmann,  $q$  é a carga elétrica e  $T$  é a temperatura. A equação (2.7) mostra que o potencial eletrostático  $\phi$  nada mais é do que a soma da tensão aplicada  $V_{\text{aplicada}}$  com uma constante, ou seja, ele é um nível discreto, logo é único e não oscilante no dispositivo. No decorrer deste trabalho, será feita uma dopagem no dispositivo, portanto as concentrações de doadores e aceitadores é fortemente ligada ao tipo de concentração (“n” ou “p”) que é feita. Neste trabalho, a dopagem é, em geral, do tipo “n”, logo o valor da densidade de aceitadores ionizados  $N_A$  é zero. Consequentemente, o valor de  $p_0$  nos semicondutores aqui utilizados é muito próximo de zero e tal afirmação implica em  $n_0 \sim N_D$ , ou seja, a concentração de portadores dopados é quase integralmente feita por elétrons, assim negligenciando a concentração de buracos sem perda de generalidade. A partir da Figura 2.4 é visto o comportamento ôhmico de um contato.

Na Figura 2.4a, com uma dopagem tipo “n”, onde o potencial eletrostático do metal  $\phi_m$  é menor do que o potencial eletrostático do semiconductor  $\phi_s$ , os potenciais eletrostáticos no equilíbrio serão alinhados pela transferência de elétrons do metal para o semiconductor (este processo é análogo para um semiconductor do tipo “p”, onde o processo de alinhamento é feito por buracos ao invés

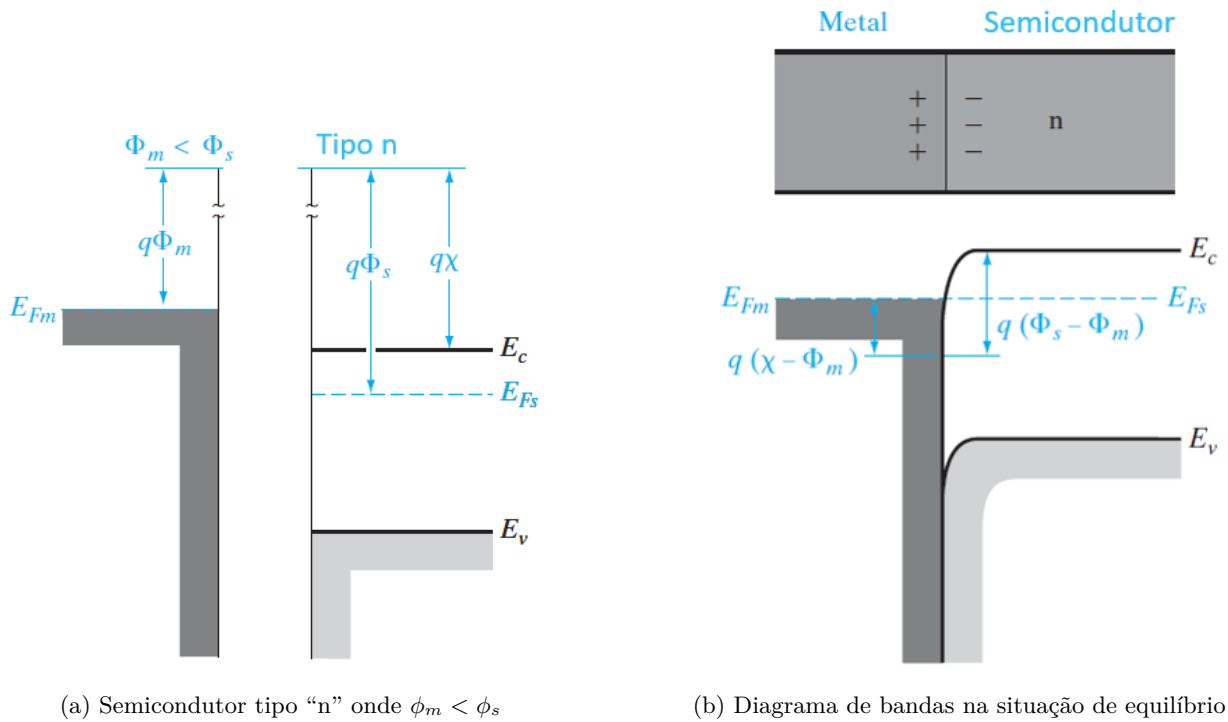


Figura 2.4: Contato ôhmico. Figuras adaptadas de [2]

de elétrons e  $\phi_m > \phi_s$ ). Desta forma, o potencial eletrostático do semicondutor abaixa em relação ao potencial do metal no equilíbrio, esse fenômeno é visto na Figura 2.4b. A barreira de potencial que é formada a partir dessa junção do metal com o semicondutor é pequena e facilmente superada por uma baixa tensão [2].

Na natureza, este exemplo mostrado pela Figura 2.4 não é normalmente observado. Neste exemplo, o contato ôhmico possui uma barreira de potencial negativa, dado as características da função trabalho do metal e do semicondutor. Apesar desse contato ser possível na teoria, na prática ele é limitado devido ao fenômeno chamado de “fixação do nível de Fermi” ou *Fermi-level pinning*.

## 2.6 O contato tipo Schottky

Quando um metal entra em contato com um semicondutor, há a formação de uma barreira na interface metal-semicondutor. A altura dessa barreira nada mais é do que a diferença entre a função trabalho do metal e a afinidade eletrônica do semicondutor. Em um contato tipo Schottky, ou seja, em um contato real no qual há um fluxo de corrente elétrica, os elétrons, via de regra, precisam ultrapassar esta barreira de potencial. Assim sendo, somente os elétrons com uma energia potencial maior do que a da barreira conseguem executar essa transição. As equações de contorno do contato Schottky definidas pelo SDevice (partindo das estatísticas de Boltzmann) são representadas pelas equações (2.10), (2.11), (2.12), (2.13) e (2.14) [8].

$$\phi = V_{\text{aplicada}} - \Phi_B + \frac{kT}{q} \ln \left( \frac{N_C}{n_{i,\text{eff}}} \right) \quad (2.10)$$

$$\vec{J}_n \hat{n} = qv_n(n - n_0^B) \quad (2.11)$$

$$\vec{J}_p \hat{p} = qv_p(p - p_0^B) \quad (2.12)$$

$$n_0^B = N_C \exp\left(\frac{-q\Phi_B}{kT}\right) \quad (2.13)$$

$$p_0^B = N_V \exp\left(\frac{-E_{g,\text{eff}} + q\Phi_B}{kT}\right) \quad (2.14)$$

A equação (2.10) do contato Schottky é muito similar a equação (2.7) do contato ôhmico, porém no contato Schottky é levado em consideração a altura da barreira  $\Phi_B$  (assumindo uma altura da barreira é finita) e a densidade de estados da banda de condução  $N_C$ . Portanto, é fácil inferir que no diagrama de bandas, representado pela Figura 2.2, existirá uma maior dificuldade para ocorrer a condução de corrente. Ao analisarmos as equações (2.11) e (2.12), vemos que haverá uma limitação nas densidades de corrente de elétrons e buracos  $\vec{J}_n$  e  $\vec{J}_p$ , respectivamente. Isso ocorre devido a concentração de portadores tender à uma constante após o contato MS, logo todas as variáveis (a velocidade de emissão termiônica de elétrons  $v_n$  e a densidade de elétrons  $n$ ) da equação se tornam constantes no equilíbrio. A velocidade de emissão termiônica de elétrons  $v_n$  é de  $2.573 * 10^6 \text{ cm s}^{-1}$ , enquanto que a velocidade de emissão termiônica de buracos  $v_p$  é de  $1.93 * 10^6 \text{ cm s}^{-1}$ . A equação (2.13) denota que as densidades de equilíbrio de elétrons  $n_0^B$  é altamente dependente da altura da barreira, dessa forma caso  $\Phi_B$  for elevado, então  $n_0 \sim 0$ . Finalmente, a equação (2.14) mostra que a densidade de equilíbrio de buracos  $p_0^B$  depende da altura da barreira, porém é amortizada pela banda de *gap* efetiva.

O fluxo de corrente elétrica é ocasionado majoritariamente por elétrons e por isso é desconsiderada, sem perda de generalidade, a corrente oriunda de buracos. Neste contato, o mecanismo de condução de corrente é a emissão termiônica, que consiste no elétron ultrapassar a barreira de potencial. Existem várias técnicas para se contornar a alta resistência do contato Schottky, ou seja, engenharia de contatos com o objetivo de se aproximar o contato Schottky, ao máximo, a um contato ôhmico. Na indústria, são desenvolvidos vários métodos de injeção de carga com este objetivo. O comportamento do contato Schottky de um semiconductor tipo “n”, onde  $\phi_m > \phi_s$ , é visto na Figura 2.2.

Ao se fazer o contato MS, no qual a função trabalho do metal  $q\phi_m$  é maior do que a do semiconductor de função trabalho  $q\phi_s$ , há uma transferência de cargas até o equilíbrio ser alcançado. Neste formato, o nível de Fermi do semiconductor está inicialmente acima do nível de Fermi do metal, portanto para que o alinhamento dos níveis de Fermi ocorra, o nível de Fermi do semiconductor deve ser elevado (os níveis de energia eletrônico devem ser abaixados) com relação ao nível de Fermi do metal. Perto da junção, é formada uma camada de depleção  $W$  com cargas positivas (íons doadores) para compensar a carga negativa do metal [2].

No limite, quando  $v_n \rightarrow \infty$  e  $v_p \rightarrow \infty$ , temos que  $n_0^B \rightarrow n$  e  $p_0^B \rightarrow p$ . Isso significa que quando a velocidade de emissão termiônica tende ao infinito, o contato tende a ser um contato ôhmico. Porém, caso a altura da barreira  $\Phi_B$  for muito pequena, então podemos ter a situação  $n_0^B > n$ ,



dessa forma, neste caso o contato possui uma resistência de canal menor do que a do contato ôhmico.

### 2.6.1 Camada de depleção

Para entender melhor o conceito de camada de depleção, vamos utilizar a Figura 2.5. Essa figura apresenta uma junção p-n, essa junção se aproxima ao  $W$  da Figura 2.2b quando o semicondutor de um contato MS é dopado ao ponto de se aproximá-lo à um metal. Considerando o lado “n” da junção infinitamente dopado, a zona de depleção é formada na interface do “metal n” e se estende até alguns nanômetros para dentro do semicondutor. Vale ressaltar que a zona de depleção não se estende ao metal, dado que o metal já possui muitas cargas dentro de si (neste exemplo ele possui infinitas cargas). Portanto, existem dois materiais, um do tipo “n” ( que possui elétrons livres) e um do tipo “p” ( que possui buracos livres). Assumimos que para cada elétron que sai do lado “n”, fica um íon positivo para trás, ou seja, a junção se transforma com o tempo, alterando assim o seu estado. No tempo  $t = 0$  a junção acaba de ser formada e a corrente de difusão expõe mais íons com o passar do tempo. Conseqüentemente, ocorre a depleção de todos os portadores livres em uma região, chamada então de região ou camada de depleção [4].

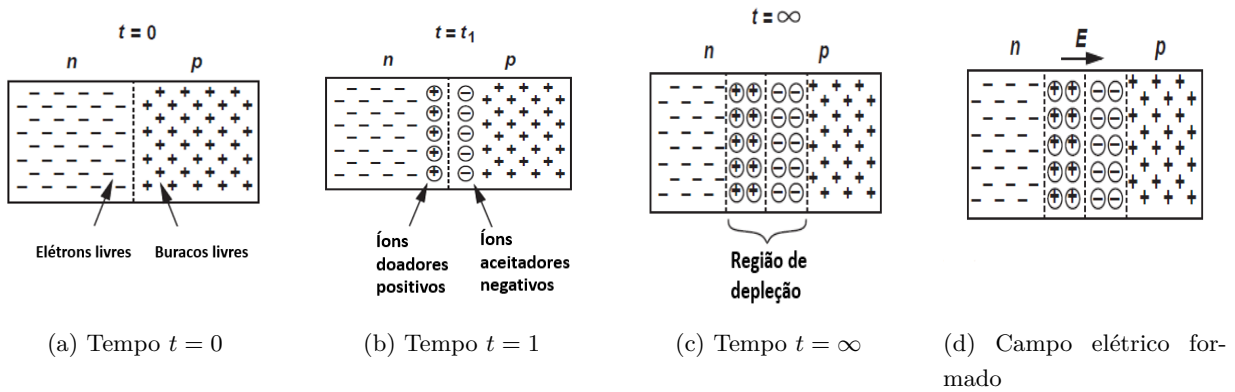


Figura 2.5: Camada de depleção. Figuras adaptadas de [4]

Recordamos então que um objeto ou uma partícula portando qualquer tipo de carga gera um campo elétrico, logo existe um campo elétrico na região de depleção. Este campo elétrico força o fluxo das partículas positivas da esquerda para a direita, contrário as concentrações dos gradientes que impõe a necessidade do fluxo de buracos da direita para a esquerda. Portanto, afirmamos que a junção entra em estado de equilíbrio quando o campo elétrico é forte o suficiente para impedir as correntes de difusão. Alternativamente, podemos afirmar que o equilíbrio é alcançado quando as correntes de deriva (oriundas do campo elétrico) se cancelam com às correntes de difusão (oriundas das concentrações dos gradientes).

## 2.7 Mecanismos de injeção

No setor de pesquisa e desenvolvimento, são criadas diversas técnicas de engenharia ou manipulação de contatos, que tem por objetivo se aproximar um contato Schottky à um contato ôhmico. O objetivo fim da engenharia de contatos é aumentar o número de cargas no dispositivo à ponto de não ocorrer nenhum tipo de limitação de cargas dentro dele. Em geral, existem três principais mecanismos de engenharia de contatos. O primeiro é a dopagem e o segundo mecanismo, não abordado neste trabalho, é a morfologia do semicondutor perto do contato. Por fim, o terceiro mecanismo é o ajuste da função de trabalho do metal por meio da inserção de camadas de injeção de carga. Dentre estes mecanismos, serão explorados a dopagem e algumas técnicas da engenharia de contatos para ajustar a função trabalho do contato, sendo elas (i) a monocamada auto-construída (*Self-Assembled Monolayer* - SAM), (ii) as camadas *buffer*, (iii) a inserção de camadas de óxido metálico na interface e (iv) a oxidação própria do semicondutor. Cada técnica altera os três mecanismos de uma forma diferente, faltando assim um consenso acadêmico na escolha da melhor técnica a ser utilizada.

### 2.7.1 Dopagem

A técnica chamada de dopagem consiste na adição controlada de impurezas no semicondutor, ou seja, são inseridos componentes no semicondutor com a função de melhorar o contato. Ao se adicionar essas impurezas, são criados muitos elétrons livres no semicondutor do que comparado ao semicondutor intrínseco (sem impurezas) [4]. A dopagem é um importante mecanismo de injeção de cargas que auxilia na melhoria do tunelamento direto de portadores de carga. Porém, para semicondutores orgânicos (OSCs) a história é diferente. Os OSCs são usados na sua forma intrínseca, ou seja, eles são normalmente utilizados sem dopagem, dado que o processo de dopagem de um OSC é uma tarefa difícil. Portanto, os OSCs possuem uma concentração de carga muito baixa no equilíbrio térmico devido à grande largura da sua banda de *gap*. Essa pequena concentração de cargas resulta em uma camada de depleção muito grossa na interface metal/semicondutor fazendo com que a injeção de cargas por tunelamento seja muito difícil. Para contornar esse problema, uma das estratégias é inserir uma camada de óxido metálico dopado entre a interface MS, criando-se assim uma dopagem local que, conseqüentemente, diminui a grossura da camada de depleção para alguns nm, fazendo com que o tunelamento quântico seja uma opção viável [1].

A partir da Figura 2.6 é possível ver a redução na resistência de contato  $R_C$  (soma da resistência de interface  $R_{int}$  com a resistência do eletrodo “bulk”  $R_{bulk}$ ), dado que a resistência da interface diminuiu. Ainda nesta figura, também é observada a ação do tunelamento no contato dopado, diferentemente da emissão termiônica.

#### 2.7.1.1 Dopagem do corpo em orgânicos

Como as estruturas dos materiais orgânicos e inorgânicos são diferentes, é fácil concluir que existem diferenças significativas nas propriedades de camadas dopadas. Entretanto, existem diver-

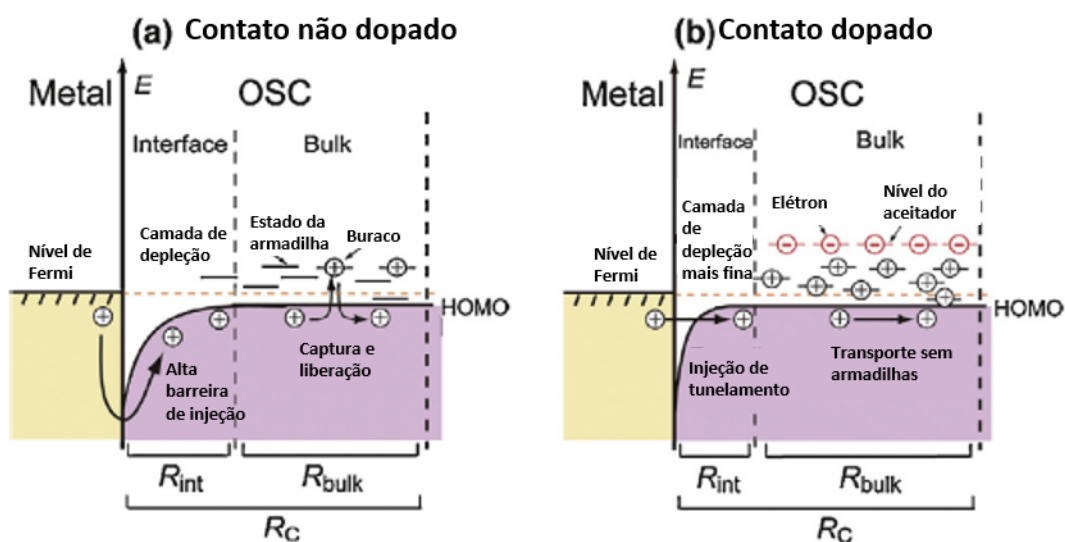


Figura 2.6: Visualização da técnica de dopagem. Figura adaptada de [1]

As similaridades nos princípios básicos de dopagem. O princípio básico é adicionar uma adição de uma impureza aceitadora ou doadora de elétrons que gera portadores de carga móveis adicionais ao dispositivo. Porém, no caso de materiais inorgânicos, o dopante do tipo “n” deve doar elétrons para o nível LUMO e o dopante do tipo “p” deve extrair elétrons do nível HOMO para criar buracos[14]. A melhor técnica para dopar contatos orgânicos não é clara, porém as pesquisas nesse tema são numerosas. Por exemplo, a utilização de gases oxidantes não obteve sucesso pelo fato desses dopantes serem muito pequenos para providenciar camadas dopadas térmicas e estáveis de dispositivos bipolares. Outro exemplo é a utilização de pequenos átomos (como o lítio ou o céσιο) [15][16] ou até pequenas moléculas (como os ácidos de Lewis) [17] para dopagem. Estes métodos não obtiveram sucesso já que existe uma instabilidade nos dispositivos construídos acarretada pela difusão. Desta forma, a dopagem de materiais orgânicos é um processo extremamente complexo e ainda não desvendado.

