

TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

**ANÁLISE TEÓRICA DE CORRENTES LIMITADAS
EM SEMICONDUTORES ORGÂNICOS
DOPADOS NÃO INTENCIONALMENTE**

Pedro Henrique Sbampato França Raro

Brasília, Julho de 2017

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA

FACULDADE DE TECNOLOGIA

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
Faculdade de Tecnologia

TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO
**ANÁLISE TEÓRICA DE CORRENTES LIMITADAS
EM SEMICONDUTORES ORGÂNICOS
DOPADOS NÃO INTENCIONALMENTE**

Pedro Henrique Sbampato França Raro

*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

MSc. Cesar do Amaral, FAPLAC
Examinador externo

Prof. Dra. Artemis Marti Ceschin, ENE/UnB
Examinador interno

Dedicatória

A Deus, por Sua misericórdia e compaixão, ao meus pais, irmã e amigos por todo incentivo e motivação

Pedro Henrique Sbampato França Raro

Agradecimentos

No âmago do ser, na alcova da alma, no alçapão dos registros da consciência, inexplicavelmente lá estava Ele. Não posso defini-Lo, nem se quisesse com a avidez máxima de um jovem sonhador. Muito menos posso compreende-Lo em suas formas ou sabedorias. Diria que Ele é o longínquo areal no continente do amor, perscrutado continuamente pelas lunetas do espírito no infinito mar do viver. Afinal quem és Tu? Tu és a única coisa que não sei se posso compreender, nem se possuísse toda idade do universo, nem se possuísse toda sabedoria infinita dos mundos. Apesar disso tudo, reconheço o balsamo inacabável do tépido afago misterioso que mina da Tua onipresença e preenche qualquer espírito. Querido amigo e amado Deus, dedico todas as minhas felicidades a Ti e, sem dúvida, a conclusão desse trabalho é uma das mais deleitosas felicidades. Obrigado.

Sem o bom humor inesgotável da minha amada mãe, o amor infinito e incondicional da minha querida e amada irmãzinha Jujuba e a sabedoria com requintes de sensibilidade extrema do meu amado pai, provavelmente, teria sido visitado pelos desvarios da loucura que encontram aqueles que pensam de menos e sentem de mais. Vocês são o maior centro do meu reabastecimento espiritual. Obrigado, de todo meu coração.

À toda minha família. Vocês me acompanham desde sempre, me abastecem de amor e "me colocam para cima" a todo momento. Obrigado por tudo.

Ao professor Stefan por ser um exemplo de professor, pela dedicação, por sua paciência inesgotável, por ser um exemplo de ser humano sensível e educado.

À Vilany e Charles pelo apoio, ajuda, simpatia, prestatividade e amizade.

Aos amigos que encontrei no percurso da engenharia. Especialmente à Natasha Huang, Gabriel (pcg), Jeremy Paule, Wagner Mourthé e Fernanda Vilela. Vocês todos são pessoas muito especiais e o mundo ganha muito em te-los. Obrigado por todo carinho de sempre.

Agradeço aos meus primos, Guilherme Sbampato e Marcelo Raro por todos os momentos de descontração, apoio emocional e pela confiança que sempre demonstraram na minha capacidade intelectual, especialmente, quando essa faltou à mim mesmo.

À Melissa Gabriela por todo carinho e paciência. Você e suas sutilezas amorosas fazem toda diferença na minha vida.

Pedro Henrique Sbampato França Raro

RESUMO

A aplicação de materiais orgânicos em eletrônica vem ganhando cada vez mais espaço no mercado. Diferentemente dos materiais inorgânicos, os materiais orgânicos oferecem atributos interessantes para a fabricação de tecnologias tais como flexibilidade, ampla disponibilidade e sustentabilidade. Embora materiais orgânicos apresentem-se satisfatórios quando implementados à eletrônica, a matéria orgânica é bastante suscetível a influências do ambiente como, por exemplo, oxidação, umidade e variações de temperatura, que podem levar a mudanças significativas no comportamento elétrico e, por consequência, nos parâmetros que caracterizam esses materiais. Este trabalho, portanto, visa discutir uma metodologia capaz de analisar perfis $V \times J$ de dispositivos orgânicos tipo M-i-M (metal1-semicondutor-metal2), com a finalidade de extrair parâmetros de interesse, como, por exemplo, dopagens indevidas, barreiras de potencial e tensões internas built-in. Para tanto, por meio do software Sentaurus TCAD, foram gerados perfis $V \times J$ para a geometria M-i-M contando apenas com três variáveis livres : barreira de injeção, barreira de extração e dopagem. A partir dessas curvas, que possuem parâmetros conhecidos, foi discutida uma metodologia dividida em duas etapas, uma de análise qualitativa e outra de análise quantitativa. A análise qualitativa visou verificar a maneira como os perfis $V \times J$ simulados se apresentaram em diferentes escalas de plotagem em comparação a perfis $V \times J$ de leis analíticas difundidas na teoria de semicondutores. A etapa quantitativa buscou, por meio de mecanismos de interpolações lineares em escala duplo logaritmo e derivadas numéricas, extrair parâmetros matemáticos avaliando essas equações de interpolação às leis analíticas. Os valores obtidos foram tabelados e comparados aos valores reais usados nas simulações. Em alguns casos, foi possível determinar adaptações para leis analíticas teóricas permitindo maior abrangência e aplicabilidade.

ABSTRACT

Electronic devices based on organic materials increasingly gain market share. Organic semiconductors are widely available, in some cases even from sustainable sources, and offer interesting properties like flexibility, which distinguish them from their inorganic counterparts. However, the demand of low cost and energy fabrication calls for ambient processing, which expose organic materials to degradation agents like oxygen and humidity. The resulting changes in the electrical characteristics of organic semiconductors have to be carefully analyzed and quantified. Here, a methodology is discussed for determining the unintentional doping concentration and contact barriers from current-voltage curves of metal-semiconductor-metal (m-s-m) samples. To this extent, electrical characteristics of hole only m-s-m samples were simulated solving the Poisson equation coupled to the charge continuity equation with drift-diffusion currents, employing the Sentaurus TCAD suite. After qualitative classification, the numerical simulations are compared to simple

analytic laws allowing quantitative parameter extraction. Known descriptions for injection, bulk and contact limited currents are modified to allow for the presence of small dopant concentrations. The extracted contact and bulk properties are compared to the simulation parameters to assess the precision of the employed extraction methodology.

SUMÁRIO

1	Introdução	1
1.1	CONTEXTUALIZAÇÃO.....	1
2	Revisão Bibliográfica	3
2.1	PORTADORES DE CARGA EM SEMICONDUTORES.....	3
2.2	EQUAÇÃO DE POISSON	3
2.3	MECANISMOS DE CONDUTIVIDADE EM DISPOSITIVOS SEMICONDUTORES DE DOIS TERMINAIS	4
2.3.1	CORRENTE LIMITADA PELA CARGA ESPACIAL	6
2.3.2	CONDUÇÃO ÔHMICA EM SEMICONDUTORES.....	7
2.3.3	CORRENTE LIMITADA POR ARMADILHAS	8
2.3.4	CORRENTE LIMITADA POR DIFUSÃO	9
2.3.5	CORRENTE ASSISTIDA PELO CAMPO ELÉTRICO	11
2.4	RECOMBINAÇÃO E GERAÇÃO	12
2.5	EQUAÇÃO DE CONTINUIDADE.....	13
3	Desenvolvimento	15
3.1	INTRODUÇÃO	15
3.2	MODELAGEM COMPUTACIONAL DE CURVAS $V \times J$	16
3.3	PROCESSOS DE ANÁLISE PARA CONSTITUIÇÃO DA METODOLOGIA.....	19
3.4	FERRAMENTAS PARA ANÁLISE QUALITATIVA: ESTUDO DE PERFIS $V \times J$	20
3.4.1	CORRENTE LIMITADA POR CARGA ESPACIAL (SCLC)	22
3.4.2	LEI ÔHMICA	25
3.4.3	CORRENTE LIMITADA POR DIFUSÃO	26
3.4.4	CORRENTE ASSISTIDA POR CAMPO ELÉTRICO.....	29
3.5	ANÁLISE QUANTITATIVA: ESTUDO DA EXTRAÇÃO DE PARÂMETROS.....	31
3.5.1	IDENTIFICAÇÃO DE TENDÊNCIAS E SEPARAÇÃO EM REGIÕES	31
3.5.2	AVALIAÇÃO DOS INTERVALOS DE BAIXAS (LB) E ALTAS TENSÕES (HB): INTERPOLAÇÕES LINEARES	33
3.5.3	ESTIMATIVAS NUMÉRICAS PARA DOPAGEM N_A	35
3.5.4	ESTIMATIVAS NUMÉRICAS PARA O NÚMERO DAS CARGAS EM EQUILÍBRIO p_0 ...	36
3.5.5	ESTIMATIVAS NUMÉRICAS PARA BARREIRA DE INJEÇÃO ϕ_{inj}	36
3.5.6	APROXIMAÇÕES NUMÉRICAS PARA O POTENCIAL INTERNO BUILT-IN V_{bi}	37

3.5.7	APROXIMAÇÕES NUMÉRICAS PARA DETERMINAÇÃO DA BARREIRA DE EXTRAÇÃO ϕ_{ext}	38
4	Resultados	39
4.1	INTRODUÇÃO	39
4.2	CLASSIFICAÇÃO QUALITATIVA	39
4.2.1	ANÁLISE QUALITATIVA E SEPARAÇÃO DAS REGIÕES: SIMULAÇÃO 1.....	39
4.2.2	ANÁLISE QUALITATIVA E SEPARAÇÃO DAS REGIÕES: SIMULAÇÃO 2.....	40
4.2.3	ANÁLISE QUALITATIVA E SEPARAÇÃO DAS REGIÕES: SIMULAÇÃO 3.....	41
4.2.4	ANÁLISE QUALITATIVA E SEPARAÇÃO DAS REGIÕES: SIMULAÇÃO 4.....	42
4.2.5	ANÁLISE QUALITATIVA E SEPARAÇÃO DAS REGIÕES: SIMULAÇÃO 5.....	43
4.2.6	ANÁLISE QUALITATIVA E SEPARAÇÃO DAS REGIÕES: SIMULAÇÃO 6.....	44
4.2.7	ANÁLISE QUALITATIVA E SEPARAÇÃO DAS REGIÕES: SIMULAÇÃO 7.....	45
4.2.8	ANÁLISE QUALITATIVA E SEPARAÇÃO DAS REGIÕES: SIMULAÇÃO 8.....	45
4.3	ANÁLISE QUANTITATIVA APLICADA ÀS SIMULAÇÕES.....	47
4.3.1	EXTRAÇÃO DE PARÂMETROS NA SIMULAÇÃO 1.....	47
4.3.2	EXTRAÇÃO DE PARÂMETROS NA SIMULAÇÃO 2.....	51
4.3.3	EXTRAÇÃO DE PARÂMETROS NA SIMULAÇÃO 3.....	54
4.3.4	EXTRAÇÃO DE PARÂMETROS NA SIMULAÇÃO 4.....	57
4.3.5	EXTRAÇÃO DE PARÂMETROS NA SIMULAÇÃO 5.....	60
4.3.6	EXTRAÇÃO DE PARÂMETROS NA SIMULAÇÃO 6.....	62
4.3.7	EXTRAÇÃO DE PARÂMETROS NA SIMULAÇÃO 7.....	64
4.3.8	EXTRAÇÃO DE PARÂMETROS NA SIMULAÇÃO 8.....	66
4.4	VALIDAÇÃO DA METODOLOGIA	68
4.4.1	COMPARAÇÃO ENTRE VALORES EXTRAÍDOS E SIMULADOS	68
4.4.2	PERFIS $V \times J$ RECONSTRUÍDOS E SIMULADOS	69
5	Conclusões	71
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	74

LISTA DE FIGURAS

2.1	Diagrama de bandas para (a) barreira de injeção maior do que a barreira de extração $\phi_{inj} = 0.3eV > \phi_{ext} = 1.58eV$ e (b) barreira de injeção menor que barreira de extração $\phi_{inj} = 0.52eV < \phi_{ext} = 0eV$	6
3.1	Metodologia	15
3.2	Perfis $V \times J$ em escala duplo logaritmo simulados a partir do software Sentaurus TCAD. As variáveis livres são as barreiras de injeção ϕ_{inj} , barreiras de extração ϕ_{ext} e as dopagens N_A . Os demais parâmetros são fixos, iguais para todas as curvas e podem ser observados nas tabelas 3.1, 3.2 e 3.3. Os valores utilizados para as variáveis livres nas Simulações, podem ser observados na tabela 4.17	17
3.3	Fluxograma representativo demonstrando as duas etapas constituintes da metodologia a elaborada.....	20
3.4	Corrente limitada por carga espacial (equação (2.21)). Todos os plots possuem a mesma variação de tensão de $0V$ a $50V$ em passos de $0.1V$ e valores de referência das tabelas 3.2, 3.3 e 3.1.	20
3.5	Lei Ôhmica (equação (2.26)). Todos os plots possuem a mesma variação de tensão de $0V$ a $50V$ em passos de $0.1V$ e valores de referência dados pelas tabelas 3.2, 3.3 e 3.1	21
3.6	Corrente de difusão (equação (2.48)) num intervalo de $0V$ a $2V$, $V_{bi} = 1V$ e $\phi_{inj} = 0.4eV$. Os demais valores podem ser observados nas tabelas 3.2, 3.3 e 3.1.	21
3.7	Corrente assistida pelo campo elétrico (equação (2.49)) para valores de $\phi_{inj} = 0.4eV$, $V_{bi} = 1V$. Os demais valores podem ser observados nas tabelas 3.2, 3.3 e 3.1	21
3.8	Variações no comprimento do canal L (a, b, c) e na mobilidade μ_p (d, e, f). Para as duas situações são plotados gráficos em escala linear, semi-log e duplo-log. Os valores escolhidos para os parâmetros podem ser observados nas respectivas legendas de cada gráfico.	22
3.9	Variações para uma tensão interna V_{bi} que opõe-se a tensão V_D aplicada na amostra. Quando V_{bi} aumenta seu módulo, as respectivas densidades de corrente diminuem, ocasionando um deslocamento da curva para direita. Nos dois gráficos as curvas pontilhadas em vermelho são SCLCs com $V_{bi} = 0$ e os valores de referência.	24
3.10	Variações para uma tensão interna V_{bi} que soma-se à tensão aplicada V_D . Quando V_{bi} aumenta seu módulo, as respectivas densidades de corrente aumentam, ocasionando um deslocamento da curva para esquerda. Nos dois gráficos as curvas pontilhadas em vermelho são ambas SCLC com $V_{bi} = 0V$	24

3.11	Variações no comprimento L e no fator mobilidade μ_p na lei Ômica. Os respectivos valores de variação podem ser lidos nas legendas dos correspondentes gráficos	25
3.12	Variações para uma tensão interna $V_{bi} < 0$. (a) em escala linear (b) em escala semi-logaritmo (c) escala duplo logaritmo. Quando V_{bi} aumenta seu módulo, as respectivas densidades de corrente aumentam, ocasionando deslocamentos na curva. Nos três gráficos as curvas pontilhadas em vermelho são leis Ôhmicas com $V_{bi} = 0V$.	26
3.13	Variações para uma tensão interna $V_{bi} > 0$. (a) em escala linear (b) em escala semi-logaritmo (c) escala duplo logaritmo. Quando V_{bi} aumenta seu módulo, as respectivas densidades de corrente diminuem, ocasionando um deslocamento da curva. Nos dois gráficos as curvas pontilhada em vermelho são ambas leis Ohmicas com $V_{bi} = 0V$.	26
3.14	Corrente de difusão num intervalo de $0V$ a $2V$, $V_{bi} = 1V$ e $\phi_{inj} = 0.4eV$. Os números 1 e 2 indicam as regiões distintas nos gráfico. A região 1 encontra-se antes de V_{bi} e a região 2 logo após.....	27
3.15	Corrente de difusão em escala semi-log. A reta em vermelho é tangente ao gráfico para todos os valores anteriores a V_{bi}	27
3.16	Corrente de difusão num intervalo de $0V$ a $2V$ com variações graduais da barreira de injeção num intervalo de $\phi_{inj} = 0.4eV$ a $\phi_{inj} = 1.2eV$ em passos de $0.05V$ (a) escala linear (b)escala semilog (c)loglog.....	28
3.17	Corrente de difusão num intervalo de $0s2V$ com variações graduais da tensão interna built in V_{bi} num intervalo de $V_{bi} = 0.3V$ a $V_{bi} = 1.2$ em passos de $0.05V$ (a) escala linear (b)escala semilog (c)loglog.	28
3.18	o conjunto $P = \frac{q\mu N_v}{L}$ na equação (2.48) sendo variado de P até $5P$ em passos de 1..	29
3.19	Corrente de difusão num intervalo de $0V$ a $2V$ com variações graduais da barreira de injeção num intervalo de $\phi_{inj} = 0.4eV$ a $\phi_{inj} = 1.2eV$ em passos de $0.05V$. A medida que ϕ_{inj} aumenta, J tende a diminuir.	30
3.20	Corrente de difusão num intervalo de $0s2V$ com variações graduais da tensão interna built in V_{bi} num intervalo de $V_{bi} = 0.3V$ a $V_{bi} = 1.2$ em passos de $0.05V$	30
3.21	o conjunto $P = \frac{q\mu N_v}{L}$ na equação (2.49) sendo variado de P até $5P$ em passos de 1..	31
3.22	tipos observados de transições entre fenômenos de condução elétrica em dispositivos semicondutores. A região com a palavra TRANSIÇÃO descreve a região de mudança de uma limitação para outra, sem haver, necessariamente predominância de um ou outro fenômeno. Os fenômenos em retângulos a esquerda da Transição acontecem sempre para tensões menores do que aqueles à direita	32
3.23	Exemplo de separação em regiões de altas tensões (HB) e baixas tensões (LB). A região de transição (T) é delimitada pelo círculo azul.....	33
3.24	interpolações lineares para regiões de altas tensões HB e baixas tensões LB. A região de transição é marcada por um círculo azul com a letra T.	34
3.25	Interpolações lineares para regiões de altas tensões HB e baixas tensões LB. O ponto de interseção entre as interpolações é marcado com uma estrela. O valor de tensão para o ponto de interseção dá uma aproximação ao potencial interno built-in (V_{bi})..	37

4.1	perfil $V \times J$ para Simulação 1 em diferentes escalas	39
4.2	Perfil $V \times J$ da simulação 1 com as regiões de tensões relativas destacadas. LB refere-se a baixas tensões tendo um contorno em amarelo, T refere-se a região de transição e HB em vermelho refere-se a região de altas tensões	40
4.3	perfil $V \times J$ para Simulação 2 em diferentes escalas	40
4.4	perfil $V \times J$ para Simulação 3 em diferentes escalas	41
4.5	Perfil $V \times J$ da Simulação 3 com as regiões de tensões relativas destacadas, respectivamente, LB refere-se a baixas tensões tendo contorno em amarelo, T refere-se a região de transição delimitada pelo círculo azul e HB em vermelho refere-se a região de altas tensões	41
4.6	perfil $V \times J$ em diferentes escalas	42
4.7	Curva simulada com as três regiões definidas. A elipse amarela mostra a região de baixas tensões (LB), o círculo azul aproxima uma possível região de transição (T) e a elipse vermelha indica a região de altas tensões (HB).....	42
4.8	(a) Reta tangente proveniente da interpolação linear com o gráfico da simulação em escala semi-logaritmo de equação $\log_{10}(J_t) = 5.077V_D - 5.438$. (b)ordens de grandeza compreendidas pela reta tangente	43
4.9	Perfil $V \times J$ para Simulação 5 em diferentes escalas. Observa-se que em duplo logaritmo (c) não há uma região clara de transição.....	43
4.10	Perfil $V \times J$ para amostra 6 em diferentes escalas	44
4.11	Separação em regiões de transição T e altas tensões HB para Simulação 6. A região de baixas tensões LB não é possível de ser definida	44
4.12	perfil $V \times J$ para simulação 7 em diferentes escalas	45
4.13	Perfis $V \times J$ da Simulação 8 nas três escalas sugeridas: Linear, semi-logaritmo e duplo logaritmo.	45
4.14	Separação em regiões de baixas tensões LB, transição T e altas tensões HB para Simulação 8	46
4.15	Simulação 8 em semi-logaritmo	46
4.16	(a) interpolação linear para altas tensões (HB) de equação $Y_{HB} = 1.900X - 4.6585$ (b) interpolação para altas tensões (HB) juntamente com a equação de uma SCLC .	47
4.17	Interpolação linear para região de baixas tensões. A reta de interpolação apresenta a equação $Y_{LB} = \alpha_{LB} + K = 1.301X - 4.601$	48
4.18	(a) e (b) apresentam curvas iterativas sobrepostas a simulação (em azul) a partir de $V_{bi} = 0V$ até um possível $V_{bi} = 1.2V$ em passos de $0.1V$. Em (b) a curva original da Simulação1 encontra-se destacada em círculos. (c) apresenta a segunda derivada do perfil $V \times J$	48
4.19	Soma da SCLC com uma lei Ohmica de $p = Na = 1.3 \times 10^{13} \text{Acm}^{-2} \text{V}^{-1}$. Nas legendas da imagem Sim refere-se a curva simulada1 e SCLC+Ohmico refere-se a aproximação.....	49
4.20	(a) curva simulada e respectivas curvas de aproximação para diferentes frações da dopagem N_A . (b) melhor curva de aproximação ($N_{A,new} = N_A \times 50\%$)	50
4.21	(a) Erro residual entre a curva simulada e a reconstruída	50

4.22	Simulação 2, curva original e reconstruída	52
4.23	Erro residual $e_i = J_s - J_r / J_s $. J_s refere-se aos valores de densidade de corrente da Simulação2 e J_r aos valores da reconstrução proposta.....	53
4.24	Interpolações lineares a partir das regiões definidas em 4.5. Em baixas tensões a interpolação linear fornece equação $Y_{LB} = X0.2 - 3.571$ e para altas tensões $Y_{HB} = X0.5 - 3.546$	54
4.25	Aproximação por (2.50) em amarelo e (3.6) em vermelho.....	55
4.26	Segunda derivada do perfil $V \times J$ da simulação 3. A ausência de picos na região escolhida para transição não fornece uma aproximação para o valor de V_{bi}	55
4.27	Interpolações lineares para regiões de altas tensões (Fit HB), para baixas tensões (Fit LB), a estrela marca o ponto de interseção das interpolações em $V_D = 0.9V$. Respectivamente, as equações das interpolações para altas e baixas tensões são: $Y_{HB} = X1.2 - 2.9061$ e $Y_{LB} = X22 - 1.7252$	57
4.28	Segunda derivada do perfil $V \times J$ da Simulação 4. O valor de máximo indica uma tensão de $V_D = 0.7V$	58
4.29	(a) curva simulada original (Sim) e a reconstrução pela equação (4.10) utilizando os parâmetros aproximados obtidos na análise. (b) Erro residual	59
4.30	Interpolações lineares para o perfil $V \times J$ em escala duplo logaritmo. A reta verde é a interpolação linear para altas tensões e possui equação $Y_{HB} = \alpha_{HB}X + K = 1.1X - 4.336$. A reta vermelha é a interpolação para baixas tensões e tem equação $Y_{LB} = \alpha_{LB}X + K = 1.4X - 4.651$. A interseção entre as retas é marcada pela estrela preta e indica uma tensão de $V_D = 10.061V$	60
4.31	Simulação 5 como uma grande região de transição entre limitação de corpo e contato. 61	
4.32	(a) interpolação linear para altas tensões. A reta obtida tem equação $Y_{HB} = \alpha_{HB} + K = X2.1 - 5.011$ e pode ser identificada na cor vermelha. (b) comparação da reta de interpolação Y_{HB} com a lei SCLC (em amarelo).....	62
4.33	Segunda derivada $\partial^2 V / \partial J^2$ do perfil $V \times J$. O círculo em vermelho indica o ponto de máximo $V_D = 1.2V$	63
4.34	Interpolações lineares para altas e baixas tensões. A reta de interpolação para altas tensões tem como equação $Y_{HB} = \alpha_{HB}X + K = 0.8X - 3.014$ e a de baixas tensões $Y_{LB} = \alpha_{LB}X + K = 0.5X - 2.968$	64
4.35	Contorno de altas tensões para Simulação7.....	65
4.36	Interpolações lineares para altas e baixas tensões. A interseção entre as duas retas de interpolação (LB e HB) é marcada pela estrela em $V_D = 0.8V$	66
4.37	Segunda derivada do perfil $V \times j$. O ponto de máximo apresenta o respectivo valor de tensão de $V_D = 0.7V$	67
4.38	(a) Simulação 1 (Sim) e reconstrução analítica (Rec). A reconstrução utiliza os valores originais simulados mostrados nas tabelas 3.2, 3.3 e a equação (2.26). (b) Erro residual ponto a ponto entre a Simulação2 e a reconstrução	69
4.39	(a) Simulação 2 (Sim) e reconstrução (Rec). A reconstrução utiliza os valores originais simulados mostrados nas tabelas 3.2, 3.3, ?? e a equação (2.26). (b) Erro residual ponto a ponto entre a Simulação2 e a reconstrução	70

4.40	(a) Simulação 6 (Sim) e reconstrução numérica (Rec). A reconstrução utiliza os valores originais simulados mostrados nas tabelas 3.2 e 3.3. (b) Erro residual ponto a ponto entre a Simulação6 e a reconstrução numérica	70
4.41	(a) Simulação8 (Sim) e reconstrução numérica (Rec). A reconstrução utiliza os valores originais simulados mostrados nas tabelas 3.2, 3.3 e ???. (b) Erro residual ponto a ponto entre a Simulação8 e a reconstrução	70

LISTA DE TABELAS

3.1	Condições de contorno aplicadas nos portadores dos contatos Schottky	19
3.2	Parâmetros do material	19
3.3	Dimensões geométricas para o dispositivo M-i-M	19
3.4	Valores de coeficientes angulares para leis analíticas quando em escala duplo logaritmo	34
3.5	Valores sugeridos para comparação dos coeficientes angulares obtidos nas interpolações lineares	35
4.1	Coeficientes angulares das interpolações lineares e limitações das regiões LB e HB ..	51
4.2	Parâmetros extraídos da Simulação 1. NaN refere-se a impossibilidade de extração do respectivo parâmetro.	51
4.3	Coeficientes angulares das interpolações lineares e limitações das regiões LB e HB ..	53
4.4	Parâmetros extraídos da Simulação 2. NaN refere-se a impossibilidade de extração do respectivo parâmetro.	53
4.5	Coeficientes angulares das interpolações lineares e limitações das regiões LB e HB ..	56
4.6	Parâmetros extraídos da Simulação 3. NaN refere-se a impossibilidade de extração do respectivo parâmetro. J_{\max} e J_{\min} referem-se, respectivamente, aos parâmetros extraídos com base nos valores de correntes máxima e mínima.....	56
4.7	Coeficientes angulares das interpolações lineares e limitações das regiões LB e HB ..	59
4.8	Parâmetros extraídos da Simulação 4. I e D referem-se, respectivamente, aos métodos de extração de V_{bi} pela interseção das interpolações lineares e pela derivada segunda.....	59
4.9	Coeficientes angulares das interpolações lineares e limitações das regiões LB e HB ..	61
4.10	Parâmetros extraídos da Simulação 5. No campo referente a barreira de injeção, J_{\max} refere-se à obtenção do parâmetro por meio da densidade de corrente máxima.	61
4.11	Coeficientes angulares das interpolações lineares e limitações das regiões LB e HB ..	63
4.12	Parâmetros extraídos da Simulação 6. NaN refere-se a impossibilidade de extração do parâmetro	63
4.13	Coeficientes angulares das interpolações lineares e limitações das regiões LB e HB ..	65
4.14	Parâmetros extraídos da Simulação 7. NaN refere-se a impossibilidade de extração do parâmetro respectivo	65
4.15	Coeficientes angulares das interpolações lineares e limitações das regiões LB e HB ..	67
4.16	Parâmetros extraídos da Simulação 8. I e D referem-se, respectivamente, aos métodos de extração de V_{bi} pela interseção das interpolações lineares e pela derivada segunda.....	67

4.17	Valores dos parâmetros barreira de injeção ϕ_{inj} , barreira de extração ϕ_{ext} e dopagem N_A usados nas simulações computacionais.....	68
4.18	Valores dos parâmetros barreira de injeção ϕ_{inj} , barreira de extração ϕ_{ext} e dopagem N_A extraídos das simulações computacionais	68

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolos

A	Área	$[cm^2]$
E	Campo elétrico	$[V/cm]$
I	Corrente elétrica	$[A]$
J	Densidade de corrente	$[I/J]$
kT	Fator de Boltzmann	$[eV]$
L	Comprimento da camada ativa	$[V]$
n	Densidade de elétrons livres	$[cm^{-3}]$
N_V	Densidade de estados	$[cm^{-3}]$
p	Densidade de lacunas livres	$[cm^{-3}]$
q	Carga de um elétron = $1,6 \times 10^{-19}$	$[C]$
T	Temperatura	$[K]$
V	Tensão elétrica	$[V]$
Q	Carga elétrica	$[C]$
μ	Mobilidade	$[cm^2/Vs]$
ϵ	Permissividade	$[F/cm]$
χ_0	Eletroafinidade	$[eV]$
ϕ	Função de trabalho dos contatos	$[eV]$
ρ	Resistividade	$[\Omega cm]$

Subscritos

ϵ_r	Permissividade relativa	[]
ν_p	Velocidade de recombinação	[cm/s]
V_{bi}	potencial interno built-in	[V]
E_g	Energia de gap	[eV]
μ_p	Mobilidade das lacunas	[cm ² /Vs]
P_T	Densidade de armadilhas de lacunas	[cm ⁻³]
P_f	Densidade de lacunas livres	[cm ⁻³]
α_{HB}	Coeficiente angular para interpolação linear de altas tensões	[Acm ⁻² V ⁻¹]
α_{LB}	Coeficiente angular para interpolação linear de baixas tensões	[Acm ⁻² V ⁻¹]
α_I	Coeficiente angular para interpolação linear	[Acm ⁻² V ⁻¹]
J_{MAX}	Densidade de corrente máxima	[Acm ⁻²]
J_{MIN}	Densidade de corrente mínima	[Acm ⁻²]
V_D	Tensão aplicada	[V]
ϕ_{inj}	barreira de injeção	[eV]
ϕ_{ext}	barreira de extração	[eV]

Siglas

HB	Altas tensões
LB	Baixas tensões
T	Região de transição
SCLC	Space charge limited current
HOMO	Orbital molecular mais energético ocupado
LUMO	Orbital molecular menos energético não ocupado
TCAD	Projeto auxiliado por computador para tecnologia

Capítulo 1

Introdução

1.1 Contextualização

Fabricação e armazenamento de dispositivos orgânicos eletrônicos em ambientes com exposição ao ar, sem necessidade de encapsulamentos, reduziria drasticamente custos na produção e implementação desse tipo de tecnologia [1, 2]. Mesmo assim, dispositivos eletrônicos que utilizam materiais orgânicos em suas camadas ativas, e que não apresentam encapsulamento, tem uma limitada estabilidade quando expostos ao ambiente [3]. Especialmente, quando em contato com oxigênio e com umidade, os dispositivos podem sofrer uma série de adversidades tais como, oxidação de contatos metálicos, oxidação da matéria orgânica entre outras coisas [3].

Além de oxidação, o oxigênio atmosférico pode desencadear uma série de outros fatores. Quando a camada ativa orgânica de um dispositivo eletrônico fica exposta ao oxigênio atmosférico, este pode criar um complexo de transferência de cargas reversível com o semicondutor orgânico agindo como um aceitador de elétrons, ou seja, funcionando como dopagem não intencional do tipo p [4]. A interação com o oxigênio pode ser eventualmente catalisada pela luz, porém, como o complexo de cargas é reversível, a dopagem pode ser revertida. Nem sempre essa interação do oxigênio com semicondutor orgânico é reversível. O oxigênio pode interagir gerando uma ligação covalente e, portanto, irreversível atuando como uma armadilha de cargas [5].

