

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
INSTITUTO DE FÍSICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MICROELETRÔNICA

**Diodos Schottky de SiC para uso como detectores de  
energia de partículas carregadas**

**IVAN RODRIGO KAUFMANN**

Tese apresentada como requisito parcial para obtenção do  
título de Doutor em Microeletrônica.

Orientador: Prof. Dr. Henri Ivanov Boudinov

**Porto Alegre**

**2017**

# AGRADECIMENTOS

Ao final desta etapa, quero agradecer a todos que de alguma forma contribuíram para a realização deste trabalho.

Ao professor Henri, pela orientação, amizade e paciência durante este período.

Aos meus pais, familiares e amigos, pelo apoio, carinho e momentos de descontração proporcionados.

Aos meus colegas de laboratório: Ana, Charles, Eduardo, Eliasibe, Frâncio, Gabriel, Guilherme, Horácio, Laura, Razera e Sabrina, pelos momentos de descontração e amizade.

A técnico Júlio, do Lab. de Conformação Nanométrica, e Leandro, do laboratório de Microeletrônica. Aos técnicos do laboratório de Implantação Iônica: Agostinho, Borba (*in memori*), Kovalick e Miro. Ao professor Marcelo, pelas deposições por ALD.

Ao povo brasileiro que, na forma de impostos coletados, possibilitou financeiramente a realização deste doutorado.

## RESUMO

Neste trabalho foram investigadas estruturas de diodos Schottky de carbeto de silício (SiC) com potencial uso em detectores de energia de partículas carregadas. Para tanto, foram fabricados diodos Schottky de SiC do tipo Metal-Isolador-Semicondutor (MIS). Uma estrutura MIS é considerada uma vez que o SiC sempre forma em sua superfície uma fina camada de oxicarbeto de silício ( $\text{SiC}_x\text{O}_y$ ) nativo, de difícil remoção por ataques químicos. Foi desenvolvido um modelo modificado da teoria de Emissão Termiônica (TE), de modo a levar em conta o óxido nativo e/ou finas camadas dielétricas inseridas entre metal e semicondutor nas estruturas de diodos Schottky. Foram fabricadas estruturas alumínio/dielétrico/silício para caracterização dos dielétricos utilizados. Foram depositados os dielétricos de  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{HfO}_2$  e  $\text{Al}_2\text{O}_3$  entre o metal Ni e o semicondutor de SiC, variando as espessuras de 1 a 8 nm. As espessuras depositadas foram confirmadas por Elipsometria espectral e Reflectometria de raio X, anteriormente à deposição por *sputtering* do contato Schottky de Ni. Após a deposição e o tratamento térmico do Ni, as estruturas de diodos Schottky foram caracterizadas eletricamente por meio de medidas de Corrente-Tensão (I-V) e Capacitância-Tensão (C-V), variando a temperatura de medida. Foi observado que a presença de uma fina camada dielétrica entre metal e semicondutor aumenta artificialmente a Altura da Barreira Schottky (SBH), diminuindo a corrente reversa quando o diodo é polarizado reversamente. Por meio do modelo modificado da TE, foi calculada uma espessura variando de 0.18 – 0.20 nm para o oxicarbeto de silício presente nos diodos estudados. As SBH reais foram extraídas por meio das medidas de I-V, variando-se a temperatura. Foram obtidos os valores da SBH de 1.39, 1.32 e 1.26 V, para os dielétricos  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{HfO}_2$  e com 1 nm de espessura nominal cada, respectivamente. Para esses, o fator de idealidade calculado ficou próximo de 1. Espessuras de dielétricos acima de 4 nm começam a apresentar características de capacitores Metal-Óxido-Semicondutor e não de diodos Schottky. Por fim, reportamos as estruturas de Ni/ $\text{Al}_2\text{O}_3$ /4H-SiC/Ni e Ni/ $\text{HfO}_2$ /4H-SiC/Ni, com 1 nm de dielétrico depositado, para uso como detector de partículas alfa no experimento de Espectrometria de Retroespalhamento Rutherford (RBS). Ambos os detectores apresentaram corrente reversa menor que  $70 \text{ nA}\cdot\text{cm}^{-2}$  e resolução em energia de 76 keV, para polarização reversa de 40 V.

**Palavras-chave:** Carbeto de Silício, Detector Schottky, Estruturas MIS, I-V, ALD.

## ABSTRACT

In the present work, silicon carbide (SiC) Schottky diodes with potential use in energy particle detectors were investigated. Metal-Insulator-Semiconductor (MIS) SiC Schottky diodes were fabricated. The MIS structures are considered because SiC always forms a thin native silicon oxycarbide ( $\text{SiC}_x\text{O}_y$ ) layer in its surface that is difficult to remove by chemical means. A modified Thermionic Emission theory (TE) was developed to take into account the native oxide and/or thin dielectric layers present between metal and semiconductor in Schottky diodes. Aluminum/dielectric/silicon structures were fabricated for the dielectric characterization.  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{HfO}_2$  and  $\text{Al}_2\text{O}_3$  dielectrics were deposited between Ni and SiC, with thicknesses varying from 1 to 8 nm. The deposited dielectrics layers thicknesses were confirmed by Ellipsometry spectra and X ray reflectometry before deposition of Ni Schottky contacts by sputtering. After Ni deposition and annealing, the Schottky diodes were electrically characterized by Current-Voltage (I-V) and Capacitance-Voltage measurements, varying the temperature. A thin dielectric layer present between metal and semiconductor artificially augments the Schottky Barrier Height (SBH) and lowers the reverse current when the diodes are reverse biased. A 0.18 – 0.20 nm of  $\text{SiC}_x\text{O}_y$  layer was inferred for the diodes using the modified TE. The real SBH was extracted from the I-V measurements and presented values of 1.39, 1.32 and 1.26 V for the diodes with 1 nm of  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$  and  $\text{HfO}_2$ , respectively. For these, an ideality factor close to 1 was calculated. Diodes with thicker (>4 nm) dielectrics layers shows Metal-Oxide-Semiconductor capacitors behavior. Ni/ $\text{Al}_2\text{O}_3$ /4H-SiC/Ni and Ni/ $\text{HfO}_2$ /4H-SiC/Ni structures with 1 nm of dielectric layer thickness were used in Rutherford Backscattering Spectrometry experiments. Both detectors presented reverse current lower than  $70 \text{ nA.cm}^{-2}$  and energy resolution of 76 keV, when applied 40 V reverse bias.

**Keywords:** Silicon Carbide, Schottky Detector, MIS structures, I-V, SBH.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Esquemático de um sistema de detecção de íons/radiação.....	4
Figura 2: Estrutura de politipos de SiC, formados pelo arranjo sequencial dos bilayers fundamentais. Este arranjo sequencial forma as camadas tetraédricas. Os átomos na cor azul representam o carbono, os laranjas o silício. A coluna da direita é uma imagem de SiC realizada com Microscopia Eletrônica de Transmissão de Alta Resolução (HR-TEM). Adaptado de [16]. .....	9
Figura 3: Espectro da altura dos pulsos obtidos pelo detector de 4H-SiC, com partículas alfa oriundas da fonte <sup>241</sup> Am. Adaptado de [21].	12
Figura 4: Diagrama de bandas de energia a) antes e b) depois do contato Schottky para uma junção metal-semicondutor tipo-n. Adaptado de [3].	14
Figura 5: Diagrama de bandas de uma junção Schottky em contato e com tensão a) direta e b) reversa aplicada. Adaptado de [3].	17
Figura 6: Exemplo de uma função Norde plotada em função da tensão direta aplicada. O ponto mínimo da curva nos dá a possibilidade de calcular a SBH, levando em conta resistência em série.	21
Figura 7: Diagrama mostrando todas as etapas de um ciclo completo típico de deposição por ALD. Adaptado de [59].	29
Figura 8: Imagem do reator utilizado para realizar o RTA.	31
Figura 9: Circuito para análise das medidas de Corrente-Tensão (I-V).	33
Figura 10: Curva C-V de alta frequência característica de um capacitor MIS com substrato tipo-p. Aplicando-se uma tensão DC negativa e aumentando-se gradualmente para tensões positivas, o capacitor passa dos estados de acumulação, depleção e inversão forte, da esquerda para a direita, nesta ordem. Adaptado de [3].	36
Figura 11: Variação das cargas em um capacitor MOS tipo-p, em resposta de um sinal AC de alta frequência e uma tensão DC. a) acumulação, b) depleção e c) inversão	37
Figura 12: Esquemático experimental do Elipsômetro.	39
Figura 13: Relação entre o ângulo de incidência ( $\Theta$ ) e o ângulo crítico ( $\Theta_c$ ), para o experimento de XRR.	40
Figura 14: Curva típica de refletividade em função do ângulo de incidência dos raios X e informações que podem ser obtidas da mesma. Adaptado de [66].	41
Figura 15: Representação experimental de RBS. São indicados os ângulos referentes aos parâmetros da geometria experimental ( $\Theta$ e $\phi$ ) e do detector, caracterizado pelo ângulo sólido $\Omega$ .	42
Figura 16: Interface gráfica do BDP, exemplificando a simulação de várias estruturas. Adaptado de [69].	44
Figura 17: Simulação usando o BDP considerando uma estrutura Ni/TiO <sub>2</sub> /SiC <sub>x</sub> O <sub>y</sub> /SiC para extração da barreira efetiva dos dielétricos TiO <sub>2</sub> e SiC <sub>x</sub> O <sub>y</sub> . A simulação foi realizada com tensão de banda plana de 1.54 V aplicada no contato de Ni.	45
Figura 18: Diagrama de fluxo mostrando as etapas de preparação das amostras. A palavra “ann.” quer dizer que um recozimento (processamento térmico) foi realizado.	46

Figura 19: a) Imagem de uma amostra na qual foi depositado Al utilizando máscara mecânica, sobre a face C. b) Curva I-V de três contatos de SiC/Al sem recozimento térmico.....	47
Figura 20: a) Resistência do contato ôhmico de SiC/Ni em função da temperatura de recozimento. São apresentadas duas curvas: a curva azul representa a resistência de contato entre dois contatos primeiros vizinhos (representados por “oo”), enquanto que a curva preta representa a resistência entre dois contatos que possuem outro contato entre os mesmos – segundos vizinhos (representados por “ooo”). b) Curvas I-V de contatos ôhmicos de SiC/Ni recozido diretamente na temperatura de 950°C.....	48
Figura 21: a) Diagrama de bandas para um semiconductor altamente dopado. A barreira de potencial na interface metal-semiconductor é muito fina, favorecendo o processo de tunelamento. b) Simulação da estrutura Ni/4H-SiC, dopado em $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , com tensão de 0 V. ....	49
Figura 22: Curva I-V em uma tentativa de formação de contato Schottky de Al em SiC, antes e após recozimento em 200°C.....	50
Figura 23: Curvas I-V com polarização direta e reversa, variando a temperatura de recozimento para formação do contato Schottky. a) e b) são referentes às medidas do grupo RO, enquanto c) e d) são referentes às medidas do grupo NRO.....	52
Figura 24: SBH em função da temperatura de processamento RTP para 2 diodos de cada um dos grupos RO e NRO. Acima de 300°C, diodos do grupo NRO apresentaram baixa corrente de fuga e alto SBH (pintado de cinza no gráfico).....	53
Figura 25: a) SBH e b) corrente reversa na polarização de -100 V, em função da temperatura de recozimento, para três diodos do grupo NRO.....	54
Figura 26: Diagrama de bandas simulado para estrutura Ni/SiC <sub>x</sub> O <sub>y</sub> /SiC, com polarização direta (3 V), tensão de banda plana (1.566 V) e polarização reversa (-10 V), da esquerda para a direita, respectivamente. 1.1 eV é o valor da barreira efetiva calculada para o SiC <sub>x</sub> O <sub>y</sub> . ....	56
Figura 27: Curvas I-V simuladas para estruturas MIS Schottky de SiC com SBH = 1 V e espessura da camada isoladora de TiO <sub>2</sub> de 0, 10 e 40 angstroms, para diferentes temperaturas. ....	57
Figura 28: SBH aparente em função da temperatura. O ajuste da dependência linear é mostrado para espessuras da camada isoladora ( $\delta$ ) de 0, 10 e 40 angstroms. ....	58
Figura 29: Curva de reflectividade para cada conjunto de amostras. a) TiO <sub>2</sub> /Si, b) HfO <sub>2</sub> /Si e c) Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> /Si.....	61
Figura 30: Curvas I-V dos capacitores MIS de Al/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> /Si-p, Al/HfO <sub>2</sub> /Si-p, Al/TiO <sub>2</sub> /Si-p e Al/SiO <sub>2</sub> /Si-n.....	63
Figura 31: Medidas I-V realizadas com intuito de se verificar a tensão de ruptura dos dielétricos Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> , HfO <sub>2</sub> e SiO <sub>2</sub> . ....	64
Figura 32: Medidas C-V para os capacitores com high-k, nas frequências de 1 MHz, 100 kHz e 10 kHz. ....	66
Figura 33: Medidas C-V ida e volta para as estruturas contendo os dielétricos HfO <sub>2</sub> , Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> e SiO <sub>2</sub> . A seta em vermelho corresponde a medida na “ida” e a seta azul a medida na “volta”.70	70
Figura 34: Diagrama de bandas para os quatro capacitores MIS fabricados, simulando a tensão no eletrodo de porta em $V_G = 0 \text{ V}$ . A estrutura simulada compreendia em Al/dielétrico/Si tipo-p (e Si tipo-n para o capacitor com SiO <sub>2</sub> ). ....	73

Figura 35: Densidade de corrente em função da tensão direta aplicada para o diodo Schottky com 1 nm de TiO <sub>2</sub> , variando a temperatura da medida I-V. ....	75
Figura 36: a) SBH aparente e b) fator de idealidade, em função da temperatura de medida I-V, para os diodos de 1 e 4 nm de TiO <sub>2</sub> e do diodo Schottky de SiC comercial.....	75
Figura 37: Diagrama de bandas simulado para estrutura Ni/TiO <sub>2</sub> /SiC <sub>x</sub> O <sub>y</sub> /SiC, com polarização direta (3 V), tensão de banda plana (1.527 V) e polarização reversa (-10 V), da esquerda para a direita, respectivamente. 0.15 eV é o valor da barreira efetiva do TiO <sub>2</sub> . ....	76
Figura 38: Corrente reversa em função da tensão reversa aplicada, para os diodos com espessuras nominais de 1 e 4 nm de TiO <sub>2</sub> e do diodo comercial. ....	79
Figura 39: Diagrama de bandas simulado para estrutura Ni/SiO <sub>2</sub> /SiC <sub>x</sub> O <sub>y</sub> /SiC, com polarização direta (3 V), tensão de banda plana (1.527 V) e polarização reversa (-10 V), da esquerda para a direita, respectivamente. 2.15 eV é o valor da barreira efetiva do SiO <sub>2</sub> . As espessuras do SiO <sub>2</sub> e SiC <sub>x</sub> O <sub>y</sub> são de 1 nm cada.....	80
Figura 40: a) SBH e b) fator de idealidade em função da temperatura de medida I-V, para dois diodos com espessuras nominais de 1 e 2 nm de SiO <sub>2</sub> . ....	81
Figura 41 a) fator de idealidade e b) SBH em função da temperatura de medida I-V, para três diodos da mesma amostra de espessura nominal de 4 nm de SiO <sub>2</sub> .....	82
Figura 42: a) SBH e b) fator de idealidade em função da temperatura de medida I-V, para dois diodos da mesma amostra com espessura nominal de 8 nm de SiO <sub>2</sub> . ....	82
Figura 43: Diagrama de bandas simulado para estrutura Ni/HfO <sub>2</sub> /SiC <sub>x</sub> O <sub>y</sub> /SiC, com polarização direta (3 V), tensão de banda plana (1.527 V) e polarização reversa (-10 V), da esquerda para a direita, respectivamente. 0.43 eV é o valor da barreira efetiva do HfO <sub>2</sub> . ....	83
Figura 44: a) SBH b) e fator de idealidade em função da temperatura de medida I-V, para dois diodos com espessura nominal de 1 nm de HfO <sub>2</sub> . ....	84
Figura 45: Corrente reversa em função da tensão reversa aplicada no diodo 1 (D1) com 1 nm de HfO <sub>2</sub> depositado, para as temperaturas medidas variando de 297 a 373 K.....	85
Figura 46: SBH a) e fator de idealidade b) em função da temperatura de medida I-V, para dois diodos com espessura nominal de 2 nm de HfO <sub>2</sub> . ....	86
Figura 47: SBH a) e fator de idealidade b) em função da temperatura de medida I-V, para dois diodos com espessura nominal de 4 nm de HfO <sub>2</sub> . ....	86
Figura 48: SBH obtida por análise C-V-T para três diodos com espessuras nominais de 1, 2 e 4 nm de HfO <sub>2</sub> .....	88
Figura 49: Diagrama de bandas simulado para estrutura Ni/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> /SiC <sub>x</sub> O <sub>y</sub> /SiC, com polarização direta (3 V), tensão de banda plana (1.527 V) e polarização reversa (-10 V), da esquerda para a direita, respectivamente. 1.8 eV é o valor da barreira efetiva do Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> . ....	89
Figura 50: SBH aparente como função das curvas I-V medidas em diferentes temperaturas, para os diodos com 1, 2 e 4 nm de Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> entre o Ni e SiC. As linhas vermelhas representam o ajuste linear realizado para cada um dos diodos, para extração da SBH real extrapolada para 0 K.....	90
Figura 51: Fator de idealidade $\eta$ como função das medidas I-V em diferentes temperaturas, para cada um dos diodos com 1, 2 e 4 nm de Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> entre Ni e SiC. ....	91

Figura 52: Corrente reversa medida na temperatura ambiente (297 K) para os diodos Schottky com 1, 2 e 4 nm de Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> .	92
Figura 53: Estrutura Ni/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> /SiC <sub>x</sub> O <sub>y</sub> /4H-SiC simulada com o programa Diagrama de Bandas, aplicando tensão de banda plana.	93
Figura 54: Visualização da secção transversal da estrutura Schottky de Ni/(Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> ou HfO <sub>2</sub> )/SiC <sub>x</sub> O <sub>y</sub> /4H-SiC.	94
Figura 55: SBH aparente em função da temperatura das medidas I-V para as amostras Ni/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> /4H-SiC e Ni/HfO <sub>2</sub> /4H-SiC.	95
Figura 56: Densidade de corrente reversa em função da tensão reversa aplicada, para as estruturas de detectores Ni/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> /4H-SiC, Ni/HfO <sub>2</sub> /4H-SiC e detector de Si comercial ORTEC.	96
Figura 57: Visão da secção transversal do encapsulamento das estruturas Ni/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> /4H-SiC e Ni/HfO <sub>2</sub> /4H-SiC, para posterior montagem no experimento de RBS. Os detectores são acoplados à eletrônica por meio de um conector microdot. Em cinza é representado partes que compõem a estrutura metálica do detector, em preto são representados os isoladores e em azul a estrutura da amostra da Figura 54.	97
Figura 58: Capacitância em função da polarização reversa aplicada, para o detector comercial ORTEC e para os detectores experimentais de Ni/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> /4H-SiC e Ni/HfO <sub>2</sub> /4H-SiC.	97
Figura 59: Distribuição das alfas repousando dentro da camada epitaxial de 4H-SiC (perfil de implantação), para as quatro energias das partículas alfa corrigidas pelo fator cinemático do Au, utilizadas no experimento de RBS.	99
Figura 60: Porcentagem das partículas alfa repousadas internamente na camada de depleção criada a partir da tensão reversa aplicada, para cada uma das energias das partículas alfa.	101
Figura 61: Curvas de ionização de Bragg, para cada uma das energias simuladas.	102
Figura 62: Energia depositada internamente à camada de depleção, obtida a partir da tensão reversa aplicada na estrutura Ni/4H-SiC.	103
Figura 63: Espectro de RBS coletado pelo detector Si ORTEC para a amostra de Au/Si, nas energias de 1, 1.5 e 2 MeV das partículas alfa. Os pontos formam o espectro experimental e as linhas vermelhas são as simulações realizadas pelo programa SIMNRA.	104
Figura 64: Retas de calibração para obtenção dos valores de offset e energia por canal, para o detector Si ORTEC e o detector experimental Ni/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> /SiC <sub>x</sub> O <sub>y</sub> /4H-SiC.	105
Figura 65: Espectro de RBS coletado pelo detector experimental de Ni/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> /4H-SiC, para a amostra de Au/Si, nas energias de 1, 1.5 e 2 MeV das partículas alfa. Os pontos formam o espectro experimental e as linhas vermelhas são as simulações realizadas pelo programa SIMNRA.	106
Figura 66: Retas de calibração para obtenção dos valores de offset e energia por canal, para o detector Si ORTEC e o detector experimental Ni/HfO <sub>2</sub> /SiC <sub>x</sub> O <sub>y</sub> /4H-SiC, polarizados em 40 V.	107
Figura 67: Espectro de RBS coletado pelo a) detector comercial ORTEC de Si e para o b) detector experimental de Ni/HfO <sub>2</sub> /4H-SiC, para a amostra de Au/Si, nas energias de 1, 1.5, 2 e 2.5 MeV das partículas alfa. Ambos os detectores foram polarizados reversamente em 40 V. Os pontos formam o espectro experimental e as linhas vermelhas são as simulações realizadas pelo programa SIMNRA.	109



Figura 68: Espectros de RBS para as energias de a) 923 keV e b) 1385 keV, na região do ouro, variando a tensão de polarização reversa do detector Ni/HfO<sub>2</sub>/4H-SiC de 5 à 40 V. "Rp" faz referência ao alcance médio das partículas alfa no detector para cada energia. A tensão indicada em vermelho na parte superior dos gráficos indica a largura da camada de depleção necessária para a coleta dos pares e-h. .... 110

Figura 69: Espectros de RBS para as energias de a) 1846 keV e b) 2308 keV, na região do ouro, variando a tensão de polarização reversa do detector Ni/HfO<sub>2</sub>/4H-SiC. "Rp" faz referência ao alcance médio das partículas alfa no detector para cada energia. A tensão indicada em vermelho na parte superior dos gráficos indica a largura da camada de depleção necessária para a coleta dos pares e-h. .... 111

Figura 70: Resolução em energia, em função da tensão reversa de polarização do detector de Ni/HfO<sub>2</sub>/4H-SiC, obtidos a partir das simulações SIMNRA das Figura 68 e Figura 69. .... 112

# LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Alcance médio da interação da radiação em detectores. O alcance médio possui variações dependendo do material a ser usado no detector. Adaptado de [2].	2
Tabela 2: Comparação das propriedades de alguns materiais empregados na detecção de radiação. D: diamante, Si: silício, Ge: germânio, GaAs: arseneto de gálio, CdTe: telureto de cádmio, 4H-SiC: carbeto de silício. Adaptado de [1].	7
Tabela 3: Valores da altura da barreira Schottky (SBH) teóricos e experimentais de diferentes metais com Si e 4H-SiC, tipo n e p. Todos os valores são dados em Volts. Os cálculos teóricos foram realizados utilizando as seguintes informações: $\chi_{Si} = 4.15$ V, $\chi_{SiC} = 3.17$ V, $E_g(Si) = 1.12$ V e $E_g(SiC) = 3.27$ V. As referências são dadas por: * = [34], <sup>a</sup> = [35], <sup>b</sup> = [36], <sup>c</sup> = [37]. SBH experimentais para 4H-SiC tipo-p são escassas na literatura.	16
Tabela 4: Valores da barreira efetiva de alguns dielétricos utilizados neste trabalho de doutorado.	45
Tabela 5: Valores de espessura e rugosidade dos dielétricos depositados por ALD sobre Si, obtidos pela técnica de Reflectometria de raio X.	60
Tabela 6: Valores de espessura e índices de refração obtidos pela técnica de Elipsometria Espectral.	62
Tabela 7: Comparação dos valores de espessura medidos por Elipsometria Espectral e Reflectividade de raio X.	62
Tabela 8: Grandezas físicas obtidas por meio das curvas I-V, calculadas a partir das Figura 30 e Figura 31.	64
Tabela 9: Reatância capacitiva e resistência efetiva para os capacitores MIS high-k. Utilizou-se $f = 1$ MHz para o cálculo $X_c$ do capacitor com $Al_2O_3$ e $HfO_2$ e $f = 10$ kHz para $TiO_2$ .	65
Tabela 10: Resumo dos resultados obtidos a partir das medidas C-V para os três diferentes high-k, nas frequências de 1 MHz, 100 kHz e 10 kHz.	67
Tabela 11: Comparação dos valores de constantes dielétricas high-k.	68
Tabela 12: Valores de offset para banda de condução (CB) e de valência (CV) para os dielétricos caracterizados por medidas C-V.	71
Tabela 13: Comparação entre as grandezas físicas dos quatro capacitores MOS fabricados.	72
Tabela 14: SBH real e espessura dos isoladores considerando uma ou duas camadas entre metal e semiconductor.	78
Tabela 15: SBH real e espessuras do $SiC_xO_y$ e $HfO_2$ depositado, calculados pela equação (45).	87
Tabela 16: Energias do feixe de partículas alfa que chegam ao detector ( $E_0 * K_{Au}$ ), suas projeções ( $R_p$ ) e o straggle das projeções, calculado através do programa SRIM. A última coluna indica a tensão mínima necessária para abertura da camada de depleção.	100
Tabela 17: Tensão reversa aplicada e a largura da camada de depleção W correspondente.	100

# LISTA DE SÍMBOLOS

$e-h$	par elétron-lacuna
$m^*$	massa efetiva do elétron
$\tau_{sc}$	tempo de espalhamento
$\mu$	mobilidade
$q$	carga do elétron
$E_0$	nível do vácuo
$E_C$	nível da banda de condução
$E_F$	nível de energia de Fermi
$E_V$	nível da banda de valência
$\Phi_m$	função trabalho do metal
$\Phi_S$	função trabalho do semiconductor
$\chi_S$	afinidade eletrônica do semiconductor
$V_{bi}$	potencial <i>built-in</i>
$\Phi_B$ OU $\Phi_{SBH}$	altura da barreira Schottky
$k$	constante de Boltzmann ( $8.62 \times 10^{-5}$ ev.k <sup>-1</sup> )
$N_C$	densidade de estados no fundo da banda de condução
$N_D$	dopagem do semiconductor
$V$	tensão aplicada
$J$	densidade de corrente
$A^*$	constante de Richardson
$T$	temperatura
$\eta$	fator de idealidade
$J_S$	densidade de corrente de saturação
$I_S$	corrente de saturação
$R_S$	resistência em série
$\zeta$	barreira efetiva da camada interfacial dielétrica
$\delta$	espessura efetiva da camada interfacial dielétrica

$C$	capacitância
$C_{ox}$	capacitância total do óxido
$C_s$	capacitância total do semicondutor
$Q_m$	densidade de carga no metal
$Q_d$	carga da camada de depleção
$W$	espessura da camada de depleção
$\epsilon_s$	constante dielétrica relativa do semicondutor
$\Delta\phi$	abaixamento da barreira Schottky
$n$	índice de refração
$k$	índice de absorção
$\psi$	amplitude
$\Delta$	diferença de fase
$\lambda$	comprimento de onda
$\theta$	ângulo de incidência
$\theta_c$	ângulo crítico
$E_0$	energia inicial da partícula alfa
$E_f$	energia final da partícula alfa
$K$	fator cinemático
$\rho$	resistividade elétrica
$A$	área
$t_{ox}$	espessura do óxido
$Q_{eff}$	carga efetiva no óxido
$V_t$	tensão de limiar
$\epsilon_{high-k}$	constante dielétrica de high-k
$Q_{ot}$	carga aprisionada no óxido
$R_p$	projeção média dos íons

# SUMÁRIO

AGRADECIMENTOS .....	I
RESUMO.....	II
ABSTRACT.....	III
LISTA DE FIGURAS.....	IV
LISTA DE TABELAS.....	IX
LISTA DE SÍMBOLOS.....	X
SUMÁRIO.....	XII
<b>1. Introdução .....</b>	<b>1</b>
<b>2. Diodo Schottky como detector .....</b>	<b>4</b>
2.1 Detectores de barreira de superfície .....	4
2.2 SiC para uso em detectores .....	6
2.3 Modelo teórico de emissão termiônica .....	13
2.4 Métodos de extração de parâmetros de diodos Schottky .....	19
2.5 Emissão termiônica modificada para estrutura Metal-Isolador-Semicondutor ...	23
<b>3. Proposta de trabalho .....</b>	<b>25</b>
<b>4. Materiais e métodos .....</b>	<b>26</b>
4.1 Limpeza das lâminas de SiC .....	26
4.2 Deposição das camadas dielétricas e metálicas .....	27
4.2.1 Deposição por Sputtering .....	27
4.2.2 Deposição por <i>Atomic Layer Deposition (ALD)</i> .....	28
4.2.3 Evaporação térmica de Alumínio .....	30
4.3 Tratamento térmico em forno rápido (RTP).....	30
4.4 Técnicas de caracterização das amostras .....	32
4.4.1 Medidas de Corrente-Tensão (I-V).....	32
4.4.2 Medida C-V de diodo Schottky .....	33
4.4.3 Medidas C-V de alta frequência de capacitor MIS.....	35
4.4.4 Elipsometria espectral.....	37
4.4.5 Reflectometria de Raio X.....	39
4.4.6 Espectrometria de Retroespalhamento Rutherford (RBS) .....	42

4.5	<b>Simulação com o programa <i>Energy Band Diagram</i></b> .....	43
<b>5.</b>	<b>Resultados e discussão</b> .....	46
5.1	<b>Resultados iniciais</b> .....	47
5.1.1	<b>Contatos ôhmicos no SiC</b> .....	47
5.1.2	<b>Contato Schottky no SiC (estrutura Ni/SiC/Ni)</b> .....	50
5.1.3	<b>Simulação de estruturas Metal-Isolador-Semicondutor</b> .....	56
5.2	<b>Caracterização das camadas dielétricas depositadas por ALD</b> .....	58
5.2.1	<b>Caracterização dos dielétricos depositados por XRR e Elipsometria espectral</b>	59
5.2.2	<b>Caracterização dos capacitores MIS por I-V e C-V</b> .....	62
5.3	<b>Diodos Schottky com estruturas MIS</b> .....	74
5.3.1	<b>Estruturas Ni/TiO<sub>2</sub>/SiC/Ni</b> .....	74
5.3.2	<b>Estruturas Ni/SiO<sub>2</sub>/SiC/Ni</b> .....	79
5.3.3	<b>Estruturas Ni/HfO<sub>2</sub>/SiC/Ni</b> .....	83
5.3.4	<b>Estruturas Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/SiC/Ni</b> .....	88
5.4	<b>Estruturas MIS para detector de partículas alfa</b> .....	92
5.4.1	<b>Características Elétricas das estruturas para detector</b> .....	94
5.4.2	<b>Encapsulamento e montagem experimental no RBS</b> .....	96
5.4.3	<b>Simulações SRIM</b> .....	98
5.4.4	<b>Aquisição e análise dos dados coletados para o detector Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/4H-SiC</b> .....	103
5.4.5	<b>Aquisição e análise dos dados coletados para o detector Ni/HfO<sub>2</sub>/4H-SiC</b> .....	106
<b>6.</b>	<b>Conclusões</b> .....	113
<b>7.</b>	<b>Referências</b> .....	117
<b>8.</b>	<b>Publicações do autor relacionados ao doutorado</b> .....	126
8.1	<b>Artigos Completos Publicados em Revistas</b> .....	126
8.2	<b>Artigos Completos Publicados em Congressos</b> .....	126
8.3	<b>Resumos Publicados em Anais de Congressos</b> .....	126

# 1. Introdução

Vários equipamentos para detecção de radiação estão presentes no nosso dia-a-dia. Um *smartphone* moderno conta com um detector de luminosidade que ajusta automaticamente o brilho da tela para o grau adequado aos nossos olhos. Já detectores mais complexos são encontrados em laboratórios de pesquisa espalhados pelo mundo, inclusive no espaço, onde a radiação é altamente ionizante. O poder de realizar espectroscopia de radiação, com baixa e alta energia (como raio-X, raios gamas, UV e partículas, tanto carregadas como neutras), tem melhorado consideravelmente nos últimos anos. Isto é de grande importância para inúmeras aplicações, que não incluem somente centros de pesquisas altamente sofisticados, mas também imageamento médico, operação de sistemas industriais de alta pressão e temperatura, segurança nacional e verificação de ameaças, segurança ambiental, entre outros [1].

Entre os tipos de detectores mais empregados estão os detectores de cintilação, de junção p-n e os de barreira de superfície. Porém, quando tratamos de ciência que envolva alta resolução em energia, os detectores de cintilação não possuem uma performance adequada, devido à sua baixa resolução. O caminho de eventos que é seguido em um sistema de detecção com cintiladores é, de maneira geral, ineficiente. Isto se deve ao fato de que, por exemplo, a energia requerida para a produção de um fotoelétron gerado pela detecção de um fóton é da ordem de 100 eV ou mais. Levando em conta o número de fotoelétrons criados a partir de uma interação de radiação de alguns milhares de eV, os detectores cintiladores perdem em performance quando comparados aos outros tipos de detectores.

A operação de qualquer detector basicamente depende da maneira como a radiação interage com o material do detector. No caso dos detectores de estado sólido, este material é um semicondutor. A resposta gerada pelo detector está relacionada com os mecanismos fundamentais pelas quais a radiação interage e perde a sua energia cinética na matéria.

Inicialmente deve-se saber o que será detectado. A Tabela 1 categoriza os quatro tipos de radiação comumente detectados. Nela também é apresentado o alcance médio de interação da radiação com a matéria, que deve ser levado em conta na engenharia de processos para otimização do sinal gerado pelo detector.

Tabela 1: Alcance médio da interação da radiação em detectores. O alcance médio possui variações dependendo do material a ser usado no detector. Adaptado de [2].

		<b>Alcance médio de interação (metros)</b>
<b>Radiação de Partículas Carregadas</b>	<b>Partículas pesadas carregadas</b>	$10^{-5}$
	<b>Elétrons “rápidos”</b>	$10^{-3}$
<b>Radiação não-Carregada</b>	<b>Nêutrons</b>	$10^{-1}$
	<b>Raio-X e raio Gama</b>	$10^{-1}$

A radiação de partículas carregadas, devido à carga elétrica, continuamente interage por meio da força coulombiana com os elétrons presentes no meio em que passa (no caso o semicondutor). Já a radiação neutra não é sujeita a força coulombiana. Este tipo de radiação primeiramente deve interagir com a matéria de modo a produzir uma interação “catastrófica”, ou seja, uma interação na qual altera radicalmente as propriedades da radiação incidente juntamente com o material do meio (frequentemente envolvendo o núcleo dos átomos constituintes da matéria). Nos dois casos, a interação resulta em total ou parcial transferência de energia da radiação incidente para elétrons ou núcleos dos átomos da matéria, ou ainda para partículas carregadas resultantes de uma possível reação nuclear. No caso de detectores, caso a interação da radiação não aconteça dentro do semicondutor, a mesma pode passar completamente pelo volume do semicondutor e não ser detectada.

Atualmente, os melhores detectores em resolução de energia são os que usam semicondutores em sua constituição física. O resultado da interação de uma partícula eletricamente carregada com o semicondutor é a formação de pares elétrons-lacuna (e-h). Este tipo de detector é usualmente chamado de detector de estado sólido.

Carbeto de Silício (SiC) é um material semicondutor com algumas propriedades superiores comparado a outros semicondutores, tais como GaAs, Ge e até mesmo o Si. Algumas dessas características, tais como alto *bandgap*, alta tensão de ruptura, alta velocidade eletrônica de saturação e alto valor de energia de deslocamento atômico, tornam o uso do SiC para detector de radiação uma alternativa atraente, especialmente quando o detector irá atuar em ambiente de alta pressão, temperatura e radiação.

Este trabalho de doutorado teve como objetivo principal a fabricação de um detector de SiC para uso no experimento de RBS (*Rutherford Backscattering Spectrometry*), na detecção de



partículas alfa. De modo a otimizar o detector de SiC, alguns passos de fabricação e de caracterização elétrica devem ser entendidos. Neste trabalho realizamos experimentos utilizando estruturas Schottky do tipo Metal-Isolador-Semicondutor (MIS).

Esta tese está estruturada primeiramente em uma abordagem teórica do SiC para uso como detector de estado sólido, além de ser apresentado o modelo de emissão termiônica tradicional e modificado para estruturas MIS (seção 2). Em seguida são mostrados os materiais e métodos experimentais utilizados para fabricação e caracterização das estruturas propostas (seção 4). Na sequência são apresentados os resultados e discussão dos mesmos (seção 5), na qual também realizamos a construção e caracterização experimental de detectores MIS de SiC, subsequentemente utilizado nos experimentos de RBS. A Seção 6 resume os resultados em forma de conclusões e sugere caminhos para continuação deste trabalho.

## 2. Diodo Schottky como detector

### 2.1 Detectores de barreira de superfície

Em sua maioria, os detectores de barreira de superfície existentes no mercado são de silício (Si). Na Figura 1 temos a representação esquemática de um detector de Si dopado do tipo-n. Na parte superior existe uma camada de metal que forma o contato Schottky, que deve ter uma espessura capaz de retardar o íon (ou radiação) em proporções mínimas. Os detectores usados para partículas alfa com energias de alguns MeV possuem, em geral, uma camada de ouro com espessura em torno de 10-20 nm. Na parte inferior também existe uma camada de metal, mas que forma um contato ôhmico com o semiconductor.

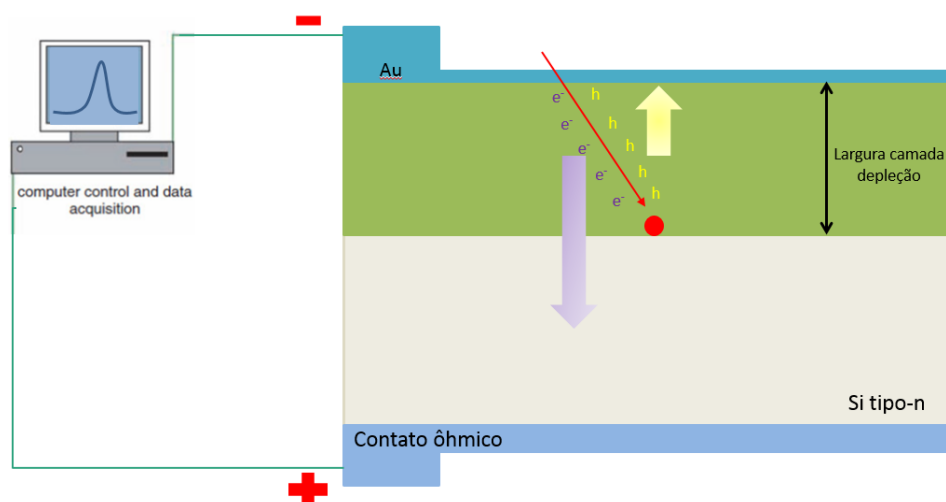


Figura 1: Esquemático de um sistema de detecção de íons/radiação.

O detector é acoplado a um sistema de aquisição de dados que analisa os sinais gerados pela interação dos íons, coletados pelo detector. Para tanto, o detector deve ser polarizado de maneira a criar uma camada de depleção próxima do contato Schottky. No exemplo da Figura 1, uma tensão negativa é aplicada na parte superior e uma tensão positiva na parte inferior, criando assim uma camada de depleção nas proximidades do contato Schottky [3]. Uma vez polarizado desta maneira, o detector está operacionalmente pronto para detecção de íons, como mostrado no exemplo.

De maneira simplificada, um íon penetra no semicondutor até o seu repouso (em relação ao semicondutor), perdendo energia e velocidade devido a interação do íon com a rede cristalina do semicondutor, por meio de forças coulombianas. Nesta trajetória, eventualmente o íon acaba se chocando com os elétrons dos átomos da rede cristalina, gerando pares e-h. A formação dos pares e-h é proporcional à perda de energia dos íons dentro do semicondutor, de modo que os íons com maior energia acabam gerando mais pares e-h. Ao polarizarmos o detector, um campo elétrico é estabelecido. Quando os pares e-h são criados, os mesmos são separados devido ao campo elétrico existente e as cargas são coletadas pelos terminais do detector. Este processo de coleta de cargas acaba gerando um pulso elétrico, que é proporcional a quantidade de pares e-h formados. Logo, quanto maior for a energia do íon (e consequentemente mais pares e-h são formados), maior será a amplitude do pulso gerado. Dessa maneira é possível quantificar a energia dos íons que incidem no detector.

Independente do material semicondutor utilizado no detector, algumas propriedades dos semicondutores são muito importantes para a realização de espectroscopia de alta performance, que incluem alta resolução em energia e alta eficiência de contagem. Algumas dessas características são [1] [2] [4]:

- Alto valor de energia de *bandgap*; a corrente de fuga do detector quando polarizado reversamente é reduzida a valores mínimos ( $\sim$ pA). Isso porque a corrente de fuga acaba diminuindo a performance do detector devido ao alto valor de ruído de operação do mesmo, o que acaba se tornando crucial para resolução em energia quando tratamos de baixas energias de radiação.
- Baixa energia de criação dos pares e-h; assim o número de pares e-h gerados por uma radiação/partícula é razoavelmente grande para garantir um alto valor entre a razão do sinal gerado pelos pares e-h e do sinal de ruído de operação. Esta característica está em conflito com o primeiro, uma vez que a energia de geração dos pares é proporcional a energia de *bandgap*.
- Cristal livre de defeitos, de alta pureza e homogêneo; é requerido para evitar a recombinação dos pares e-h, garantir a coleta integral das cargas geradas e diminuir o ruído de operação. Consequentemente, melhora a resolução em energia.
- Alto comprimento de deriva médio dos portadores gerados; também conhecido como “comprimento de *trapping*”, é o valor de caminho médio da distância que um portador gerado se desloca devido ao campo elétrico criado, antes de ser aprisionado por uma

armadilha (ou *trapping*). Este é um parâmetro importante a ser considerado para a melhora do sinal gerado, e está intimamente ligado ao item anterior.

- Alto valor de deslocamento atômico; alguns tipos de radiação ionizantes (íons pesados) geram defeitos na rede cristalina do semicondutor, tais como vacâncias, átomos intersticiais, pares Frenkel (vacâncias + intersticial) e *antisites*. Estes defeitos são potenciais centros de *trapping*, gerando uma coleta ineficiente de cargas e baixa energia de resolução. Deslocamentos atômicos gerados por partículas beta ou raio-X e gama são de menor significância.
- Alta condutividade térmica; uma maneira de aumentar a durabilidade de um detector de estado sólido é baixando a sua temperatura de operação. Isto requer o uso de materiais com boas propriedades de resfriamento. Ainda, quando o detector é empregado em altas doses de radiações ou ambientes de alta temperatura, a alta condutividade térmica se torna um fator importante para se poder refrigera-lo, preservando sua funcionalidade a longo prazo.

Considerando todas as características abordadas acima, alguns materiais semicondutores aparecem como candidatos a serem utilizados para detecção de radiação ionizante. Em particular, o SiC se sobressai considerando a sua elevada energia de *bandgap* em relação a outros semicondutores (Si, Ge, GaAs...). Além do mais, o SiC mostrou-se capaz de trabalhar em altas temperaturas e em ambientes extremos (de altas doses de radiação) sem variar significativamente suas propriedades físicas e químicas [5] [6] [7] [8]. A seguir, trataremos de algumas propriedades físicas, químicas e elétricas deste material.

## 2.2 SiC para uso em detectores

A fabricação de detectores semicondutores de radiação envolve um determinado número de passos críticos, tais como crescimento do semicondutor, corte, polimento das superfícies, passivação superficial, deposição de metais, recozimentos, encapsulamento e acoplamento elétrico para o devido uso. Todos estes passos devem ser bem controlados, pois a detecção de qualquer radiação/partícula é sutil, onde interferências não-desejadas possuem um papel prejudicial significativo.

Atualmente tem se dado uma considerável atenção aos detectores envolvendo SiC [6] [9] [10] [11]. A Tabela 2 mostra algumas propriedades de materiais semicondutores que são usualmente utilizados para detecção de radiação. Na última coluna podemos observar as características do politipo 4H-SiC. Alguns pontos são interessantes, tais como banda proibida (*bandgap*), tensão de rompimento (*breakdown field*), velocidade de saturação dos elétrons (*saturated electron velocity*) e energia de deslocamento atômico (*threshold displacement energy*). Nestes quesitos, o 4H-SiC apresenta características superiores quando comparado aos outros materiais semicondutores.

Tratando de detecção em ambientes inóspitos (de alta temperatura e radiação), uma das características a ser observada é a energia de deslocamento atômico, onde o SiC apresenta a sua principal vantagem frente aos outros materiais semicondutores apresentados na Tabela 2. Esta característica tem sido fundamental para a realização de pesquisas ao redor do mundo, com uma dupla proposta de identificação das partículas e também do dano induzido pelas mesmas, que tem fundamental importância na degradação de detectores nucleares. O SiC é um ótimo candidato quando levando em conta estas duas propostas [12] [13] [14].

Tabela 2: Comparação das propriedades de alguns materiais empregados na detecção de radiação. D: diamante, Si: silício, Ge: germânio, GaAs: arseneto de gálio, CdTe: telureto de cádmio, 4H-SiC: carbeto de silício. Adaptado de [1].

Property	D	Si	Ge	GaAs	CdTe	4H-SiC
Bandgap (eV)	5.5	1.12	0.67	1.42	1.49	3.27
Relative dielectric constant	5.7	11.9	16	13.1	10	9.7
Breakdown field (MV cm <sup>-1</sup> )	10	0.3	0.1	0.4	0.5	3.0
Density (g cm <sup>-3</sup> )	3.5	2.3	5.33	5.3	5.9	3.2
Atomic number Z	6	14	32	31–33	48–52	14–6
e–h creation energy (eV)	13	3.6	2.95	4.3	4.42	7.78
Saturated electron velocity (10 <sup>7</sup> cm s <sup>-1</sup> ) at 300 K	2.2	1.0	0.6	1.2	1.0	2
Electron mobility (cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> ) at 300 K	1800	1300	3900	8500	1100	800
Hole mobility (cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> ) at 300 K	1200	460	1900	400	100	115
Threshold displacement energy (eV)	40–50	13–20	16–20	8–20	6–8	22–35
Minimum ionizing energy loss (MeV cm <sup>-1</sup> )	4.7	2.7	6	5.6		4.4

SiC também é conhecido pelo alto valor de *bandgap* existente em seus diferentes politipos. Porém, devido a algumas propriedades elétricas dos dispositivos empregados na microeletrônica, a orientação não-isotrópica em respeito ao cristal semicondutor, parâmetros de rede e polarização superficial são de grande importância quando tratamos do SiC para uso

em detectores e na microeletrônica em geral. Logo, um entendimento aprofundado da cristalinidade e terminologia do SiC é necessário.

As diferentes sequências de camadas duplas (*bilayers*) compostas por Si e C é que dão origem ao termo politipo. Cada *bilayer* de Si-C pode ser visto de maneira simplificada como sendo uma camada planar de átomos de Si acima (ou abaixo) de outra camada de C. A cristalinidade do SiC é definida na direção normal ao empilhamento dos *bilayers*. Na Figura 2 temos a representação dos principais politipos que compõem o SiC, bem como os seus *bilayers* fundamentais.

Os politipos mais comuns para o SiC usados na microeletrônica atual são os 3C, 4H e 6H-SiC. Os números 3, 4 e 6 na representação dos politipos representam a quantidade de *bilayers* empilhados até uma nova repetição dos mesmos. Estes números podem ser entendidos como a distância de uma célula unitária (composta pelo empilhamento dos *bilayers*) até ela ser repetida novamente. A terminologia “C” e “H” é referente a estrutura atômica cúbica e hexagonal, respectivamente. Uma informação detalhada sobre a estrutura físico-química dos politipos de SiC, bem como um estudo mais aprofundado do mesmo pode ser obtido na referência [15].