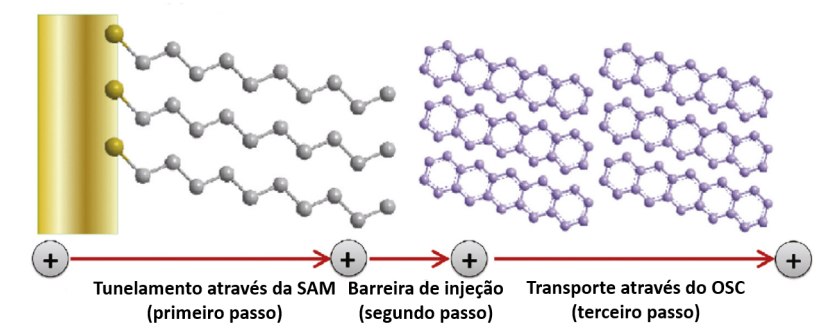
## 2.7.2 Camadas de injeção de cargas

Com o objetivo de se melhorar a injeção de cargas no contato, pode-se inserir uma camada composta de materiais, condutores ou não, que auxiliam na injeção de cargas do dispositivo. Existem várias técnicas e estratégias para se realizar este procedimento, sendo que cada técnica tenta alcançar o mesmo objetivo de diferentes formas.

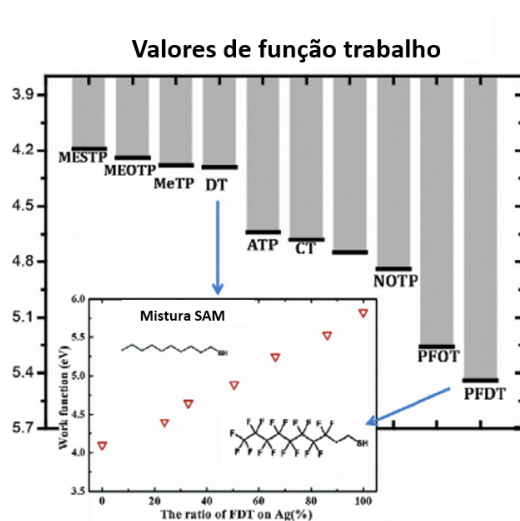
### 2.7.2.1 A monocamada auto-construída

Esta é uma técnica de ajuste fino da interface do contato que auxilia a injeção de elétrons ou buracos em OSCs a partir da adsorção de uma monocamada auto-construída [18]. Para tanto, são construídas monocamadas de diversos materiais como o naftaleno e alcanetiol para ser adsorvida em contato com o eletrodo metálico. Entretanto, esta técnica possui a desvantagem de possuir

ligações longas, criando uma barreira de tunelamento grossa, como pode ser visto na Figura 2.7a. Os transistores modificados a partir dessa técnica exibem tanto uma resistência de contato menor, quanto uma maior corrente de injeção de cargas comparados com transistores não modificados [1].



(a) Visualização da técnica SAM



(b) Ajuste da função trabalho

Figura 2.7: A técnica SAM. Figuras adaptadas de [1]

A Figura 2.7a mostra um contato metal/monocamada auto-construída/OSC. Nesta figura é observada a ligação longa provocada pelas monocamadas auto-construídas. O ajuste da função de trabalho é essencial para se propiciar um melhor contato. Desta forma, a Figura 2.7b revela uma grande oscilação nos valores de função de trabalho para as diferentes modificações feitas em ouro. A pequena figura dentro da Figura 2.7b também mostra uma mistura entre duas monocamadas auto-construídas, com o intuito de aumentar o alcance da região de ajuste da função trabalho. As monocamadas auto-construídas são utilizadas somente para *bottom-contact*, ou seja, elas só podem ser realizadas para certas configurações de dispositivos. Os contatos deste tipo são ilustrados na Figura 2.8.

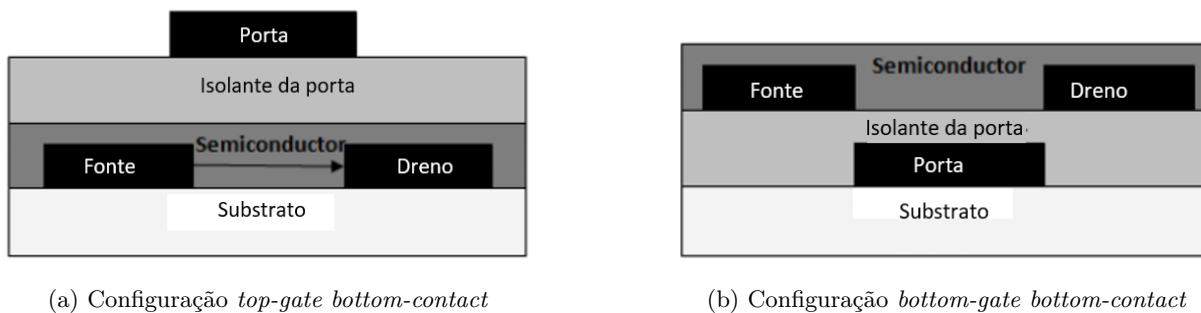


Figura 2.8: Configurações do tipo *bottom-contact*. Figuras adaptadas de [5]

### 2.7.2.2 A camada *buffer*

O processo de injeção de cargas na interface MS tem um grande impacto nas propriedades elétricas de dispositivos orgânicos, sendo às vezes mais dominante do que o processo de transporte de cargas em semicondutores orgânicos. Para contornar o problema da altura da barreira, o uso de metais com altos valores de função trabalho é considerado o fator mais importante para que a injeção de cargas seja possível. Porém, o alinhamento dos níveis de Fermi é susceptível à oxidação natural da superfície do metal sob a atmosfera ambiente, sendo essa oxidação uma reação inevitável na produção de dispositivos reais. Essa reação que ocorre entre o metal e o oxigênio depende do potencial do eletrodo do metal  $E_p$ . Ao se fabricar OFETs com duas camadas (uma camada normal e uma camada *buffer*) no eletrodo em uma atmosfera inerte, foi observado que o contato do metal é espontaneamente oxidado na interface “metal/semicondutor orgânico” sob atmosfera ambiente, sendo que a formação deste filme de óxido afeta fortemente a eficiência de injeção de cargas em dispositivos orgânicos. Devido a formação do filme fino de óxido na interface de contato,  $E_p$  é o fator mais dominante sobre a injeção de cargas, contrário a seleção tradicional de metais com maiores funções trabalho, quando o dispositivo é exposto ao ar. Todos os dispositivos orgânicos com contatos metálicos estão sujeitos ao risco de oxidação natural sob condições ambientes de atmosfera, logo esse mecanismo gera uma descoberta crítica para o controle de interfaces “metal/semicondutor orgânico” na aplicação prática de eletrônicos [6].

Na Figura 2.9 é vista a camada *buffer* entre o contato de ouro e o semicondutor de pentaceno. Em contraste com as monocamadas auto-construídas, as camadas *buffer* podem ser somente realizadas para as configurações de *top-contact*, representadas pela Figura 2.10.

### 2.7.2.3 A inserção de camadas de óxido metálico

A técnica de inserção de camadas de óxido metálico na interface “eletrodo metálico/semicondutor orgânico” é uma abordagem comum para a melhoria das propriedades de contato em dispositivos orgânicos (OFETs, OLEDs e OPVs). Não se sabe ainda o porquê deste fenômeno (normalmente considerado contra intuitivo) ocorrer, porém este é amplamente confirmado por meio de vários experimentos. Existe um extensivo estudo sobre os óxidos metálicos, em especial os metais de transição, sendo utilizados como camadas intermediárias para suavizar a limitação dos contatos

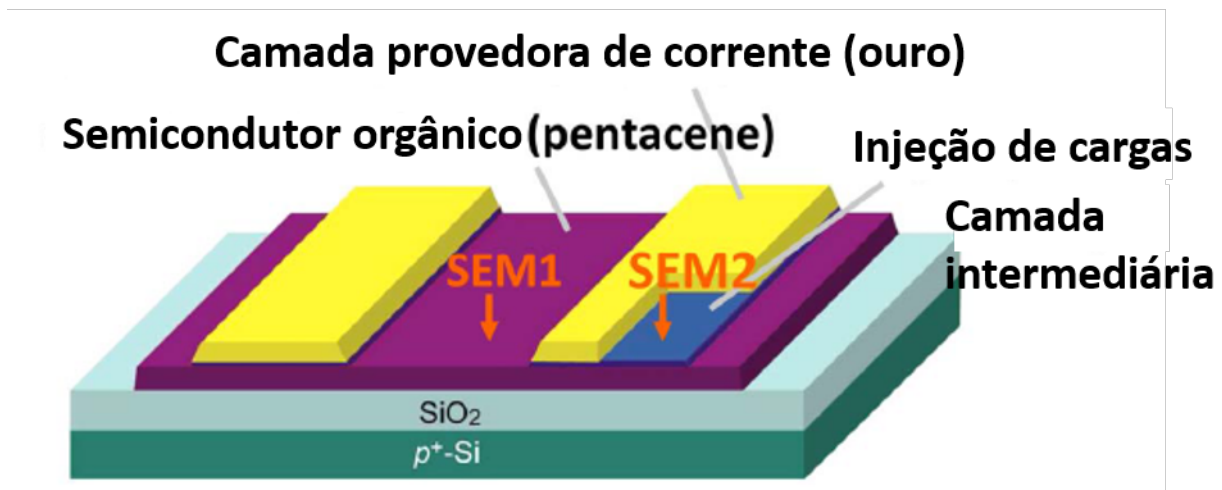
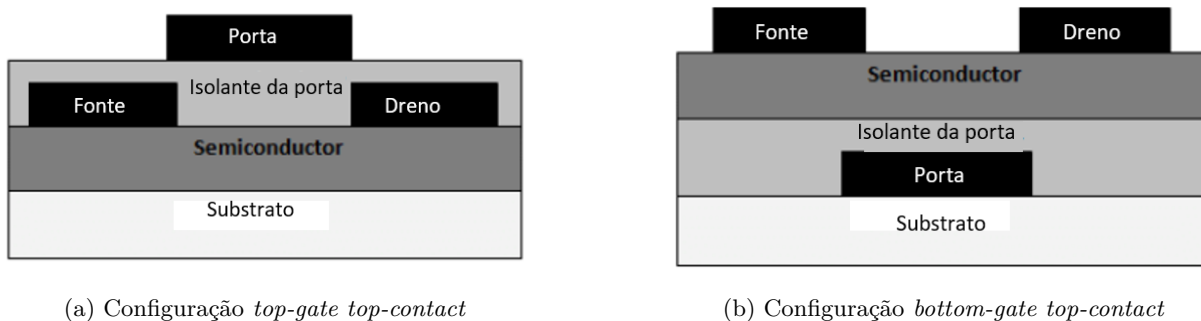


Figura 2.9: Visualização da técnica de camadas buffer. Adaptado de [6]



(a) Configuração *top-gate top-contact*

(b) Configuração *bottom-gate top-contact*

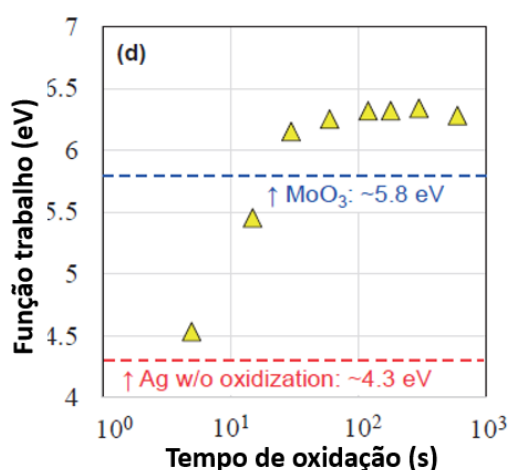
Figura 2.10: Configurações do tipo *top-contact*. Figuras adaptadas de [5]

em dispositivos orgânicos. Os óxidos metálicos possuem uma vasta gama de funções de trabalho (de 3 a 7 eV), contendo também um grande espectro de propriedades elétricas de isolantes, semicondutores e metais [19][20]. A partir dessas características, os óxidos de metal são utilizados para o ajuste da injeção ou extração de elétrons e buracos em diferentes dispositivos. Desta forma, existem vários experimentos que revelam a melhoria da corrente de saída e a diminuição da resistência de contato a partir da utilização desta técnica [1].

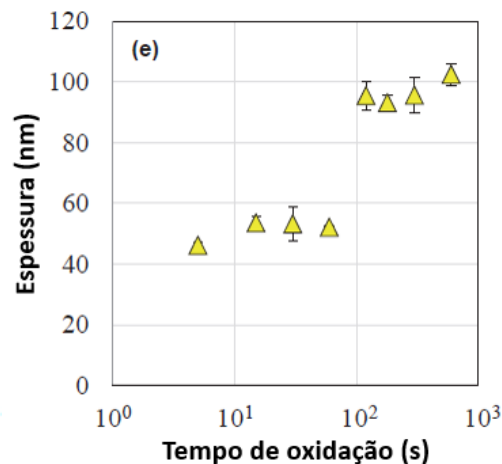
#### 2.7.2.4 A oxidação própria do contato

Esta técnica difere levemente da técnica anteriormente apresentada. Há uma sutil diferença entre as duas, pois, neste caso, ocorre a oxidação própria do contato em condições de alta oxigenação, diferentemente da inserção de uma camada de óxido (já previamente oxidado) em que não é considerada a oxidação do contato. A oxidação própria do contato não necessariamente o piora, por mais contra intuitivo que isso seja. A Figura 2.11a revela que a função trabalho da prata oxidada aumenta com o tempo de oxidação e se estabiliza por volta de 6.3 eV, sendo este valor de função de trabalho maior do que o seu análogo formado por uma camada de  $MoO_3$  (com uma função trabalho de 5.8 eV) [7]. Concluímos que a formação da camada de  $AgO$  previne o aumento

do valor da função trabalho, ou seja, a função trabalho fica constante para longos períodos de oxidação. Vemos por meio da Figura 2.11b que a grossura da camada de óxido de prata aumenta gradualmente com o tempo de oxidação. Logo, a formação de uma camada grossa de óxido é atribuída à constante função de trabalho para longos períodos de oxidação, apesar dessa característica da grossura não ser totalmente correspondida pelo comportamento da função trabalho.



(a) Função trabalho de *Ag* oxidada e não oxidada e de uma camada de *MoO<sub>3</sub>* pelo tempo de oxidação



(b) Dependência da grossura dos eletrodos de *Ag* pelo tempo de oxidação

Figura 2.11: Influência do tempo de oxidação. Figuras adaptadas de [7]

Na Figura 2.12 são avaliadas as características IV de OFETs (Transistores de efeito de campo orgânicos) que possuem camadas de *Ag* ou *AgO<sub>x</sub>* resultantes de diferentes tempos de oxidação. A base de comparação utilizada nesta análise são as características IV de um OFET convencional com eletrodos de ouro. As curvas na parte superior do gráfico se remetem ao eixo vertical esquerdo, complementarmente as curvas da parte inferior do gráfico se remetem ao eixo vertical direito. Antes da oxidação da *Ag*, os OFETs que possuem eletrodos de prata exibem correntes menores do que o OFET de ouro, ocorrência vista na região abaixo de  $V_{GS} = -30$  V. Por meio deste fato, concluímos que a injeção de buracos é inferior no OFET de *Ag*, comparado com o OFET convencional de *Au*. Entretanto, comparado ao valor do OFET sem oxidação em  $V_{GS} = -5$  V, uma corrente de saída de uma ordem maior do que a corrente de entrada é observada para o OFET com óxido de prata que sofreu oxidação por 5 s. Este resultado implica que a injeção de buracos é aprimorada pela oxidação da superfície do eletrodo de *Ag*.