Um semicondutor amplamente estudado quanto aos mecanismo de degradação é o P3HT. O P3HT é um semicondutor à base de Tiofeno que possui um bom desempenho quando empregado a dispositivos de circuitos eletrônicos devido a sua regioregularidade [6]. Investigações de corrente termo-estimuladas em P3HT mostraram que o oxigênio atmosférico não apenas introduz armadilhas para elétrons mas também aumenta a densidade de armadilhas já existentes ocupadas por lacunas [7].

Isso tudo reflete a necessidade de estudos a respeito do comportamento e caracterização de dispositivos orgânicos. Dado que a "eletrônica verde" vem sendo amplamente um setor que, a cada dia ganha mais espaço em pesquisas científicas, é preciso estudar mais profundamente o comportamento dos novos materiais orgânicos em relação ao meio que são expostos com a finalidade de utilizar mais eficientemente suas propriedades físicas.

Com o intuito de estudar como se comportam estruturas orgânicas expostas a condições ambientes, o foco deste trabalho consiste na descrição de uma metodologia capaz de estudar dispositivos do tipo m-i-m a partir dos perfis $V \times J$. A aplicação dessa metodologia visa extrair informações sobre interferências do meio no semiconductor refletidas em possíveis dopagens indevidas, valores das barreiras de potencial dos contatos metálicos e o potencial interno do dispositivo. Para o desenvolvimento da metodologia, foram utilizadas simulações a partir do software Sentaurus TCAD com valores previamente estipulados e o uso da ferramenta computacional MATLAB para a análise destas curvas.

O capítulo 2 traz uma revisão bibliográfica a respeito de fenômenos e leis analíticas $V \times J$ amplamente estudados e aplicáveis a semicondutores. Em seguida, no capítulo 3 as análises que são empregadas à metodologia são mostradas e discutidas. No capítulo 4 a metodologia é aplicada as curvas simuladas pelo TCAD e os resultados obtidos são expostos em tabelas e comparados aos valores reais das simulações. Por fim, o capítulo 5 traz as conclusões a respeito da metodologia desenvolvida.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

2.1 Portadores de carga em semicondutores

Em um semicondutor há vários fatores que contribuem para a carga total do dispositivo, dentre eles, há a contribuição dos dopantes aceitadores N_A^- , dos dopantes doadores N_D^+ , das lacunas livres p , da densidade de elétrons livres n , densidades de armadilhas para lacunas p_T e para elétrons n_T . Considerando todos estes fatores presentes e que a carga elementar é dada por q :

$$\rho_v = q(N_D^+ - N_A^- + p - n) + q(p_T - n_T) \quad (2.1)$$

2.2 Equação de Poisson

A equação de Poisson, em matemática, consistem em uma equação que se utiliza de derivadas parciais. Por este motivo, torna-se por definição uma equação diferencial parcial. Em eletrostática, esta equação pode descrever, com a sua solução, o potencial eletrostático em um dispositivo semicondutor levando-se em conta suas dimensões espaciais. Como em [8] a dedução desta equação começará a partir da forma pontual da lei de Gauss:

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho_v \quad (2.2)$$

Pela definição de densidade de fluxo elétrico tem-se que

$$\vec{D} = \varepsilon \vec{E} \quad (2.3)$$

Usando a relação do gradiente

$$\vec{E} = -\nabla V \quad (2.4)$$

Por substituição, chegamos a

$$\nabla \cdot \nabla V = -\frac{\rho_v}{\varepsilon} \quad (2.5)$$

Expandindo em coordenadas cartesianas

$$\nabla^2 V = \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial z^2} = -\frac{\rho_v}{\varepsilon} \quad (2.6)$$

Ou, de outra forma bastante útil a equação (2.6) pode ser escrita como

$$\nabla \cdot \vec{E} = \frac{\rho_v}{\varepsilon} \quad (2.7)$$

e ainda, para os semicondutores a serem analisados, usando a equação (2.1) e introduzindo-a na equação (2.7) :

$$\nabla \cdot \vec{E} = \frac{\rho_v}{\varepsilon} = \frac{q}{\varepsilon}(N_D^+ - N_A^- + p - n) + q(p_T - n_T) \quad (2.8)$$

Como é sabido, a equação de Poisson pode ser resolvida para casos especiais devido a certas condições de contorno [9, 8]. Estas serão discutidas nas próximas sessões quando o uso desta ferramenta matemática se fizer necessária para o estudo do comportamento elétrico quantitativo nas amostras analisadas.

2.3 Mecanismos de condutividade em dispositivos semicondutores de dois terminais

É sabido que em um dispositivo semicondutor há dois tipos de fenômenos gerais que explicam a corrente elétrica, são eles, difusão e deriva. A corrente de difusão resulta da diferença de concentração de portadores de carga e da agitação térmica dos átomos presentes. Em outras palavras, se há uma diferença de concentração dos portadores de carga e houver agitação térmica, então um fluxo de portadores de carga se formará de modo a equilibrar a diferença; sumariamente, a corrente de difusão tem sentido contrário ao gradiente de concentração dos portadores de carga, tendo a tendência de tornar homogênia a densidade de portadores no corpo. A equação que descreve a densidade de corrente de difusão é apresentada a seguir para elétrons e lacunas [10]:

$$\vec{J}_{n,dif} = qD_n \nabla n(x, y, z) \quad (2.9)$$

e

$$\vec{J}_{p,dif} = -qD_p \nabla p(x, y, z) \quad (2.10)$$

em que q é a carga elementar, D_p e D_n os coeficientes de difusão de lacunas e elétrons respectivamente, $p(x, y, z)$ e $n(x, y, z)$ as densidades espaciais de lacunas e elétrons respectivamente. Dessa forma, a equação (2.9) refere-se aos elétrons e a equação (2.10) refere-se as lacunas.

A densidade de corrente de deriva pode ser entendida como a corrente que aparece no dispositivo quando há um campo elétrico externo presente E , ocasionando aceleração nos portadores de carga. As equações que descreve este fenômeno para elétrons e lacunas, respectivamente, podem ser verificadas a seguir:

$$\vec{J}_{n,der} = -qnv_n = q\mu_n n \vec{E} \quad (2.11)$$

e

$$\vec{J}_{p,der} = qpv_p = q\mu_p p \vec{E} \quad (2.12)$$

em que q corresponde a carga elementar, n e p correspondem a, respectivamente, densidade de elétrons e lacunas livres e V_n e V_p as velocidades de deriva, respectivamente, dos elétrons e das lacunas.

Mesmo que as correntes de deriva e difusão ocorram por razões distintas, ambas contribuem para a corrente elétrica final num dispositivo. A densidade de corrente total de um dispositivo semiconductor é a soma algébrica das duas contribuições:

$$\vec{J}_n = q\mu_n n \vec{E} + qD_n \nabla n(x, y, z) \quad (2.13)$$

e, analogamente às lacunas, tem-se

$$\vec{J}_p = q\mu_p p \vec{E} - qD_p \nabla p(x, y, z) \quad (2.14)$$

Nas próximas seções serão analisados casos especiais de transporte de portadores que vão considerar apenas a presença de lacunas livres. Isso pode ser justificado pelo fato de que os metais escolhidos nessa análise dopam o dispositivos com apenas lacunas.

Além da dopagem os dois parametros mais importantes investigados nesse trabalho são as barreiras de injeção ϕ_{inj} e barreiras de extração ϕ_{ext} das lacunas. As relações energéticas típicas consideradas nesse trabalho são ilustradas na figura 2.1

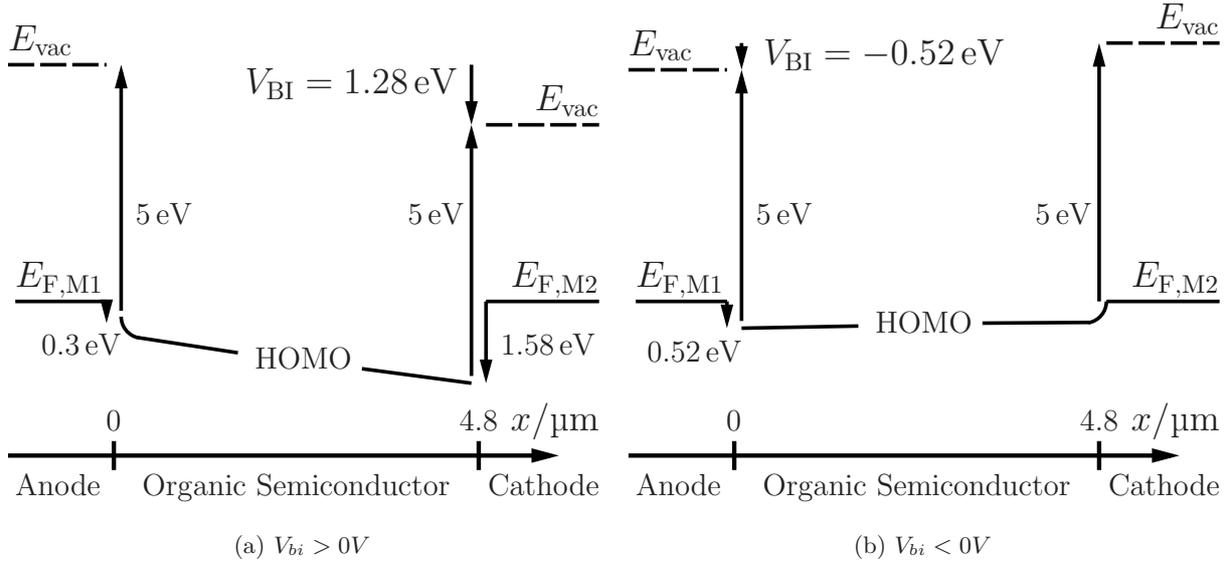


Figura 2.1: Diagrama de bandas para (a) barreira de injeção maior do que a barreira de extração $\phi_{inj} = 0.3\text{eV} > \phi_{ext} = 1.58\text{eV}$ e (b) barreira de injeção menor que barreira de extração $\phi_{inj} = 0.52\text{eV} < \phi_{ext} = 0\text{eV}$.

2.3.1 Corrente Limitada pela Carga Espacial

A Corrente limitada por carga espacial [11] (do inglês Space-Charge-Limited-Current, SCLC), é um importante fenômeno que acontece em semicondutores. Qualitativamente, este fenômeno pode ser explicado pela enorme densidade dos portadores livres que foram injetados ao canal de condução de corrente. Como consequência dessa injeção elevada, o material fica carregado em uma região específica e tanto o campo elétrico quanto as deformações na banda de energia são bastantes relevantes à análise do sistema. Nestas condições, a corrente elétrica que passa pelo sistema depende quadraticamente da tensão aplicada.

Para demonstrar matematicamente a validade dessa idéia, algumas suposições são necessárias. Em primeiro lugar, é necessário assumir que os únicos portadores de carga presentes que contribuem efetivamente para a corrente elétrica são lacunas livres e que estas apenas se orientam em uma dimensão e, para isto, vamos assumir que esta seja x . Essa hipótese reflete-se ao campo elétrico E e isso pode ser verificado pela equação (2.8). A segunda suposição presume que todas as cargas são livres e contribuem para a corrente elétrica, sendo as correntes de difusão desconsideradas.

Considerando o sistema com apenas lacunas como em [12]:

$$J = q\mu_p p(x) \vec{E}(x) \quad (2.15)$$

Utilizando as equações (2.4) e (2.6) percebe-se que o campo elétrico é relacionado com a carga por

$$\frac{dE(x)}{dx} = \frac{\rho(x)}{\epsilon} = \frac{qp(x)}{\epsilon} \quad (2.16)$$

substituindo (2.16) em (2.15)

$$J = \mu_p \epsilon \frac{dE(x)}{dx} E(x) \quad (2.17)$$

Assumindo que $E(0) = 0$, ou seja, não há intensidade de campo elétrico no eletrodo de injeção, ao integrar a expressão temos

$$E^2(x) = \frac{2J}{\epsilon\mu_p} x \quad (2.18)$$

ou de outra maneira

$$E(x) = \sqrt{\frac{2J}{\epsilon\mu_p} x} \quad (2.19)$$

O potencial é a integral do campo elétrico. Assumindo que para um condutor de comprimento d o potencial seja $V(d) = 0$ e $V(0) = V$,

$$V = - \int_0^d E(x) dx = \sqrt{\frac{2J}{\epsilon\mu_p} \frac{L^3}{3/2}} \quad (2.20)$$

Manipulando algebricamente a equação (2.20) chegamos a fórmula matemática da corrente limitada por carga espacial (*SCLC*) [13], mais conhecida como Lei de Mott-Gurney [14]

$$J = \frac{9\epsilon\mu_p V^2}{8L^3} \quad (2.21)$$

2.3.2 Condução Ôhmica em Semicondutores

A condução Ôhmica é possível quando os efeitos da interface dos contatos são ignorados para baixas correntes. Além do mais se o campo elétrico é constante sobre toda a amostra e a mobilidade dos portadores for assumida como independente do campo elétrico, se o número de aceitadores N_A^- for igual ao número de lacunas livres p e assumindo que apenas lacunas e aceitadores contribuem na carga elétrica total do dispositivo, então é possível reescrever a equação (2.8) como:

$$\nabla \cdot \vec{E} = 0 \quad (2.22)$$

ou de outra forma, como consideramos que a corrente elétrica está presente apenas na direção x

$$\frac{dE}{dx} = 0 \quad (2.23)$$

isso nos mostra que o campo elétrico é uma constante. Então,

$$\frac{-dV}{dx} = E \quad (2.24)$$

integrando a expressão, sabendo que $E(0) = 0$

$$E = \frac{V}{d} \quad (2.25)$$

Considerando a densidade de lacunas livres como homogênea em todo material, a corrente de difusão é desconsiderada e, dessa forma, a relação $V \times J$ pode ser representada por

$$\vec{J}_p = q\mu_p \frac{V}{d} p \quad (2.26)$$

Em que q é a carga elementar, μ_p mobilidade das lacunas, V o potencial, d o comprimento do canal e p a densidade de lacunas livres. Esta expressão é analoga aos elétrons.

2.3.3 Corrente Limitada por Armadilhas

A maioria das cargas não contribuem no fenômeno de transporte de cargas quando há uma distribuição exponencial de armadilhas pela banda proibida.

Dessa forma, é possível definir a densidade de lacunas capturadas pelas armadilhas com a seguinte expressão :

$$P_{TRAP} = P_T \left(\frac{P_f}{N_V} \right)^{T/T_C} \quad (2.27)$$

os parâmetros da equação são: P_T densidade de armadilhas de lacunas, P_f densidade de lacunas livres, N_V densidade de estados na banda de valência, T temperatura, T_C constante de distribuição.

Se usada a aproximação para uma dimensão da equação de Poisson e a introduzirmos na equação acima (2.27) chegamos a expressão

$$\frac{dE}{dx} = -\frac{q}{\epsilon} P_T \left(\frac{P_f}{N_V} \right)^{T/T_C} \quad (2.28)$$

E, pela relação

$$l = \frac{T_c}{T} \quad (2.29)$$

chegamos a uma outra forma de (2.28) que pode ser observada como

$$\frac{dE}{dx} = -\frac{q}{\epsilon} P_T \left(\frac{P_f}{N_V} \right)^{1/l} \quad (2.30)$$

Se introduzirmos a expressão matemática da corrente de deriva (2.17) no termo P_f , podemos obter uma nova forma da equação (2.30) que pode ser expressa como

$$E^{1/l} \frac{dE}{dx} = -\frac{q}{\epsilon} \frac{P_T}{N_V^{1/l}} \left(\frac{J}{q\mu} \right)^{1/l} \quad (2.31)$$

E se considerarmos

$$\frac{dE^{\frac{l+1}{l}}}{dx} = \left(\frac{1}{l} + 1 \right) E^{1/l} \frac{dE}{dx} \quad (2.32)$$

A equação (2.31) pode ser reescrita como

$$\frac{dE^{\frac{l+1}{l}}}{dx} = -\frac{q}{\epsilon} \frac{P_T}{N_V^{1/l}} \left(\frac{J}{q\mu} \right)^{1/l} \left(\frac{l+1}{l} \right) \quad (2.33)$$

utilizando esta última equação (2.33), podemos integra-la para o comprimento de todo o semicondutor, fazendo isso, obtemos a seguinte relação descrita como:

$$E^{\frac{l+1}{l}}(x) = -\frac{q}{\epsilon} \frac{P_T}{N_V^{1/l}} \left(\frac{J}{q\mu} \right)^{\frac{1}{l}} \left(\frac{l+1}{l} \right) x \quad (2.34)$$

Como é sabido que o potencial é a integral negativa do campo elétrico e esta integral estende-se pelo comprimento $x = 0$ até $x = L$, em que L é o comprimento total do dispositivo, o campo elétrico pode ser simplesmente substituído pela diferença de potencial aplicada ao extremos, então tem-se que

$$V = \left[\frac{q}{\epsilon} \frac{l+1}{l} \frac{P_T}{N_V^{1/l}} \left(\frac{J}{q\mu} \right)^{1/l} \right]^{\frac{l}{l+1}} \left(\frac{l+1}{2l+1} \right) L^{\frac{2l+1}{l+1}} \quad (2.35)$$

Como o fator de interesse é a densidade de corrente J , com as manipulações algébricas necessárias, a equação (2.35) é manipulada para obtermos o resultado final

$$J = q^{1-l} \mu N_V \left(\frac{2l+1}{l+1} \right)^{l+1} \left(\frac{\epsilon l}{(l+1) P_T} \right)^l \frac{V^{l+1}}{L^{2l+1}} \quad (2.36)$$

2.3.4 Corrente limitada por difusão

Para diodos orgânicos do tipo Metal-Semicondutor-Metal, apenas com lacunas como portadores, sem dopagem, com contatos assimétricos e baseado na proposição clássica de difusão de Schottky [15] para um contato metálico ligado a um semicondutor inorgânico dopado, pode-se derivar uma equação analítica. Partindo do pressuposto que um dos contatos está alinhado com o HOMO do material semicondutor e que o outro contato metálico possui uma função trabalho φ_b

causando desbalanceamento dos níveis de Fermi, então, pode-se considerar que há uma diferença de potencial V_{bi} dada por esse desnível.

Assim, seguindo a proposição classica de Schottky para correntes de difusão, a densidade de corrente total do dispositivo deve ser dada por :

$$\vec{J}_p = \mu_p kT \left(\frac{p}{kT} \frac{dE_v}{dx} - \frac{dp}{dx} \right) \quad (2.37)$$

Em que foi usada a relação de Einstein para obter a mobilidade [16] e E_v refere-se ao potencial do HOMO.

Em contraste com a teoria desenvolvida nos diodos Schottky, os limites de integração da estrutura M-i-M devem se estender até os limites do dispositivo no que diz respeito a suas dimensões físicas de espessura L :

$$\vec{J}_p \int_0^L \exp\left(-\frac{E_v(x)}{kT}\right) dx = -\mu_p kT p(x) \exp\left(-\frac{E_v(x)}{kT}\right) \Big|_0^L \quad (2.38)$$

Para resolver essa expressão são necessários condições de contorno para a densidade de portadores $p(x)$ e para o potencial da banda de valência (HOMO) $E_v(x)$ nas interfaces dos eletrodos. Fazendo o potencial interno $V_{bi} = \varphi_b$ as condições de fronteira para a densidade de portadores nos eletrodos podem ser dadas como em [17]:

$$p(0) = N_v \quad (2.39)$$

e

$$p(L) = N_v \exp\left(-\frac{q\varphi_b}{kT}\right) \quad (2.40)$$

Equanto as condições de contorno para a banda de valência são:

$$E_v(0) = -qV \quad (2.41)$$

$$E_v(L) = -q\varphi_b \quad (2.42)$$

Combinando ambas com a equação (2.38), temos então para corrente:

$$\vec{J}_p = \frac{N_v \mu_p kT \left[\exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1 \right]}{\int_0^L \exp\left(-\frac{E_v(x)}{kT}\right) dx} \quad (2.43)$$

Considerando que não há carga espacial no dispositivo, não são consideradas deformações na banda [18], então

$$E_v(x) = -q \left(V + \frac{(\varphi_b - V)x}{L} \right) \quad (2.44)$$

Levando-nos a outra resolução da integral do denominador da equação (2.43)

$$\int_0^L \exp\left(-\frac{E_v(x)}{kT}\right) dx = \frac{LkT}{q(\varphi_b - V)} \left(\exp\left(\frac{q\varphi_b}{kT}\right) - \exp\left(\frac{qV}{kT}\right) \right) \quad (2.45)$$

E substituindo (2.45) em (2.43) obtemos a forma final da equação, dada por

$$\vec{J}_{p,diff} = \frac{q\mu_p N_v (\varphi_b - V) \left[\exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1 \right]}{L \left[\exp\left(\frac{q\varphi_b}{kT}\right) - \exp\left(\frac{qV}{kT}\right) \right]} \quad (2.46)$$

Em que q é a carga elementar, μ_p mobilidade das lacunas, N_v densidade de subníveis eletrônicos na banda de valência, φ_b a função trabalho de um dos contatos, V tensão aplicada externamente, k constante de Boltzman, T temperatura. E, ainda se destacarmos o potencial interno $\varphi_b = V_{bi}$, se forem incluídas barreiras para ambos contatos $V_{bi} = \phi_{inj} - \phi_{ext}$ e tensão aplicada for V_D , manipulando algebricamente (2.46)

$$J_{p,diff} = \frac{q\mu N_v}{L \exp(q\phi_{inj}/kT)} \frac{(V_D - V_{bi}) [1 - \exp(-qV_D/kT)]}{1 - \exp[-q(V_D - V_{bi})/kT]} \quad (2.47)$$

Para tensões $V_D \geq 0.1V$ a expressão $1 - \exp(-qV_D/kT) = 0.98 \approx 1$, portanto, a equação (2.48) pode ser simplificada para

$$J_{p,diff} = \frac{q\mu N_v}{L \exp(q\phi_{inj}/kT)} \frac{(V_D - V_{bi})}{1 - \exp[-q(V_D - V_{bi})/kT]} \quad (2.48)$$

2.3.5 Corrente assistida pelo campo elétrico

Na equação (2.48), caso o campo elétrico interno assuma valores negativos, ou seja, $V_{bi} < 0V$ a equação pode ser ajustada para:

$$J_{p,FA} = \frac{q\mu N_v}{L \exp(q\phi_{inj}/kT)} \frac{(V_D + V_{bi})}{1 - \exp[-q(V_D + V_{bi})/kT]} \quad (2.49)$$

Como mostrado em [18] os desvios do potencial linear podem ser também incluídos na equação (2.48) incluindo as barreiras efetivas de injeção nos contatos e, conseqüentemente, o valor de tensão interna build-in é também um valor efetivo. Essa barreira efetiva é uma função da tensão aplicada $V_{BI,eff}(V_D)$ e tem seu valor reduzido ao passo que a tensão aplicada aumenta. Assim a tensão interna efetiva, built-in, torna-se uma função sublinear da tensão V_D aplicada :

$$J_{vbi} = q\mu p_{0,inj} \frac{V_D + |V_{BI,eff}(V_D)|}{L} \quad (2.50)$$

2.4 Recombinação e Geração

Recombinação e geração são mecanismos pelos quais portadores podem passar a "existir" ou a "não existir" mais, como o próprio nome já sugere os portadores podem ser Gerados, e isso implica que o portador vai contribuir na corrente elétrica por exemplo, ou podem ser Recombinados e, dessa forma, voltam a não contribuir mais. Sumariamente:

- Geração

A Geração pode ser descrita como qualquer processo em que lacunas e elétrons podem ser "criados", ou seja, tornam-se disponíveis.

- Recombinação

A recombinação pode ser descrita como processo de aniquilação (le-se indisponibilização) pelo qual um par elétron-lacuna é recombinado tornando ambos não mais contribuintes para os fenômenos que incidem sobre portadores livres.

Ao contrário de processos simples que afetam portadores como a corrente de deriva por exemplo, Recombinação e Geração é um nome genérico dado ao conjunto de processos similares que produzem os mesmos resultados.

Para as finalidade deste trabalho, os processos mais importantes de Recombinação e Geração são : injeção de energia no semiconductor pela luz (Fotogeração) e injeção de energia pela temperatura (Geração e Recombinação térmicas).

Sucintamente, a geração óptica ocorre quando fótons incidentes no semiconductor transmitem uma energia maior que a energia de gap E_G quebrando ligações químicas. Dessa maneira um par elétron-lacuna é criado.

De maneira análoga aos processos ópticos, a Recombinação e geração térmica direta acontece de maneira quase idêntica, salvo que a energia fornecida ao sistema é térmica. Quando os portadores perdem essa energia, estes são recombinados e, portanto, invalidados para a contribuição de corrente elétrica.

Outra forma de Recombinação e Geração importante é a térmica indireta. Apesar de usar energia térmica também, há uma leve diferença entre o processo térmico direto e indireto. Esta diferença consiste na presença de um "terceiro elemento", ou seja, não apenas a excitação térmica está presente no processo como um átomo de impureza indevido na rede de semiconductor e/ou uma ausência de átomo constituinte da rede. Dessa forma, o processo de Geração térmica indireta acontece com a ajuda deste "terceiro elemento" que introduz níveis permitidos de energia E_T próximos ao centro do gap de energia (o que distingue o fato de uma dopagem por impurezas). Dessa maneira, ao receber energia térmica, o elétron salta para esse nível introduzido E_T e, ao receber mais um pouco de energia térmica, salta novamente atingindo a banda de condução.

Já o processo de Recombinação térmica indireta, embora análogo contrário da Geração térmica indireta, torna-se de entendimento simples quando pensamos que o átomo de impureza, por exemplo, funciona como uma armadilha capturando o elétron livre até que uma lacuna se recombine com ele.

2.5 Equação de continuidade

Em um semiconductor, elétrons e lacunas não podem aparecer ou desaparecer em um determinado ponto sem que isso seja justificado por alguma atividade recorrente dos portadores de carga no local específico, ou seja, de outra forma, os portadores de uma determinada localidade devem ser transportados até lá ou "criados" naquela região. Sobre este fato, conclui-se que deve haver uma continuidade no tempo e no espaço na concentração de portadores [16].

Para justificar a expressão analítica da Equação da Continuidade, deve-se levar em conta todos os possíveis processos que possam contribuir para a mudança de concentração dos portadores. Tomando os principais processos como sendo, corrente de deriva, corrente de difusão, recombinação térmica, fotogeração de portadores e, combinando seus efeitos, pode-se escrever o esboço da equação:

Para os elétrons

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial n}{\partial t}|_{nder} + \frac{\partial n}{\partial t}|_{ndif} + \frac{\partial n}{\partial t}|_{RT} + \frac{\partial n}{\partial t}|_{FG} \quad (2.51)$$

e para as lacunas

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial p}{\partial t}|_{nder} + \frac{\partial p}{\partial t}|_{ndif} + \frac{\partial p}{\partial t}|_{RT} + \frac{\partial p}{\partial t}|_{FG} \quad (2.52)$$

Em que os termos com os subscritos RT e FG referem-se, respectivamente a recombinação térmica e fotogeração de portadores de carga.

As equações de continuidade ainda podem ser reescritas de uma forma mais compacta se considerarmos que as correntes, respectivamente, para elétrons e lacunas podem ser escritas como

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial n}{\partial t}|_{nder} + \frac{\partial n}{\partial t}|_{ndif} = \frac{1}{q} \left(\frac{\partial J_{nx}}{\partial x} + \frac{\partial J_{ny}}{\partial y} + \frac{\partial J_{nz}}{\partial z} \right) = \frac{1}{q} \nabla \cdot \vec{J}_n \quad (2.53)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial p}{\partial t}|_{nder} + \frac{\partial p}{\partial t}|_{pdif} = \frac{1}{q} \left(\frac{\partial J_{px}}{\partial x} + \frac{\partial J_{py}}{\partial y} + \frac{\partial J_{pz}}{\partial z} \right) = -\frac{1}{q} \nabla \cdot \vec{J}_p \quad (2.54)$$

As equações (2.53) e (2.54) indicam que vai haver uma mudança na concentração de portadores em uma pequena região do semiconductor se existir um desbalanceamento de portadores dentro e fora dessa região.

Substituindo as equações (2.53) e (2.54) nas equações, respectivamente, (2.51) e (2.52), temos para os elétrons

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \nabla \cdot \vec{J}_n + \frac{\partial n}{\partial t}|_{RT} + \frac{\partial n}{\partial t}|_{FG} \quad (2.55)$$

e para as lacunas

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{q} \nabla \cdot \vec{J}_p + \frac{\partial p}{\partial t}|_{RT} + \frac{\partial p}{\partial t}|_{FG} \quad (2.56)$$

Capítulo 3

Desenvolvimento

3.1 Introdução

Com o intuito de estudar dispositivos orgânicos M-i-M expostos a condições ambientes, por meio de análises de perfis $V \times J$ simulados, neste capítulo, uma metodologia é discutida e proposta. A partir de curvas computacionais com parâmetros bem definidos que simulam o comportamento desses dispositivos, leis analíticas para semicondutores e análises qualitativas e quantitativas dessas leis, foram construídas etapas de análises que visam extrair parâmetros de interesse como aproximações para o potencial interno V_{bi} , barreira de injeção ϕ_{inj} e dopagem N_A . Os passos da análise podem ser verificados no fluxograma da Figura 3.1

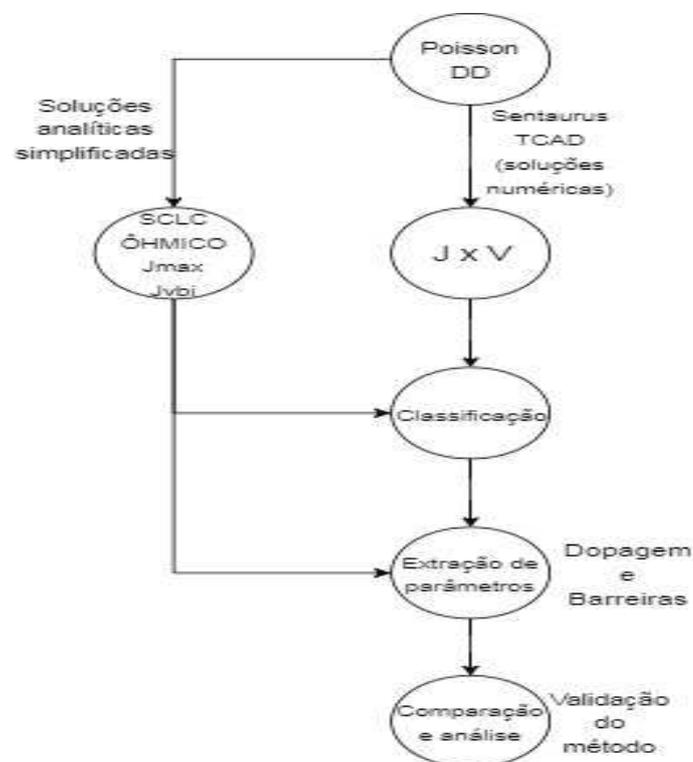


Figura 3.1: Metodologia

3.2 Modelagem computacional de curvas $V \times J$

Utilizando o software Sentaurus TCAD [9] foram simuladas oito curvas diferentes para parâmetros variados de barreiras de injeção, barreiras de exteção e dopagem. Os demais parâmetros foram fixados e podem ser observados nas tabelas 3.1, 3.2 e 3.3. Para tanto, as equações de Poisson e de continuidade foram resolvidas numericamente para a geometria M-i-M de uma dimensão.