Apesar dos diferentes politipos de SiC diferirem somente no empilhamento de camadas de Si e C, isso acaba afetando completamente as propriedades eletrônicas e ópticas do cristal. Uma das principais características de um semicondutor é o seu *bandgap*, que no caso do SiC varia para os diferentes politipos. Por exemplo, em temperatura de hélio líquido (~4 K), o *bandgap* é de 2.39 eV para o 3C-SiC e 3.3 eV para o 2H-SiC. Já para os politipos 6H e 4H-SiC, o valor é de 3.02 e 3.27, respectivamente [17]. Além disso, propriedades como tensão elétrica de rompimento, variam dependendo da região cristalográfica de interesse, devido a característica não-isotrópica do material. Este efeito é muito mais pronunciado no politipo 6H-SiC do que no 4H-SiC [18].

A escolha para a maioria das aplicações eletrônicas do politipo de 4H-SiC em relação ao politipo 6H-SiC se devem principalmente a dois fatos: 1) maior valor de *bandgap* e 2) melhores propriedades de transporte eletrônico. Este segundo fato vem de um estudo que trata dos valores de massa efetiva para o elétron medidos por meio da técnica de ressonância ciclôtrônica com campo magnético orientado ao longo da direção do eixo cristalino do SiC [1] [19]. Nesse estudo, a massa efetiva do elétron ( $m^*$ ) ao longo da

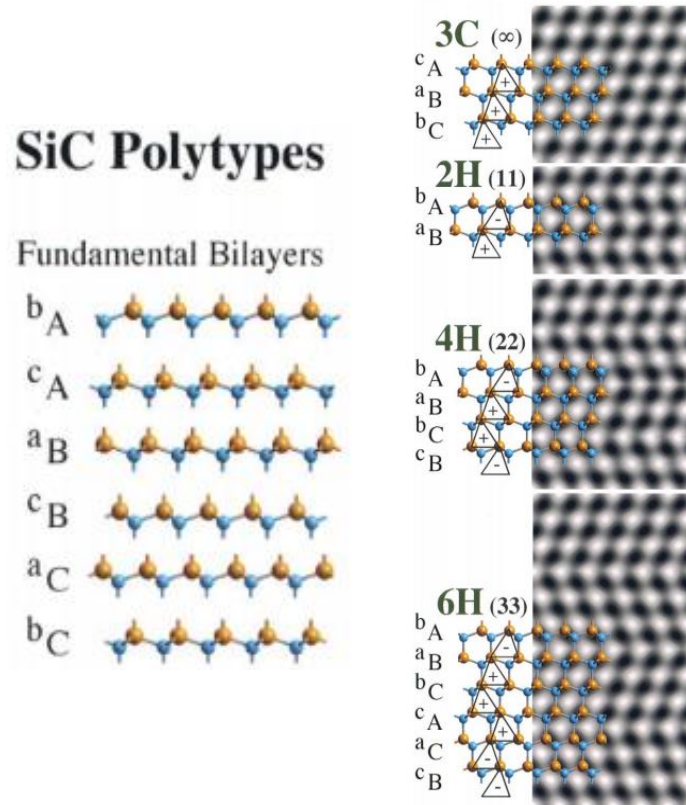


Figura 2: Estrutura de politipos de SiC, formados pelo arranjo sequencial dos *bilayers* fundamentais. Este arranjo sequencial forma as camadas tetraédricas. Os átomos na cor azul representam o carbono, os laranjas o silício. A coluna da direita é uma imagem de SiC realizada com Microscopia Eletrônica de Transmissão de Alta Resolução (HR-TEM). Adaptado de [16].

direção cristalina é praticamente uma ordem de grandeza menor para o politipo 4H comparado com o 6H. A massa efetiva do elétron, juntamente com o alto tempo de espalhamento ( $\tau_{sc}$ ) do politipo 4H, nos dá uma enorme vantagem em relação ao 6H, aumentando a mobilidade, dada pela equação [20]:

$$\mu = \frac{e \tau_{sc}}{m^*} \quad (1)$$

onde  $e$  é a carga do elétron.

Por muito tempo e inclusive até hoje, o Si foi o “carro-chefe” da maioria dos dispositivos microeletrônicos. Porém, o 4H-SiC apresenta as vantagens mencionadas anteriormente e por isso uma considerável atenção tem se dado a detectores envolvendo este semiconductor [6] [9] [10] [11]. Ademais, o 4H-SiC se mostra superior em suas propriedades elétricas e estruturais, considerando três situações, que são:

1. *Detector operando em alta temperatura.* O alto valor de *bandgap* e baixo valor intrínseco da concentração de portadores permitem o SiC manter suas propriedades elétricas mesmo em ambientes de alta temperatura (>300°C). Em altas temperaturas de operação, o “ruído” relacionado a corrente do detector, quando reversamente polarizado, é baixo suficiente para seu devido uso [21].
2. *Detector operando com alto campo elétrico.* Algumas aplicações que envolvem altas energias ionizantes, a camada de depleção criada (quando o detector é reversamente polarizado) deve garantir uma região ativa larga o suficiente para coletar todas as cargas geradas pela radiação ionizante. Caso não seja possível uma larga camada de depleção, o sinal gerado por uma radiação ionizante é pequeno e a resolução do detector fica comprometida. Devido ao alto valor de tensão de ruptura do 4H-SiC (3 MV cm<sup>-1</sup>), o detector pode operar com altas tensões reversas. Esta característica, somada a uma boa qualidade da camada epitaxial de SiC (que proporciona baixa densidade de centros de *trapping* e centros de recombinação), um alto valor de caminho médio de deriva de cargas pode ser atingido.
3. *Detector operando em ambientes inóspitos.* Detectores de radiação operando em ambientes hostis são cada vez mais empregados. Algumas dessas aplicações são na área de controle nuclear, satélites e em experimentos físicos de altas energias. Nessas aplicações, a dose de energia depositada no detector é muito grande, sendo necessário um aparato de detecção capaz de resistir a tais doses. Um parâmetro relevante de um detector é a sua resistência à radiação. Uma alta resistência à radiação garante que o semiconductor empregado para tal fim não é (ou muito pouco) afetado pela sua exposição à radiação nuclear. Materiais com alto valor de deslocamento atômico, como o SiC, podem ser empregados para esse tipo de uso.

Como a camada de depleção deve suportar altas tensões de ruptura (até centenas de volts), a concentração de dopantes deve ser baixa, mas o substrato não depletado deve ter alta concentração de dopantes para diminuir a resistência em série do dispositivo. Por causa disso, a estrutura deve ter uma camada epitaxial com baixa concentração de dopagem sobre um substrato com alta concentração de dopagem. Camadas crescidas epitaxialmente são mais controladas e reproduzíveis. Com isso, é possível se obter propriedades de detecção superiores, uma vez que os defeitos na rede epitaxial cristalina são muito bem controlados [22] [23] [24].

Dois parâmetros importantes para a abertura da camada de depleção são a concentração de dopagem e a espessura da camada epitaxial. Com uma baixa dopagem da camada epitaxial, é



possível criar uma zona de depleção com tensões menores. É importante se ter o cuidado para garantir uma total abertura da camada de depleção, de modo que a camada seja igual ou maior do que o deslocamento do íon até sua completa parada dentro do semiconductor. A completa abertura também contribui para uma capacitância menor do detector, melhorando assim o tempo de processamento do sinal gerado pelos pares e-h.

O semiconductor 4H-SiC para detectores de partículas foi estudado pela primeira vez por Rogalla *et al* [22] e Dubbs *et al* [25]. Rogalla *et al* testaram o polítipo 4H-SiC semi-isolado, com contatos ôhmicos em ambas as faces. Uma fonte  $^{90}\text{Sr}$ -beta foi utilizada para testar o dispositivo detector. Os resultados mostraram que os espectros de sinal e de ruído foram bem resolvidos, porém a eficiência da coleta de carga (*charge collection efficiency*, CCE) foi de apenas 12% e o sinal adquirido teve decaimento exponencial com uma constante de tempo de 14 min. Estes resultados indicam a presença de defeitos e/ou impurezas no SiC, atuando como centros de aprisionamento e espalhamento para ambos os portadores. A partir de então, consideráveis avanços foram realizados de modo a se melhorar as propriedades cristalográficas e elétricas do SiC, como por exemplo, a diminuição da concentração de dopantes no SiC crescido epitaxialmente, que forma o contato Schottky. Atualmente o estado da arte do SiC epitaxial trabalha com valor de dopagem na ordem de  $10^{14} \text{ cm}^{-3}$  [21]. Ademais, estudos foram realizados investigando os defeitos causados por radiação no SiC [26] [27] [28]. Estes estudos indicam que à temperatura ambiente, os danos causados no SiC praticamente independem do tipo de radiação ionizante. A irradiação no SiC basicamente aumenta a concentração de defeitos já existentes no material, e se mostra mais pronunciado para prótons e nêutrons.

A contínua melhora das propriedades cristalográficas do SiC com baixa dopagem permitiu a detecção de qualquer tipo de radiação ionizante em ambientes inóspitos de radiação, temperatura e meios líquidos agressivos. Estes detectores especializados podem ser utilizados em sistemas de monitoramento em meios ácidos e na determinação do campo de radiação de raios X e gama, por exemplo. Em particular, a baixa densidade de corrente reversa de junções Schottky de SiC permitiu a fabricação de detectores de raios X, com energia de resolução abaixo de 200 eV, mesmo operando em alta temperatura (+100°C) [29].

Detetores de SiC se mostraram excelentes detectores de partículas alfa [30] e de nêutrons, quando acoplados com camadas de conversão nêutrons-alfa [31]. Chaudhuri *et al* [21] reportaram um detector de SiC para partículas alfa com os melhores resultados encontrados na literatura até então. O contato Schottky foi fabricado sobre uma camada epitaxial com dopagem de  $2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ , utilizando 10 nm de Ni. O contato ôhmico na face oposta foi realizado com 100 nm de Ni. A altura da barreira Schottky foi calculada em 1.6 V e o detector apresentou uma corrente reversa de 3.5 pA na tensão reversa de operação de -90 V. A Figura 3 mostra o espectro da altura dos pulsos adquiridos pela fonte  $^{241}\text{Am}$ , com o detector otimizado para operação reversa. Observam-se três picos principais, localizados nas energias 5353, 5407 e 5449 keV, referente às partículas alfa emitidas pela fonte e que perderam um pouco da energia devido a uma combinação de fatores (absorção própria da fonte, espalhamento na entrada do detector, perda parcial da carga devido a presença de defeitos...). As energias das partículas alfa representadas na figura são referentes as energias emitidas pela fonte de  $^{241}\text{Am}$ . O pico de maior energia (5486 keV) apresentou uma largura à meia altura (FWHM) de 16.2 keV. Essa FWHM, dividida pela energia do pico, nos dá a informação sobre a resolução em energia, calculada em 0.29%.

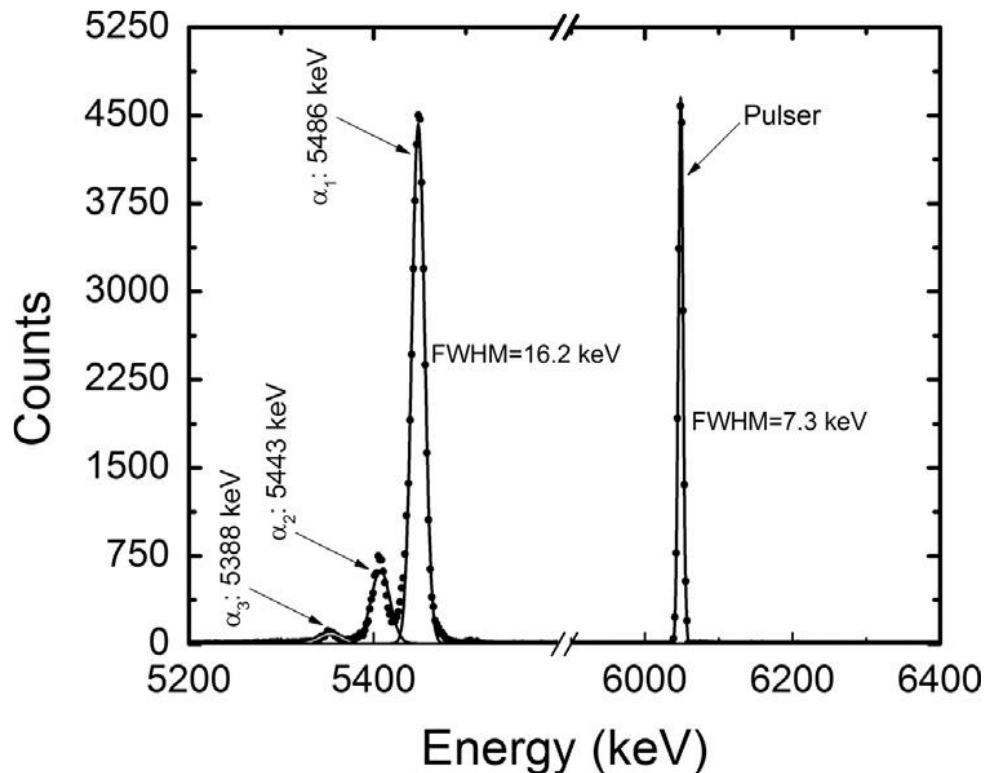


Figura 3: Espectro da altura dos pulsos obtidos pelo detector de 4H-SiC, com partículas alfa oriundas da fonte  $^{241}\text{Am}$ . Adaptado de [21].

Outros estudos calcularam a resolução em energia de maneira similar, utilizando uma fonte radioativa de partículas alfa para caracterizar o detector de SiC. Strokan *et al* [32] reportou um detector de 4H-SiC (camada epitaxial dopada do tipo-n com concentração de  $6 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ ) com resolução em energia de 0.34% (ou FWHM de 16.2 keV), utilizando partículas alfa de fontes radioativas de  $^{226}\text{Ra}$ ,  $^{241}\text{Am}$  e  $^{238}\text{Pu}$ , com energias entre 4.8-7.7 MeV. A corrente reversa deste detector ficou abaixo de 1 nA, com tensão reversa de 500 V. Ruddy *et al* [9] reportaram uma resolução em energia similar à Strokan *et al*, utilizando partículas alfa com energia de 5499 keV, provenientes da fonte radioativa de  $^{238}\text{Pu}$ . A estrutura condizente ao detector era formada por uma junção Schottky de multicamadas metálicas sobre uma camada epitaxial de SiC na seguinte configuração: Au (2  $\mu\text{m}$ ) / Pt (60 nm) / Ti (40 nm) / 4H-SiC. A camada epitaxial era dopada do tipo-n em  $8.5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ .

Quando tratamos de diodos Schottky de SiC para aplicação como detectores de partículas alfa, a literatura científica oferece um conjunto de estudos nas quais se utilizam fontes radioativas. No entanto, não encontramos estudos relacionando detectores de partículas alfa de SiC que sejam caracterizados por meio de feixe de íons. Nesse sentido, uma novidade na proposta deste trabalho é a utilização de um acelerador de íons disponível no IF-UFRGS para caracterização dos detectores fabricados, realizando o experimento de Espectrometria de Retroespalhamento Rutherford (conhecido como RBS). Neste experimento, incidimos partículas alfa de 1-2.5 MeV em uma amostra conhecida, e as partículas retroespalhadas serão coletadas simultaneamente pelo detector comercial de Si e pelo detector experimental de SiC.

### 2.3 Modelo teórico de emissão termiônica

Os princípios físicos básicos que regem o funcionamento de um diodo Schottky estão fundamentados no modelo teórico de Emissão Termiônica [33]. Para se entender como este modelo é aplicado a detectores, primeiramente devemos ter conhecimento de como acontece a formação da barreira Schottky proveniente do contato entre metal e semicondutor.

A formação da barreira Schottky pode ser entendida de forma mais clara utilizando os níveis de diagramas de bandas da estrutura metal-semicondutor. Na Figura 4 temos o diagrama de bandas para um metal e semicondutor a) antes do contato e b) depois do contato. Os níveis

de energia estão referenciados em função do nível de vácuo (*Vacuum level*) e as seguintes denotações são empregadas:

$E_0$  = nível do vácuo

$E_C$  = nível da banda de condução

$E_F$  = nível de energia de Fermi

$E_V$  = nível da banda de valência

$q\Phi_m$  = função trabalho do metal

$q\Phi_s$  = função trabalho do semiconductor

$q\chi_s$  = afinidade eletrônica do semiconductor

$V_{bi}$  = potencial *built-in*

$q\Phi_B$  = altura da barreira Schottky

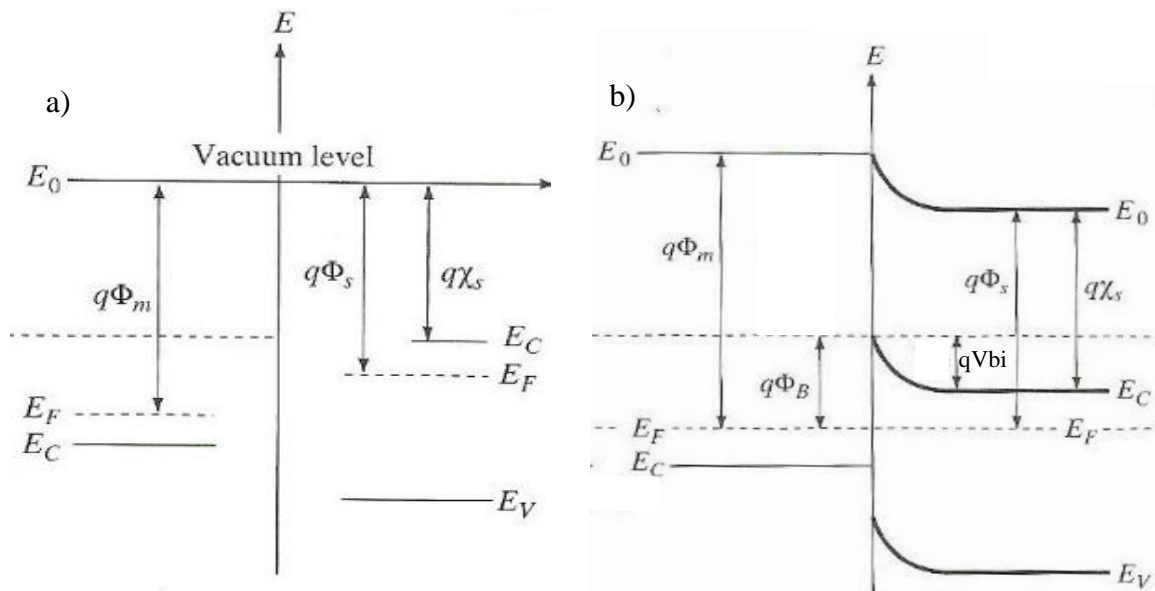


Figura 4: Diagrama de bandas de energia a) antes e b) depois do contato Schottky para uma junção metal-semicondutor tipo-n. Adaptado de [3].

Considerando o caso ideal, sem levar em conta estados da interface e outras anomalias, a Figura 4a) mostra a relação das energias eletrônicas entre um metal e um semiconductor tipo-n que inicialmente não estão em contato um com o outro. Como não há contato, não existe transferência de carga entre metal e semiconductor. Quando o metal e o semiconductor entrarem em contato um com o outro, como mostrado na Figura 4b), existe um fluxo de elétrons do semiconductor para o metal. Isto se deve ao fato que o nível de Fermi do semiconductor ser mais alto que o do metal. O fluxo de elétrons irá continuar até que o equilíbrio eletrônico entre os dois seja estabelecido. Quando atingido o equilíbrio, o nível de Fermi dos dois lados é alinhado, formando uma junção metal-semicondutor. Como resultado, dizemos que o equilíbrio termodinâmico é atingido e o semiconductor agora está carregado positivamente em relação ao metal, criando assim uma zona de depleção próximo da superfície do semiconductor. Em

equilíbrio termodinâmico existem fluxos contínuos de elétrons nos dois sentidos (metal-semicondutor). Se a junção não está polarizada externamente, a corrente pela junção é zero.

Com o contato entre metal e semicondutor, uma camada de depleção é criada no semicondutor. Conseqüentemente, um campo elétrico do semicondutor para o metal é estabelecido e com isso uma barreira de potencial ( $qV_{bi}$ ) é formada. Uma vez que a afinidade eletrônica ( $q\chi_S$ ) é uma constante do semicondutor e os níveis de Fermi se alinham, existe uma curvatura não só das bandas de condução e valência, mas também de uma curvatura idêntica no nível de vácuo no lado do semicondutor.

Uma das características mais importantes dos dispositivos criados pela junção metal-semicondutor é a formação da Barreira Schottky  $q\Phi_B$  (ou  $q\Phi_{SBH}$ , como iremos introduzir nas equações posteriormente). Matematicamente, a Altura da Barreira Schottky (SBH em inglês: *Schottky Barrier Height*) é representada pela seguinte equação:

$$q\Phi_{SBH} = q(\Phi_m - \chi_S) \quad (2)$$

A SBH representa uma barreira em energia na qual os elétrons no metal devem ultrapassar para fluir para o semicondutor.

No contato metal-semicondutor, também é criada uma barreira de potencial no lado do semicondutor ( $qV_{bi}$ ). Matematicamente pode ser expressa como:

$$qV_{bi} = q(\Phi_m - \Phi_S) \quad (3)$$

ou

$$qV_{bi} = q(\Phi_{SBH} - \Phi_D) \quad (4)$$

na qual  $q\Phi_D$  é a diferença de energia entre  $E_C$  (no *bulk*) e o nível de Fermi:

$$q\Phi_D = E_C - E_F = \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{N_C}{N_D}\right) \quad (5)$$

onde  $k$  é a constante de Boltzmann ( $k = 8.62 \times 10^{-5} \text{ eV.K}^{-1}$ ),  $N_C$  é a densidade de estados no fundo da banda de condução e  $N_D$  é a dopagem do semiconductor.

$V_{bi}$  representa uma barreira em energia na qual os elétrons do lado do semiconductor devem ultrapassar para fluir em direção ao metal.

As equações (2) a (5) tratam dos casos em que um contato ideal é formado. Porém, as junções metal-semiconductor reais apresentam diferenças. Isto se deve ao fato de que existem estados de interface entre o semiconductor e o metal. Quaisquer não-idealidades (impurezas, defeitos, rugosidade, etc) alteram os valores finais de SBH e  $V_{bi}$ . Na Tabela 3 são mostrados valores teóricos e experimentais de alguns metais formando contatos Schottky com Si e SiC, tipo n e p.

Tabela 3: Valores da altura da barreira Schottky (SBH) teóricos e experimentais de diferentes metais com Si e 4H-SiC, tipo n e p. Todos os valores são dados em Volts. Os cálculos teóricos foram realizados utilizando as seguintes informações:  $\chi_{Si} = 4.15 \text{ V}$ ,  $\chi_{SiC} = 3.17 \text{ V}$ ,  $E_g(\text{Si}) = 1.12 \text{ V}$  e  $E_g(\text{SiC}) = 3.27 \text{ V}$ . As referências são dadas por: \* = [34], <sup>a</sup> = [35], <sup>b</sup> = [36], <sup>c</sup> = [37]. SBH experimentais para 4H-SiC tipo-p são escassas na literatura.

	Metal ->	Ag	Al	Au	Cr	Ni	Pt	W
	$\Phi_M$ (em vácuo) (V)	4.3	4.25	5.1	4.5	5.04	5.3	4.6
<b>SBH Teórico (V)</b>	n-Si	0.15	0.1	0.95	0.35	0.89	1.15	0.45
	p-Si	0.97	1.02	0.17	0.77	0.23	0.03	0.67
	n 4H-SiC	1.13	1.08	1.93	1.33	1.87	2.13	1.43
	p 4H-SiC	2.14	2.19	1.34	1.94	1.4	1.14	1.84
<b>SBH Experimental (V)</b>	n-Si*	0.83	0.81	0.83	0.60	0.74	0.9	0.66
	p-Si*	0.29	0.31	0.29	0.52	0.38	0.22	0.46
	n 4H-SiC	-	1.4 <sup>a</sup>	1.73-1.85 <sup>a</sup>	1.2 <sup>b</sup>	1.62-1.75 <sup>a</sup>	1.39 <sup>c</sup>	-
	p 4H-SiC	-	-	-	-	-	-	-

Consideramos agora o caso em que existe tensão externa aplicada. Esta tensão pode facilitar ou dificultar o fluxo de corrente através da junção. Isso depende da maneira como a junção

Schottky é polarizada. A polarização pode ser direta, facilitando o fluxo de elétrons do semiconductor para o metal, ou reversa, dificultando esta passagem.

Como uma primeira aproximação, consideramos que a SBH não varia com a tensão aplicada (isto não é totalmente verdade, como veremos mais adiante). Nesse caso, a quantidade de elétrons atravessando a SBH permanece inalterada, independente da tensão aplicada.

Toda queda de tensão deve aparecer inteiramente no lado do semiconductor. Como podemos observar no diagrama de bandas da Figura 5, uma tensão aplicada causa uma mudança na curvatura das bandas no semiconductor e uma mudança correspondente no campo elétrico total na junção com o metal. A barreira que os elétrons do lado do semiconductor devem ultrapassar ( $V_{bi}-V$ ) é menor quando uma tensão direta é aplicada ( $V > 0$  V) e maior quando uma tensão reversa é aplicada ( $V < 0$  V).

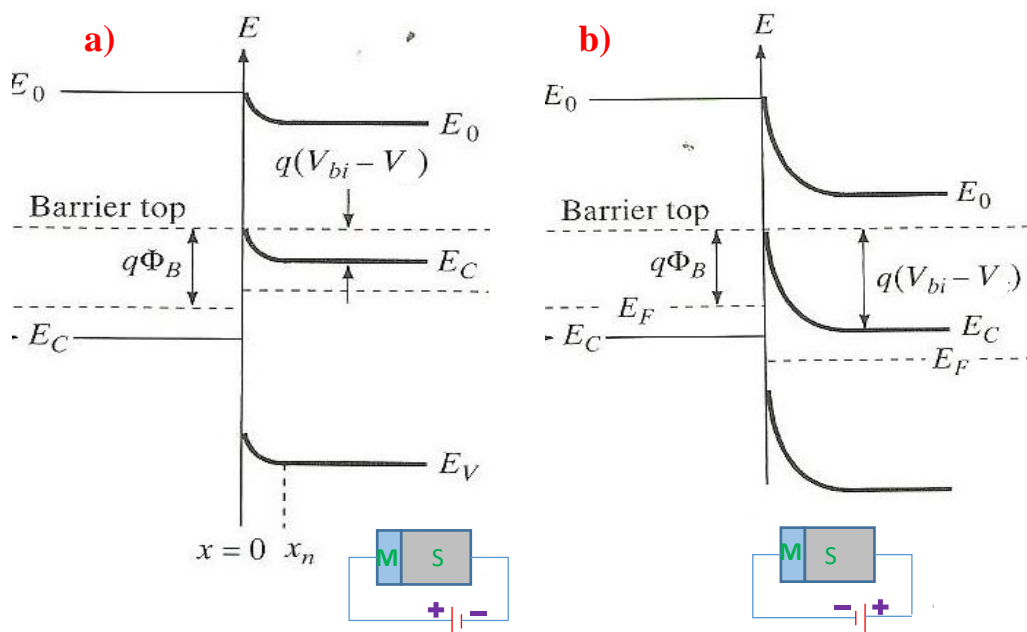


Figura 5: Diagrama de bandas de uma junção Schottky em contato e com tensão a) direta e b) reversa aplicada. Adaptado de [3].

Com uma tensão direta aplicada, a corrente elétrica do metal para o semiconductor aumenta (lembrando que corrente elétrica é definida na direção contrária do movimento dos elétrons). Já com tensão reversa aplicada, a corrente fluindo pela junção Schottky consiste primordialmente dos elétrons passando do metal para o semiconductor, chamada de corrente reversa.

Tradicionalmente é utilizado o modelo de Emissão Termiônica (TE) para extrair informações sobre a SBH e fator de idealidade ( $\eta$ ). Este modelo é aplicado para análises das curvas experimentais de Corrente-Tensão (I-V). Aqui iremos estudar a densidade de corrente ( $J$ ) em função de uma tensão externa aplicada ( $V$ ). O modelo de TE parte de três premissas: (1) a SBH é maior ou igual a  $3kT/q$  ( $SBH > 3kT/q$ ); (2) o equilíbrio termodinâmico é estabelecido no plano que determina a emissão, ou seja, na direção metal-semicondutor; (3) a existência de uma corrente elétrica pela junção não afeta o equilíbrio termodinâmico, de maneira que sempre existem duas correntes pela junção (uma do metal para o semicondutor e outra do semicondutor para o metal). Uma vez estabelecida uma tensão externa, o equilíbrio termodinâmico é atingido rapidamente e não varia no tempo.

A densidade de corrente do semicondutor para o metal ( $J_{S \rightarrow m}$ , em  $A/cm^2$ ) é dada pela concentração de elétrons com energia suficiente para ultrapassar a barreira de potencial, de modo que [3] [34] [38]:

$$J_{S \rightarrow m} = A^* T^2 \exp\left(-\frac{q\phi_{SBH}}{kT}\right) \exp\left(\frac{qV}{\eta kT}\right) \quad (6)$$

onde  $A^*$  é a constante de Richardson,  $T$  é a temperatura,  $q$  é a carga do elétron ( $1.602 \times 10^{-19}$  C),  $k$  é a constante de Boltzmann e  $V$  é a tensão aplicada.  $\eta$  é o fator de idealidade na qual pode assumir valores maiores de 1 (sendo 1 o caso ideal). O fator de idealidade para junções Schottky difere do fator de idealidade das junções p-n (que pode assumir valores entre 1 e 2). Isto se deve ao fato que, além de emissão de portadores pela SBH, também são levadas em conta recombinação na região espaço-carga ou regiões neutras e tunelamento através da SBH [34] [39]. O fenômeno de tunelamento (que será abordado mais adiante) pode elevar  $\eta$  inclusive a valores muito acima de 2.

Como discutido anteriormente, a barreira de potencial vista pelos elétrons se movimentando do metal para o semicondutor permanece a mesma, mesmo com diferentes tensões aplicadas. A densidade de corrente do metal para o semicondutor ( $J_{m \rightarrow S}$ ) é igual a equação (6) quando  $V = 0$ . Ou seja:

$$J_{m \rightarrow S} = -A^* T^2 \exp\left(-\frac{q\phi_{SBH}}{kT}\right) \quad (7)$$



Logo, a soma das duas densidades de corrente é dada por:

$$J = A^*T^2 \exp\left(-\frac{q\phi_{SBH}}{kT}\right) \left[\exp\left(\frac{qV}{\eta kT}\right) - 1\right] \quad (8)$$

A SBH e  $\eta$  podem ser calculadas utilizando a parte da polarização direta das curvas I-V (para  $V > 3kT/q$ ):

$$\phi_{SBH} = \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{A^*T^2}{J_S}\right) \quad (9)$$

$$\eta = \frac{q}{kT} \frac{dV}{d(\ln J)} \quad (10)$$

onde  $J_S$  é a densidade de corrente de saturação, extraída da intersecção com o eixo y da curva  $\ln(J)$ -V.

## 2.4 Métodos de extração de parâmetros de diodos Schottky

Alguns outros métodos de extração dos parâmetros de diodos Schottky têm sido explorados na literatura. Estes métodos derivam do modelo da TE para diodos Schottky, levando em conta a resistência em série ( $R_S$ ) atrelada ao dispositivo, expressada matematicamente como:

$$I = I_S^* \left[\exp\left(\frac{q(V - IR_S)}{\eta kT}\right) - 1\right] \quad (11)$$

onde a corrente de saturação ( $I_S$ ) é dada por:

$$I_S = AA^*T^2 \exp\left(-\frac{q\phi_{SBH}}{kT}\right). \quad (12)$$

O método padrão de extração dos parâmetros Schottky, apresentado na seção 2.3, requer a presença de uma região linear na curva  $\ln(I)$  vs  $V$ . O parâmetro SBH pode ser obtido a partir da intersecção com o eixo y (informação a respeito da corrente de saturação) e  $\eta$  pode ser obtido a partir da inclinação da região linear. A extração destes parâmetros é apresentada nas equações (9) e (10). Quando uma resistência em série que não pode ser ignorada está presente na estrutura do dispositivo a ser analisado, a análise simplista do modelo TE tende a falhar e apresentar resultados errôneos. A presença de uma resistência em série complica consideravelmente o aspecto matemático da extração dos parâmetros e torna a equação (11) em uma equação transcendente. Nesse sentido, novos métodos analíticos, numéricos e algorítmicos evolucionários são propostos.

O método de Norde [40] foi um dos primeiros modelos matemáticos a levar em conta a resistência em série envolvida em diodos Schottky. Norde sugeriu uma função  $F(V)$  a ser plotada:

$$F(V) = \left(\frac{V}{2}\right) - \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{J}{A^*T^2}\right) \quad (13)$$

Esta nova função plotada acaba gerando um ponto mínimo ( $V_0$ ), conforme mostrado na Figura 6, na qual é possível extrair a SBH como:

$$\phi_{SBH} = F(V_0) + \frac{V_0}{2} - \frac{kT}{q} \quad (14)$$

A partir do valor mínimo da de  $F(V)$ , podemos calcular a corrente de saturação  $I_0$  ( $J_0^*A$ ) e, a partir dela, realizar o cálculo da resistência em série associada ao dispositivo medido:

$$F(V_0) = \left(\frac{V_0}{2}\right) - \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{I_0}{AA^*T^2}\right) \quad (15)$$

$$R = \frac{kT}{qI_0} \quad (16)$$

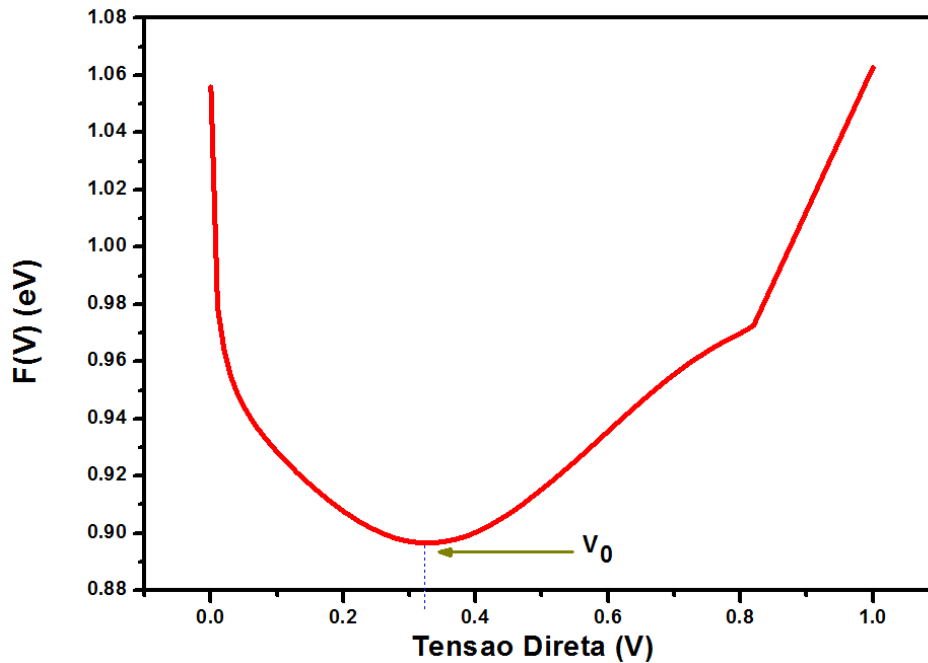


Figura 6: Exemplo de uma função Norde plotada em função da tensão direta aplicada. O ponto mínimo da curva nos dá a possibilidade de calcular a SBH, levando em conta resistência em série.

Somente do gráfico  $F(V)$  vs.  $V$  plotado é difícil inferir o que causa o ponto mínimo  $V_0$ . O mesmo pode ser causado devido à resistência em série fora do dispositivo, um contato ôhmico pobre ou ainda a soma dos dois. Portanto, uma análise mais detalhada do contato ôhmico e conexão externas deve ser levada em conta.

Olikh [41] realizou um estudo sobre 16 diferentes métodos de extração dos parâmetros Schottky, utilizando dados de curvas I-V experimentais e simuladas. Neste estudo, foram analisadas as precisões na extração das resistências em série, SBH e fator de idealidade. Além disso, os fatores que influenciam na precisão da extração dos parâmetros foram estimados. Segundo Olikh, os métodos de Gromov, Lee e algorítmicos evolucionários são apontados como preferíveis e mais confiáveis [42] [46] [47].

As análises envolvendo algorítmicos evolucionários (EA) podem ser utilizadas para determinação dos parâmetros de dispositivos semicondutores [42] [43]. EA é um método de otimização estocástica eficiente em otimizar funções objetivas multimodais [44]. Em contraste ao método numérico, EA consegue lidar com funções não-lineares sem a necessidade de informações derivativas, dependendo fracamente dos parâmetros iniciais que são introduzidos. Dentre os diferentes métodos de EA, podemos destacar o algorítmico modificado de colônia

artificial de abelhas (MABC) [45]. MABC é um algorítmico otimizado baseado no comportamento inteligente das abelhas no armazenamento de mel. Este algorítmico é utilizado em diferentes áreas de conhecimento e é inclusive adaptado para extração dos parâmetros Schottky.

Os métodos analíticos de Gromov [46] e Lee [47] são próximos. A função matemática base de ambos os métodos é dada por:

$$y(I) = c_1 + c_2 I + c_3 \ln I \quad (17)$$

na qual as constantes  $c_1$ ,  $c_2$  e  $c_3$  são determinadas. A SBH pode ser calculada como:

$$\phi_{SBH} = \frac{2c_1}{\eta} + \frac{(2 - \eta)kT}{\eta q} \ln(AA^*T^2) \quad (18)$$

$$\phi_{SBH} = \frac{c_3}{\eta} + \frac{kT}{q} \ln(AA^*T^2) \quad (19)$$

para os métodos de Gromov e Lee, respectivamente.

A vantagem da abordagem matemática oferecida pelos métodos analíticos de Gromov e Lee é de que podemos minimizar incertezas na determinação do ponto mínimo do gráfico  $F(I)$  vs  $I$ , muito próximo do que foi apontado por Norde. Os métodos de Gromov e Lee podem ser melhorados com relação a precisão, adicionando-se uma resistência externa em série ao diodo. Desse modo, pode-se verificar a coerência nos valores de  $\eta$  e resistência em série, para diferentes resistências externas.

## 2.5 Emissão termiônica modificada para estrutura Metal-Isolador-Semicondutor

Uma junção Schottky tradicional é composta como sendo um metal em contato com um semicondutor. Porém, em um sistema Metal-Isolador-Semicondutor (MIS), que apresenta uma camada dielétrica intermediária variando sua espessura de 1 - 4 nm, não descaracteriza uma junção Schottky. Além do mais, como veremos posteriormente nas análises experimentais, uma fina camada isoladora é benéfica ao nosso dispositivo, de forma a melhorar consideravelmente suas características elétricas.

Para diodos Schottky com uma camada interfacial dielétrica, a equação (8) é reescrita com um termo exponencial adicional [34]:

$$J = A^*T^2 \exp\left(-\sqrt{\zeta}\delta \left[2\left(\frac{2m'}{\hbar^2}\right)\right]^{\frac{1}{2}}\right) \exp\left(-\frac{q\phi_{SBH(real)}}{kT}\right) \left[\exp\left(\frac{qV}{\eta kT}\right) - 1\right] \quad (20)$$

onde  $\zeta$  (em eV) e  $\delta$  (em Å) são a barreira efetiva e a espessura efetiva da camada interfacial dielétrica, respectivamente. O termo exponencial  $\sqrt{\zeta}\delta$  é multiplicado pela constante  $[2(2m'/\hbar^2)]^{1/2}$ , na qual possui valor de  $1.01 \text{ eV}^{-1/2}\text{Å}^{-1}$ . Esta constante será omitida das próximas equações, devido ao fato que seu valor não muda o resultado da equação ( $m' = 0.067m_0$  é a massa efetiva do elétron,  $m_0$  é a massa de repouso de um elétron livre) [34].

Agora, a extração da SBH se torna:

$$\phi_{SBH(real)} = \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{A^*T^2}{J_s}\right) - \frac{kT}{q} \sqrt{\zeta}\delta \quad (21)$$

Comparando a equação (21) com a (9), a SBH sempre irá apresentar um valor menor quando uma fina camada interfacial é considerada entre o metal e o semicondutor. Isso significa que se não considerada uma estrutura MIS (considerando somente uma estrutura formada por metal e semicondutor), resultados errôneos serão obtidos. Sendo assim, chamamos a  $\phi_{SBH}$ , calculada pela equação (9), como “SBH aparente”. A equação (21) nos dá a “SBH real” e pode ser reescrita como:

$$\phi_{SBH(real)} = \phi_{SBH(aparente)} - \frac{kT}{q} \sqrt{\zeta} \delta \quad (22)$$

Na literatura são apresentados alguns comportamentos não-ideais e que não seguem o modelo de TE. Em especial, vários dados experimentais mostram um comportamento na qual a SBH aumenta (e diminuição do valor do fator de idealidade) com o aumento da temperatura de medida das curvas I-V [48] [49] [50] [51]. Estes dados, em geral, possuem uma abordagem a partir do modelo de Tung [52] [53], que considera uma inomogenedade na área ativa do diodo Schottky. Neste modelo é considerado uma soma de correntes paralelas fluindo através diferentes regiões da interface que possuem diferentes alturas da barreira Schottky, provendo uma SBH dependente da tensão aplicada. Este modelo, porém, não leva em conta possíveis camadas interfaciais presentes entre metal e semiconductor.

Uma abordagem teórica e experimental do aumento da SBH com o aumento da temperatura da medida I-V é apresentada na seção de resultados, onde realizamos uma simulação de uma estrutura MIS e analisamos os diodos experimentais deste trabalho de doutorado, levando em conta a camada interfacial na extração dos parâmetros.

### 3. Proposta de trabalho

Este trabalho tem como objetivo principal a construção e caracterização de um detector de partículas alfa de carbeto de silício (SiC), a ser utilizado no experimento de Espectrometria de Retroespalhamento Rutherford (RBS).

Para tanto, é necessário desenvolver e otimizar os contatos ôhmicos e Schottky no SiC. Os contatos ôhmicos devem apresentar baixa resistência de contato. Para os contatos Schottky se busca um alto valor da Altura da Barreira Schottky (SBH). O alto valor de SBH está intimamente relacionado com a baixa corrente de fuga e, portanto, é um parâmetro importante nas estruturas Schottky para detectores de partículas.

Estruturas de diodos Schottky tipo metal-isolador-semicondutor (MIS) serão investigadas, variando a espessura e os dielétricos utilizados ( $\text{SiO}_2$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{HfO}_2$ ). A inserção de uma fina camada dielétrica entre metal e semicondutor servirá como barreira de potencial e camada passivadora de estados eletricamente ativos. Dessa forma, espera-se diminuir a corrente de fuga, melhorando o desempenho elétrico do dispositivo. Para caracterização elétrica das estruturas, utilizaram-se medidas de corrente-tensão e capacitância-tensão, variando-se a temperatura de medida.

Para entender a condução de corrente pela estrutura Schottky, buscaremos readequar a equação da Emissão Termiônica, levando em conta a inserção dos dielétricos nos diodos Schottky de SiC.

## 4. Materiais e métodos

As amostras utilizadas neste trabalho de doutorado são do politipo 4H-SiC (1000), dopado do tipo-n (dopante de Nitrogênio (N), concentração  $\sim 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ), com uma camada epitaxial de SiC com espessura de 6  $\mu\text{m}$ , dopada com N em uma concentração volumétrica de portadores livres de  $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ . Essas amostras foram adquiridas da *CREE Inc. Research* [54]. As lâminas de 3 polegadas foram cortadas em amostras de  $6 \times 6 \text{ mm}^2$ .

### 4.1 Limpeza das lâminas de SiC

A limpeza química das amostras previamente a qualquer tipo de manipulação é de extrema importância na indústria de microeletrônica e na área de pesquisa científica. Contaminações nas lâminas de SiC estão sujeitas a acontecer em qualquer uma das etapas de fabricação de dispositivos. Nesse sentido, a limpeza química é primordial para reduzir ao máximo contaminações por particulados, óxidos nativos, matéria orgânica, entre outros. É importante que a limpeza química não cause danos estruturais no substrato [55].

Uma limpeza completa e eficaz foi primeiramente desenvolvida para o Si nos laboratórios da empresa RCA ® (*Radio Corporation of America*) e publicado em 1970 [56]. O processo consiste em submeter os substratos em solução aquosa diluída em peróxido de hidrogênio ( $\text{H}_2\text{O}_2$ ) e hidróxido de amônio ( $\text{NH}_4\text{OH}$ ) ou ácido clorídrico ( $\text{HCl}$ ). Os mesmos processos de limpeza empregados no Si foram realizados nas amostras de 4H-SiC.

Para garantir uma limpeza completa e reduzir os contaminantes a níveis mínimos, quatro soluções químicas são empregadas, apresentadas a seguir:

- $\text{H}_2\text{SO}_4$  (95%) :  $\text{H}_2\text{O}_2$  (30%), (4:1),  $120^\circ\text{C}$  por 10 min – conhecida como “piranha”, esta limpeza remove contaminantes de origem orgânica;
- $\text{NH}_4\text{OH}$  (25%) :  $\text{H}_2\text{O}_2$  (30%) : DI  $\text{H}_2\text{O}$ , (1:1:4),  $80^\circ\text{C}$  por 10 min – remoção de resíduos hidrocarbonetos, em meio alcalino. Essa limpeza garante remoção de contaminantes metálicos presentes na superfície, como Au, Cu, Ag, Ni, Co, Cr, Zn e Cd;



- HCl (37%) : H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> (30%) : DI H<sub>2</sub>O, (1:1:4), 80°C por 10 min – remoção de íons alcalinos e hidróxidos insolúveis;
- HF (40%) : DI H<sub>2</sub>O, (1:10), temperatura ambiente por aproximadamente 1 minuto – remoção do filme nativo de óxido de silício (SiO<sub>2</sub>) proveniente da oxidação natural quando exposto ao ambiente externo (ar).

Entre cada etapa do processo de limpeza, as amostras foram enxaguadas em água deionizada. Ao final, as amostras foram secas em fluxo de nitrogênio (N<sub>2</sub>).

O processo de limpeza química foi realizado previamente a construção das junções Schottky do tipo MIS para evitar ao máximo a formação da camada de óxido (e oxicarbeto) de silício. Contraditoriamente, como veremos mais adiante, foi exatamente essa camada passivadora responsável por instigar o estudo das estruturas do tipo MIS.

## 4.2 Deposição das camadas dielétricas e metálicas

Após a sequência do processo de limpeza química, foram realizadas deposições de camadas de óxidos e também a deposição de Ni para formação do contato ôhmico e Schottky nas amostras de SiC. Para tanto, foram utilizadas as técnicas de *sputtering* e deposição de camadas atômicas (ALD, em inglês *Atomic Layer Deposition*), que serão descritas sucintamente a seguir. Ambas as técnicas de deposições foram realizadas no Laboratório de Conformação Nanométrica (LCN), do Instituto de Física da UFRGS [57]. Também depositamos camadas de alumínio no Si por meio da técnica de evaporação térmica, para formar capacitores MIS.

### 4.2.1 Deposição por Sputtering

O termo *sputtering* (também conhecido como pulverização catódica) é referente ao processo físico na qual partículas que compõem um certo material sólido são ejetadas do

mesmo devido ao bombardeamento do alvo por partículas energéticas. Este processo gera erosão do material alvo durante o tempo de bombardeamento dos íons que formam o plasma.

A deposição de camadas de um determinado material sobre uma superfície é designada pelo termo “deposição por *sputtering*”. O filme depositado na superfície de outro material é proveniente do *sputtering* do material alvo. Essa técnica de deposição física é amplamente utilizada na indústria, para as mais diversas aplicações (inclusive para a indústria de microeletrônica).