A Figura 2.12 também revela a dominância de todos os contatos de prata oxidados sobre o contato de ouro. Desta forma, qualquer contato de prata oxidado é melhor do que o de ouro, porém essa melhoria não é linear, ou seja, existe um tempo ótimo de oxidação do contato. No caso da prata, a oxidação de 60 s se revela como a melhor de todas, dado que para tempos de oxidações superiores a 60 s a corrente de saída do dispositivo diminui (mesmo essas correntes diminuindo, elas ainda são superiores ao contato de ouro). Tal fenômeno é atribuído ao composto formado a partir da oxidação da prata. Nos seus estágios iniciais de oxidação, é formado o composto óxido semiconductor *Ag<sub>2</sub>O*, porém caso o tempo de oxidação se estenda muito, ocorrerá a formação do

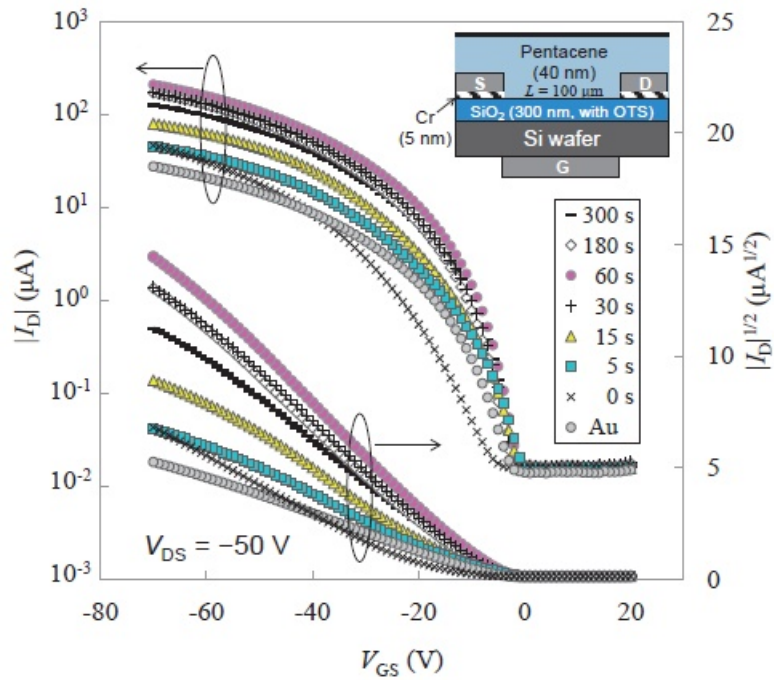


Figura 2.12: Características IV para camadas de óxido de prata com diferentes períodos de oxidação. Figura adaptada de [7]

composto óxido isolante  $AgO$ . Portanto, os dois compostos formados a partir da oxidação da prata auxiliam na injeção de cargas no contato, porém um auxilia mais do que o outro.

## 2.8 TCAD

O desenho tecnológico auxiliado por computadores, do inglês *Technology Computer-Aided Design* (TCAD), se refere ao uso de simulações computacionais para o desenvolvimento e otimização de dispositivos em conjunto com o processamento tecnológico de semicondutores. O TCAD desenvolvido pela Synopsys possui ferramentas de simulação de dispositivos elétricos e ambientes de simulação do tipo *Graphical User Interface* para a análise dos resultados da simulação e para o gerenciamento das tarefas de simulação. O TCAD, para o cálculo dos parâmetros dos dispositivos, utiliza do modelo de deriva-difusão para o transporte de cargas, resolvendo iterativamente as equações diferenciais de continuidade e de Poisson. Portanto, estes temas exigem uma análise um pouco mais aprofundada.

### 2.8.1 Modelo de difusão-deriva

Os processos de difusão e deriva são processos de transporte de portadores de carga, ou seja, são processos de movimento de carga dentro de um semicondutor. Estes mecanismos de transporte dão origem à corrente no dispositivo. Sabemos, por meio de física básica e pela lei de Ohm, que um material pode conduzir corrente em resposta à uma diferença de potencial e, portanto, à um campo



elétrico. O campo elétrico acelera os portadores de carga dentro do material, forçando assim o fluxo de portadores de carga de uma ponta a outra dentro do material. Portanto, definimos o movimento de portadores ocasionados por um campo elétrico de “deriva”. Além do mecanismo de deriva, existe outro mecanismo que pode dar origem à corrente elétrica dentro do dispositivo, chamado de difusão [4]. O processo chamado de “difusão” parte do princípio da diferença de concentrações de portadores de carga dentro do material. Suponha que ocorra a injeção de portadores de carga em um semiconductor, criando-se assim uma densidade de cargas não uniforme. Mesmo sem a presença de um campo elétrico, os portadores de carga se movem em direção à região de baixa concentração de portadores de carga, carregando assim uma corrente elétrica até que a não-uniformidade se acabe. Este mecanismo é então caracterizado como o mecanismo de difusão. O modelo oferecido pelo SDevice é chamado de modelo difusão-deriva e parte do par de equações (2.15) e (2.16).

$$\vec{J}_n = \mu_n n \nabla E_C + D_n \nabla n \quad (2.15)$$

$$\vec{J}_p = \mu_p p \nabla E_C + D_p \nabla p \quad (2.16)$$

Onde  $\mu_n$  é a mobilidade de elétron e  $D_n$  é o coeficiente de difusão ou difusividade do elétron. Os primeiros termos da equação levam em consideração a parcela de deriva da corrente, enquanto que a segunda parte da equação leva em consideração a parcela de difusão da corrente.

## 2.8.2 Equação de Poisson e equação de continuidade

As equações de Poisson e de continuidade são duas equações diferenciais, parciais e não lineares. Para se resolver essas equações, o simulador *SDevice* utiliza o método de Newton por meio de um esquema desenvolvido por Bank e Rose. O simulador segue então o algoritmo de Newton e as iterações do algoritmo não se interrompem até que os critérios de convergência sejam cumpridos. Um exemplo de critério de convergência é o erro relativo às variáveis medidas, em outras palavras, quando o resultado for menor do que o erro proposto, ocorre a interrupção do algoritmo. A equação de continuidade de elétrons e buracos (2.17) serve para analisar os efeitos de fenômenos dependentes do tempo, como a geração, injeção em baixos níveis e recombinação. Como o processo de recombinação pode causar uma variação na distribuição de portadores (em uma janela de análise transiente), este processo precisa então ser analisado, principalmente, nos processos em que existam correntes de difusão dentro do dispositivo [21].

$$\nabla \cdot \vec{J}_n = qR_{\text{net}} + q \frac{\partial n}{\partial t} \quad - \nabla \cdot \vec{J}_p = qR_{\text{net}} + q \frac{\partial p}{\partial t} \quad (2.17)$$

Nesta equação,  $R_{\text{net}}$  é a taxa líquida de recombinação. Vale ressaltar que, este parâmetro é igual para as duas equações pelo fato de a recombinação de um buraco ocorrer somente com a recombinação de um elétron, dado que não existe criação de cargas no dispositivo. O  $R_{\text{net}}$  varia com o campo elétrico, a dopagem, a temperatura e a iluminação. Considerando um dispositivo que é alimentado puramente com uma corrente DC, como é o caso de todas as simulações deste trabalho, o segundo termo da equação  $\frac{\partial n}{\partial t}$  é zero, pois sob uma corrente DC não existe uma variação transiente.

A equação de Poisson (2.18) é utilizada para se determinar a distribuição de potencial e a distribuição de campo elétrico causados por uma densidade de cargas dentro da camada de depleção.

$$\nabla \cdot \epsilon \nabla \phi = -q(p - n + N_D - N_A) \quad (2.18)$$

As concentrações  $N_D$  e  $N_A$  são fixas e  $n$  e  $p$  são responsáveis pelo fluxo da corrente no dispositivo. Portanto, desta equação concluímos que ao se conhecer as distribuições de todas as cargas no dispositivo, é então possível calcular o campo elétrico do mesmo.

As simulações dos dispositivos no trabalho presente são baseadas, como dito anteriormente, na solução numérica do par de equações acopladas (sendo elas a equação de Poisson e a equação de continuidade) na sua forma de deriva-difusão. Essas equações diferenciais resultam de uma abordagem bruta de modelagem que transcende a natureza atomística ou molecular do semicondutor. No caso de compostos orgânicos, a energia resultante do nível da banda de condução deve ser interpretada como a energia média do orbital molecular desocupado mais baixo (LUMO). Correspondentemente, o nível da banda de valência representa a energia média do orbital molecular ocupado mais alto (HOMO). Devido ao ambiente não ser perfeitamente ordenado em cada molécula orgânica, nem todos os LUMOs (HOMO) em um determinado ponto espacial ao longo do dispositivo eletrônico possuem a mesma energia. A distribuição de energias LUMO (HOMO) dá origem a bandas, que desempenham um papel similar no transporte eletrônico do que suas contrapartes coerentes em materiais inorgânicos.

### 2.8.3 Condições de contorno

As equações (2.17) e (2.18) são utilizadas em conjunto dentro do modelo de difusão-deriva do SDevice para se calcular a densidade de corrente no dispositivo. Desta forma, dizemos que as equações (2.18) e (2.17) são acopladas, pois cada iteração de cálculo da corrente no modelo depende do resultado de cálculo de cada uma das duas equações. Para se resolver, numericamente, essas duas equações não lineares acopladas, devemos definir as condições de contorno do dispositivo. Desta forma, para solucionar as equações de continuidade e de Poisson devemos utilizar as equações de contorno dos contatos, representadas nos subcapítulos 2.5 e 2.6. Cada contato possui seu próprio conjunto de condições de contorno, fazendo com que as suas características mudem completamente de um para outro.

# Capítulo 3

## Desenvolvimento

### 3.1 Introdução

Este capítulo explora os métodos empregados e estratégias utilizadas para simularmos os contatos que resultam nos objetivos descritos no Capítulo 1. Este trabalho visa a modelagem de um resistor semiconductor, em que são analisados o máximo de fenômenos que ocorrem em sua interface de contato.

### 3.2 *Software Sentaurus Device*

Neste trabalho, o *software* simulador Sentaurus Device da empresa Synopsys e o seu devido manual foram utilizados para o desenho de contatos auxiliado por computador. A partir do manual, existem dois tipos arquivos necessários para realizar a etapa descrita anteriormente, sendo eles o arquivo de geometria e o arquivo de comando. A linguagem utilizada para se criar os códigos no SDevice é a linguagem Scheme.

#### 3.2.1 Linguagem Scheme

Esta linguagem consiste de um conjunto de definições de funções, ou seja, o processo de programação ocorre por meio de várias funções que serão avaliadas pelo compilador. Nesta linguagem não existe uma função principal nem uma estrutura imposta ao programa, portanto existe uma liberdade para a estruturação dos arquivos. O fim de cada função não é demarcado por um símbolo ao seu final, já que o comando começa com um parêntese aberto, ele termina a função em um parêntese fechado. Para a linguagem Scheme, uma boa prática adotada neste trabalho foi a restrição de uma função por linha do arquivo.

### 3.2.2 Geometria do dispositivo

O arquivo de geometria do dispositivo descreve os limites e restrições físicas das várias regiões que o compõe, suas limitações, os tipos de materiais envolvidos e o posicionamento de todos os contatos elétricos presentes no dispositivo. Neste arquivo, delimitamos tanto a geometria do elemento (a sua altura, largura e comprimento) quanto a sua dopagem interna. Aqui também pode ser definido o quão fina ou grossa será a malha de refinamento do dispositivo definida no arquivo, sendo esta a estrutura responsável pelo número de pontos a serem capturados nas iterações dos algoritmos (por meio do arquivo de comando). O código de referência disposto a seguir é de um contato ôhmico de 200 nm (linha 1) de largura e altura. A modelagem é feita por meio de dois eletrodos (linhas 2 a 5), um do lado esquerdo (nomeado “Left”) e outro do lado direito (nomeado “Right”), neste caso os eletrodos estão posicionados a 100 nm no eixo “y” do dispositivo e em suas duas extremidades no eixo “x”. A sua dopagem (linhas 6 e 7) é de Arsênio, com uma concentração de portadores equivalente a  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . As linhas 8 a 11 do código se referem a criação das malhas de refinamento e, por fim, a linha 12 serve para nomear o arquivo de saída que possui todas as características de geometria do dispositivo.

```
(sdegeo:create-rectangle (position 0 0 0) (position 0.2 0.2 0) "Silicon" "SiliconReference")
(sdegeo:define-contact-set "Left")
(sdegeo:define-2d-contact (find-edge-id (position 0 0.1 0))"Left")
(sdegeo:define-contact-set "Right")
(sdegeo:define-2d-contact (find-edge-id (position 0.2 0.1 0))"Right")
(sdedr:define-constant-profile "ConstAsDoping" "ArsenicActiveConcentration" 1e18)
(sdedr:define-constant-profile-region "ConstProfilePlace" "ConstAsDoping" "SiliconReference")
(sdedr:define-refinement-size "Mesh" 0.001 0.1 0.001 0.02)
(sdedr:define-refinement-function "Mesh" "MaxLenInt" "SiliconReference" "Contact" 2e-3 2)
(sdedr:define-refinement-region "BodyMesh" "Mesh" "SiliconReference")
(sde:build-mesh "smesh" "" "ohmic_contact_reference")
```

Este código criará um dispositivo equivalente ao visto na Figura 3.1. Vale ressaltar que o fluxo da elétrons é definido pela tensão aplicada ao eletrodo esquerdo, sendo este representado pelo número 1 no esquemático. O fluxo de elétrons adquire o sentido da esquerda para direita enquanto o eletrodo esquerdo possuir uma tensão negativa. De forma complementar, a corrente e o fluxo de elétrons serão opostos ao se polarizar o eletrodo esquerdo positivamente. O eletrodo 2 neste trabalho será sempre representado por um contato ôhmico, enquanto que o eletrodo 1 poderá ser um contato ôhmico ou Schottky dependendo do tipo de análise (a alteração entre os tipos de contatos será abordada posteriormente). Quando a simulação do arquivo de geometria é bem sucedida, os resultados da simulação são armazenados em um arquivo com terminação *msh.tdr*, neste exemplo o arquivo de saída é o *ohmic\_contact\_reference\_msh.tdr*. Este arquivo será lido, posteriormente, pelo arquivo de comando do dispositivo.

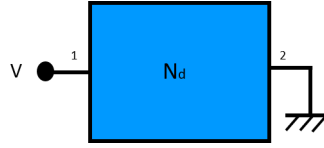


Figura 3.1: Esquemático

Os valores de constantes importantes do silício e do dióxido de silício estão representados na Tabela 3.1. Tais valores são relevantes neste trabalho para termos uma base de comparação mais palpável ao confrontarmos diferentes materiais.

	<i>Si</i>	<i>SiO<sub>2</sub></i>
$E_g$ [eV]	1.17	9
$N_C$ [cm <sup>-3</sup> ]	$2.8 * 1^{19}$	-
$N_V$ [cm <sup>-3</sup> ]	$1.04 * 1^{19}$	-
$\chi$ [eV]	4.05	0.9
$N_D$ [cm <sup>-3</sup> ]	$1^{18}$	-

Tabela 3.1: Características do *Si* e *SiO<sub>2</sub>*

### 3.2.3 Arquivo de comando do dispositivo

No arquivo de comando são definidas as características internas do elemento e lá são definidos os arquivos de entrada e de saída que carregam os resultados das simulações, os contatos que são os eletrodos com suas condições de contorno, os conjuntos de equações físicas que serão aplicados a simulação do dispositivo, as características físicas que serão salvas no arquivo de saída e as equações que serão resolvidas iterativamente pelo simulador. A seguir é apresentado um exemplo de um arquivo de comando típico.

```
File{
* Input files
Grid = "ohmic_contact_reference_msh.tdr"
* Output files
Plot = "ohmic_contact_reference"
Current = "ohmic_contact_reference"
Output = "Referencia"
}

Electrode{
{Name = "Left" Voltage=0.0}
{Name = "Right" Voltage=0.0}
}

Plot{
eDensity hDensity eCurrent hCurrent
Potential SpaceCharge ElectricField
eMobility hMobility eVelocity hVelocity
Doping DonorConcentration AcceptorConcentration
```

```

ConductionBandEnergy ConductionBandEnergy
ValenceBandEnergy ValenceBandEnergy
}

Math{
  Extrapolate
  RelErrControl
}

Solve{
  * Initial guess
  Poisson
  Coupled {Poisson Electron Hole}
  * Bias ramp
  Quasistationary ( MaxStep = 0.005 Goal {Name="Left" Voltage=-5.0})
  {Coupled {Poisson Electron Hole}}
}

```

Na seção *File* do arquivo são carregadas as características retiradas do arquivo de geometria por meio da definição do *Grid*. O arquivo de saída do *Plot* detalha os valores das características físicas do dispositivo em todos os instantes, o arquivo de corrente *Current* reflete os valores de corrente no tempo e, finalmente, o arquivo de saída *Output* gera um registro do processo de simulação feito pelo SDevice. Na seção *Electrode* serão então definidos os nomes do eletrodo (que devem necessariamente coincidir com o arquivo de geometria) e as condições de contorno iniciais de tensão para cada eletrodo (pode-se também atribuir uma função trabalho ao eletrodo, criando-se assim uma barreira de potencial no dispositivo). A seção *Plot* inclui todas as características físicas que são relevantes para a análise do dispositivo como um todo, ou seja, somente os parâmetros aqui inseridos serão salvos no arquivo *Plot*. A seção *Math* engloba comandos matemáticos definem algoritmos de iteração que simulador utilizará. Finalmente, a seção *Solve* controla as sequências de soluções a serem obtidas pelo simulador, por exemplo o comando *Poisson* especifica a solução inicial da equação não linear de Poisson e os eletrodos terão as condições iniciais elétricas definidas na seção *Electrode*.

### 3.2.4 O ambiente da *Sentaurus*

Para gerarmos os arquivos dentro do ambiente da *Sentaurus*, criamos uma representação visual para auxiliar no entendimento do processo. A Figura 3.2 é a representação dos comandos utilizados para gerarmos os resultados das simulações de geometria e das propriedades físicas do dispositivo em conjunto com a integração ao MATLAB.

O primeiro comando é utilizado para simular a geometria do dispositivo, gerando o arquivo *msh.tdr*. O segundo comando gera o arquivo *.plt* e o terceiro comando gera os arquivos que serão utilizados no MATLAB. Desta forma, caso as simulações do dispositivo necessitem de uma visualização do diagrama de bandas, devemos seguir todos esses passos para poder simulá-lo. Porém, caso somente as curvas IV sejam desejadas, então pode-se pular as duas últimas etapas descritas na figura. As curvas IV são geradas ao fim do arquivo de comando do dispositivo, logo

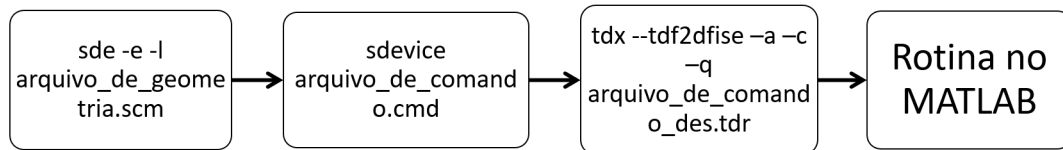


Figura 3.2: Representação visual no ambiente TCAD da *Sentaurus*

não é necessária a transformação do arquivo *.plt* em uma rotina do MATLAB.