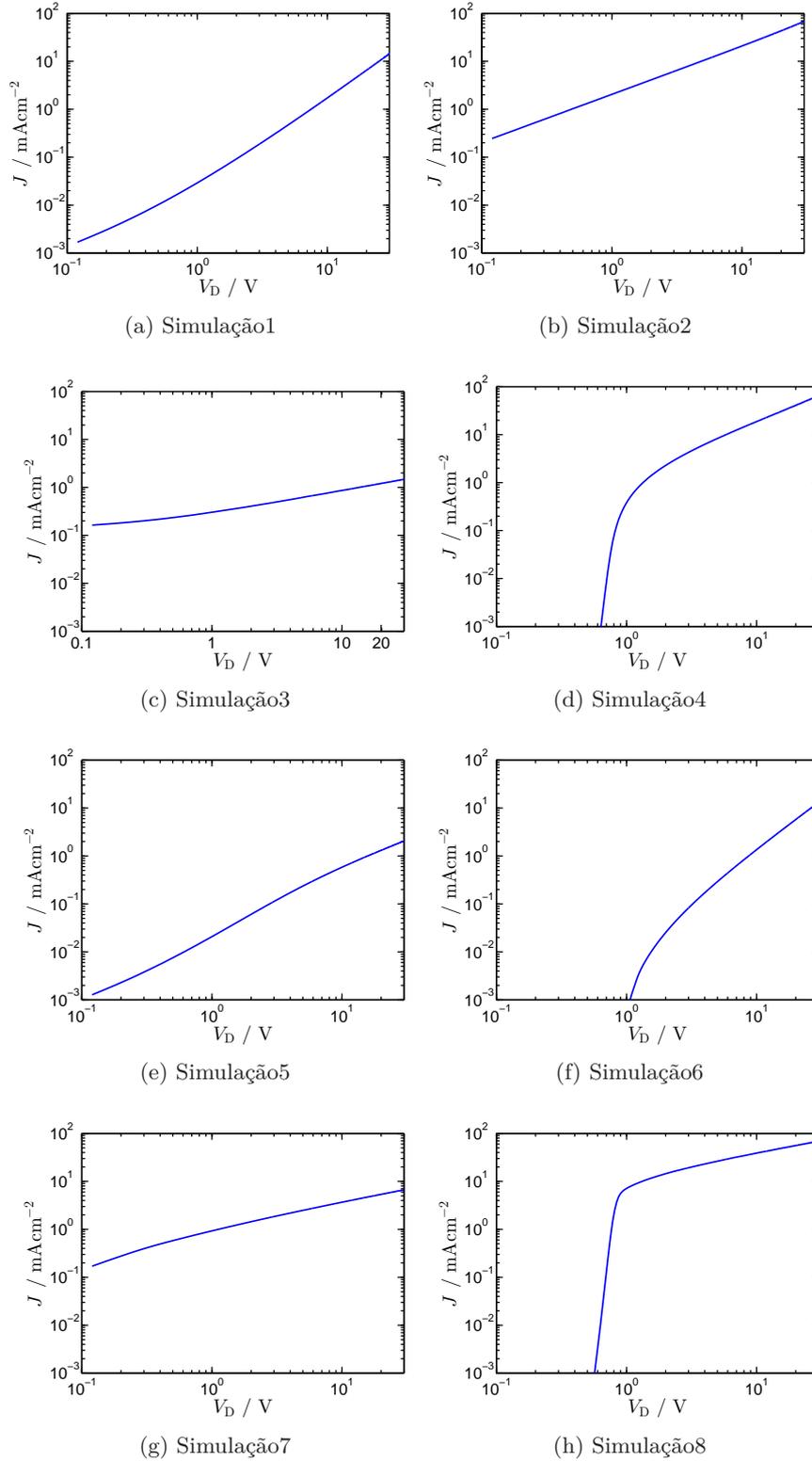


Figura 3.2: Perfis $V \times J$ em escala duplo logaritmo simulados a partir do software Sentaurus TCAD. As variáveis livres são as barreiras de injeção ϕ_{inj} , barreiras de extração ϕ_{ext} e as dopagens N_A . Os demais parâmetros são fixos, iguais para todas as curvas e podem ser observados nas tabelas 3.1, 3.2 e 3.3. Os valores utilizados para as variáveis livres nas Simulações, podem ser observados na tabela 4.17

Nas simulações, as densidades de corrente em uma dada posição x nas amostras simuladas foram calculadas como correntes de difusão e deriva (DD) e expressas como gradientes de potencial quasi-Fermi de elétrons e lacunas, respectivamente $\phi_n(x)$ e $\phi_p(x)$. Considerando que as densidades de portadores e campos elétricos são pequenos, a mobilidade foi assumida como constante. As densidades de elétrons e lacunas livres seguem as estatísticas de Fermi determinadas por, respectivamente, $E_{F,n} = E_F - q\phi_n$ e $E_{F,p} = E_F - q\phi_p$. A quantidade de lacunas livres na banda de valência p foi aproximada para $p \approx N_v \exp[(E_{HOMO} - E_{F,p})/kT]$, N_v deve ser interpretado como o número de densidades de subníveis energéticos conjugados e E_{HOMO} deve ser interpretado como a energia da banda de valência quando preenchida por uma lacuna. Para a camada ativa de semicondutor considerada, devido as condições de contorno nos contatos, apenas são levadas em conta contribuições de lacunas livres $p(x)$ para carga espacial na equação de Poisson. Quando considerada a presença adicional de dopantes aceitadores, uma carga fixa a mais deve ser considerada já que todos os dopantes são considerados ionizados.

A barreira de injeção de lacunas foi denotada como $\phi_B = \phi - \chi_0 + E_G$. A barreira é diferente para os dois contatos metálicos M1 e M2. Assim, as seguintes condições de Dirichlet são empregadas:

$$\psi(\text{Mi}) = V_D(\text{Mi}) + \frac{\phi_B(\text{Mi})}{q} + \frac{kT}{q} \ln \left(\frac{n_i}{N_v} \right) \quad (3.1)$$

$$\mathbf{J}_n \cdot \hat{n} = +qv_n(n - n_0)(\text{Mi}) \quad (3.2)$$

$$\mathbf{J}_p \cdot \hat{n} = -qv_p(p - p_0)(\text{Mi}) \quad (3.3)$$

Em que o vetor normal \hat{n} para dentro, ou seja, do contato metálico para o semicondutor. As densidades de equilíbrio de elétrons e lacunas nos contatos são dadas, respectivamente por

$$n_0 = N_c \times \exp[(q\phi_b - E_g)/kT] \quad (3.4)$$

e

$$p_0 = N_v \times \exp[-q\phi_b/kT] \quad (3.5)$$

A partir dessas condições de contorno, é possível escrever a corrente máxima de saturação. Se $p = 0$:

$$J_{p,max} = qv_p p_0 \quad (3.6)$$

Os parâmetros do material semicondutor simulado e dos metais M1 e M2 dos contatos podem ser observados nas tabelas a seguir:

Tabela 3.1: Condições de contorno aplicadas nos portadores dos contatos Schottky

Parâmetro	M1	M2
Função de trabalho Φ	?	?
Velocidade de recombinação de lacunas v_p	10^6 cm/s	

Tabela 3.2: Parâmetros do material

Parâmetro	OSC
Permissividade relativa ϵ_r	3
Eletroafinidade (LUMO) χ_0	-2.9 eV
gap da banda E_g	2.1 eV
Densidade dos subníveis na banda de valência N_v	2×10^{20} cm ⁻³
Mobilidade $\mu(300$ K)	6.1×10^{-3} cm ² /Vs
Dopagem por aceitadores N_a	?

Tabela 3.3: Dimensões geométricas para o dispositivo M-i-M

Parâmetro	
Comprimento L	5 μ m
Área A	0.01 cm ²

Nas tabelas 3.1 e 3.2 os parâmetros, barreira de injeção ϕ_{inj} , barreira de extração ϕ_{ext} e dopagem N_A não foram indicados por serem justamente as variáveis livres das simulações. Estes valores serão primeiramente investigados e estimados pela aplicação da metodologia para que posteriormente sejam identificados e comparados aos respectivos valores simulados.

3.3 Processos de análise para constituição da metodologia

Para o estudo de perfis $V \times J$, a proposta de metodologia será dividida em duas fases de análise, uma qualitativa e outra quantitativa. Primeiramente, por meio de análises somente qualitativas, as curvas $V \times J$ deverão ser plotadas em três diferentes escalas tais quais linear, escala semi logarítmica e duplo logarítmica. Por meio desses plots os perfis serão estudados visualmente com o intuito de buscar similaridades com trechos de perfis $V \times J$ de leis analíticas já conhecidas. Para isso, as principais leis discutidas no capítulo 2 terão seus parâmetros variados e suas respectivas curvas estudadas.

A segunda parte da análise, constitui o estudo da extração de parâmetros de interesse dos perfis $V \times J$. Para esse segundo momento da metodologia, serão propostos meios de gerar aproximações

matemáticas para os parâmetros de interesse tais quais: dopagem N_A , potencial interno V_{bi} e barreiras de injeção e extração, respectivamente, ϕ_{inj} e ϕ_{ext} .

METODOLOGIA

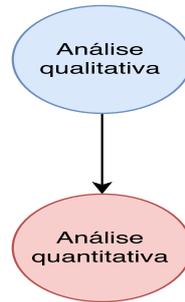


Figura 3.3: Fluxograma representativo demonstrando as duas etapas constituintes da metodologia a elaborada

3.4 Ferramentas para análise qualitativa: estudo de perfis $V \times J$

Fenômenos condutivos distintos apresentam comportamentos de acordo com a fórmula matemática que são descritos. Dessa forma, com o intuito de compreender o comportamento das leis analíticas estudadas no capítulo 2, foram feitos testes com os diferentes parâmetros que compõe suas respectivas fórmulas matemáticas. Para tanto foram definidos valores de referência baseados nas tabelas 3.2, 3.3 e 3.1

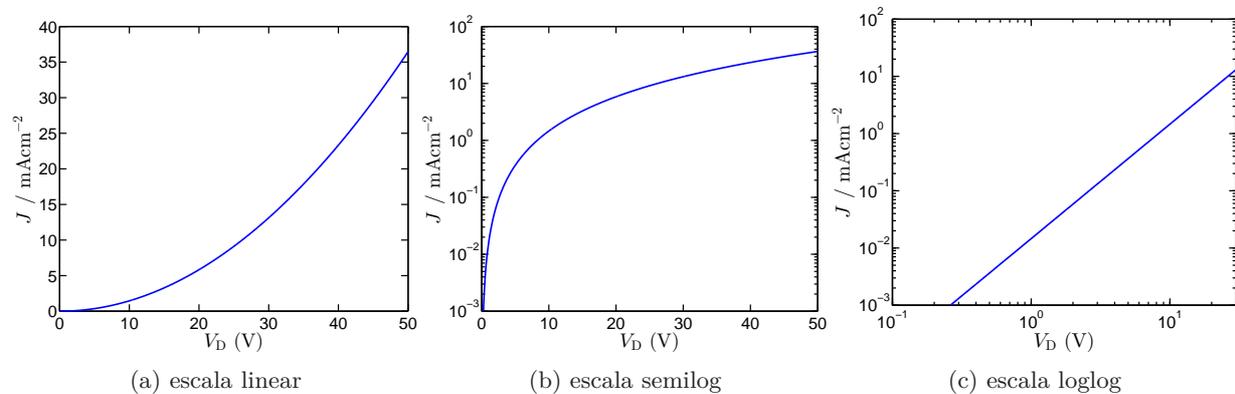


Figura 3.4: Corrente limitada por carga espacial (equação (2.21)). Todos os plots possuem a mesma variação de tensão de $0V$ a $50V$ em passos de $0.1V$ e valores de referência das tabelas 3.2, 3.3 e 3.1.

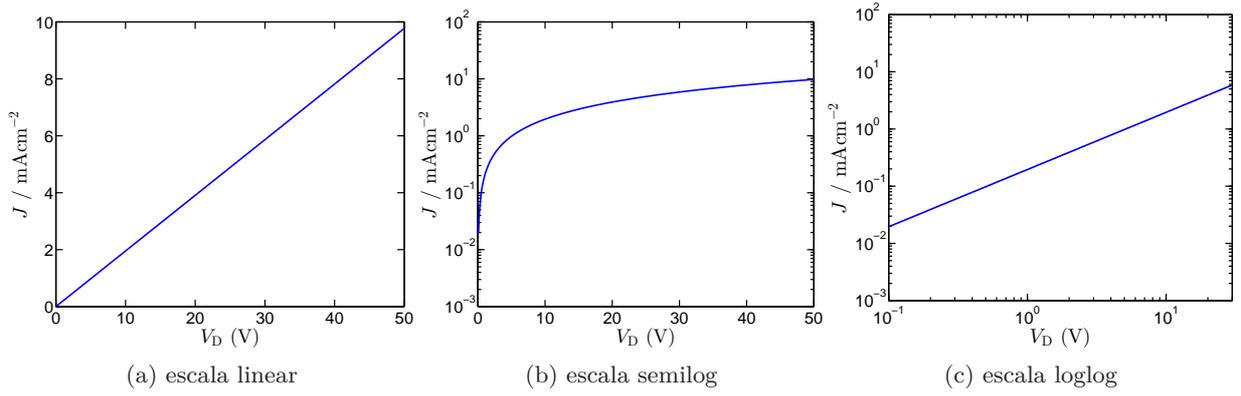


Figura 3.5: Lei Ôhmica (equação (2.26)). Todos os plots possuem a mesma variação de tensão de $0V$ a $50V$ em passos de $0.1V$ e valores de referência dados pelas tabelas 3.2, 3.3 e 3.1

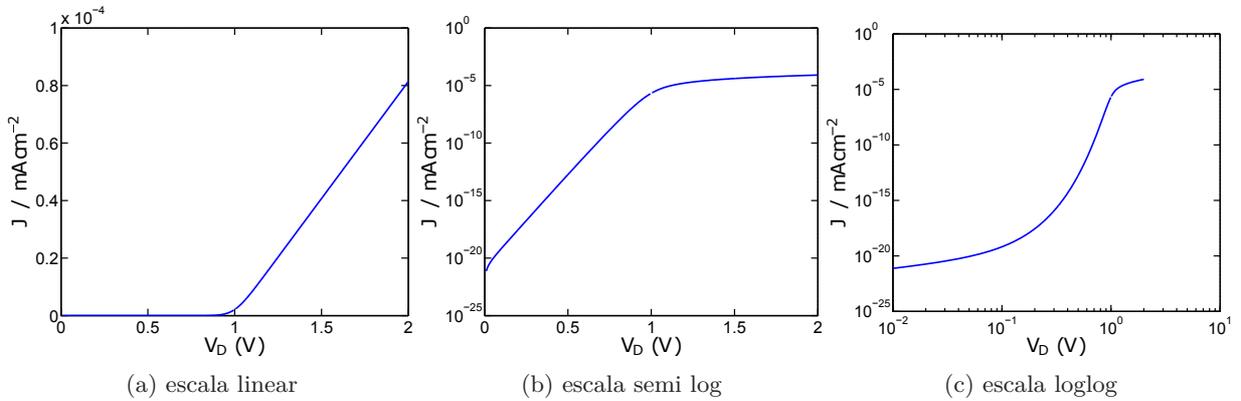


Figura 3.6: Corrente de difusão (equação (2.48)) num intervalo de $0V$ a $2V$, $V_{bi} = 1V$ e $\phi_{inj} = 0.4eV$. Os demais valores podem ser observados nas tabelas 3.2, 3.3 e 3.1.

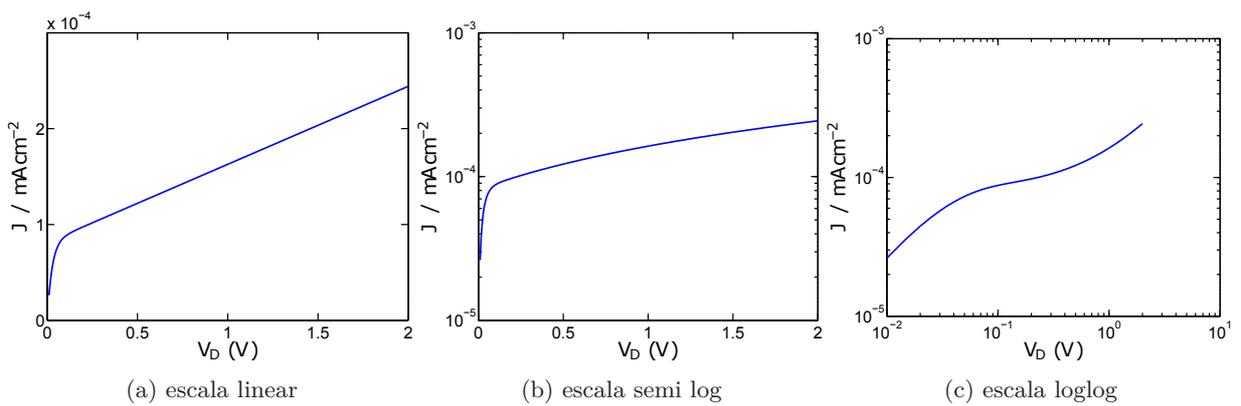


Figura 3.7: Corrente assistida pelo campo elétrico (equação (2.49)) para valores de $\phi_{inj} = 0.4eV$, $V_{bi} = 1V$. Os demais valores podem ser observados nas tabelas 3.2, 3.3 e 3.1

A partir desses valores de referência, os parâmetros mais relevantes das leis analíticas são

variados um a um enquanto os demais são mantidos constantes. Ao fazer essas variações, são gerados gráficos em escalas linear, semi-logaritmo e duplo logaritmo com o intuito de entender como, visualmente, esses gráficos se comportam e como podem oferecer mecanismos para que essas leis analíticas sejam identificadas nos perfis $V \times J$ das simulações.

As figuras 3.4, 3.5, 3.6 e 3.7 mostram as formas das leis analíticas para os valores padrões dados pelas tabelas 3.2, 3.3 e 3.1. Portanto, são o ponto de partida das análises qualitativas.

3.4.1 Corrente limitada por carga espacial (SCLC)

Para entender melhor o comportamento da curva da SCLC em relação a seus parâmetros, são feitos plots em que são variados cada um dos parâmetros de maior relevância para o mesmo intervalo de tensão ($0.1V - 50V$ em passos de $0.1V$), um de cada vez, enquanto os demais são deixados constantes nos respectivos valores de referência.

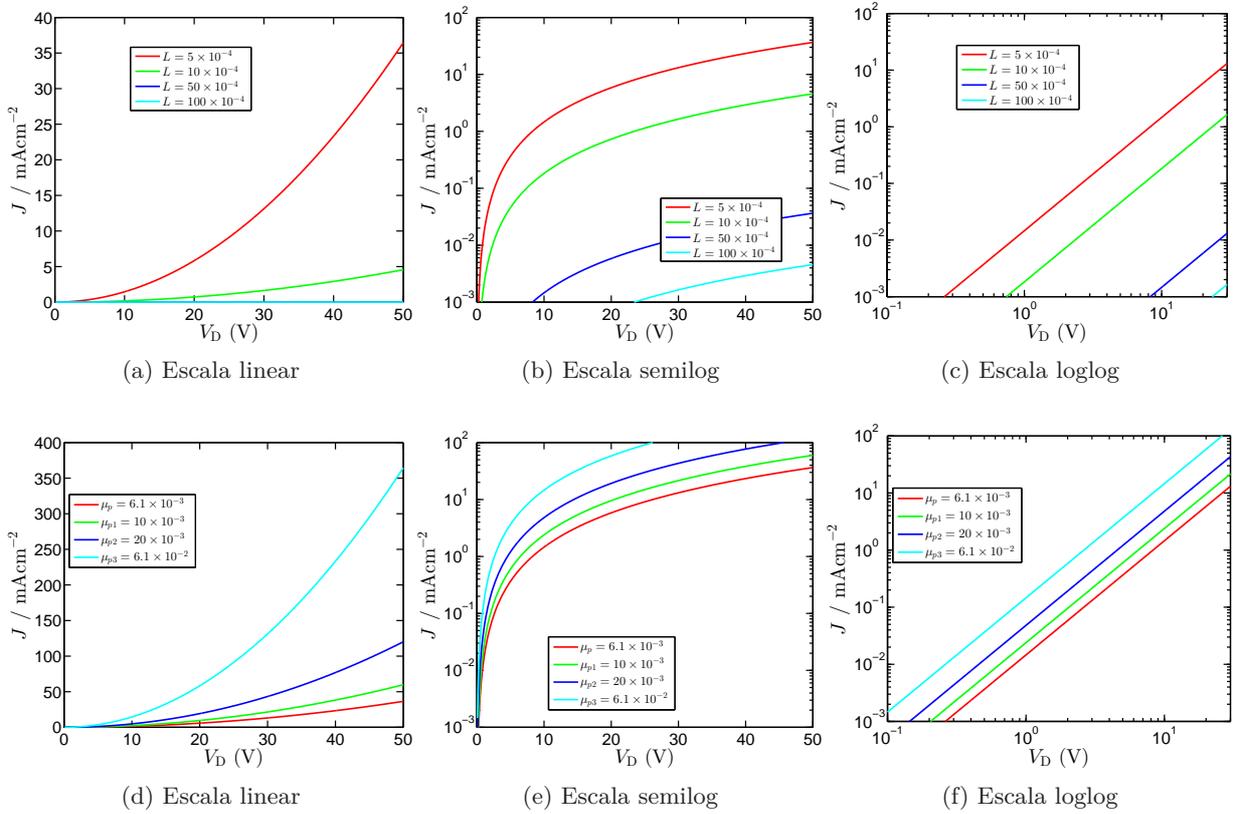


Figura 3.8: Variações no comprimento do canal L (a, b, c) e na mobilidade μ_p (d, e, f). Para as duas situações são plotados gráficos em escala linear, semi-log e duplo-log. Os valores escolhidos para os parâmetros podem ser observados nas respectivas legendas de cada gráfico.

A partir dos plots e das equações, é possível notar que nenhum parâmetro quando variado faz com que haja alterações significativas na forma das curvas em suas respectivas escalas, alterando somente a magnitude da densidade de corrente J . Quando em escala duplo-log, independentemente

se o parâmetro variado é L ou μ_p as curvas obtidas são retas com o coeficiente angular de módulo 2. Matematicamente isso pode ser verificado:

$$\log_{10}(J) = \log_{10}\left(\frac{9\epsilon\mu_p V^2}{8L^3}\right) \quad (3.7)$$

E como a tensão é o único fator esperando que varie em uma amostra, podemos reescrever tudo isso como:

$$\log_{10}(J) = \log_{10}\left(\frac{9\epsilon\mu_p}{8L^3}\right) + \log_{10}(V^2) \quad (3.8)$$

E pelas propriedades de logaritmo, segue que

$$\log_{10}(J) = \log_{10}\left(\frac{9\epsilon\mu_p}{8L^3}\right) + 2\log_{10}(V) \quad (3.9)$$

Assim, ao ser aplicado duplo logaritmo à SCLC, desde que a tensão seja a única variável, obtém-se a equação de uma reta $Y = 2X + K$ em que $Y = \log_{10}(J)$, $2X = \log_{10}(V^2)$ e $K = \log_{10}\left(\frac{9\epsilon\mu_p}{8L^3}\right)$.

Por diversas razões como, por exemplo, a diferença de potencial atribuída ao desnível energético das diferentes funções de trabalho dos contatos metálicos [18], uma diferença de potencial intrínseca na amostra V_{bi} pode surgir. Dessa forma podemos modelar este potencial interno dos contatos como um valor médio DC que é subtraído ou acrescido da tensão aplicada diretamente nos contatos V_D :

$$J = \frac{9\epsilon\mu_p(V_D - V_{bi})^2}{8L^3} \quad (3.10)$$

Ou quando a tensão interna contribui

$$J = \frac{9\epsilon\mu_p(V_D + V_{bi})^2}{8L^3} \quad (3.11)$$

A partir destas equações também foram gerados gráficos.

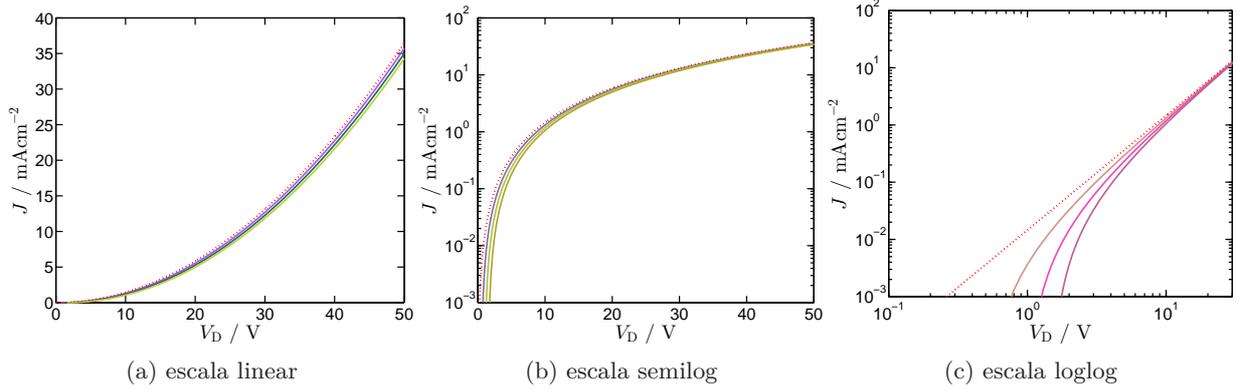


Figura 3.9: Variações para uma tensão interna V_{bi} que opõe-se a tensão V_D aplicada na amostra. Quando V_{bi} aumenta seu módulo, as respectivas densidades de corrente diminuem, ocasionando um deslocamento da curva para direita. Nos dois gráficos as curvas pontilhadas em vermelho são SCLCs com $V_{bi} = 0$ e os valores de referência.

Observa-se que ao subtrair-se uma quantidade V_{bi} do vetor de tensões V , o conjunto de curvas em escala linear não apresenta mudanças muito significativa mas, quando o plot é escala semi-logaritmo e duplo logaritmo, pode-se observar mudanças de inclinação. Todas as curvas, ao passo que a tensão V_D fica cada vez maior, tendem a uma SCLC já que V_D torna-se gradualmente muito maior que V_{bi} .

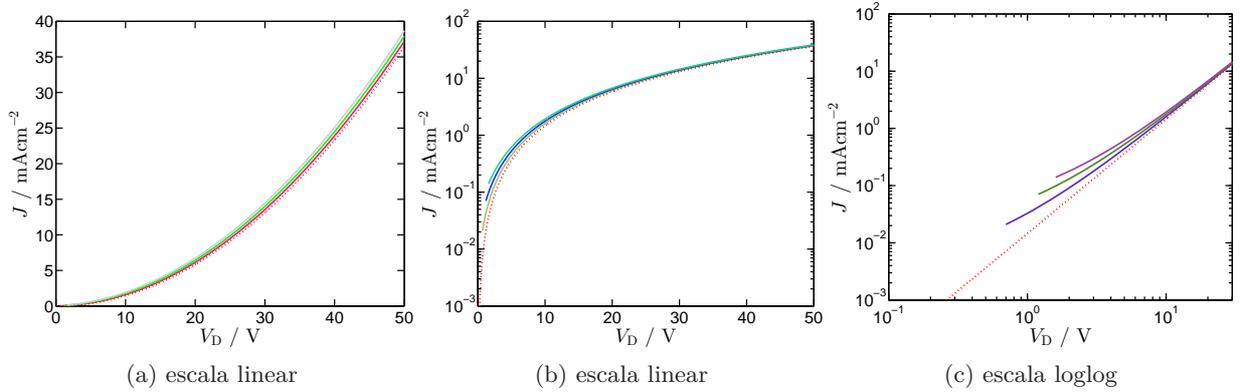


Figura 3.10: Variações para uma tensão interna V_{bi} que soma-se à tensão aplicada V_D . Quando V_{bi} aumenta seu módulo, as respectivas densidades de corrente aumentam, ocasionando um deslocamento da curva para esquerda. Nos dois gráficos as curvas pontilhadas em vermelho são ambas SCLC com $V_{bi} = 0V$.

Quando uma quantidade de tensão é acrescida, nota-se que para o plot linear também não há mudança substancial na forma, porém, em outras escalas, para baixas tensões as quais V_{bi} é comparável a V há mudanças significativas na inclinação dos gráfico. Quando a tensão V torna-se muito grande, essas mudanças de inclinações não se fazem tão significativas e o coeficiente angular volta a tender a $2Acm^{-2}V^{-1}$, ou seja, tornam-se uma SCLC de $V_{bi} = 0V$.

3.4.2 Lei Ôhmica

O comportamento da curva em escala linear (3.5 (a)), como esperado, apresenta uma reta. Em escala semi-logaritmo, a curva apresenta substanciais mudanças de inclinação. Na escala duplo logaritmo, observa-se uma reta de coeficiente angular de módulo unitário. Assim, se fizermos o logaritmo da densidade de corrente e da tensão na lei Ôhmica, obtemos:

$$\log_{10}(J_p) = \log_{10}\left(q\mu_p \frac{V}{d} p\right) \quad (3.12)$$

Se separarmos a tensão, chegamos a

$$\log_{10}(J_p) = \log_{10}\left(\frac{pq\mu_p}{d}\right) + \log_{10}(V) \quad (3.13)$$

caso a única variável seja a tensão, para os demais parâmetros a valores fixos, em escala duplo logaritmo é de se esperar sempre obter-se uma reta de coeficiente angular $1 \text{Acm}^{-2} \text{V}^{-1}$. Isto pode ser observado graficamente a seguir.