A deposição por *sputtering* foi utilizada para a deposição do Ni (contatos ôhmicos e Schottky) e SiO<sub>2</sub> (como dielétrico de uma das estruturas MIS). As espessuras depositadas serão discutidas posteriormente. O equipamento utilizado foi o *AJA International Inc.*, modelo AJA Orion-8 UHV [58]. A pressão de base foi de  $5 \times 10^{-8}$  torr.

#### 4.2.2 Deposição por *Atomic Layer Deposition (ALD)*

ALD, ou deposição por camadas atômicas (na tradução literal), é uma deposição química sequencial capaz de produzir filmes finos de alta qualidade e com alto controle de espessura. A deposição por ALD é controlável a níveis atômicos, de modo que um ciclo do processo é completado quando uma camada atômica é depositada. A quantidade de ciclos é definida previamente pelo operador do equipamento.

Muito similar a deposição química na fase vapor (CVD, *Chemical Vapor Deposition*), ALD difere pelo fato de que os gases reagentes são introduzidos (pulsados) para o reator de maneira sequencial ou digital, para reagir com as espécies que compõem a superfície da amostra [59]. No CVD, os gases reagentes são introduzidos no reator simultaneamente.

O reator de ALD é alimentado alternadamente pelos precursores do processo, sendo que a introdução entre um percurso e outro é separada por um período de purga ou evacuação da espécie introduzida anteriormente. Parâmetros como temperatura do substrato e tempo de reação dos precursores (tempo entre uma purga e outra) são ajustados de maneira a garantir a saturação da quimissorção (absorção química) dos precursores na superfície do substrato. Os precursores utilizados são escolhidos de maneira a garantir que, num intervalo de um ciclo, exista a formação de uma monocamada atômica. Dessa maneira é garantida o crescimento de

filmes com excelente conformação e uniformidade, além de um completo controle da espessura (diretamente proporcional a quantidade de ciclos realizados) [60].

Na Figura 7 são mostradas as etapas básicas de um ciclo completo de deposição por ALD. Primeiramente a superfície do substrato é exposta a um pulso do primeiro precursor gasoso. A quimissorção ocorre entre o precursor e a superfície inicial do substrato, formando uma camada monoatômica que ainda é incompleta, pois o primeiro precursor possui parte das espécies que irão formar a monocamada final. Em seguida, acontece a purga para remoção do excesso do primeiro precursor não-reagido. Na sequência, o segundo precursor é adicionado ao reator para então produzir a monocamada atômica desejada, reagindo com a superfície do substrato. Finalmente, uma purga final é realizada de maneira a remover todo e qualquer precursor ou produto final que não sofreu quimissorção na superfície do substrato. Esse processo caracteriza um ciclo completo. O processo então é repetido até que a espessura desejada seja atingida.

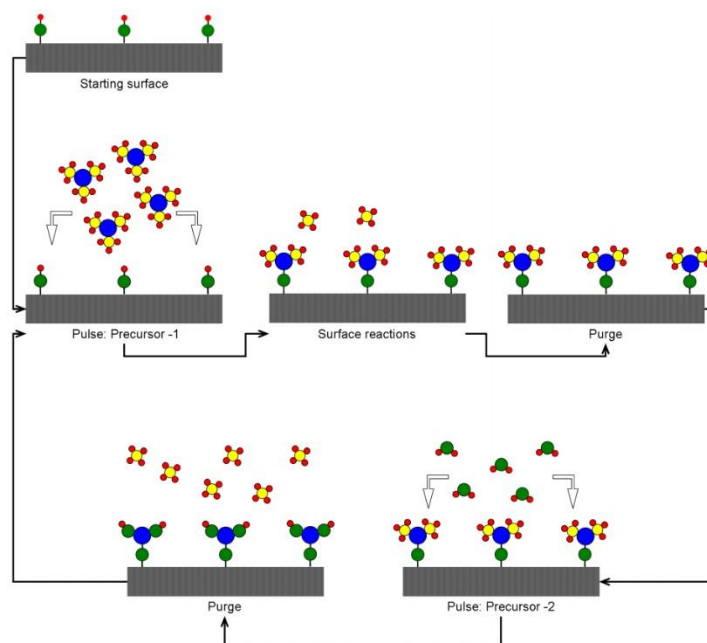


Figura 7: Diagrama mostrando todas as etapas de um ciclo completo típico de deposição por ALD. Adaptado de [59].

O equipamento utilizado para deposição por ALD neste trabalho de doutorado foi o reator Beneq TFS200 [61]. Foram realizadas deposição dos seguintes óxidos:  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{HfO}_2$  e  $\text{Al}_2\text{O}_3$ . Como informação adicional, aqui descrevemos os parâmetros utilizados para deposição de  $\text{TiO}_2$  (a deposição dos outros dois dielétricos acontece de maneira similar, porém com seus devidos precursores). Para deposição de  $\text{TiO}_2$  é utilizado o precursor de isopropóxido de titânio  $\text{Ti}(\text{OCH}(\text{CH}_3)_2)_4$  (Sigma-Aldrich), aquecido a  $60^\circ\text{C}$ , juntamente com água deionizada, para

agente oxidante. A câmara do reator foi mantida em 250°C durante a deposição e o precursor e a água foram introduzidos no reator por meio de um fluxo de N<sub>2</sub>. O ciclo se deu com 500 ms de pulso do precursor Ti(OCH(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>)<sub>4</sub>, 1 segundo de purga, 600 ms de pulso de água e novamente 1 segundo de purga. A taxa de deposição ficou em 0.025 nm/ciclo.

### 4.2.3 Evaporação térmica de Alumínio

Construímos capacitores MIS sobre Si para estudo da qualidade e estabilidade elétrica dos dielétricos utilizados neste trabalho. Para tanto, depois da deposição de 20 nm nominais dos dielétricos TiO<sub>2</sub>, HfO<sub>2</sub>, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> e crescimento térmico de SiO<sub>2</sub>, realizou-se a deposição de contatos circulares de Al, com 200 µm de diâmetro e 0.45 µm de espessura. A espessura de Al depositada termicamente foi confirmada por meio de perfilometria mecânica. O Si utilizado é dopado do tipo-p (dopado com boro na concentração de  $2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ ) e uma fina liga eutética de InGa foi depositada na parte não polida do Si, de modo a melhorar o contato ôhmico.

## 4.3 Tratamento térmico em forno rápido (RTP)

Tratamento térmico rápido (*Rapid Thermal Processing* ou *Annealing*, RTP ou RTA, respectivamente) é utilizado na indústria de microeletrônica para ativação de dopantes ou até mesmo na reestruturação cristalina de estruturas com defeitos [62]. Também é utilizado para o crescimento de óxidos ultrafinos, quando uma mínima redistribuição dos dopantes no semicondutor é requerida. Esse tipo de tratamento rápido é assim definido porque o mesmo atinge elevadas temperaturas (~1000°C) em questão de alguns segundos (~10 seg). Dessa maneira, tempos de tratamentos térmicos são reduzidos e implicam em um menor tempo para redistribuição dos dopantes do semicondutor.

Quando temos um material A e queremos que o mesmo forme uma liga com outro material B, tratamentos térmicos são realizados em temperaturas que possibilitam a formação

da junção ou liga AB dos dois materiais. RTP é uma boa alternativa para esse tipo de processo, uma vez que o mesmo é mais simples e rápido comparado aos reatores convencionais.

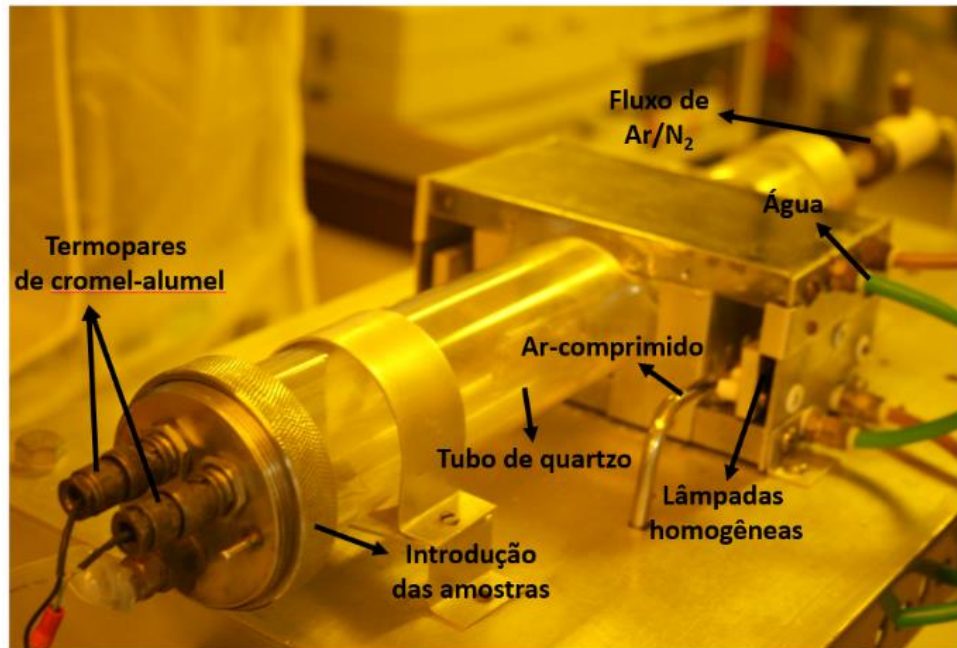


Figura 8: Imagem do reator utilizado para realizar o RTA.

A Figura 8 é uma fotografia do reator utilizado no recozimento térmico das amostras deste trabalho. O mesmo se encontra dentro da sala limpa do Laboratório de Microeletrônica, IF-UFRGS. A introdução da amostra a ser recozida é feita através de uma porta-amostra feito de uma vareta de quartzo. A amostra é colocada sobre um substrato de Si limpo, que possui um contato de um termopar cromel-alumel no seu lado oposto. Após carregada a amostra, é ligado o fluxo de Ar ( $\sim 3$  NL/min) que passa pelo tubo de quartzo e depois por um borbulhador (recipiente com água). O equipamento é controlado por um microcomputador, na qual se define rampas e patamares de tempo e temperatura. A temperatura requerida é atingida por um sistema de lâmpadas halogênicas, que dissipam mais ou menos potência, dependendo da temperatura lida pelo termopar. O sistema de lâmpadas é refrigerado com fluxo de água e de ar-comprimido.

O sistema de RTA foi utilizado para realização dos contatos ôhmicos e Schottky do Ni depositado sobre o SiC. A temperatura ideal para a formação de tais contatos é discutida nos resultados.

## 4.4 Técnicas de caracterização das amostras

Nesta seção descrevemos as técnicas de caracterização das amostras fabricadas. Para tanto, foram realizadas medidas de Corrente-Tensão com temperatura variável (I-V-T), Capacitância-Tensão (C-V), Elipsometria e Reflectometria de Raio X. Realizando tais experimentos, fomos capazes de obter informações a respeito da altura da barreira Schottky, fator de idealidade, estimativa das espessuras das camadas dielétricas depositadas e suas constantes dielétricas. Ainda, discutimos os conceitos básicos de RBS (Espectrometria de Retroespalhamento Rutherford) e a utilização do SIMNRA para análise dos dados.

### 4.4.1 Medidas de Corrente-Tensão (I-V)

As curvas I-V são obtidas aplicando uma diferença de potencial elétrico entre dois terminais e simultaneamente fazendo a leitura da corrente elétrica que passa por eles. A Figura 9 mostra uma representação esquemática das medidas I-V. A amostra é colocada sobre uma base condutiva e firmada com vácuo. No caso da figura abaixo, a base é aterrada e a ponteira superior colocada sobre a amostra. O sistema de medidas varia a tensão aplicada e realiza a leitura da corrente elétrica. Medidas I-V com temperatura variável são possíveis, uma vez que a base pode ser aquecida utilizando um controlador de temperatura (não mostrado na figura). Assim é possível realizar medidas com temperatura variável (I-V-T). O sistema base-amostra é protegido por uma gaiola de Faraday que, além de isolar eletricamente das ondas eletromagnéticas do meio externo, também impede a entrada de luminosidade, o que pode alterar a medida da corrente-tensão quando as amostras são sensíveis à luz.

As equações (8) a (10) são utilizadas para extração dos parâmetros de SBH e  $\eta$ .

Neste trabalho, medidas I-V-T foram realizadas em todas as amostras produzidas. Tanto a parte direta (0 – 5 V) como a parte reversa (0 – (-100) V) foram medidas. Alguns cuidados são necessários durante as medidas, como por exemplo: espera pela estabilidade da temperatura, intensidade da força aplicada na ponteira, realização de *stress* elétrico anterior a medida e umidade da sala de medidas inferior a 60%. As medidas foram realizadas no

Laboratório de Microeletrônica da UFRGS, por meio do analisador de parâmetros de dispositivos semicondutores HP4155A.

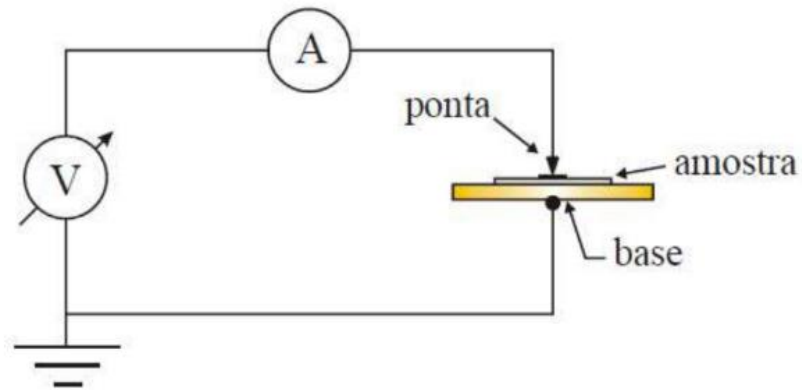


Figura 9: Circuito para análise das medidas de Corrente-Tensão (I-V).

#### 4.4.2 Medida C-V de diodo Schottky

Medidas Capacitância-Tensão (C-V) são utilizadas para caracterização de dispositivos do tipo Metal-Óxido-Semicondutor. Esse tipo de medida permite obter informações a respeito das cargas fixas, móveis e densidade de estados de interface. Pode-se também estimar a espessura do dielétrico presente e o seu comportamento frente a frequência da medida, assim como calcular o nível de dopagem do semicondutor.

O arranjo experimental para as medidas C-V é praticamente idêntico ao mostrado na Figura 9. A medida consiste em aplicar uma tensão *DC* superposta a um sinal *AC* com amplitude de 20 mV e frequência de 10 Hz a 1 MHz.

A capacitância da medida é determinada pela variação de cargas induzidas na interface dielétrico-semicondutor de maneira que, ao aplicar uma determinada tensão *DC*, a pequena variação do sinal *AC* acaba induzindo uma quantidade diferente de cargas presentes na interface (e conseqüentemente presente no metal), segundo a equação:

$$C = \frac{dQ_m}{dV_g} \quad (23)$$

onde  $C$  é a capacitância em F/cm<sup>2</sup>,  $Q_m$  é a densidade de carga no metal e  $V_g$  é a tensão aplicada no metal e que irá se distribuir no óxido e no semicondutor. A capacitância total em uma associação em série de capacitores é dada pela capacitância total do óxido ( $C_{ox}$ ) e do semicondutor ( $C_s$ ):

$$C = \left( \frac{1}{C_{ox}} + \frac{1}{C_s} \right)^{-1} \quad (24)$$

No caso de um semicondutor do tipo-n, uma tensão positiva aplicada no metal colocará o capacitor no estado de acumulação. Nessa situação, a concentração de portadores majoritários (no caso os elétrons) é predominante na interface dielétrico-semicondutor. Nesse caso, toda a tensão se distribui no dielétrico. Para se obter informação da dopagem do semicondutor, o sistema deve estar no estado de depleção, ou seja, uma tensão negativa no metal deve ser aplicada. O que contribui para a capacitância neste caso são os átomos doadores fixos na rede e carregados positivamente. A tensão aplicada se distribui pelo dielétrico e pela camada de depleção. A carga da camada de depleção ( $Q_d$ ) e sua espessura ( $W$ ) são dadas pelas equações:

$$Q_d = qN_D W \quad (25)$$

$$W = \left( \left( \frac{2\varepsilon_s}{qN_D} \right) (V_{bi} - V) \right)^{1/2} \quad (26)$$

onde  $\varepsilon_s$  é a constante dielétrica relativa do semicondutor,  $V_{bi}$  a tensão *built-in* e  $V$  a tensão reversa aplicada. Para se obter a capacitância que atua na camada de depleção, devemos usar a equação (23) e assim obtemos:



$$\left(\frac{1}{C^2}\right) = \frac{2(V_{bi} - V)}{q\epsilon_s N_D} \quad (27)$$

Assumindo que  $N_D$  é uniforme ao longo da camada epitaxial, com o gráfico  $1/C^2$  versus a tensão reversa aplicada  $V$  podemos obter  $V_{bi}$  pelo valor de interceptação no eixo vertical ( $V = 0$  V). O valor de  $N_D$  pode ser obtido a partir da inclinação da reta. A SBH pode ser determinada usando a seguinte equação [34]:

$$\phi_{SBH} = V_{bi} + \frac{kT}{q} + \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{N_C}{N_D}\right) - \Delta\phi \quad (28)$$

Nessa equação é levado em conta o termo  $\Delta\phi$ , referente ao abaixamento da barreira de energia vista pelos portadores que atravessam a mesma, de ambos os lados. Este efeito é conhecido como Efeito Schottky. Para tensões positivas, essa diminuição na altura da barreira de energia é desprezível frente aos valores de  $V_{bi}$  e SBH. Já para tensões reversas, esse efeito deve ser levado em conta, como mostrado na equação (28).

#### 4.4.3 Medidas C-V de alta frequência de capacitor MIS

De modo a se identificar os desvios das características elétricas de um capacitor MIS real em relação a um capacitor MIS ideal, se faz necessário um estudo de medidas C-V utilizando alta frequência. As medidas C-V de alta frequência são realizadas aplicando-se uma tensão DC gradualmente crescente, sobreposta por uma tensão AC com amplitude de 10 mV e frequência de 1 MHz.

Para um substrato dopado do tipo-p, os portadores majoritários (lacunas) respondem às alterações do campo elétrico em um tempo de relaxação dada pela razão entre a constante dielétrica e a condutividade. Este tempo de relaxação acontece na ordem de picosegundos. Desse modo, para um período de 1  $\mu$ s (frequência alta de 1 MHz), os portadores majoritários respondem ao sinal AC sobreposto. Já os portadores minoritários levam em torno de milissegundos para formar uma camada de inversão, de modo que os mesmos não respondem

ao sinal AC de alta frequência. A Figura 10 mostra uma curva C-V idealizada para alta frequência, para um capacitor com substrato dopado do tipo-p.

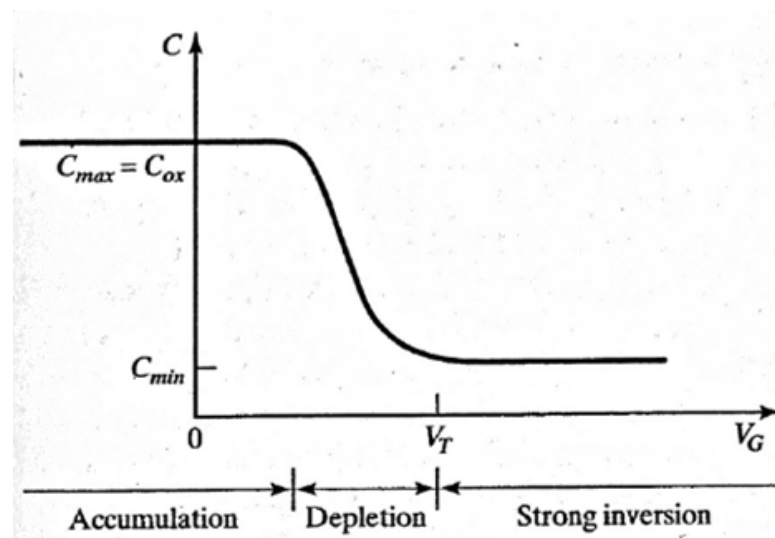


Figura 10: Curva C-V de alta frequência característica de um capacitor MIS com substrato tipo-p. Aplicando-se uma tensão DC negativa e aumentando-se gradualmente para tensões positivas, o capacitor passa dos estados de acumulação, depleção e inversão forte, da esquerda para a direita, nesta ordem. Adaptado de [3].

A curva da Figura 10 pode ser descrita com base na equação (23). Para tensões negativas, o capacitor MIS encontra-se no estado de acumulação. Nesse caso, para um sinal AC de alta frequência, os portadores majoritários respondem ao sinal, de modo a resultar em uma variação de carga  $\Delta Q$  nos dois lados do capacitor (metal e semiconductor). A Figura 11a) mostra graficamente o comportamento das cargas no estado de acumulação. No estado de acumulação, praticamente toda a tensão aplicada no eletrodo de porta cai sobre o dielétrico. A capacitância equivalente do sistema é dada basicamente pela capacitância do dielétrico ( $C_{ox}$ ).

Aumentando-se a tensão DC para valores positivos, o capacitor começa a entrar no regime de depleção. Neste estado, o capacitor é caracterizado por apresentar uma camada de depleção  $W$ , que aumenta quando o valor da tensão DC tende para valores positivos (no caso de um semiconductor do tipo-p). A capacitância total do sistema pode ser descrita como sendo a ligação em série de dois capacitores, referentes à capacitância do dielétrico mais a capacitância da camada de depleção. Para este caso, a equação (24) deve ser usada. A largura da camada de depleção  $W$  aumenta e diminui em torno do seu valor correspondente da tensão

DC, devido a presença do sinal AC, que promove uma variação de carga  $\Delta Q$  na região de depleção, conforme pode ser visto na Figura 11b).

Elevando-se a tensão para valores positivos no eletrodo de porta, o capacitor é levado ao seu estado de inversão, onde a largura da camada de depleção chega ao seu valor máximo  $W_m$ . Como os portadores elétrons não respondem a tensão AC aplicada junto à tensão DC, a densidade de elétrons é fixada aproximadamente em seu valor DC, conforme mostrado na Figura 11c). Por conseguinte, a capacitância associada a densidade de elétrons é zero, de modo que a capacitância total do sistema é a combinação da capacitância do dielétrico com a capacitância do semiconductor em seu valor máximo da largura da camada de depleção. A capacitância neste estado é a mínima possível e é definida basicamente pela capacitância da camada de depleção.

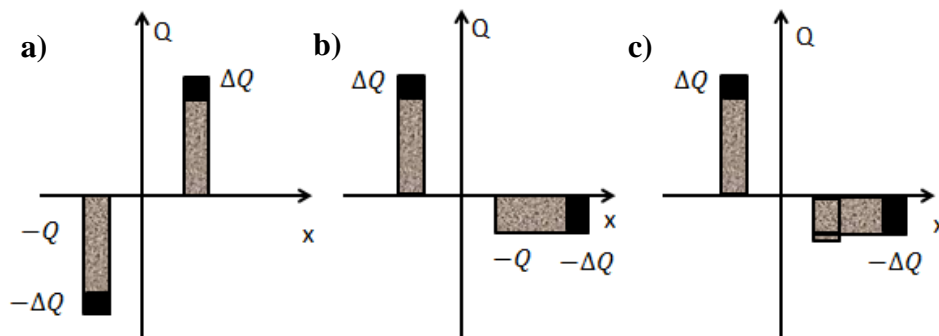


Figura 11: Variação das cargas em um capacitor MOS tipo-p, em resposta de um sinal AC de alta frequência e uma tensão DC. a) acumulação, b) depleção e c) inversão

Todas as medidas C-V deste trabalho foram realizadas por meio do equipamento HP4284A, localizado no Laboratório de Microeletrônica do IF-UFRGS.

#### 4.4.4 Elipsometria espectral

Elipsometria é uma técnica óptica não-destrutiva para investigação das propriedades dielétricas (espessura ( $\delta$ ), índice de refração ( $n$ ) e índice de absorção ( $k$ )) de filmes finos. A luz incidente interage com o filme investigado, produzindo uma resposta que é sensível a qualquer mudança óptica da radiação incidente.

O sinal medido pela Elipsometria é resultado da mudança na polarização da luz, que depende da interação da radiação incidente com a estrutura do filme de interesse (interações podem ser de reflexão, absorção, espalhamento ou transmitido). A mudança na polarização é quantificada pela razão da amplitude ( $\psi$ ) e a diferença de fase ( $\Delta$ ). Devido a dependência do sinal com espessura e das propriedades do material investigado, Elipsometria pode ser uma ferramenta universal para determinação de espessuras e constantes ópticas relacionadas a todos os tipos de filme. Ainda ao seu favor, conta-se com a rapidez das análises e o fato de ser uma técnica não-destrutiva.

Incidindo um feixe de luz polarizado sob a amostra e medindo a mudança de polarização após a interação, através da reflexão, podemos determinar as propriedades do material. A mudança de polarização é determinada pelas amplitudes relativas das componentes paralela ( $p^P$ ) e perpendicular ( $p^S$ ) ao plano de incidência em conjunto com a diferença de fase entre as duas componentes ( $\Delta^P - \Delta^S$ ) [63]. A partir da razão entre as reflexões das duas polarizações são definidos os parâmetros  $\psi$  e  $\Delta$ :

$$\frac{R^P}{R^S} = \frac{p^P}{p^S} e^{i(\Delta^P - \Delta^S)} = \tan(\psi) e^{i\Delta} \quad (29).$$

Para medir os parâmetros  $\psi$  e  $\Delta$ , utiliza-se um arranjo experimental conforme mostrado na Figura 12. Nesse aparato experimental, utiliza-se um feixe de luz colimado e monocromático que atravessa um polarizador e um retardador de fase (cristal birrefringente responsável pela defasagem entre as componentes p e s), tornando o feixe elipticamente polarizado. O polarizador e o retardador são ajustados de maneira que o feixe refletido seja plano-polarizado. O feixe refletido atravessa o analisador (outro polarizador) que é ajustado até atingir um mínimo sinal no detector (espectrômetro).

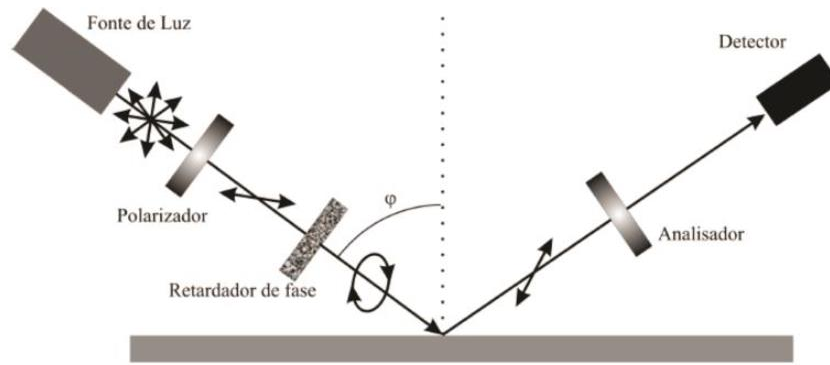


Figura 12: Esquemático experimental do Elipsômetro.

A medida de Elipsometria permite obter os parâmetros  $A$ ,  $B$  e  $C$  da formula de dispersão de Cauchy, que relaciona o índice de refração ( $n$ ) com o comprimento de onda ( $\lambda$ ) [64]:

$$n(\lambda) = A + \frac{B}{\lambda^2} + \frac{C}{\lambda^4} \quad (30)$$

O equipamento utilizado para as medidas foi o Elipsômetro modelo SOPRA GES-E. Este equipamento encontra-se no Laboratório de Laser e Óptica, do Instituto de Física da UFRGS. Para se obter a espessura e o índice de refração dos filmes analisados, foi utilizado o software *Winelli II*. As medidas foram feitas com ângulo de incidência de  $75^\circ$  com a normal e no intervalo espectral de 300 a 800 nm.

Esta técnica foi empregada no estudo da espessura dos dielétricos depositados por ALD. Como as taxas de deposições por ALD foram determinadas previamente, utilizamos a Elipsometria para confirmar as espessuras depositadas.

#### 4.4.5 Reflectometria de Raio X

A técnica de Reflectometria de raio X (XRR) consiste basicamente em varrer um feixe de raios X em ângulos rasantes sobre uma superfície de uma amostra. A interação do raio X com a amostra é detectada e posteriormente analisada para se obter informações sobre

densidade, rugosidade e espessura do filme. É uma técnica não destrutiva e ideal para análise de filmes finos depositados sobre um substrato.

A Figura 13 mostra a relação entre o ângulo de incidência do raio X e o ângulo de saída, depois de refletir sobre a superfície do filme fino e da interface filme fino/substrato. Após interação com a amostra, os raios X refletidos são coletados pelo detector e obtém-se a curva de refletividade. A curva de refletividade consiste em um gráfico que relaciona a intensidade dos raios X refletidos com o ângulo de incidência ( $\Theta$ ). Para ângulos entre zero e um certo ângulo crítico ( $\Theta_c$ ), ocorre a reflexão total do filme fino, como mostrado na Figura 13. O ângulo crítico está relacionado com a densidade eletrônica do material e da radiação do feixe incidente. Para ângulos acima do  $\Theta_c$ , parte do raio X incidente penetra na amostra e interage com o material do filme. Para determinados ângulos específicos ( $\Theta > \Theta_c$ ), ocorrerá a interferência dos raios X refletidos por diferentes interfaces, resultando em oscilações (franjas de Kiessig) na intensidade dos raios X refletidos, em função do ângulo de incidência [65] [66].

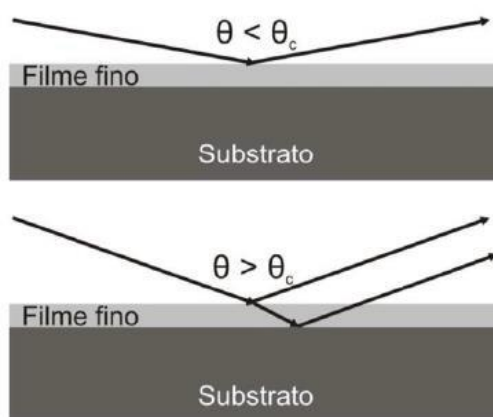


Figura 13: Relação entre o ângulo de incidência ( $\Theta$ ) e o ângulo crítico ( $\Theta_c$ ), para o experimento de XRR.

A curva de refletividade é mostrada no exemplo da Figura 14. Na figura, a refletividade em função do ângulo de incidência dos raios X é plotada e relaciona cada parte da curva obtida com os parâmetros que podem ser extraídos. A intensidade da curva antes do  $\Theta_c$  é influenciada por fatores experimentais tais como: o tipo de atenuador usado entre os raios X e a amostra e; o tamanho da amostra. Uma amostra menor significa menor área de incidência de raios X, de modo a gerar uma menor intensidade do sinal detectado. O  $\Theta_c$  tem dependência com a

densidade eletrônica do material, de modo que quanto maior a densidade do material, maior será o ângulo crítico. A partir do momento que  $\Theta > \Theta_c$ , os raios X penetram no material e o sinal detectado é significativamente reduzido. A rugosidade superficial da amostra afeta a declividade do sinal após o  $\Theta_c$ , sendo que quanto maior a rugosidade, mais abrupta será a declividade. A distância das oscilações está relacionada com a espessura do filme, sendo que quanto mais espesso o filme, mais próximas estarão as oscilações. Atrélos a amplitude dos sinais de refletividade estão a rugosidade interfacial, resolução, qualidade da interface e variações na densidade.

As medidas realizadas neste trabalho utilizaram o equipamento Bruker AXS Gmb, do Laboratório de Conformação Nanométrica, no Instituto de Física da UFRGS. As análises dos dados foram realizadas pelo software DIFFRACplus LEPTOS 7.

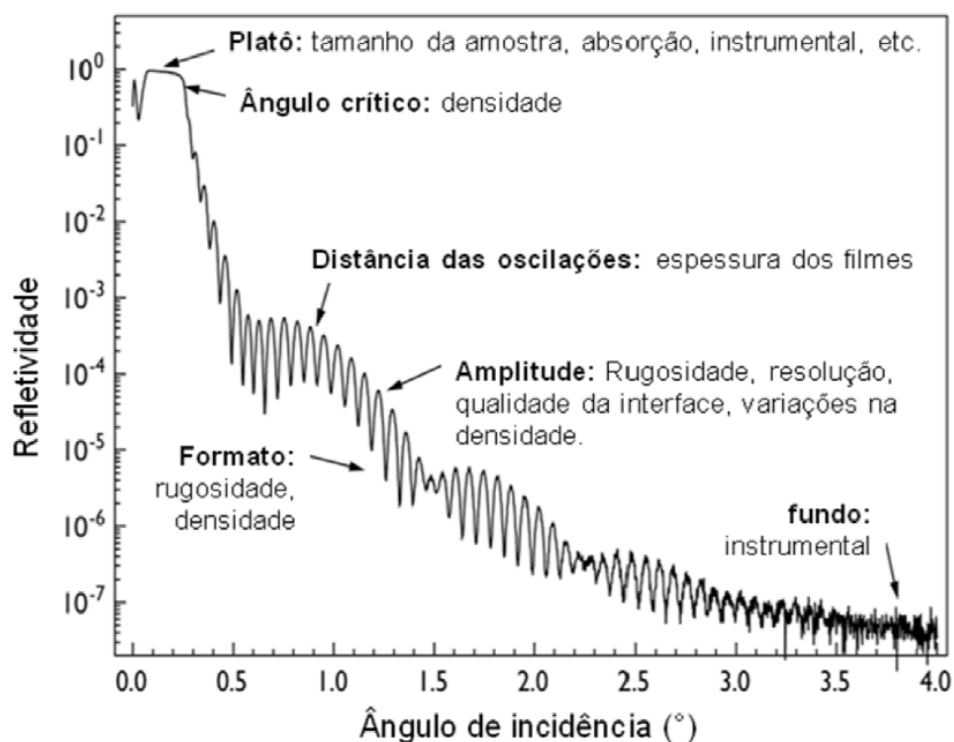


Figura 14: Curva típica de refletividade em função do ângulo de incidência dos raios X e informações que podem ser obtidas da mesma. Adaptado de [66].

#### 4.4.6 Espectrometria de Retroespalhamento Rutherford (RBS)

Espectrometria de Retroespalhamento Rutherford (RBS) é uma técnica analítica usada para estudar a estrutura e composição de materiais. A técnica consiste basicamente em direcionar um feixe de íons com uma determinada energia sobre uma amostra a ser analisada, como mostrado na Figura 15. Os íons interagem com o material da amostra, de modo que alguns destes acabam sendo retroespalhados. Estes, por sua vez, são coletados por um detector de estado sólido, gerando pares e-h. Após o sinal elétrico gerado pelos pares e-h ser amplificado pela eletrônica apropriada e chegar ao computador, obtemos um espectro da quantidade de íons espalhados pela energia detectada. A geometria do experimento deve ser levada em conta para efeitos de cálculos da energia detectada.

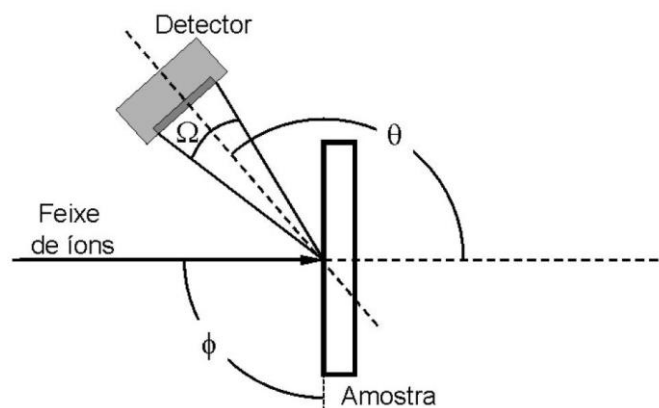


Figura 15: Representação experimental de RBS. São indicados os ângulos referentes aos parâmetros da geometria experimental ( $\Theta$  e  $\phi$ ) e do detector, caracterizado pelo ângulo sólido  $\Omega$ .

Usualmente são utilizados feixes de íons de He de alta energia (na ordem de MeV). O espalhamento acontece de forma elástica, por repulsão eletrostática gerada pelo campo elétrico do núcleo dos átomos da amostra. Os íons, após a colisão com os átomos da amostra, acabam tendo uma energia menor em comparação à energia incidente, relacionada pela equação:

$$E_f = K \cdot E_0 \quad (31)$$



onde  $E_f$  é a energia após a colisão com um átomo da amostra,  $E_0$  é a energia do feixe de íons incidente e  $K$  é o fator cinemático. O fator cinemático  $K$  é diferente para cada interação do íon do feixe com os átomos constituintes da amostra. Desse modo,  $K$  depende da massa do íon incidente, das massas de cada um dos átomos da amostra e do ângulo de espalhamento.

Devido ao fator cinemático  $K$ , elementos mais pesados do filme aparecerão em energias superiores no espectro de RBS. A escala de energia referente ao íon espalhado pode ser transformada em escala de massa. Ainda, podemos obter informações em relação à distribuição em profundidade dos elementos no filme. Uma vez que o íon incidente sofre espalhamento não só na superfície do filme, mas também no interior do filme, este acaba perdendo energia em sua trajetória durante sua penetração e saída do filme. Essa perda de energia pode ser causada pelo freamento nuclear e/ou eletrônico. Nesse caso, o íon espalhado acaba tendo energia menor do que  $K_x \cdot E_0$  ( $K_x$  referente ao fator cinemático de um elemento qualquer  $X$ ). Levando em conta o poder de freamento do material na faixa de energia de análise, podemos transformar a escala de energia em escala de profundidade dos elementos no interior do filme.

A técnica de RBS é bem conhecida no meio científico, em especial pela comunidade do Instituto de Física da UFRGS, que possui um acelerador Tandetron de 3 MV, localizado no laboratório de Implantação Iônica. Utilizamos o experimento de RBS para caracterizar os detectores de SiC fabricados durante este doutorado, e os comparamos com os tradicionais detectores de Si. Para analisar os dados coletados durante o experimento de RBS, utilizamos o software SIMNRA 6.06, disponibilizado eletronicamente pelo *Max-Planck-Institut für Plasmaphysik* [67].

#### 4.5 Simulação com o programa *Energy Band Diagram*

Para realizar os cálculos da SBH e estimar as espessuras dielétricas depositadas nas estruturas MIS, são necessárias informações a respeito da barreira efetiva ( $\zeta$ ) das camadas interfaciais dos diodos Schottky. Para se obter essas informações, utilizamos um programa disponibilizado pelo grupo de pesquisa “*Knowlton Research Group*”, da *Boise State University – USA*. O programa, chamado de “*Band Diagram Program*” (BDP) [68] [69], permite a simulação das bandas de energia das mais diversas estruturas do tipo Metal-Dielétricos-Semicondutor. A representação gráfica do programa é mostrada na Figura 16.

O BDP é interativo e permite a extração de vários parâmetros tais como: tensão limiar, tensão de *flatband* (tensão de banda plana), espessura de óxido equivalente (EOT), medidas de capacitâncias, quedas de potencial, simulação do campo elétrico, entre vários outros. É possível também modificar a temperatura.

A Figura 17 mostra uma simulação de uma estrutura composta por Ni/TiO<sub>2</sub>/SiC<sub>x</sub>O<sub>y</sub>/4H-SiC, em tensão de banda plana igual a 1.54 V. É importante estabelecer a tensão de banda plana para obtenção da barreira efetiva, pois a mesma garante que a tensão aplicada no metal produza uma energia de banda plana no semiconductor, ou seja, sem distorções na banda de condução, energia de Fermi e banda de valência, ao longo da distância perpendicular a junção Schottky.

Neste trabalho foram testadas algumas estruturas Schottky do tipo MIS. Para extração dos parâmetros Schottky, os valores de barreira efetiva são usados nas equações. A Tabela 4 contém os valores de barreira efetiva ( $\zeta$ ) dos dielétricos testados, obtidos pelo BDP.

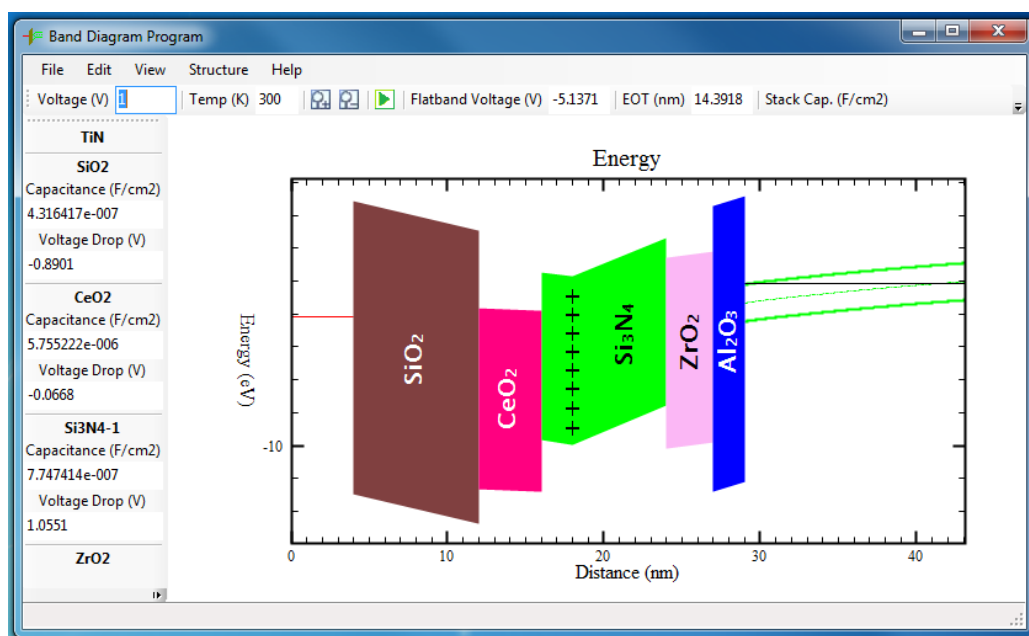


Figura 16: Interface gráfica do BDP, exemplificando a simulação de várias estruturas. Adaptado de [69].

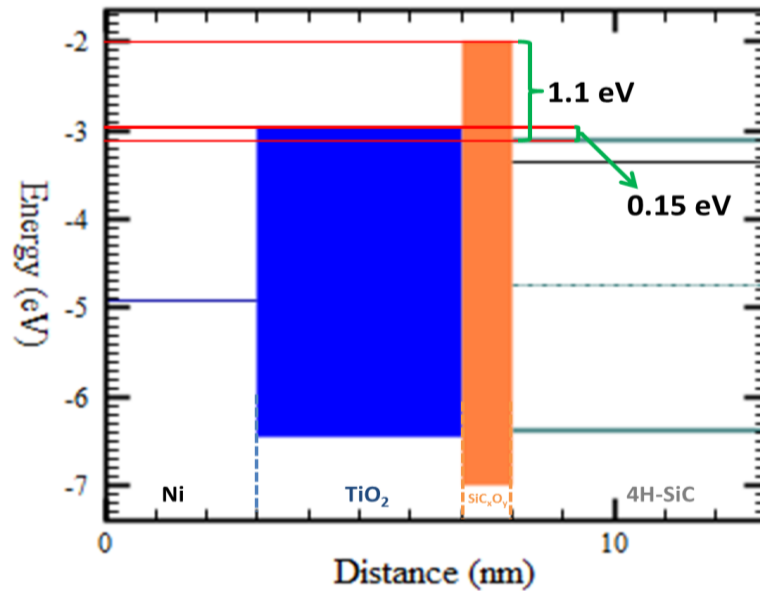


Figura 17: Simulação usando o BDP considerando uma estrutura Ni/TiO<sub>2</sub>/SiC<sub>x</sub>O<sub>y</sub>/SiC para extração da barreira efetiva dos dielétricos TiO<sub>2</sub> e SiC<sub>x</sub>O<sub>y</sub>. A simulação foi realizada com tensão de banda plana de 1.54 V aplicada no contato de Ni.

Tabela 4: Valores da barreira efetiva de alguns dielétricos utilizados neste trabalho de doutorado.

Dielétrico	Barreira efetiva da camada dielétrica em respeito a $E_c$ do 4H-SiC (em eV)
SiO <sub>2</sub>	2.15
SiC <sub>x</sub> O <sub>x</sub>	1.1
TiO <sub>2</sub>	0.15
HfO <sub>2</sub>	0.43
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	1.8

## 5. Resultados e discussão

A Figura 18 mostra um fluxograma identificando as etapas de preparação das amostras: corte do *wafer* de SiC, limpeza química RCA, deposição de contato ôhmico, deposição de uma fina camada dielétrica, deposição do contato Schottky, recozimento após deposições dos metais e medida elétrica (I-V e C-V). Ainda, após caracterização elétrica das estruturas, realizamos a montagem do detector e posterior caracterização do mesmo no experimento de RBS.

A primeira parte do trabalho mostra os resultados iniciais e introduz o modelo da dependência da SBH com a temperatura. A segunda parte estuda as características dos dielétricos depositados por ALD. A terceira parte do trabalho consiste em entender como se dá a formação da barreira Schottky no SiC e o aumento da SBH variando a temperatura de medida I-V, nas amostras que tiveram inserção de uma fina camada dielétrica entre metal e semicondutor. A última parte do trabalho tem como objetivo utilizar a estrutura MIS de SiC para detector de partícula alfa no experimento de RBS.

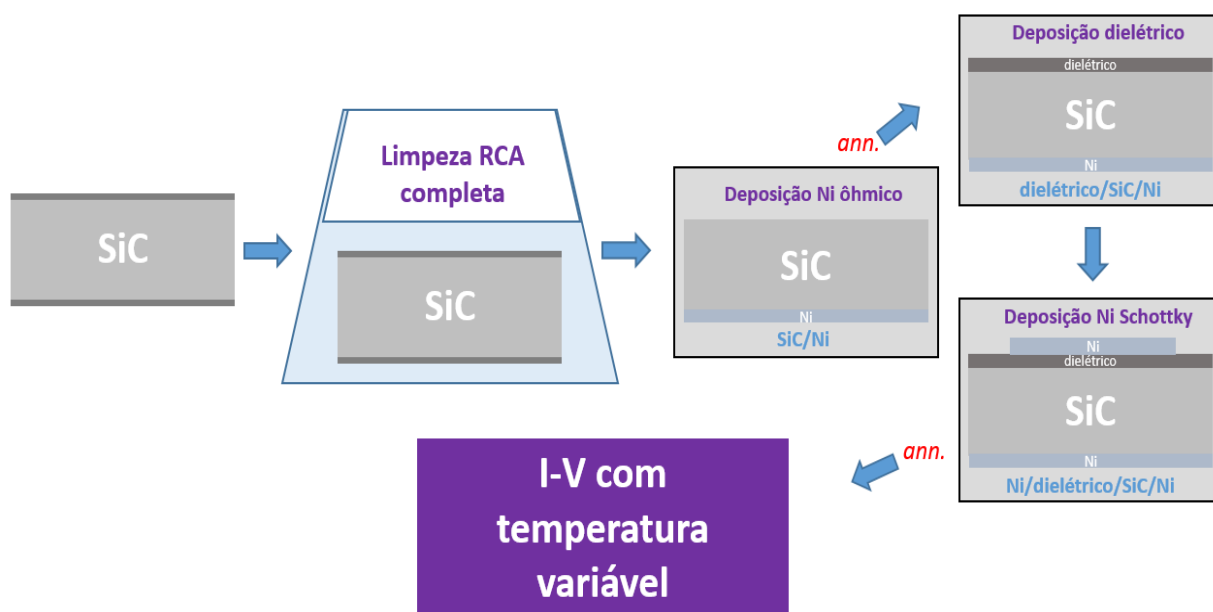


Figura 18: Diagrama de fluxo mostrando as etapas de preparação das amostras. A palavra “*ann.*” quer dizer que um recozimento (processamento térmico) foi realizado.