### 3.3 Fluxograma

A partir do contato MS, este trabalho explora várias estratégias de engenharia de contatos para se tentar desenvolver um contato ôhmico. O fluxograma das atividades aqui desenvolvidas é apresentado na Figura 3.3.

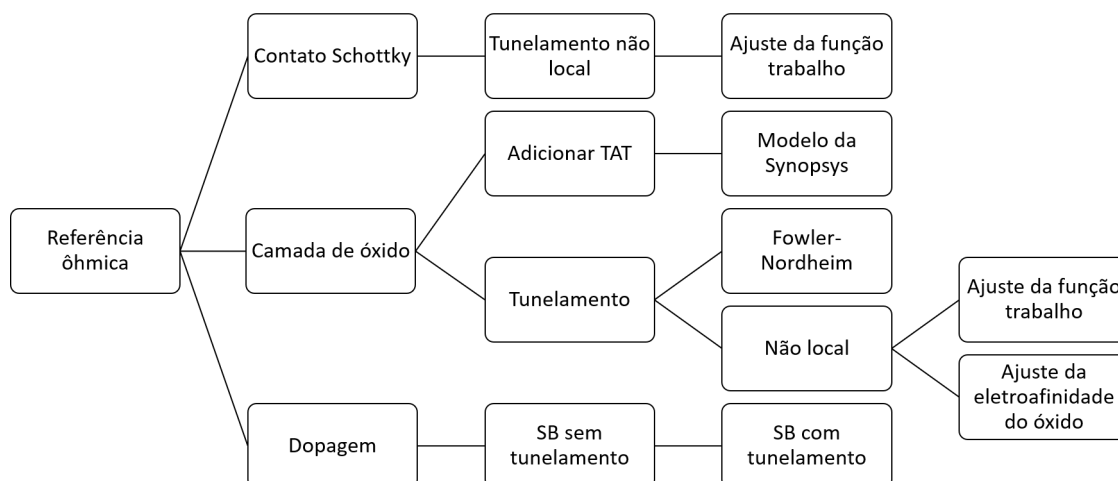


Figura 3.3: Fluxograma das estratégias utilizadas

A primeira parte do trabalho consiste na simulação da referência do trabalho, ou seja, na

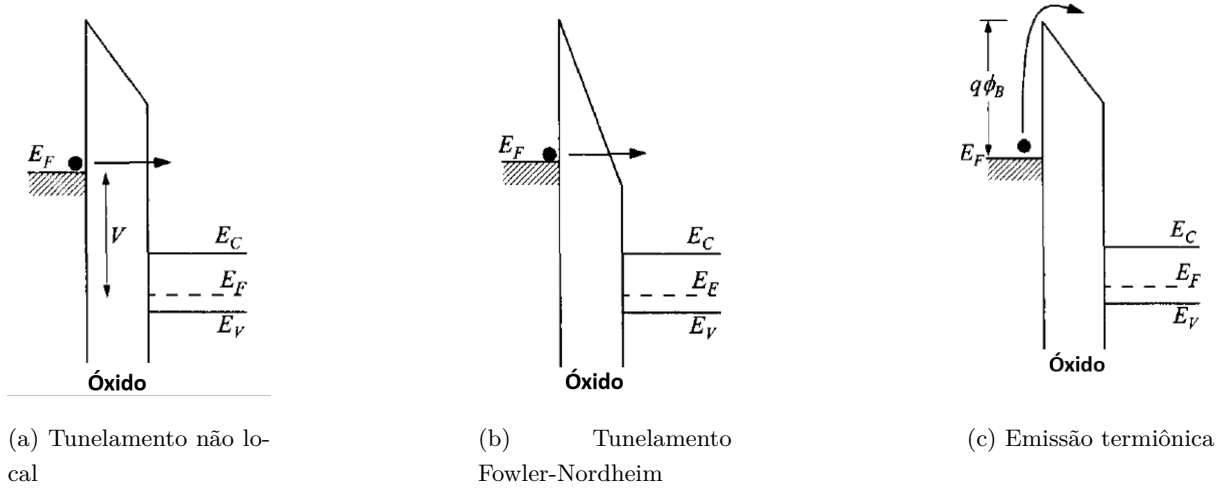


Figura 3.4: Mecanismos de condução de corrente. Figura adaptada de [8]

simulação do contato ôhmico. As principais características para análise são o diagrama de bandas e as curvas IV do dispositivo.

Após obtermos a referência, simulamos os contatos Schottky, lembrando que estes são os contatos reais que possuem uma barreira de potencial. Ao aprimorarmos o contato, obtivemos uma versão final do contato Schottky que engloba vários fenômenos da interface do contato, equiparando-os ao contato ôhmico. Concluída esta etapa, simulamos algumas técnicas de engenharia de contatos, aqui já explicados, com o intuito de melhorar a condução de corrente em contatos reais e exploramos as dificuldades de simular estas técnicas.

### 3.4 O tunelamento quântico

Na ótica da física clássica, quando portadores de carga possuem energia menor do que uma barreira de potencial, eles serão abruptamente freados e não atravessam essa barreira. Ao analisar esse fenômeno pela ótica da física quântica, a natureza ondular do elétron deve ser considerada. O elétron, como onda, não sofre uma parada abrupta nos limites da barreira, ou seja, não somente os portadores de carga podem existir dentro da barreira como também existe a probabilidade de a barreira ser atravessada, caso ela seja fina o suficiente [8]. Tal fato é observado experimentalmente, como no caso de uma corrente parasitária presente no MOSFET saindo do eletrodo *gate*, essa corrente é uma corrente residual neste eletrodo ocasionada pelo tunelamento quântico de elétrons [4]. A Figura 3.4 ilustra os três mecanismos de condução de corrente, inclusive o tunelamento, analisados neste trabalho.

A partir desses três mecanismos de condução apresentados na Figura 3.4, o tunelamento é segregado em (i) tunelamento sobre o óxido e (ii) tunelamento sobre a barreira.



### 3.4.1 Tunelamento sobre a barreira

O caso geral de tunelamento sobre uma barreira de potencial é o tunelamento não local. O tunelamento não local ocorre abaixo da faixa de 5 nm. O tunelamento não local não depende somente das quantidades presentes em um ponto, mas também depende das propriedades geométricas desse ponto. Sendo assim, o cálculo da corrente de tunelamento não pode ser simplesmente atribuído às características das quantidades locais de um único ponto. O software SDevice possui uma ferramenta para o cálculo da característica não local do tunelamento, retirada das soluções da equação de transporte e da equação de Poisson.

### 3.4.2 Tunelamento sobre óxido

Um caso mais específico de tunelamento é o Fowler-Nordheim, sendo este uma abordagem analítica do tunelamento geral, ocorrendo somente sob certas condições em óxidos. O tunelamento FN é um tipo de tunelamento que parte de duas premissas: (i) os portadores de carga tunelam somente por uma parte específica da barreira; (ii) a barreira possui formato triangular como disposto na Figura 3.4b. Este tunelamento é caracterizado pelo alto campo elétrico produzido por uma diferença de potencial nos terminais dos eletrodos. A Figura 3.5 apresenta uma melhor visualização do contato MOS, em que existe a presença de um óxido entre o contato MS.

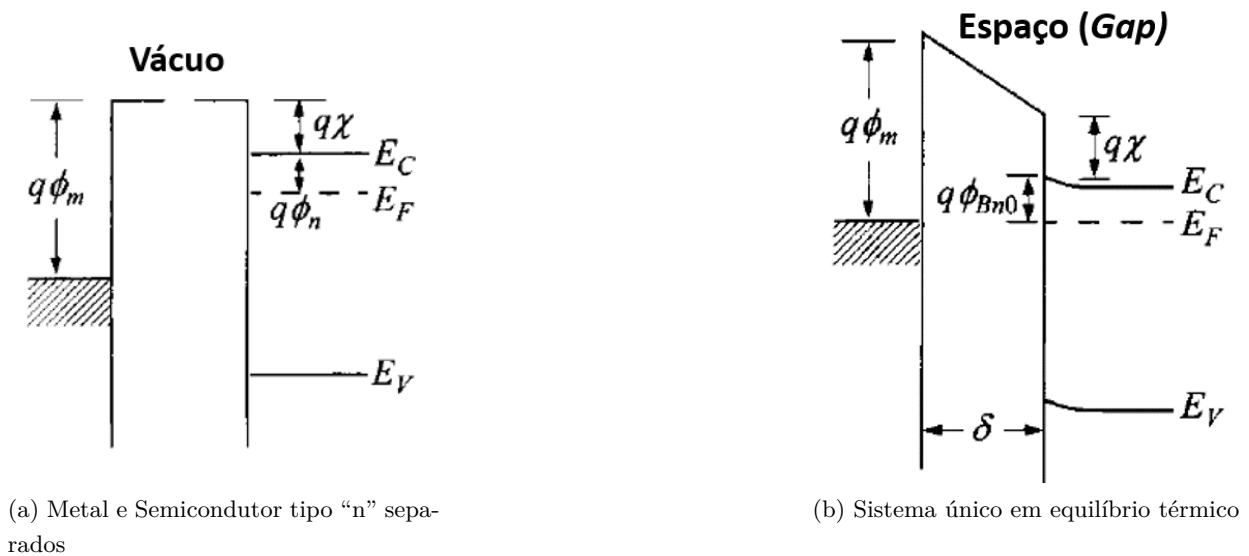


Figura 3.5: Relação de energia eletrônica. Figuras adaptadas de [8]

Sendo a espessura do óxido representada pela letra  $\delta$ . Desta forma, ao tunelar, o elétron deve atravessar diretamente a barreira imposta pelo óxido. A probabilidade do tunelamento ocorrer é inversamente proporcional à grossura da barreira. Basicamente, se a diferença de potencial entre os eletrodos for alta o suficiente e a espessura de óxido for fina o suficiente, cria-se um campo elétrico forte o bastante para que ocorra este tunelamento [8]. É importante notar que este tipo de tunelamento é um caso especial do tunelamento não local. A equação de contorno

que o Sentaurus Device utiliza para a caracterização do tunelamento Fowler-Nordheim, retirada do manual, é dada por:

$$j_{FN} = AF_{ins}^2 \exp\left(\frac{-B}{F_{ins}}\right) \quad (3.1)$$

Onde  $F_{ins}$  é o campo elétrico do isolante na interface, sendo  $A$  e  $B$  constantes físicas. Este tipo de tunelamento depende da espessura da camada de óxido na qual ocorrerá o tunelamento, pois a espessura do óxido é inversamente proporcional ao valor do campo elétrico. A tensão aplicada aos terminais do dispositivo também influencia este tipo de tunelamento, dado que  $F_{ins} \propto V_{aplicada}$ . Para que este tunelamento ocorra é necessário assumir que (i) a altura da barreira é muito maior do que  $kT$ , (ii) as concentrações de portadores em  $x = 0$  e em  $x = W_D$  não variem com o fluxo de corrente (permanecem com suas concentrações de equilíbrio), sendo  $x = 0$  o início da camada de óxido e  $x = W_D$  o final da camada de óxido e, finalmente, (iii) as concentrações de impurezas no semiconductor não sejam degeneradas. Os canais dos elementos utilizados atualmente são de ordem nanométrica e, decorrente deste pequeno tamanho do canal, a tensão mínima a ser aplicada nos terminais para que o tunelamento ocorra é por volta de 2V. Esta tensão é facilmente alcançada, resultando assim em uma corrente de tunelamento relativamente alta dependendo do tipo de contato, em outras palavras, das condições de contorno da modelagem feita.

### 3.4.3 Tunelamento assistido por armadilhas

O tunelamento assistido por armadilhas (TAT) é um tunelamento baseado em defeitos existentes no isolante (neste trabalho, isolante pode ser lido como camada de óxido). Partindo desse princípio, o elétron pode se alojar em um defeito do isolante e, posteriormente, tunelar para o semiconductor, ou seja, o elétron não realiza o tunelamento de uma vez só, ele o faz por partes. Em certos dispositivos é feita a adição de defeitos no óxido para que esse tipo de tunelamento ocorra. Para simular este tipo de tunelamento, obtivemos um arquivo de exemplo a partir de comunicações privadas com a empresa Synopsys.

## 3.5 MATLAB

O MATLAB é um software interativo de alta performance utilizado prioritariamente para realizar cálculos numéricos, porém neste trabalho a função dele foi gerar a maior parte dos gráficos aqui presentes. Para tal, transformamos os resultados das simulações em arquivos do tipo “.dat” e “.grid” por meio do comando “tdx -tdf2dfise -a -c -q nome\_do\_arquivo.tdr” do SDevice. A partir desses arquivos, utilizamos uma rotina do MATLAB, já previamente criada em outro trabalho, para analisar esses arquivos. Dessa forma, foi possível isolar quaisquer características presentes na seção *Plot* do arquivo de comando para análise. As imagens dos diagramas de banda utilizadas são formadas por meio das variáveis banda de condução e nível de Fermi. Um exemplo da rotina para extração dos dados do arquivo do servidor é vista na Figura 3.6.

Essa rotina carrega os dados da simulação inserida por meio da rotina `read_dfise`. Nas linhas

```

16
17 % ----- Carregando dados -----
18
19 fn1 = './nonlocaltunneling/MisturandoTATcomNLT/UltimaEtapa/variacoes/TATInanoElectrodeEMid20_des.plt';
20
21 [x1 y1] = read_plt(fn1, 'Left OuterVoltage', 'Left TotalCurrent');
22
23 fn2 = './nonlocaltunneling/MisturandoTATcomNLT/UltimaEtapa/variacoes/TATInanoOxideEMid20_des.plt';
24
25 [x2 y2] = read_plt(fn2, 'Left OuterVoltage', 'Left TotalCurrent');
26
27 % ----- Banda de Condução e Nivel de Fermi -----
28
29
30 [x, y, data, data_names, sgrid] = read_dfise('./nonlocaltunneling/MisturandoTATcomNLT/UltimaEtapa/variacoes/TATInanoElectrodeEMid20_des',
31 {'Left' 'Right'}, 0, 'linear', 1);
32 iC=1;
33 for i = 1:length(x(1,1:end))
34     xiC(iC) = x(1,i);
35     yiC(iC) = data{2}(1,i);
36     iC = iC+1;
37 end
38
39 [x, y, data, data_names, sgrid] = read_dfise('./nonlocaltunneling/MisturandoTATcomNLT/UltimaEtapa/variacoes/TATInanoElectrodeEMid20_des',
40 {'Left' 'Right'}, 0, 'linear', 1);
41 iF=1;
42 for i = 1:length(x(1,1:end))
43     xiF(iF) = x(1,i);
44     yiF(iF) = data{16}(1,i);
45     iF = iF+1;
46 end

```

Figura 3.6: Rotina para extração de dados

30 e 39, ela seleciona os arquivos “.dat” e “.grid” (na Figura 3.6 esses arquivos são designados pelo nome TATInanoElectrodeEMid20\_des) e na linha 35 o comando “data{2}” (similarmente na linha 44 o comando “data{16}”) seleciona a característica desejada para se gerar a imagem e guarda a informação em uma variável. Neste caso, o comando “data{2}” seleciona a banda de condução, enquanto que o comando “data{16}” seleciona o nível de Fermi. A partir desse processo são construídos os diagramas de bandas de todas as estruturas aqui representadas. As curvas IV também são frutos de códigos no matlab, porém eles não necessitam de uma rotina sofisticada para serem feitos. A partir do arquivo “.plt” gerado pelas simulações, podemos extrair os valores de corrente e tensão do dispositivo como mostrado nas linhas 19 e 20 da Figura 3.6. Após extraídos esses dados, são plotados os gráficos a partir das respectivas variáveis “x” e “y” criadas para representar os valores de tensão e corrente.

No escopo das simulações realizadas neste trabalho, uma única simulação possui em média o tamanho de 2GB com uma duração média de 350 000s ou 97 h. Dado que foram realizadas cerca de 400 simulações durante o trabalho todo, temos um total de 800GB com uma duração média de 38 800 h ou 1616 d. Vale ressaltar que esse seria o caso em que todas as simulações fossem realizadas uma seguida da outra, mas na realidade a maioria delas foi feita em paralelo. Desta forma, foi possível resumir este enorme tempo de simulação para alguns meses.

# Capítulo 4

## Resultados

### 4.1 Introdução

As simulações aqui realizadas são, como já esclarecido anteriormente, baseadas na engenharia de um contato real, de tal forma que ele se equipare ao contato ôhmico. Para tanto, foi criado um modelo com diversas implementações diferentes, alterando parâmetros como as características intrínsecas dos materiais e da geometria do dispositivo. As simulações são todas feitas no SDevice e posteriormente transferidas ao software MATLAB para se criar os gráficos aqui observados.