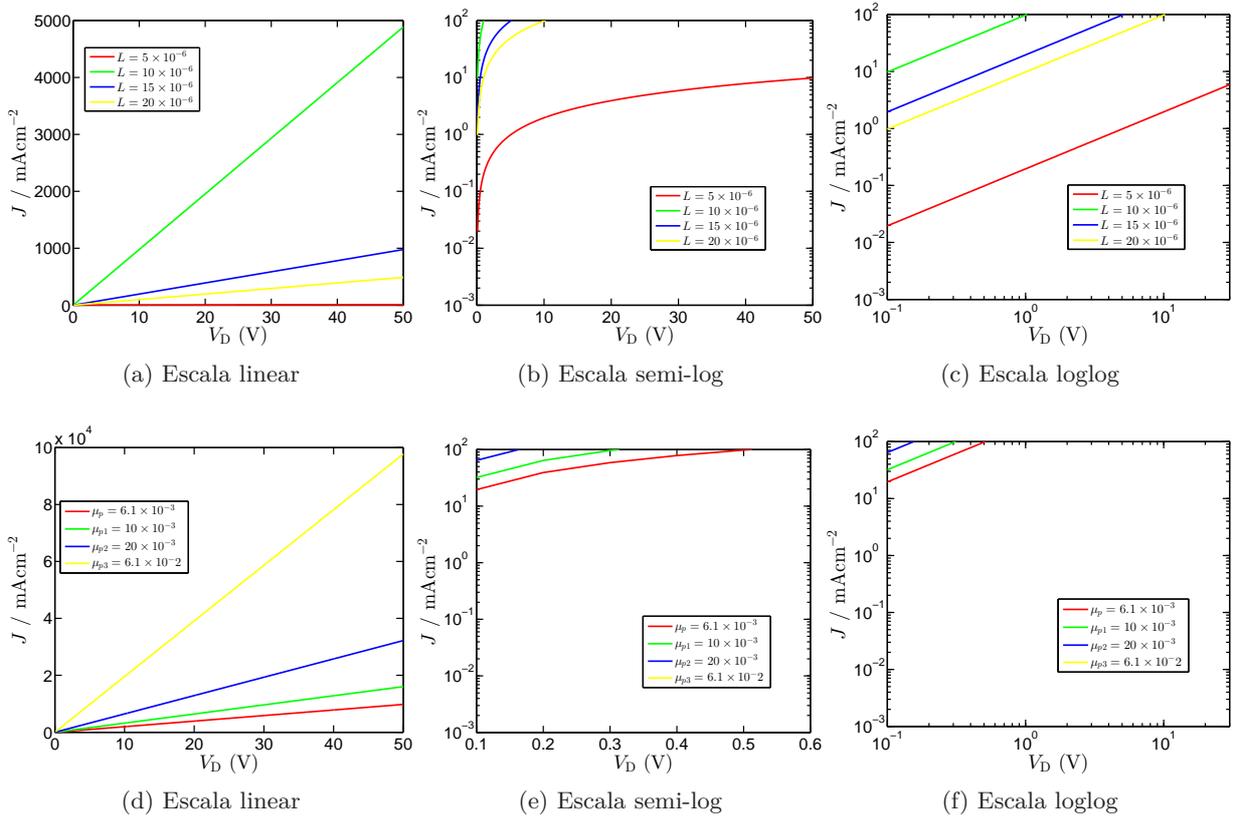


Figura 3.11: Variações no comprimento L e no fator mobilidade μ_p na lei Ôhmica. Os respectivos valores de variação podem ser lidos nas legendas dos correspondentes gráficos

Nota-se que de fato em escala duplo logaritmo, independente do parâmetro variado, há um conjunto de retas paralelas, ou seja, com mesmo coeficiente angular. Considerando também uma

possível diferença de potencial interna análogo a (3.11) e (3.10), respectivamente:

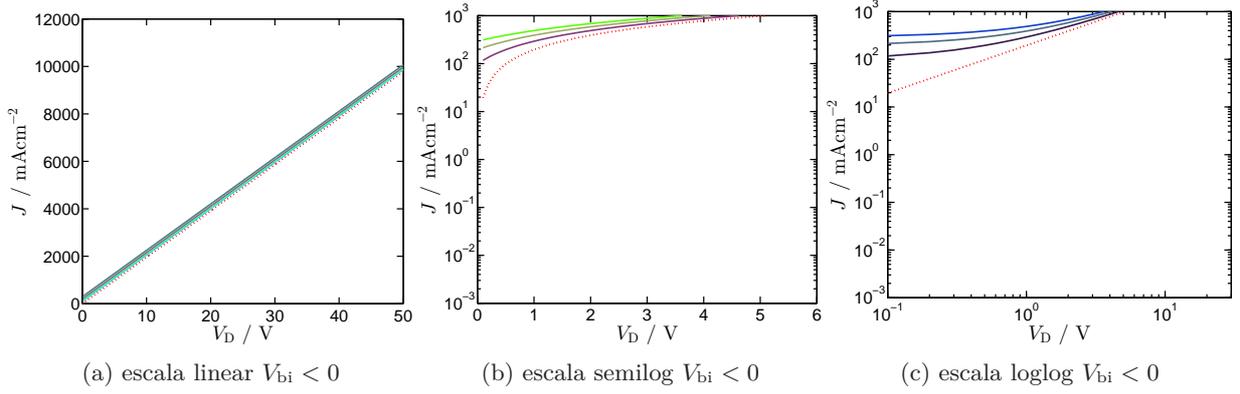


Figura 3.12: Variações para uma tensão interna $V_{bi} < 0$. (a) em escala linear (b) em escala semi-logaritmo (c) escala duplo logaritmo. Quando V_{bi} aumenta seu módulo, as respectivas densidades de corrente aumentam, ocasionando deslocamentos na curva. Nos três gráficos as curvas pontilhadas em vermelho são leis Ôhmicas com $V_{bi} = 0V$.

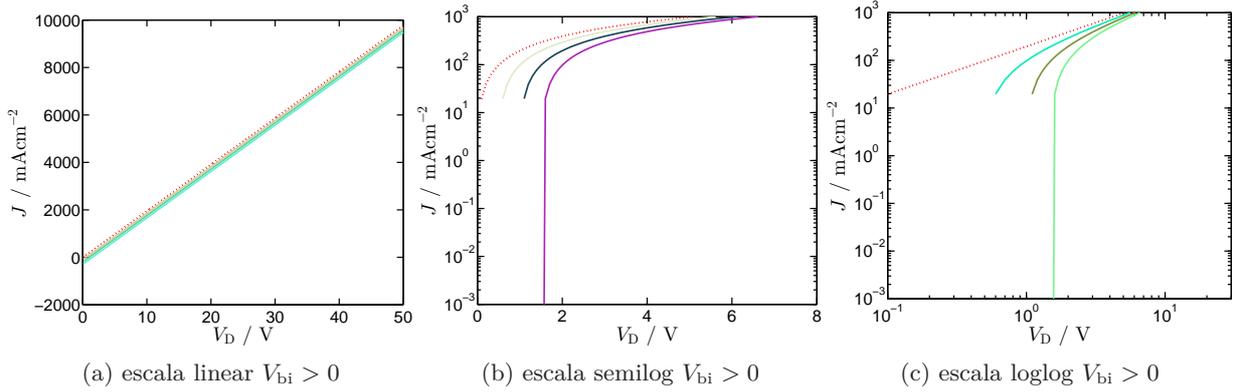


Figura 3.13: Variações para uma tensão interna $V_{bi} > 0$. (a) em escala linear (b) em escala semi-logaritmo (c) escala duplo logaritmo. Quando V_{bi} aumenta seu módulo, as respectivas densidades de corrente diminuem, ocasionando um deslocamento da curva. Nos dois gráficos as curvas pontilhada em vermelho são ambas leis Ohmicas com $V_{bi} = 0V$.

As curvas com o fator $V_{bi} \neq 0$ apresentam o coeficiente angular tendendo a $1Acm^{-2}V^{-1}$ a medida que $V_D \gg V_{bi}$.

3.4.3 Corrente limitada por difusão

Na figura 3.6 os gráficos podem ser divididos em duas regiões visivelmente distintas, $V_D < V_{bi}$ e $V_D > V_{bi}$. Para regiões de baixas tensões em que $V_D < V_{bi}$ os níveis de densidade de corrente J , apresentam, gráficamente, grande distinção de tendência em relação a região imediatamente após V_{bi} .

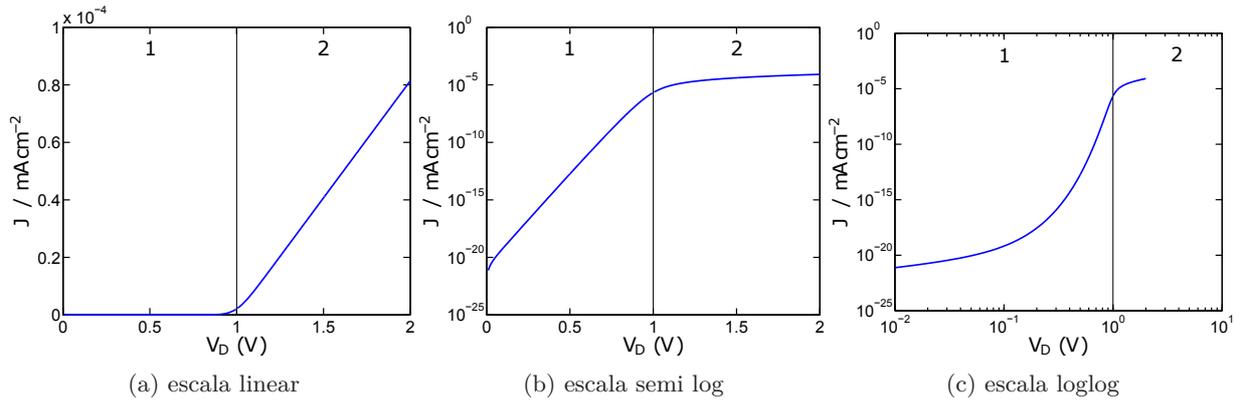


Figura 3.14: Corrente de difusão num intervalo de $0V$ a $2V$, $V_{bi} = 1V$ e $\phi_{inj} = 0.4eV$. Os números 1 e 2 indicam as regiões distintas nos gráfico. A região 1 encontra-se antes de V_{bi} e a região 2 logo após

Em escala semi-log observa-se que até a tensão V_{bi} , o gráfico comporta-se como uma reta, compreendendo, neste caso, cerca de 15 ordens de grandeza.

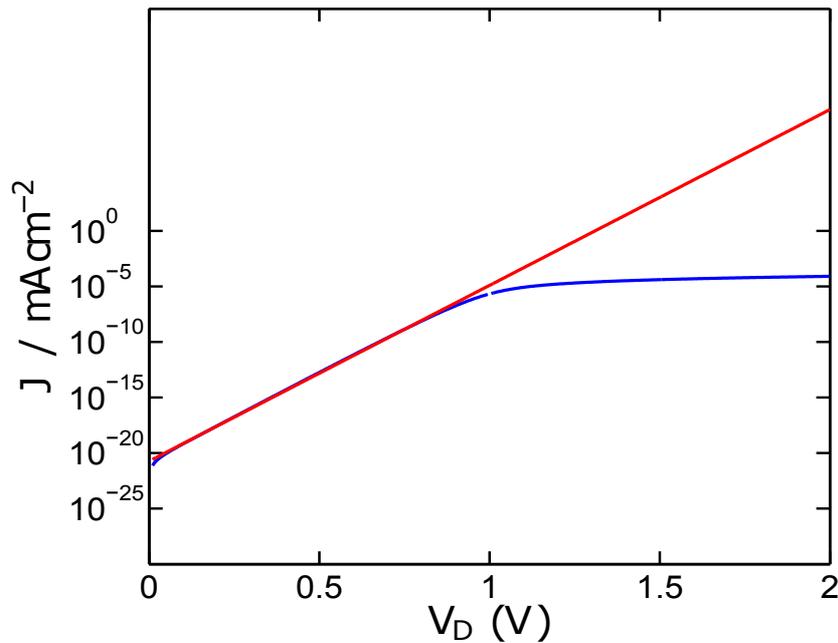


Figura 3.15: Corrente de difusão em escala semi-log. A reta em vermelho é tangente ao gráfico para todos os valores anteriores a V_{bi} .

Para maior compreensão do comportamento do fenômeno de difusão, cada um de seus parâmetros são variados, um por vez, e são gerados novos plots nas três escalas, linear, semi-log e duplo logaritmo.

Em primeiro lugar, é variada a barreira de injeção. Partindo do valor inicial de $\phi_{inj} = 0.4eV$ esta é variada em passos de $0.05V$ até $1.2V$. Para isso, os demais valores são mantidos iguais aos valores escolhidos como os de referência. É importante ressaltar que $V_{bi} = \phi_{ext} - \phi_{inj}$ e, ao variar

somente ϕ_{inj} mantendo $V_{bi} = 0.4V$, a barreira de extração ϕ_{ext} também é variada para que V_{bi} seja mantido constante.

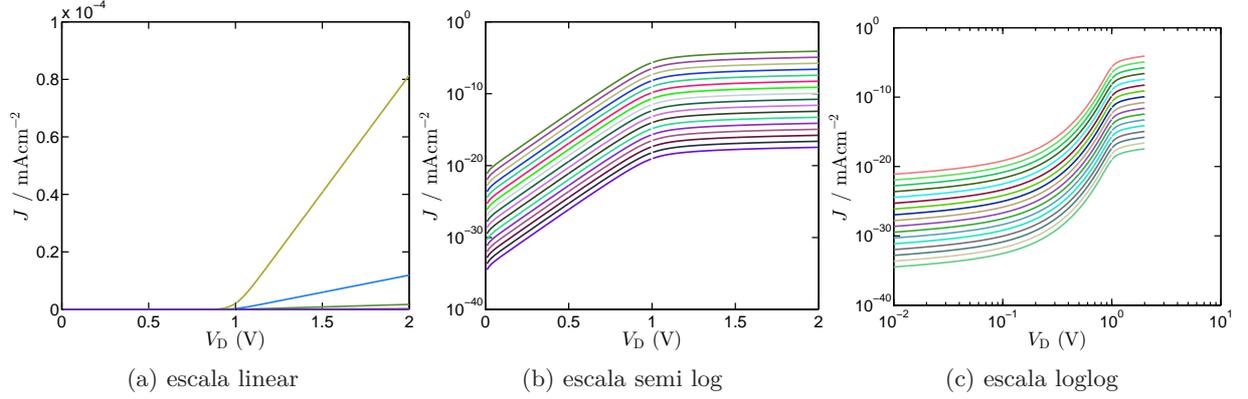


Figura 3.16: Corrente de difusão num intervalo de 0V a 2V com variações graduais da barreira de injeção num intervalo de $\phi_{inj} = 0.4eV$ a $\phi_{inj} = 1.2eV$ em passos de 0.05V (a) escala linear (b)escala semilog (c)loglog.

É possível perceber que, ao passo que ϕ_{inj} alcança valores maiores, o valor da densidade de corrente de difusão diminui significativamente.

Outro parâmetro a ser variado é o próprio potencial interno V_{bi} . Ao variar o potencial interno e mantendo $\phi_{inj} = 0.4$, em outras palavras, o que se varia é a barreira de extração ϕ_{ext} . Dessa forma, o V_{bi} foi variado a partir de seu valor escolhido como de referência de 0.4V em passos de 0.05V até o valor de 1.2V.

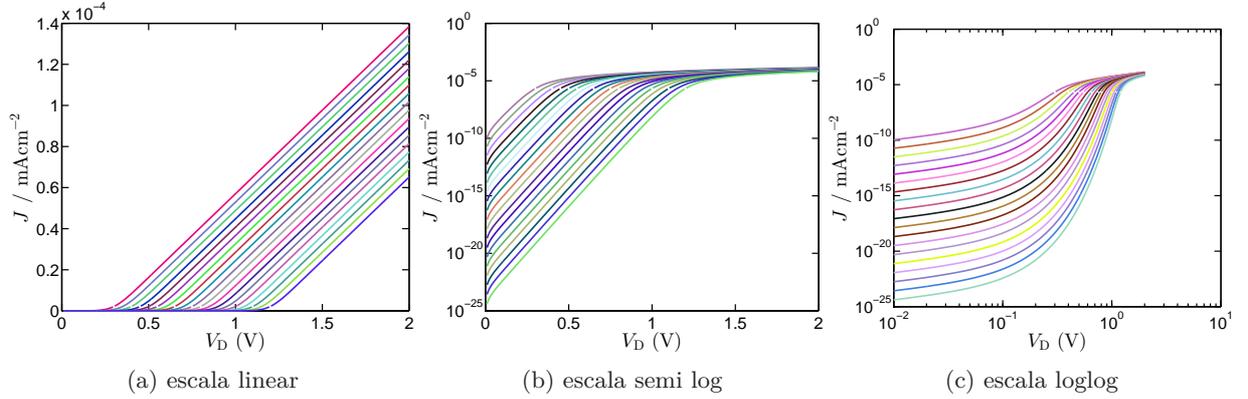


Figura 3.17: Corrente de difusão num intervalo de 0s2V com variações graduais da tensão interna built in V_{bi} num intervalo de $V_{bi} = 0.3V$ a $V_{bi} = 1.2$ em passos de 0.05V (a) escala linear (b)escala semilog (c)loglog.

Quando variado, o V_{bi} faz com que a densidade de corrente seja menor para tensões maiores que $V_D = V_{bi}$. Isso pode ser observado na figura 3.17

Em escala duplo logaritmo percebe-se com mais clareza que, a medida que a tensão V_{bi} au-

menta, há um deslocamento para regiões de menor magnitude, empurrando os gráficos na direção do eixo das abscissas. Outro fator importante em escala duplo logaritmo é que para tensões muito elevadas V_D aplicadas na amostra, V_{bi} torna-se muito pequeno podendo ser ignorado. Graficamente, percebe-se isso pela aproximação das curvas em uma tendência uniforme.

Outra importante variação a se considerar é em relação ao conjunto de parâmetros $\frac{q\mu N_v}{L}$. Matematicamente, como estes fatores atuam de forma linear sendo multiplicados à expressão, quando variados, alteram a magnitude dos valores J , causando, graficamente, um deslocamento na direção vertical.

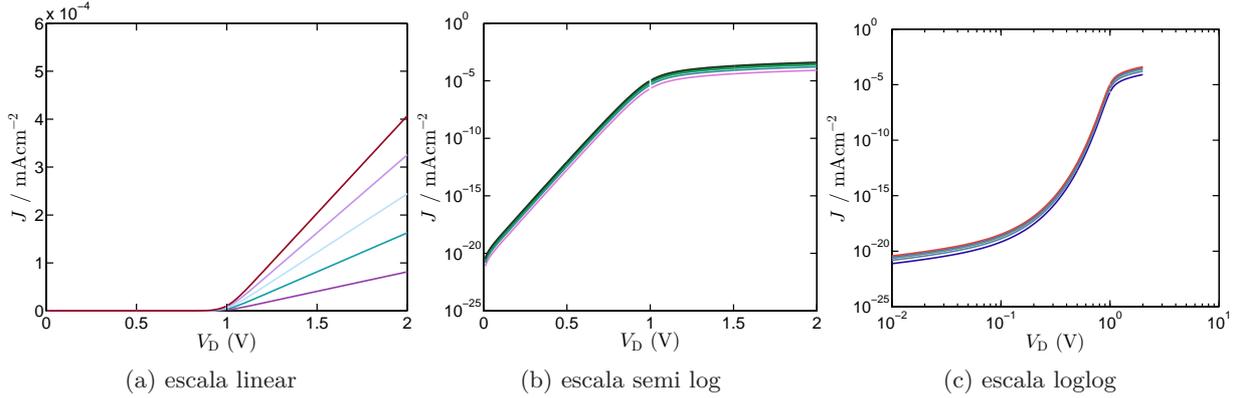


Figura 3.18: o conjunto $P = \frac{q\mu N_v}{L}$ na equação (2.48) sendo variado de P até $5P$ em passos de 1.

Todas as variações até agora estudadas para o fenômeno de difusão levaram em consideração que o potencial interno do dispositivo V_{bi} se contrapunha ao potencial externo V_D . Para os casos em que o potencial interno $V_{bi} < 0$ o estudo e classificação deve ser feito para a equação (2.49).

3.4.4 Corrente assistida por campo elétrico

Diferentemente do que pode ser observado na figura 3.6, na figura 3.7 mostra regiões bem definidas antes e após V_{bi} . Para compreender o comportamento da curva os mesmo parâmetros variados na equação (2.46) são também variados para a equação (2.49)

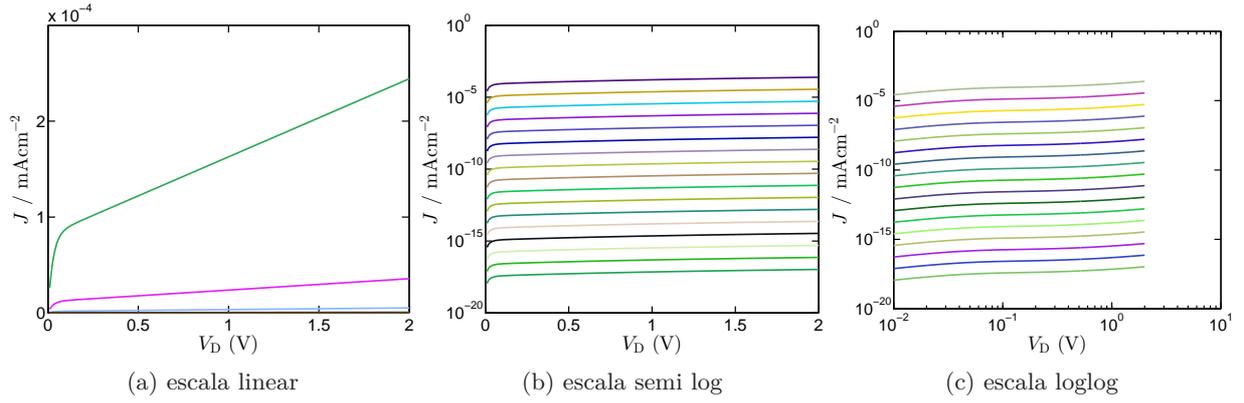


Figura 3.19: Corrente de difusão num intervalo de 0V a 2V com variações graduais da barreira de injeção num intervalo de $\phi_{inj} = 0.4\text{eV}$ a $\phi_{inj} = 1.2\text{eV}$ em passos de 0.05V. A medida que ϕ_{inj} aumenta, J tende a diminuir.

Observa-se na figura 3.19 tendência semelhante à figura 3.16. A medida que são escolhidos valores maiores de ϕ_{inj} , as curvas tendem a deslocar-se verticalmente para baixo.

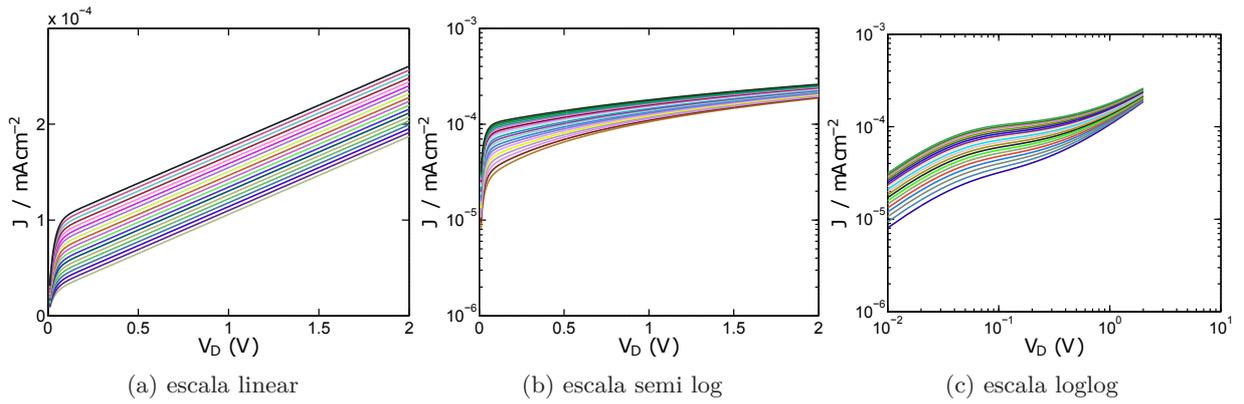


Figura 3.20: Corrente de difusão num intervalo de 0s2V com variações graduais da tensão interna built in V_{bi} num intervalo de $V_{bi} = 0.3\text{V}$ a $V_{bi} = 1.2$ em passos de 0.05V.

Na figura 3.20 observa-se tendência contrária ao comportamento observado na figura 3.17. A medida que V_{bi} alcança valores maiores, J tende a aumentar seu módulo. Graficamente, quanto maior V_{bi} , mais a curva desloca-se no sentido de crescimento do eixo J .

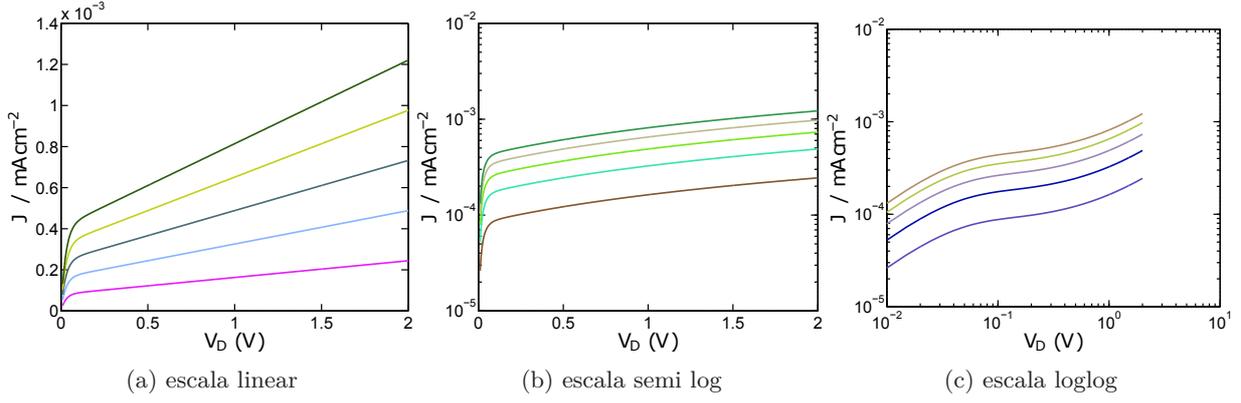


Figura 3.21: o conjunto $P = \frac{q\mu N_v}{L}$ na equação (2.49) sendo variado de P até $5P$ em passos de 1.

Para a variação dos parâmetros multiplicativos $\frac{q\mu N_v}{L}$ na equação (2.49), quanto maior o valor dos parâmetros, maior é a densidade J . Graficamente a tendência é a mesma observada na figura 3.17. Isso pode ser observado na figura 3.21.

3.5 Análise quantitativa: estudo da extração de parâmetros

Por meio das equações descritas ao logo do escopo desse trabalho, pretende-se sugerir ferramentas para a extração numérica de aproximações para os parâmetros dopagem N_A , barreira de injeção ϕ_{inj} e potencial interno V_{bi} (obtendo-se o potencial V_{bi} e a barreira de injeção ϕ_{inj} , a barreira de extração pode ser obtida facilmente já que $V_{bi} = \phi_{ext} - \phi_{inj}$). Assim, o comportamento $V \times J$ do perfil em estudo em duplo logaritmo, deverá ser analisado em partes.

3.5.1 Identificação de tendências e separação em regiões

São esperados quatro possíveis tipos de regiões fenomenológicas para os comportamentos $V \times J$ em relação a magnitude de tensões a que são analisados. Para que estas regiões sejam determinadas, os fenômenos condutivos devem, primeiramente, ser separados em três categorias: limitação de injeção, limitação de corpo e limitação de contato.

As limitações de injeção são referentes a fenômenos de baixas tensões. Fenômenos que possuem predominância para tensões muito pequenas como, por exemplo, o fenômeno de difusão, podem ser alocados nesta categoria. Isso se deve ao fato desses fenômenos dependerem em grande parte da concentração e disposição dos portadores em relação ao potencial interno gerado pelos contatos.

Limitações de corpo e contato acontecem, predominantemente, para tensões maiores. Os fenômenos limitados pelo corpo, dependem da disponibilidade das cargas no dispositivo e das limitações físicas elétricas no corpo do dispositivo como, por exemplo, o que acontece na SCLC e na condução Ôhmica. A limitação pelo contato ocorre quando a injeção de cargas pelos contatos chegam à saturação, apresentando uma corrente máxima. Esse tipo de limitação é descrita matematicamente, neste trabalho, na equação (3.6).

Espera-se então as seguintes possíveis combinações entre as limitações

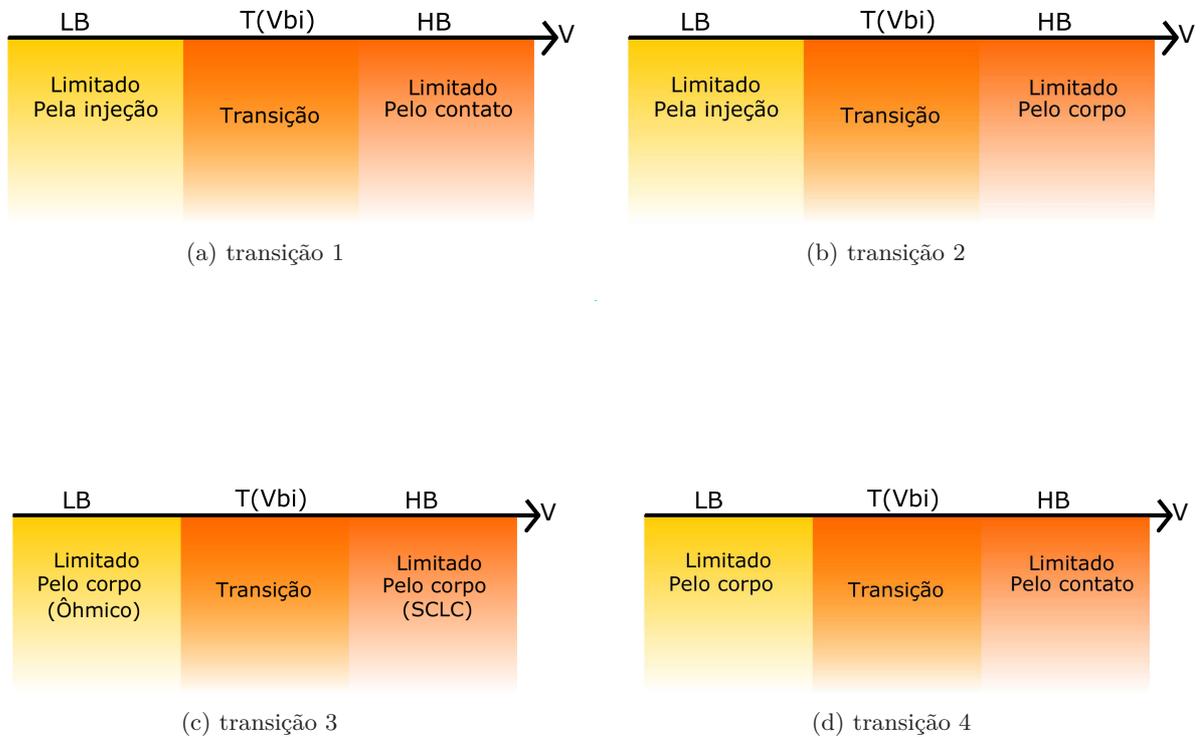


Figura 3.22: tipos observados de transições entre fenômenos de condução elétrica em dispositivos semicondutores. A região com a palavra TRANSIÇÃO descreve a região de mudança de uma limitação para outra, sem haver, necessariamente predominância de um ou outro fenômeno. Os fenômenos em retângulos a esquerda da Transição acontecem sempre para tensões menores do que aqueles à direita

Assim, para o primeiro passo da análise, devem ser separadas as regiões de relativas baixas e altas tensões. Como pode ser observado na figura 3.22, há sempre uma região intermediária entre as limitações. Nessa região espera-se um comportamento de acentuadas variações que posteriormente estabiliza-se quando alcança a próxima região fenomenológica. Em escala duplo logaritmo a região de transição, deve ser observada como, por exemplo, uma curvatura suave tipo Joelho. Portanto, ainda em escala duplo logarítimo, para valores de tensão anteriores a região de transição, atribui-se o intervalo de baixas tensões relativas (LB). Para valores de tensão posteriores à região de transição, destacam-se as altas tensões relativas (HB). Isso pode ser observado na figura 3.23.

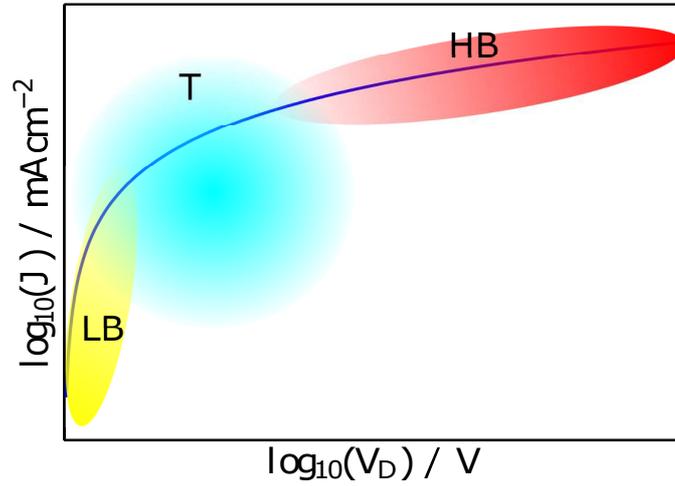


Figura 3.23: Exemplo de separação em regiões de altas tensões (HB) e baixas tensões (LB). A região de transição (T) é delimitada pelo círculo azul.