## 5.1 Resultados iniciais

### 5.1.1 Contatos ôhmicos no SiC

Um diodo Schottky consiste de duas junções entre metal e semicondutor. Uma dessas junções é referente ao contato Schottky e a outra é referente ao contato ôhmico. Nesse sentido, se faz necessário um estudo sobre quais metais são mais adequados para a construção de um diodo Schottky. Nesta seção estaremos interessados no contato ôhmico no SiC, do lado oposto ao da camada epitaxial. Chamamos este lado de face carbono do 4H-SiC. A face silício é a parte onde irá acontecer o contato Schottky, que será discutida posteriormente

Um metal muito utilizado para formar contatos ôhmicos na microeletrônica é o Alumínio (Al) [70] [71]. O mesmo forma um contato ôhmico adequado sem mesmo ser necessário um tratamento térmico posterior. A Figura 19b) mostra a curva I-V para três conjuntos de contatos ôhmicos (cada conjunto sendo de dois contatos adjacentes). Esses contatos foram arranjados por meio de uma máscara mecânica utilizada na deposição do metal por *sputtering* (Figura 19 a)).

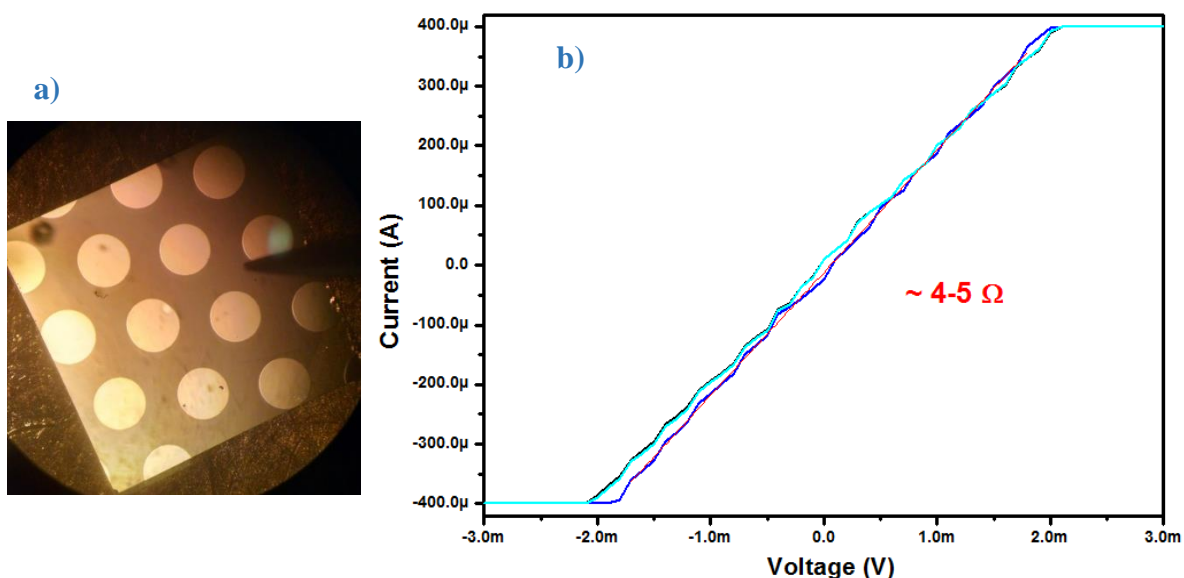


Figura 19: a) Imagem de uma amostra na qual foi depositado Al utilizando máscara mecânica, sobre a face C. b) Curva I-V de três contatos de SiC/Al sem recozimento térmico.

Podemos observar que os contatos ôhmicos de Al proporcionam uma baixa resistência (~5 ohms). Quando o contato ôhmico de Al é submetido a temperaturas acima de 200°C, o mesmo piora consideravelmente, apresentando uma resistência acima de 10 ohms. Os estudos apresentados posteriormente mostram que um bom contato Schottky utiliza Ni como metal, e este deve ser recozido termicamente a temperaturas acima de 200°C. Isso nos motivou a buscar uma alternativa ao Al, para formação do contato ôhmico.

Encontramos na literatura vários outros tipos de contatos e dentre estes aparece o Ni como potencial candidato, não somente para formação de contato Schottky, mas também para formação de contato ôhmico [72] [73] [74] [75]. Para tanto, foram fabricados contatos ôhmicos de Ni. Após a deposição por *sputtering* utilizando máscara mecânica, as amostras foram recozidas a partir da menor temperatura. A Figura 20a) apresenta a resistência em função da temperatura de recozimento realizada no RTP. O processo de RTP foi realizado com fluxo constante de Ar, nas temperaturas de processamento de 700 a 1000°C, por 5 minutos. Foi medida a resistência entre dois contatos primeiros vizinhos (curva em azul) e entre contatos segundos vizinhos (em preto na figura). O processo de recozimento foi realizado em sequência, ou seja, com a mesma amostra. Entre um recozimento e outro, foram traçadas as curvas I-V. Como indicado pela literatura [75], a temperatura de recozimento de 950°C apresentou menor resistência.

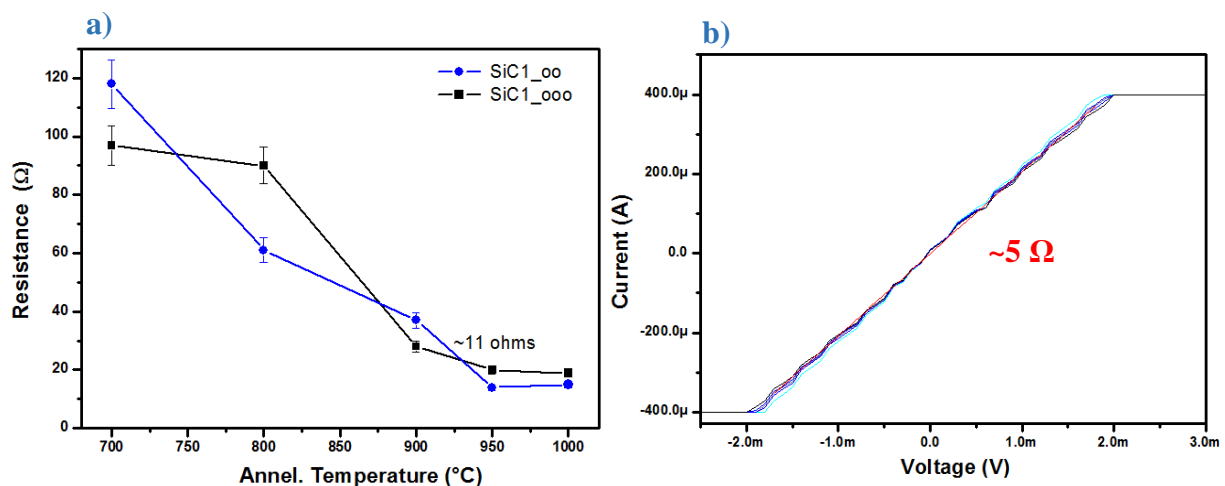


Figura 20: a) Resistência do contato ôhmico de SiC/Ni em função da temperatura de recozimento. São apresentadas duas curvas: a curva azul representa a resistência de contato entre dois contatos primeiros vizinhos (representados por “oo”), enquanto que a curva preta representa a resistência entre dois contatos que possuem outro contato entre os mesmos – segundos vizinhos (representados por “ooo”). b) Curvas I-V de contatos ôhmicos de SiC/Ni recozido diretamente na temperatura de 950°C.

Quando realizamos o processo de RTP diretamente na temperatura de 950°C (após a deposição, recozimento direto na temperatura de 950°C), o contato melhora para uma resistência de ~5 ohms. A Figura 20b) mostra as curvas I-V para diferentes arranjos de contatos – primeiros vizinhos.

O processo que rege a condução elétrica pelo contato ôhmico é bem conhecido e se chama tunelamento quântico. Uma vez que a face carbono do SiC é fortemente dopada, a barreira de potencial vista pelo elétron é fina o suficiente de modo a favorecer a condução através do tunelamento pela barreira, como mostrado na Figura 21a). A Figura 21b) mostra a simulação da estrutura Ni/4H-SiC, dopado com  $N_D = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , com tensão de 0 V aplicada no metal.

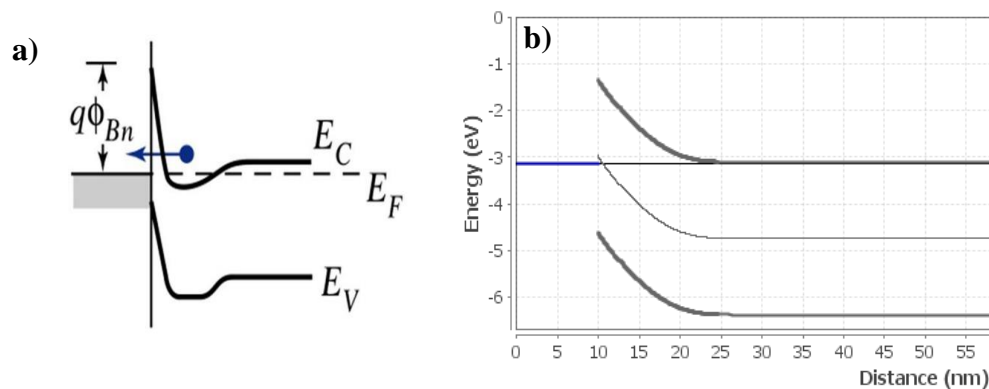


Figura 21: a) Diagrama de bandas para um semiconductor altamente dopado. A barreira de potencial na interface metal-semiconductor é muito fina, favorecendo o processo de tunelamento. b) Simulação da estrutura Ni/4H-SiC, dopado em  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , com tensão de 0 V.

Neste primeiro estudo, Ni depositado e tratado termicamente na temperatura de 950°C se mostrou promissor para formação do contato ôhmico. A partir de então, todas as amostras foram preparadas com a deposição (por *sputtering*) de Ni para contato ôhmico, sem máscara mecânica. Subsequentemente é realizado um recozimento a 950°C. As espessuras de Ni depositadas foram de 150 nm, em toda a área da face carbono do SiC.

Na sequência foi realizada a deposição de Ni para formação do contato Schottky na face silício do SiC. Este estudo é apresentado nas próximas seções. Antes, porém, apresentamos uma tentativa de formação de contato Schottky a partir de Al depositado. A Figura 22 mostra o resultado para Al sem e com recozimento em 200°C. Em ambos os casos, o contato é ôhmico

e não produz uma barreira Schottky. Isso se deve ao valor relativamente baixo da função trabalho do Al (4.1 eV).

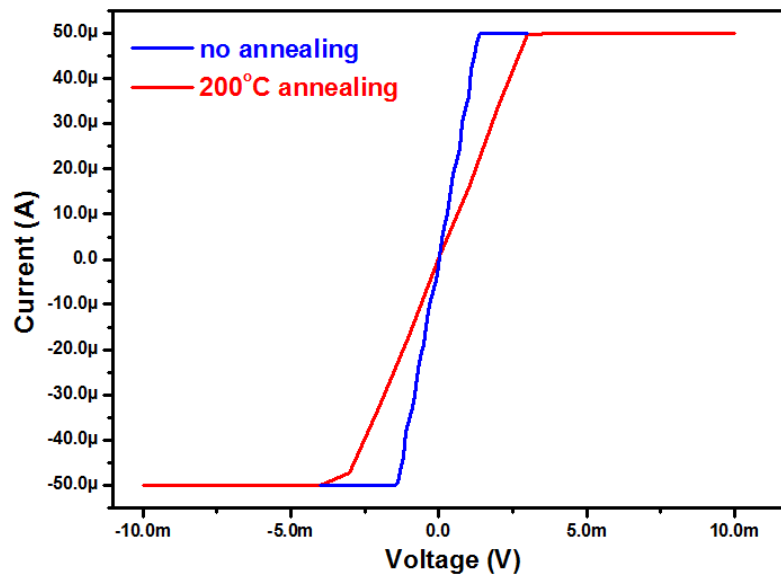


Figura 22: Curva I-V em uma tentativa de formação de contato Schottky de Al em SiC, antes e após recozimento em 200°C.

### 5.1.2 Contato Schottky no SiC (estrutura Ni/SiC/Ni)

A primeira tentativa deste trabalho de formar um diodo Schottky com características de detector foi formar uma estrutura Ni(Schottky)/4H-SiC/Ni(ôhmico). Quando nos referimos a “diodo Schottky com características de detector”, estamos preocupados principalmente em dois parâmetros: i) SBH superior aos detectores usuais de Si e ii) corrente de fuga mais baixa possível, quando o diodo está polarizado reversamente. Um está relacionado com o outro, uma vez que uma SBH baixa irá resultar em uma corrente de fuga alta.

As amostras Ni/SiC/Ni foram preparadas na seguinte sequência de processos: i) limpeza RCA completa + HF para remoção de qualquer contaminante e óxido nativo; ii) deposição de 150 nm de Ni na face carbono do SiC; iii) RTP com Ar, 950°C, 5 min; iv) na metade do grupo de amostras foi realizada novamente uma limpeza com HF, anterior a deposição dos contatos Schottky. Na outra metade não foi realizada nenhuma limpeza adicional; v) deposição de Ni



para contato Schottky, com máscara mecânica, em todas as amostras (espessura de 300 nm); vi) RTP sequencial em Ar, variando a temperatura (200-400°C), 5 min. O tempo de 5 min no processo de RTP é suficiente, uma vez que não foi observada nenhuma diferença quando realizamos 10 min de recozimento.

Por fim, possuímos dois grupos de amostras, anterior ao processo de RTP:

1. **Grupo RO** (remoção do óxido): houve remoção do óxido nativo antes da deposição do contato Schottky;
2. **Grupo NRO** (não-remoção do óxido): não houve remoção do óxido nativo antes da deposição do contato Schottky.

A Figura 23 mostra as curvas I-V dos dois conjuntos de amostras, tanto da parte direta como da parte reversa. Primeiramente analisaremos a parte direta (tensão positiva aplicada no contato Schottky). Pode-se observar que conforme aumento da temperatura de recozimento, o grupo de amostras NRO apresentou um deslocamento da curva I-V para valores maiores no eixo da tensão. Já no grupo de amostras RO, o aumento da temperatura de recozimento não provocou um efeito ordenado como nas amostras do grupo anterior. A SBH do grupo de amostras RO variou de 0.76 até 1.16 V de maneira desordenada, sem nenhuma dependência em relação ao aumento da temperatura. Já para o grupo de amostras NRO, o comportamento da SBH foi dependente com relação a temperatura de recozimento, de modo que houve uma variação de 1.05 até 1.31 V, no intervalo de 200 a 400°C, respectivamente. As amostras que não tiveram seu óxido nativo atacado quimicamente com HF previamente à deposição do Ni (contato Schottky) acabam tendo seus estados de interface passivados. Um semiconductor passivado produz uma interface entre metal e semiconductor com menos estados de interface eletricamente ativos. Já um semiconductor sem passivação nenhuma, que tem a deposição de um metal sobre ele, acaba deixando mais estados de interface não passivados.

As características dos diodos reversamente polarizados são apresentadas nas Figura 23b) e d), para o grupo de amostras RO e NRO, respectivamente. A corrente reversa medida para o grupo de amostras RO chegou a sua corrente de saturação de 50  $\mu$ A antes mesmo dos 20 V aplicados reversamente. Sendo assim, estes diodos não apresentaram boas características reversas. Já para o grupo de amostras NRO, a corrente reversa obtida foi de alguns pA para tensões reversas de 20 V. Este grupo de amostras mostrou ótimas características quando polarizado reversamente. Dessa maneira, uma fina camada passivadora entre Ni (Schottky) e SiC pode ser benéfica, de modo a aumentar a SBH e diminuir a corrente reversa.

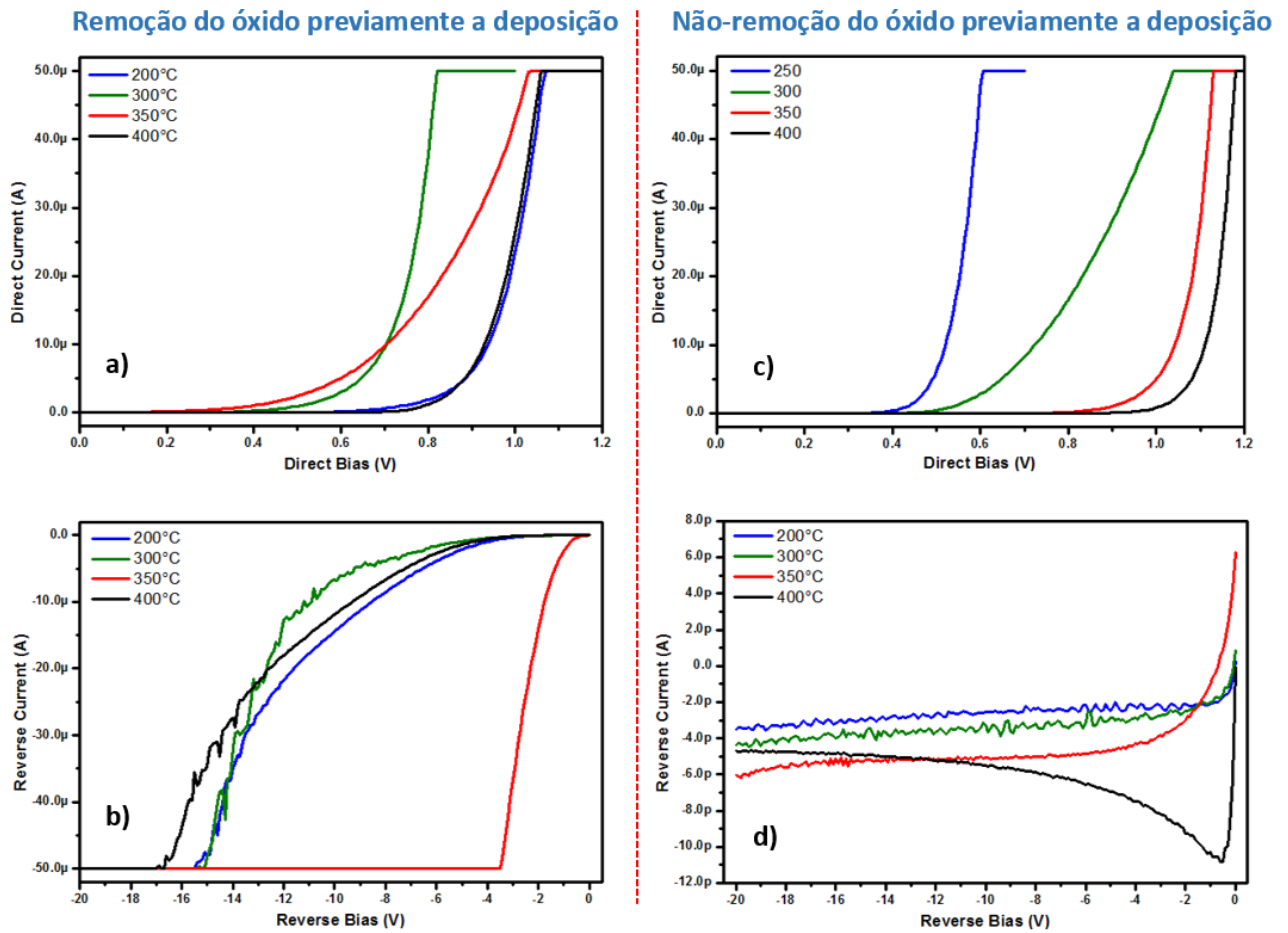


Figura 23: Curvas I-V com polarização direta e reversa, variando a temperatura de recozimento para formação do contato Schottky. a) e b) são referentes às medidas do grupo RO, enquanto c) e d) são referentes às medidas do grupo NRO.

No gráfico da Figura 24 são mostrados dois diodos diferentes para cada um dos dois grupos de amostras (RO e NRO). Estes diodos tiveram recozimento sequencial (eixo horizontal) e a SBH foi extraída. Os dois diodos do grupo RO apresentaram uma variação desordenada na SBH em função do aumento da temperatura de recozimento. Para os dois diodos NRO, temperaturas acima de 300°C mostram aumento na SBH, além de apresentarem as menores correntes de fuga.

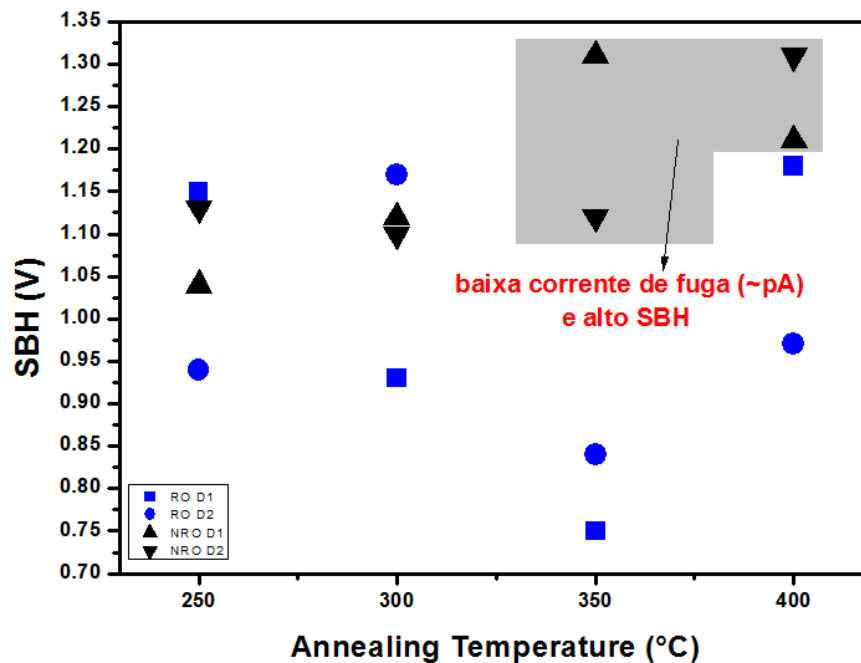


Figura 24: SBH em função da temperatura de processamento RTP para 2 diodos de cada um dos grupos RO e NRO. Acima de 300°C, diodos do grupo NRO apresentaram baixa corrente de fuga e alto SBH (pintado de cinza no gráfico).

Ainda foi realizado um estudo de recozimento a 450°C para comparação com os resultados anteriores. A Figura 25 mostra a SBH e a corrente reversa medida com polarização reversa de 100 V, em função da temperatura de recozimento, para três diodos do grupo NRO. Podemos ver que a SBH aumenta muito pouco de 400°C para 450°C. Por outro lado, a corrente reversa medida aumenta em torno de 4 vezes em relação a temperatura de 400°C. Como a corrente reversa é um fator importante a ser considerado na futura construção do detector, optamos por realizar todos os recozimentos, para formar o contato Schottky, na temperatura de 400°C.

É bem estabelecido na literatura que o Si, quando exposto a um ambiente que contém moléculas de O<sub>2</sub> ou H<sub>2</sub>O, oxida naturalmente à temperatura ambiente, formando uma camada de óxido com ~2.5 nm de espessura [76]. Devido à similaridade do SiC com o Si, podemos esperar que o mesmo também oxide naturalmente. Porém, devido a presença de carbono na estrutura do SiC, a oxidação térmica se torna um processo mais complexo comparado ao Si. Durante a oxidação, ligações Si-C são quebradas na interface SiO<sub>2</sub>/SiC, gerando CO e C, além do SiO<sub>2</sub>. Para entender um pouco sobre a cinética de reação que ocorre na superfície do SiC,

supomos que o SiC tenha sua terminação cristalográfica bem definida, não possua contaminantes/impurezas e que está inserido em um ambiente com uma pressão parcial de O<sub>2</sub>.

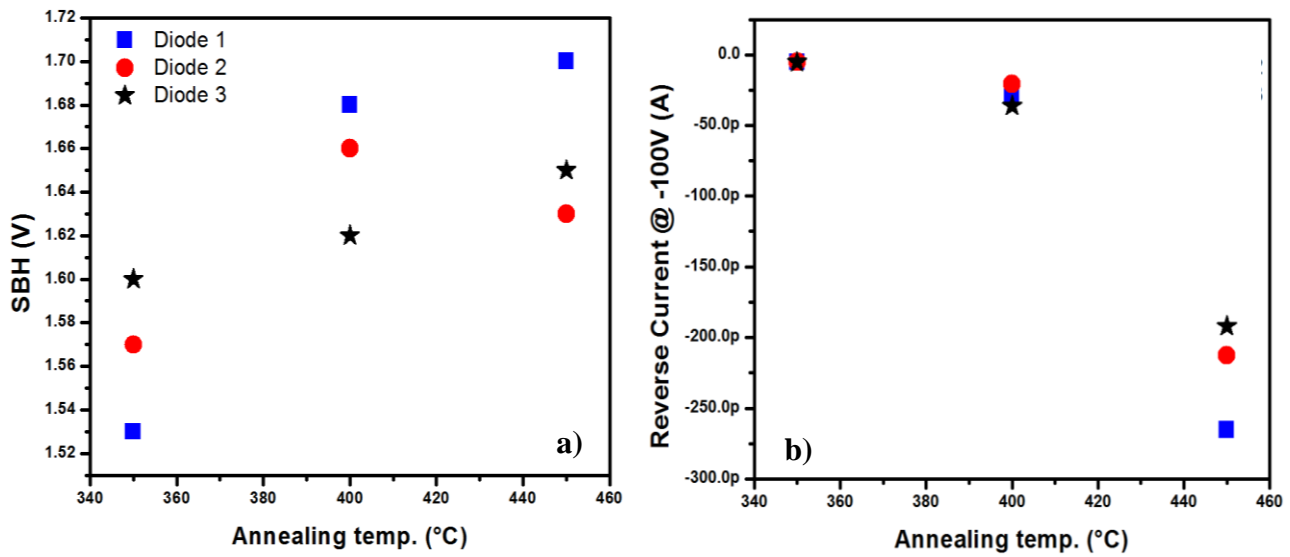
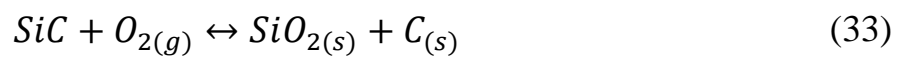
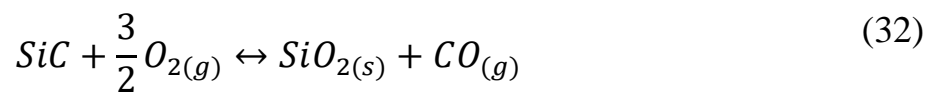


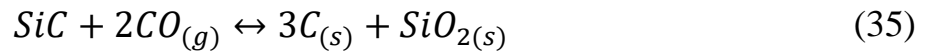
Figura 25: a) SBH e b) corrente reversa na polarização de -100 V, em função da temperatura de recozimento, para três diodos do grupo NRO.

As duas principais reações químicas que ocorrem na superfície do SiC são descritas pelas seguintes equações [77] [78]:

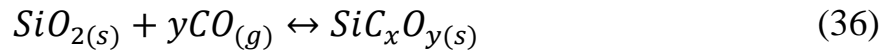


Os produtos das duas reações acima podem reagir com o substrato de SiC, com o O<sub>2</sub> ou ainda com o SiO<sub>2</sub> formado, dando origem às reações secundárias [77] [79]:





Grande parte do C reage com o oxigênio e forma CO gasoso, que é volátil (equação (34)), mas uma pequena parte acumula-se na região interfacial (equação (35)). Caso o CO reaja com uma camada de óxido já formada, outras reações podem ocorrer [79] [80] [81], com por exemplo:



Nessa reação,  $x$  e  $y$  remetem à estequiometria variável desses compostos contendo Si, O e C, denominados oxicarbeto de silício ( $SiO_xC_y$ ). Cálculos teóricos demonstram que a formação do  $SiC_xO_y$  como camada interfacial é termodinamicamente favorável [82] [83] e inevitável na transição entre o SiC e o  $SiO_2$  [84].

Várias tentativas de remoção do  $SiC_xO_y$  em ambientes úmidos (utilizando produtos químicos) não se mostraram eficazes, evidenciando uma alta resistência química deste composto [79]. Dessa maneira, o SiC exposto a um ambiente contendo moléculas de  $O_2$  ou  $H_2O$ , irá crescer naturalmente uma fina camada de  $SiC_xO_y$ .

A formação natural de uma camada interfacial de  $SiC_xO_y$  motivou a realização de uma simulação teórica das características elétricas de estruturas MIS, apresentada a seguir. Para tanto, é necessário saber a barreira efetiva da camada de isolador, que foi calculada utilizando o *Band Diagram Program*. A Figura 26 mostra o diagrama de bandas para a estrutura Ni/ $SiC_xO_y$ /SiC, polarizado diretamente, com tensão de banda plana e reversamente. A altura da barreira efetiva do oxicarbeto de silício foi calculada em 1.1 eV.

Como na superfície do SiC sempre existe uma fina camada de  $SiC_xO_y$  nativo, que não é uniforme devido a sua reação não controlada, decidimos adicionar camadas finas de outros dielétricos e investigar estas estruturas MIS.

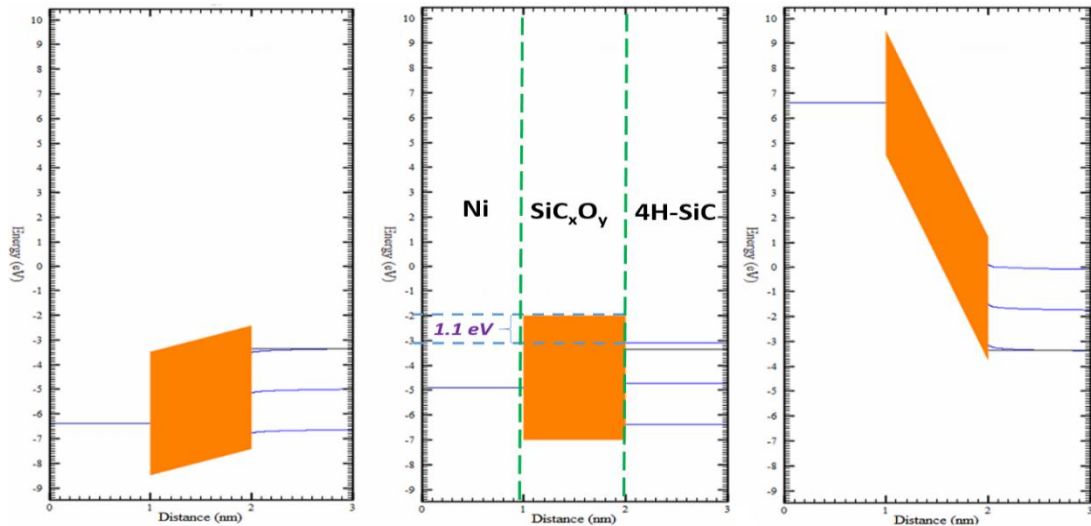


Figura 26: Diagrama de bandas simulado para estrutura Ni/SiC<sub>x</sub>O<sub>y</sub>/SiC, com polarização direta (3 V), tensão de banda plana (1.566 V) e polarização reversa (-10 V), da esquerda para a direita, respectivamente. 1.1 eV é o valor da barreira efetiva calculada para o SiC<sub>x</sub>O<sub>y</sub>.

### 5.1.3 Simulação de estruturas Metal-Isolador-Semicondutor

Nesta subseção procuramos explicar o papel da espessura do dielétrico interfacial sobre o valor da SBH aparente.

Foram simuladas curvas I-V usando a equação (20), para diodos Schottky de SiC com camadas interfaciais de óxido de titânio (TiO<sub>2</sub>) com espessuras ( $\delta$ ) de 0, 10 e 40 angstroms, variando a temperatura entre 297-373 K. Os parâmetros usados foram:  $A^* = 146 \text{ Acm}^{-2}\text{K}^{-2}$  (para 4H-SiC tipo-n), barreira efetiva da camada interfacial  $\zeta = 0.15 \text{ eV}$ ,  $\phi_{\text{SBH}} = 1 \text{ V}$  e  $\eta = 1$ .

Na Figura 27 são mostradas simulações da densidade de corrente em função da tensão direta aplicada e espessura do dielétrico para quatro temperaturas diferentes. Pode-se observar que quando a espessura da camada interfacial aumenta, a densidade de corrente diminui. Isso é devido ao fato de que a probabilidade dos portadores de carga “tunelar” através da camada dielétrica isoladora diminui conforme a espessura aumenta.

As curvas I-V (Figura 27), simuladas a partir da equação (20) (levando em conta a camada interfacial), foram usadas para extrair o parâmetro da SBH usando a equação (9) (que não considera a existência de camada interfacial). A Figura 28 mostra a extração da SBH versus

a temperatura. Os valores de SBH aparentes são maiores do que o valor usado na simulação (1 V). Sendo assim, não considerando a existência de uma fina camada de isolador entre metal e semiconductor, a SBH é artificialmente aumentada. Esse aumento da SBH mostra uma dependência linear com aumento da temperatura e, portanto, podemos traçar linhas retas que descrevem tal comportamento. Por fim, as funções lineares são equacionadas, como mostrado na legenda da Figura 28.

A inclinação da reta interpolando os pontos da Figura 28 aumenta com aumento da camada interfacial simulada, porém a SBH real é determinada em 0 K, independentemente do valor de  $\delta$ . As linhas retas são equacionadas de acordo com:

$$\phi_{SBH(\text{aparente})} = \phi_{SBH(\text{real})} + \text{slope} * \text{Temperatura (K)} \quad (37)$$

Uma vez determinada a  $SBH_{\text{real}}$ , podemos inferir a espessura da camada interfacial ( $\delta$ ) para dispositivos experimentais, variando a temperatura da medida I-V:

$$\delta = \frac{(\phi_{SBH(\text{aparente})} - \phi_{SBH(\text{real})})}{\frac{kT}{q} (\sqrt{\zeta})} \quad (38)$$

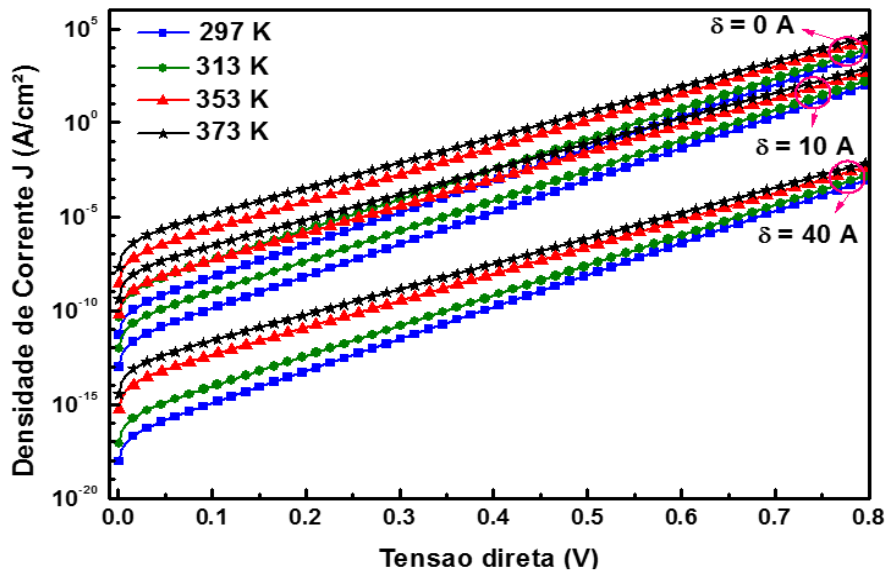


Figura 27: Curvas I-V simuladas para estruturas MIS Schottky de SiC com SBH = 1 V e espessura da camada isoladora de TiO<sub>2</sub> de 0, 10 e 40 angstroms, para diferentes temperaturas.

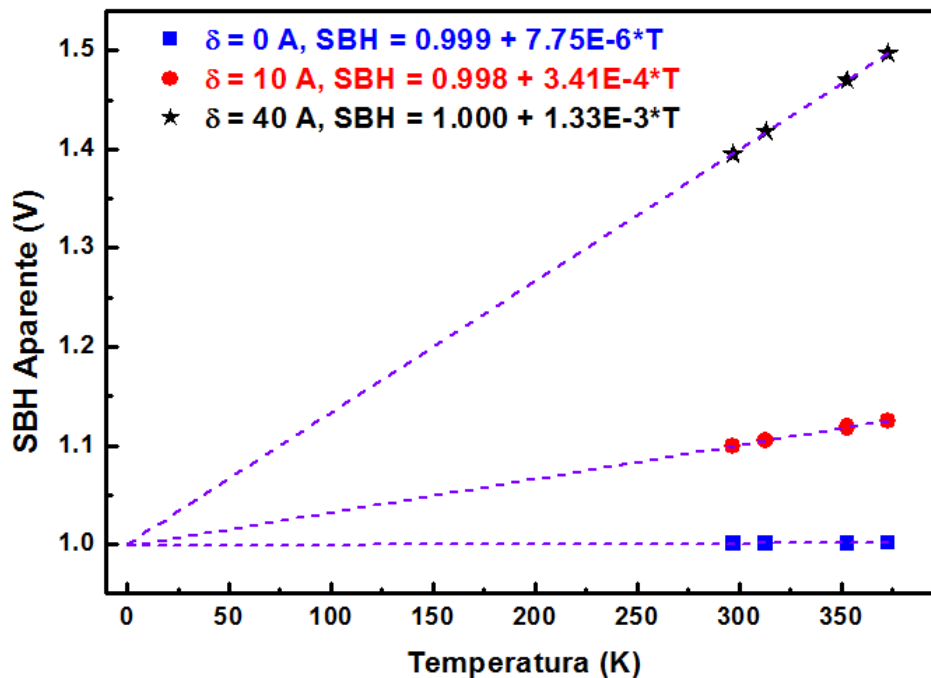


Figura 28: SBH aparente em função da temperatura. O ajuste da dependência linear é mostrado para espessuras da camada isoladora ( $\delta$ ) de 0, 10 e 40 angstroms.

## 5.2 Caracterização das camadas dielétricas depositadas por ALD

De modo a se caracterizar os dielétricos que serão usados nas estruturas Schottky de SiC, foram depositados, por ALD, os dielétricos de  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{HfO}_2$  e  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , com espessura de 20 nm, sobre substrato de Si tipo-p dopado em  $2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ . Posteriormente a deposição dos dielétricos, foram formados os contatos de Al por meio de evaporação térmica, com diâmetros de 200  $\mu\text{m}$  e espessura de 0.45  $\mu\text{m}$ , formando assim capacitores MIS. Para validar as espessuras depositadas anterior a deposição do metal de Al, realizamos um estudo referente às espessuras depositadas, analisando-as por Reflectometria de raio X (XRR) e elipsometria espectral. A partir destas técnicas, obtemos um comparativo das espessuras depositadas, além de informações sobre rugosidade e índices de refração dos dielétricos. Posteriormente a caracterização dos dielétricos, os capacitores MIS de Si foram caracterizados por meio de medidas elétricas I-V e C-V.



### 5.2.1 Caracterização dos dielétricos depositados por XRR e Elipsometria espectral

A espessura nominal dos dielétricos depositados por ALD foi de 20 nm. Dada a informação da espessura depositada por ciclo completo (taxa de deposição), determina-se a quantidade de ciclos necessários para a deposição de 20 nm. As taxas de deposição foram: i) TiO<sub>2</sub>, 0.0232 nm/ciclo, ii) HfO<sub>2</sub>, 0.0833 nm/ciclo e iii) Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, 0.1 nm/ciclo. As taxas de deposição são previamente definidas.

A Tabela 5 resume os resultados obtidos sobre espessura e rugosidade dos dielétricos depositados sobre Si, obtidos a partir dos dados de XRR, mostrados na Figura 29. Notamos que os valores de espessuras se aproximam do valor de 20 nm, com erro de 32%, 12% e 8% para os dielétricos TiO<sub>2</sub>, HfO<sub>2</sub> e Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, respectivamente. Somente o HfO<sub>2</sub> apresentou espessura abaixo do esperado de 20 nm. Estas variações do valor nominal para o valor medido representam variações do processo de deposição. Também pela técnica de XRR inferimos a espessura do óxido nativo (SiO<sub>2</sub>) entre o dielétrico depositado e o Si, variando de 1 a 2.5 nm. A rugosidade superficial dos dielétricos se mostrou abaixo de 1 nm para os dielétricos de HfO<sub>2</sub> e Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, e de 2.4 nm para o dielétrico de TiO<sub>2</sub>. Este último apresentou maior rugosidade e maior variação da espessura depositada, comparada com a espessura nominal de 20 nm.

Para efeito de comparação das espessuras depositadas, também realizamos medidas de elipsometria espectral nas amostras. As medidas de elipsometria foram realizadas em um ângulo de incidência de 75.11° e na faixa de 0.35 – 0.70 μm de comprimento de onda. Para obtenção  $N(\lambda)$  (índice de reflexão) e espessura dos filmes finos, primeiramente foram medidas as grandezas físicas para o substrato de Si (*bulk*), e posteriormente para as amostras.

Tabela 5: Valores de espessura e rugosidade dos dielétricos depositados por ALD sobre Si, obtidos pela técnica de Reflectometria de raio X.

<b>Amostra</b>	<b>Espessura (nm)</b>	<b>Rugosidade (nm)</b>
<b>TiO<sub>2</sub>/Si</b>		
<b>TiO<sub>2</sub></b>	26.5 ± 0.26	2.40
<b>SiO<sub>2</sub></b>	1.0	0.51
<b>Si</b>	-	0
<b>HfO<sub>2</sub>/Si</b>		
<b>HfO<sub>2</sub></b>	17.5 ± 0.18	0.53
<b>SiO<sub>2</sub></b>	2.5	0.33
<b>Si</b>	-	0.47
<b>Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Si</b>		
<b>Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub></b>	21.6 ± 0.22	0.70
<b>SiO<sub>2</sub></b>	2.5	0.32
<b>Si</b>	-	0.17

A Tabela 6 resume as grandezas físicas medidas por elipsometria espectral e a Tabela 7 faz a comparação entre os valores de espessuras medidas por elipsometria e XRR. Nota-se que as medidas realizadas por elipsometria mostraram uma pequena variação das espessuras para menos, comparados aos valores obtidos pela técnica de XRR. Esta pequena diferença medida é devido ao fato que as técnicas se baseiam em princípios diferentes. As medidas de XRR são mais sensíveis à diferença de densidade eletrônica entre o substrato, camada

interfacial e filme. Já as medidas de elipsometria espectral dependem da relação entre as constantes ópticas do filme, substrato, camada interfacial e também do índice de refração.

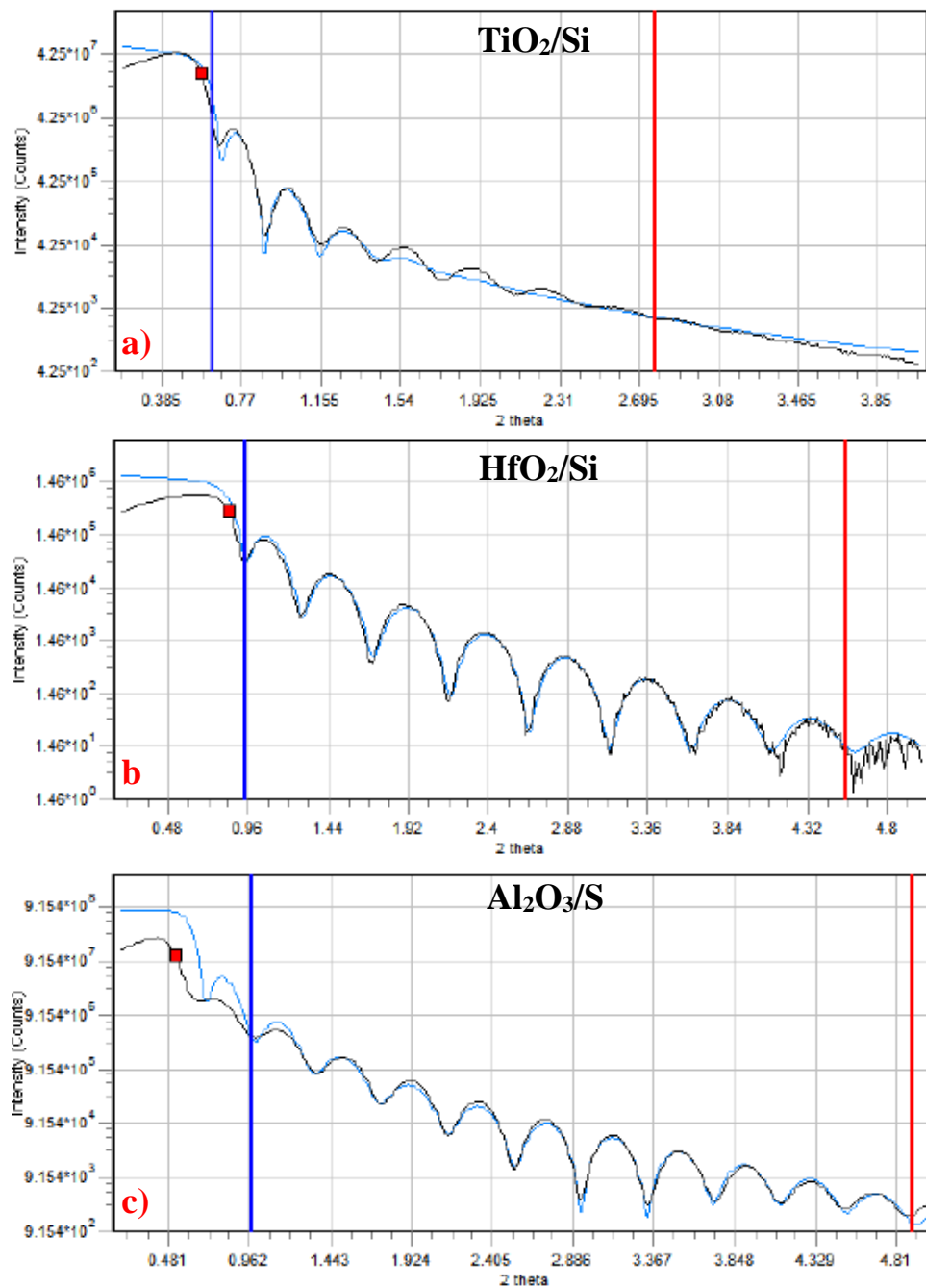


Figura 29: Curva de reflectividade para cada conjunto de amostras. a)  $\text{TiO}_2/\text{Si}$ , b)  $\text{HfO}_2/\text{Si}$  e c)  $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Si}$ .

Tabela 6: Valores de espessura e índices de refração obtidos pela técnica de Elipsometria Espectral.

<b>Dielétrico depositado por ALD</b>	<b>Espessura (nm)</b>	<b>N(<math>\lambda=0.35 \mu\text{m}</math>)</b>	<b>N(<math>\lambda=0.55 \mu\text{m}</math>)</b>	<b>N(<math>\lambda=0.70 \mu\text{m}</math>)</b>
<b>TiO<sub>2</sub></b>	24.9 ± 0.12	3.199	2.500	2.526
<b>HfO<sub>2</sub></b>	17.2 ± 0.05	2.172	2.028	2.042
<b>Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub></b>	20.9 ± 0.08	1.646	1.610	1.612

Tabela 7: Comparação dos valores de espessura medidos por Elipsometria Espectral e Reflectividade de raio X.

<b>Dielétrico depositado por ALD</b>	<b>Elipsometria</b>	<b>Refletividade de RX</b>
<b>TiO<sub>2</sub></b>	(24.9 ± 0.12) nm	(26.5 ± 0.26) nm
<b>HfO<sub>2</sub></b>	(17.2 ± 0.05) nm	(17.5 ± 0.18) nm
<b>Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub></b>	(20.9 ± 0.08) nm	(21.6 ± 0.22) nm

### 5.2.2 Caracterização dos capacitores MIS por I-V e C-V

Nesta subseção estaremos interessados em caracterizar eletricamente, por medidas I-V e C-V, os capacitores MIS das seguintes estruturas (20 nm de cada dielétrico): Al/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Si-p, Al/HfO<sub>2</sub>/Si-p, Al/TiO<sub>2</sub>/Si-p e Al/SiO<sub>2</sub>/Si-n. A última estrutura que contém SiO<sub>2</sub> foi crescida termicamente nos fornos de oxidação do Laboratório de Microeletrônica do IF-UFRGS. Esta estrutura foi fabricada para comparação com os outros dielétricos depositados por ALD.