### 4.2 O contato ôhmico

O contato de referência desse trabalho é, como já dito anteriormente, o contato ôhmico. O contato ôhmico é simulado a partir do código de geometria e do arquivo de comando disponíveis a seguir.

```
(sdegeo:create-rectangle (position 0 0 0) (position 0.2 0.2 0) "Silicon" "SiliconReference")
(sdegeo:define-contact-set "Left")
(sdegeo:define-2d-contact (find-edge-id (position 0 0.1 0))"Left")
(sdegeo:define-contact-set "Right")
(sdegeo:define-2d-contact (find-edge-id (position 0.2 0.1 0))"Right")
(sdedr:define-constant-profile "ConstAsDoping" "ArsenicActiveConcentration" 1e18)
(sdedr:define-constant-profile-region "ConstProfilePlace" "ConstAsDoping" "SiliconReference")
(sdedr:define-refinement-size "Mesh" 0.001 0.1 0.001 0.02)
(sdedr:define-refinement-function "Mesh" "MaxLenInt" "SiliconReference" "Contact" 2e-3 2)
(sdedr:define-refinement-region "BodyMesh" "Mesh" "SiliconReference")
(sde:build-mesh "snmesh" "" "ohmic_contact_reference")
```

O arquivo de geometria gera um dispositivo de 200 nm de comprimento do canal e 200 nm de altura do canal, sendo que a largura do canal não foi especificada. A largura do canal do dispositivo é de 1  $\mu\text{m}$ , sendo este o valor de parâmetro métrico que o SDevice assume caso a variável não seja especificada. A base do arquivo de geometria também é a de 1  $\mu\text{m}$ , ou seja, qualquer valor inserido no arquivo de geometria é micrométrico. Na simulação, a tensão aplicada ao eletrodo esquerdo

(inserido na altura de 100 nm) é de  $-5$  V e o eletrodo direito (inserido na mesma altura do eletrodo esquerdo) está conectado à terra. A dopagem do semiconductor de Silício é de  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . Desta forma, o contato esquerdo é a fonte de injeções de carga no dispositivo.

```

File{
* Input files
Grid = "ohmic_contact_reference_msh.tdr"
* Output files
Plot = "ohmic_contact_reference"
Current = "ohmic_contact_reference"
Output = "Referencia"
}

Electrode{
{Name = "Left" Voltage=0.0}
{Name = "Right" Voltage=0.0}
}

Plot{
eDensity hDensity eCurrent hCurrent
Potential SpaceCharge ElectricField
eMobility hMobility eVelocity hVelocity
Doping DonorConcentration AcceptorConcentration
ConductionBandEnergy ConductionBandEnergy
ValenceBandEnergy ValenceBandEnergy
}

Math{
Extrapolate
RelErrControl
}

Solve{
* Initial guess
Poisson
Coupled {Poisson Electron Hole}
* Bias ramp
Quasistationary ( MaxStep = 0.005 Goal {Name="Left" Voltage=-5.0})
{Coupled {Poisson Electron Hole}}
}

```

Com o arquivo de comando acima, o SDevice calcula as curvas IV do dispositivo e o seu diagrama de bandas, a partir das equações de contorno (2.5), (2.6), (2.7), (2.8) e (2.9). Os resultados estão dispostos na Figura 4.1.

A Figura 4.1 revela as características típicas de um contato ôhmico tanto no diagrama de bandas quanto nas curvas IV. O diagrama de bandas (onde o eixo “y” representa a energia  $E$  dada em eV e o eixo “x” representa a largura do dispositivo dada em  $\mu\text{m}$ ), representado na Figura 4.1b, mostra que a resistência de contato do dispositivo é muito baixa, dado que o valor da barreira de potencial de 0.09 eV é muito baixo. Assim sendo, ocorre o fluxo livre de elétrons do metal para o semiconductor e vice-versa. O diagrama de bandas horizontal indica que o campo elétrico no dispositivo é zero e que a densidade de cargas no dispositivo é igual à densidade de cargas no

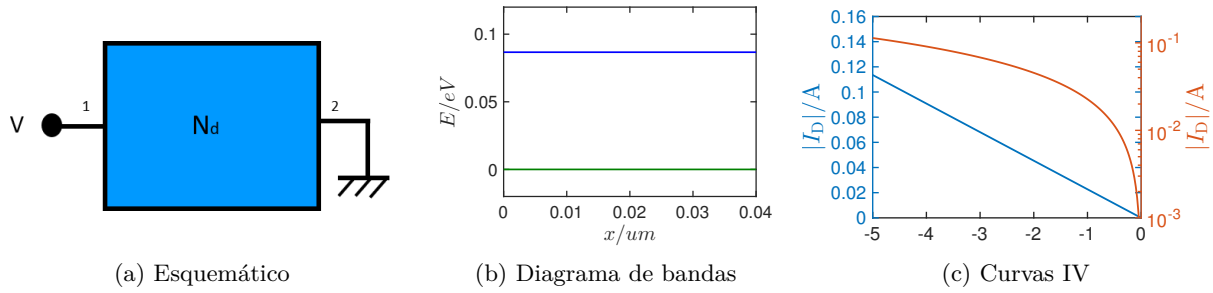


Figura 4.1: Contato ôhmico

equilíbrio. Por fim, a Figura 4.1c revela que as características entre tensão e corrente (curvas IV) do dispositivo possuem uma relação linear, ou seja, este contato não retifica nem limita nenhum tipo de sinal. Vale ressaltar que a ordem de grandeza da corrente é de A, ou seja, é de alta ordem, levando em conta que a tensão aplicada é de  $-5\text{V}$ . A partir das características IV do gráfico, podemos calcular a resistência do canal por meio da inclinação desta curva. O valor de resistência de canal obtido para o contato ôhmico é de  $44\Omega$ . Lembrando que a tensão de  $-5\text{V}$  força um fluxo de elétrons do contato esquerdo para o contato direito. Com a referência do trabalho então estabelecida, realizamos a simulação do contato Schottky sem acionar o tunelamento, a partir da Figura 4.2, com as mesmas premissas utilizadas pelo contato ôhmico. O contato ôhmico é acionado pela falta da função trabalho do metal na seção *Electrode* do arquivo de comando do dispositivo.

Como teste de consistência dos resultados, podemos realizar o cálculo da resistência do dispositivo a partir dos dados aqui apresentados. Dado que a mobilidade  $\mu$  do silício é de  $1.42\text{ cm}^2\text{ V}^{-1}\text{ s}^{-1}$ , sendo a resistividade calculada por  $\rho = \frac{1}{qN_D\mu} = 4.4 * 10^{-5}\Omega\text{ m}$  e a resistência calculada por  $R = \frac{\rho}{\frac{\text{comprimento\_do\_canal}}{\text{largura\_do\_canal} * \text{altura\_do\_canal}}} = \frac{\rho}{\text{largura\_do\_canal}} = \frac{4.4 * 10^{-5}\Omega\text{ m}}{1\mu\text{m}} = 44\Omega$ . Desta forma, podemos afirmar que os resultados da simulação estão coerentes com a teoria.

#### 4.2.1 Teoria da emissão termiônica

O principal fenômeno de condução de corrente no tipo Schottky é a emissão termiônica, ou seja, o elétron deve atravessar a barreira de potencial formada pelo contato. Esta simulação é feita de forma idêntica ao contato ôhmico, ou seja, o dispositivo possui as mesmas dimensões, porém a barreira de potencial é quatro vezes maior. Vale ressaltar que somente o efeito da emissão termiônica é considerado nesta simulação, sendo os efeitos do tunelamento quântico aqui, por enquanto, negligenciados. O contato Schottky possui o mesmo arquivo de geometria que o contato ôhmico, sendo a única parte diferente a introdução da função trabalho do metal no eletrodo esquerdo. O código abaixo mostra essa adição na linha 13, neste caso é utilizado o silício como semiconductor (a afinidade eletrônica do silício é de  $4.05\text{ eV}$ ). A partir da função trabalho do contato, podemos calcular a altura da barreira pela diferença entre a função trabalho do metal e a afinidade eletrônica do semiconductor, ou seja,  $\Phi_B = q\phi_m - \chi = 4.42 - 4.05 = 0.37\text{ eV}$ .

```
File{
* Input files
```

```

Grid = "schottky_contact_reference_msh.tdr"
* Output files
Plot = "schottky_contact_reference"
Current = "schottky_contact_reference"
Output = "referencia_schottky"
}

Electrode{
{Name = "Left" Voltage=0.0 Schottky Workfunction=4.42}
{Name = "Right" Voltage=0.0}
}

Plot{
eDensity hDensity eCurrent hCurrent
Potential SpaceCharge ElectricField
eMobility hMobility eVelocity hVelocity
Doping DonorConcentration AcceptorConcentration
ConductionBandEnergy
ValenceBandEnergy
}

Math {
Extrapolate
RelErrControl
}

Solve{
* Initial guess
Poisson
Coupled {Poisson Electron Hole}
* Bias ramp
Quasistationary ( MaxStep = 0.005 Goal {Name="Left" Voltage=-5.0})
{Coupled {Poisson Electron Hole}}
}

```

De uma forma similar ao contato ôhmico, simulamos as características IV e o diagrama de bandas para esse novo contato. Vale ressaltar que a única diferença entre os dois contatos é a presença da barreira de potencial e as condições de contorno. O simulador do SDevice, para o contato Schottky, leva em consideração as equações (2.10), (2.11), (2.12), (2.13) e (2.14) para efetivar os seus cálculos.

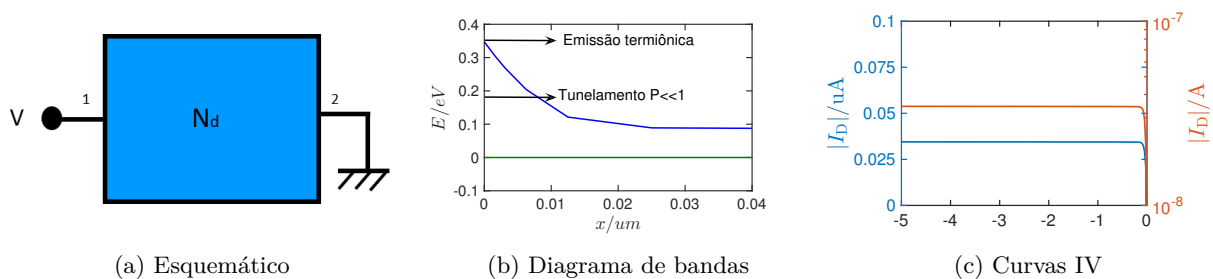


Figura 4.2: Contato tipo Schottky

O diagrama de bandas (Figura 4.2b) foi regulado à uma  $V_{ds} = 0V$ , com o intuito de se obter uma melhor imagem da barreira de potencial. Ao inserirmos uma  $V_{ds} = 0V$ , colocamos o

dispositivo nas condições de equilíbrio. A diferença entre os contatos das Figuras 4.1 e 4.2 podem ser vistos tanto no diagrama de bandas quanto nas curvas IV. Na Figura 4.2b, o fluxo de elétrons ocorre por meio da emissão termiônica, sendo que os elétrons devem sobrepor uma barreira na faixa dos 0.37 eV de altura, dificultando assim o seu fluxo. As curvas IV, a partir da Figura 4.2c, revelam que o contato Schottky apresenta uma corrente claramente saturada (retificadora) e limitante em comparação ao contato ôhmico que possui características lineares. O valor da corrente Schottky é de seis ordens de grandeza menor do que o valor da corrente ôhmica. Essa simulação mostra que o contato ôhmico é superior ao contato Schottky, pois ele conduz mais corrente elétrica e não retifica e nem limita a corrente. Esse é um fato esperado, dado a teoria de contatos aqui já explicada. A partir deste contato Schottky, faremos várias alterações para tentarmos chegar às mesmas características do contato ôhmico.

## 4.3 O contato dopado

Esta técnica é altamente conhecida e utilizada globalmente por produtores de dispositivos inorgânicos. Desta forma, um dispositivo com uma camada fina de semiconductor altamente dopada é adicionada ao dispositivo e então simulado.

### 4.3.1 Teoria da emissão termiônica

A partir dos arquivos de geometria e de comando do contato Schottky apresentados acima, devemos alterar somente o arquivo de geometria do dispositivo. A partir do código abaixo, vemos que o silício possui uma região altamente dopada que constitui somente 10% do dispositivo, ou seja, 20 nm altamente dopados enquanto o restante do dispositivo possui uma dopagem de duas ordens de grandeza menor. A malha de discretização precisa ser mais refinada nas regiões da interface onde existe o contato (eletrodo com filme altamente dopado e filme altamente dopado para o corpo não tão dopado), com o objetivo de capturarmos a influência da dopagem no dispositivo.

```
(sdegeo:create-rectangle (position 0.02 0 0) (position 0.2 0.2 0) "Silicon" "Silicon")
(sdegeo:create-rectangle (position 0 0 0) (position 0.02 0.2 0) "Silicon" "DopedSilicon")
(sdegeo:define-contact-set "Left")
(sdegeo:define-2d-contact (find-edge-id (position 0 0.1 0))"Left")
(sdegeo:define-contact-set "Right")
(sdegeo:define-2d-contact (find-edge-id (position 0.2 0.1 0))"Right")
(sdedr:define-constant-profile "ConstAsDoping" "ArsenicActiveConcentration" 1e18)
(sdedr:define-constant-profile "HighConstAsDoping" "ArsenicActiveConcentration" 1e20)
(sdedr:define-constant-profile-region "ConstProfilePlace" "ConstAsDoping" "Silicon")
(sdedr:define-constant-profile-region "HighConstProfilePlace" "HighConstAsDoping" "DopedSilicon")
(sdedr:define-refinement-size "Mesh1" 0.1 0.1 0.02 0.02)
(sdedr:define-refinement-function "Mesh1" "MaxLenInt" "DopedSilicon" "" 2e-5 2)
(sdedr:define-refinement-function "Mesh1" "MaxLenInt" "DopedSilicon" "Silicon" 2e-5 2)
(sdedr:define-refinement-region "BodyMesh1" "Mesh1" "Silicon")
(sdedr:define-refinement-size "Mesh2" 0.001 0.1 0.0001 0.02)
(sdedr:define-refinement-function "Mesh2" "MaxLenInt" "Silicon" "Contact" 2e-3 2)
(sdedr:define-refinement-function "Mesh2" "MaxLenInt" "Silicon" "DopedSilicon" 2e-5 2)
(sdedr:define-refinement-region "BodyMesh2" "Mesh2" "DopedSilicon")
```



```
(sde:build-mesh "snmesh" "" "schottky_doped_reference")
```

Como consequência desse código, os resultados das simulações estão dispostos na Figura 4.3. A parte azul do semiconductor na Figura 4.3a possui uma dopagem de  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  enquanto que a parte vermelha do dispositivo possui uma dopagem de  $10^{20} \text{ cm}^{-3}$ . A tensão aplicada é a mesma dos casos anteriores e as condições de contorno são iguais às do contato Schottky.

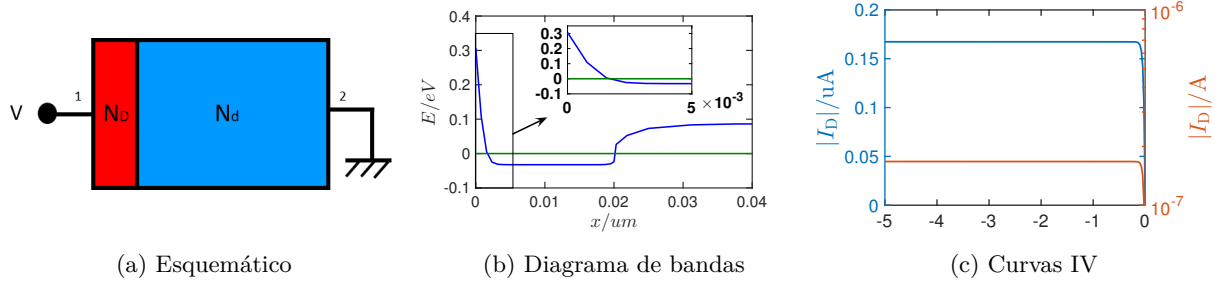


Figura 4.3: Contato tipo Schottky com o filme fino altamente dopado

A Figura 4.3b revela a alteração que ocorreu na banda de condução. Como discutido em teoria, a banda de condução foi reduzida somente na parte altamente dopada do dispositivo, voltando ao normal após percorrer os 20 nm. Essa mudança não modifica a altura da barreira de potencial, porém ela aumenta a injeção de cargas na interface do contato (reduzindo a resistência de contato do canal), aumentando assim o valor da corrente no dispositivo. A corrente, apesar de triplicar, ainda possui, em amplitude, um valor muito baixo comparado à corrente ôhmica, em outras palavras, a corrente ainda assim está sendo limitada pelo contato. Concluímos, a partir do resultado desta simulação, que o fenômeno da emissão termiônica não pode ser o único mecanismo levado em consideração na análise computacional de dispositivos.