3.5.2 Avaliação dos intervalos de baixas (LB) e altas tensões (HB): interpolações lineares

Para as regiões selecionadas de baixas (LB) e altas tensões (HB), ainda em escala duplo logaritmo do perfil $V \times J$ analisado, são feitas interpolações lineares para cada uma dessas regiões. Isto pode ser observado na figura 3.24. As interpolações fornecem retas de equações gerais tais como:

$$Y_{LB} = \alpha_{LB}X + K_{LB} \quad (3.14)$$

e

$$Y_{HB} = \alpha_{HB}X + K_{HB} \quad (3.15)$$

respectivamente para baixas e altas tensões, em que $X = \log_{10}(V_D)$ (V_D é a tensão externa aplicada ao dispositivo), $Y = \log_{10}(J)$ e K é uma constante.

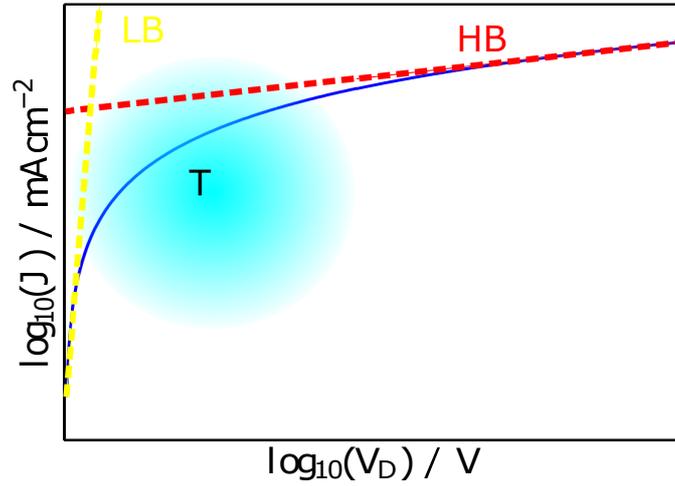


Figura 3.24: interpolações lineares para regiões de altas tensões HB e baixas tensões LB. A região de transição é marcada por um círculo azul com a letra T.

Algumas das leis estudadas até então, quando em escala duplo logaritmo, apresentam também equações de retas da forma $Y = \alpha X + K$. Na lei Ôhmica, como mostrado na equação (3.13), quando em escala duplo logaritmo, apresenta sempre o coeficiente angular $\alpha_{\Omega} = 1 \text{Acm}^{-2} \text{V}^{-1}$ mesmo que seus parâmetros variem. Semelhante fenômeno ocorre para SCLC como mostrado e discutido para (3.9), neste caso o coeficiente angular esperado para a SCLC é de $\alpha_{SCLC} = 2 \text{Acm}^{-2} \text{V}^{-1}$. Se análise semelhante for feita para as expressões da corrente máxima de saturação, respectivamente, de equações (3.6) e (2.50):

$$\log_{10}(J_{p,max}) = \log_{10}(qv_p p_0) \quad (3.16)$$

e, se substituirmos $\log_{10}(J_{p,max}) = Y_{Jpmax}$ e $\log_{10}(qv_p p_0) = K_{Jpmax}$:

$$Y_{Jpmax} = K_{Jpmax} \quad (3.17)$$

ou seja, uma reta de valor constante com o coeficiente angular nulo $\alpha_{Jmax} = 0 \text{Acm}^{-2} \text{V}^{-1}$. Analogamente, o mesmo é esperado para (2.50).

Assim, esses fenômenos podem ser identificados, em escala duplo logaritmo, pelos seus respectivos valores de inclinação como mostra a tabela 3.4

Tabela 3.4: Valores de coeficientes angulares para leis analíticas quando em escala duplo logaritmo

Lei condutiva	Coefficiente angular α (Escala loglog)
Ôhmico	1
SCLC	2
$J_{p,max}(HB)$	0
$J_{vbi}(LB)$	0

Embora a tabela 3.4 apresente valores exatos para os respectivos α 's de cada lei analítica, normalmente isso não é esperado. As regiões relativas as transições 3.22 podem estender-se causando não regularidades no comportamento esperado, ou seja, os coeficientes angulares obtidos pelas interpolações lineares das regiões de baixas (LB) e altas (HB) tensões não serão iguais, porém, aproximados aos da tabela 3.4. Portanto são sugeridas aproximações razoáveis de faixas de valores para aproximação na tabela 3.5

Tabela 3.5: Valores sugeridos para comparação dos coeficientes angulares obtidos nas interpolações lineares

Lei condutiva	Coefficiente angular α (Escala loglog)
Ôhmico	$0.8 \leq \alpha_{\Omega} \leq 1.4$
SCLC	$1.7 \leq \alpha_{SCLC} < 2$
$J_{p,max}(HB)$	$0 \leq \alpha_{Jmax} < 0.8$
$J_{vbi}(LB)$	$0 \leq \alpha_{vbi} < 0.8$

Devido a elevada complexidade, o fenômeno de difusão não permite a identificação clara pela análise em escala duplo logarítimo. Como sua fórmula matemática apresenta diversos fatores exponenciais (equação (2.48)), quando em escala duplo logarítimo não apresenta a forma de uma reta como as demais leis. Assim, a identificação do fenômeno de difusão fica restrita a análise qualitativa como mostrado na figura 3.15.

3.5.3 Estimativas numéricas para dopagem N_A

A partir da tabela 3.4, os coeficientes angulares obtidos nas retas de interpolação linear para baixas (α_{LB}) e altas tensões (α_{HB}) podem ser avaliados. Caso esses coeficientes apresentem valores semelhantes aos descritos na tabela, as equações de interpolações podem ser igualadas matematicamente às respectivas leis analíticas de coeficiente semelhantes. Neste processo, parâmetros podem ser extraídos. Caso $\alpha_{LB} = 1$ ou $\alpha_{HB} = 1$ a igualdade é feita com a lei ôhmica

$$Y = \alpha_I X + K_I \equiv 1 \log_{10}(V_D) + \log_{10} K_I = \log_{10}(J_I) \quad (3.18)$$

E assim podemos ainda reescrever a equação (3.18) como:

$$\log_{10}(V_D)^1 + \log_{10}(K_I) = \log_{10}(K_I V_D^1) = \log_{10}(J_I) \quad (3.19)$$

Retirando o logarítimo da equação (3.19):

$$J_I = K_I V_D^1 \quad (3.20)$$

E igualando as equações (3.20) e (2.26)

$$K_I V_D = q\mu_p \frac{V_D}{L} p \quad (3.21)$$

E isolando a concentração de portadores p

$$p = N_A = \frac{K_I L}{q\mu_p} \quad (3.22)$$

Em que o subíndice I refere-se a uma reta genérica obtida por interpolação.

3.5.4 Estimativas numéricas para o número das cargas em equilíbrio p_0

Caso a equivalência entre a interpolação linear e a lei analítica aconteça para a lei de corrente máxima de saturação de equação (3.6) e considerando que, no perfil $V \times J$ para altas tensões a corrente máxima observada de saturação seja J_{MAX} , o número das cargas em equilíbrio p_0 pode ser aproximado por:

$$\log_{10}(J_{p,max}) = \log_{10}(qv_p p_0) = \log_{10}(J_{MAX}) \quad (3.23)$$

retirando o logaritmo dos dois lados e isolando p_0

$$p_0 = \frac{J_{max}}{qv_p} \quad (3.24)$$

p_0 pode ser obtido também por outra aproximação. Em baixas tensões, para intervalos em que J possa ser considerado constante, ou seja, $\alpha_I = 0$, desde que se tenha uma aproximação para o valor da tensão interna do dispositivo V_{bi} , o valor mínimo de corrente J_{MIN} deve ser igualado a equação (2.50) e então, isolando p_0 :

$$p_0 = \frac{J_{min} L}{\mu q (V_{D,min} + V_{bi})} \quad (3.25)$$

Na equação (3.25) o termo $V_{D,min}$ refere-se ao menor valor de tensão possível aplicado.

3.5.5 Estimativas numéricas para barreira de injeção ϕ_{inj}

A barreira de injeção pode ser estimada por meio de p_0 . As equações (2.50) e (3.6) permitem o cálculo de p_0 por aproximações, respectivamente, do valor de correntes mínimas e máximas. Assim ϕ_{inj} pode ser obtida analiticamente por meio da equação (3.5):

$$\phi_{inj} = -\ln\left(\frac{p_0}{N_V}\right) \frac{kT}{q} \quad (3.26)$$

3.5.6 Aproximações numéricas para o potencial interno built-in V_{bi}

A tensão interna V_{bi} pode manifestar-se de duas maneiras:

1. $V_{bi} = -|V_{bi}|$
2. $V_{bi} = +|V_{bi}|$

No caso 1, espera-se que para tensões $V_D < V_{bi}$ o campo elétrico interno seja predominante, ocasionando um comportamento elétrico acentuadamente diferente de quando a tensão aplicada excede a tensão interna $V_D > V_{bi}$. Isso pode ser observado, por exemplo, de maneira mais clara na figura 3.14. Dessa forma, espera-se que o momento de transição em que a tensão aplicada torna-se maior do que a tensão interna, produza um efeito no perfil $V \times J$ em duplo logaritmo de uma região não definida por nenhum fenômeno específico, apresentando uma grande variação de inclinações cujo formato é, na maioria das vezes, de uma curva suave do tipo "joelho".

Já para o caso 2, a medida que a tensão aplicada V_D supera e cresce significativamente comparada a tensão interna V_{bi} , deve haver também uma região de transição, porém, muito menos acentuada. No caso, por exemplo, da equação (2.50), observa-se que, matematicamente, a função tende a uma limitação Ôhmica a medida que V_D cresce, deixando a relação sublinear a baixas tensões.

Para os dois casos, 1 e 2, a tensão interna V_{bi} pode ser estimada pelo ponto de interseção entre as interpolações lineares. O ponto de interseção deve indicar, em circunstâncias ideais, o marco da mudança de fenomenologia. Isso pode ser observado na figura 3.25

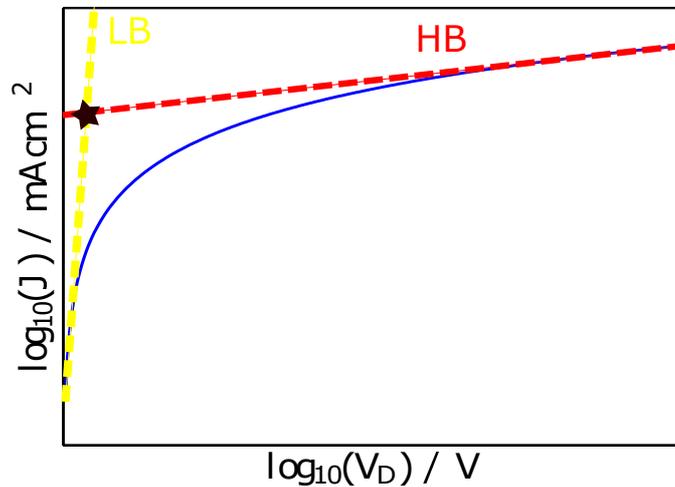


Figura 3.25: Interpolações lineares para regiões de altas tensões HB e baixas tensões LB. O ponto de interseção entre as interpolações é marcado com uma estrela. O valor de tensão para o ponto de interseção dá uma aproximação ao potencial interno built-in (V_{bi}).

Há ainda outro meio de se obter uma aproximação à tensão built-in. Na região de transição, é esperado uma grande variação de inclinações já que acontece uma mudança de mecanismo de

condutividade. Assim, o gráfico da segunda derivada $\frac{\partial^2 J}{\partial V^2} \times V$ pode apresentar um valor de máximo traduzido em um pico na região de tensões correspondentes a zona de transição. Dessa forma, quando possível, o gráfico da segunda derivada deve ser plotado e a tensão do valor de pico (quando houver) registrada como uma possível aproximação para V_{bi} .

3.5.7 Aproximações numéricas para determinação da barreira de extração ϕ_{ext}

Ao serem obtidas aproximações para barreira de injeção e para o potencial interno V_{bi} , a barreira de extração pode ser determinada indiretamente por meio da seguinte expressão:

$$\phi_{\text{ext}} = V_{bi} + \phi_{\text{inj}} \quad (3.27)$$

Capítulo 4

Resultados

4.1 Introdução

A partir dos estudos realizados para a caracterização da metodologia, esta será aplicada às simulações realizadas com o software Sentaurus TCAD. Para cada uma dessas simulações o procedimento é explicado passo-a-passo, sendo destacadas possíveis etapas extras. Primeiramente será feita uma análise puramente qualitativa, equiparando visualmente as simulações às formas das leis analíticas estudadas. Posteriormente as regiões de baixas tensões (LB), transição (T) e altas tensões (HB) serão divididas e analisadas com o procedimento de extração de parâmetros. Por fim, os valores extraídos serão tabelados para comparação com os valores reais das simulações.

4.2 Classificação qualitativa

4.2.1 Análise qualitativa e separação das regiões: Simulação 1

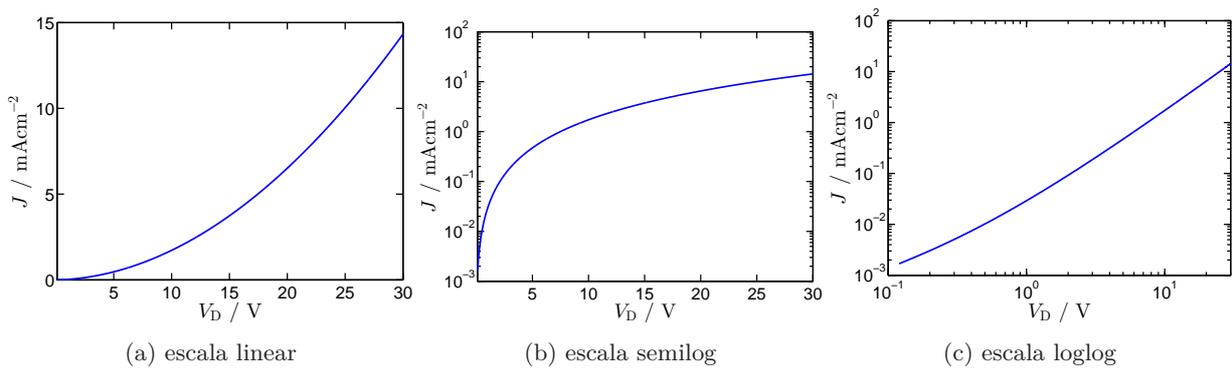


Figura 4.1: perfil $V \times J$ para Simulação 1 em diferentes escalas

O gráfico em escala linear na figura 4.1 (a) aponta comportamento semelhante ao de uma parábola, assim, se compararmos os três plots com a figura 3.4, nota-se boa similaridade, exceto,

pelo perfil em duplo logaritmo. No perfil em duplo logaritmo, pode ser notado uma pequena curvatura. A curvatura pode indicar uma possível região de transição.

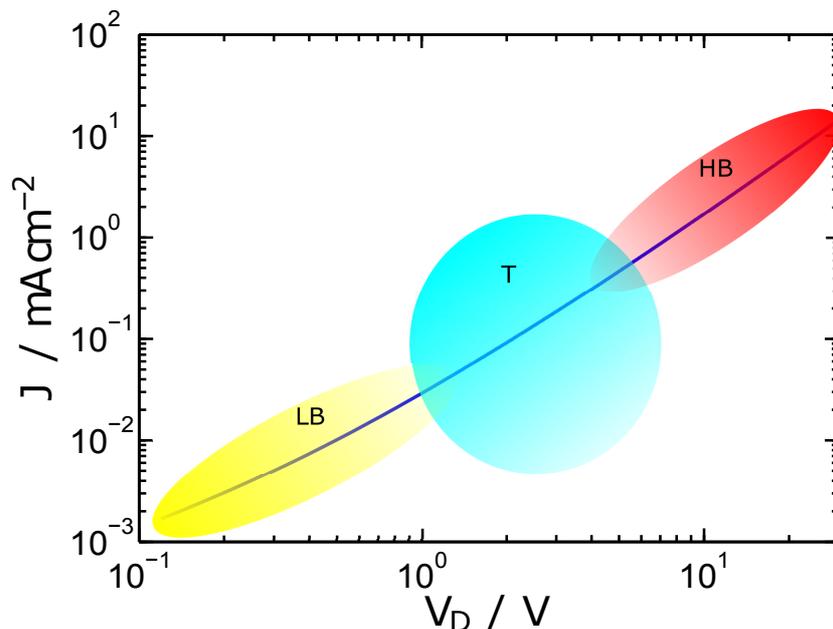


Figura 4.2: Perfil $V \times J$ da simulação 1 com as regiões de tensões relativas destacadas. LB refere-se a baixas tensões tendo um contorno em amarelo, T refere-se a região de transição e HB em vermelho refere-se a região de altas tensões

4.2.2 Análise qualitativa e separação das regiões: Simulação 2

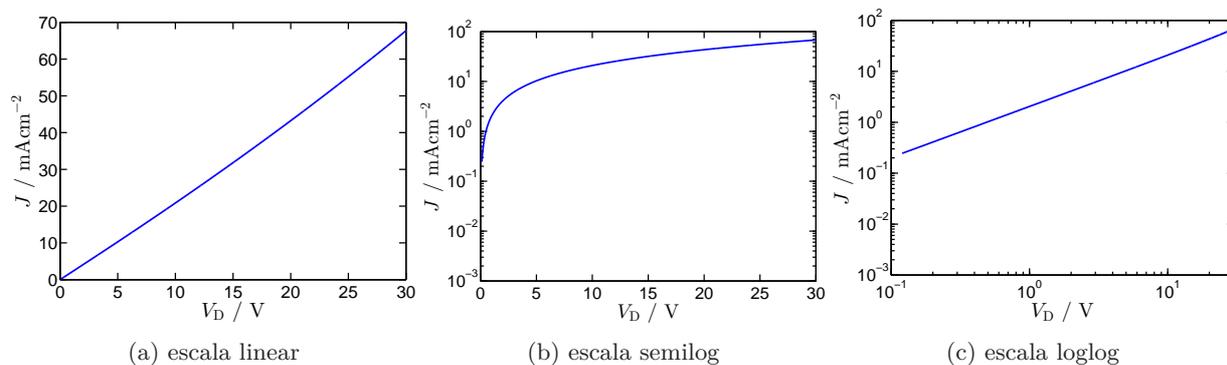


Figura 4.3: perfil $V \times J$ para Simulação 2 em diferentes escalas

Como pode ser observado, os três plots do perfil $V \times J$ na figura 4.3 apresentam comportamento muito semelhantes aos apresentados na figura 3.5. Assim, sob hipótese de que trata-se de uma condução Ôhmica apenas, não são esperadas regiões distintas para baixas e altas tensões, portanto, não há região de transição.

4.2.3 Análise qualitativa e separação das regiões: Simulação 3

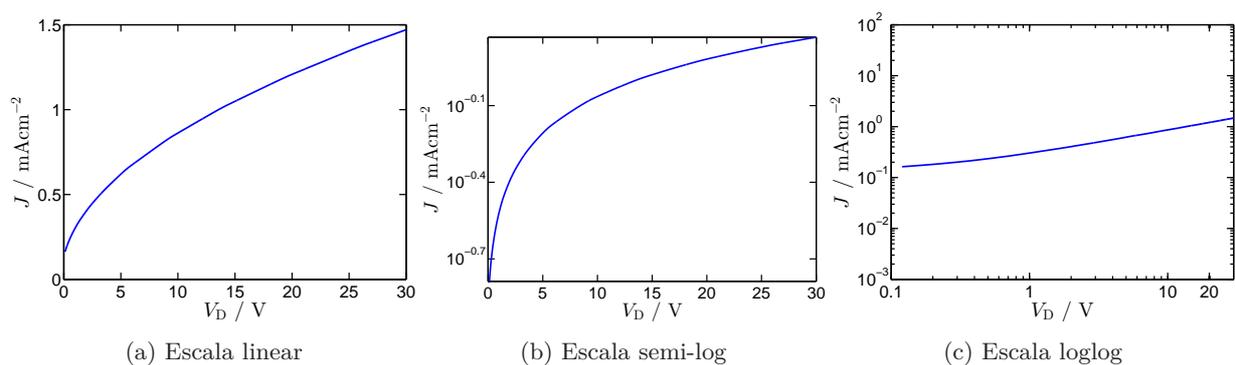


Figura 4.4: perfil $V \times J$ para Simulação 3 em diferentes escalas

Para essa simulação, a região de transição não é muito bem definida. A região de baixas tensões LB é muito pequena comparada a região de altas tensões HB.

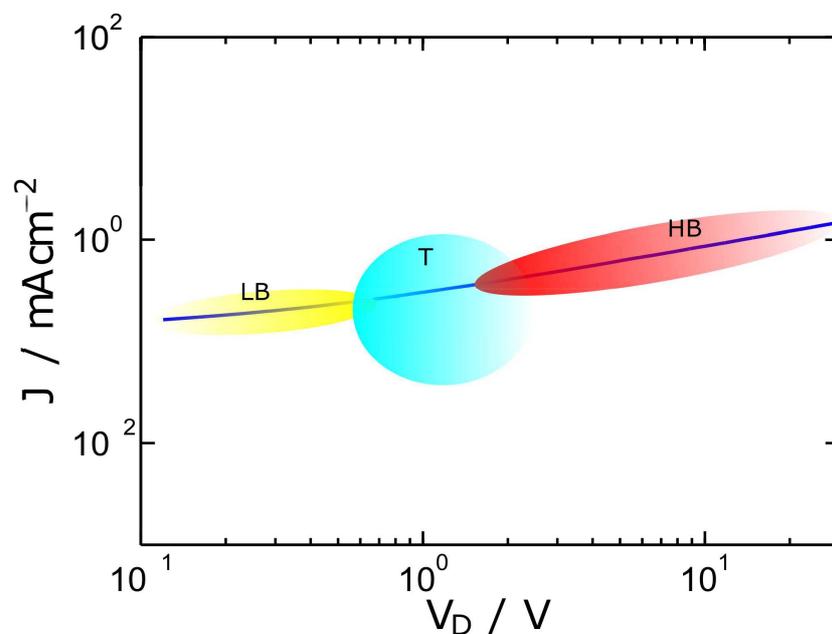


Figura 4.5: Perfil $V \times J$ da Simulação 3 com as regiões de tensões relativas destacadas, respectivamente, LB refere-se a baixas tensões tendo contorno em amarelo, T refere-se a região de transição delimitada pelo círculo azul e HB em vermelho refere-se a região de altas tensões

4.2.4 Análise qualitativa e separação das regiões: Simulação 4

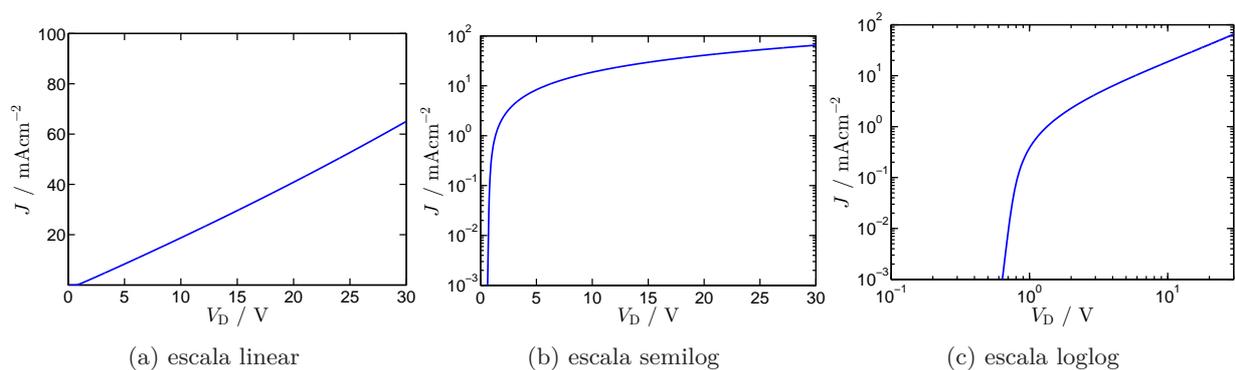


Figura 4.6: perfil $V \times J$ em diferentes escalas

O plot em escala duplo logarítmico mostra uma região de transição bastante acentuada que permite a divisão dos intervalos de tensão de interesse.

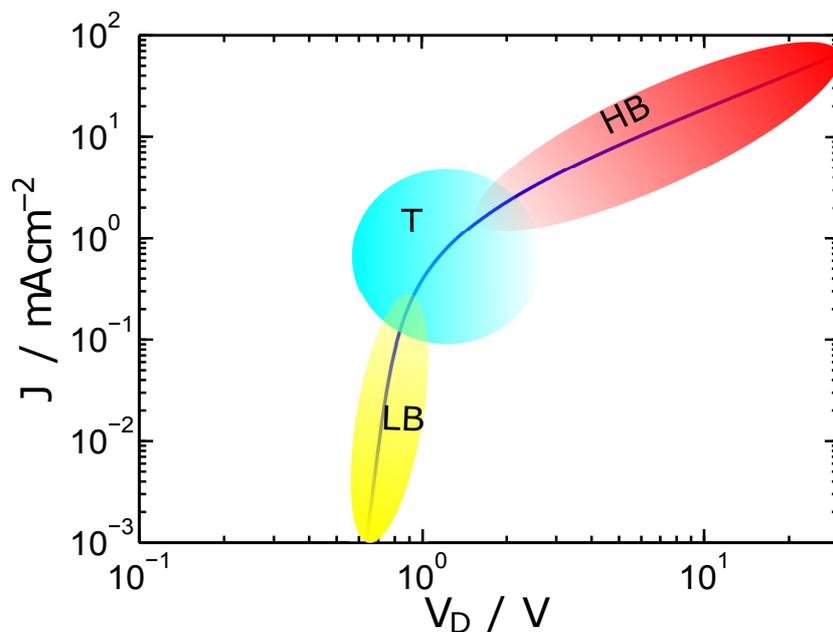


Figura 4.7: Curva simulada com as três regiões definidas. A elipse amarela mostra a região de baixas tensões (LB), o círculo azul aproxima uma possível região de transição (T) e a elipse vermelha indica a região de altas tensões (HB)

Na figura 4.6, o plot em semi-logaritmo mostra semelhanças com a figura 3.15. Como aparentemente há a tendência de uma reta para baixas tensões, esse intervalo deve indicar predominância de corrente de difusão. Esse comportamento pode ser observado na figura 4.8.

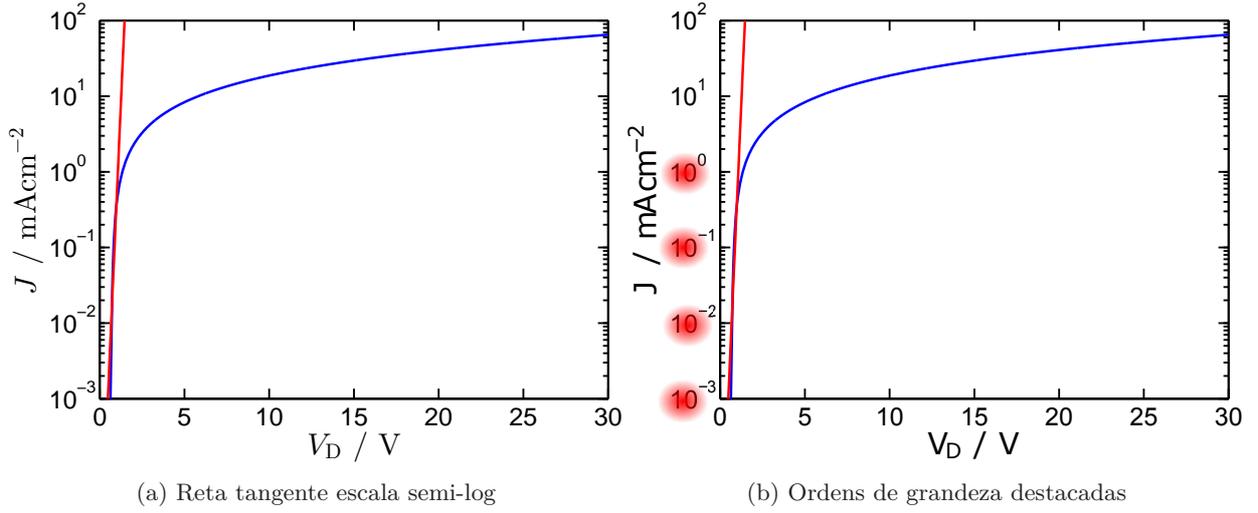


Figura 4.8: (a) Reta tangente proveniente da interpolação linear com o gráfico da simulação em escala semi-logaritmo de equação $\log_{10}(J_t) = 5.077V_D - 5.438$. (b) ordens de grandeza compreendidas pela reta tangente

4.2.5 Análise qualitativa e separação das regiões: Simulação 5

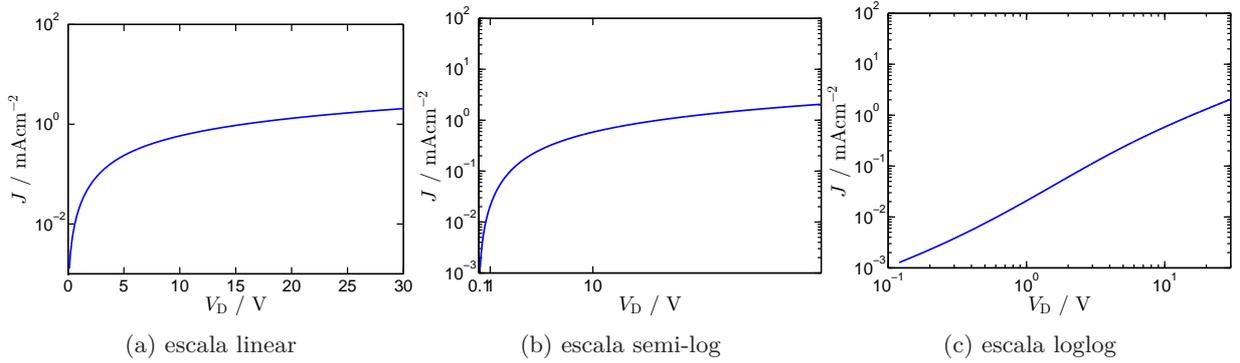


Figura 4.9: Perfil $V \times J$ para Simulação 5 em diferentes escalas. Observa-se que em duplo logaritmo (c) não há uma região clara de transição.

A divisão entre as regiões de baixa tensão (LB), transição (T) e alta tensão (HB) não é suficientemente conclusiva. O perfil em duplo logaritmo não apresenta de maneira clara uma região de transição, portanto, optou-se por não fazer a separação até que o comportamento seja investigado nas etapas posteriores.

4.2.6 Análise qualitativa e separação das regiões: Simulação 6

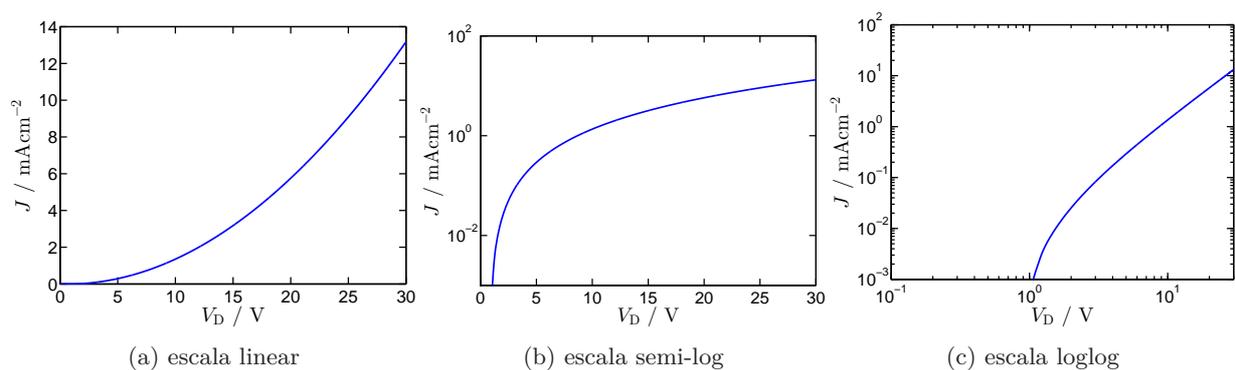


Figura 4.10: Perfil $V \times J$ para amostra 6 em diferentes escalas

Nota-se a similaridade da figura 4.10 com a figura 3.4. Assim, espera-se que o comportamento da simulação 6 possa ser investigado a partir de uma SCLC.