A Figura 30 mostra as curvas I-V dos capacitores MIS fabricados. A partir destas curvas, podemos obter grandezas físicas tais como resistividade e corrente de fuga dos capacitores. Foi verificado que o capacitor com dielétrico de  $\text{TiO}_2$ , a corrente de fuga é da ordem de mA, correspondendo à 9 ordens de grandeza de diferença em comparação aos capacitores com os dielétricos de  $\text{HfO}_2$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$  e  $\text{SiO}_2$ . Estes apresentaram corrente de fuga na ordem de pA.

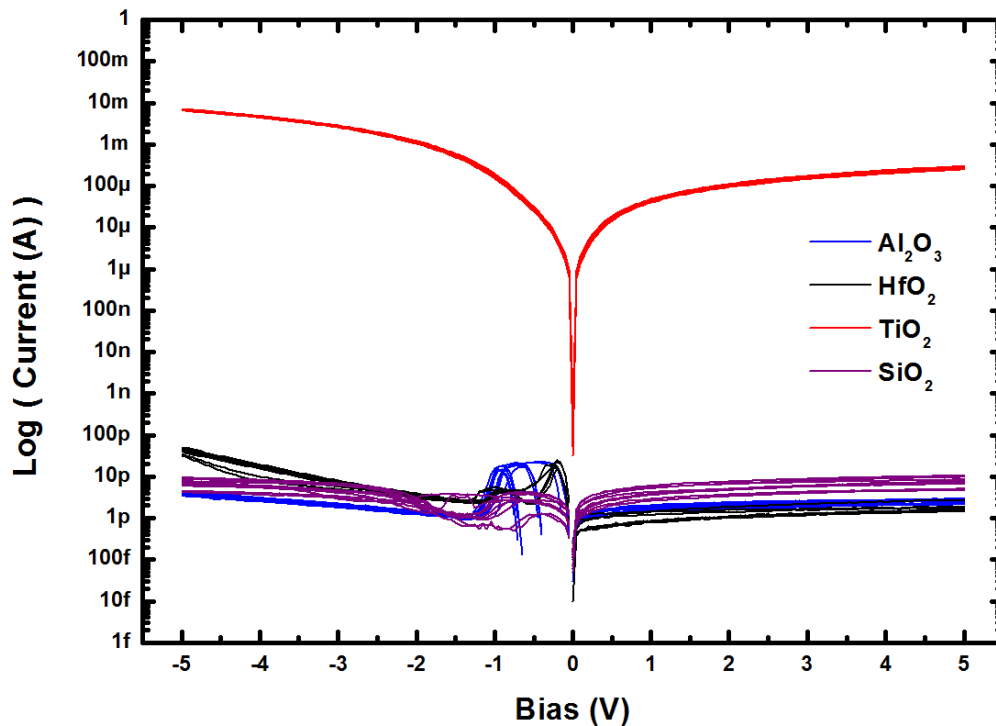


Figura 30: Curvas I-V dos capacitores MIS de  $\text{Al}/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Si-p}$ ,  $\text{Al}/\text{HfO}_2/\text{Si-p}$ ,  $\text{Al}/\text{TiO}_2/\text{Si-p}$  e  $\text{Al}/\text{SiO}_2/\text{Si-n}$

Também foram realizadas medidas de tensão de ruptura para os dielétricos de  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{HfO}_2$  e  $\text{SiO}_2$ . Todas as medidas foram realizadas com limitação de corrente em  $10 \mu\text{A}$  e são apresentados na Figura 31. A tensão de ruptura para o  $\text{TiO}_2$  não foi possível de ser medida, uma vez que resultaria em uma corrente superior a 100 mA, o que poderia danificar o equipamento de medida.

A partir da Figura 30, podemos extrair os valores de resistência de cada dielétrico e calcular o valor da resistividade elétrica, a partir da equação:

$$R = \rho \frac{L}{A} \quad (39)$$

em que  $\rho$  é a resistividade elétrica a ser determinada, A é a área do capacitor e L corresponde à espessura do dielétrico.

Já os valores de campo elétrico de ruptura dielétrica foram calculados por meio da tensão de ruptura, dada pela equação:

$$E_{ruptura} = \frac{V_p}{t_{ox}} \quad (40)$$

em que  $V_p$  é a tensão de ruptura e  $t_{ox}$  é a espessura dos dielétricos. Este último obtido a partir da Tabela 7.

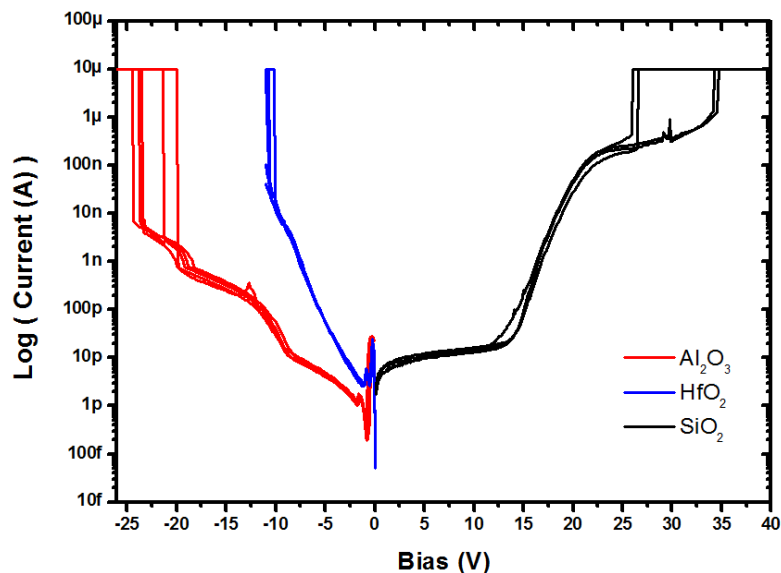


Figura 31: Medidas I-V realizadas com intuito de se verificar a tensão de ruptura dos dielétricos  $Al_2O_3$ ,  $HfO_2$  e  $SiO_2$ .

Tabela 8: Grandezas físicas obtidas por meio das curvas I-V, calculadas a partir das Figura 30 e Figura 31.

Dielétrico depositado	Área do capacitor ( $cm^2$ )	Corrente de fuga (A)	Resistividade ( $\Omega cm$ )	Tensão de ruptura dielétrica (V)	Campo elétrico de ruptura (MV/cm)
$HfO_2$	$3.14 \cdot 10^{-4}$	50 p	$1.57 \cdot 10^{13}$	10.86	6.21
$Al_2O_3$	$3.14 \cdot 10^{-4}$	5 p	$1.57 \cdot 10^{14}$	22.47	10.40
$TiO_2$	$3.14 \cdot 10^{-4}$	7 m	$1.12 \cdot 10^5$	-	-
$SiO_2$	$4.00 \cdot 10^{-4}$	10 p	$1.00 \cdot 10^{14}$	31.33	15.67

Realizamos medidas C-V variando a frequência do sinal AC entre 1 MHz e 10 kHz, para os capacitores MIS com dielétrico *high-k*. O objetivo destas medidas foi verificar a dependência das curvas C-V com a frequência do campo elétrico aplicado.

A Figura 32 mostra que a capacitância do capacitor MIS é independente da frequência do campo aplicado. Isso pode ser explicado pelo fato de que na região de frequência trabalhada (10 kHz, 100 kHz e 1 MHz), a constante dielétrica permanece constante. Desse modo, a capacitância associada ao dielétrico é independente da frequência do campo aplicado. O comportamento da capacitância dos capacitores MIS tem o seu comportamento descrito na subseção 4.4.3 e é retratado pela Figura 10.

Contudo, a explicação precedente não se aplica para o capacitor com o dielétrico TiO<sub>2</sub>, mostrado na Figura 32c). O comportamento para este capacitor é diferente pelo fato de que a condição do modelo de circuito de medida C-V utilizado não ser satisfeita. O modelo utilizado para tanto considera uma capacitância e uma resistência em série. Este tipo de configuração de circuito é utilizado para espessuras de dielétricos maiores que 3 nm, em que a corrente de fuga é pequena e o dispositivo é dominado pela resistência em série. Para que as medidas experimentais extraídas a partir deste modelo sejam confiáveis, precisa-se que a reatância capacitiva  $X_c$  seja muito menor que a resistência efetiva do dispositivo  $R_p$ . A reatância capacitiva é expressada matematicamente como sendo o inverso do produto entre  $2\pi f$  e a capacitância (na região de acumulação), sendo  $f$  a frequência do sinal AC aplicado junto com o sinal DC sobre o eletrodo de porta.

Aplicando a condição acima para os capacitores MIS com *high-k*, a condição  $X_c \ll R_p$  é satisfeita para os capacitores MIS com dielétricos de porta de Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> e HfO<sub>2</sub>, conforme pode ser visto na Tabela 9 abaixo. No entanto, para o capacitor MIS com dielétrico de porta TiO<sub>2</sub>, a condição não foi satisfeita. Logo, as grandezas físicas que poderiam ser calculadas através das curvas C-V para este capacitor não são confiáveis.

Tabela 9: Reatância capacitiva e resistência efetiva para os capacitores MIS *high-k*. Utilizou-se  $f = 1$  MHz para o cálculo  $X_c$  do capacitor com Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> e HfO<sub>2</sub> e  $f=10$  kHz para TiO<sub>2</sub>.

<b>Dielétrico</b>	<b><math>X_c</math> (<math>\Omega</math>)</b>	<b><math>R_p</math>(<math>\Omega</math>)</b>	<b><math>X_c \ll R_p</math></b>
<b>Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub></b>	$2.65 \cdot 10^5$	$8.33 \cdot 10^{10}$	Satisfeita
<b>HfO<sub>2</sub></b>	$1.59 \cdot 10^5$	$5 \cdot 10^{10}$	Satisfeita
<b>TiO<sub>2</sub></b>	$1.99 \cdot 10^3$	$5 \cdot 10^2$	Não satisfeita

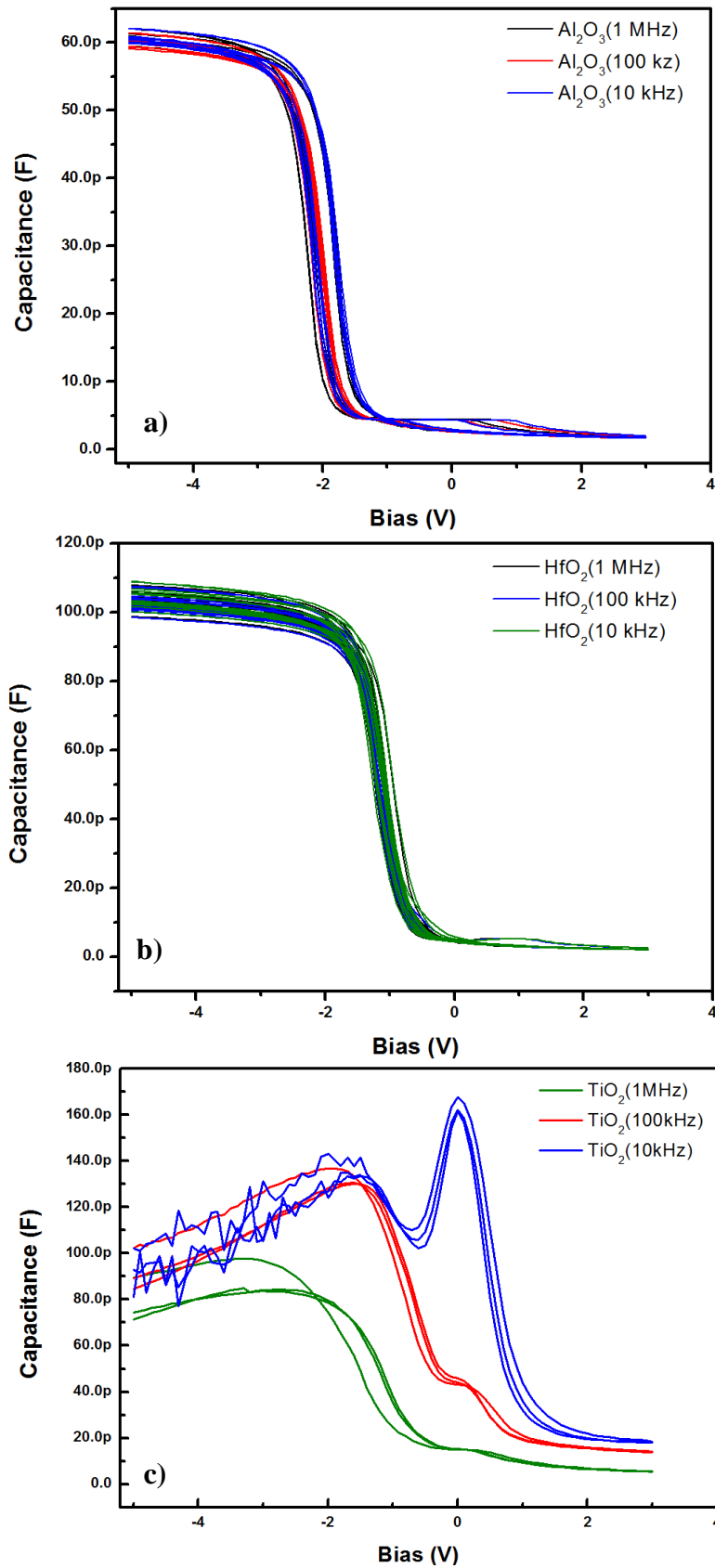


Figura 32: Medidas C-V para os capacitores com *high-k*, nas frequências de 1 MHz, 100 kHz e 10 kHz.



A partir das curvas C-V dos capacitores MIS com dielétricos de Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> e HfO<sub>2</sub> (Figura 32), foi possível se determinar certas propriedades dos respectivos capacitores MIS. O valor de tensão de limiar V<sub>T</sub> é determinado através da tensão em que a capacitância atinge, primeiramente, o seu valor mínimo. Pelo valor da capacitância do óxido na região de acumulação do capacitor MIS, a espessura do óxido de SiO<sub>2</sub> equivalente é determinada (EOT). A concentração de portadores (N<sub>A</sub>) e a quantidade de carga efetiva no óxido (Q<sub>eff</sub>) também são informações obtidas a partir dos cálculos envolvendo a física de capacitores MOS [3] [34]. Todas estas grandezas físicas estão mostradas na Tabela 10, menos para o TiO<sub>2</sub>, devido aos valores medidos não serem confiáveis nas medidas elétricas C-V, conforme explicado anteriormente.

Tabela 10: Resumo dos resultados obtidos a partir das medidas C-V para os três diferentes *high-k*, nas frequências de 1 MHz, 100 kHz e 10 kHz.

<b>Amostras</b>	<b>Concentração de portadores (cm<sup>-3</sup>)</b>	<b>Tensão de limiar V<sub>t</sub> (V)</b>	<b>Espessura de SiO<sub>2</sub> equivalente (EOT) (Å)</b>	<b>Capacitância do óxido Cox (F)</b>	<b>Carga efetiva no óxido Q<sub>eff</sub> (cm<sup>-2</sup>)</b>
<b>Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (1 MHz)</b>	2.1E+14	-1.22	179	60.63 p	1.2E+12
<b>Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (100 kHz)</b>	2E+14	-1.26	181	59.98 p	1.23E+12
<b>Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (10 kHz)</b>	2E+14	-1.19	179	60.60 p	1.16E+12
<b>HfO<sub>2</sub> (1 MHz)</b>	3.1E+14	-0.13	106	101.0 p	-2.1E+11
<b>HfO<sub>2</sub> (100 kHz)</b>	3E+14	- 0.14	106	101.9 p	-1.6E+11
<b>HfO<sub>2</sub> (10 kHz)</b>	3E+14	-0.11	105	103.3 p	- 2.5E+11

Além das grandezas físicas calculadas a partir das curvas C-V da Figura 32 e apresentadas na Tabela 10, podemos calcular a constante dielétrica dos dielétricos. Para tanto, a seguinte igualdade pode ser aplicada:

$$C_{high\ k} = \frac{\varepsilon_{high\ k} \varepsilon_0 A}{t_{high\ k}} = \frac{\varepsilon_{SiO_2} \varepsilon_0 A}{t_{EOT, SiO_2}} \quad (41)$$

em que  $\varepsilon_{high-k}$  e  $\varepsilon_{SiO_2}$  são as constantes dielétricas dos dielétricos *high-k* e do SiO<sub>2</sub>, nesta ordem, A é a área do capacitor MIS e  $t_{high-k}$  corresponde à espessura do dielétrico medida pela técnica de refletividade de raios X ou elipsometria espectral (Tabela 7) e  $t_{EOT, SiO_2}$  é a espessura do óxido calculada através das curvas C-V (Tabela 10). Fazendo as devidas simplificações algébricas na igualdade apresentada na equação (41), temos:

$$\varepsilon_{high\ k} = \frac{3,9\ t_{high\ k}}{t_{EOT, SiO_2}} \quad (42)$$

na qual  $\varepsilon_{SiO_2} = 3.9$ .

Substituindo na equação (42) os valores encontramos pela técnica de refletividade de raios X para  $t_{high-k}$  e os valores medidos por C-V para  $t_{EOT, SiO_2}$ , obtemos  $\varepsilon_{high-k}$  para os dielétricos Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> e HfO<sub>2</sub>. Para o dielétrico TiO<sub>2</sub>, não foi possível se determinar a sua constante dielétrica, pelo motivo já explicado anteriormente.

A Tabela 11 compara os valores medidos das constantes dielétricas dos capacitores MIS *high-k* fabricados com os valores presentes na literatura, assim como, os artigos que usaram o processo de deposição de óxido por ALD. Observamos que as constantes dielétricas calculadas apresentam aproximadamente a metade do valor encontrado na literatura, com exceção para o TiO<sub>2</sub>, o qual nenhuma informação pode ser obtida com relação a sua constante dielétrica. Essa diferença nas constantes dielétricas ainda é objeto de investigação.

Tabela 11: Comparação dos valores de constantes dielétricas high-k.

<b>Dielétricos high-k</b>	<b><math>\varepsilon_{high\ k}</math> calculadas</b>	<b><math>\varepsilon_{high\ k}</math> presentes na literatura[85]</b>	<b><math>\varepsilon_{high\ k}</math> encontradas em outros artigos que usaram ALD</b>
<b>Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub></b>	4.69	8 - 9	10.3 [86]
<b>HfO<sub>2</sub></b>	6.46	16 - 19	18.7[87]
<b>TiO<sub>2</sub></b>	-	~ 80	40[87]

Há dois tipos de cargas presentes no óxido que podem ter influência sobre a capacitância MOS, que são: cargas aprisionadas na interface óxido-semicondutor ( $Q_{ot}$ ) e íons móveis.

Para entendermos e visualizarmos os efeitos práticos que as cargas no óxido têm sobre a capacitância MOS, realizamos medidas C-V variando a tensão de cada capacitor de -5 V a 5 V e após de 5 V a -5 V, como mostrado na Figura 33.

Podemos observar um efeito de “memória” para os dielétricos *high-k* Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> e HfO<sub>2</sub> nos capacitores MIS caracterizados. Este efeito de memória é referente ao fenômeno físico de histerese, o mesmo que ocorre em materiais ferromagnéticos. As setas nas curvas representam o sentido de variação da tensão.

Uma vez que os capacitores MIS *high-k* foram construídos em substrato tipo-p, as medidas foram realizadas começando pelo regime de acumulação, aplicando uma tensão negativa no eletrodo de porta dos capacitores. Neste estágio, a direção do campo elétrico (que está no seu valor máximo) é no sentido do semicondutor para o metal, de forma que as armadilhas na interface óxido-semicondutor são preenchidas pela captura de lacunas nesta região de acumulação. Isso acarreta em uma contribuição positiva para a carga efetiva, o qual desloca a curva C-V para valores negativos de tensão.

Quando a voltagem sobre o eletrodo de porta cresce positivamente, o nível de Fermi se move na direção da banda de condução e as armadilhas no óxido começam a ser preenchidas por elétrons. Com isso, as cargas nestas armadilhas de óxido se tornam negativas em relação ao estágio de acumulação, causando um deslocamento positivo na tensão de *flatband*.

A próxima fase é quando a tensão é decrescida (volta). Neste estágio, o nível de Fermi move-se em direção a banda de valência. As armadilhas começam a serem preenchidas por lacunas e há emissão de elétrons reiniciando a condição inicial de medida [88].

Em relação às cargas móveis, devido ao fato de se moverem com a presença do campo elétrico, o seu efeito é oposto ao das armadilhas no óxido, o qual não é verificado nas curvas C-V dos dielétricos HfO<sub>2</sub> e Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Por isso, o fenômeno de histerese ilustrado nestas figuras é consequência das armadilhas no óxido.

Para o dielétrico de SiO<sub>2</sub>, a explicação é análoga aos capacitores MIS *high-k*, com a diferença que a região de acumulação é para tensão positiva e não negativa, pois o substrato é tipo-n. Neste dielétrico não foi possível se notar a presença de cargas aprisionadas no óxido, visto que o fenômeno de histerese não foi observado.

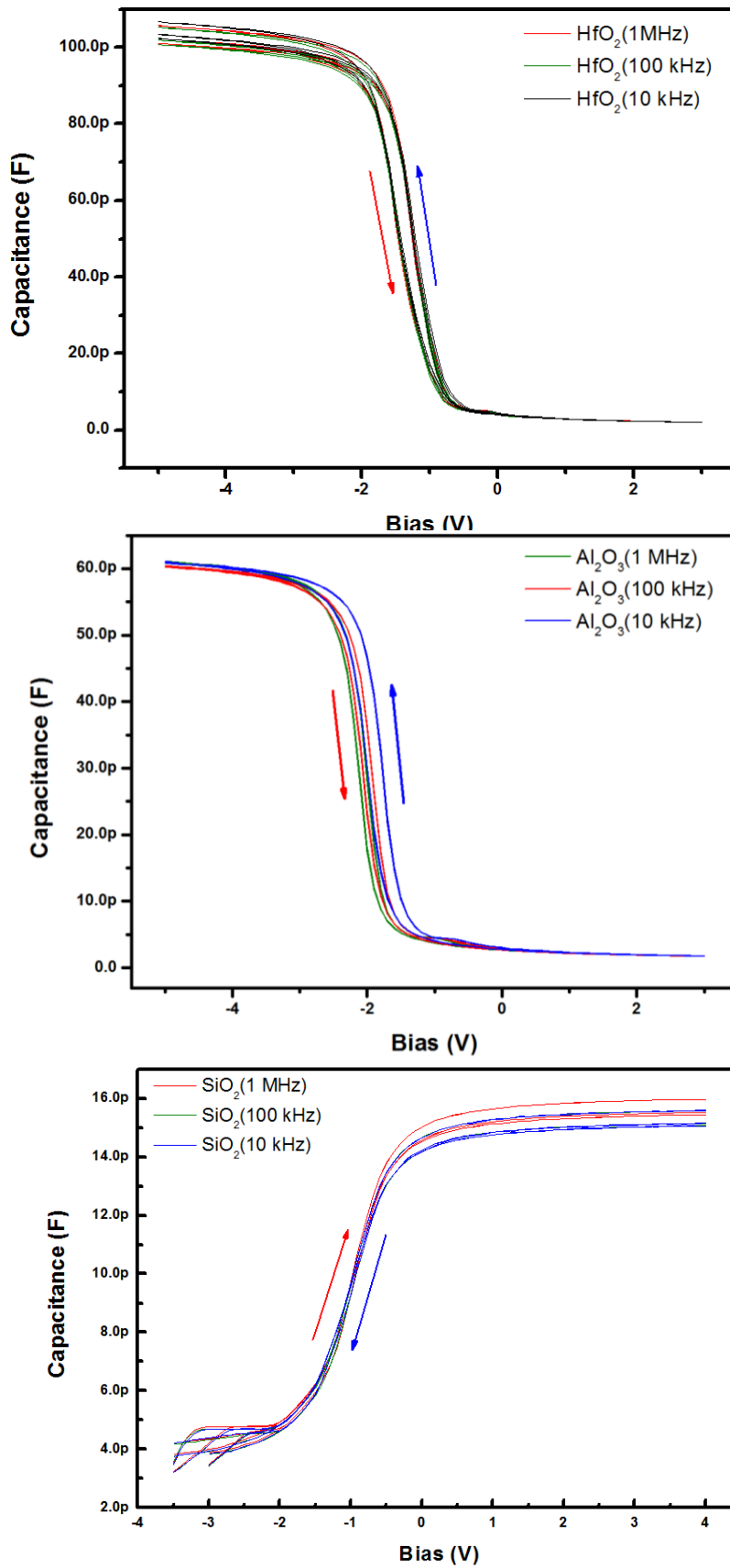


Figura 33: Medidas C-V ida e volta para as estruturas contendo os dielétricos HfO<sub>2</sub>, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> e SiO<sub>2</sub>. A seta em vermelho corresponde a medida na “ida” e a seta azul a medida na “volta”.

A Tabela 12 apresenta os valores estimados para a carga aprisionada no óxido ( $Q_{ot}$ ) ( $\text{cm}^{-2}$ ) para o  $\text{HfO}_2$  e  $\text{Al}_2\text{O}_3$ . O cálculo foi feito através da seguinte equação e usando as medidas C-V:

$$Q_{ot} = \frac{C_{ox}\Delta V}{q} \quad (43)$$

em que  $\Delta V$  é a largura da voltagem na histerese. Este valor é aproximadamente 0.25 V para ambos dielétricos *high-k*. Substituindo este valor na equação (43), encontramos a densidade de cargas aprisionadas como sendo  $Q_{ot} \approx 5,2 * 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  e  $Q_{ot} \approx 3,1 * 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ , para  $\text{HfO}_2$  e  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , respectivamente.

A Figura 34 mostra uma comparação, através do diagrama de bandas, entre os quatro tipos de capacitores MIS fabricados, em que CB offset e CV offset correspondem, respectivamente, a diferença entre as bandas de condução do semiconductor e do dielétrico e a diferença entre as bandas de valência do semiconductor e do dielétrico.

De acordo com as propriedades requeridas para isolantes, os dielétricos de um capacitor MIS devem exibir um offset tanto em sua banda de condução (CB), como de valência (CV), superior a 1 eV para evitar uma condução por emissão Schottky de elétrons ou lacunas para as bandas do óxido, e por conseguinte, uma corrente de fuga alta [89]. A Tabela 12 mostra CB e CV para os dielétricos *high-k*  $\text{HfO}_2$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{TiO}_2$ , assim como para  $\text{SiO}_2$ . Os valores de CB e CV foram obtidos através do *software Energy Band Diagram*. A Tabela 13 mostra a comparação das propriedades elétricas medidas entre os quatro tipos de capacitores MIS construídos neste trabalho.

Tabela 12: Valores de offset para banda de condução (CB) e de valência (CV) para os dielétricos caracterizados por medidas C-V.

<b>Dielétrico</b>	<b><math>\epsilon</math> [89]</b>	<b>Bandgap [89] (eV)</b>	<b>CB offset (eV)</b>	<b>CV offset (eV)</b>
<b>TiO<sub>2</sub></b>	80	3.5	1	1.25
<b>Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub></b>	9	8.8	2.8	4.8
<b>HfO<sub>2</sub></b>	25	5.8	1.4	3.3
<b>SiO<sub>2</sub></b>	3.9	9	3.2	4.8

Tabela 13: Comparação entre as grandezas físicas dos quatro capacitores MOS fabricados.

Grandezas físicas	SiO <sub>2</sub>	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	HfO <sub>2</sub>	TiO <sub>2</sub>
Cargas aprisionadas (cm <sup>-2</sup> )	0	3.13*10 <sup>11</sup>	5.21*10 <sup>11</sup>	-
Corrente de fuga (A)	10 p	5p	50p	7m
Tensão de ruptura dielétrica (V)	31.33	22.47	10.86	-
Campo elétrico de ruptura dielétrica (MV/cm)	15.67	10.40	6.21	-
Constante dielétrica	3.9	4.69	6.46	-
Resistividade (Ω cm)	1*10 <sup>14</sup>	1.57*10 <sup>14</sup>	1.57*10 <sup>13</sup>	1.12*10 <sup>5</sup>

A partir da Tabela 13 podemos inferir que o capacitor MIS com dielétrico de TiO<sub>2</sub> é o que apresenta as piores propriedades elétricas, visto que a sua corrente de fuga é 9 ordens de grandeza maior frente aos outros 3 capacitores MIS construídos. Este comportamento é atribuído pelo fato do *offset* de sua banda de condução ser de 1 eV, o que proporciona um efeito significativo de emissão Schottky.

A Tabela 13 e a Figura 30 ilustram que a corrente de fuga para o capacitor MIS com dielétrico Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> é menor em relação ao capacitor MIS com HfO<sub>2</sub>. Esta característica pode ser atribuída devido à sua melhor qualidade de interface, visto que Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> apresenta menor quantidade de cargas aprisionadas no óxido ( $Q_{ot} \approx 3,13 * 10^{11}$ ) em relação ao HfO<sub>2</sub> ( $Q_{ot} \approx 5,21 * 10^{11}$ ), alta estabilidade termodinâmica, maior robustez [90] e maior *offset* de banda entre o Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> e Si frente HfO<sub>2</sub> e Si (veja Tabela 12).

Já o SiO<sub>2</sub> apresenta grandezas físicas similares ao Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, como valor de *bandgap*, *offset* de banda de condução e valência, assim como valores próximos de corrente de fuga. A diferença recai sobre os valores das constantes dielétricas.

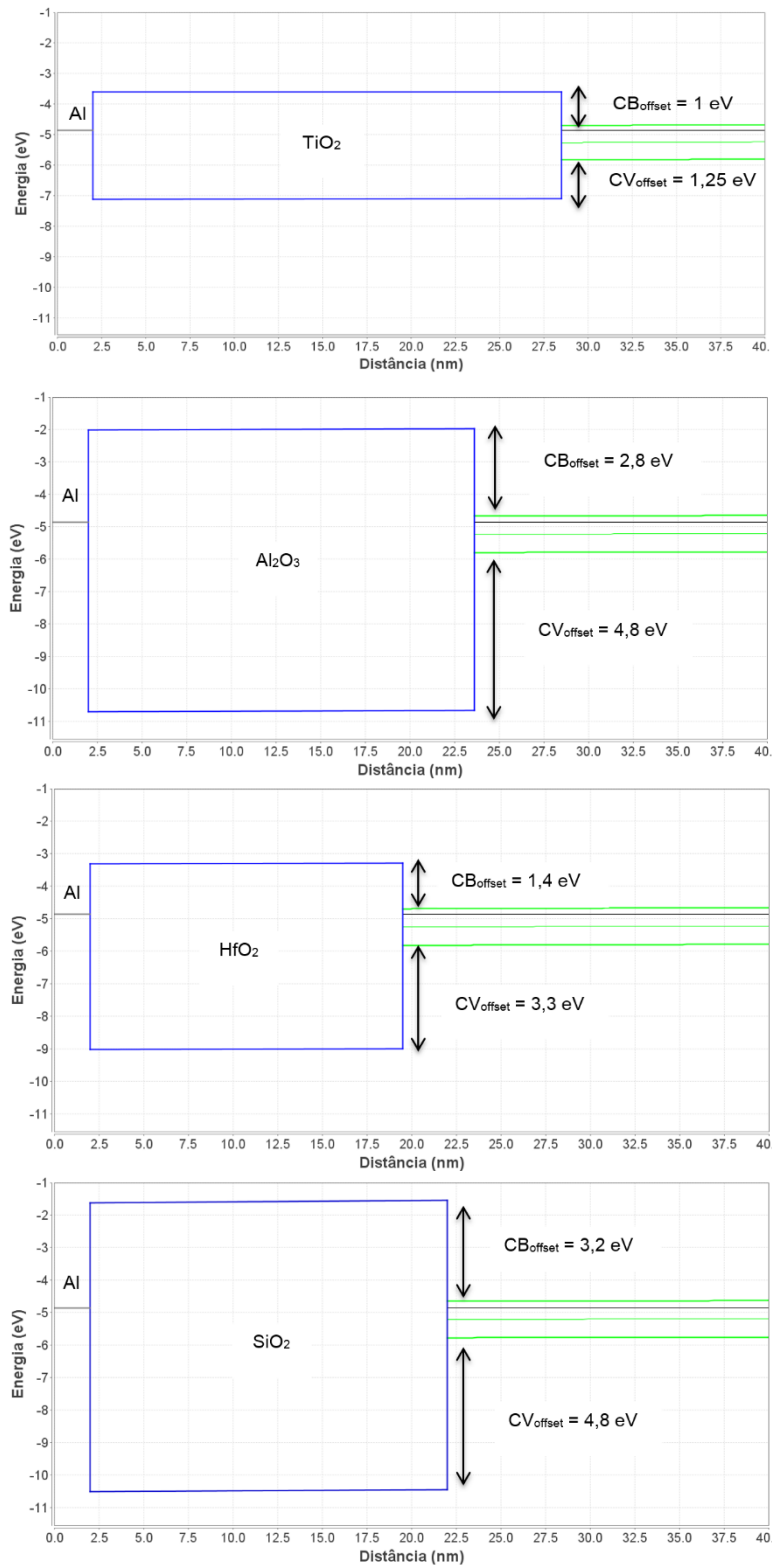


Figura 34: Diagrama de bandas para os quatro capacitores MIS fabricados, simulando a tensão no eletrodo de porta em  $V_G = 0$  V. A estrutura simulada compreendia em Al/dielétrico/Si tipo-p (e Si tipo-n para o capacitor com SiO<sub>2</sub>).

## 5.3 Diodos Schottky com estruturas MIS

### 5.3.1 Estruturas Ni/TiO<sub>2</sub>/SiC/Ni

Estruturas do tipo Ni/TiO<sub>2</sub>/SiC/Ni foram fabricadas para análise das características elétricas de SBH, fator de idealidade  $\eta$  e de corrente reversa. TiO<sub>2</sub> foi depositado por ALD, nas espessuras de 1 a 4 nm. Não foram realizadas etapas de limpeza química adicionais, a não ser a limpeza RCA completa + HF, anteriormente a qualquer etapa de fabricação.

Como mencionado na abordagem do modelo de TE modificando e nas simulações teóricas das curvas I-V (seção 5.1.3), as medidas I-V experimentais com temperatura variável (I-V-T) permitem determinar a SBH real (ajuste extrapolado para 0 K), o fator de idealidade e estimar a espessura da camada dielétrica (equação (38)). Um conjunto de duas amostras de Ni/TiO<sub>2</sub>/SiC/Ni foram medidas por I-V-T para validar o modelo de TE modificado. A fim de facilitar o entendimento das equações e relaciona-las aos gráficos, utilizaremos a escala de temperatura em Kelvin, uma vez que as equações do modelo TE modificado estão relacionadas à temperatura absoluta.

A Figura 35 mostra a curva densidade de corrente ( $\ln J$ ) em função da tensão direta aplicada para o diodo com 1 nm de TiO<sub>2</sub>, variando a temperatura da medida de 297 a 373 K. Como previsto teoricamente, a densidade de corrente aumenta com o aumento da temperatura. Um ajuste linear (não mostrado) é realizado na parte linear de cada uma das curvas para determinação da corrente de saturação (para  $V > 3kT$ ). A corrente de saturação é utilizada nos cálculos de extração da SBH e  $\eta$ , como mostrado nas equações (9) e (10), respectivamente.

Uma vez calculadas as SBH aparentes para cada temperatura de medida, as mesmas são plotadas em função da temperatura da medida I-V. A Figura 36a) apresenta o gráfico da SBH aparente em função da temperatura medida para os diodos Schottky de Ni/TiO<sub>2</sub>(1 e 4 nm)/SiC. A partir do modelo modificado da TE, é realizado um ajuste linear entre os pontos que compõem o gráfico e então a SBH real e a espessura da camada interfacial podem ser calculadas.



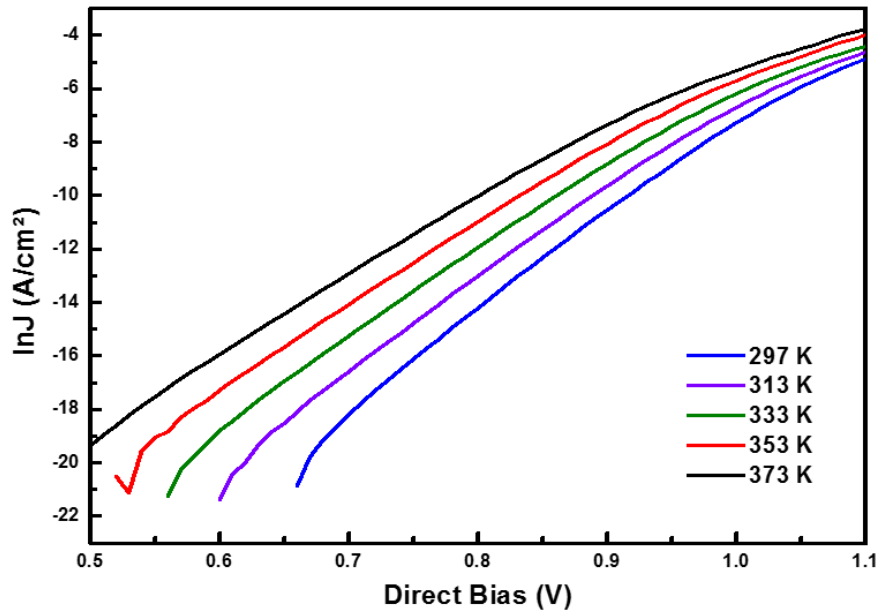


Figura 35: Densidade de corrente em função da tensão direta aplicada para o diodo Schottky com 1 nm de TiO<sub>2</sub>, variando a temperatura da medida I-V.

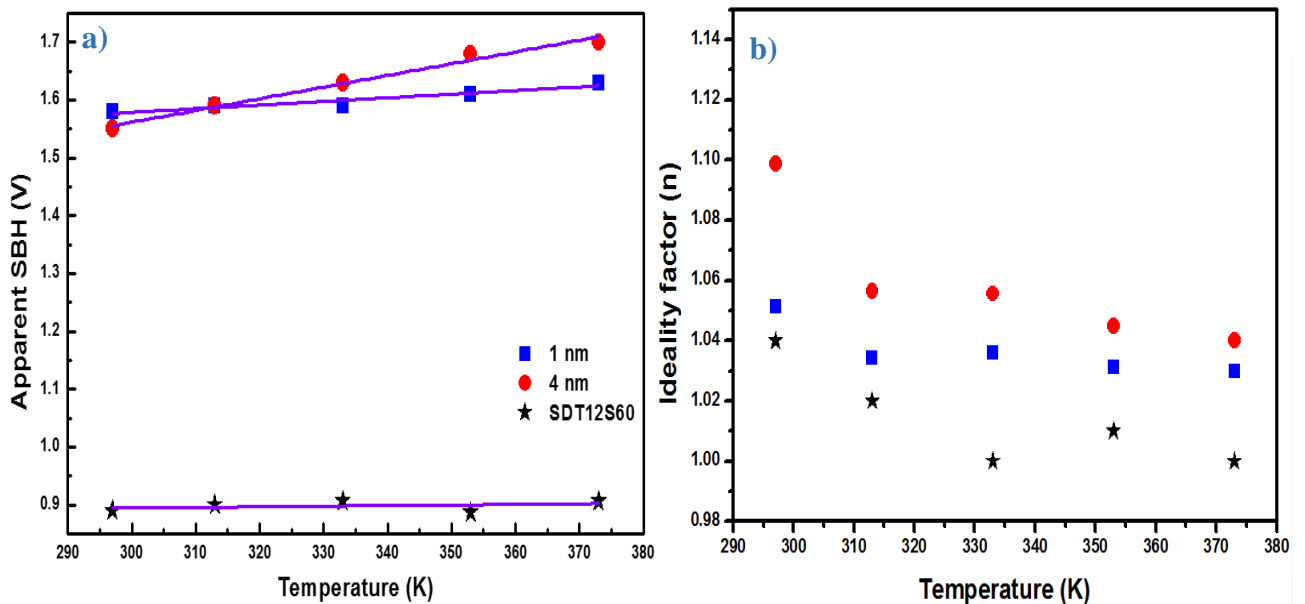


Figura 36: a) SBH aparente e b) fator de idealidade, em função da temperatura de medida I-V, para os diodos de 1 e 4 nm de TiO<sub>2</sub> e do diodo Schottky de SiC comercial.

Obtivemos uma SBH real de 1.39 V e 0.95 V, e  $\delta$  de 1.9 nm e 6.1 nm, para os diodos com espessura nominal de 1 nm e 4 nm de TiO<sub>2</sub>, respectivamente. Um diodo Schottky comercial, de SiC tipo SDT12S60, adquirido da *Infineon Technologies* [91], foi medido para

comparação e/ou referência. A SBH do diodo comercial também aumenta com a temperatura, mas este efeito é muito menos pronunciado. A SBH real calculada foi de 0.86 V e a  $\delta$  de  $\text{SiC}_x\text{O}_y$  de 0.19 nm. Na Figura 36b) temos informações a respeito do fator de idealidade  $\eta$  dos diodos medidos, em função da temperatura. Como pode-se observar, o  $\eta$  diminui com o aumento da temperatura medida, evidenciando um comportamento contrário do que acontece com a SBH em função da temperatura. Este comportamento está de acordo com estudos da literatura [48] [49] [50] [51] [92] [93]. Quanto mais próximo de 1 o valor de  $\eta$  se encontrar, o diodo conduzirá sua corrente preferencialmente pelo efeito da TE. Sendo assim, o aumento da temperatura do diodo favorece a condução por meio de elétrons e lacunas gerados pela TE, aproximando o valor de  $\eta$  para 1. Quando o valor de  $\eta$  é maior que 1, outros mecanismos de condução competem, tais como o tunelamento, recombinação, difusão de elétrons e de lacunas [34].

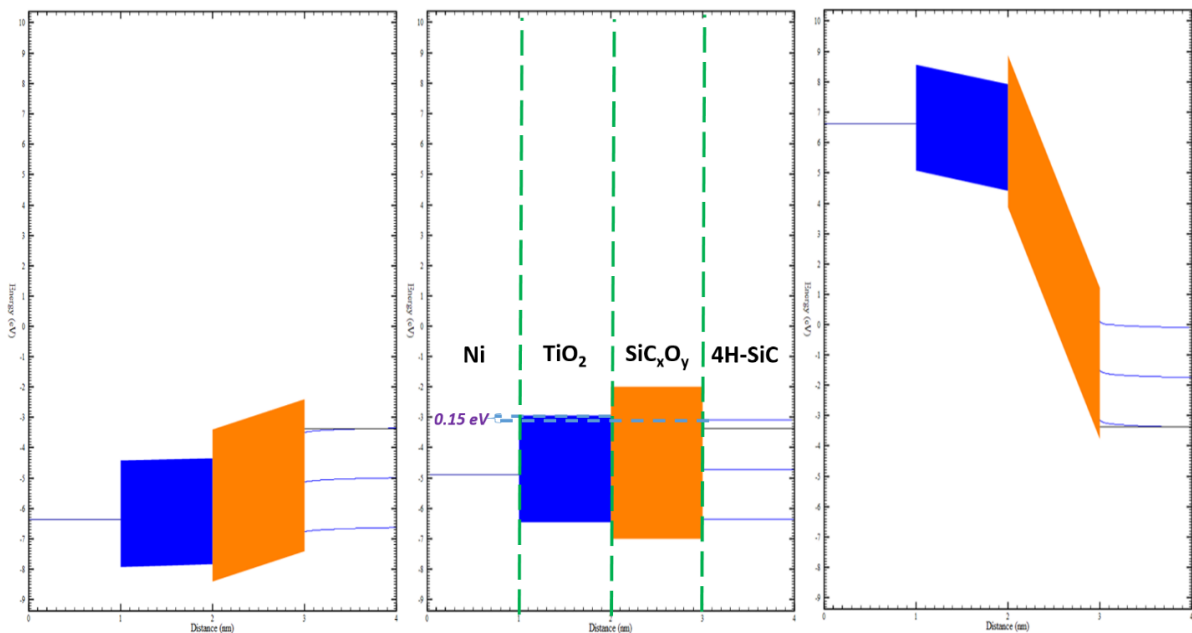


Figura 37: Diagrama de bandas simulado para estrutura Ni/TiO<sub>2</sub>/SiC<sub>x</sub>O<sub>y</sub>/SiC, com polarização direta (3 V), tensão de banda plana (1.527 V) e polarização reversa (-10 V), da esquerda para a direita, respectivamente. 0.15 eV é o valor da barreira efetiva do TiO<sub>2</sub>.

Para se calcular a SBH,  $\eta$  e  $\delta$ , foi necessária a informação a respeito da altura da barreira efetiva do TiO<sub>2</sub>. A Figura 37 mostra o diagrama de bandas para a estrutura Ni/TiO<sub>2</sub>/SiC<sub>x</sub>O<sub>y</sub>/SiC, com polarização direta, reversa e em com tensão de banda plana. A altura da barreira efetiva do oxido de titânio foi calculada em 0.15 eV.

Podemos notar que as espessuras das camadas interfaciais calculadas são maiores que o esperado. Os valores foram de 1.9 nm para 1 nm nominal, e de 6.1 nm para 4 nm nominal. Esta discrepância é devido ao fato de que o cálculo realizado anteriormente somente considera a presença de uma camada interfacial (de TiO<sub>2</sub>) entre metal e semicondutor.

Como vimos na seção 5.1.2, uma ínfima camada de SiC<sub>x</sub>O<sub>y</sub> sempre estará presente, e a mesma é resistente ao ataque químico úmido. Dessa maneira, uma nova interpretação das equações da TE modificada devem ser consideradas. A equação (20) precisa ser reescrita considerando duas camadas dielétricas (TiO<sub>2</sub> e SiC<sub>x</sub>O<sub>y</sub>) entre metal e semicondutor:

$$J = A^*T^2 \exp(-\sqrt{\zeta_1}\delta_1 - \sqrt{\zeta_2}\delta_2) \exp\left(-\frac{q\phi_{SBH}}{kT}\right) \left[\exp\left(\frac{qV}{\eta kT}\right) - 1\right] \quad (44)$$

onde os indexadores 1 e 2, em  $\zeta$  e  $\delta$ , representam os dois dielétricos.

A extração da espessura dos dielétricos agora é função um do outro:

$$\delta_2 = \frac{\phi_{SBH(apparent)} - \phi_{SBH(real)} - \frac{kT}{q}(\delta_1\sqrt{\zeta_1})}{\frac{kT}{q}(\sqrt{\zeta_2})} \quad (45)$$

Considerando que o SiC<sub>x</sub>O<sub>y</sub> possui a mesma espessura nos diodos com espessura nominal de 1 e 4 nm de TiO<sub>2</sub>, somente a espessura do TiO<sub>2</sub> é a que varia. A equação (45) apresenta duas incógnitas ( $\delta_1$  e  $\delta_2$ ), uma vez que os valores de  $\zeta$  são referentes à altura da barreira efetiva de cada um dos dielétricos e são conhecidos.

Como temos duas incógnitas e duas equações para extração das espessuras dos dielétricos (uma para o diodo com espessura nominal de 1 nm e outra para o diodo com 4 nm de TiO<sub>2</sub>), o problema é facilmente resolvido. A Tabela 14 resume os resultados de SBH e espessura dos isoladores, considerando uma ou duas camadas.

Tabela 14: SBH real e espessura dos isoladores considerando uma ou duas camadas entre metal e semiconductor.