### 4.3.2 Teoria da emissão termiônica com tunelamento não local

Para se adicionar o tunelamento sobre uma barreira, devemos definir outras regiões dentro do arquivo de geometria. A geometria do dispositivo, em si, não muda, porém, é necessária a nomeação de uma nova região do dispositivo em que ocorrerá o tunelamento. Essa nova região, na segunda linha do código abaixo, é chamada de “Silicon2” e possui uma discretização maior do que as discretizações previamente utilizadas. A discretização serve como orientação para o simulador de quantos pontos serão analisados no intervalo selecionado, sendo as duas discretizações utilizadas vistas das linhas 10 a 17 do código. Essa alteração é necessária para o simulador convergir nas suas iterações do algoritmo de Newton, caso contrário a simulação não seria efetivada (o simulador não teria pontos suficientes para realizar a sua análise, desta forma a simulação é interrompida pela divergência do algoritmo).

```
(sdegeo:create-rectangle (position 0 0 0) (position 0.02 0.2 0) "Silicon" "Silicon")
(sdegeo:create-rectangle (position 0.02 0 0) (position 0.2 0.2 0) "Silicon" "Silicon2")
```

```

(sdegeo:define-contact-set "Left")
(sdegeo:define-2d-contact (find-edge-id (position 0 0.1 0))"Left")
(sdegeo:define-contact-set "Right")
(sdegeo:define-2d-contact (find-edge-id (position 0.2 0.1 0))"Right")
(sdedr:define-constant-profile "ConstAsDoping" "ArsenicActiveConcentration" 1e18)
(sdedr:define-constant-profile-region "ConstProfilePlace" "ConstAsDoping" "Silicon")
(sdedr:define-constant-profile-region "ConstProfilePlace" "ConstAsDoping" "Silicon2")
(sdedr:define-refinement-size "Mesh1" 0.001 000.1 0.0002 0.0001)
(sdedr:define-refinement-function "Mesh1" "MaxLenInt" "Silicon2" "" 2e-7 2)
(sdedr:define-refinement-function "Mesh1" "MaxLenInt" "Silicon2" "Silicon" 2e-7 1.8)
(sdedr:define-refinement-region "BodyMesh1" "Mesh1" "Silicon")
(sdedr:define-refinement-size "Mesh2" 0.001 0.001 0.0001 0.0001)
(sdedr:define-refinement-function "Mesh2" "MaxLenInt" "Silicon" "Contact" 2e-9 2)
(sdedr:define-refinement-function "Mesh2" "MaxLenInt" "Silicon" "Silicon2" 2e-7 1.8)
(sdedr:define-refinement-region "BodyMesh2" "Mesh2" "Silicon2")
(sde:build-mesh "snmesh" "" "schottky_reference_twerked")

```

Tendo em vista que a geometria do contato, em essência, continua a mesma, o tunelamento quântico é acionado a partir do arquivo de comando. O código de arquivo de comando do tunelamento não local é disponibilizado a seguir.

```

File{
* Input files
Grid = "schottky_reference_msh.tdr"
* Output files
Parameters = "modelsred.par"
Plot = "schottky_contact_reference"
Current = "schottky_contact_reference"
Output = "curvaschottky_contact_reference"
}

Electrode{
{Name = "Left" Voltage=0.0 Schottky Workfunction=4.42} *contato do tipo Schottky
{Name = "Right" Voltage=0.0}
}

Plot{
eDensity hDensity eCurrent hCurrent
Potential SpaceCharge ElectricField
eMobility hMobility eVelocity hVelocity
Doping DonorConcentration AcceptorConcentration
ConductionBandEnergy ConductionBandEnergy
ValenceBandEnergy ValenceBandEnergy
eBarrierTunneling hBarrierTunneling
}

Math{
Nonlocal "NLM" (Electrode="Left" Length=10e-7) * Malha de tunelamento de comprimento 10 nm
Extrapolate
RelErrControl
Traps( Damping=100)
}

Physics{
eBarrierTunneling "NLM" * Declara o tunelamento global, ou seja, não especifica a o destino do elétron
hBarrierTunneling "NLM"
}

```

```

Solve
{
* Initial guess
Poisson
Coupled {Poisson Electron Hole}
* Bias ramp
Quasistationary ( MaxStep = 0.005 Goal {Name="Left" Voltage=-5.0})
{Coupled {Poisson Electron Hole}}
}

```

Para se ativar o tunelamento não local, deve-se adicionar o comando *Nonlocal* na seção *Math*, definir qual é o eletrodo de origem do tunelamento e, por fim, determinar qual o comprimento (*Length*) em que ocorrerá o tunelamento. Há também a adição de uma nova seção chamada *Physics* que seleciona os modelos físicos que serão aplicados na simulação do dispositivo. A Figura 4.4 nada mais é do que a Figura 4.2 com tunelamento.

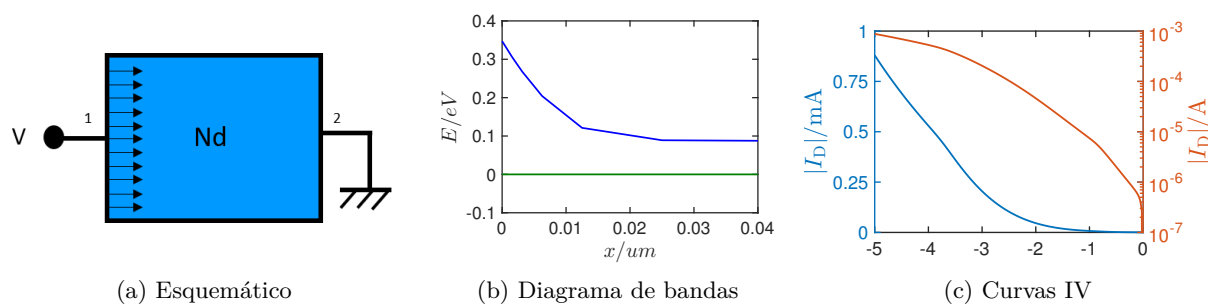


Figura 4.4: Contato tipo Schottky com tunelamento não local

A geometria dos dispositivos das Figuras 4.2 e 4.4 são as mesmas, portanto o diagrama de bandas permanece inalterado. No entanto, ao se comparar as curvas IV desses dois casos, vemos uma diferença de três ordens de grandeza nas correntes apresentadas pelos dispositivos. Apesar da melhora em três ordens de grandeza vista nas curvas IV do dispositivo, comparado ao contato ôhmico ainda existe uma diferença de mais três ordens de grandeza. Para fins de comparação, definimos a resistência total do dispositivo como a soma da resistência de canal com a resistência de contato. A resistência de canal é proporcional ao comprimento do canal, enquanto que a resistência de contato é proporcional a área da seção do contato ( $altura\_do\_canal * largura\_do\_canal$ ). A partir desta afirmação, é fácil ver que a maior porção do valor de resistência neste trabalho advém da resistência de contato. A resistência do resistor, neste caso é de  $6\text{ k}\Omega$ , sendo assim quatro ordens de grandeza maior do que o contato ôhmico. Partindo desses resultados, simulamos a técnica de dopagem em conjunto com o tunelamento não local. A Figura 4.5 revela os resultados.

Com o abaixamento da banda de condução, visto na Figura 4.5b, aumentamos a probabilidade de tunelamento para  $P \approx 1$ . Os resultados da dopagem, propriamente dito, são visualizados nas curvas IV, representadas na Figura 4.5c, onde é obtido um contato com uma corrente superior à corrente ôhmica. Esse fato é explicado pela alta dopagem, que traz consigo um grande número de cargas para o contato. Portanto, o processo de dopagem de uma fina camada do semiconductor inorgânico leva à um contato com características ôhmicas. Em suporte a este fato, a resistência de

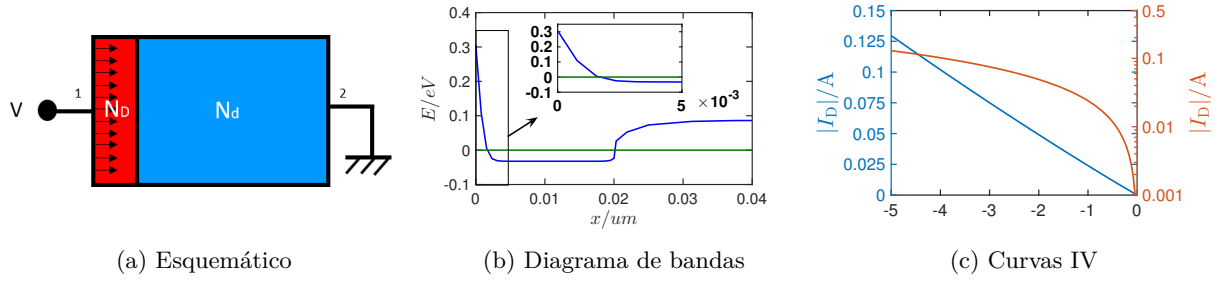


Figura 4.5: Contato tipo Schottky dopado com tunelamento não local

canal desse contato dopado é de  $38 \Omega$ , portanto menor do que o contato ôhmico devido à injeção de cargas por meio da dopagem.

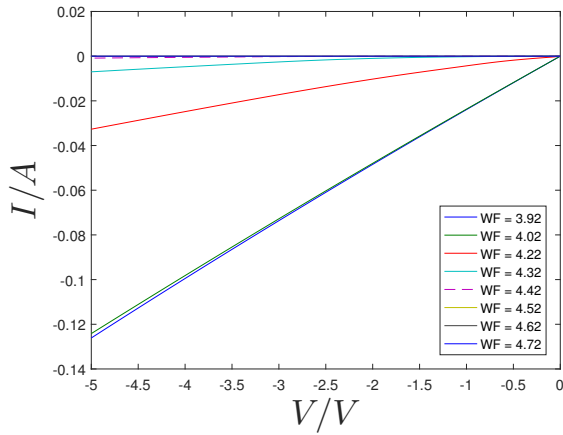
## 4.4 Ajustando a função trabalho

Por meio de algumas técnicas de engenharia de contato, aqui citadas, é possível realizar a modificação ou o ajuste da função trabalho do metal no contato MS. Logo, podemos simular o efeito da alteração da função trabalho do metal no contato Schottky modificando a variável *Workfunction*, presente nos arquivos de comando dos contatos Schottky. Ao ajustarmos a função trabalho do metal, estamos simplesmente adicionando algum óxido condutor, como por exemplo o *TiO*, ao contato e considerando a nova função de trabalho como uma junção do metal com o óxido. O eletrodo ou a camada de inserção entre o contato MS podem também ser orgânicos, como por exemplo uma camada ou eletrodo compostos de grafeno.

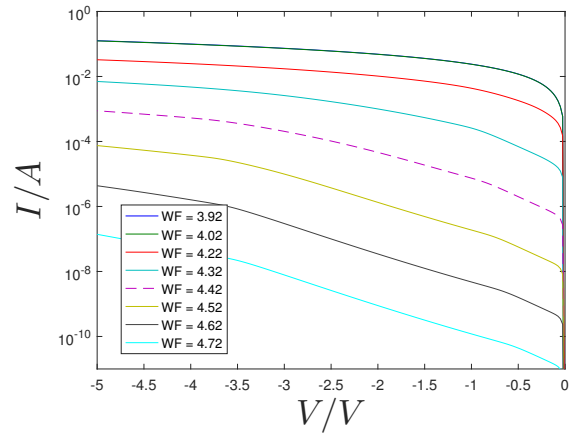
### 4.4.1 Teoria da emissão termiônica com tunelamento não local

A partir do dispositivo com o contato Schottky completo (emissão termiônica com tunelamento não local), simulamos o efeito do ajuste da função trabalho no semiconductor.

A partir da Figura 4.6a, a variação da função trabalho do metal é bem significativa, dado que o contato se torna ôhmico abaixo da faixa dos 4.02 eV. A linha roxa tracejada representa a função trabalho de 4.42 eV, ou seja, o nosso *status quo*. No seu extremo, onde o contato possui uma função trabalho de 3.92 eV, a curva IV semi-linear possui uma resistência de canal de  $40 \Omega$ . O fato desta  $R_c$  ser menor do que a do contato ôhmico é explicado pelo maior número de cargas presente nesse contato (devido a uma barreira de potencial  $\Phi_B$  muito baixa ou até com valores negativos, discussão feita na explicação da equação (2.13)). Desta forma, esse valor da corrente supera a corrente ôhmica. Portanto, se um contato ôhmico fosse dopado da mesma forma, é intuitivo afirmar que seu valor de corrente seja maior do que o valor obtido no contato Schottky dopado com tunelamento. Tal simulação foi feita e está disponível na seção de anexos.



(a) Curvas IV



(b) Curvas IV com a corrente em logarítmo

Figura 4.6: Contato tipo Schottky com tunelamento não local para diferentes funções trabalho

## 4.5 Contatos oxidados

Nesta seção serão analisados os contatos que contém algum tipo de óxido com propriedades isoladoras, logo os contatos são da estrutura metal/óxido/semicondutor (MOS). O SDevice possui tanto o comando para o tunelamento não local, quanto para o tunelamento Fowler-Nordheim com o intuito de analisar as características de tunelamento sobre óxidos.

### 4.5.1 Teoria da emissão termiônica com tunelamento não local

Aqui será replicado o exemplo de emissão termiônica com tunelamento não local, porém com uma camada de óxido de 1 nm entre o contato MS. O óxido escolhido foi o dióxido de silício  $SiO_2$  e para adicioná-lo, devemos alterar o arquivo de geometria do dispositivo como é ilustrado abaixo. Vale ressaltar que, no SDevice, o material *Oxide* se refere exclusivamente ao dióxido de silício.

```
(sdegeo:create-rectangle (position 0 0 0) (position 0.001 0.2 0) "Oxide" "Oxido")
(sdegeo:create-rectangle (position 0.001 0 0) (position 0.2 0.2 0) "Silicon" "SiliconBulk")
(sdegeo:define-contact-set "Left")
(sdegeo:define-2d-contact (find-edge-id (position 0 0.1 0))"Left")
(sdegeo:define-contact-set "Right")
(sdegeo:define-2d-contact (find-edge-id (position 0.2 0.1 0))"Right")
(sdedr:define-constant-profile "ConstAsDoping" "ArsenicActiveConcentration" 1e18)
(sdedr:define-constant-profile-region "ConstProfilePlace2" "ConstAsDoping" "SiliconBulk")
(sdedr:define-refinement-size "Mesh1" 0.0001 0.001 0.00005 0.0001)
(sdedr:define-refinement-function "Mesh1" "MaxLenInt" "" "Oxide" 2e-7 1.5)
(sdedr:define-refinement-region "ContactMesh" "Mesh1" "")
(sdedr:define-refinement-size "Mesh2" 0.0005 0.0005 0.00005 0.00005)
(sdedr:define-refinement-function "Mesh2" "MaxLenInt" "Oxide" "" 2e-9 1.7)
(sdedr:define-refinement-function "Mesh2" "MaxLenInt" "Oxide" "Silicon" 2e-7 1.7)
(sdedr:define-refinement-region "TrapMesh" "Mesh2" "Oxido")
(sdedr:define-refinement-size "Mesh3" 0.01 0.01 0.01 0.01)
(sdedr:define-refinement-function "Mesh3" "MaxLenInt" "Silicon" "Oxide" 2e-9 1.8)
(sdedr:define-refinement-function "Mesh3" "MaxLenInt" "Silicon" "" 2e-7 2)
(sdedr:define-refinement-region "BulkMesh" "Mesh3" "SiliconBulk")
```

```
(sde:build-mesh "snmesh" "" "NLToxidoInano")
```

Neste caso, o código do arquivo de comando é o mesmo do que o apresentado na seção anterior, dado que somente a geometria do dispositivo é alterada. A Figura 4.7 mostra os resultados da simulação feitos a partir do código disposto acima.

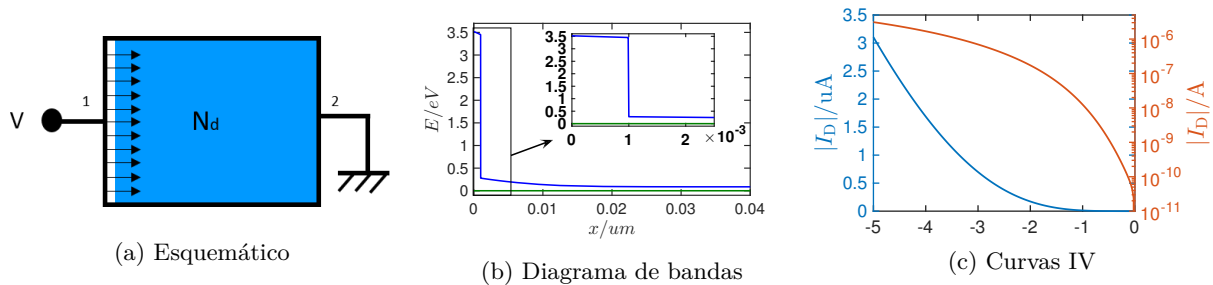


Figura 4.7: Contato tipo Schottky com tunelamento não local sobre uma camada de óxido

A influência do óxido no contato é negativa, dado que este óxido possui propriedades isolantes. Na Figura 4.7b, vemos que a altura da barreira foi fortemente elevada devido à presença do óxido. Isso resulta em uma dificuldade de fluxo eletrônico a partir da emissão termiônica. Na Figura 4.7c, é fácil ver que a corrente diminuiu em três ordens de grandeza comparado com a corrente da Figura 4.4c. A largura do óxido de 1 nm é o suficiente para prejudicar o tunelamento através da barreira de uma forma notável. A presença do óxido fez a resistência do dispositivo aumentar de 6 k $\Omega$  para 1.7 M $\Omega$ , deteriorando assim a condução de corrente pelo mesmo. A grossura da camada de óxido influencia bastante a corrente no contato e é uma variável que ainda será explorada neste trabalho.

#### 4.5.2 O tunelamento de Fowler-Nordheim

O tunelamento FN nada mais é do que o tunelamento através da parte triangular da barreira de potencial, diferindo-o assim do tunelamento não local. O arquivo de geometria, na modelagem do tunelamento Fowler-Nordheim, é o mesmo utilizado no tunelamento não local com um refinamento maior. A ativação do tunelamento ocorre no arquivo de comando como é feito no código abaixo.

```
File
{
* Input files
Grid = "FNT_1nano_msh.tdr"
* Output files
Plot = "FNT_1nano"
Current = "FNT_1nano"
Output = "FNT_1nano"
}

Electrode
{
{Name = "Left" Voltage=0.0 Schottky Workfunction=4.42}
```

```

{Name = "Right" Voltage=0.0}
}

Physics(MaterialInterface="Silicon/Oxide") {Gatecurrent(Fowler)}

Plot
{
eDensity hDensity eCurrent hCurrent
Potential SpaceCharge ElectricField
eMobility hMobility eVelocity hVelocity
Doping DonorConcentration AcceptorConcentration
ConductionBandEnergy ConductionBandEnergy
ValenceBandEnergy ValenceBandEnergy
eBarrierTunneling hBarrierTunneling
}

Math
{
Extrapolate
RelErrControl
}

Solve
{
* Initial guess
Poisson
Coupled {Poisson Electron Hole}
* Bias ramp
Quasistationary ( MaxStep = 0.005 Goal {Name="Left" Voltage= -5.0})
{Coupled {Poisson Electron Hole}}
}

```

A seção *Physics* do arquivo é a única linha necessária para se ativar este tunelamento. Nesta linha, é definida a interface na qual o tunelamento ocorrerá e a equação (3.1) dita a condição de contorno para o cálculo da corrente. Desta forma, ao simularmos este dispositivo, obtivemos o resultado apresentado na Figura 4.8.