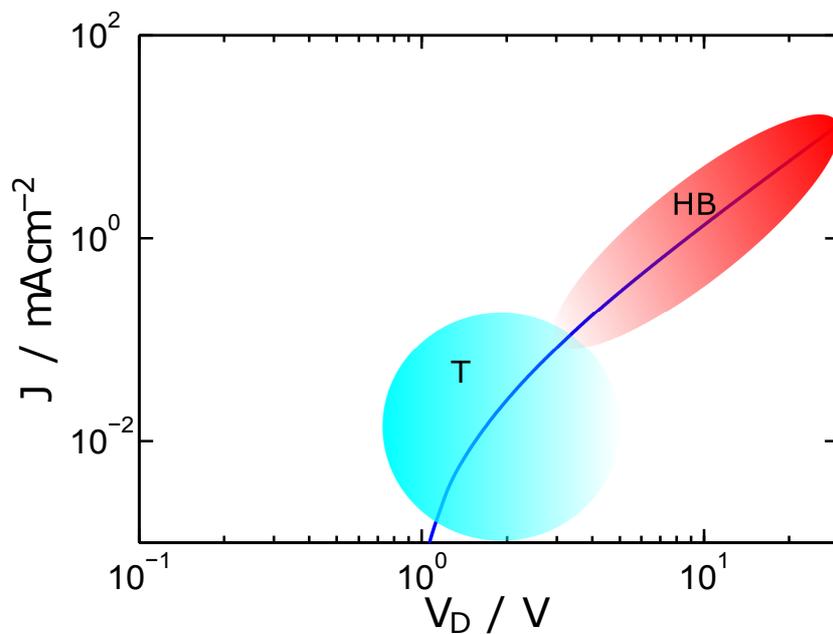


Figura 4.11: Separação em regiões de transição T e altas tensões HB para Simulação 6. A região de baixas tensões LB não é possível de ser definida

4.2.7 Análise qualitativa e separação das regiões: Simulação 7

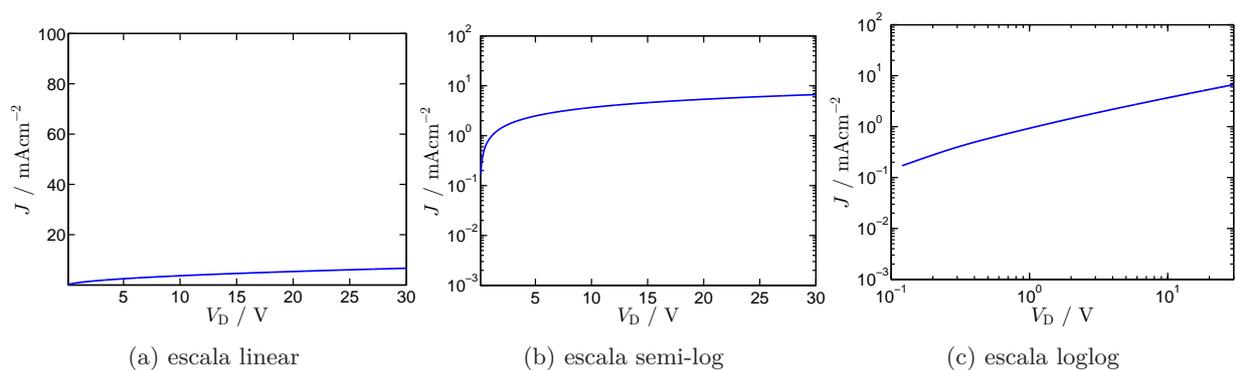


Figura 4.12: perfil $V \times J$ para simulação 7 em diferentes escalas

A representação em duplo logaritmo, como pode ser visto na figura 4.12, não apresenta uma clara região de transição. Assim, a divisão entre baixas tensões e altas tensões não pode ser feita com limites claros.

4.2.8 Análise qualitativa e separação das regiões: Simulação 8

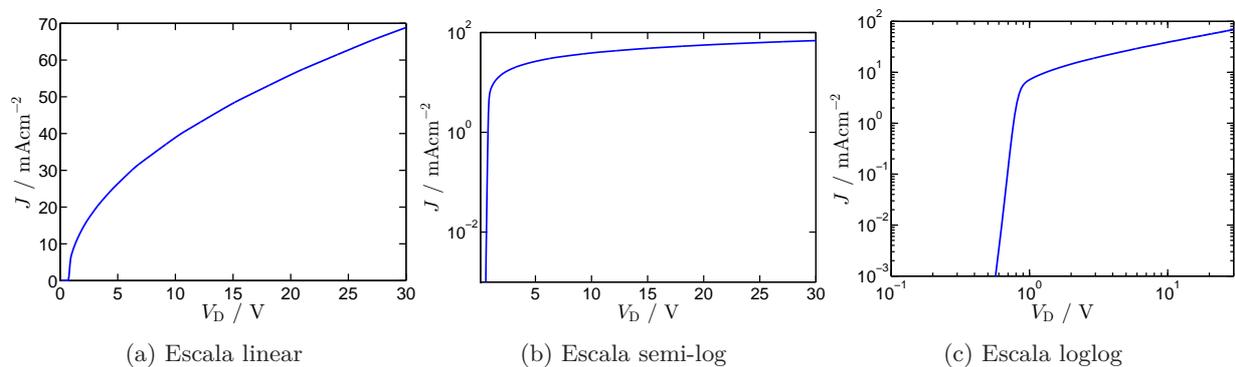


Figura 4.13: Perfis $V \times J$ da Simulação 8 nas três escalas sugeridas: Linear, semi-logaritmo e duplo logaritmo.

Há uma curva suave do tipo joelho, portanto, há possibilidade de separar as tensões em intervalos como mostra a figura 4.14

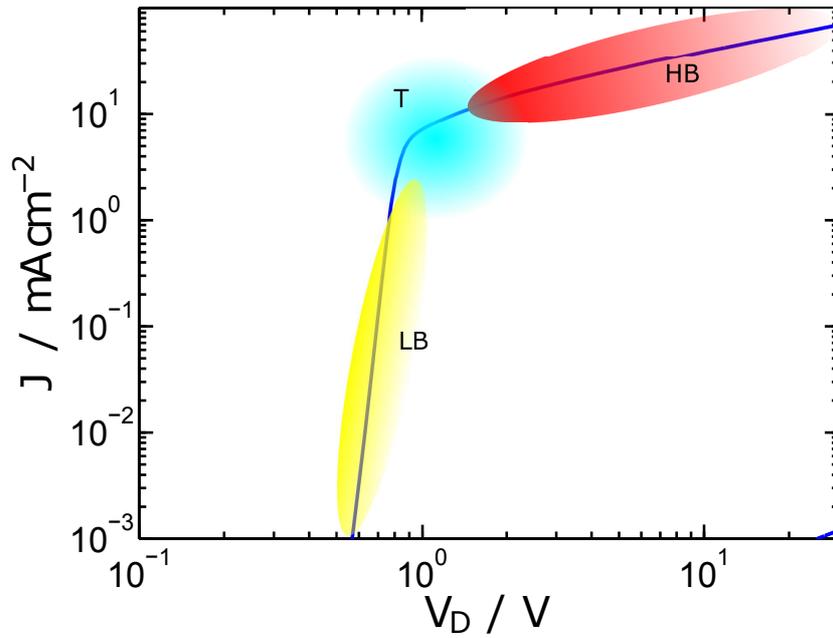


Figura 4.14: Separação em regiões de baixas tensões LB, transição T e altas tensões HB para Simulação 8

O plot em semi-logaritmo mostrado em 4.13, indica comportamento similar a 3.15. Assim, a região de baixas tensões deve possuir predominância do comportamento de difusão.

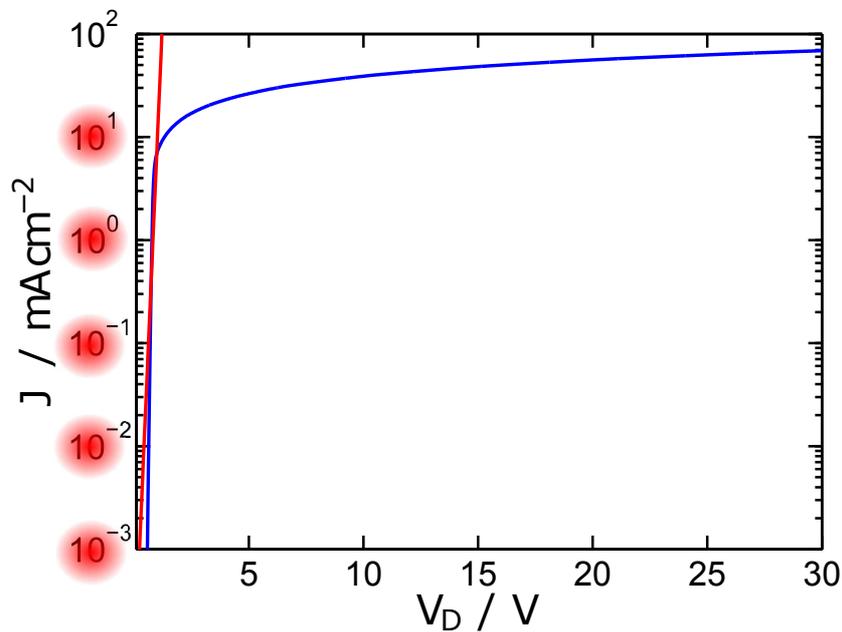


Figura 4.15: Simulação 8 em semi-logaritmo

A quantidade de ordens de grandezas compreendidas pela reta de interpolação em 4.15 indica aproximação ao comportamento exponencial.

4.3 Análise quantitativa aplicada às simulações

Nesta seção, os métodos para a extração de parâmetros propostos no capítulo 3, serão aplicados as simulações da figura 3.2. O programa computacional utilizado para a análise dos dados foi o MATLAB devido as facilidades de funções já implementadas.

4.3.1 Extração de parâmetros na Simulação 1

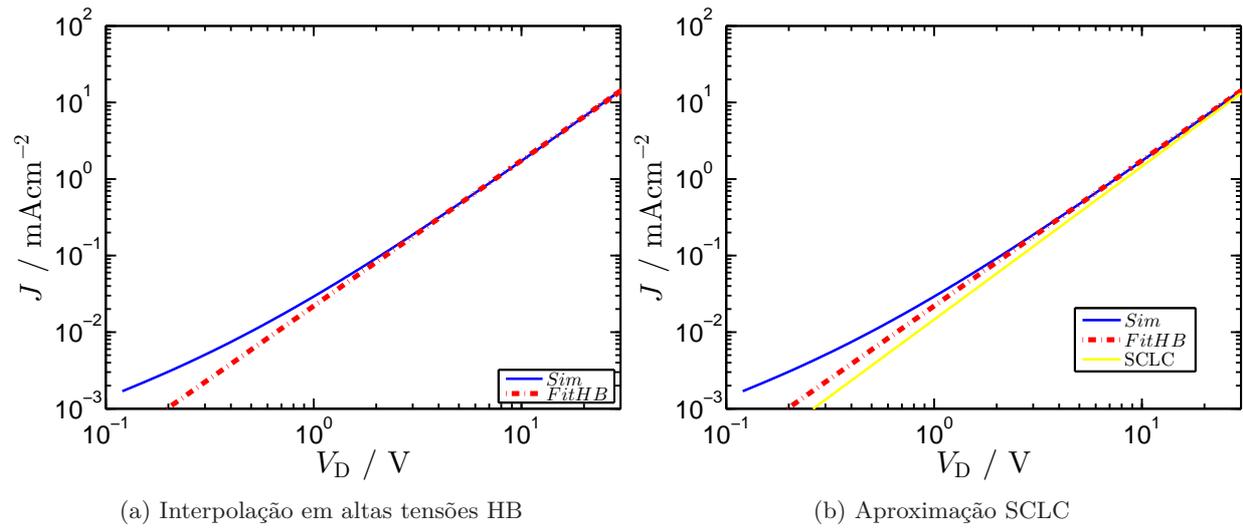


Figura 4.16: (a) interpolação linear para altas tensões (HB) de equação $Y_{HB} = 1.900X - 4.6585$ (b) interpolação para altas tensões (HB) juntamente com a equação de uma SCLC

O coeficiente angular da reta de interpolação para região de altas tensões apresenta valor aproximado $\alpha_{HB} \approx 1.9$. A partir da tabela 3.5 observa-se que a região de altas tensões deve ser descrita por uma SCLC. A região de baixas tensões também é interpolada por uma reta.

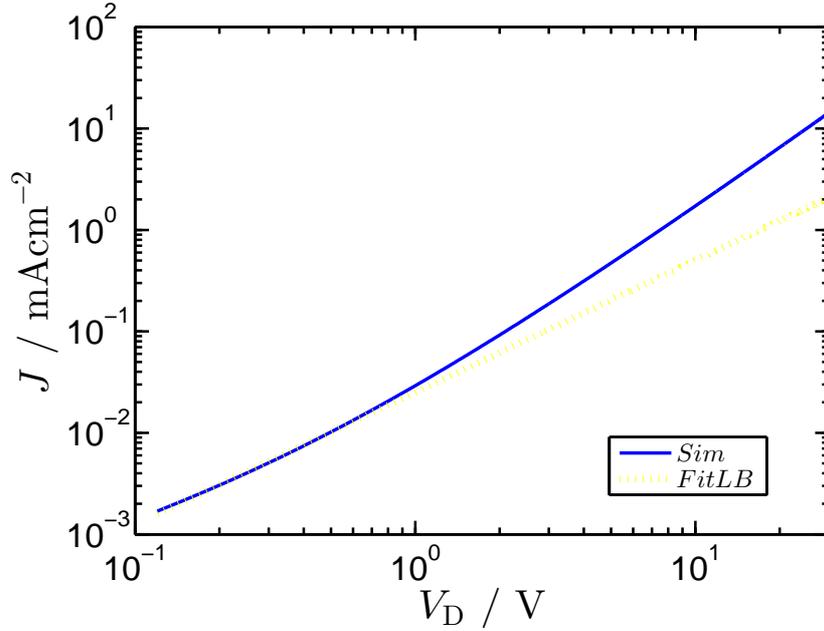


Figura 4.17: Interpolação linear para região de baixas tensões. A reta de interpolação apresenta a equação $Y_{LB} = \alpha_{LB} + K = 1.301X - 4.601$

O coeficiente angular da reta de interpolação (observada em 4.17) em baixas tensões sugere um valor de $\alpha_{LB} = 1.3$. A partir de 3.5 isso sugere uma aproximação à lei ôhmica.

A dopagem pode ser extraída equiparando a equação da interpolação linear de baixas tensões à lei ôhmica como em (3.21) e (3.22). A dopagem extraída é de $p = N_A = 1.3 \times 10^{13} \text{cm}^{-3}$.

A tensão interna V_{bi} , pode ser investigada a partir de pesquisas iterativas como sugerem as equações (3.10) e (3.11) e a partir da segunda derivada do perfil $V \times J$

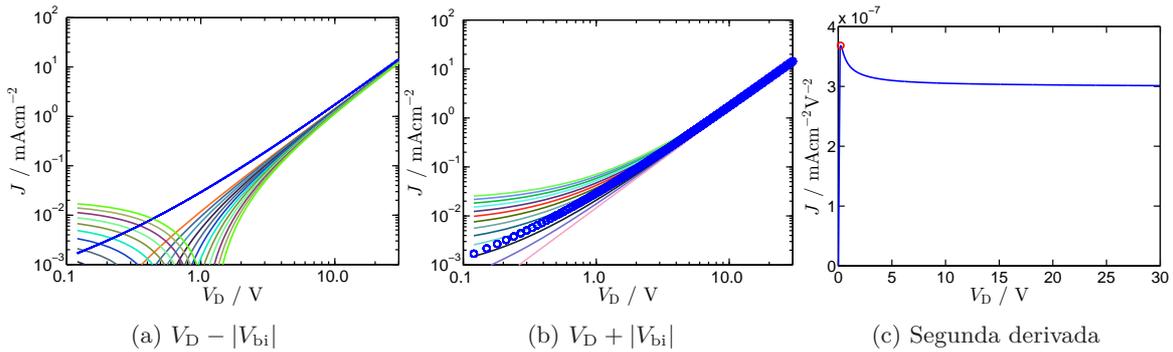


Figura 4.18: (a) e (b) apresentam curvas iterativas sobrepostas a simulação (em azul) a partir de $V_{bi} = 0V$ até um possível $V_{bi} = 1.2V$ em passos de $0.1V$. Em (b) a curva original da Simulação1 encontra-se destacada em círculos. (c) apresenta a segunda derivada do perfil $V \times J$.

Nenhuma das aproximações buscadas para V_{bi} mostram-se satisfatórias (figura 4.18). O valor de pico da segunda derivada na figura 4.18 está sob a região de baixas tensões (LB) e, portanto,

não pode ser uma aproximação para a tensão built-in.

A barreira de injeção, embora não possa ser extraída quantitativamente, pode ser avaliada. Como a Simulação 1 não demonstra nenhuma limitação nos valores de corrente por ser limitada pelo corpo, a barreira de injeção pode ser estimada como baixa $\phi_{inj} < 0.3eV$.

Utilizando os valores extraídos, a curva da Simulação 1 pode ser reconstruída.

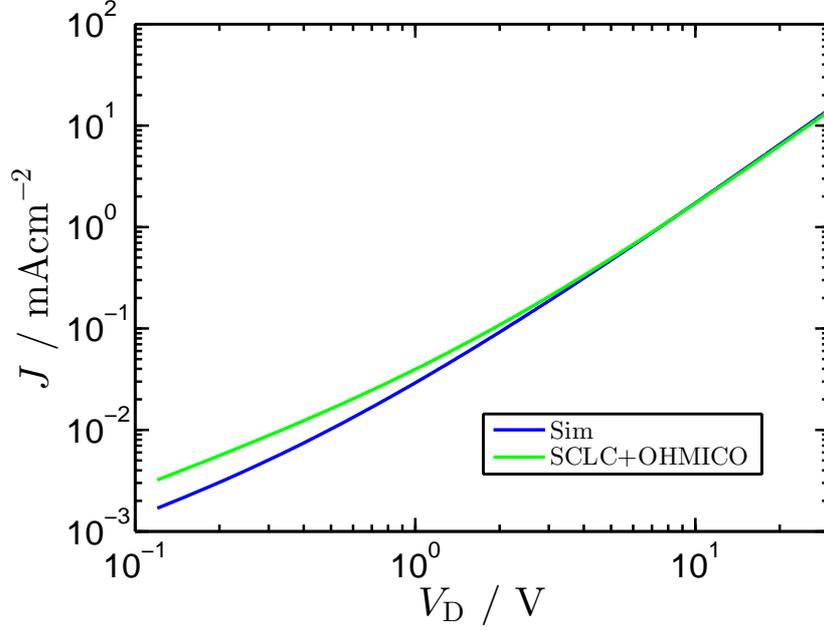


Figura 4.19: Soma da SCLC com uma lei Ohmica de $p = Na = 1.3 \times 10^{13} \text{Acm}^{-2} \text{V}^{-1}$. Nas legendas da imagem Sim refere-se a curva simulada e SCLC+Ohmico refere-se a aproximação.

Para baixas tensões, a curva proposta na figura 4.19 mostra-se insatisfatória, apresentando valores maiores em J que os esperados. O fato de o número das cargas $N_A = p$ ter sido extraído de uma interpolação linear em que $\alpha_{LB} = 1.3 > 1$, gera erros de aproximação. Neste caso, são feitas iterações que plotam diferentes curvas de SCLC somadas a leis ohmicas cujas dopagens $N_A = 1.3 \times 10^{13} \text{cm}^{-3}$ são multiplicadas por porcentagens menores até $N_A \times 50/100$ com a finalidade de compensar o erro de aproximação.

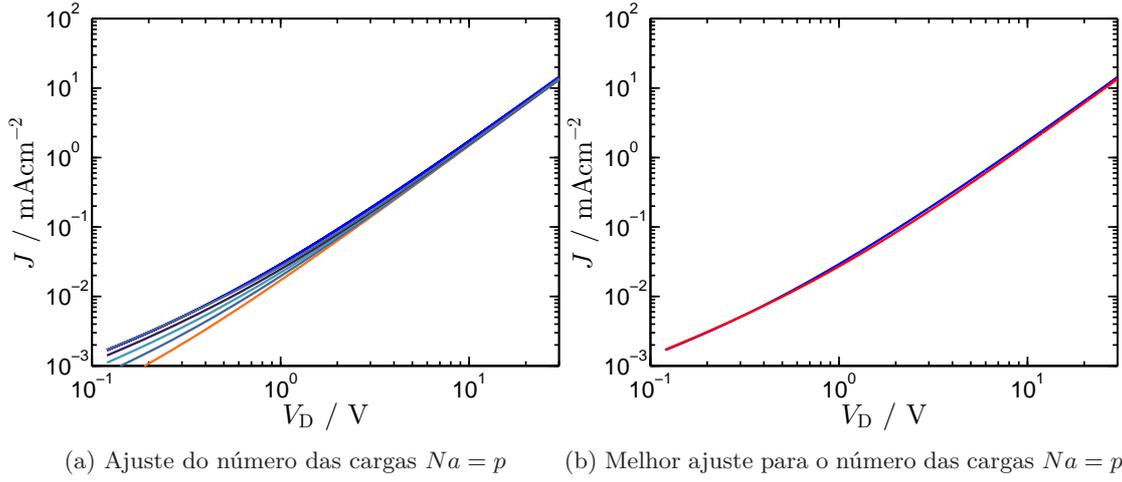


Figura 4.20: (a) curva simulada e respectivas curvas de aproximação para diferentes frações da dopagem N_A . (b) melhor curva de aproximação ($N_{A,new} = N_A \times 50\%$)

A melhor aproximação para uma dopagem retificada é de $N_A = 0.6 \times 10^{13} \text{cm}^{-3}$.

Embora o comportamento predominante dessa simulação seja descrito por uma lei SCLC e, portanto, as cargas introduzidas no corpo sejam predominantes em relação a uma possível dopagem, possivelmente a dopagem extraída é proveniente dos contatos.

O erro residual ponto a ponto entre a Simulação 1 original e a curva proposta em 4.20 (b) é mostrado a seguir.

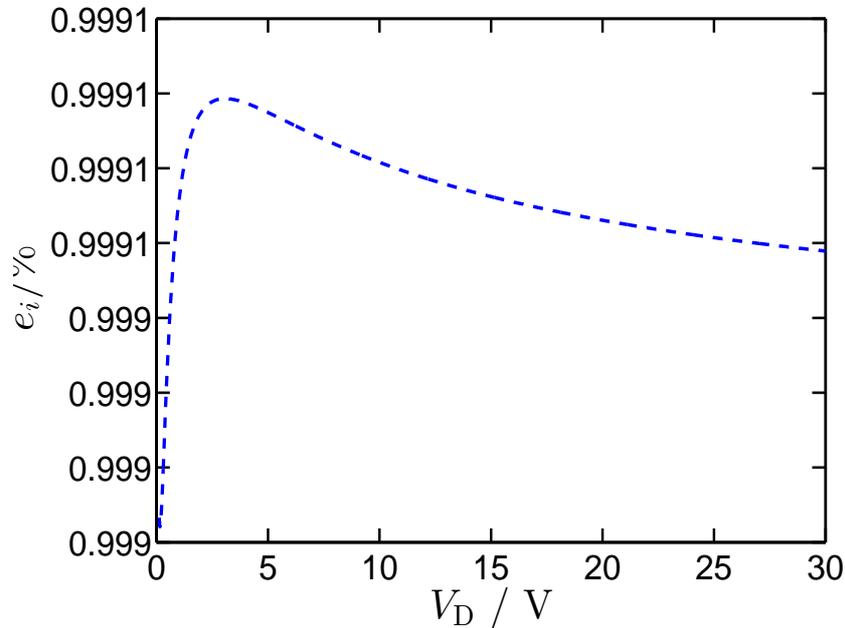


Figura 4.21: (a) Erro residual entre a curva simulada e a reconstruída

Os parâmetros obtidos por meio dos procedimentos de extração são resumidos nas tabelas 4.1

Tabela 4.1: Coeficientes angulares das interpolações lineares e limitações das regiões LB e HB

α_{LB}	α_{HB}	Comportamento de transição
1.3	1.9	Corpo - Corpo

Tabela 4.2: Parâmetros extraídos da Simulação 1. NaN refere-se a impossibilidade de extração do respectivo parâmetro.

$N_A[\text{cm}^{-3}]$	$ \phi_{inj} [\text{eV}]$	$V_{bi}[\text{V}]$	$ \phi_{ext} [\text{eV}]$
0.6×10^{13}	<0.3	NaN	NaN

A tensão interna V_{bi} não pôde ser extraída devido ao fato de nenhum dos métodos sugeridos para a determinação desse parâmetro funcionarem. Não há região de baixas tensões o que inviabiliza a aproximação pelo ponto de interseção das interpolações lineares. Os demais métodos foram discutidos com auxílio das figuras 4.18 (a),(b) e (c).

A barreira de extração ϕ_{ext} depende de um valor de aproximação para V_{bi} , portanto, não foi possível determinar uma aproximação para esse parâmetro.

A barreira de injeção é considerada pequena já que o comportamento da simulação não mostra limitações por parte dos contatos e não há meios de determiná-la numericamente; o valor intervalar escolhido para esse parâmetro, $\phi_{inj} < 0.3\text{eV}$, consiste no fato de que para valores abaixo de 0.3eV nas simulações em Sentaurus TCAD, as barreiras não apresentam significativas interferências no comportamento relativo à limitação do dispositivo.

A dopagem extraída, como trata-se de uma SCLC, deve ser proveniente do número das cargas excessivas injetadas pelos contatos. A partir dessa dopagem extraída, verifica-se que a soma de uma lei Ôhmica com uma SCLC descreve bem o comportamento do dispositivo simulado.

Nota-se que na aproximação para lei Ôhmica, devido ao fato de o expoente ser maior do que 1, no caso, $\alpha_{LB} = 1.3$, são introduzidos erros na obtenção da dopagem. Isso pode ser verificado na figura 4.20.

4.3.2 Extração de parâmetros na Simulação 2

A Simulação 2 não apresenta divisão em regiões, portanto, é feita a interpolação de seus pontos como um único intervalo

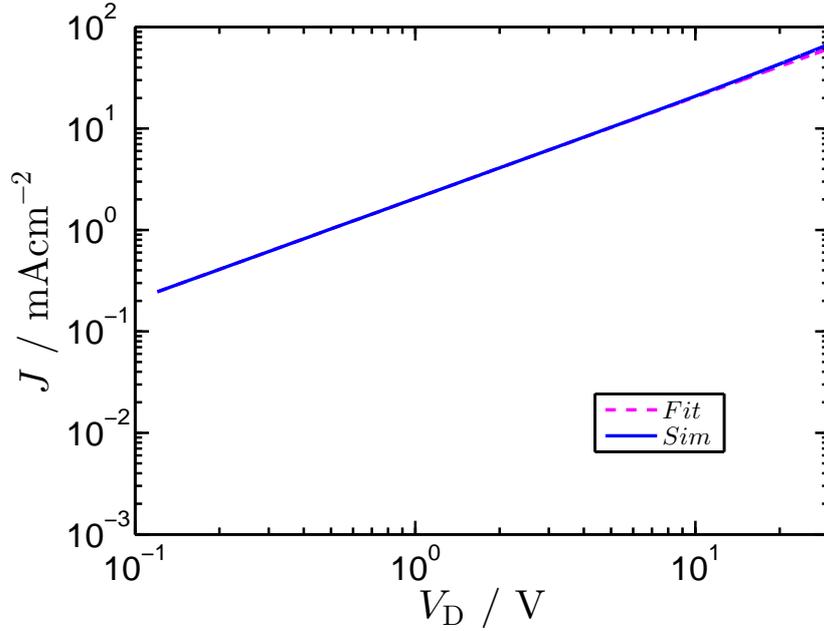


Figura 4.22: Simulação 2, curva original e reconstruída

A equação da reta obtida da interpolação apresentada na figura 4.22 foi:

$$Y = \alpha X + K \equiv \log_{10}(J) = 1.\log_{10}(V_D) - 2.689 \quad (4.1)$$

Observa-se que a Simulação 2 é descrita por somente limitação de corpo dado a aproximação com a lei Ôhmica quando verificada a tabela 3.5. Retirando o logaritmo da equação (4.1) temos:

$$V_D^{1.000} 10^{-2.689} \quad (4.2)$$

E ainda, se compararmos à (2.26)

$$V_D^{1.000} 10^{-2.689} = q\mu_p \frac{V}{d} p \quad (4.3)$$

Assim, a resistividade do dispositivo pode ser modelada como $\rho = 4.1 \times 10^{-4} \Omega\text{cm}$ e ainda o número das cargas pode ser extraído:

$$p = \frac{Jd}{\mu_p q V} \quad (4.4)$$

A dopagem do dispositivo pode ser obtida por meio da equação (3.22) e apresenta valor aproximado de $N_A = 1.1 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$

Como trata-se de uma aproximação à lei Ôhmica, a barreira de injeção deve ser pequena $\phi_{\text{inj}} < 0.3$. Como também não há regiões de transição, não há tensão interna built-in $V_{\text{bi}} = 0$.

O erro associado a aproximação por interpolação linear pode ser observado na figura 4.23

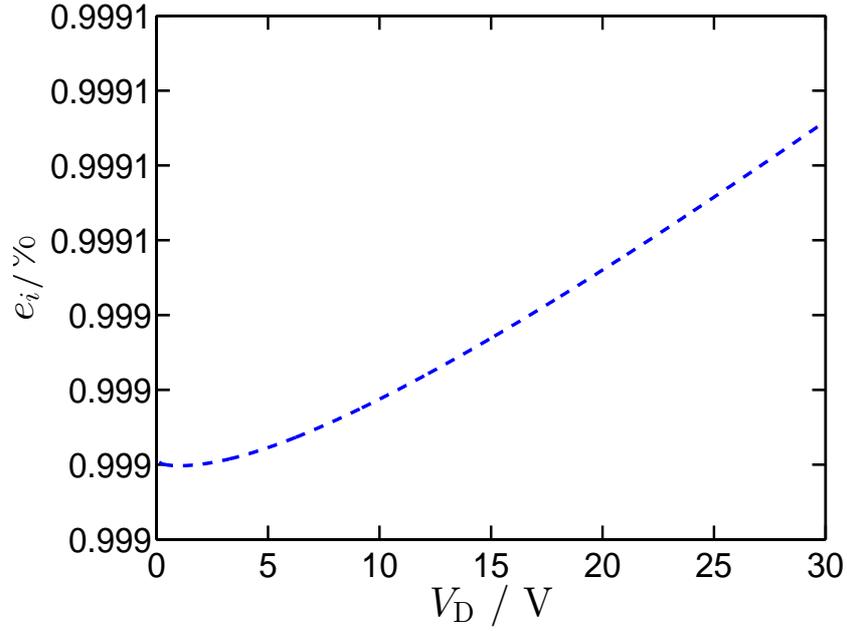


Figura 4.23: Erro residual $e_i = |J_s - J_r| / |J_s|$. J_s refere-se aos valores de densidade de corrente da Simulação2 e J_r aos valores da reconstrução proposta

A extração de parâmetros na Simulação 2 é resumida nas tabelas 4.3 e 4.4

Tabela 4.3: Coeficientes angulares das interpolações lineares e limitações das regiões LB e HB

α_{LB}	α_{HB}	Comportamento de transição
1	1	NaN

Tabela 4.4: Parâmetros extraídos da Simulação 2. NaN refere-se a impossibilidade de extração do respectivo parâmetro.