Diodo	SBH <sub>REAL</sub> (V)	Espessura do isolador considerando uma camada (nm)	Espessura do isolador considerando duas camadas (nm)	
			$\delta_{\text{SiC}_x\text{O}_y}$	$\delta_{\text{TiO}_2}$
1 nm TiO <sub>2</sub>	1.39	1.9	0.18	1.42
4 nm TiO <sub>2</sub>	0.95	6.1		5.68
SDT12S60	0.86	0.19	0.19	--

Quando consideramos duas camadas dielétricas na equação TE modificada (equação (44)), obtemos valores de espessuras mais próximos das espessuras nominais. Uma camada interfacial de 0.18 nm foi obtida para o SiC<sub>x</sub>O<sub>y</sub> dos diodos experimentais. Este valor foi praticamente o mesmo calculado para o diodo comercial (0.19 nm). A partir desses resultados, podemos considerar que uma camada de oxicarboneto de silício com espessura de 0.18 nm sempre existe na superfície do SiC, mesmo após ataque químico com HF.

Como já discutido anteriormente, as características reversas dos diodos são importantes, uma vez que os mesmos são potenciais candidatos a serem usados futuramente como estruturas para detector. A Figura 38 mostra as curvas I-V quando a tensão reversa é aplicada para os diodos de TiO<sub>2</sub> e o comercial, com temperatura ambiente. Os mesmos apresentaram bom comportamento reverso (com baixa corrente reversa). Os diodos 4 e 1 nm de TiO<sub>2</sub> apresentaram corrente reversa em torno de uma e duas ordens de grandeza menores que o diodo comercial, respectivamente. A Tabela 14 apresenta a SBH real, onde o diodo com 1 nm de TiO<sub>2</sub> possui SBH real maior comparado ao de 4 nm. A SBH aparente para o diodo com 1 nm aparece um pouco maior que para o diodo com 4 nm, como mostrado na Figura 36a). Desse modo, é esperado que a corrente reversa pelo diodo com 4 nm de TiO<sub>2</sub> seja maior que pelo diodo com 1 nm.

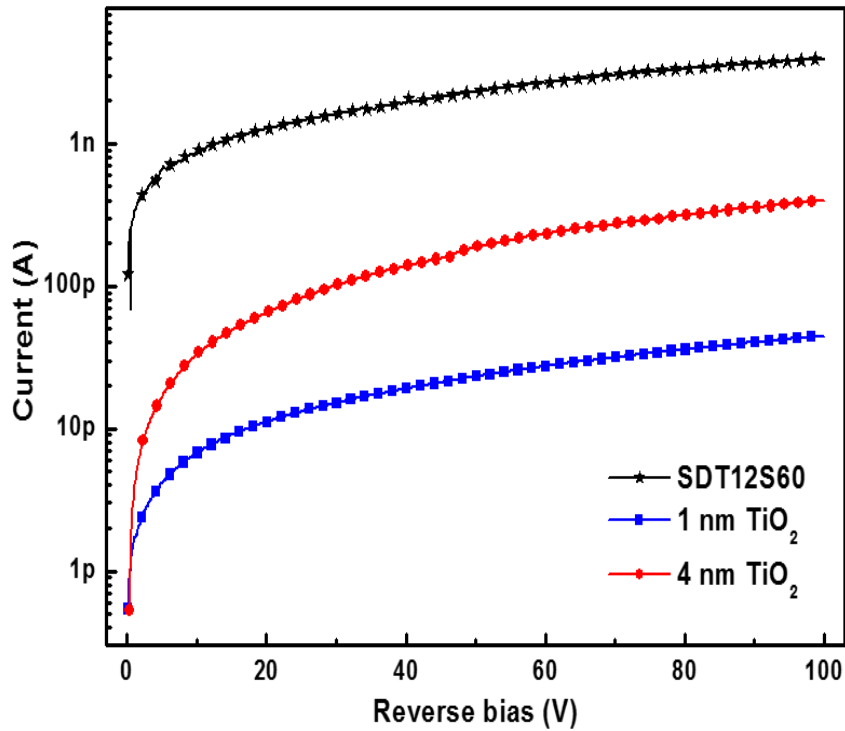


Figura 38: Corrente reversa em função da tensão reversa aplicada, para os diodos com espessuras nominais de 1 e 4 nm de TiO<sub>2</sub> e do diodo comercial.

### 5.3.2 Estruturas Ni/SiO<sub>2</sub>/SiC/Ni

Como o *bandgap* do TiO<sub>2</sub> tem um valor baixo (3.5 eV) comparado a outros dielétricos (5.7 eV, 8.7 eV e 8.9 eV, para HfO<sub>2</sub>, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> e SiO<sub>2</sub>, respectivamente), também foram depositados os dielétricos de SiO<sub>2</sub>, HfO<sub>2</sub> e Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> para construção do diodo Schottky e análise das suas características elétricas. Posteriormente discutiremos os resultados referentes aos diodos com dielétricos de HfO<sub>2</sub> e Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Aqui tratamos da discussão dos resultados referentes aos diodos utilizando SiO<sub>2</sub> como dielétrico passivador.

A Figura 39 mostra a banda de energia para a estrutura Ni/SiO<sub>2</sub>/SiC<sub>x</sub>O<sub>y</sub>/SiC, nas polarizações direta, reversa e de banda plana. Foi considerado uma camada dielétrica natural de 1 nm de espessura de SiC<sub>x</sub>O<sub>y</sub>. A altura da barreira efetiva do óxido de silício foi calculada em 2.15 eV.

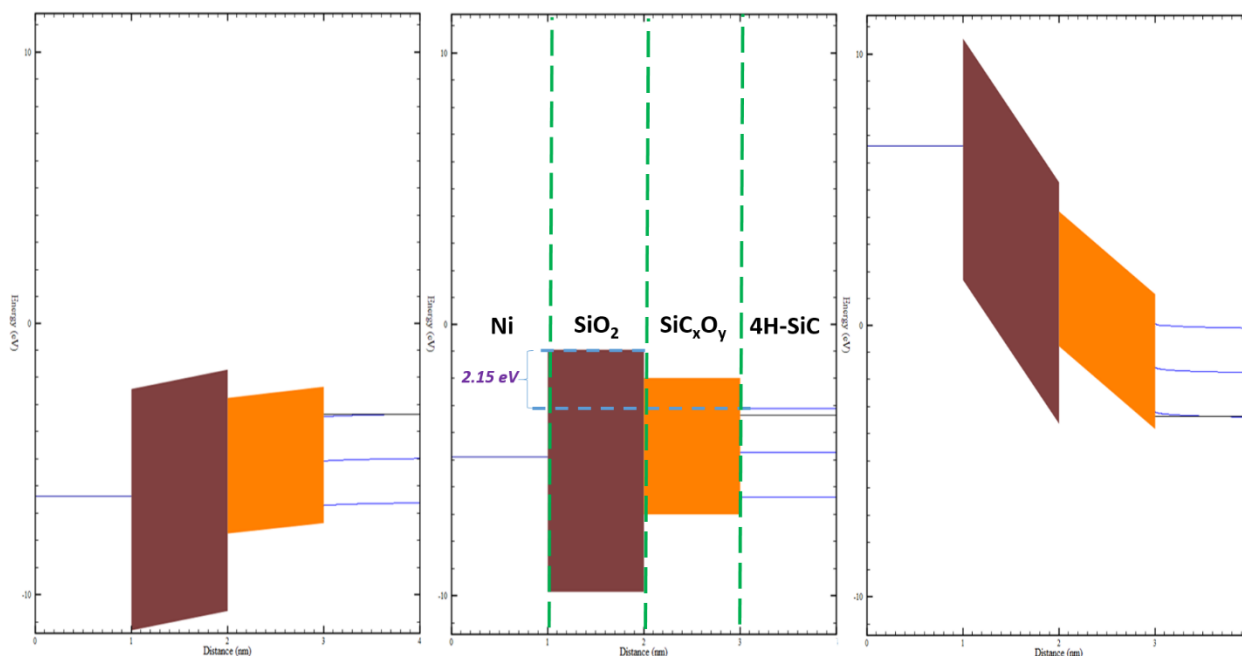


Figura 39: Diagrama de bandas simulado para estrutura Ni/SiO<sub>2</sub>/SiC<sub>x</sub>O<sub>y</sub>/SiC, com polarização direta (3 V), tensão de banda plana (1.527 V) e polarização reversa (-10 V), da esquerda para a direita, respectivamente. 2.15 eV é o valor da barreira efetiva do SiO<sub>2</sub>. As espessuras do SiO<sub>2</sub> e SiC<sub>x</sub>O<sub>y</sub> são de 1 nm cada.

A camada dielétrica de SiO<sub>2</sub> foi depositada por meio de *sputtering*, uma vez que o precursor de SiO<sub>2</sub> não está disponível para deposição por ALD no IF-UFRGS. A deposição por *sputtering* proporciona uma incerteza quanto ao processo de deposição, uma vez que esta técnica não garante uma uniformidade e controle na taxa de deposição como o ALD proporciona. As espessuras depositadas nominalmente foram de 1, 2, 4 e 8 nm de SiO<sub>2</sub>.

A Figura 40 nos dá informação da SBH (a) e o fator de idealidade  $\eta$  (b) em função da temperatura de medida das curvas I-V, para um diodo com 1 e 2 nm nominal de SiO<sub>2</sub> depositado. A SBH real calculada foi de 1.27 e 1.18 V para o diodo de 1 e 2 nm de SiO<sub>2</sub>, respectivamente. O fator de idealidade não teve muita alteração com o aumento da temperatura medida e apresentou valores aceitáveis com o esperado (valores próximos de 1), especialmente para o diodo com 1 nm de SiO<sub>2</sub> nominal. Ainda, podemos ver uma dependência da SBH e  $\eta$  se observarmos ponto a ponto para cada diodo: quando  $\eta$  diminui, a SBH aumenta, e vice-versa. Uma camada dielétrica de SiC<sub>x</sub>O<sub>y</sub> de 0.067 angstroms e de 1.43 angstroms para SiO<sub>2</sub> com espessura nominal de 1 nm foram encontradas, sugerindo que a deposição de SiO<sub>2</sub> não foi realizada conforme o esperado. Realizamos medidas de elipsometria de estruturas SiO<sub>2</sub>/Si, na qual o SiO<sub>2</sub> foi depositado juntamente com as amostras de SiC, de modo a se estimar a

espessura depositada de fato. As medidas de elipsometria apresentavam uma superfície sem óxido algum para SiO<sub>2</sub> com espessura nominal menor que 2 nm. Para as amostras com espessura nominal de 4 e 8 nm, as medidas de elipsometria apresentaram um óxido com espessura muito irregular e com índice de refração muito próximo ao do ar. As medidas I-V-T também não mostraram uma boa reprodutibilidade, em todos os casos.

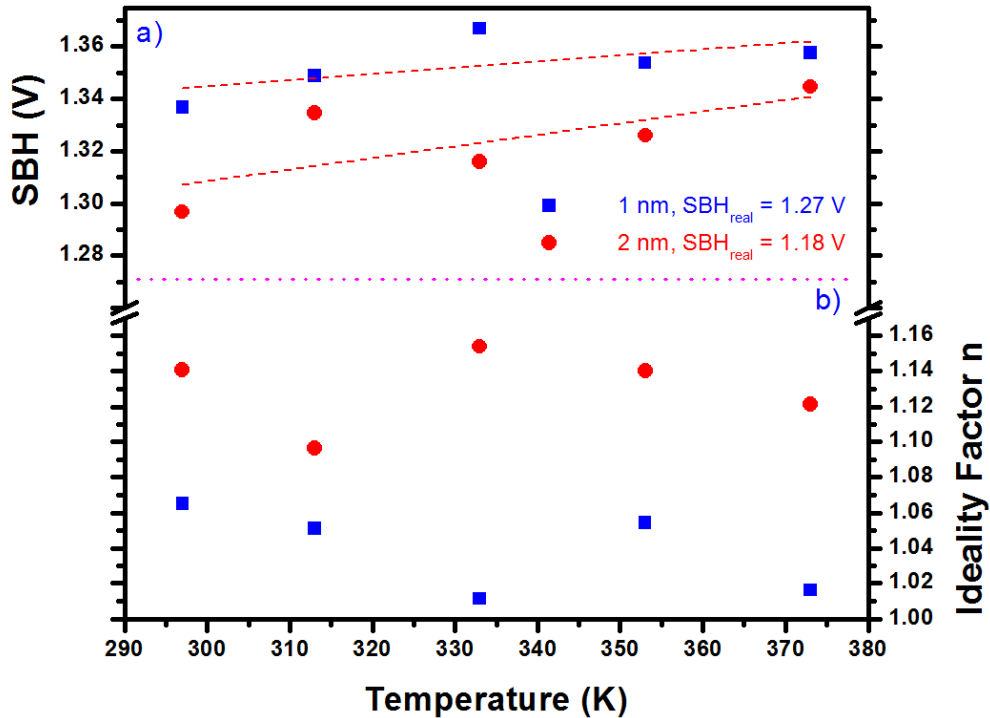


Figura 40: a) SBH e b) fator de idealidade em função da temperatura de medida I-V, para dois diodos com espessuras nominais de 1 e 2 nm de SiO<sub>2</sub>.

Como podemos observar na Figura 41a), o fator de idealidade para três diodos diferentes da mesma amostra com espessura nominal de 4 nm de SiO<sub>2</sub>, apresentaram valores muito acima do ideal e também sem nenhuma dependência clara com o aumento da temperatura das medidas I-V-T. A SBH também apresentou uma variabilidade muito grande, indicando que o SiO<sub>2</sub> depositado por *sputtering* não se mostrou uma boa técnica para fabricação de dispositivos Schottky do tipo MIS. Pela análise dos dois gráficos, poderíamos sugerir que o diodo 1 (D1) apresentou um comportamento adequado, com diminuição de  $\eta$  e aumento da SBH, aumentando a temperatura. Porém, uma SBH real de 0.06 V é calculada para o mesmo, além de variar o valor de  $\eta$  para valores acima de 3.

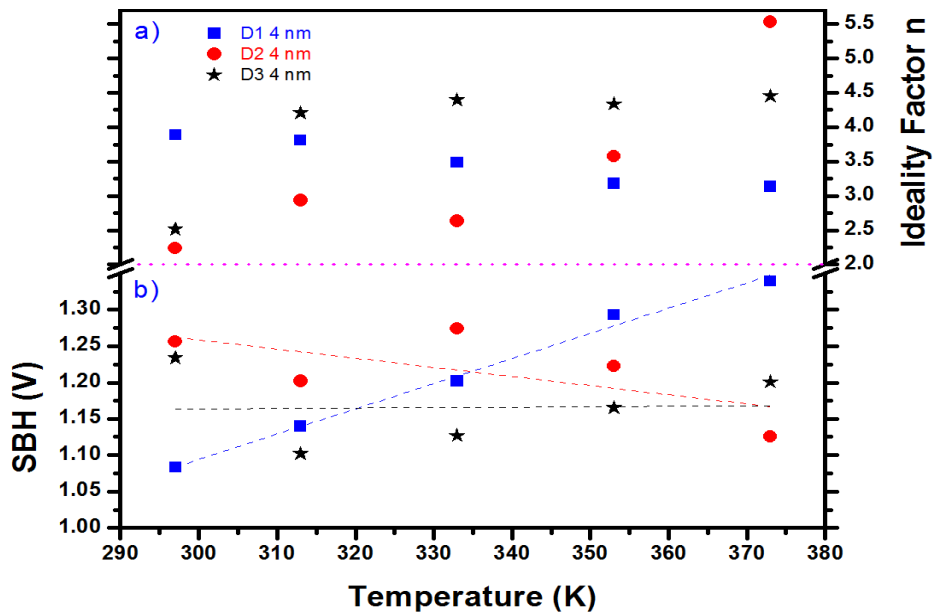


Figura 41 a) fator de idealidade e b) SBH em função da temperatura de medida I-V, para três diodos da mesma amostra de espessura nominal de 4 nm de SiO<sub>2</sub>.

A Figura 42 mostra os dados de SBH e  $\eta$  de dois diodos na qual possuem uma espessura nominal de SiO<sub>2</sub> de 8 nm. Como pode ser visto, ambos os diodos mostraram resultados confusos e não servem como dispositivo Schottky devido a sua instabilidade frente aos parâmetros calculados.

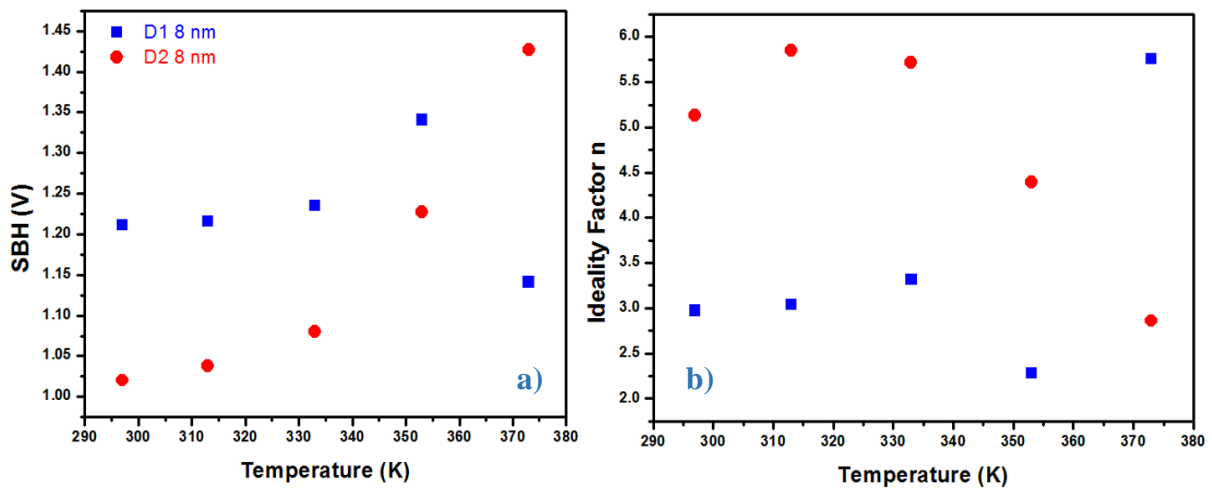


Figura 42: a) SBH e b) fator de idealidade em função da temperatura de medida I-V, para dois diodos da mesma amostra com espessura nominal de 8 nm de SiO<sub>2</sub>.



### 5.3.3 Estruturas Ni/HfO<sub>2</sub>/SiC/Ni

O óxido de háfnio (HfO<sub>2</sub>) atualmente é empregado em dispositivos de Efeito de Campo Metal-Óxido-Semicondutor (MOSFET), substituindo o óxido de silício como dielétrico de porta. Também tem aplicações em revestimentos ópticos e como *high-k* para capacitores em memórias DRAM. Uma das vantagens do HfO<sub>2</sub> é sua alta constante dielétrica quando comparado ao SiO<sub>2</sub> (25 e 3.9, respectivamente). Nesse sentido, o HfO<sub>2</sub> se torna um interessante dielétrico para estudo de estruturas Schottky do tipo MIS.

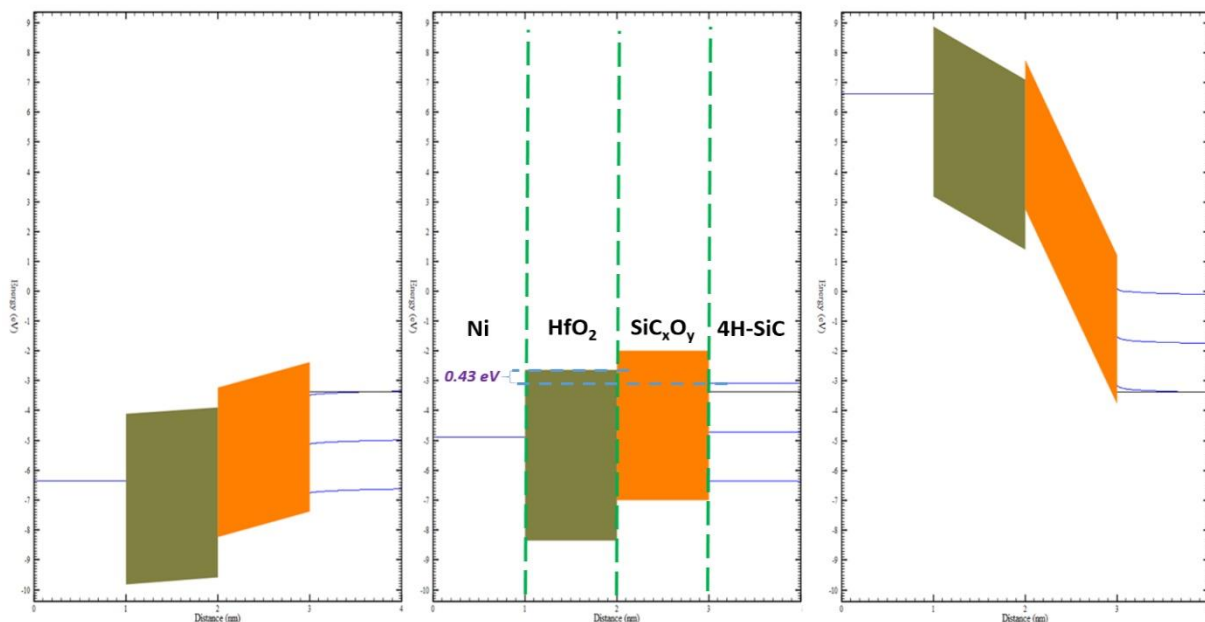


Figura 43: Diagrama de bandas simulado para estrutura Ni/HfO<sub>2</sub>/SiC<sub>x</sub>O<sub>y</sub>/SiC, com polarização direta (3 V), tensão de banda plana (1.527 V) e polarização reversa (-10 V), da esquerda para a direita, respectivamente. 0.43 eV é o valor da barreira efetiva do HfO<sub>2</sub>.

As espessuras de HfO<sub>2</sub> depositadas por ALD foram de 1, 2, 4 e 8 nm. A Figura 43 mostra as bandas de energia para a estrutura Ni/HfO<sub>2</sub>/SiC<sub>x</sub>O<sub>y</sub>/SiC, nas polarizações direta, de banda plana e reversa. A altura da barreira efetiva do oxido de háfnio foi calculada em 0.43 eV. Para análise, foram usados dois diodos de cada uma das espessuras, exceto para a amostra com 8 nm de HfO<sub>2</sub> depositado, na qual apresentou características que não correspondem a de um diodo Schottky.

A Figura 44 nos dá informação da SBH (a) e o fator de idealidade  $\eta$  (b) em função da temperatura de medida das curvas I-V, para dois diodos da mesma amostra com 1 nm nominal de HfO<sub>2</sub> depositado. Uma SBH real foi calculada para ambos os diodos, com valores de 1.22 e 1.26 V. O fator de idealidade encontrado foi o melhor até então, com valores muito próximos de 1. O mesmo também variou muito pouco com a temperatura, tendendo a 1 para temperaturas mais altas. A SBH real com valores muito próximos dos dois diodos e sua dependência linear casando muito bem com o ajuste mostram que os diodos apresentaram características de diodo Schottky reproduzíveis. A Figura 45 mostra as informações das características reversas de um dos diodos para várias temperaturas medidas. Todas as medidas mostram correntes reversas entre 5 e 10 pA para 100 V de tensão reversa, apresentando ótimas características para uso como dielétrico passivador entre metal e semicondutor.

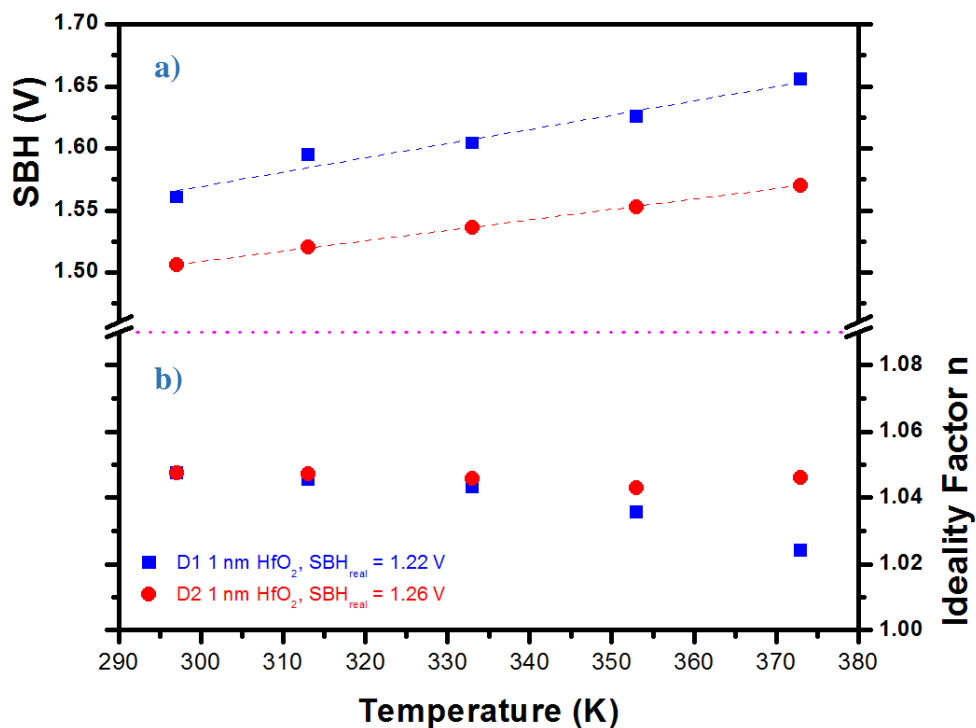


Figura 44: a) SBH b) e fator de idealidade em função da temperatura de medida I-V, para dois diodos com espessura nominal de 1 nm de HfO<sub>2</sub>.

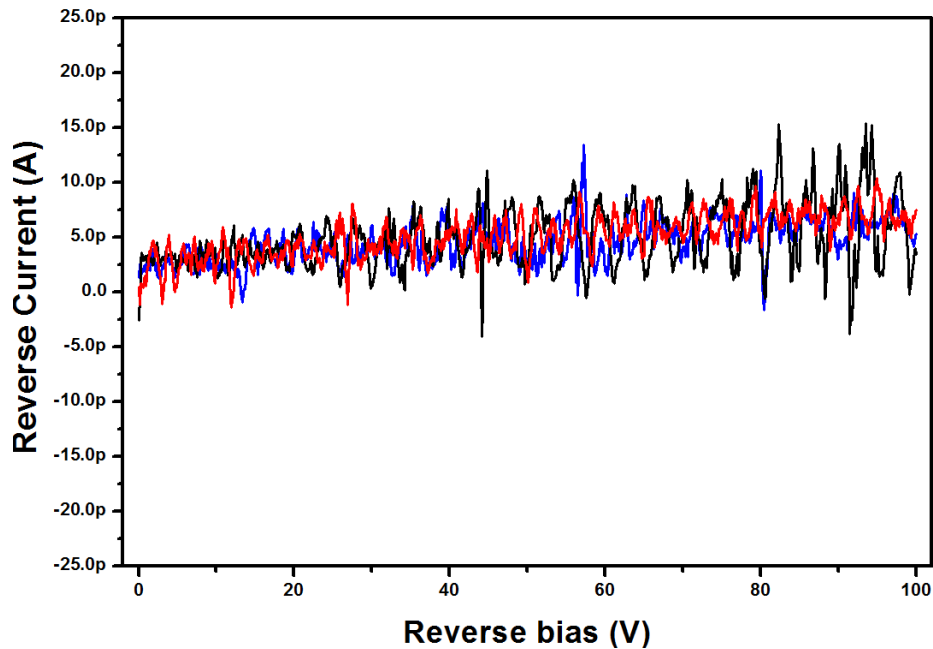


Figura 45: Corrente reversa em função da tensão reversa aplicada no diodo 1 (D1) com 1 nm de HfO<sub>2</sub> depositado, para as temperaturas medidas variando de 297 a 373 K.

Os dois diodos analisados com espessura nominal de 2 nm de HfO<sub>2</sub> apresentaram SBH real de 1.09 e 1.15 V, com fator de idealidade variando entre 1.20 e 1.28, como pode ser visto na Figura 46. Como vimos anteriormente, os diodos com espessuras acima de 1 nm não formam diodos Schottky apropriados. Pode-se observar claramente que o aumento de  $\delta$  diminui o valor da SBH real e aumenta o fator de idealidade. Este comportamento não beneficia o uso destes diodos para futuros dispositivos detectores. Esses parâmetros estão intimamente ligados com as características reversas, uma vez que é desejável passivar eletricamente a interface metal-semicondutor e não isolar uma da outra, como acontece em um capacitor MOS.

Os diodos com 4 nm de HfO<sub>2</sub> não apresentaram boas características de diodo Schottky, como pode ser observado na Figura 47. Além da SBH real variar significativamente de um diodo para outro da mesma amostra, o fator de idealidade apresentou valores superiores a 1.65 para temperatura ambiente e diminuiu para valores em torno de 1.5 para temperatura de 373 K. Espessuras acima de 4 nm, para todos os dielétricos estudados, não apresentaram características a serem consideradas para um diodo Schottky e potencial uso em detector de partículas.

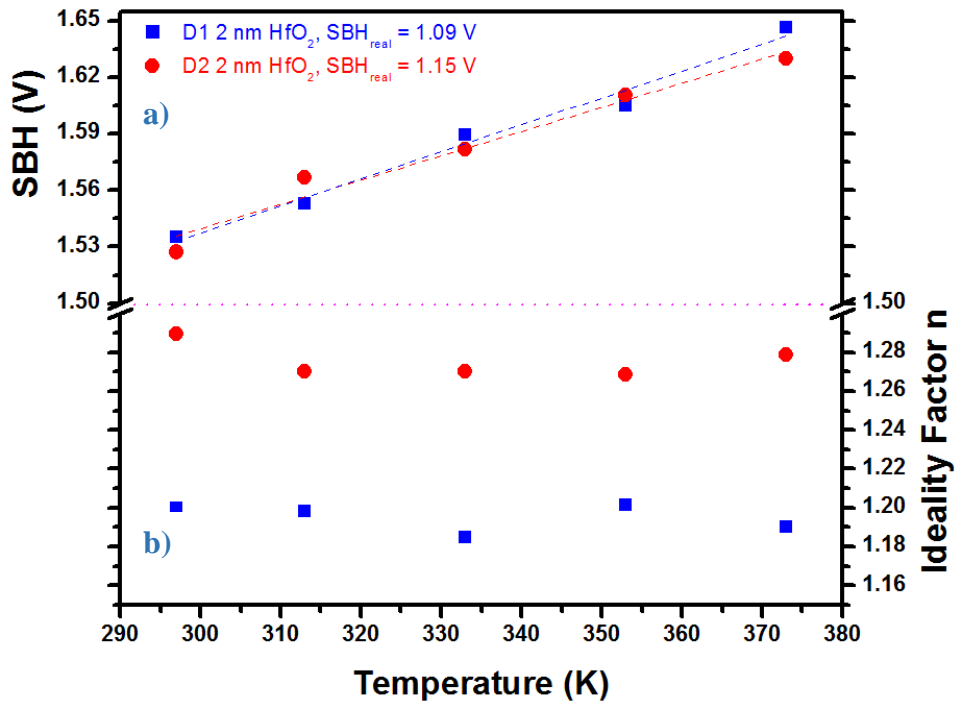


Figura 46: SBH a) e fator de idealidade b) em função da temperatura de medida I-V, para dois diodos com espessura nominal de 2 nm de  $\text{HfO}_2$ .

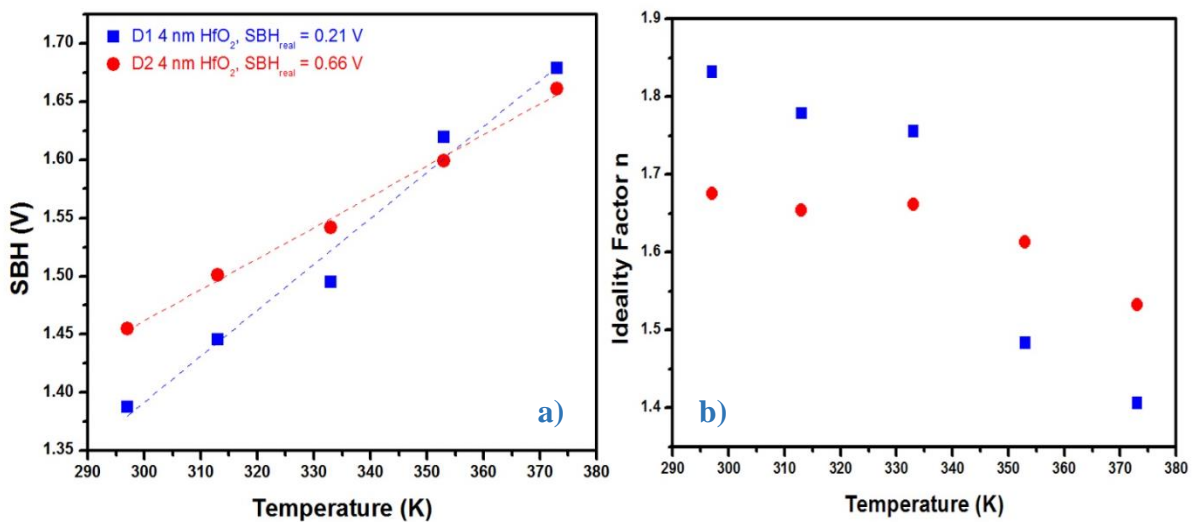


Figura 47: SBH a) e fator de idealidade b) em função da temperatura de medida I-V, para dois diodos com espessura nominal de 4 nm de  $\text{HfO}_2$ .

Utilizando a equação (45), podemos inferir as espessuras do oxidante crescido naturalmente e do  $\text{HfO}_2$  depositado. Os cálculos realizados foram referentes aos diodos com espessura nominal de 1 e 2 nm. Os diodos com 4 nm apresentaram variabilidade muito grande

entre um diodo e outro e não puderam ser utilizados para fins de cálculos de espessura. A Tabela 15 resume os resultados calculados. Assim como encontrado para a espessura de oxycarbeto de silício nativo nos diodos de TiO<sub>2</sub> (0.18 nm), a espessura calculada para os diodos com HfO<sub>2</sub> foi muito próxima, com valor de 0.20 nm. As espessuras de HfO<sub>2</sub> foram calculadas como sendo 1.12 e 2.24 nm, para as espessuras nominais de 1 e 2 nm, respectivamente. As espessuras calculadas ficaram próximas dos resultados esperados para as espessuras nominais. A variabilidade para mais ou para menos, mostrada na tabela, é referente a variabilidade dos cálculos realizados para os diferentes diodos da mesma amostra.

Tabela 15: SBH real e espessuras do SiC<sub>x</sub>O<sub>y</sub> e HfO<sub>2</sub> depositado, calculados pela equação (45).

Diodo	SBH <sub>REAL</sub> (V)	Espessura do isolador considerando duas camadas (nm)	
		$\delta_{\text{SiC}_x\text{O}_y}$	$\delta_{\text{HfO}_2}$
<b>1 nm HfO<sub>2</sub></b>	1.24 ± 0.05	0.2 ± 0.01	1.12 ± 0.3
<b>2 nmHfO<sub>2</sub></b>	1.12 ± 0.1		2.24 ± 0.6

Ainda foram realizadas medidas C-V variando a temperatura de medida. Os resultados para três diodos, cada um com espessura nominal de 1, 2 e 4 nm de HfO<sub>2</sub> são mostrados na Figura 48. Ao contrário do efeito do aumento da SBH com a temperatura das medidas I-V, as medidas C-V com temperatura variável mostram um efeito contrário, na qual a SBH diminui com o aumento da temperatura. Porém, isto é válido para os diodos 1 e 2 nm. Já para o diodo com 4 nm de HfO<sub>2</sub>, o efeito é parecido com o das análises I-V-T.

O efeito da SBH diminuir conforme aumento da temperatura da medida C-V ainda não é completamente entendido e precisa ser melhor investigado. Mas o que podemos inferir deste resultado é que o aumento da temperatura da medida C-V diminui o valor de  $V_{bi}$ . É esta diminuição, que é levada em conta na equação (28)), que faz com que SBH diminua com aumento da temperatura da medida C-V.

A análise C-V é uma boa ferramenta para se obter informações a respeito da SBH,  $V_{bi}$  e o valor de  $N_D$  (dopagem da camada epitaxial). O valor de  $N_D$  apresentou valores calculados de  $(1.25 \pm 0.1) \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ , próximo do valor informado pela empresa *CREE*. Este valor obtido corresponde ao cálculo para a tensão reversa de polarização de 0 V a 7 V. Dessa maneira garantimos que a abertura da camada de depleção esteja dentro dos 6  $\mu\text{m}$  de espessura, referente a espessura total da camada epitaxial. A completa abertura da camada epitaxial acontece com polarização reversa de 40 V.

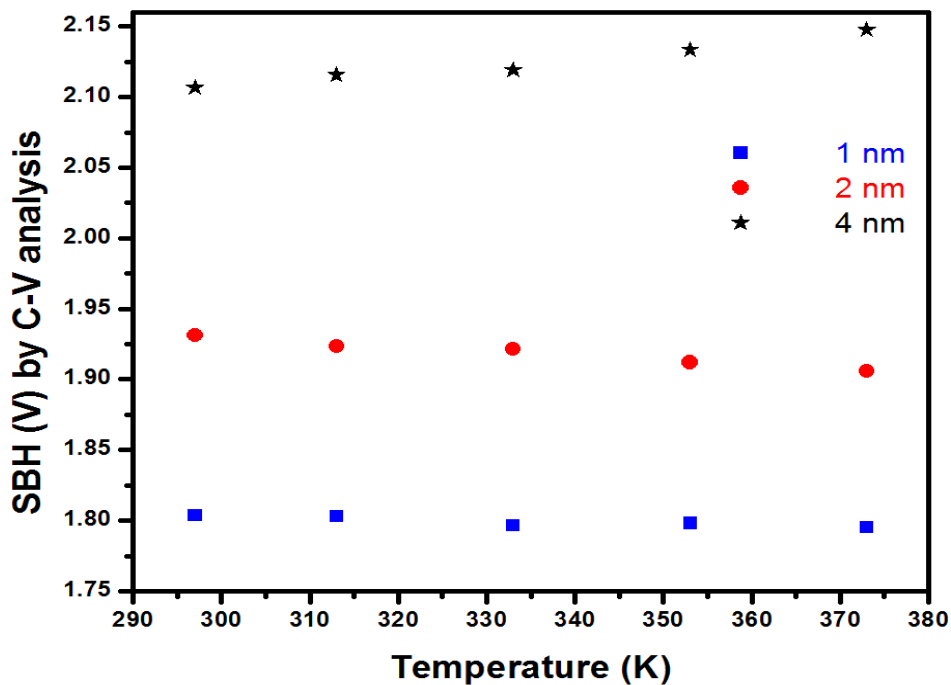


Figura 48: SBH obtida por análise C-V-T para três diodos com espessuras nominais de 1, 2 e 4 nm de  $\text{HfO}_2$

### 5.3.4 Estruturas Ni/ $\text{Al}_2\text{O}_3$ /SiC/Ni

Estruturas do tipo Ni/ $\text{Al}_2\text{O}_3$ /SiC/Ni foram fabricadas para análise dos parâmetros Schottky. O óxido de alumínio apresenta um valor de *bandgap* elevado comparado aos outros dielétricos estudados neste trabalho, tendo valor menor somente comparado ao óxido de silício (8.9 eV do  $\text{SiO}_2$  para 8.7 eV do  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ). O dielétrico  $\text{Al}_2\text{O}_3$  foi escolhido uma vez que um valor

maior de *bandgap* proporciona uma maior altura da barreira efetiva, com efeito benéfico para diminuição da corrente de fuga quando o dispositivo é polarizado reversamente. As espessuras de  $\text{Al}_2\text{O}_3$  depositadas por ALD foram de 1, 2 e 4 nm.

A Figura 49 mostra a banda de energia para a estrutura  $\text{Ni}/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiC}_x\text{O}_y/\text{SiC}$ , nas polarizações direta, reversa e de banda plana. Foi considerado uma camada dielétrica natural de  $\text{SiC}_x\text{O}_y$ , com 1 nm de espessura. A altura da barreira efetiva do óxido de alumínio foi calculada em 1.8 eV.

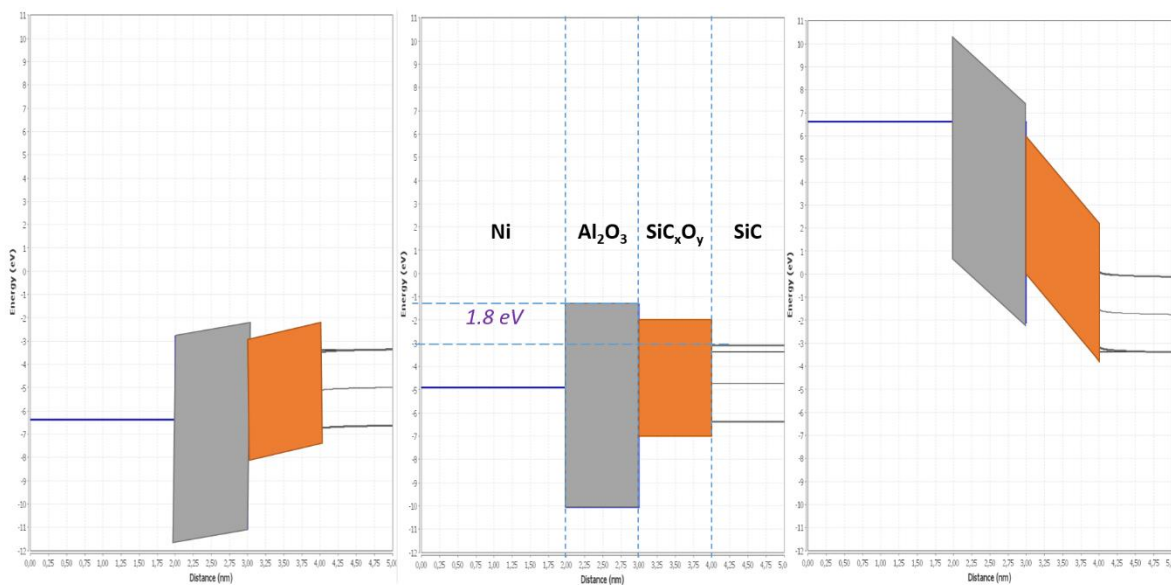


Figura 49: Diagrama de bandas simulado para estrutura  $\text{Ni}/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiC}_x\text{O}_y/\text{SiC}$ , com polarização direta (3 V), tensão de banda plana (1.527 V) e polarização reversa (-10 V), da esquerda para a direita, respectivamente. 1.8 eV é o valor da barreira efetiva do  $\text{Al}_2\text{O}_3$ .

A SBH aparente em função da temperatura I-V medida é apresentada na Figura 50, para os diodos com espessura nominal de 1, 2 e 4 nm de  $\text{Al}_2\text{O}_3$ . A SBH real foi calculada em 1.32 e 0.87 V, para os diodos com 1 e 2 nm de  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , respectivamente. Para ambos os diodos, a SBH aparente em função da temperatura apresenta uma dependência linear adequada, evidenciando boas características Schottky. A SBH aparente apresentou variância menor que 7% para diodos da mesma amostra, de espessuras 1 e 2 nm. Os diodos com espessura nominal de 4 nm apresentaram variação na SBH aparente maior que 10%. Particularmente, o diodo com 4 nm de  $\text{Al}_2\text{O}_3$  não apresentou um ajuste linear adequado para extração da SBH real. Esta divergência dos pontos da SBH aparente para um ajuste linear adequado sugere que espessuras maiores que 4 nm não apresentam boas características Schottky, mostrando características de um capacitor

MOS ao invés de um diodo MIS. Este comportamento torna os parâmetros obtidos a partir da TE modificada não serem confiáveis. Sendo assim, nenhuma informação a respeito da SBH real pode ser inferida.

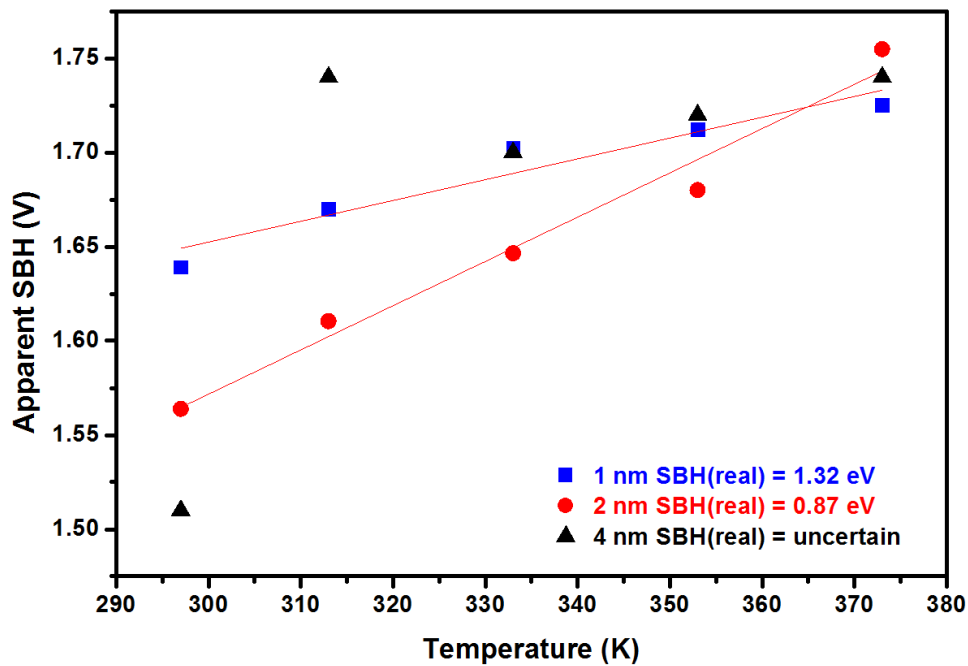


Figura 50: SBH aparente como função das curvas I-V medidas em diferentes temperaturas, para os diodos com 1, 2 e 4 nm de  $\text{Al}_2\text{O}_3$  entre o Ni e SiC. As linhas vermelhas representam o ajuste linear realizado para cada um dos diodos, para extração da SBH real extrapolada para 0 K.

A Figura 51 mostra o fator de idealidade  $\eta$  como função da temperatura medida, para cada um dos diodos. O fator de idealidade aumenta para maiores espessuras de  $\text{Al}_2\text{O}_3$ . O diodo com espessura de 1 nm apresentou  $\eta$  de 1.24 à temperatura ambiente (297 K) e seu valor diminuiu enquanto a temperatura de medida I-V aumentou, como esperado pelos estudos teórico e experimentais apresentados anteriormente. O mesmo aconteceu para o diodo com espessura nominal de 2 nm, porém este tem valor de  $\eta$  maior comparado ao diodo com 1 nm. Para ambos os diodos, o valor de  $\eta$  diminuiu enquanto a temperatura de medida I-V aumenta, evidenciando que a corrente elétrica é gerada primordialmente por TE quando aumentamos a temperatura de medida. O diodo com 4 nm apresentou valores maiores para  $\eta$  e não obedece a regra de diminuição de  $\eta$  para temperaturas maiores. A corrente por este diodo é devido a uma combinação de TE, tunelamento quântico e condutividade ôhmica do filme dielétrico, aumentando assim o valor de  $\eta$ .



As espessuras dielétricas dos diodos MIS foram calculadas utilizando a equação (45). Uma camada nativa de  $\text{SiC}_x\text{O}_y$  com espessura de 0.2 nm foi calculada para os diodos. As espessuras nominais de  $\text{Al}_2\text{O}_3$  com 1 e 2 nm foram calculadas, apresentando valores próximos dos esperados: 1.2 e 2.4 nm, respectivamente. Como a SBH real do diodo com 4 nm não foi possível de se obter, também não foi possível se calcular a camada dielétrica utilizando a TE modificada.