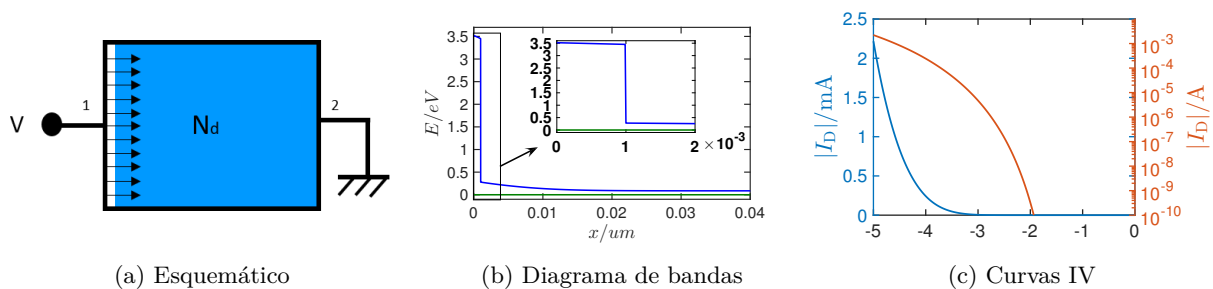


Figura 4.8: Contato tipo Schottky com tunelamento Fowler-Nordheim com 1 nm de óxido

Este tunelamento apresenta uma resistência de contato de 4 k $\Omega$ , porém este valor não pode ser comparado aos outros contatos oxidados, dado que a sua condição de contorno para o cálculo de corrente é diferente dos contatos prévios. Desta forma, esta simulação possui os parâmetros *A* e *B*, advindos da equação (3.1), calibrados para um material em específico, ou seja, o resultado do

tunelamento não local é conservador. Cabe destacar que a grossura do óxido determina o valor do campo elétrico  $F_{ins}$  no dispositivo, alterando assim o valor de corrente no mesmo.

### 4.5.3 O tunelamento assistido por armadilhas

Esse tunelamento ocorre em etapas por meio do auxílio de armadilhas presentes no óxido, como já havia sido previamente discutido. Logo, para se aprimorar o modelo, devemos adicionar essas armadilhas no  $SiO_2$  em conjunto ao tunelamento já existente. Para se programar as armadilhas em um isolante, é necessário criar uma geometria do dispositivo como a mostrada abaixo. Este estilo de construção para a geometria do dispositivo foi adaptado de um arquivo disponibilizado pela equipe da Synopsys em um dos cursos que é explicado como utilizar as ferramentas do SDevice.

```
(sdegeo:create-rectangle (position 0 0 0) (position 0.001 0.2 0) "Silicon" "SiliconInj")
(sdegeo:create-rectangle (position 0.001 0 0) (position 0.002 0.2 0) "Oxide" "SiliconTrap")
(sdegeo:create-rectangle (position 0.002 0 0) (position 0.2 0.2 0) "Silicon" "SiliconBulk")
(sdegeo:define-contact-set "Left")
(sdegeo:define-2d-contact (find-edge-id (position 0 0.1 0))"Left")
(sdegeo:define-contact-set "Right")
(sdegeo:define-2d-contact (find-edge-id (position 0.2 0.1 0))"Right")
(sdedr:define-constant-profile "ConstAsDoping" "ArsenicActiveConcentration" 1e18)
(sdedr:define-constant-profile-region "ConstProfilePlace1" "ConstAsDoping" "SiliconInj")
(sdedr:define-constant-profile-region "ConstProfilePlace2" "ConstAsDoping" "SiliconBulk")
(sdedr:define-refinement-size "Mesh1" 0.0001 0.001 0.00005 0.0001)
(sdedr:define-refinement-function "Mesh1" "MaxLenInt" "SiliconInj" "" 2e-7 2)
(sdedr:define-refinement-function "Mesh1" "MaxLenInt" "SiliconInj" "SiliconTrap" 2e-7 1.5)
(sdedr:define-refinement-region "ContactMesh" "Mesh1" "SiliconInj")
(sdedr:define-refinement-size "Mesh2" 0.0005 0.0005 0.00005 0.00005)
(sdedr:define-refinement-function "Mesh2" "MaxLenInt" "SiliconTrap" "Silicon" 2e-9 1.7)
(sdedr:define-refinement-function "Mesh2" "MaxLenInt" "SiliconTrap" "SiliconBulk" 2e-7 1.7)
(sdedr:define-refinement-region "TrapMesh" "Mesh2" "SiliconTrap")
(sdedr:define-refinement-size "Mesh3" 0.01 0.01 0.01 0.01)
(sdedr:define-refinement-function "Mesh3" "MaxLenInt" "SiliconBulk" "SiliconTrap" 2e-9 1.8)
(sdedr:define-refinement-function "Mesh3" "MaxLenInt" "SiliconBulk" "" 2e-7 2)
(sdedr:define-refinement-region "BulkMesh" "Mesh3" "SiliconBulk")
(sde:build-mesh "snmesh" "" "TAT1nanoOxide")
```

Nessa nova construção, existem três malhas de análise, uma para cada área diferente do dispositivo. A primeira região é uma camada fina de silício seguida de uma camada de óxido de 1 nm, onde serão inseridas as armadilhas, e por fim, o resto do dispositivo até se completar os 200 nm. Neste arquivo, a segunda linha do código adiciona o dióxido de silício ao dispositivo. Lembrando sempre que a camada de óxido deve ser relativamente pequena para que o dispositivo consiga conduzir uma corrente razoável (na faixa dos mA). Como de praxe, as regiões que ocupam menores áreas do dispositivo devem possuir um refinamento maior do que as suas complementares. As armadilhas são adicionadas por meio do arquivo de comando do dispositivo mostrado a seguir.

```
File{
* Input files
Grid = "TAT1nanoOxide_msh.tdr"
* Output files
Parameters = "modelsred.par"
Plot = "TAT1nanoOxide"
```



```

Current = "TAT1nanoOxide"
Output = "TAT1nanoOxide"
}

Electrode{
{Name = "Left" Voltage=0.0 Schottky Workfunction=4.42}
{Name = "Right" Voltage=0.0}
}

Plot{
eDensity hDensity eCurrent hCurrent
Potential SpaceCharge ElectricField
eMobility hMobility eVelocity hVelocity
Doping DonorConcentration AcceptorConcentration
ConductionBandEnergy ConductionBandEnergy
ValenceBandEnergy ValenceBandEnergy
eBarrierTunneling hBarrierTunneling
}

Physics{
eBarrierTunneling "NLM"
hBarrierTunneling "NLM"
}

Physics (Region="SiliconTrap") {
Traps(
Donor Conc=1e18 Level Energymid=0.20 EnergySigma=0 fromCondBand
eBarrierTunneling(Nonlocal="SiliconInj_SiliconTrap" Nonlocal="SiliconTrap_SiliconBulk")
TrapVolume=5e-10 alpha=1 PhononEnergy=0.04 HuangRhys=2.81
)
}

Math{
Nonlocal "SiliconInj_SiliconTrap" (RegionInterface="SiliconInj/SiliconTrap" Length=10e-7)
Nonlocal "SiliconTrap_SiliconBulk" (RegionInterface="SiliconTrap/SiliconBulk" Length=10e-7)
Nonlocal "NLM" (Electrode="Left" Length=10e-7)
Extrapolate
RelErrControl
Traps( Damping=100)
}

Solve{
* Initial guess
Poisson
Coupled {Poisson Electron Hole}
* Bias ramp
Quasistationary ( MaxStep = 0.005 Goal {Name="Left" Voltage=-5.0})
{Coupled {Poisson Electron Hole}}
}

```

O leitor atento nota que existe uma nova seção *Physics* com um comando chamado *Traps*. Antes de entrarmos nesse comando, devemos indicar qual será a região em que serão injetadas as armadilhas por meio do comando (*Region="SiliconTrap"*), sendo a região com armadilhas a região *SiliconTrap* do arquivo de geometria. O comando *Traps* controla os parâmetros a serem incluídos nas armadilhas presentes em um material, logo ele dita todos os parâmetros das armadilhas. O tipo de armadilhas é o primeiro comando, podendo elas serem doadoras (*Donor*) ou aceitadoras

(*Acceptor*). A concentração de armadilhas é dada pela variável *Conc*, o valor escolhido é o mesmo da dopagem do dispositivo, pois uma concentração maior de armadilhas leva a uma dopagem do dispositivo. O comando *Level* se refere à distribuição das armadilhas pelo material, neste caso essa distribuição será feita por níveis discretos e bem definidos. Contudo, é possível utilizar outros tipos de distribuição, como a gaussiana (comando *Gaussian*), a exponencial (comando *Exponential*) entre outros. O parâmetro *Energymid* serve como base para a definição do nível de energia para o centro das armadilhas  $E_{trap}$ . Por meio do comando *fromCondBand*, escolhemos qual equação será utilizada para computar o  $E_{trap}$  e assim escolhemos o valor de *Energymid* mais apropriado. Para o comando *fromCondBand*, a equação utilizada é  $E_{trap} = E_C - Energymid$ , porém existem outros comandos com diferentes equações no SDevice como o *fromMidBandGap* e o *fromValBand*. Por fim, o comando *eBarrierTunneling* cria as interfaces que serão utilizadas como base na seção *Math*. Apesar de realizarmos várias simulações alterando os comandos *TrapVolume*, *alpha*, *PhononEnergy*, *HuangRhys* e *Energysigma*, não obtivemos nenhuma alteração nos resultados das simulações. Vale ressaltar que o manual do SDevice não explica todos os parâmetros utilizados em cada comando, por isso é necessário realizar testes variando esses parâmetros para observarmos as suas influências nos resultados. Adicionalmente, é necessário criar um novo comando na seção *Math* para que seja estabelecido um caminho de tunelamento, ou seja, as interfaces de contato (definidas pelo comando *eBarrierTunneling*) em que ocorrerá o tunelamento.

Como este dispositivo possui uma nova geometria, a referência utilizada não pode ser a mesma. Desta forma, devemos criar uma nova referência para podermos comparar esses resultados. A nova referência consiste em um arquivo de geometria idêntico ao acima, com algumas alterações no arquivo de comando. No arquivo de comando, é retirada a nova seção de *Physics*, ou seja, ele é o novo dispositivo com tunelamento local sem o acionamento do tunelamento assistido por armadilhas. Os resultados dessa simulação estão presentes na Figura 4.9.

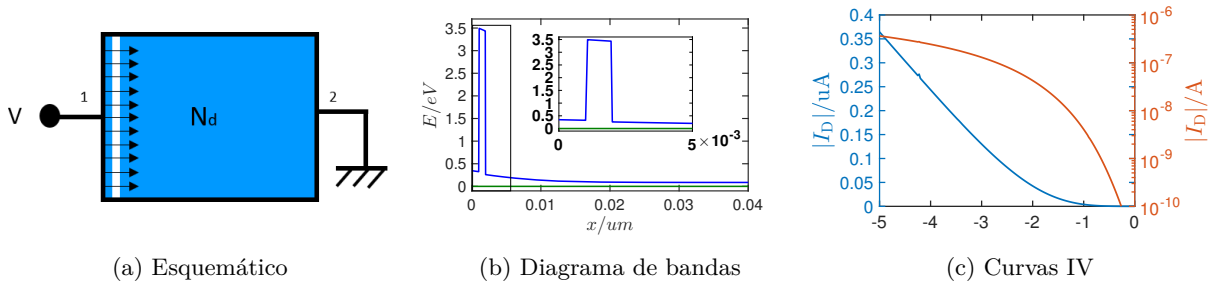


Figura 4.9: Contato tipo Schottky com tunelamento não local sobre uma camada de óxido sem o tunelamento assistido por armadilhas

Essa nova referência não conduz eletricidade muito bem, porém ela não limita a corrente do contato. A partir das curvas IV, calculamos uma nova resistência de referência de 13.1 M $\Omega$ . Agora simulamos o efeito do tunelamento assistido por armadilhas neste dispositivo, como mostra a Figura 4.10.

Vemos que o tunelamento assistido por armadilhas não altera de forma significativa as características do dispositivo. Por meio dos resultados da Figura 4.10c, classificamos o tunelamento

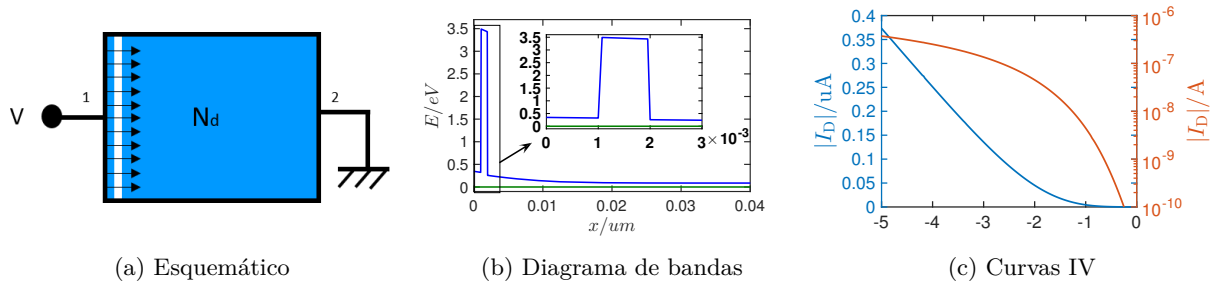


Figura 4.10: Contato tipo Schottky com tunelamento não local sobre uma camada de óxido com o tunelamento assistido por armadilhas

assistido por armadilhas como um mecanismo secundário de condução de corrente. Tal fato ocorre pela pequena influência que este mecanismo possui no dispositivo, dado os resultados da simulação. A resistência do dispositivo com o tunelamento assistido por armadilhas é de  $12.7 \text{ M}\Omega$ , mostrando que existe uma pequena melhora no contato, porém não o suficiente para ser considerado um mecanismo principal de condução de corrente. Ressaltamos que a influência de todos esses parâmetros ainda não foi completamente entendida, logo existe ainda a possibilidade de refinar esta simulação de uma forma que o TAT vire um mecanismo com forte influência no modelo.

#### 4.5.4 A diminuição da barreira

A barreira de potencial, em um contato, deve ser mínima, com o intuito de maximizar a condução de corrente por meio da emissão termiônica. A partir dos códigos exibidos para o tunelamento não local com óxido, diminuimos a função de trabalho do metal (a variação da função trabalho nada mais é do que a troca de um metal por outro) que se localiza na seção *Electrode* do arquivo de comando.

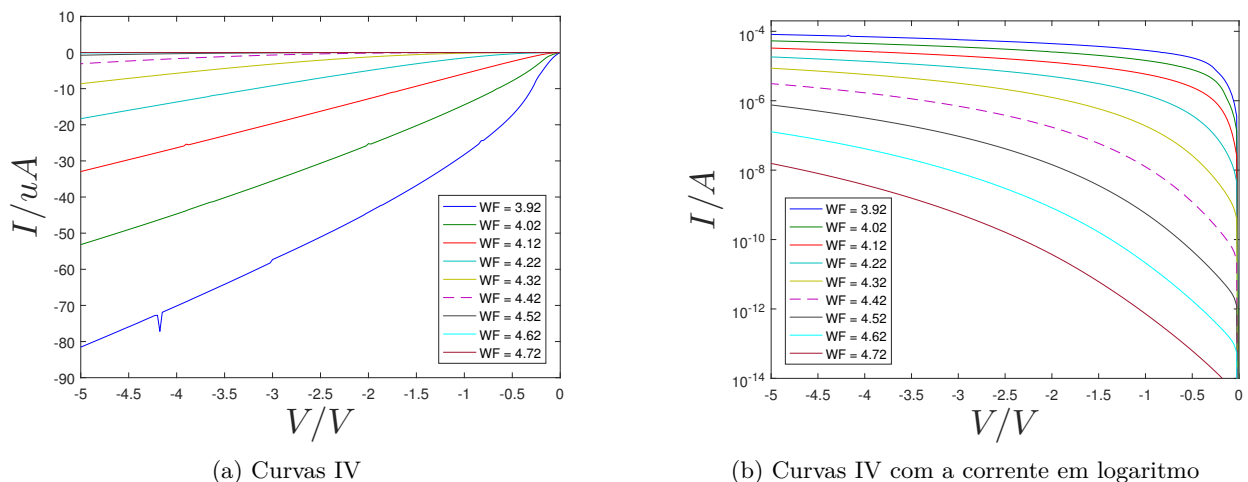


Figura 4.11: Contato tipo Schottky 1 nm oxidado com tunelamento não local para diferentes funções trabalho

Como feito anteriormente, o contato roxo tracejado é o contato que estávamos utilizando

durante todo o trabalho. Esse ajuste da função trabalho mostra uma melhoria no comportamento do dispositivo, porém a presença da camada de óxido ainda suprime muito a condução de corrente no dispositivo. Em termos mais palpáveis, a resistência de contato para uma função trabalho de 4.42 eV, temos uma  $R_c$  de 1.7 M $\Omega$ . Enquanto que para uma função trabalho de 3.92 eV, temos uma  $R_c$  de 67 k $\Omega$ . Portanto, apesar de se melhorar a resistência de contato, a corrente ainda não alcança valores ôhmicos. Desta forma, fizemos a mesma análise para uma camada de óxido mais fina, com o intuito de capturar a relevância dessa variável no modelo. A Figura 4.12 revela os resultados da simulação.