$N_A [\text{cm}^{-3}]$	$ \phi_{inj} [\text{eV}]$	$V_{\text{bi}} [\text{V}]$	$ \phi_{ext} [\text{eV}]$
1.1×10^{15}	< 0.3	0	NaN

4.3.3 Extração de parâmetros na Simulação 3

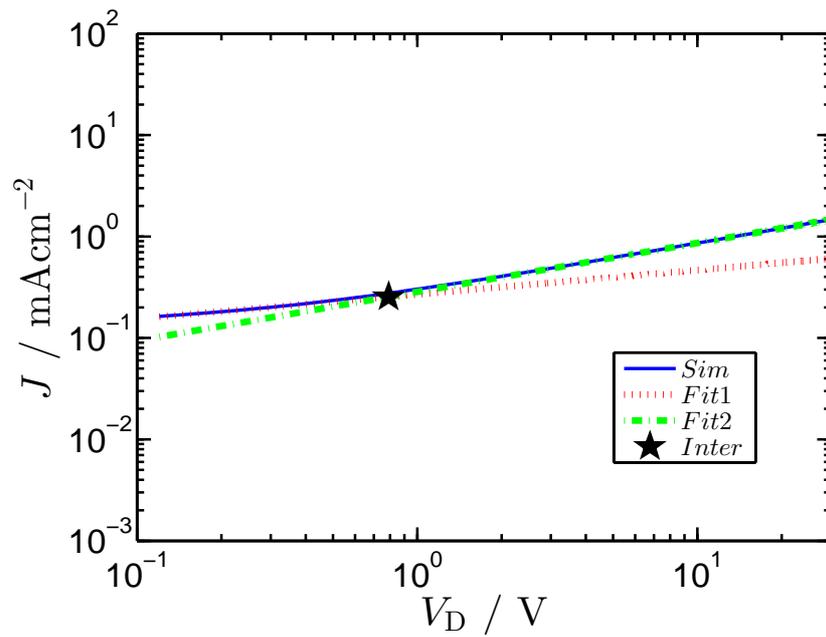


Figura 4.24: Interpolações lineares a partir das regiões definidas em 4.5. Em baixas tensões a interpolação linear fornece equação $Y_{LB} = X0.2 - 3.571$ e para altas tensões $Y_{HB} = X0.5 - 3.546$

Os coeficientes angulares das respectivas retas de interpolação assumem valores sublineares, sendo $\alpha_{LB} < \alpha_{HB}$, indicando mudança de uma região limitada pela injeção diretamente a região limitada pelo contato. Assim, neste caso, para baixas tensões a Simulação 3 pode ser aproximada pela equação (2.50) e para altas tensões pela equação (3.6). Isso pode ser observado na figura 4.25.

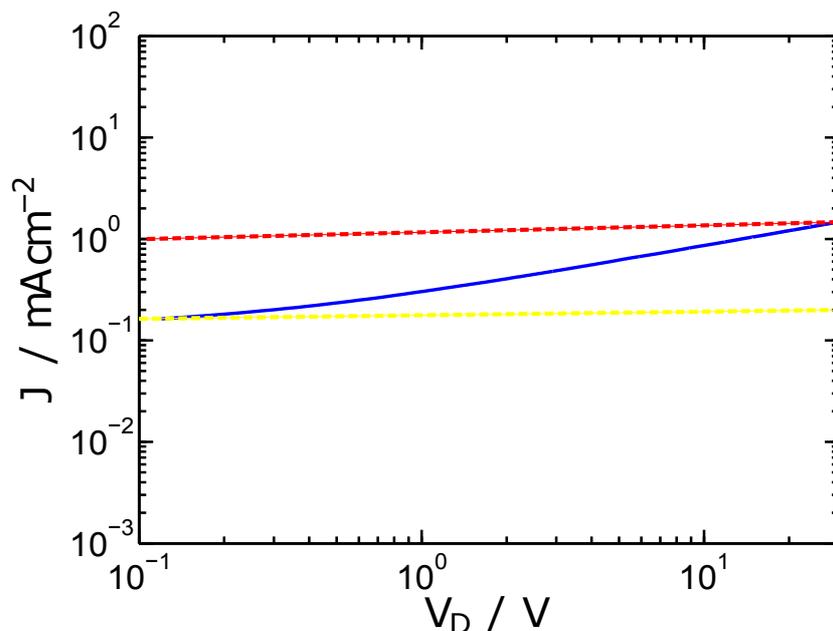


Figura 4.25: Aproximação por (2.50) em amarelo e (3.6) em vermelho.

O módulo do valor da tensão interna built-in pode ser aproximada pelo ponto de interseção das interpolações lineares (figura 4.25). A aproximação pela segunda derivada não é conclusiva devido a impossibilidade de definir um ponto de pico. Isso pode ser observado na figura 4.26

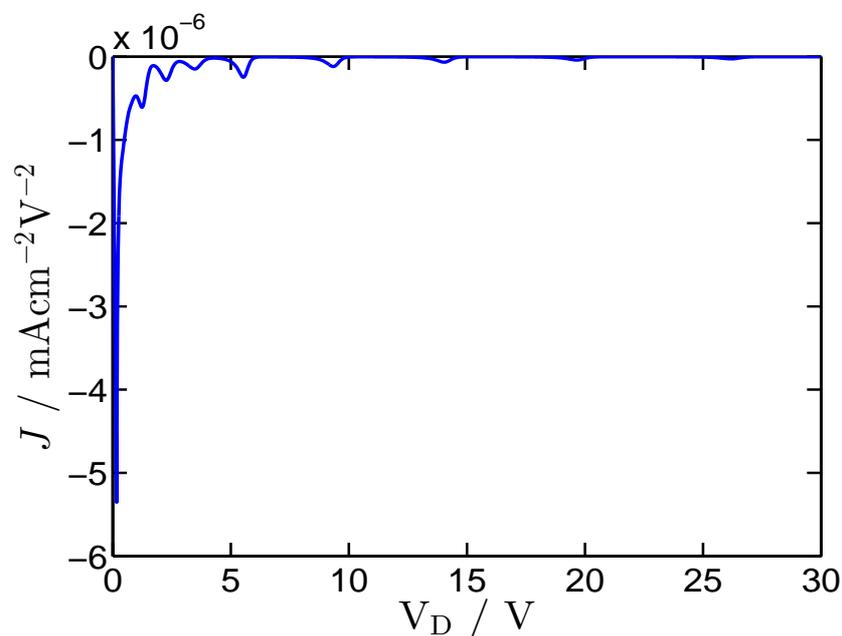


Figura 4.26: Segunda derivada do perfil $V \times J$ da simulação 3. A ausência de picos na região escolhida para transição não fornece uma aproximação para o valor de V_{bi}

O valor obtido pela interseção das interpolações é de $|V_{bi}| = 0.8V$. Aproximações para a barreira de injeção ϕ_{inj} podem ser calculados. Para isso, o número das lacunas em equilíbrio p_0

deve ser primeiramente extraído.

Utilizando o valor mínimo de corrente $J_{\min} = 1.1631 \text{mAcm}^{-2}$ por meio da equação (2.50), p_0 pode ser estimado como:

$$p_{0,J_{vbi}} = \frac{J_{\min} L}{q\mu |(V_{D,\min} + V_{bi})|} \quad (4.5)$$

O que fornece um valor de $p_{0,J_{vbi}} = 9.172 \times 10^{13} \text{cm}^{-3}$. Outra aproximação calculável de p_0 pode ser obtida com o valor máximo de densidade de corrente da simulação ($J_{\max} = 1.5 \text{mA/cm}^2$). A partir de (3.6)

$$p_{0,J_{\max}} = \frac{J_{\max}}{qV_p} \quad (4.6)$$

Fornecendo um valor de $p_{0,J_{\max}} = 9.181 \times 10^9 \text{cm}^{-3}$. Usando (3.26) e os valores estimados para p_0 , as aproximações para barreira de injeção são $\phi_{inj,J_{\max}} = 0.6 \text{eV}$ e $\phi_{inj,J_{vbi}} = 0.4 \text{eV}$.

Os valores extraídos para Simulação 3 são resumidos nas tabelas 4.5 e 4.6.

Tabela 4.5: Coeficientes angulares das interpolações lineares e limitações das regiões LB e HB

α_{LB}	α_{HB}	Comportamento de transição
0.5	0.2	Injeção - Contato

Tabela 4.6: Parâmetros extraídos da Simulação 3. NaN refere-se a impossibilidade de extração do respectivo parâmetro. J_{\max} e J_{\min} referem-se, respectivamente, aos parâmetros extraídos com base nos valores de correntes máxima e mínima.

$N_A [\text{cm}^{-3}]$	$ \phi_{inj} [\text{eV}]$	$V_{bi} [\text{V}]$	$ \phi_{ext} [\text{eV}]$
NaN	$0.6(J_{\max})/0.4(J_{vbi})$	0.4	$0.2(J_{\max})/0(J_{vbi})$

No caso dessa simulação, não foi possível extrair a dopagem já que em nenhuma das regiões (LB e HB) se aproximam de uma lei Ôhmica.

A tensão interna V_{bi} pôde ser aproximada apenas pela interseção das interpolações lineares. O método da derivada mostrou-se inadequado devido ao fato de não haver um pico de tensão claro na região de transição. O valor extraído para o potencial interno deve ser interpretado como sendo negativo devido a transição da sublinearidade de ambos intervalos (LB e HB) ser muito sutil.

A barreira de injeção pôde ser aproximada por dois valores distintos baseados um na corrente máxima e outro na corrente mínima. Isso reflete-se diretamente na barreira de extração que, por consequência, foi aproximada por dois valores.

4.3.4 Extração de parâmetros na Simulação 4

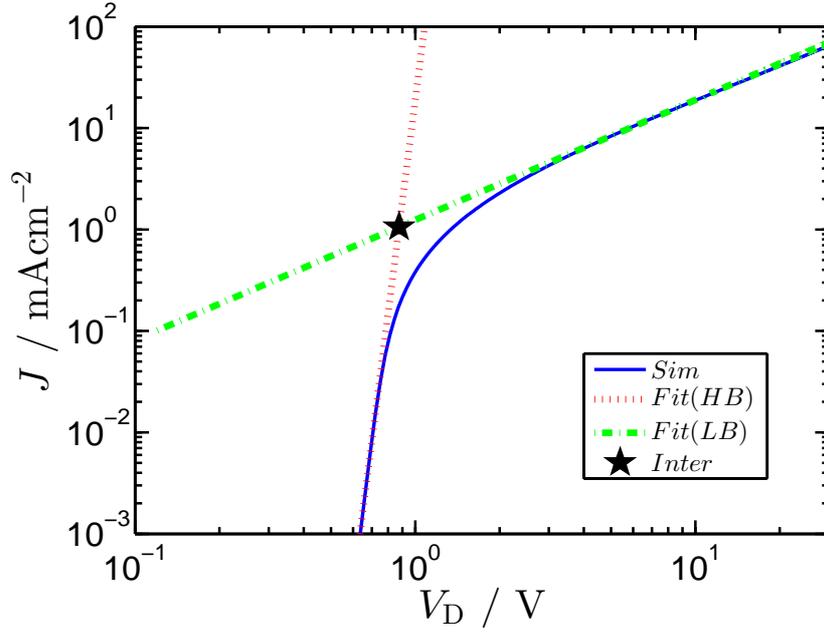


Figura 4.27: Interpolações lineares para regiões de altas tensões (Fit HB), para baixas tensões (Fit LB), a estrela marca o ponto de interseção das interpolações em $V_D = 0.9V$. Respectivamente, as equações das interpolações para altas e baixas tensões são: $Y_{HB} = X1.2 - 2.9061e$ $Y_{LB} = X22 - 1.7252$

A região de baixas tensões observada na figura 4.27, como observado na figura 4.8 pode ser aproximada pelo fenômeno de difusão. O coeficiente angular da reta de interpolação para altas tensões $\alpha_{HB} = 1.2$, quando avaliado na tabela 3.5, indica uma região que comporta-se, aproximadamente, pela lei Ôhmica. A Simulação 4, portanto, para baixas tensões possui limitação de injeção e para altas tensões limitação pelo corpo.

Se a interpolação linear para altas tensões for avaliada como uma lei Ôhmica pela equação (3.21), é possível extrair uma dopagem como feito usando a equação (3.22) de $N_A = 0.6 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$.

A tensão interna é aproximada por um valor de $V_{bi1} = 0.9V$ pela interseção das retas de interpolação. Outra aproximação pode ser verificada a partir da segunda derivada

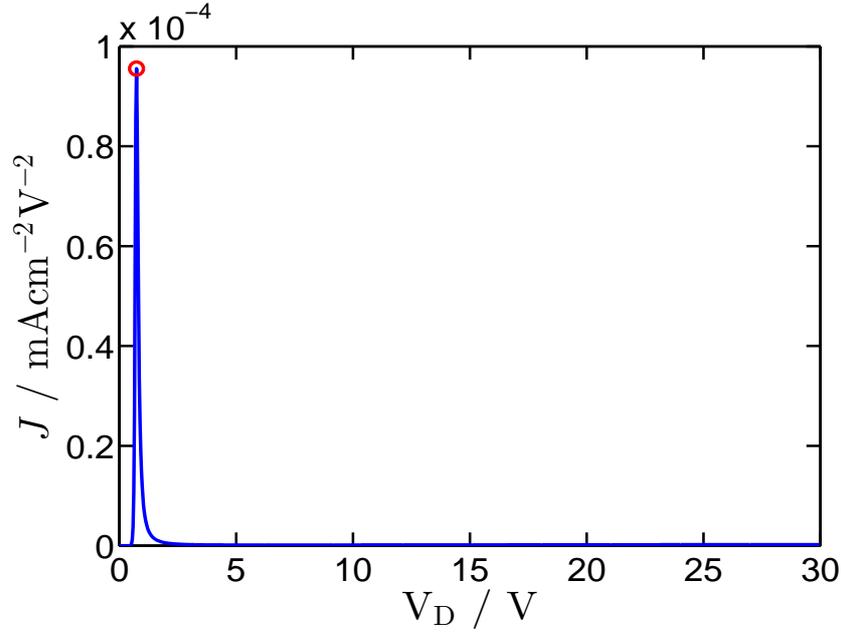


Figura 4.28: Segunda derivada do perfil $V \times J$ da Simulação 4. O valor de máximo indica uma tensão de $V_D = 0.7V$

Assim, a segunda derivada indica também uma aproximação da tensão interna de $V_{bi2} = 0.7V$.

Como a Simulação 4 é limitada apenas pelo corpo para altas tensões, a barreira de injeção deve ser baixa ($\phi_{inj} < 0.3eV$).

Utilizando os valores extraídos, pode ser proposta uma fórmula matemática analítica que descreva o comportamento da Simulação 4. Observa-se uma grande similaridade de comportamento com o fenômeno de difusão na figura 3.6, porém, a equação matemática deste fenômeno (2.48) não leva em consideração dopagem. Como na simulação foi extraída uma dopagem de $p = Na = 0.6 \times 10^{15} cm^{-3}$, essa pode ser incluída na equação (2.48) desde que suas condições de contorno (2.39) e (2.40) sejam alteradas para:

$$p(\theta) = Na \quad (4.7)$$

e

$$p(L) = Na \quad (4.8)$$

O potencial (2.44) deve ser ajustado também para:

$$E_v(x) = -q \left(V + \frac{(\varphi_b - (V - V_{bi}))x}{L} \right) \quad (4.9)$$

Se mantivermos constantes as demais condições (2.41) e (2.42) e resolvermos a integral para os mesmo limites propostos em [18] podemos chegar a:

$$J_{dif} = q\mu_p N_A (V - V_{bi}) \frac{1 - \exp(-Vq/kT)}{L(1 - \exp(-(V - V_{bi})q/kTq))} \quad (4.10)$$

Usando o valor aproximado médio das tensões built-in $V_{bi} = 0.8V$ e o valor extraído para o número das cargas $p = Na = 6.3 \times 10^{14} \text{cm}^{-3}$, a equação (4.10) pode ser plotada junto com o perfil $V \times J$ da curva simulada

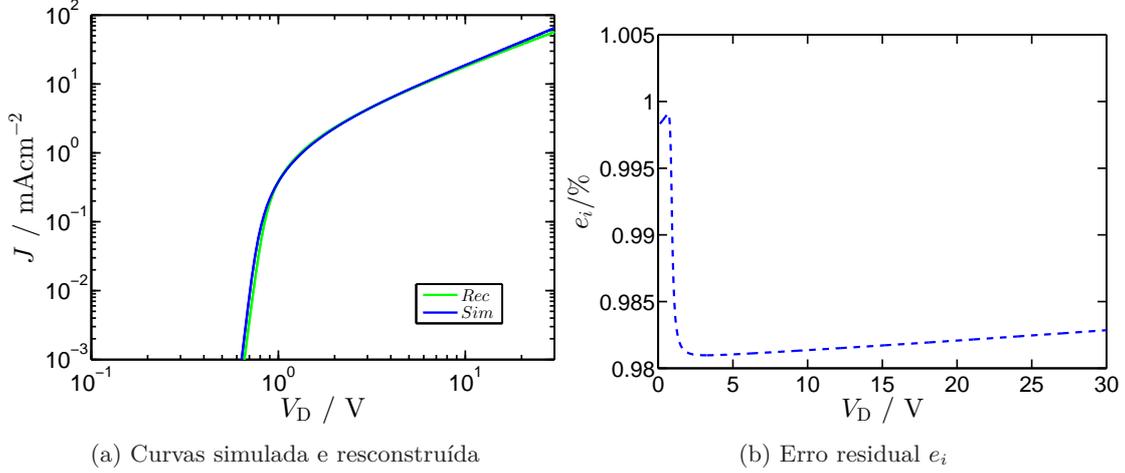


Figura 4.29: (a) curva simulada original (Sim) e a reconstrução pela equação (4.10) utilizando os parâmetros aproximados obtidos na análise. (b) Erro residual

A Simulação 4 pode ser resumida a seguir nas tabelas 4.7 e 4.8

Tabela 4.7: Coeficientes angulares das interpolações lineares e limitações das regiões LB e HB

α_{LB}	α_{HB}	Comportamento de transição
22	1.2	Injeção - Corpo

Tabela 4.8: Parâmetros extraídos da Simulação 4. I e D referem-se, respectivamente, aos métodos de extração de V_{bi} pela interseção das interpolações lineares e pela derivada segunda.

$N_A [\text{cm}^{-3}]$	$ \phi_{inj} [\text{eV}]$	$V_{bi} [\text{V}]$	$ \phi_{ext} [\text{eV}]$
6.4×10^{14}	< 0.3	0.7(I)/0.9(D)	0.7(I)/0.9(D)

A barreira de injeção apresentada na tabela 4.8, pôde ser considerada pequena devido ao fato de que em altas tensões (HB) a limitação da amostra é dada por um comportamento Ôhmico, ou seja, há uma limitação pelo corpo e não pelo contato. Como mencionado anteriormente, nas simulações feitas pelo software Sentaurus TCAD, valores a baixo de 0.3eV para a barreira de injeção, foram desprezíveis para o intervalo de tensão em estudo.

4.3.5 Extração de parâmetros na Simulação 5

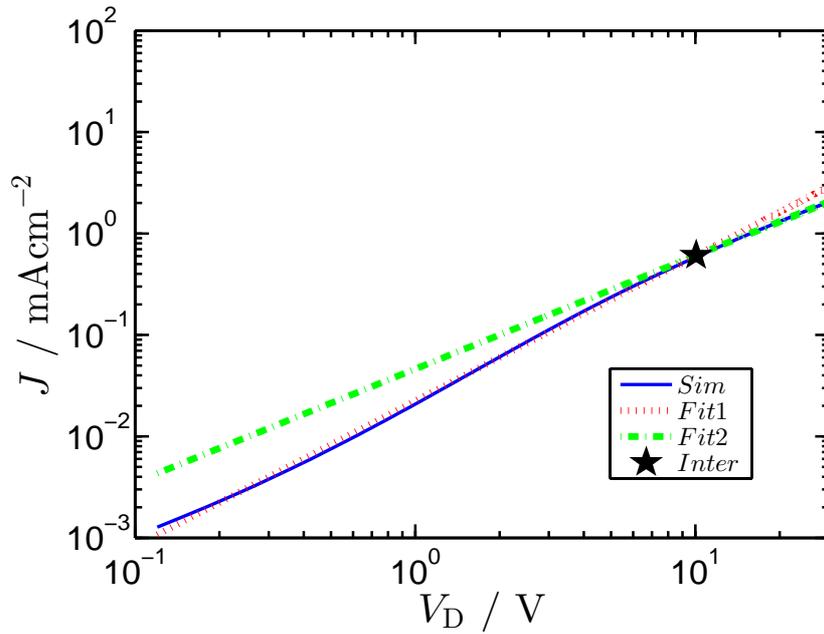


Figura 4.30: Interpolações lineares para o perfil $V \times J$ em escala duplo logarítmico. A reta verde é a interpolação linear para altas tensões e possui equação $Y_{HB} = \alpha_{HB}X + K = 1.1X - 4.336$. A reta vermelha é a interpolação para baixas tensões e tem equação $Y_{LB} = \alpha_{LB}X + K = 1.4X - 4.651$. A interseção entre as retas é marcada pela estrela preta e indica uma tensão de $V_D = 10.061V$

Os coeficientes das retas de interpolação para baixas e altas tensões, respectivamente, são: $\alpha_{LB} = 1.4$ e $\alpha_{HB} = 1.1$. Como visto na figura 3.22 não há a possibilidade de haver transição de limitação de corpo partindo de SCLC para lei Ôhmica, portanto, o gráfico observado deve ser interpretado como um grande região de transição (figura 4.31) entre limitação de corpo e limitação de contato. Sendo assim, a tensão interna built-in não pode ser aproximada.

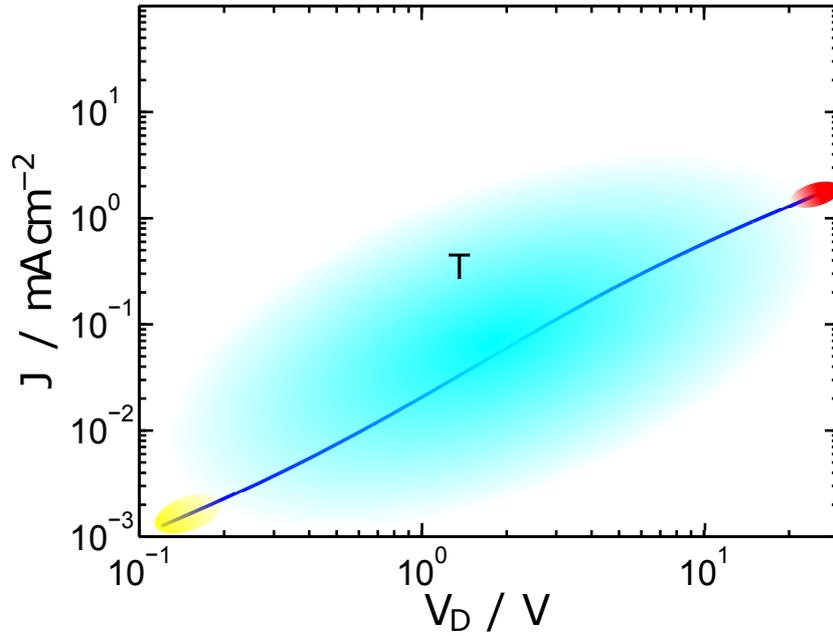


Figura 4.31: Simulação 5 como uma grande região de transição entre limitação de corpo e contato.

Para barreira de injeção, como a Simulação 5 é limitada pelo contato, pode ser calculado um limite máximo. Usando a equação (3.24) o número das cargas em equilíbrio é calculado como $p_0 = 1.282 \times 10^{10} \text{cm}^{-3}$. Assim o limite superior para barreira de injeção pode ser calculado a partir da equação (3.26) e dá uma aproximação de $\phi_{inj} = 0.6 \text{eV}$

Em suma os parâmetros extraídos podem ser observados nas tabelas 4.9 e 4.10.

Tabela 4.9: Coeficientes angulares das interpolações lineares e limitações das regiões LB e HB

α_{LB}	α_{HB}	Comportamento de transição
1.5	1.1	Corpo - Contato

Tabela 4.10: Parâmetros extraídos da Simulação 5. No campo referente a barreira de injeção, J_{max} refere-se à obtenção do parâmetro por meio da densidade de corrente máxima.

$N_A [\text{cm}^{-3}]$	$ \phi_{inj} [\text{eV}]$	$V_{bi} [\text{V}]$	$ \phi_{ext} [\text{eV}]$
NaN	0.6 (J_{max})	NaN	NaN

O valor da dopagem não pôde ser obtido, pois, não há nenhuma região que pode ser avaliada como lei Ôhmica.

A barreira de injeção extraída constitui um limite superior. Como a corrente ainda mostra tendência de crescimento, o valor tomado como corrente máxima, pode ainda não ser o máximo valor de densidade de corrente.

Como a simulação apenas mostra uma grande região de transição e, não pode-se saber até onde esta se estende, não há meios para extrair a tensão interna V_{bi} por nenhum dos métodos.

Isso implica também na não determinação da barreira de extração.

4.3.6 Extração de parâmetros na Simulação 6

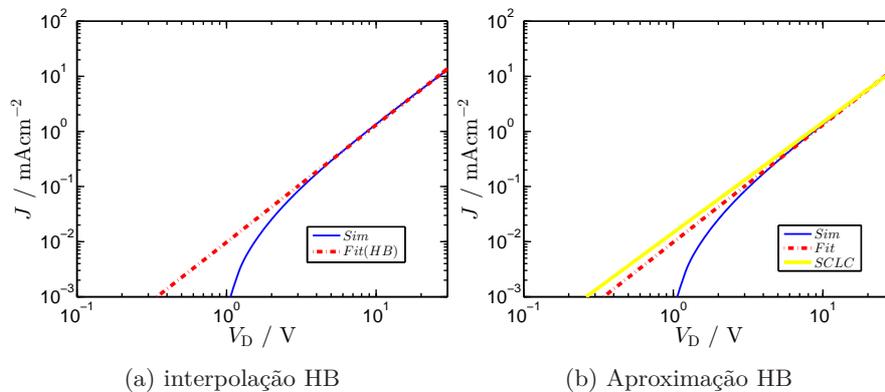


Figura 4.32: (a) interpolação linear para altas tensões. A reta obtida tem equação $Y_{HB} = \alpha_{HB} + K = X2.1 - 5.011$ e pode ser identificada na cor vermelha. (b) comparação da reta de interpolação Y_{HB} com a lei SCLC (em amarelo).

De acordo com o valor obtido para o coeficiente angular da reta de interpolação em altas tensões $\alpha_{HB} = 2.1$, essa é comparada na tabela 3.5 à lei SCLC. Para altas tensões, há tendência ainda à limitação de corpo, portanto, a barreira de injeção deve ser muito pequena, $\phi_{inj} < 0.3eV$. Em relação a dopagem, como trata-se de uma lei SCLC, essa deve ser pequena e, para o caso desse trabalho, pode-se dizer que $N_A < 10^{13}cm^{-3}$. Para a tensão interna V_{bi} , como não há uma significant quantidade de pontos para a região de baixas tensões, não é possível obter seu valor pela interseção das interpolações, então, observa-se a segunda derivada do perfil $V \times J$.

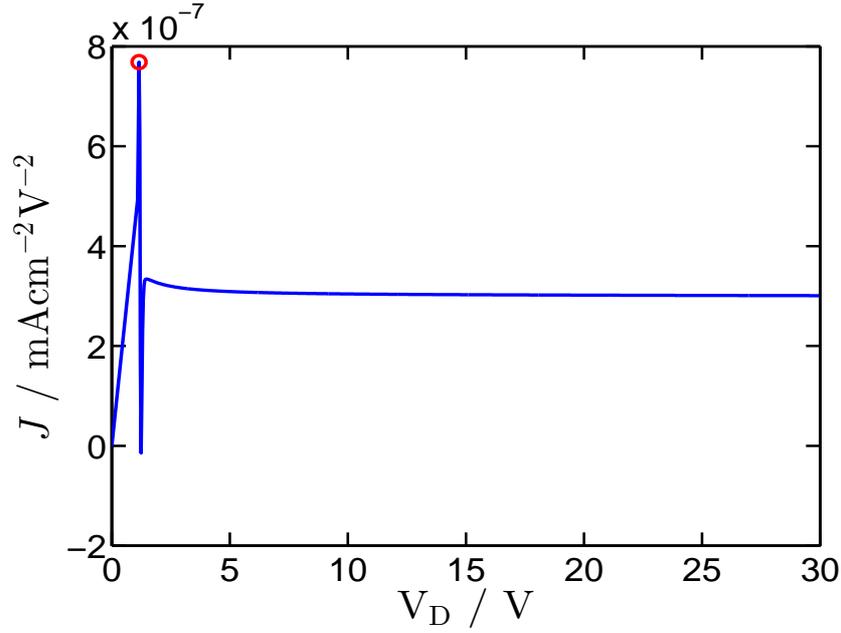


Figura 4.33: Segunda derivada $\partial^2 V / \partial J^2$ do perfil $V \times J$. O círculo em vermelho indica o ponto de máximo $V_D = 1.2V$

O valor do ponto de máximo na figura 4.33 constitui uma aproximação para a tensão interna V_{bi} da amostra. O valor indicado para esse ponto foi de $V_{bi} = 1.2V$.

A extração de parâmetros na Simulação 6 pode ser resumida nas tabelas 4.11 e 4.12.

Tabela 4.11: Coeficientes angulares das interpolações lineares e limitações das regiões LB e HB

α_{LB}	α_{HB}	Comportamento de transição
NaN	2.1	? - Corpo

Tabela 4.12: Parâmetros extraídos da Simulação 6. NaN refere-se a impossibilidade de extração do parâmetro

$N_A [cm^{-3}]$	$ \phi_{inj} [eV]$	$V_{bi} [V]$	$ \phi_{ext} [eV]$
$< 10^{13}$	< 0.3	1.2	1.2

Na tabela 4.11, observa-se que no campo relativo ao comportamento de transição, não é possível determinar a limitação para baixas tensões. Isso se deve ao fato da Simulação 6, para baixas tensões, já partir de uma região de transição que não define um comportamento específico.

Por se tratar de uma SCLC, a Simulação 6 apresenta dopagens baixas quando comparadas às cargas injetadas pelos contatos. Por esse motivo a dopagem foi considerada pequena. No escopo deste trabalho, baseado em resultados computacionais, baixas dopagens podem ser consideradas como $N_A < 10^{13} cm^{-3}$.

A barreira de injeção foi considerada pequena por se tratar de uma SCLC. O valor indicado em

4.12 foi escolhido baseado em resultados computacionais. Barreiras no intervalo $\phi_{inj} < 0.3\text{eV}$, para as condições desse trabalho, são consideradas baixas e, por vezes, desprezíveis.

A barreira de extração foi calculada considerando um valor mínimo $\phi_{inj=0\text{eV}}$ para a barreira de injeção.