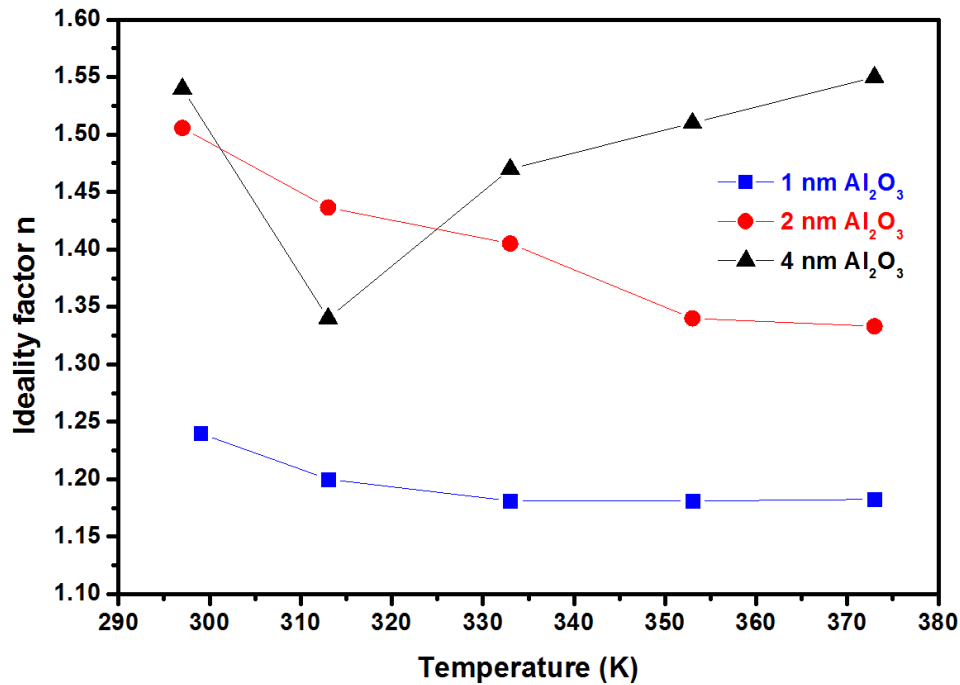


Figura 51: Fator de idealidade  $\eta$  como função das medidas I-V em diferentes temperaturas, para cada um dos diodos com 1, 2 e 4 nm de  $\text{Al}_2\text{O}_3$  entre Ni e SiC.

As correntes reversas para cada um dos diodos são apresentadas na Figura 52, para medidas em temperatura ambiente. Todas as correntes reversas permanecem na ordem de pA. Como podemos ver na Figura 50, na temperatura ambiente, a SBH aparente é maior para o diodo com 1 nm de  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , seguido dos diodos com 2 e 4 nm, respectivamente. Desse modo, é esperado que a corrente reversa seja maior para diodos com camadas mais espessas de  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , como podemos ver pela Figura 52. Se considerarmos somente as correntes reversas dos três diodos, os mesmos poderiam ser usados como estruturas de detectores de partículas. O diodo com 1 nm de  $\text{Al}_2\text{O}_3$  apresentou correntes reversas abaixo de 100 pA, na polarização reversa de 40 V. Esta tensão de polarização é selecionada quando utilizamos as estruturas para detector, de modo a assegurar a completa abertura da camada epitaxial (6  $\mu\text{m}$ ). O aumento da

temperatura tem o efeito de aumentar a corrente reversa para todos os diodos. Como mais energia é entregue aos elétrons para ultrapassar a SBH, é esperado que a corrente reversa aumente proporcionalmente.

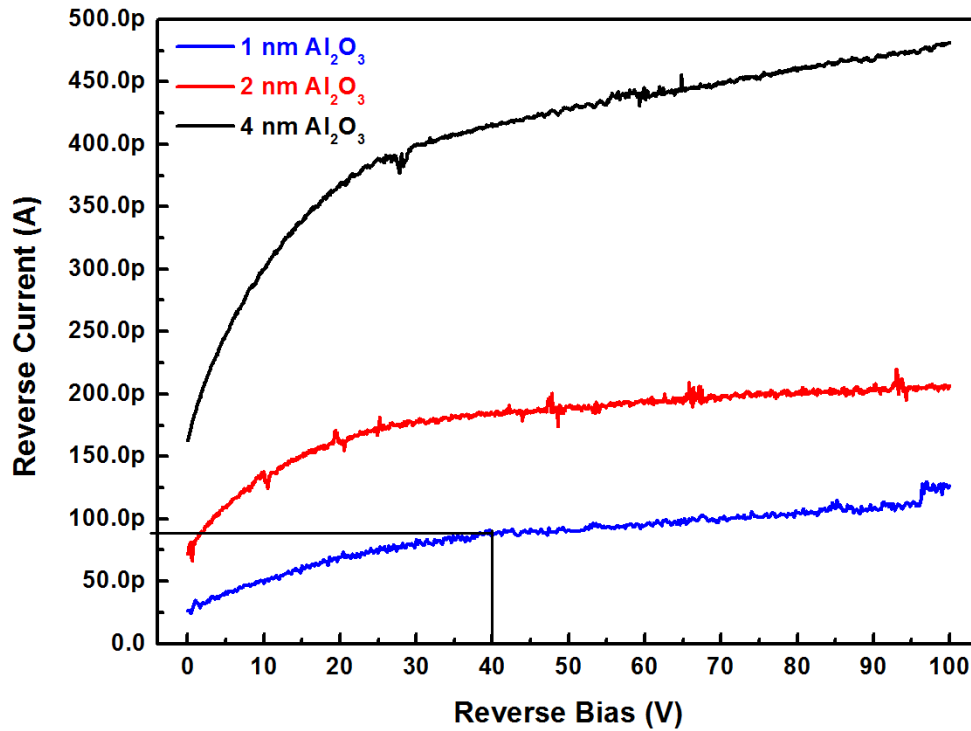


Figura 52: Corrente reversa medida na temperatura ambiente (297 K) para os diodos Schottky com 1, 2 e 4 nm de Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

#### 5.4 Estruturas MIS para detector de partículas alfa

Usualmente os detectores de partículas alfa utilizados nos experimentos de Espectrometria de Retroespalhamento Rutherford (RBS) possuem uma barreira Schottky formada pelo ouro sobre silício. A escolha do ouro se deve pelo fato de o mesmo possuir uma função trabalho maior que outros metais, formando uma SBH maior (ver Tabela 3). No caso da formação da barreira Schottky sobre SiC, estudos da literatura sugerem níquel ou ouro como metal para barreira Schottky [35][94]. Estes dois metais possuem um valor de função trabalho próxima, de modo que a dependência da SBH em relação a diferença da função trabalho dos dois metais é menor quando comparada ao papel que os estados de interface promovem em

determinar a altura efetiva da barreira. Como abordado neste trabalho, a utilização de estruturas Schottky do tipo MIS passivam os estados de interface e também aumentam artificialmente a SBH, de modo a produzirem uma barreira em energia para os elétrons quando utilizamos o detector na polarização reversa (para o SiC dopado tipo-n).

Nesta seção apresentaremos a confecção e caracterização de duas estruturas para compor um detector de partículas alfa, a ser testado no experimento de RBS, localizado no Instituto de Física da UFRGS.

As estruturas Schottky MIS de SiC foram fabricadas da mesma maneira como as amostras estudadas anteriormente, conforme fluxograma mostrado na

Figura 18. O contato ôhmico de Ni foi depositado com espessura de 150 nm. Os dielétricos depositados entre o Ni (Schottky) e SiC foram o  $\text{HfO}_2$  e  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , ambos com espessura de 1 nm. Posteriormente realizamos a deposição dos contatos Schottky de Ni em ambas as amostras, utilizando máscara mecânica, formando eletrodos circulares com 6 mm de diâmetro e 10 nm de espessura.

A Figura 53 mostra a simulação utilizando o Diagrama de Bandas, para a estrutura Ni(10 nm)/ $\text{Al}_2\text{O}_3$ (1 nm)/ $\text{SiC}_x\text{O}_y$ (0.2 nm)/4H-SiC, com tensão de banda plana aplicada. Como podemos ver, a inserção de uma camada dielétrica fina entre metal e semiconductor auxilia no aumento da SBH, quando comparada a SBH teórica. Para o caso da amostra que possui  $\text{HfO}_2$

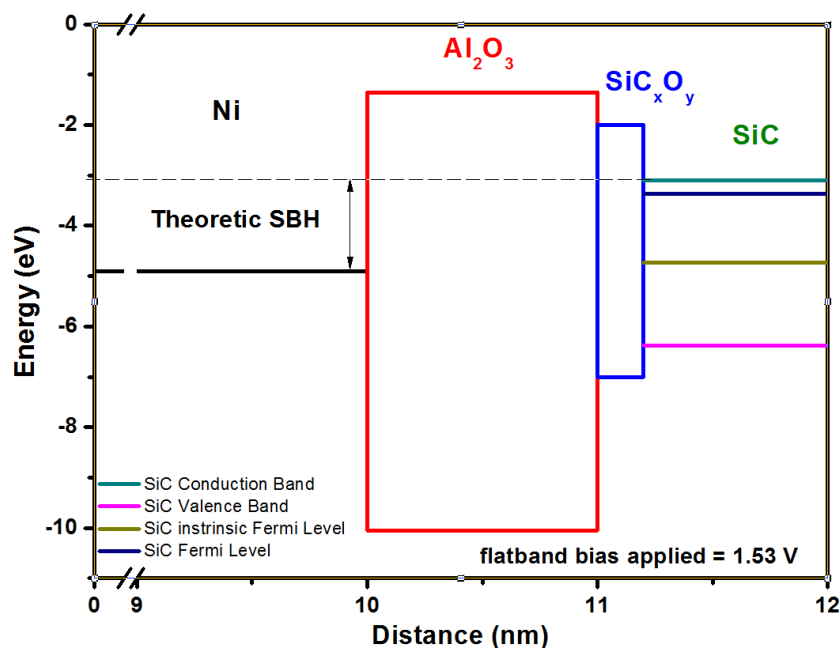


Figura 53: Estrutura Ni/ $\text{Al}_2\text{O}_3$ / $\text{SiC}_x\text{O}_y$ /4H-SiC simulada com o programa Diagrama de Bandas, aplicando tensão de banda plana.

como dielétrico, o diagrama de bandas é similar e se aproxima do que é mostrado na Figura 43. A Figura 54 mostra a secção transversal das amostras fabricadas, com as devidas dimensões.

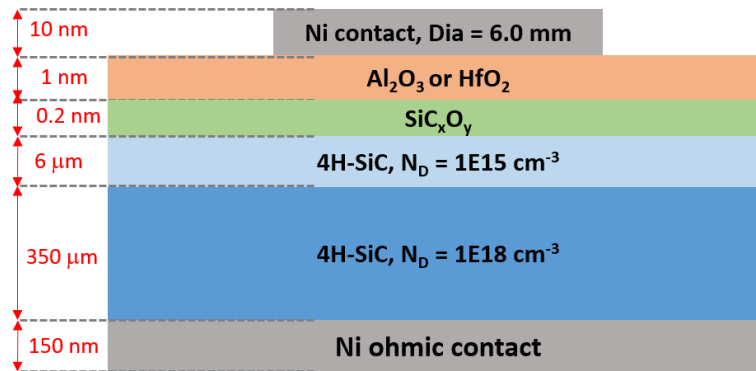


Figura 54: Visualização da secção transversal da estrutura Schottky de Ni/(Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> ou HfO<sub>2</sub>)/SiC<sub>x</sub>O<sub>y</sub>/4H-SiC.

#### 5.4.1 Características Elétricas das estruturas para detector

Anteriormente ao encapsulamento e teste no experimento de RBS, as amostras foram caracterizadas eletricamente. Para tanto, medidas I-V com temperatura variável foram realizadas nas estruturas MIS fabricadas. A Figura 55 apresenta a SBH aparente em função da temperatura de medida I-V para as estruturas de Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/4H-SiC e Ni/HfO<sub>2</sub>/4H-SiC. Ambas as amostras aumentam a SBH conforme o aumento da temperatura de medida I-V. As SBH real foram extraídas, assim como o fator de idealidade. A amostra de Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/4H-SiC apresentou SBH real de 0.61 V e  $\eta$  de 1.19, enquanto a amostra de Ni/HfO<sub>2</sub>/4H-SiC apresentou SBH real de 0.32 V e  $\eta$  de 1.15. O fator de idealidade de ambas as amostras variou muito pouco em torno de seus valores médios. Como no experimento de RBS os detectores são mantidos a temperatura ambiente, é interessante expressar o valor de SBH aparente. Nesse caso, a amostra de Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/4H-SiC apresenta uma SBH de 0.97 V, enquanto a amostra de Ni/HfO<sub>2</sub>/4H-SiC apresenta uma SBH de 0.91 V.

Na Figura 56 são apresentadas as densidades de correntes reversas de ambas as amostras experimentais e de um detector comercial utilizado no experimento de RBS. O detector de Si comercial foi adquirido da empresa ORTEC, modelo cu-012-025-100 [95]. Detectores devem ter sua corrente reversa como sendo a menor possível, de modo que os pulsos

de cargas gerados pelas partículas  $\text{He}^{++}$  coletados na camada epitaxial gerem uma alta razão de sinal-ruído.

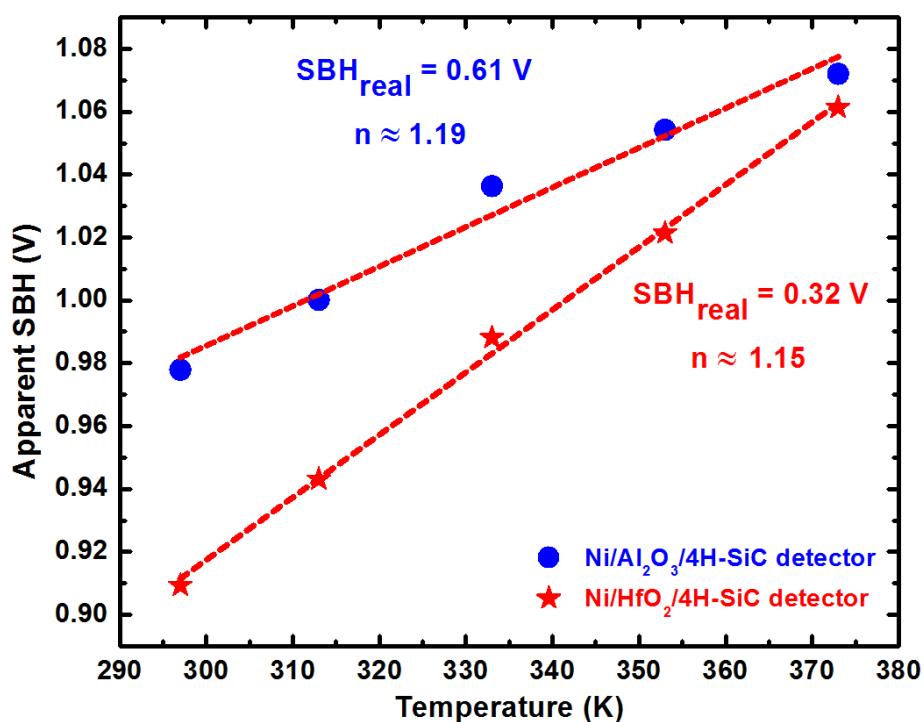


Figura 55: SBH aparente em função da temperatura das medidas I-V para as amostras Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/4H-SiC e Ni/HfO<sub>2</sub>/4H-SiC.

Uma densidade de corrente em torno de  $20 \text{ nA/cm}^2$ , com tensão reversa de  $40 \text{ V}$ , foi inferida para a amostra de Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/4H-SiC, sendo a menor dentre as estruturas apresentadas na Figura 56. O detector ORTEC de Si apresentou uma densidade de corrente reversa maior em toda escala de tensão até  $40 \text{ V}$ , em comparação ao detector de Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/4H-SiC. Nesta tensão de  $40 \text{ V}$ , o detector ORTEC apresentou uma densidade de corrente em torno de  $55 \text{ nA/cm}^2$ . Este valor é mais do que duas vezes o valor de densidade de corrente da estrutura de Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/4H-SiC. Para efeitos de comparação, as áreas ativas do detector comercial e das estruturas Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/4H-SiC e Ni/HfO<sub>2</sub>/4H-SiC são de  $0.25 \text{ cm}^2$  e  $0.28 \text{ cm}^2$ , respectivamente. O detector de Ni/HfO<sub>2</sub>/4H-SiC apresentou densidade de corrente reversa maior que o detector de Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/4H-SiC, em toda escala de tensão reversa. A densidade de corrente do detector Ni/HfO<sub>2</sub>/4H-SiC foi muito próxima da densidade de corrente medida para o detector comercial ORTEC em toda escala de tensão, sendo levemente superior para tensões acima de  $35 \text{ V}$ . Na tensão reversa de  $40 \text{ V}$ , a estrutura de Ni/HfO<sub>2</sub>/4H-SiC apresentou uma densidade de corrente

reversa de  $62 \text{ nA/cm}^2$ . As densidades de corrente de todos os detectores estão de acordo com o desejado para realização de detecção de partículas alfa no experimento de RBS.

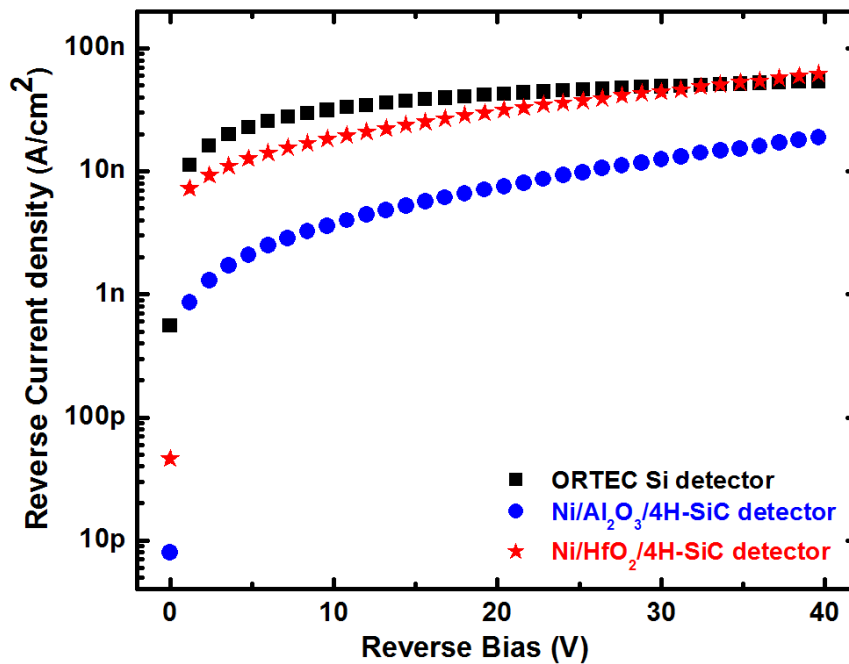


Figura 56: Densidade de corrente reversa em função da tensão reversa aplicada, para as estruturas de detectores Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/4H-SiC, Ni/HfO<sub>2</sub>/4H-SiC e detector de Si comercial ORTEC.

#### 5.4.2 Encapsulamento e montagem experimental no RBS

Após a caracterização elétrica com medidas I-V de ambas as estruturas apresentadas anteriormente, as mesmas foram montadas em uma estrutura similar ao dos detectores comerciais de Si. A Figura 57 apresenta a estrutura utilizada para o encapsulamento das amostras experimentais.

A capacitância do detector é um parâmetro importante para o tempo de coleta de carga e amplitude do sinal-ruído medido. A Figura 58 mostra a capacitância medida em função da tensão reversa aplicada. Para a tensão reversa de 40 V, o detector de Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/4H-SiC apresentou capacitância de 200 pF, enquanto que para o detector de Ni/HfO<sub>2</sub>/4H-SiC foi de 300 pF. Já o detector comercial de Si, a capacitância foi de 31 pF, também para a polarização reversa de 40 V. As constantes dielétricas relativas do Si e do SiC são comparáveis (11.9 para

o Si e 9.7 para o SiC). Essa diferença de capacitância dos detectores experimentais para o detector comercial de Si é devida principalmente ao fato da maior espessura da camada epitaxial de Si no detector comercial de Si (estimado em 45  $\mu\text{m}$ ).

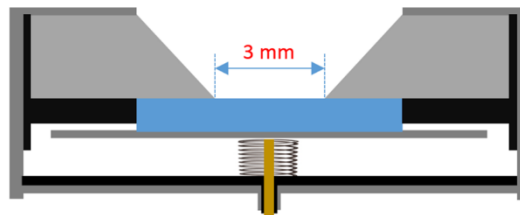


Figura 57: Visão da secção transversal do encapsulamento das estruturas Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/4H-SiC e Ni/HfO<sub>2</sub>/4H-SiC, para posterior montagem no experimento de RBS. Os detectores são acoplados à eletrônica por meio de um conector microdot. Em cinza é representado partes que compõem a estrutura metálica do detector, em preto são representados os isoladores e em azul a estrutura da amostra da Figura 54.

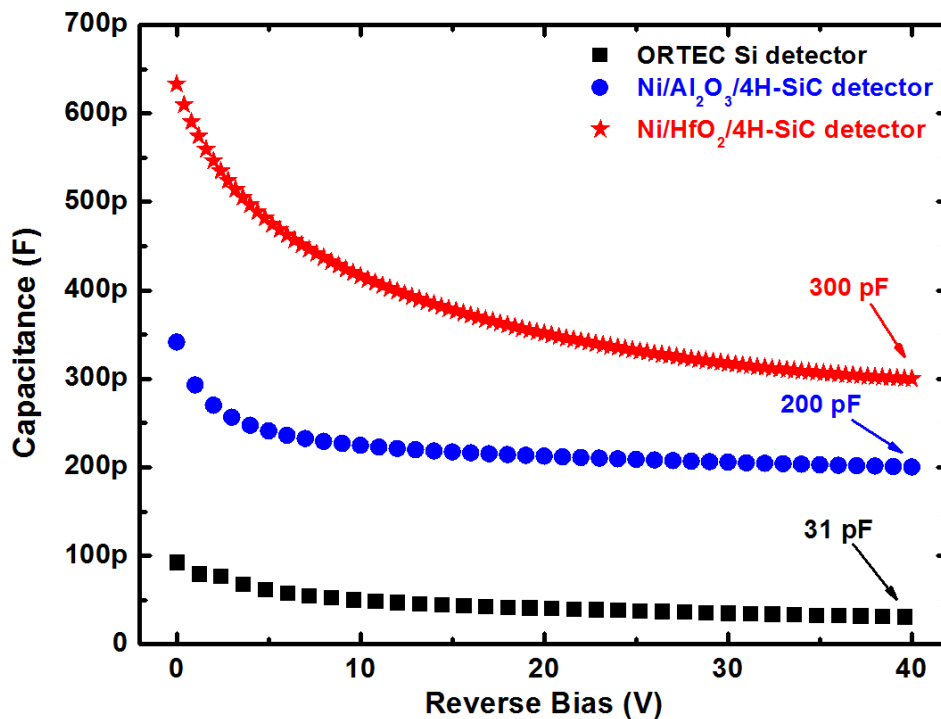


Figura 58: Capacitância em função da polarização reversa aplicada, para o detector comercial ORTEC e para os detectores experimentais de Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/4H-SiC e Ni/HfO<sub>2</sub>/4H-SiC.

Anterior ao experimento de RBS, é importante assegurar que a coleta das partículas alfa ocorra dentro da camada epitaxial, na qual para os detectores experimentais é de 6  $\mu\text{m}$ . Para tanto, simulações utilizando o programa SRIM foram realizadas [96] e são apresentadas a

seguir. Na sequência apresentaremos os resultados para cada um dos detectores em separado, pois o detector de Ni/HfO<sub>2</sub>/4H-SiC foi fabricado posteriormente ao detector de Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/4H-SiC e, portanto, realizamos algumas medidas e simulações adicionais.

### 5.4.3 Simulações SRIM

Para realizar o experimento de RBS, desejamos saber a projeção dos íons e quanto da energia é depositada na camada de depleção, até a completa parada das partículas alfa no detector. Para tanto, realizamos simulações utilizando o programa SRIM (*Stopping and Range of Ions in Matter*) [96]. Este programa é uma coleção de *softwares* capaz de calcular vários parâmetros importantes do transporte de íons na matéria. Aplicações típicas do *software* incluem cálculos de perda de energia, parada e alcance médio de íons na matéria, rápidos ou aprimorados cálculos de tabelas com valores do poder de “freamento” eletrônico e nuclear, *straggling*, distribuição 3D dos íons na matéria, possibilidade de simular alvos com complexas configurações de multicamadas, cálculos de mudança na configuração do arranjo químico dos alvos, cálculos de átomos ejetados a partir da incidência de íons, entre outros cálculos. O programa é interativo e permite simular diferentes configurações experimentais típicas da pesquisa com feixes de íons. Realizando simulações prévias ao experimento de RBS, podemos otimizar a configuração experimental, além de facilitar o entendimento frente aos resultados experimentais.

Na configuração experimental do RBS, utilizamos uma amostra de Si contendo um filme de 55 nm de ouro (Au). A configuração experimental simulada pelo programa SRIM constituiu em variar a energia do feixe das partículas alfa ( $E_0$ ) de 1 até 2.5 MeV, porém corrigida pelo fator cinemático do ouro ( $K_{Au}(165^\circ) = 0.9233$ ). Esta correção pelo fator cinemático do Au se deve ao fato de que as partículas alfa que chegam ao detector já interagiram com os átomos de ouro da amostra, transferindo parte de sua energia para estes. A correção da energia das partículas alfa pelo fator cinemático do ouro, para a geometria de retrospalhamento de 165°, pode ser observada na Tabela 16.

A Figura 59 mostra a simulação para os íons He<sup>++</sup> após a sua completa perda de energia, configurando no repouso completo dentro do detector, em função da profundidade no 4H-SiC.



A estrutura alvo das partículas alfa foi composta de 10 nm de Ni sobre *bulk* de 4H-SiC. As energias simuladas foram de 1, 1.5, 2 e 2.5 MeV, corrigidas pelo fator cinemático do ouro, resultando nas energias ( $E_0 \cdot K_{Au}$ ) 923, 1385, 1846 e 2308 keV, respectivamente. Observamos que conforme o aumento da energia das partículas alfa, o completo repouso das mesmas acontece mais profundamente no 4H-SiC. A partir desta simulação, pudemos determinar a projeção média dos íons dentro do 4H-SiC ( $R_p$ ) e o *straggle* calculado, conforme apresentado na Tabela 16. O *straggle* é a largura à meia altura calculada de cada curva de distribuição das alfas da Figura 59. A Tabela 16 também informa a tensão reversa mínima necessária para que as alfas repousem dentro de uma projeção total  $R_p + \textit{straggle}$ , considerando um perfil puramente gaussiano para cada curva de implantação da Figura 59. Dessa maneira, sabemos qual a tensão mínima necessária a ser aplicada no detector para cada uma das energias das partículas alfa retroespalhadas da amostra. A Tabela 17 indica a tensão reversa de polarização do detector e sua respectiva abertura da camada de depleção, para dopagem da camada epitaxial calculada em  $1.25 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  (obtidas através das medidas C-V).

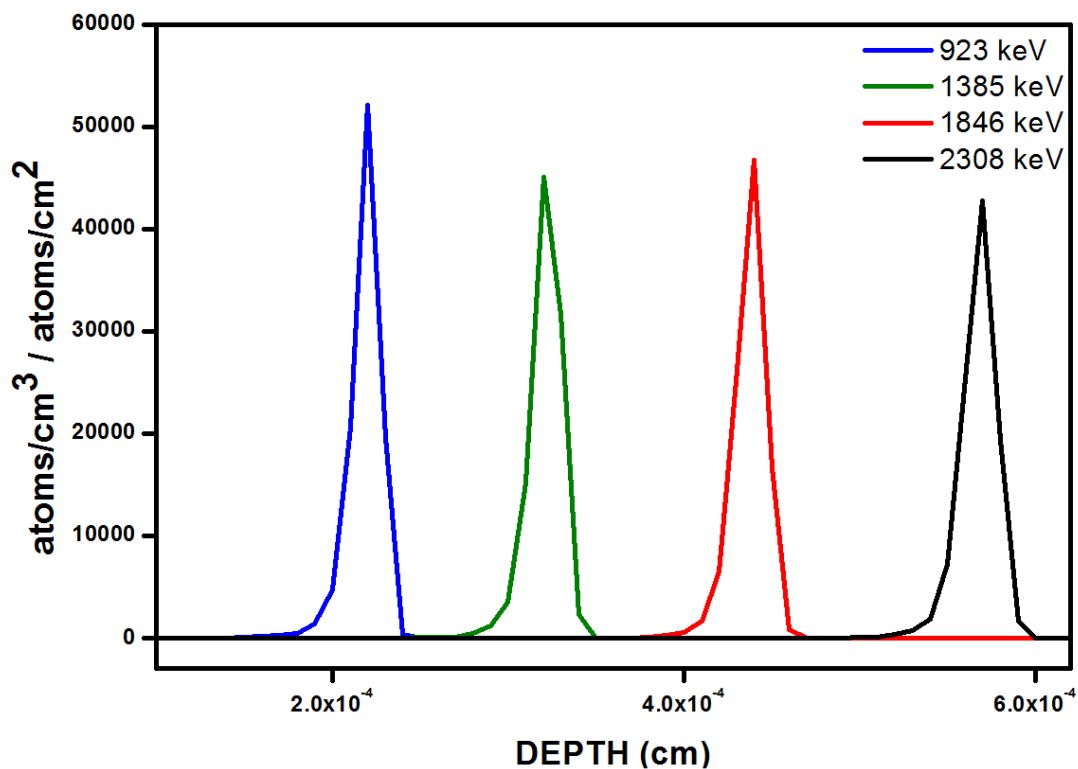


Figura 59: Distribuição das alfas repousando dentro da camada epitaxial de 4H-SiC (perfil de implantação), para as quatro energias das partículas alfa corrigidas pelo fator cinemático do Au, utilizadas no experimento de RBS.

Tabela 16: Energias do feixe de partículas alfa que chegam ao detector ( $E_0 * K_{Au}$ ), suas projeções ( $R_p$ ) e o *straggle* das projeções, calculado através do programa SRIM. A última coluna indica a tensão mínima necessária para abertura da camada de depleção.

$E_0 * K_{Au}$ (keV)	$R_p$ ( $\mu\text{m}$ )	<i>Straggle</i> ( $\mu\text{m}$ )	$R_p + \textit{Straggle}$ ( $\mu\text{m}$ )	Tensão reversa mínima (V)
<b>923</b>	2.13	0.10	2.23	4.25
<b>1385</b>	3.15	0.11	3.26	10.82
<b>1846</b>	4.31	0.12	4.43	21.34
<b>2308</b>	5.61	0.13	5.74	36.9

Tabela 17: Tensão reversa aplicada e a largura da camada de depleção W correspondente.

Tensão reversa aplicada no detector de 4H-SiC (V)	Largura da camada de depleção W ( $\mu\text{m}$ )
0	1.16
5	2.37
10	3.15
15	3.77
20	4.3
25	4.77
30	5.2
35	5.6
40	5.97

A partir do cálculo da largura da camada de depleção obtida para cada uma das tensões reversas aplicadas, conforme mostrado na Tabela 17, podemos inferir o percentual das partículas alfa que repousam dentro da zona de depleção, para cada uma das energias do feixe de partículas alfa. Este cálculo foi realizado com base na Figura 59, na qual se realizou a integral de zero à  $W$ , dividido pelo valor total da integral de 0 à infinito, para cada uma das tensões reversas e cada uma das energias. Definimos infinito como sendo uma região na escala de profundidade da Figura 59, longe do pico principal de repouso das partículas alfa. A Figura 60 indica a porcentagem de partículas alfa repousadas internamente na camada de depleção, em função da tensão reversa aplicada, para cada uma das energias simuladas. Podemos ver que para as partículas alfa que penetram o detector 4H-SiC com energia de 923, 1385, 1846 e 2308 keV, uma tensão mínima de 5, 15, 25 e 40 V é necessária para garantir 100% das partículas repousando internamente na camada de depleção, respectivamente.

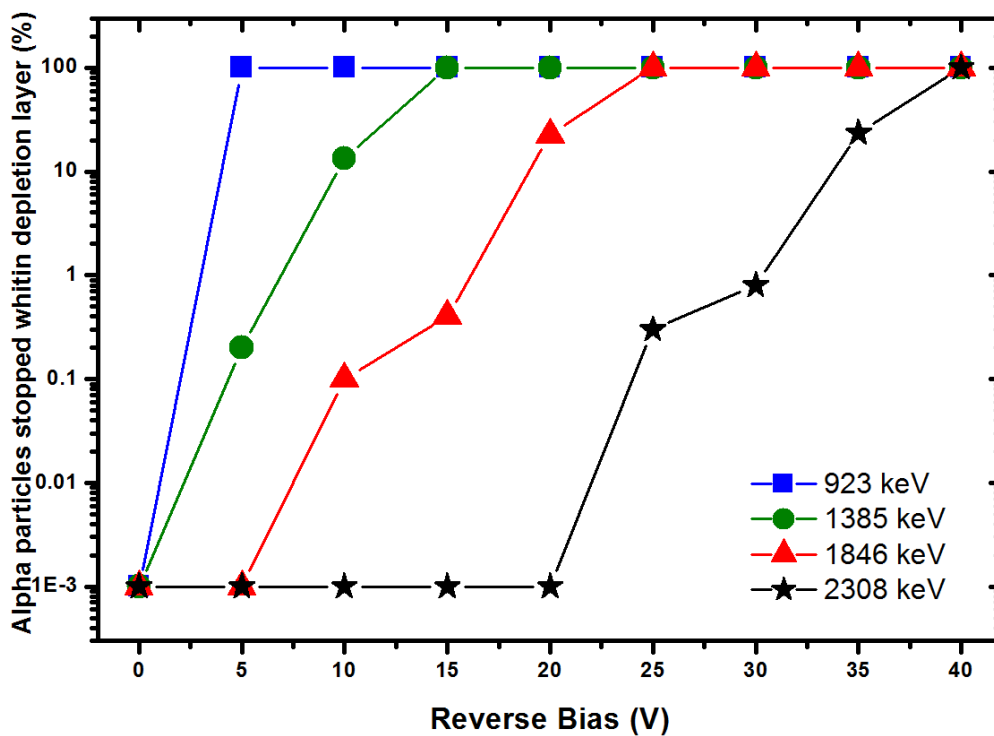


Figura 60: Porcentagem das partículas alfa repousadas internamente na camada de depleção criada a partir da tensão reversa aplicada, para cada uma das energias das partículas alfa.

Ao mesmo tempo que as simulações ocorriam para se determinar a distribuição das partículas alfa em função da profundidade, conforme apresentado na Figura 59, obtivemos as curvas de ionização de Bragg, apresentadas na Figura 61. A partir das curvas de Bragg para

cada energia simulada, podemos visualizar a perda de energia das partículas alfa em função da profundidade no detector. No início de cada curva podemos observar um leve aumento na perda de energia, referente aos 10 nm de Ni do contato Schottky do detector. Após esse leve aumento, a perda de energia se dá completamente internamente no 4H-SiC, até a completa parada do íon no final de cada curva. Realizando-se a integral completa da curva de ionização, obtemos a energia inicial das partículas alfa, uma vez que toda energia cinética é transferida para os átomos da rede, além da criação dos pares e-h na estrutura de Ni/4H-SiC.

A partir dos cálculos apresentados na Tabela 17, podemos realizar a integral do início de cada curva de Bragg até a profundidade da camada de depleção para cada tensão reversa aplicada. Assim podemos inferir a porcentagem de energia depositada internamente a camada de depleção criada pela polarização reversa. A Figura 62 mostra estes resultados para cada uma das energias simuladas. Para que quase 100% da energia das partículas alfa seja depositada na camada de depleção criada, tensões menores do que o calculado para a Figura 60 são necessárias. Porém, para garantir uma coleta integral dos pares e-h criados, as tensões reversas que devem ser observadas são as que garantem todas as partículas alfa repousando internamente na camada de depleção criada. As tensões que devem ser observadas são as apresentadas na Tabela 16.

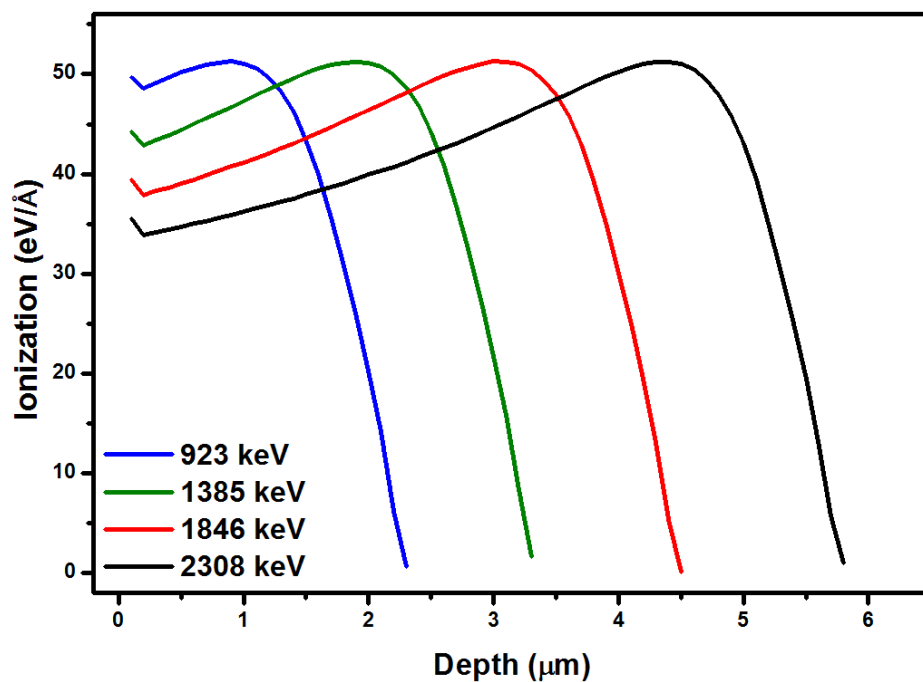


Figura 61: Curvas de ionização de Bragg, para cada uma das energias simuladas.

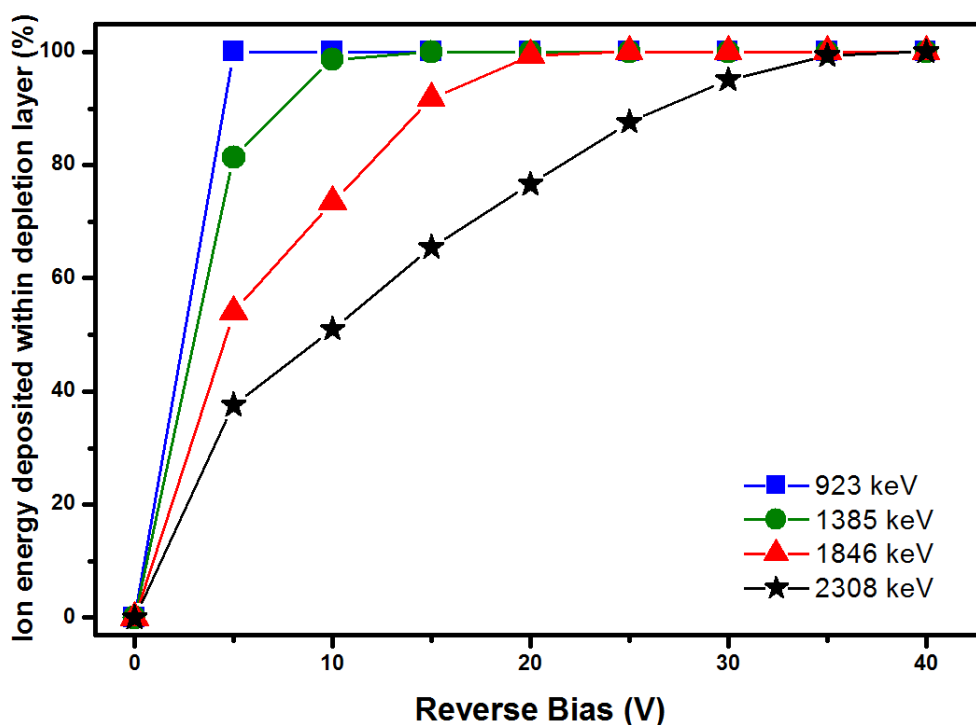


Figura 62: Energia depositada internamente à camada de depleção, obtida a partir da tensão reversa aplicada na estrutura Ni/4H-SiC.

#### 5.4.4 Aquisição e análise dos dados coletados para o detector Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/4H-SiC

O detector comercial ORTEC de Si e o detector experimental Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/4H-SiC foram montados simultaneamente na câmara de RBS. A geometria do laboratório foi mantida com o ângulo de 170° e 165° em relação ao feixe de íons, para os detectores de Si e SiC, respectivamente. A coleta de carga dos detectores foi realizada pelo pré-amplificador EG&G ORTEC 142A. O pré-amplificador 142A é designado para operar com uma capacitância do detector entre 0 e 100 pF. O mesmo pode operar com capacitâncias maiores, porém sua performance fica degradada. Em torno de 10 keV de ruído provem da capacitância de 200 pF do detector experimental, para 2 μs de *shaping time* do amplificador [97]. Ambos os detectores foram polarizados reversamente em 40 V.

Para realização do RBS, utilizamos uma amostra de ouro (Au) sobre Si. A espessura da camada de Au foi estimada em 55 nm, por meio de estudos anteriores a este trabalho de doutorado.

A Figura 63 mostra o espectro de RBS (pontos) e simulação por meio do SIMNRA (linhas vermelhas), usando o detector de Si ORTEC. Os picos de mais alta energia são referentes a camada de Au presente na amostra analisada. O pico contínuo de mais baixa energia é referente do substrato de Si da amostra medida. Usando três diferentes energias é possível se obter a calibração (*offset* e energia por canal), apresenta na Figura 64, para cada um dos detectores. Estes dados são necessários como informações a serem inseridas no programa SIMNRA e posterior simulação. Os ajustes para as energias de 1, 1.5 e 2 MeV foram realizados separadamente, procurando por valores únicos de espessura do Au e resolução do detector de Si. Os valores extraídos foram de 57.3 nm e 24 keV, respectivamente. Estes valores asseguram uma boa coincidência entre as curvas experimentais e simuladas, conforme mostrado na Figura 63.

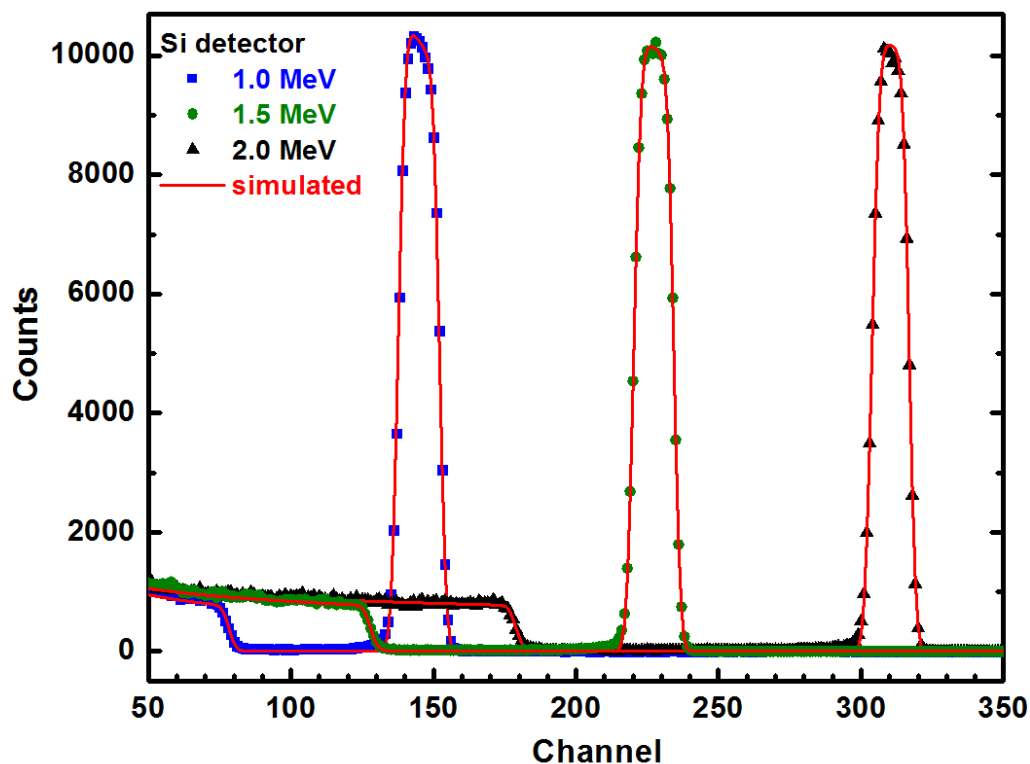


Figura 63: Espectro de RBS coletado pelo detector Si ORTEC para a amostra de Au/Si, nas energias de 1, 1.5 e 2 MeV das partículas alfa. Os pontos formam o espectro experimental e as linhas vermelhas são as simulações realizadas pelo programa SIMNRA.

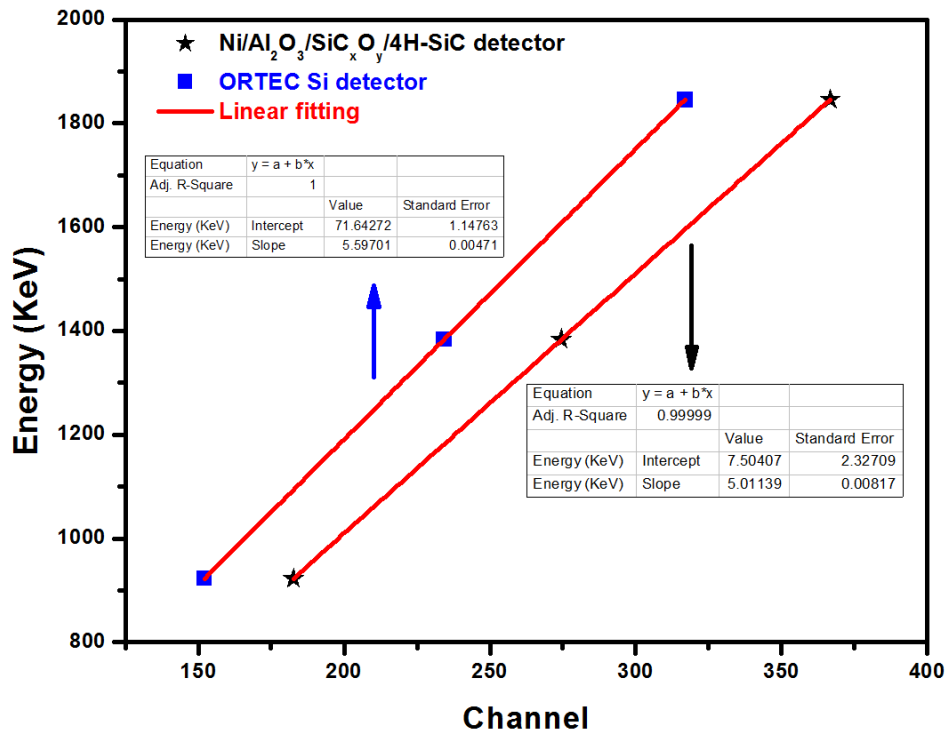


Figura 64: Retas de calibração para obtenção dos valores de *offset* e energia por canal, para o detector Si ORTEC e o detector experimental Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/SiC<sub>x</sub>O<sub>y</sub>/4H-SiC.

A Figura 65 apresenta o espectro de RBS coletado pela estrutura de detector experimental de Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/4H-SiC. A resolução do detector experimental foi extraída usando uma estimativa da camada de Au de 57.3 nm, obtido dos dados do detector ORTEC de Si (Figura 63). As curvas simuladas coincidem de maneira satisfatória com os pontos experimentais do experimento de RBS. Este método resultou em uma resolução em energia do detector experimental de 76 keV para as três energias de íons. Este resultado está de acordo com alguns valores encontrados na literatura [21] [98] [99], tratando de estudos do SiC para uso como estrutura de detector.