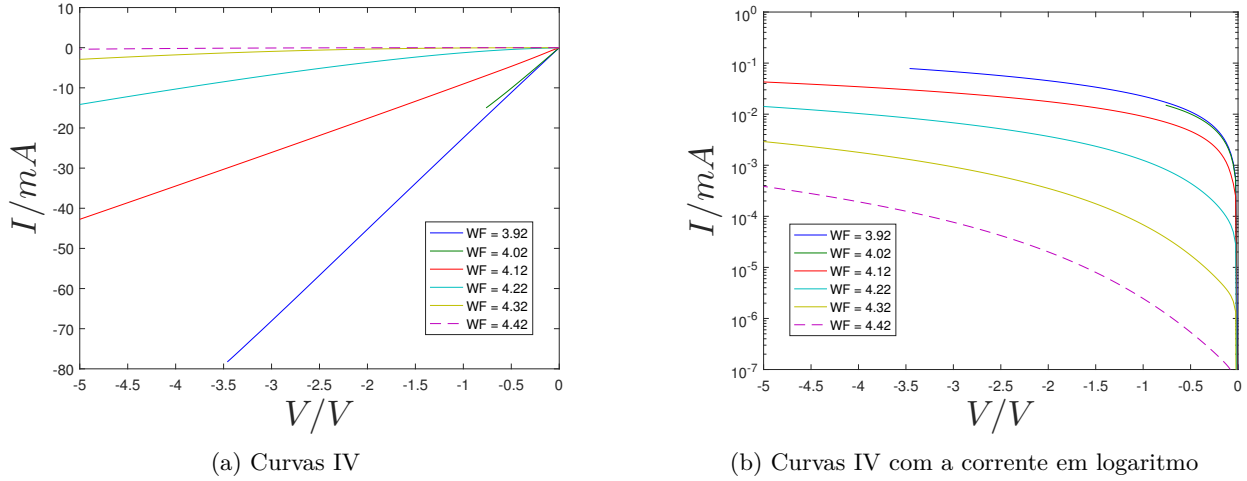


Figura 4.12: Contato tipo Schottky 0.2 nm oxidado com tunelamento não local para diferentes funções trabalho

Ao diminuirmos a camada de óxido, devemos aumentar a discretização das malhas de refinamento. Entretanto, esse processo acaba trazendo diversas dificuldades para a convergência do algoritmo utilizado pelo SDevice. Portanto, todas as curvas incompletas foram extrapoladas para se realizar o cálculo da resistência de canal do dispositivo. Para uma camada de óxido de 0.2 nm, a resistência de contato para uma função trabalho de 4.42 eV é de 15 k $\Omega$ . De outro lado, a função trabalho de 3.92 eV resultou em uma resistência de contato de 44  $\Omega$ . Este valor de resistência é idêntico ao valor ôhmico, portanto a grossura da barreira de óxido é um fator crucial na avaliação de contatos MOS. Ao extrapolarmos os valores obtidos pela curva, podemos calcular qual seria o valor da corrente para uma tensão  $V = 5$  V. Para essa tensão, a corrente resultante é de 0.11 A, valor muito próximo à corrente ôhmica.

#### 4.5.5 A modelagem da eletroafinidade do óxido

Podemos alterar a eletroafinidade do óxido no dispositivo, com o intuito de se diminuir a altura da barreira. Ao alterarmos a eletroafinidade de um isolante, estamos fazendo o mesmo raciocínio proposto pelo ajuste da função trabalho. Basicamente, trocamos o material de óxido utilizado na simulação. Ao aumentarmos o valor de  $\chi$ , diminuímos a diferença entre a eletroafinidade do  $SiO_2$  e do  $Si$ , ocasionando assim na diminuição da altura da barreira. O  $\chi$  do dióxido de silício é de 0.9 eV, enquanto que o novo  $\chi$  é de 3 eV. Como a função trabalho do silício dada na literatura é

de 4.05 eV, espera-se uma drástica diminuição na altura da barreira. Os resultados são revelados na Figura 4.13.

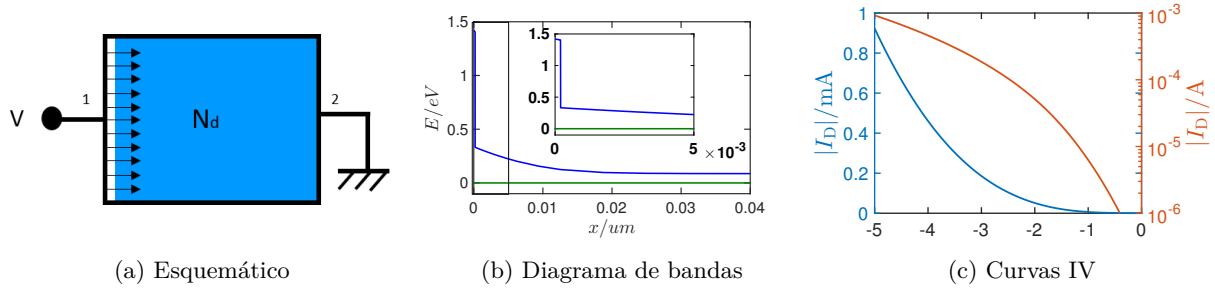


Figura 4.13: Contato tipo Schottky com tunelamento não local e um óxido diferente

Na Figura 4.13b, vemos que a altura da barreira foi significativamente reduzida, proporcionando assim uma maior facilidade dos elétrons para ultrapassá-la. Os efeitos da redução da altura da barreira são capturados pelas curvas IV, onde vemos que a corrente do contato retorna aos valores da Figura 4.4. Para este caso, a resistência do dispositivo também é de 6 k $\Omega$ , idêntica a resistência da simulação da Figura 4.4.

## 4.6 Comparações finais

Ao longo deste capítulo, foram realizados vários cálculos de resistência dentro das diferentes técnicas de engenharia de contatos. A Tabela 4.1 agrupa todos esses valores.

Tipo de contato	Estratégia	Tunelamento	Resistência
Ôhmico	-	-	44 $\Omega$
$\Phi_B = 0.37$ eV	-	Tunelamento não local	6 k $\Omega$
$\Phi_B = 0.37$ eV	Dopagem	Tunelamento não local	38 $\Omega$
$\Phi_B = -0.13$ eV	Ajuste da função trabalho	Tunelamento não local	40 $\Omega$
$\Phi_B = 0.37$ eV	Adição da camada de óxido de 1 nm com $\chi = 0.9$ eV	Tunelamento não local	1.7 M $\Omega$
$\Phi_B = -0.13$ eV	Adição da camada de óxido de 1 nm com $\chi = 0.9$ eV	Tunelamento não local	67 k $\Omega$
$\Phi_B = 0.37$ eV	Adição da camada de óxido de 0.2 nm com $\chi = 0.9$ eV	Tunelamento não local	15 k $\Omega$
$\Phi_B = -0.13$ eV	Adição da camada de óxido de 0.2 nm com $\chi = 0.9$ eV	Tunelamento não local	44 $\Omega$
$\Phi_B = 0.37$ eV	Adição da camada de óxido de 1 nm com $\chi = 0.9$ eV	Tunelamento Fowler-Nordheim	4 k $\Omega$
$\Phi_B = 0.37$ eV	-	Tunelamento não local sem armadilhas	13.1 M $\Omega$
$\Phi_B = 0.37$ eV	-	Tunelamento não local com armadilhas	12.7 M $\Omega$
$\Phi_B = 0.37$ eV	Ajuste da eletroafinidade do óxido com $\chi = 3$ eV	Tunelamento não local	6 k $\Omega$

Tabela 4.1: Tabela de resistências

O contato ôhmico possui uma resistência de 44  $\Omega$ , sendo assim quatro ordens de grandeza menor do que a  $R_c$  do modelo de tunelamento não local com  $\Phi_B = 0.37$  eV. A partir dessa comparação, vemos o grande efeito negativo que uma barreira de potencial trás ao contato. Entretanto, esse problema foi contornado por meio das estratégia de dopagem do semiconductor e ajuste da função trabalho do metal. Lembrando que a função trabalho do metal é alterada, em princípio, por injeções de camadas metálicas ou isolantes. Por meio destas duas técnicas, melhoramos o contato de uma forma a torná-lo ôhmico.

A estratégia de adicionar um óxido entre interface MS por si só não funcionou, dado que o óxido era muito grosso, impossibilitando assim uma boa injeção de cargas. Isso é comprovado pela resistência de  $67\text{ k}\Omega$  do dispositivo que contempla o ajuste da função trabalho em conjunto com a adição da camada de óxido. Porém, ao diminuirmos a grossura do óxido, alcançamos o contato ôhmico após o devido ajuste da função trabalho. Concluimos que o tunelamento através de uma camada isolante é menos efetivo. Dessa forma, caso esse tunelamento seja inevitável, recomendamos três engenharias de contato para a sua melhoria. O óxido deve possuir um grande número de defeitos, um grande valor de eletroafinidade e ser fino.

O tunelamento assistido por armadilhas ajuda a redimir parcialmente as desvantagens de uma camada isolante no contato. Entretanto, o TAT não acarretou em uma melhoria muito significativa ao contato, logo essa técnica não pode ser a única estratégia de engenharia de contatos utilizada na modelagem do dispositivo. Apesar de sua influência ser pequena, ele ainda assim modificou o dispositivo e, por isso, para a análise completa de um dispositivo não podemos ignorar a sua influência, dado que o TAT é uma parte essencial para uma modelagem mais completa dos fenômenos que englobam a interface de contato.

Outra alternativa ao ajuste da função trabalho é o ajuste da eletroafinidade do óxido. Desta forma, a simulação deste ajuste trás à tona um resultado equiparável ao tunelamento não local com uma camada de óxido de  $0.2\text{ nm}$ . Vemos que o ajuste da eletroafinidade do óxido é indispensável para camadas de óxido mais grossas.

Em suma, com relação às camadas de injeção de cargas, os isolantes devem exibir uma grande gama de defeitos, para que eles funcionem como uma camada de injeção de cargas com o propósito de se alterar a função trabalho do metal. Como recomendações adicionais para a engenharia de contatos, ressaltamos também a grande importância do isolante ser fino e eletronegativo.

No caso do tunelamento FN, os parâmetros “A” e “B” da equação (3.1) não são relacionados às propriedades específicas do material utilizado. Portanto, uma comparação detalhada com o modelo de tunelamento não local é difícil. No modelo FN, somente a grossura do isolante impacta diretamente a eficiência de injeção de cargas por meio da alteração do valor de  $F_{ins}$ . Entretanto, os parâmetros “A” e “B” derivam da livreria de materiais da Synopsys e, por isso, representam valores calibrados para um determinado material. A partir do modelo FN, concluimos que os resultados das simulações de dispositivos com o tunelamento não local são conservadoras.

# Capítulo 5

## Conclusões

O melhor modelo simulado neste trabalho é o contemplado pelo mecanismo de dopagem, porém os modelos do contato Schottky com o ajuste da função trabalho do metal e o modelo da adição de óxido de 0.2nm com o ajuste da função trabalho do metal não devem ser ignorados. Todos estes modelos alcançaram resistências ôhmicas, tornando-os assim alvos de um estudo mais aprofundado. Lembrando que todos os modelos aqui estruturados estão disponíveis ou no capítulo 4 ou na seção de anexos com as suas devidas marcações.

Em suma, vimos que para alcançar o patamar de contato ôhmico é necessário algum tipo de engenharia de contatos, sendo que modelos sem engenharia de contatos não são bons condutores. Lembramos que materiais orgânicos não possuem dopagem e, conseqüentemente, o volume de pesquisas sendo feitas para se atingir um dispositivo ôhmico com estes compostos é deveras grande. A partir dos resultados apresentados, vemos a grande influência que o ajuste da função trabalho do metal, o ajuste da eletroafinidade do óxido e a adição de uma camada de óxido possuem no contato. Ressaltamos que os óxidos possuem um largo intervalo de eletroafinidades, sendo assim óxidos possuem as propriedades de isolantes, semicondutores e condutores. Além disso, os contatos metálicos podem ser diretamente oxidados a partir de ambientes controlados, criando-se assim uma camada de óxido proposital. Vale ressaltar que a maioria dos fenômenos aqui representados foram retratados de forma independente, porém há uma correlação entre eles ainda não averiguada.

Propostas para trabalhos futuros são a análise dos dispositivos para uma baixa dopagem e após isso, replicar as simulações destes novos modelos com materiais orgânicos. Outra proposta é a análise mais aprofundada dos parâmetros tunelamento assistido por armadilhas, investigando a melhor forma de modelá-lo e de detalhar melhor cada parâmetro presente nesse modelo. Além disso, analisar a influência das técnicas aqui estudadas para óxidos semicondutores como o  $Ag_2O$ . A simulação da morfologia do contato é uma outra linha forte de pesquisa futura que anda em conjunto com este trabalho, dado que ainda não determinamos influência deste mecanismo em contatos neste trabalho. Por fim, é possível construir um modelo que englobe todas as influências dos três mecanismos em um único dispositivo.

# REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] C. Liu, Y. Xu, and Y.-Y. Noh, “Contact Engineering in Organic Field-effect Transistors,” *Materials Today*, vol. 18, no.2, pp. 79–96, 2015.
- [2] B. G. Streetman and S. K. Banerjee, *Solid State Electronic Devices*. Pearson Education, 2015.
- [3] J. Hwang, A. Wan, and A. Kahn, “Energetics of metal–organic interfaces: New experiments and assessment of the field,” *Materials Science and Engineering R*, vol. 64, pp. 1–31, 2009.
- [4] Behzad Razavi, *Fundamentals of Microelectronics*. John Wiley & Sons, Inc., 2014.
- [5] A. Sharma, C. Madhu, and J. Singh, “Performance Evaluation of Thin Film Transistors: History, Technology Development and Comparison: A Review,” *International Journal of Computer Applications*, vol. 89, no.15, pp. 36–40, 2014.
- [6] A. Kumatani, Y. Li, P. Darwaman, T. Minari, and K. Tsukagoshi, “On practical charge injection at the metal/organic semiconductor interface,” *Scientific Reports*, vol. 3, 2013.
- [7] C. Minagawa, Y. Kim, M. Klaus, and Z. Bao, “Reducing the contact resistance in bottom-contact-type organic field-effect transistors using an ago x interface layer,” *Applied Physics Express*, vol. 10, p. 091601, 2017.
- [8] S.M. Sze and Kwok K. Ng, *Physics of Semiconductor Devices*. John Wiley & Sons, Inc., 2007.
- [9] John D. Cressler, *Silicon Earth*. Taylor & Francis Group, LLC, 2016.
- [10] D. Natali and M. Caironi, “Charge Injection in Solution-Processed Organic Field-Effect Transistors: Physics, Models and Characterization Methods,” *Advanced Materials*, vol. 24, pp. 1357–1387, 2012.
- [11] J. C. Scott and G. G. Malliaras, “Charge injection and recombination at the metal–organic interface,” *Chemical Physics Letters*, vol. 299, pp. 115–119, 1999.
- [12] C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, and J. Hone, “Measurement of the Elastic Properties and Intrinsic Strength of Monolayer Graphene,” *Science*, vol. 321, pp. 385–388, 2008.
- [13] A. H. C. Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, “The electronic properties of graphene,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 81, p. 109, 2009.



- [14] B. Lüssem, M. Riede, and K. Leo, “Doping of organic semiconductors,” *Physica Status Solidi A*, vol. 210(1), pp. 9–43, 2013.
- [15] G. Parthasarathy, C. Shen, and S. R. Forrest, “Lithium doping of semiconducting organic charge transport materials,” *Journal of Applied Physics*, vol. 89(9), p. 4986–4992, 2001.
- [16] J. Kido and T. Matsumoto, “Bright organic electroluminescent devices having a metal-doped electron-injecting layer,” *Applied Physics Letters*, vol. 73, p. 2866, 1998.
- [17] J. Endo, T. Matsumoto, and J. Kido, “Organic Electroluminescent Devices with a Vacuum-Deposited Lewis-Acid-Doped Hole-Injecting Layer,” *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 41 (3B), p. L358–L360, 2002.
- [18] R. Winter, M. S. Hammer, C. Deibel, and J. Pflaum, “Improvement of the poly-3-hexylthiophene transistor performance using small molecule contact functionalization,” *Applied Physics Letters*, vol. 95, p. 263313, 2009.
- [19] M. T. Greiner, L. Chay, M. G. Helander, W. Tang, and Z. Lu, “Metal/Metal-Oxide Interfaces: How Metal Contacts Affect the Work Function and Band Structure of MoO<sub>3</sub>,” *Advanced Functional Materials*, vol. 23, pp. 215–226, 2013.
- [20] —, “Transition Metal Oxide Work Functions: The Influence of Cation Oxidation State and Oxygen Vacancies,” *Advanced Functional Materials*, vol. 22, pp. 4557–4568, 2012.
- [21] *Sentaurus Device User Guide*, Synopsis, Inc., 2011.

# ANEXOS

## Arquivos e simulações do contato ôhmico dopado

- O arquivo de geometria é idêntico ao do contato Schottky dopado e o arquivo de comando é idêntico ao do contato Schottky dopado, apagando a variável *Workfunction*

### Resultados das simulações

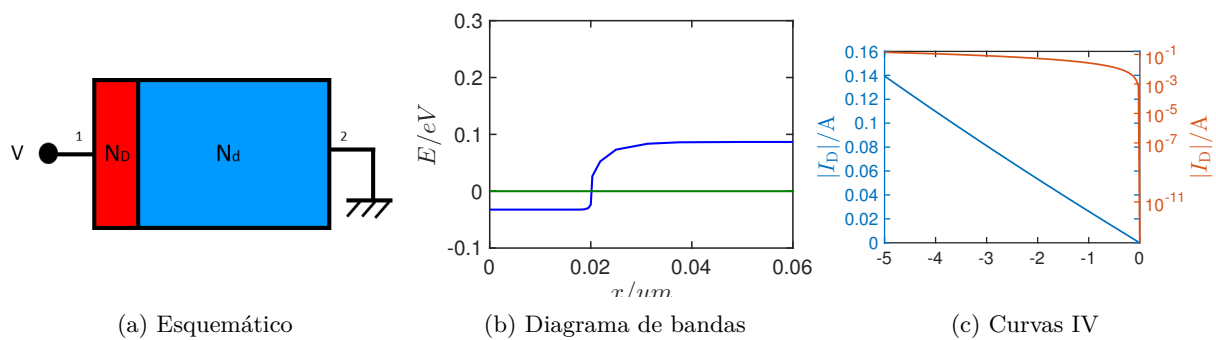


Figura 1: Contato ôhmico dopado