4.3.7 Extração de parâmetros na Simulação 7

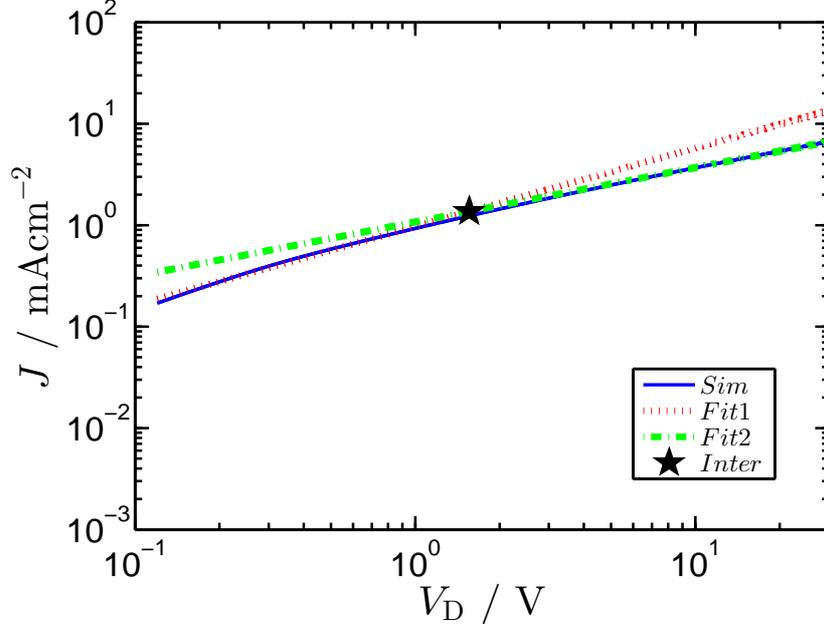


Figura 4.34: Interpolações lineares para altas e baixas tensões. A reta de interpolação para altas tensões tem como equação $Y_{HB} = \alpha_{HB}X + K = 0.8X - 3.014$ e a de baixas tensões $Y_{LB} = \alpha_{LB}X + K = 0.5X - 2.968$.

O coeficiente angular α_{LB} supera o coeficiente angular α_{HB} e ambos são sublineares. Ambas regiões de baixas e altas tensões são limitadas pelo contato, porém, não há nenhum tipo de transição mostrada na figura 3.22 que descreva essa situação, portanto, como a tendência da corrente é a saturação, a Simulação 7 como um todo é observada como uma grande região de altas tensões limitada pelo contato (figura 4.35).

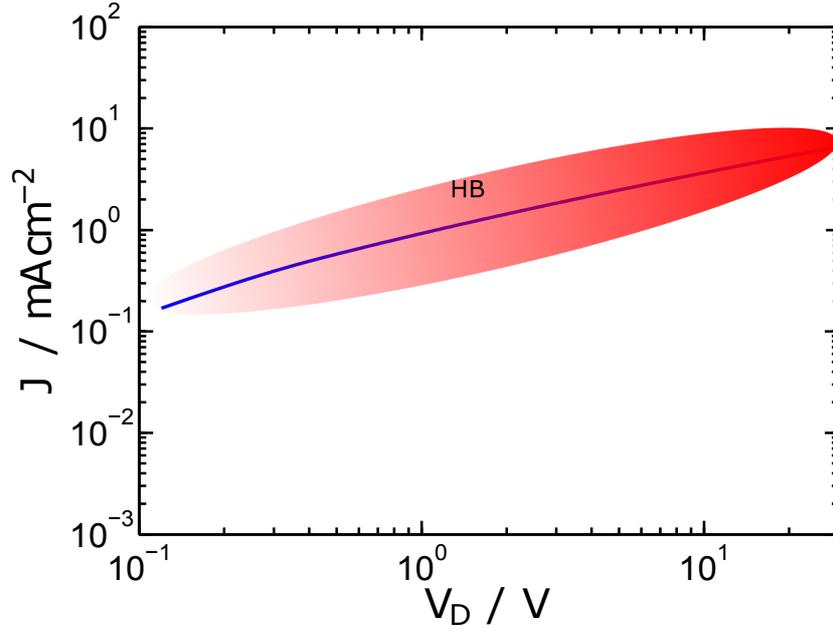


Figura 4.35: Contorno de altas tensões para Simulação7

Utilizando o ponto máximo de densidade de corrente da Simulação 7 J_{\max} e a equação de corrente máxima (3.6) pode ser obtida uma aproximação do numero da cargas de equilíbrio como $p_0 = 4.160 \times 10^{10} \text{cm}^{-3}$. E a partir da equação (3.26) a barreira de injeção é estimada como $\phi_{\text{inj}} = 0.6 \text{eV}$.

Resumidamente, os valores extraídos na Simulação 7 são mostrados nas tabelas 4.13 e 4.14

Tabela 4.13: Coeficientes angulares das interpolações lineares e limitações das regiões LB e HB

α_{LB}	α_{HB}	Comportamento de transição
0.5	0.8	? - Contato

Tabela 4.14: Parâmetros extraídos da Simulação 7. NaN refere-se a impossibilidade de extração do parâmetro respectivo

$N_A [\text{cm}^{-3}]$	$ \phi_{\text{inj}} [\text{eV}]$	$V_{\text{bi}} [\text{V}]$	$ \phi_{\text{ext}} [\text{eV}]$
NaN	0.6	NaN	NaN

A tabela 4.13, no campo relacionado a transição mostra que não é possível determinar o tipo de limitação para a região de baixas tensões. Isso ocorre devido ao fato de que a Simulação 7 consiste apenas em uma grande região de altas tensões.

Não é possível obter uma aproximação para a dopagem. Não há nenhuma região que tem o comportamento regido por uma lei Ôhmica ou SCLC, portanto, não há meios de extrair ou aproximar valores a respeito da dopagem.

Embora há uma aproximação numérica para barreira de injeção na tabela 4.14, não é possível determinar a barreira de extração, pois, não houve meios de extrair a tensão interna V_{bi} .

4.3.8 Extração de parâmetros na Simulação 8

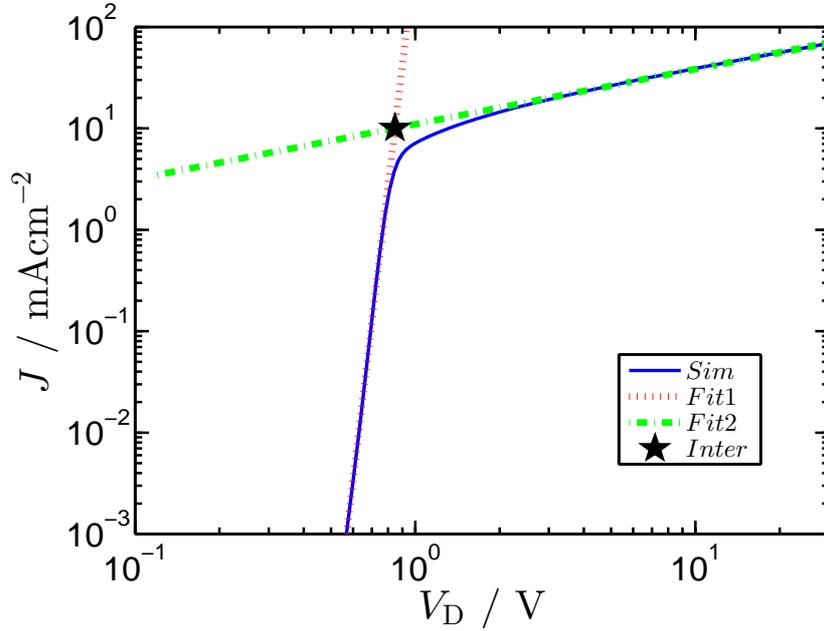


Figura 4.36: Interpolações lineares para altas e baixas tensões. A interseção entre as duas retas de interpolação (LB e HB) é marcada pela estrela em $V_D = 0.8V$

Nos primeiros passos da análise, observa-se que para o intervalo de baixas tensões há predominância do fenômeno de difusão como mostrado na figura 4.13 (e). Para a interpolação linear de altas tensões observa-se reta de equação $Y_{HB} = \alpha_{HB}X + K = 0.5X - 1.959$. A interseção das retas mostrada na figura 4.13 (f) indica uma aproximação para o potencial interno de $V_{bi1} = 0.8V$. Outra aproximação ao potencial interno pode ser indicada pela segunda derivada do perfil $V \times J$

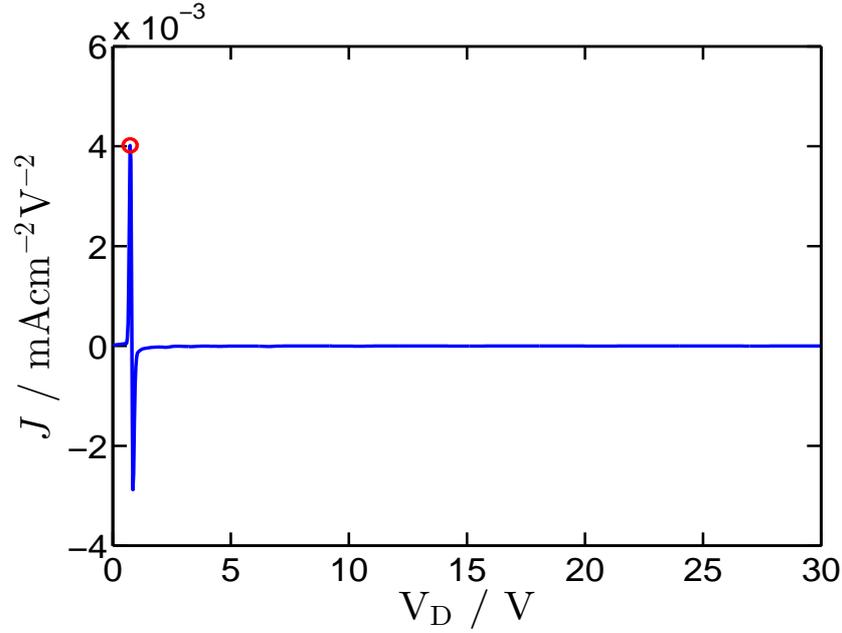


Figura 4.37: Segunda derivada do perfil $V \times j$. O ponto de máximo apresenta o respectivo valor de tensão de $V_D = 0.7V$

A segunda derivada apresenta outra aproximação para tensão interna de $V_{bi2} = 0.7V$.

A barreira de injeção pode ser aproximada a partir do valor máximo de corrente J_{max} . Usando a equação (3.24), $p_{0,Jmax} = 4.297 \times 10^{11} cm^{-3}$. A barreira de injeção é então calculada por meio de (3.26), obtém-se $\phi_{inj,Jmax} = 0.5eV$.

A extração de parâmetros na Simulação 8 pode ser resumida nas tabelas 4.15 e 4.16.

Tabela 4.15: Coeficientes angulares das interpolações lineares e limitações das regiões LB e HB

α_{LB}	α_{HB}	Comportamento de transição
23.2	0.5	Injeção - Contato

Tabela 4.16: Parâmetros extraídos da Simulação 8. I e D referem-se, respectivamente, aos métodos de extração de V_{bi} pela interseção das interpolações lineares e pela derivada segunda.

$N_A [cm^{-3}]$	$ \phi_{inj} [eV]$	$V_{bi} [V]$	$ \phi_{ext} [eV]$
NaN	0.5	0.8(I)/0.7(D)	1.4(I)/1.3(D)

Não foi possível obter nenhuma aproximação ou informação a respeito da dopagem N_A . Como não há nenhuma região da Simulação 8 que se aproxime de uma lei Ôhmica ou SCLC, nenhuma informação pôde ser obtida a respeito do número das cargas.

Como a corrente tende a saturar-se, porém, verifica-se na figura 4.36 que esta ainda tende a crescer, o valor obtido da barreira de injeção constitui um limite superior.

Por terem sido obtidos dois valores aproximativos para a tensão interna V_{bi} , foram também obtidos dois valores para a barreira de extração.

4.4 Validação da metodologia

4.4.1 Comparação entre valores extraídos e simulados

Os valores das variáveis livres usadas nas simulações e os valores extraídos podem ser observados nas tabelas 4.17 e 4.18.

Tabela 4.17: Valores dos parâmetros barreira de injeção ϕ_{inj} , barreira de extração ϕ_{ext} e dopagem N_A usados nas simulações computacionais

Simulação	$N_A[\text{cm}^{-3}]$	ϕ_{inj} [eV]	ϕ_{ext} [eV]
1	0	0	0
2	10^{15}	0	0
3	10^{17}	0.5	0
4	10^{15}	0	1.2
5	0	0.4	0
6	0	0	1.4
7	10^{15}	0.4	0.4
8	10^{17}	0.4	1.2

Tabela 4.18: Valores dos parâmetros barreira de injeção ϕ_{inj} , barreira de extração ϕ_{ext} e dopagem N_A extraídos das simulações computacionais

Simulação	$N_A[\text{cm}^{-3}]$	ϕ_{inj} [eV]	ϕ_{ext} [eV]
1	0.6×10^{13}	<0.3	NaN
2	1.1×10^{15}	<0.3	<0.3
3	NaN	0.6	0
4	6.4×10^{14}	<0.3	0.9
5	NaN	0.6	NaN
6	< $10^{\wedge}\{13\}$	<0.3	1.2
7	NaN	0.6	NaN
8	NaN	0.5	1.3

Os valores relativos à dopagem N_A foram obtidos com boa aproximação para todos os casos. Quando possível extrair valores numéricos de aproximação para a dopagem como nas Simulações 1, 2, 4, a ordem de grandeza mostrou-se a mesma quando comparada aos valores simulados da tabela 4.17. Para os demais casos, a dopagem ou não puderam ser determinados pela metodologia (Simulações 3, 7 e 8) ou então o valor foi dado como baixo (Simulações 5 e 6). Para os casos em que a dopagem foi considerada baixa ($N_A < 10^{13}\text{cm}^{-3}$), apresentaram concordância com os

valores simulados. Nota-se que na extração da dopagem pela comparação com a lei Ôhmica, quanto mais distante o coeficiente angular da reta de interpolação do valor unitário, mais erros são introduzidos, porém, estes não afetam significativamente a ordem de grandeza desde que a tabela sugerida 3.5 seja respeitada.

Os valores obtidos para barreira de injeção, em todos os casos, constituíram um limite superior. Para os casos em que esta pôde ser obtida tanto pela corrente máxima quanto pela corrente mínima, a aproximação pela corrente máxima demonstrou-se mais próxima do valor real. Isso pode ser verificado ao comparar os valores simulados e extraídos da Simulação 3, por exemplo (tabela 4.6). As discrepâncias entre os valores simulados e extraídos para as barreiras de injeção devem-se aos fatos de que, primeiramente, os valores extraídos são efetivos, desconsiderando possíveis dobras nas bandas perto dos contatos e, quando o valor da barreira é aproximado pela corrente máxima, nota-se que a corrente escolhida não é ainda o valor de saturação, o que introduz erros na aproximação.

A tensão interna V_{bi} pôde ser obtida por duas maneiras, por meio da segunda derivada e por meio da interseção das interpolações lineares de altas (HB) e baixas (LB) tensões. Em ambos os casos os valores extraídos mostraram-se subestimado quando comparados com os valores simulados $V_{bi,ext} \leq V_{bi,sim}$. Isso se deve ao fato de o valor extraído ser um valor efetivo já que parte da tensão cai na região imediatamente próxima dos contatos.

4.4.2 Perfis $V \times J$ reconstruídos e simulados

Para o desenvolvimento da metodologia, foram utilizadas leis analíticas que fazem simplificações do comportamento elétrico real. Isso deve constituir também uma fonte de erro na extração dos parâmetros.

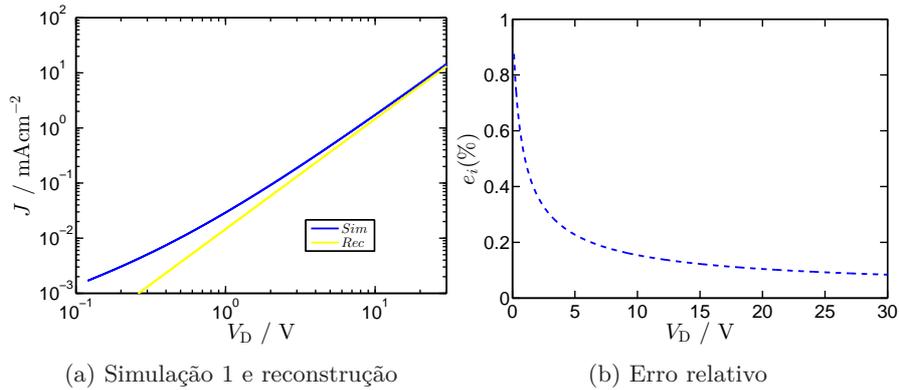


Figura 4.38: (a) Simulação 1 (Sim) e reconstrução analítica (Rec). A reconstrução utiliza os valores originais simulados mostrados nas tabelas 3.2, 3.3 e a equação (2.26). (b) Erro residual ponto a ponto entre a Simulação2 e a reconstrução

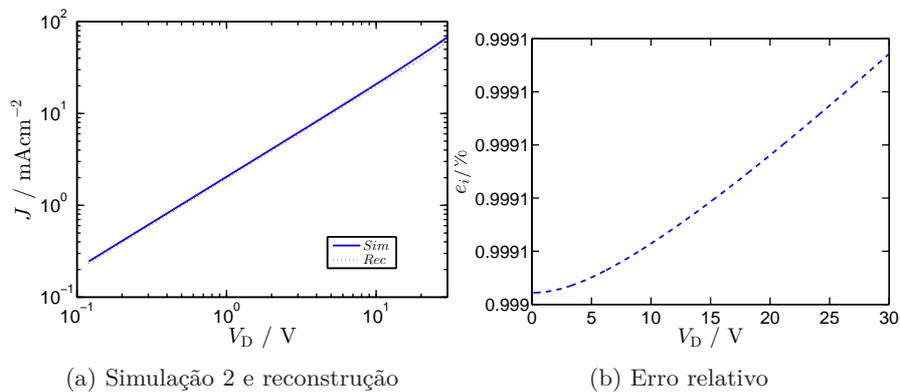


Figura 4.39: (a) Simulação 2 (Sim) e reconstrução (Rec). A reconstrução utiliza os valores originais simulados mostrados nas tabelas 3.2, 3.3, ?? e a equação (2.26). (b) Erro residual ponto a ponto entre a Simulação2 e a reconstrução

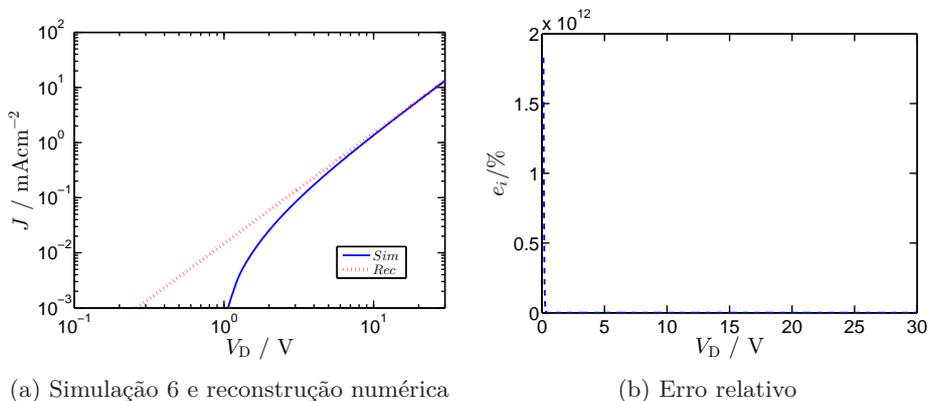


Figura 4.40: (a) Simulação 6 (Sim) e reconstrução numérica (Rec). A reconstrução utiliza os valores originais simulados mostrados nas tabelas 3.2 e 3.3. (b) Erro residual ponto a ponto entre a Simulação6 e a reconstrução numérica

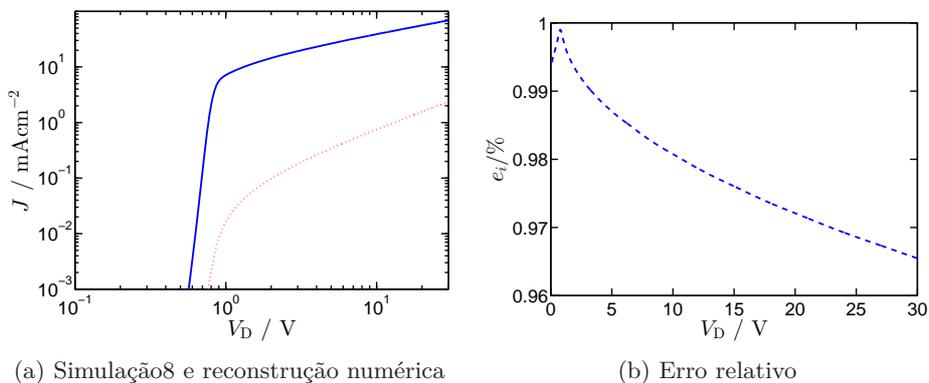


Figura 4.41: (a) Simulação8 (Sim) e reconstrução numérica (Rec). A reconstrução utiliza os valores originais simulados mostrados nas tabelas 3.2, 3.3 e ???. (b) Erro residual ponto a ponto entre a Simulação8 e a reconstrução

Capítulo 5

Conclusões

Esse trabalho focou-se em discutir a análise e extração de parâmetros de curvas $V \times J$ para dispositivos semicondutores orgânicos de arquiteturas M1-i-M2, geradas a partir da equação de Poisson e das equações de Continuidade. Ambas equações foram resolvidas numericamente, portanto, de forma exata. Para a construção desses perfis de comportamento $V \times J$ foram empregadas condições de fronteira de Dirichlet para as interfaces dos contatos metálicos na camada ativa de semicondutor e para o potencial eletrostático. As modelagens levaram em conta apenas a variação de três parâmetros tais quais barreira de injeção ϕ_{inj} , barreira de extração $\phi_{ext} = \phi_{inj} + V_{bi}$ e dopagem N_A , os demais parâmetros foram sugeridos. Os únicos portadores considerados que contribuem representativamente para a corrente elétrica são lacunas.

Para que as simulações pudessem ser analisadas, uma metodologia foi sugerida a partir de leis analíticas. A metodologia dividiu-se em uma parte qualitativa e outra quantitativa. A análise qualitativa comparou os perfis $V \times J$ das simulações em diferentes escalas tais quais linear, semi-logaritmo e duplo logaritmo, com o comportamento de leis analíticas plotadas nas mesmas escalas. A análise quantitativa visou extrair, matematicamente, os parâmetros de interesse ($\phi_{inj}, \phi_{ext}, V_{bi}$ e N_A). Para isso, primeiramente, os perfis $V \times J$ analisados, em duplo logaritmo, foram separados em regiões de baixas tensões, transição e altas tensões. Essa divisão foi feita com base em curvas suaves do tipo joelho presente nos perfis $V \times J$ em duplo logaritmo, que indicaram a divisão entre altas tensões e baixas tensões. Após a divisão dessas regiões, foram feitas interpolações lineares para ambas altas e baixas tensões. Os coeficientes angulares dessas interpolações (α_{HB} e α_{LB} , respectivamente, para altas e baixas tensões) foram comparados aos de leis analíticas pela tabela 3.5. Após essa comparação, as equações de interpolação foram avaliadas com as respectivas leis analíticas aproximadas para a extração de parâmetros. A tensão interna built-in foi extraída por meio da interseção das retas de interpolação, bem como, por meio de picos na segunda derivada numérica dos perfis $V \times J$.

A análise qualitativa demonstrou-se eficiente para uma primeira avaliação. Ao serem observados os perfis $V \times J$ em diferentes escalas e comparados aos perfis de leis analíticas, a comparação da forma gráfica demonstrou-se razoável, como pode ser observado, por exemplo, nas figuras 4.1, 4.3 em que, apenas pela comparação visual dos perfis, foram sugeridas as leis analíticas para posterior

análise quantitativa. Outro aspecto relevante, foi o uso da aproximação em escala semi-logaritmo para lei de difusão de equação 3.15 que demonstrou-se precisa nas análises das Simulações 4 e 8.

A análise quantitativa relacionada a extração de dopagem obteve resultados próximos aos valores escolhidos para simulações TCAD. Para a extração da dopagem N_A , observou-se que, essa pode apenas ser extraída por uma lei Ôhmica e quanto mais distante o coeficiente angular da reta de interpolação linear α_I em relação ao da lei Ôhmica ($\alpha_\Omega = 1$), maiores são os erros introduzidos no valor extraído. Isso pode ser observado nas análises quantitativas para Simulações 1, 2 e 4. A análise quantitativa da Simulação 1 demonstra isso graficamente na figura 4.20. Não foram observados erros apreciáveis relacionados a ordem de grandeza das dopagens. As dopagens consideradas baixas $N_A < 10^{13}\text{cm}^{-3}$ e assim foram consideradas, pois, nas simulações TCAD dopagens menores, a partir desse valor, não refletem significativas variações nos perfis $V \times J$.

A extração do potencial interno built-in apresentou valores semelhantes nos dois modos de extração. Apesar de apresentarem valores semelhantes, na maioria dos resultados, a aproximação obtida pela interseção das retas de interpolação se aproximou mais do valor real empregado no TCAD. Isso pode ser observado nas tabelas 4.16, 4.8 e 4.6. Para valores de tensão built-in positivos as aproximações mostraram-se melhores do que no caso contrário, observado na Simulação 3. Os valores extraídos constituem valores efetivos, acarretando sempre uma subestimação no valor extraído.

As barreiras de injeção extraídas são limites superiores para a barreira real. Para os casos em que utilizou-se a densidade de corrente máxima, observou-se que para nenhuma das situações a densidade de corrente máxima era realmente o valor de saturação, dada ainda a tendência de crescimento da curva. Isso implica em uma extração de limite superior para a barreira de injeção. O raciocínio é análogo para as barreiras extraídas a partir do valor de densidade de corrente mínima. Barreiras de injeção consideradas baixas $\phi_{inj} < 0.3\text{eV}$ e assim foram consideradas devido ao fato de que nas simulações TCAD barreiras menores a partir desse valor puderam ser desprezadas. Os valores extraídos para as barreiras foram todos efetivos, desconsiderando quaisquer efeitos de dobra nas bandas.

Valores para dopagem puderam ser aproximados apenas quando as Simulações apresentaram regiões que podiam ser aproximadas de leis Ôhmicas e SCLC. Valores numéricos foram apenas extraídos quando as interpolações lineares foram avaliadas com a lei Ôhmica. Notou-se que quanto mais o expoente das interpolações distanciava-se do valor unitário (como sugerido na tabela 3.4) maiores eram os erros introduzidos na extração, porém, esses erros não prejudicaram a ordem de grandeza. Todas as dopagens extraídas numericamente pela lei Ôhmica possuem a mesma ordem de grandeza dos valores simulados. Regiões aproximadas de SCLCs sugeriram valores baixos de dopagem $N_A < 10^{13}\text{cm}^{-3}$.

As leis analíticas usadas na análise descritas no capítulo 2 são simplificações das condições reais. O fato de serem simplificações adicionou também erros na análise e, portanto, na extração de parâmetros. As curvas simuladas em conjunto com as leis analíticas que as descrevem e os respectivos erros relativos, podem ser observadas, por exemplo nas figuras 4.40, 4.41, 4.29.

Algumas das simulações puderam ser descritas com alterações nas leis analíticas. A Simulação

4 pôde ser descrita por uma alteração na lei de difusão em que a dopagem passa a ser levada em consideração, dando origem a equação (4.10). A Simulação 1 pôde ser modelada somando-se as leis SCLC e Ôhmica para uma dopagem extraída. Embora na simulação TCAD a Simulação1 não apresentasse dopagem, a hipótese é que a fonte desta dopagem seja proveniente dos contatos. As alterações nas fórmulas analíticas aumentam a aplicabilidade e a extensão de fenômenos que podem ser descritos.

A metodologia proposta não leva em conta uma série de fatores. Análises que incluem, por exemplo, efeitos de armadilhas por TLC não foram incluídas, assim, isso constitui um passo de interesse futuro da metodologia. Outro aspecto importante é que parâmetros como comprimento do canal L , mobilidade μ , permissividade do meio ϵ_r , velocidade de recombinação V_p , área A (e todos os demais apresentados em 3.2) devem ser conhecidos.

Os processos descritos nesse trabalho foram apenas teóricos. Como foram analisadas apenas simulações, essa metodologia não foi aplicada à amostras laboratoriais embora conveniente. Caso utilizada em laboratório a tensão aplicada às amostras deve ser lenta, pois, trata-se de uma análise DC.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] KREBS, F. C. Air stable polymer photovoltaics based on a process free from vacuum steps and fullerenes. *Solar energy materials and solar cells*, Elsevier, v. 92, n. 7, p. 715–726, 2008.
- [2] JØRGENSEN, M.; NORRMAN, K.; KREBS, F. C. Stability/degradation of polymer solar cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, Elsevier, v. 92, n. 7, p. 686–714, 2008.
- [3] ROSCH, R. et al. Investigation of the degradation mechanisms of a variety of organic photovoltaic devices by combination of imaging techniques the isos3 interlaboratory collaboration. *Energy Environmental Science*, Royal Society of Chemistry, v. 5, n. 4, p. 6521–6540, 2012.
- [4] ABDOU, M. S. et al. Interaction of oxygen with conjugated polymers: Charge transfer complex formation with poly (3-alkylthiophenes). *Journal of the American Chemical Society*, ACS Publications, v. 119, n. 19, p. 4518–4524, 1997.
- [5] SEEMANN, A. et al. Reversible and irreversible degradation of organic solar cell performance by oxygen. *Solar Energy*, Elsevier, v. 85, n. 6, p. 1238–1249, 2011.
- [6] KIM, H.; SO, W.; MOON, S. Effect of thermal annealing on the performance of p3ht/pcbm polymer photovoltaic cells. *Journal of the Korean Physical Society*, v. 48, n. 3, p. 441–445, 2006.
- [7] YU, C.-Y.; JEN, T.-H.; CHEN, S.-A. Traps in regioregular poly (3-hexylthiophene) and its blend with [6, 6]-phenyl-c61-butyric acid methyl ester for polymer solar cells. *ACS applied materials & interfaces*, ACS Publications, v. 5, n. 10, p. 4086–4092, 2013.
- [8] JR, W. H. H.; BUCK, J. A. *Eletromagnetismo*. [S.l.]: Bookman Editora, 2013.
- [9] MARK, P.; HELFRICH, W. Space-charge-limited currents in organic crystals. *Journal of Applied Physics*, AIP, v. 33, n. 1, p. 205–215, 1962.
- [10] SEDRA, A. S.; SMITH, K. C. *Microelectronic circuits*. [S.l.]: New York: Oxford University Press, 1998.
- [11] ROSE, A. Space-charge-limited currents in solids. *Physical Review*, APS, v. 97, n. 6, p. 1538, 1955.
- [12] STALLINGA, P. *Electrical Characterization of Organic Electronic Materials and Devices*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2009.

- [13] KAO, K.-C.; HWANG, W. *Electrical transport in solids: with particular reference to organic semiconductors*. [S.l.]: Oxford, 1979.
- [14] MOTT, N. F.; GURNEY, R. W. *Electronic processes in ionic crystals*. Clarendon Press, 1940.
- [15] SCHOTTKY, W. Halbleitertheorie der sperrschicht. *Naturwissenschaften*, Springer, v. 26, n. 52, p. 843–843, 1938.
- [16] PIERRET, R. F. *Semiconductor device fundamentals*. [S.l.]: Pearson Education India, 1996.
- [17] KOSTER, L. J. et al. Device model for the operation of polymer/fullerene bulk heterojunction solar cells. *Physical Review B*, APS, v. 72, n. 8, p. 085–205, 2005.
- [18] BRUYN, P. D. et al. Diffusion-limited current in organic metal-insulator-metal diodes. *Physical review letters*, APS, v. 111, n. 18, p. 186–801, 2013.