A resolução em energia é esperada ser inferior para o detector de SiC, uma vez que a energia necessária para produzir um par e-h no SiC é mais do que duas vezes o necessário no Si (8.4 e 3.8, respectivamente) [99]. Apesar da resolução em energia estimada para o detector experimental de Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/4H-SiC ser maior do que o detector de Si utilizado no experimento de RBS, o mesmo pode ser usado para análise de amostras que necessitam altas doses de energia ou em ambientes de alta temperatura.

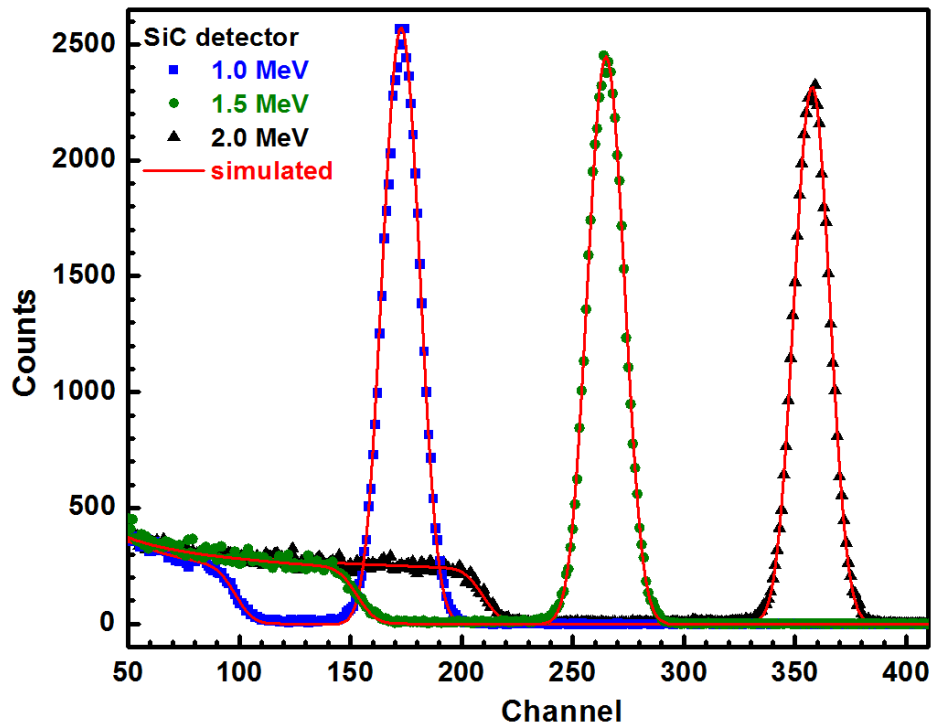


Figura 65: Espectro de RBS coletado pelo detector experimental de Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/4H-SiC, para a amostra de Au/Si, nas energias de 1, 1.5 e 2 MeV das partículas alfa. Os pontos formam o espectro experimental e as linhas vermelhas são as simulações realizadas pelo programa SIMNRA.

#### 5.4.5 Aquisição e análise dos dados coletados para o detector Ni/HfO<sub>2</sub>/4H-SiC

O mesmo experimento de RBS foi realizado para caracterização do detector de Ni/HfO<sub>2</sub>/4H-SiC, utilizando a mesma amostra de Au/Si. Porém, para este detector, utilizamos uma energia adicional de 2.5 MeV. Esta energia não poderia ser usada se as partículas alfa que chegassem ao detector teriam exatamente 2.5 MeV, pois esta energia gera uma projeção média das partículas alfa em 6.21  $\mu\text{m}$ , o que acarretaria numa projeção além da máxima largura da zona de depleção. Porém, como explicado anteriormente, as partículas alfa que chegam até o detector já interagiram com os átomos de ouro da amostra a ser analisada. Dessa forma, a energia máxima com que as partículas alfa chegam ao detector são referentes as partículas que sofreram retroespalhamento logo na superfície da amostra, transferindo parte de sua energia para os átomos de Au e chegando com uma energia de 2.308 MeV. Nesta energia, a projeção



média das partículas alfa é de 5.61  $\mu\text{m}$ , garantindo que as mesmas repousem internamente a camada de depleção quando o detector experimental é polarizado em 40 V.

A partir da Figura 66 obtemos os valores de *offset* e da energia por canal, para ambos os espectros de RBS dos detectores comercial e experimental polarizados em 40 V. Estas informações são fornecidas como valores de entrada para simulação com o programa SIMNRA. Os ajustes para as energias de 1, 1.5, 2 e 2.5 MeV foram realizados separadamente, procurando por valores únicos de espessura do Au e resolução para o detector de Si, conforme Figura 67a). Os valores extraídos foram de 55.5 nm e 15 keV, para espessura do filme de Au sobre Si e resolução do detector, respectivamente. O ajuste destes valores garante uma boa coincidência entre as curvas experimentais e simuladas, conforme mostrado na Figura 67a). Observamos que a resolução do detector ORTEC melhorou em torno de 9 keV. Isto se deve ao fato do uso de um novo detector, pois os mesmos degradam com o tempo de uso e acabam tendo a sua resolução prejudicada. Em geral, um detector ORTEC de Si novo possui 15 keV de resolução, segundo apuração realizada juntamente com os técnicos do Laboratório de Implantação Iônica da UFRGS.

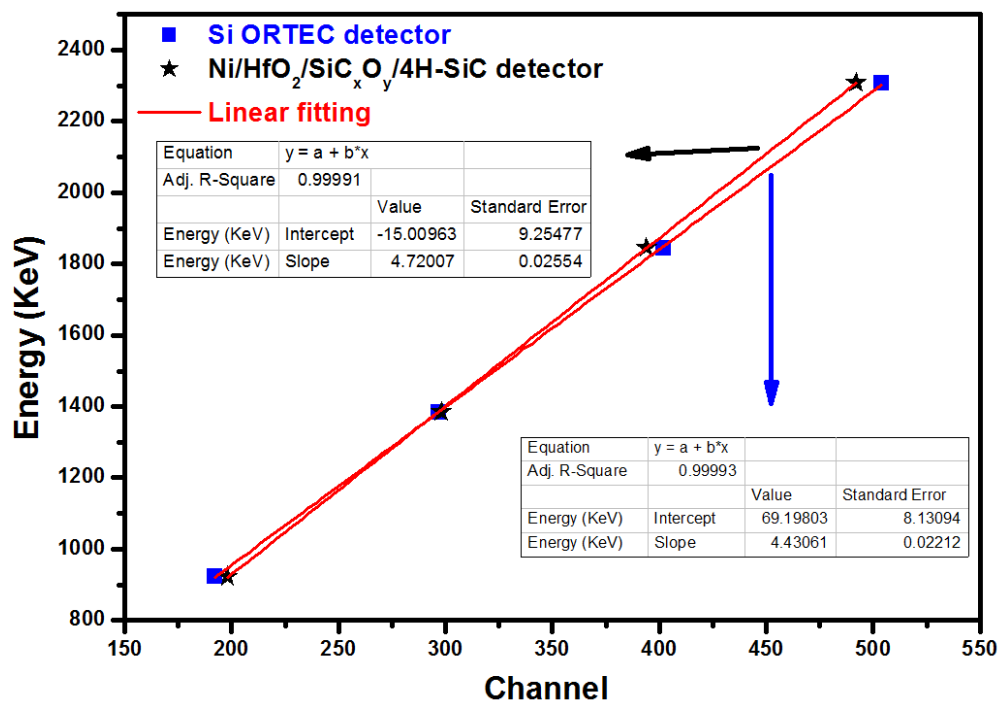


Figura 66: Retas de calibração para obtenção dos valores de *offset* e energia por canal, para o detector Si ORTEC e o detector experimental Ni/HfO<sub>2</sub>/SiC<sub>x</sub>O<sub>y</sub>/4H-SiC, polarizados em 40 V.

A Figura 67b) apresenta o espectro de RBS coletado pela estrutura de detector experimental de Ni/HfO<sub>2</sub>/4H-SiC. A resolução do detector experimental foi extraída usando uma estimativa da camada de Au de 55.5 nm, obtido a partir dos dados do detector ORTEC de Si (Figura 67a)). Novamente as curvas simuladas coincidem de maneira satisfatória com os pontos experimentais do experimento de RBS. Obtivemos as seguintes resoluções para o detector experimental de Ni/HfO<sub>2</sub>/4H-SiC na polarização de 40 V: 76, 75, 77 e 80 keV, para as energias de 1, 1.5, 2 e 2.5 MeV, respectivamente.

As Figura 68 e Figura 69 mostram o espectro de RBS na região do Au, para as energias do feixe de partículas alfa, variando a tensão de polarização reversa do detector experimental de Ni/HfO<sub>2</sub>/4H-SiC. Podemos observar que, quando a tensão de polarização é menor que a tensão necessária para abrir uma camada de depleção capaz de assegurar o repouso de todas as partículas alfa internamente, o espectro nesta região é deslocado para canais de menor energia. Além disso, os espectros têm amplitude reduzida, de modo a prejudicar a resolução, uma vez que existe um alargamento dos mesmos se observada a largura à meia altura. A partir do momento que a tensão de polarização reversa é maior que aquela mínima necessária para cobrir a projeção média dos íons somada ao *straggle*, os espectros se aproximam um dos outros. Porém, quando a tensão reversa é aumentada, e conseqüentemente o campo elétrico interno do detector é aumentado, os espectros tendem a se definir melhor, melhorando assim a resolução em energia. Isto pode ser observado a partir da Figura 70, onde a resolução em energia é melhorada significativamente quando utilizada uma tensão reversa de polarização maior. Mesmo para as partículas alfa com energia de 923 keV e, portanto, uma tensão de somente 5 V é necessária, a resolução do detector é melhorada quando aplicamos uma tensão maior, tendo sua melhor performance para 40 V. Uma tensão reversa maior diminui a capacitância em série, uma vez que a camada de depleção é aumentada e, por conseguinte, a capacitância do sistema de detecção como um todo diminui.

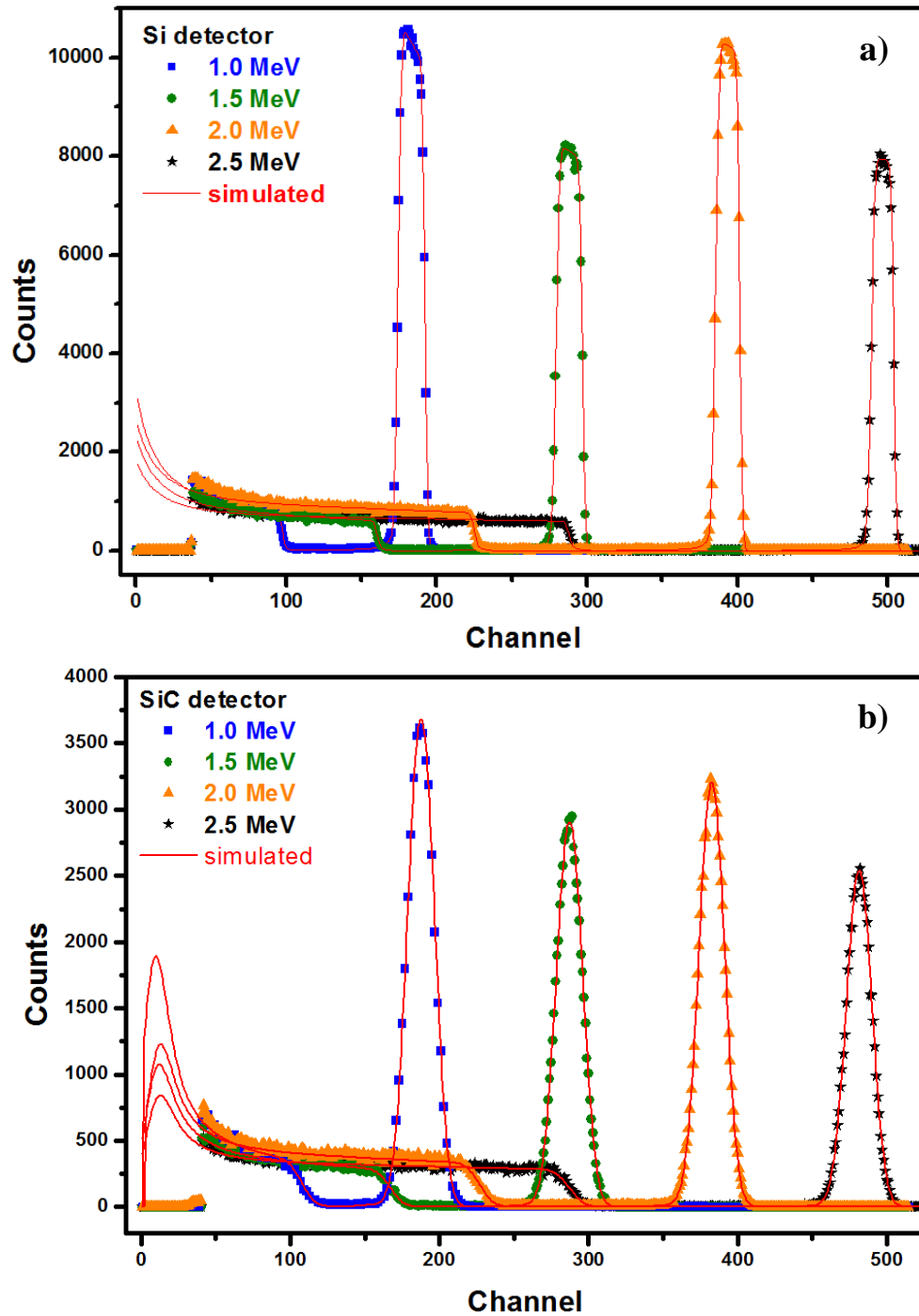


Figura 67: Espectro de RBS coletado pelo a) detector comercial ORTEC de Si e para o b) detector experimental de Ni/HfO<sub>2</sub>/4H-SiC, para a amostra de Au/Si, nas energias de 1, 1.5, 2 e 2.5 MeV das partículas alfa. Ambos os detectores foram polarizados reversamente em 40 V. Os pontos formam o espectro experimental e as linhas vermelhas são as simulações realizadas pelo programa SIMNRA.

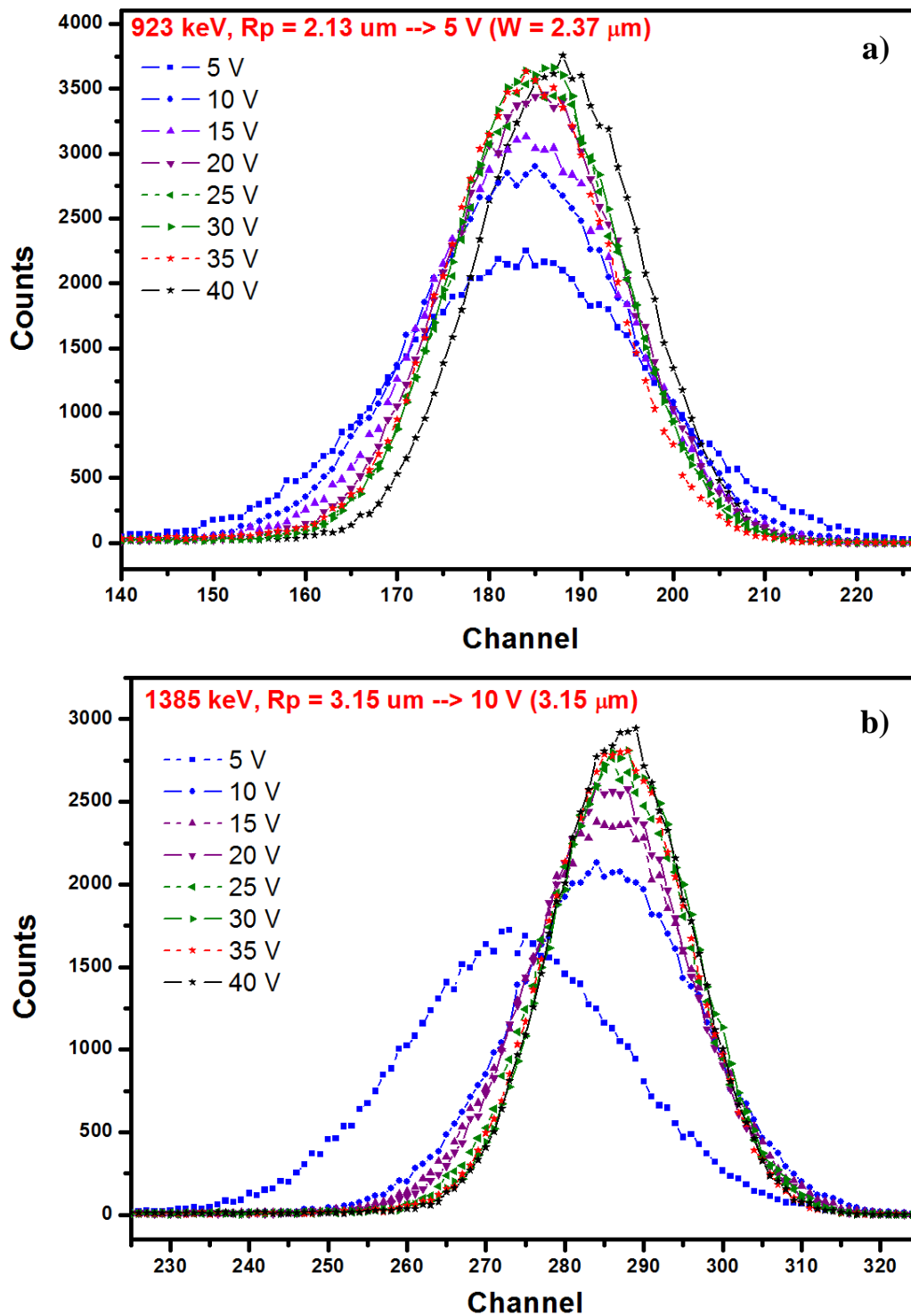


Figura 68: Espectros de RBS para as energias de a) 923 keV e b) 1385 keV, na região do ouro, variando a tensão de polarização reversa do detector Ni/HfO<sub>2</sub>/4H-SiC de 5 à 40 V. "Rp" faz referência ao alcance médio das partículas alfa no detector para cada energia. A tensão indicada em vermelho na parte superior dos gráficos indica a largura da camada de depleção necessária para a coleta dos pares e-h.

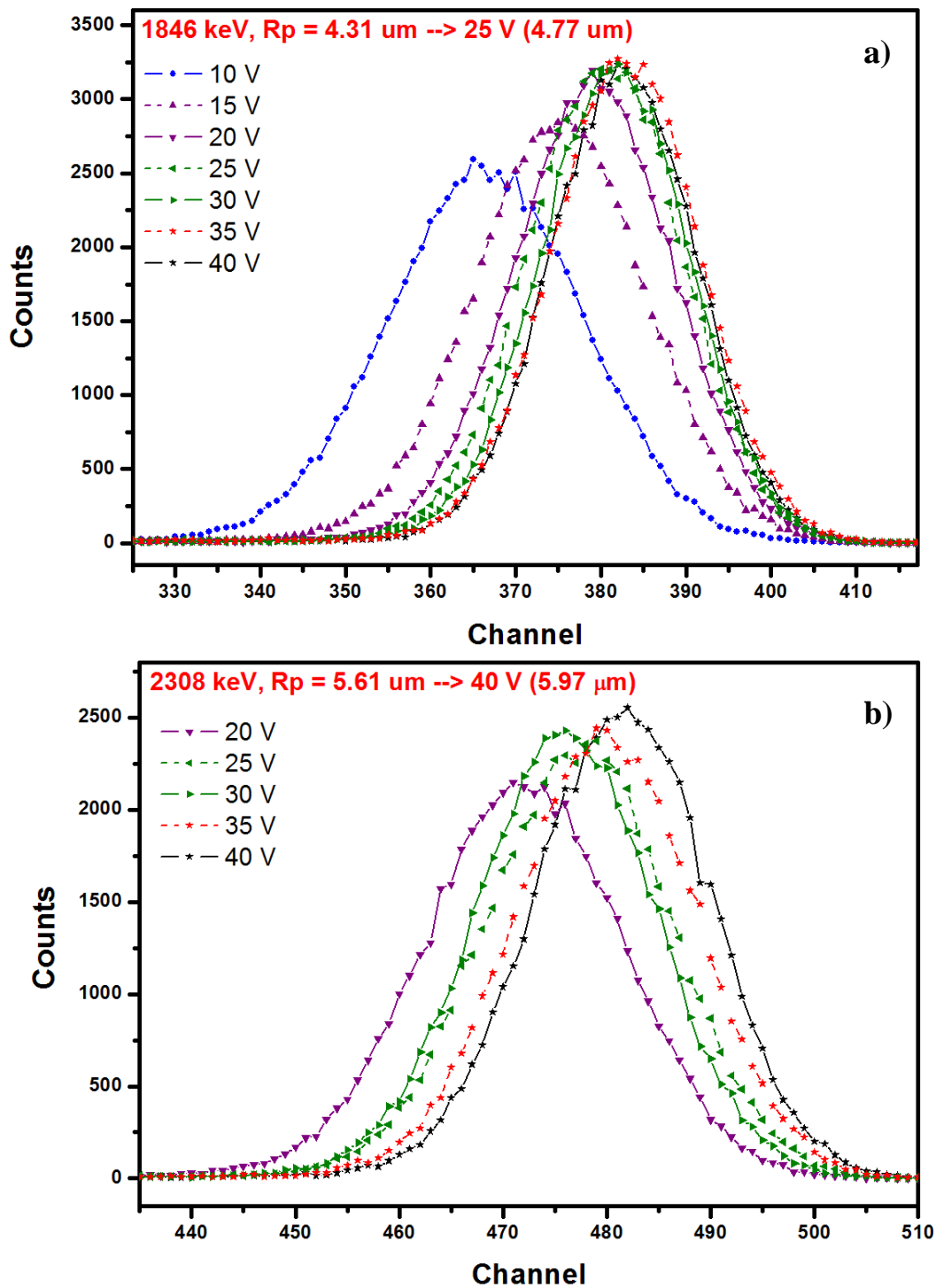


Figura 69: Espectros de RBS para as energias de a) 1846 keV e b) 2308 keV, na região do ouro, variando a tensão de polarização reversa do detector Ni/HfO<sub>2</sub>/4H-SiC. "Rp" faz referência ao alcance médio das partículas alfa no detector para cada energia. A tensão indicada em vermelho na parte superior dos gráficos indica a largura da camada de depleção necessária para a coleta dos pares e-h.

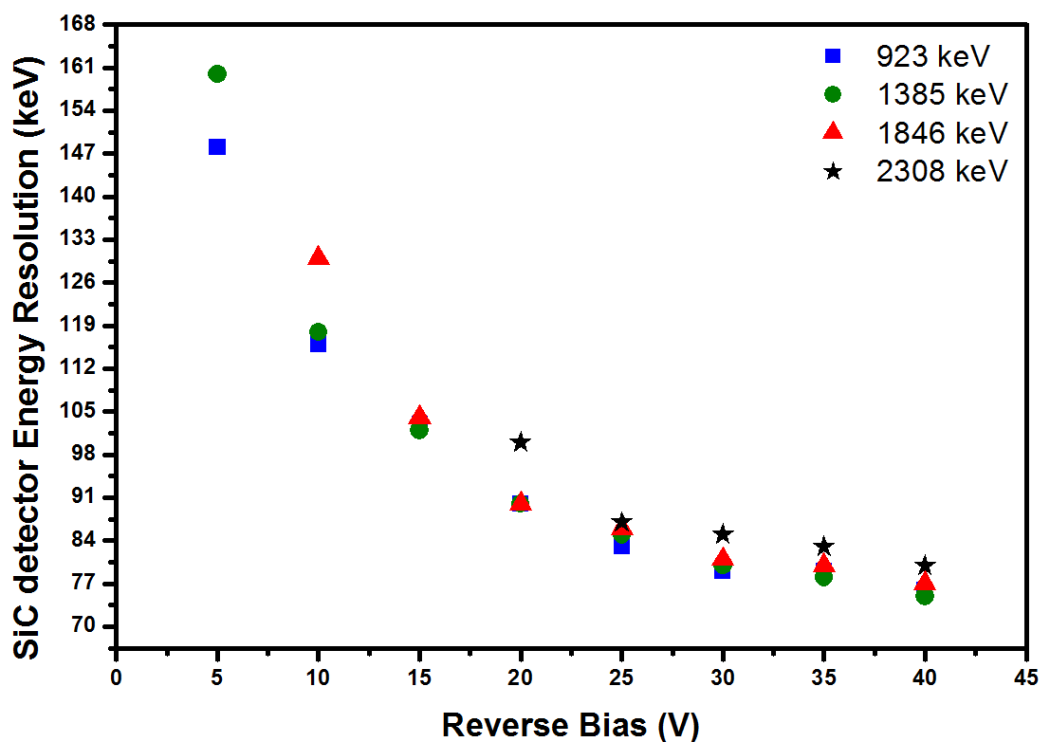


Figura 70: Resolução em energia, em função da tensão reversa de polarização do detector de Ni/HfO<sub>2</sub>/4H-SiC, obtidos a partir das simulações SIMNRA das Figura 68 e Figura 69.

## 6. Conclusões

Durante este trabalho investigamos estruturas de diodo Schottky MIS de SiC, com potencial uso em detectores de partículas. Para tanto, se fez necessário o estudo dos contatos ôhmicos e Schottky no SiC. Anterior a deposição do contato Schottky (na face Si do SiC), realizamos um contato ôhmico depositando Ni e realizando um tratamento térmico na temperatura de 950°C. Para o contato Schottky, inicialmente foram fabricados diodos do tipo Ni/SiC. Observamos que, quando anterior a deposição do contato Schottky é realizada uma limpeza com ácido fluorídrico para remoção do óxido nativo formado (grupo de amostras RO), os diodos apresentaram características elétricas inferiores aos diodos em que não houve remoção do óxido nativo (grupo NRO). Nos diodos do grupo NRO, observou-se um aumento da Altura da Barreira Schottky (SBH) em função da temperatura da medida I-V. As características reversas dos diodos do grupo RO não satisfizeram a condição de corrente reversa baixa (pA a nA) para aplicações como detector. Já para as amostras do grupo NRO, as características reversas foram satisfatórias e com potencial uso para detector de partículas. As mesmas apresentaram corrente de fuga pelo diodo na ordem de pA.

A literatura científica indica que o SiC forma uma fina camada de oxycarbeto de silício ( $\text{SiC}_x\text{O}_y$ ) na superfície do semicondutor. O modelo teórico de Emissão Termiônica (TE) não considera uma possível camada isoladora/passivadora entre metal e semicondutor. Desenvolvemos uma simulação levando em conta a camada de isolador presente. Este estudo oferece uma nova abordagem do modelo TE, na qual chamamos de Emissão Termiônica modificada para Metal-Isolador-Semicondutor. A partir deste estudo, observamos que o aumento da SBH em função da temperatura de medida I-V está diretamente relacionado com a presença de camadas dielétricas entre metal e semicondutor. O modelo modificado também permite obter informação das espessuras das camadas isoladoras presentes. A partir das curvas I-V variando a temperatura de medida, podemos obter informações a respeito da SBH real, fator de idealidade e espessuras das camadas dielétrica e de  $\text{SiC}_x\text{O}_y$  nativo.

Desenvolvemos diodos com uma camada isoladora propositalmente depositada anterior a deposição do Ni que forma o contato Schottky. Os dielétricos depositados foram o  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{HfO}_2$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , por ALD, e de  $\text{SiO}_2$  (por *sputtering*).

Os dielétricos  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{HfO}_2$  e  $\text{Al}_2\text{O}_3$  foram caracterizados por meio de Elipsometria espectral e Reflectometria de raio X sobre amostra de Si tipo-p, de modo a se confirmar as espessuras depositadas. O  $\text{Al}_2\text{O}_3$  foi o dielétrico com menos variância da espessura nominal frente a espessura medida. Posteriormente foram fabricados capacitores MIS com os mesmos dielétricos e realizadas medidas I-V e C-V. O dielétrico  $\text{TiO}_2$  apresentou as piores propriedades dielétricas, uma vez que o mesmo apresenta baixo *offset* de sua banda de condução (1 eV), o que proporciona um efeito significativo de emissão Schottky. Os dielétricos  $\text{HfO}_2$  e  $\text{Al}_2\text{O}_3$  apresentaram propriedades dielétricas condizentes com o esperado, tendo o  $\text{Al}_2\text{O}_3$  apresentando menor quantidade de cargas aprisionadas no óxido ( $Q_{\text{ot}} \approx 3,13 * 10^{11}$ ) em relação ao  $\text{HfO}_2$  ( $Q_{\text{ot}} \approx 5,21 * 10^{11}$ ).

As características de diodo Schottky utilizando  $\text{SiO}_2$  depositado por *sputtering* não se mostraram confiáveis, uma vez que as medidas I-V não foram reproduzíveis de um diodo para outro da mesma amostra. Além do mais, os cálculos realizados para estimar as camadas dielétricas (de  $\text{SiC}_x\text{O}_y$  e  $\text{SiO}_2$ ) não foram satisfatórios.

As características dos diodos que tiveram deposição de  $\text{TiO}_2$  por ALD foram satisfatórias e apresentaram SBH real de 1.39 V para o diodo com espessura nominal de 1 nm de  $\text{TiO}_2$ . O fator de idealidade diminuiu com o aumento da temperatura, tangendo valores próximos do ideal ( $\sim 1$ ). As características reversas também foram satisfatórias para uso como detector. Calculamos as espessuras das duas camadas dielétricas envolvidas e obtivemos os seguintes valores: 0.18 nm para o  $\text{SiC}_x\text{O}_y$  e 1.42 nm para o  $\text{TiO}_2$ , com espessura nominal do  $\text{TiO}_2$  em 1 nm. Um diodo Schottky comercial de SiC também foi medido variando a temperatura. O mesmo apresentou uma SBH de 0.86 V e espessura calculada de  $\text{SiC}_x\text{O}_y$  como sendo de 0.19 nm. Observa-se a similaridade das espessuras calculadas para o  $\text{SiC}_x\text{O}_y$  nativo dos diodos experimentais e do comercial.

Os diodos de Ni/ $\text{HfO}_2$ /SiC apresentaram bom grau de reprodutibilidade entre um diodo e outro da mesma amostra, para as espessuras de  $\text{HfO}_2$  com 1 e 2 nm. A espessura depositada de 1 nm formou uma SBH real de 1.26 V e apresentou o fator de idealidade muito próximo de um diodo ideal. A corrente de fuga, quando polarizado reversamente, apresentou valores em torno de 5 pA para as diferentes temperaturas de medida (297 – 373 K). Em relação aos valores das espessuras calculadas, obtivemos uma camada de  $\text{SiC}_x\text{O}_y$  com espessura de 0.2 nm e de 1.12 nm de  $\text{HfO}_2$  para o diodo com 1 nm nominal. Os diodos com espessura nominal de 2 nm de  $\text{HfO}_2$  apresentaram SBH real em torno de 1.09-1.15 V, com fator de idealidade variando entre 1.20 e 1.28.



Os diodos de Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/SiC apresentaram SBH real de 1.32 e 0.87 V, para os diodos com 1 e 2 nm de Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, respectivamente. A SBH aparente apresentou variância menor que 7% para diodos da mesma amostra, de espessuras 1 e 2 nm. O fator de idealidade aumentou para maiores espessuras de Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. O diodo com espessura de 1 nm apresentou  $\eta$  de 1.24 à temperatura ambiente (297 K) e seu valor diminuiu quando a temperatura de medida I-V aumentou. As correntes reversas permaneceram na ordem de pA para todos os diodos, aumentando conforme o aumento da espessura do dielétrico depositado. O diodo com 1 nm de Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> apresentou correntes reversas abaixo de 100 pA, na polarização reversa de 40 V.

Diodos de todos os grupos de amostras com uma camada isoladora de espessura acima de 4 nm não apresentaram boas características de diodo Schottky. Podemos deduzir que os diodos com espessuras de dielétricos acima de 4 nm apresentam características que se assemelham mais a um capacitor MOS ao invés de um diodo Schottky propriamente dito.

Também realizamos um estudo variando a temperatura das medidas C-V. Foi observado que o aumento da temperatura de medida diminui o valor calculado da SBH, justamente o oposto observado pelas análises I-V. A partir das medidas C-V, extraímos os valores da dopagem da camada epitaxial de SiC. Os diodos apresentaram uma concentração volumétrica de portadores livres de  $(1.25 \pm 0.1) \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ .

Por fim reportamos duas estruturas experimentais MIS Schottky, para uso como detector de partículas alfa no experimento de RBS. As estruturas foram compostas de Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/4H-SiC/Ni e Ni/HfO<sub>2</sub>/4H-SiC/Ni, com 1 nm do dielétrico depositado entre metal e semiconductor. Os detectores experimentais apresentaram SBH (297 K) de 0.97 V e 0.91 V, fator de idealidade de 1.19 e 1.15 e densidade de corrente reversa de 20 nA.cm<sup>-2</sup> e 62 nA.cm<sup>-2</sup> (na polarização reversa de 40 V), para os detectores Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/4H-SiC/Ni e Ni/HfO<sub>2</sub>/4H-SiC/Ni, respectivamente. Coletamos os dados de RBS para os detectores experimentais e de Si comercial. Após análise através do *software* SIMNRA, inferimos as resoluções em energia de 76 keV, na polarização reversa de 40 V, para ambos os detectores experimentais de 4H-SiC. A resolução em energia variou até 80 keV para o detector Ni/HfO<sub>2</sub>/4H-SiC/Ni quando utilizadas energias de partículas alfa mais energéticas. As resoluções em energia para os detectores experimentais são inferiores comparado ao detector de Si (15-24 keV). Porém, o uso de estruturas de detectores com SiC oferecem a vantagem de serem utilizados em ambientes de altas doses de energia e/ou alta temperatura sem variar significativamente suas propriedades físicas ou químicas.

Como perspectivas futuras, estaremos interessados em aprimorar a estrutura Schottky para detecção de partículas alfa. A conexão entre a carcaça metálica do detector com o contato Schottky da amostra deve ser melhorado, de modo a se evitar problemas de perda de contato após manuseio do mesmo. Para diminuir a capacitância da estrutura da amostra, podemos diminuir a área ativa do contato Schottky para próximo da área de coleta de carga do detector. Um desafio neste sentido é a montagem do detector, uma vez que as áreas serão “casadas” e o contato entre a carcaça metálica e a estrutura da amostra é feita de maneira manual.

Também estaremos interessados em realizar Espectroscopia de fotoelétrons excitados por raio X (XPS) da região interfacial entre metal e semicondutor. Dessa maneira poderemos aprimorar nosso conhecimento acerca do ambiente químico interfacial. Ainda, é interessante se observar os defeitos criados e/ou aumentados devido a incidência de altas doses de radiações, bombardeando o detector com partículas carregadas ou ainda nêutrons. Para efeitos de comparação, podemos fabricar detectores Schottky MIS sobre silício. Por fim, seria interessante repetir a última parte do trabalho que trata da resolução do detector de Ni/HfO<sub>2</sub>/SiC, coletando espectros de RBS com maior estatística e maior detalhe frente a polarização reversa aplicada, para as quatro energias estudadas.

## 7. Referências

- [1] F. Nava, G. Bertuccio, A. Cavallini, and E. Vittone, "Silicon carbide and its use as a radiation detector material," *Meas. Sci. Technol.*, **19**, 10, 102001, 2008.
- [2] G. E. Knoll and J. Wiley, *Radiation Detection and Measurement*, third edition, John Wiley & Sons, Inc., 2000.
- [3] K. Kano, *Semiconductor Devices*. New Delhi: Prentice-Hall, Inc., 1998.
- [4] R. G. H. k. Debertin, *Gamma and X-ray Spectroscopy with Semiconductor Detectors*. Amsterdam: North-Holland, 1998.
- [5] Lebedev, "Radiation Resistance of SiC and Nuclear-Radiation Detectors Based on SiC Films," *Semiconductors*, **38**, 2, 125, 2004.
- [6] G. Bertuccio, R. Casiraghi, A. Cetronio, C. Lanzieri, and F. Nava, "Silicon carbide for high resolution X-ray detectors operating up to 100°C," *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. A Accel. Spectrometers, Detect. Assoc. Equip.*, **522**, 3, 413–419, 2004.
- [7] A. R. Dulloo, F. H. Ruddy, J. G. Seidel, J. M. Adams, J. S. Nico, and D. M. Gilliam, "The neutron response of miniature silicon carbide semiconductor detectors," *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. A Accel. Spectrometers, Detect. Assoc. Equip.*, **422**, 1–3, 47–48, 1999.
- [8] F. Nava, A. Castaldini, A. Cavallini, P. Errani, and V. Cindro, "Radiation Detection Properties of 4H-SiC Schottky Diodes Irradiated Up to  $10^{16}$  n/cm<sup>2</sup> by 1 MeV Neutrons," *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, **53**, 5, 2977–2982, 2006.
- [9] F. H. Ruddy, J. G. Seidel, and P. Sellin, "High-resolution alpha spectrometry with a thin-window silicon carbide semiconductor detector," *2009 IEEE Nucl. Sci. Symp. Conf. Rec.*, 2201–2206, 2009.
- [10] K. C. Mandal, P. G. Muzykov, J. Russell Terry, J. R. Terry, and J. Russell Terry, "Highly sensitive x-ray detectors in the low-energy range on n-type 4H-SiC epitaxial layers," *Appl. Phys. Lett.*, **101**, 5, 51111, 2012.

- [11] K. C. Mandal, P. G. Muzykov, S. K. Chaudhuri, and J. R. Terry, "Characterization of 4H-SiC Epitaxial Layers and High-Resistivity Bulk Crystals for Radiation Detectors," *2012 IEEE Nucl. Sci. Symp. Med. Imaging Conf. Rec.*, **59**, 4,4216–4221, 2012.
- [12] C. Hemmingsson *et al.*, "Deep level defects in electron-irradiated 4H SiC epitaxial layers," *J. Appl. Phys.*, **81**, 9, 6155, 1997.
- [13] F. H. Ruddy and J. G. Seidel, "The effects of intense gamma-irradiation on the alpha-particle response of silicon carbide semiconductor radiation detectors," *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, **263**, 1, 163–168, 2007.
- [14] S. Sciortino *et al.*, "Effect of heavy proton and neutron irradiations on epitaxial 4H-SiC Schottky diodes," *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. A Accel. Spectrometers, Detect. Assoc. Equip.*, **552**, 1–2, 138–145, 2005.
- [15] M. Mukherjee, *Silicon Carbide - Materials , Processing And Applications In Electronic Devices*, InTech, 2011.
- [16] T. L. Daulton, T. J. Bernatowicz, R. S. Lewis, S. Messenger, F. J. Stadermann, and S. Amari, "Polytype distribution of circumstellar silicon carbide: Microstructural characterization by transmission electron microscopy," *Geochim. Cosmochim. Acta*, **67**, 24, 4743–4767, 2003.
- [17] G. L. Harris, "Properties of silicon carbide", *Ceramics International*, **93**, 5, 277-281, 1995.
- [18] T. S. M. B. Ellis, "The Conduction Bands in 6H and 15R Silicon Carbide. I. Hall Effect and Infrared Faraday Rotation Measurements," *R. Soc. Proc. A*, **299**, 1458, 383–392, 1967.
- [19] G. A. Lomakina, "Silicon Carbide," *Proc. 3<sup>rd</sup> Int. Conf. on Silicon carbide*, Miami Beach, 1973.
- [20] S. Karmann *et al.*, "Chemical vapor deposition and characterization of undoped and nitrogen-doped single crystalline 6H-SiC," *J. Appl. Phys.*, **72**, 11,5437, 1992.
- [21] S. K. Chaudhuri, K. J. Zavalla, and K. C. Mandal, "High resolution alpha particle detection

- using 4H-SiC epitaxial layers: Fabrication, characterization, and noise analysis," *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. A Accel. Spectrometers, Detect. Assoc. Equip.*, **728**, 97–101, 2013.
- [22] M. Rogalla, K. Runge, and A. Söldner-Rembold, "Particle detectors based on semi-insulating silicon carbide," *Nucl. Phys. B-Proceedings*, **78**, 516–520, 1999.
- [23] W. Cunningham *et al.*, "Performance of bulk SiC radiation detectors," *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. A Accel. Spectrometers, Detect. Assoc. Equip.*, **487**, 1–2, 33–39, 2002.
- [24] F. Moscatelli *et al.*, "Radiation hardness after very high neutron irradiation of minimum ionizing particle detectors based on 4H-SiC p+n junctions," *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, **53**, 3, 1557–1563, 2006.
- [25] T. Dubbs *et al.*, "Development of radiation-hard materials for microstrip detectors," *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, **46**, 4 PART 1, 839–843, 1999.
- [26] A. Castaldini, A. Cavallini, L. Rigutti, and F. Nava, "Low temperature annealing of electron irradiation induced defects in 4H-SiC," *Appl. Phys. Lett.*, **85**, 17, 3780–3782, 2004.
- [27] A. Castaldini, A. Cavallini, L. Rigutti, F. Nava, S. Ferrero, and F. Giorgis, "Deep levels by proton and electron irradiation in 4H-SiC," *J. Appl. Phys.*, **98**, 5, 2005.
- [28] A. A. Lebedev, A. I. Veinger, D. V. Davydov, V. V. Kozlovski, N. S. Savkina, and A. M. Strel'chuk, "Doping of n-type 6H-SiC and 4H-SiC with defects created with a proton beam," *J. Appl. Phys.*, **88**, 11, 6265–6271, 2000.
- [29] G. Bertuccio and R. Casiraghi, "Study of Silicon Carbide for X-Ray Detection and Spectroscopy," *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, **50**, 1, 175–185, 2003.
- [30] F. H. Ruddy, J. G. Seidel, and R. Dulloo, "High-resolution alpha-particle spectrometry using 4H silicon carbide semiconductor detectors," *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, **53**, 3, 1713–1718, 2006.
- [31] S. Seshadri, A. R. Dulloo, F. H. Ruddy, J. G. Seidel, and L. B. Rowland, "Demonstration of

- an SiC neutron detector for high-radiation environments," *IEEE Trans. Electron Devices*, **46**, 3, 567–571, 1999.
- [32] N. B. Strokan *et al.*, "Spectrometry of short-range ions using detectors based on 4H-SiC films grown by chemical vapor deposition," *Semiconductors*, **39**, 3, 364–369, 2005.
- [33] H. a. Bethe, "Theory of the Boundary Layer of Crystal Rectifiers," *MIT Radiat. Lab. Rep*, **43**, 12, 1942.
- [34] S. M. Sze, *Physics of semiconductor devices*, third edition, Wiley & Sons, Inc., 2007.
- [35] A. Itoh and H. Matsunami, "Analysis of Schottky barrier heights of Metal/SiC Contacts and its Possible Application to High-Voltage Rectifying Devices," *Phys. Stat. Sol.*, **162**, 389–408, 1997.
- [36] C. Koliakoudakis *et al.*, "Cr/4H-SiC Schottky contacts investigated by electrical and photoelectron spectroscopy techniques," *Phys. Status Solidi*, **205**, 11, 2536–2540, 2008.
- [37] V. Saxena, J. Nong, and A. J. Steckl, "High-Voltage Ni- And Pt-SiC Schottky Diodes Utilizing Metal Field Plate Termination," *IEEE Trans. Electron Devices*, **46**, 3, 456–464, 1999.
- [38] S. K. Gupta, a. Azam, and J. Akhtar, "Improved electrical parameters of vacuum annealed Ni/4H-SiC (0001) Schottky barrier diode," *Phys. B Condens. Matter*, **406**, 15–16, 3030–3035, 2011.
- [39] E. H. Rhoderick, *Metal-Semiconductor Contacts*. Oxford, 1978.
- [40] H. Norde, "A modified forward I-V plot for Schottky diodes with high series resistance," *J. Appl. Phys.*, **50**, December 1978, 5052–5053, 1979.
- [41] O. Y. Olikh, "Review and test of methods for determination of the Schottky diode parameters," *J. Appl. Phys.*, **118**, 2, 2015.
- [42] S. J. Patel, A. K. Panchal, and V. Kheraj, "Extraction of solar cell parameters from a single current-voltage characteristic using teaching learning based optimization algorithm,"

- Appl. Energy*, **119**, 384–393, 2014.
- [43] K. Wang and M. Ye, “Parameter determination of Schottky-barrier diode model using differential evolution,” *Solid. State. Electron.*, **53**, 2, 234–240, 2009.
- [44] M. Ye, X. Wang, and Y. Xu, “Parameter extraction of solar cells using particle swarm optimization,” *J. Appl. Phys.*, **105**, 9, 2009.
- [45] N. Karaboga, S. Kockanat, and H. Dogan, “Parameter determination of the Schottky barrier diode using by artificial bee colony algorithm,” *2011 Int. Symp. Innov. Intell. Syst. Appl.*, **38**, 1, 6–10, 2011.
- [46] D. Gromov and V. Pugachevich, “Modified methods for the calculation of real Schottky-diode parameters,” *Appl. Phys. A Solids Surfaces*, **59**, 3, 331–333, 1994.
- [47] T. C. Lee, S. Fung, C. D. Beling, and H. L. Au, “A systematic approach to the measurement of ideality factor, series resistance, and barrier height for Schottky diodes,” *J. Appl. Phys.*, **72**, 10, 4739–4742, 1992.
- [48] L. Calcagno, a. Ruggiero, F. Roccaforte, and F. La Via, “Effects of annealing temperature on the degree of inhomogeneity of nickel-silicide/SiC Schottky barrier,” *J. Appl. Phys.*, **98**, 2, 23713, 2005.
- [49] M. E. Aydın, N. Yıldırım, and A. Türüt, “Temperature-dependent behavior of Ni/4H-nSiC Schottky contacts,” *J. Appl. Phys.*, **102**, 4, 43701, 2007.
- [50] F. Roccaforte, F. Giannazzo, and V. Raineri, “Nanoscale transport properties at silicon carbide interfaces,” *J. Phys. D. Appl. Phys.*, **43**, 22, 223001, 2010.
- [51] P. M. Gammon *et al.*, “Modelling the inhomogeneous SiC Schottky interface,” *J. Appl. Phys.*, **114**, 22, 223704, 2013.
- [52] R. Tung, “Electron transport at metal-semiconductor interfaces: General theory,” *Phys. Rev. B*, **45**, 23, 13509–13523, 1992.
- [53] R. T. Tung, “Recent advances in Schottky barrier concepts,” *Mater. Sci. Eng. R Reports*, **35**, 1–3, 1–138, 2001.

- [54] "CREE Inc. Research." [Online]. Available: <http://www.cree.com/LED-Chips-and-Materials/Materials>.
- [55] W. Kern, *Handbook of semiconductor wafer cleaning technology*. Westwood, 1993.
- [56] D. Kern, W. Puotinen, "Cleaning Solution Based on Hydrogen Peroxide for use in semiconductor technology," *RCA Rev.*, **31**, 6, 187–207, 1970.
- [57] "Laboratório de Conformação Nanométrica (LCN) - UFRGS." [Online]. Available: [http://nanolab.if.ufrgs.br/index.php/Página\\_principal](http://nanolab.if.ufrgs.br/index.php/Página_principal).
- [58] AJA International Inc., "Sputtering Systems." [Online]. Available: <http://www.ajaint.com/atc-orion-series-sputtering-systems.html>.
- [59] Institut für Mikrosystemtechnik, "Atomic Layer Deposition." [Online]. Available: <https://www.imtek.de/professuren/nano/forschung/aldsurface>.
- [60] M. Putkonen, T. Sajavaara, L. Niinistö, and J. Keinonen, "Analysis of ALD-processed thin films by ion-beam techniques," *Anal. Bioanal. Chem.*, **382**, 8, 1791–9, 2005.
- [61] Beneq, "Beneq TFS 200 ALD." [Online]. Available: <http://www.beneq.com/tfs-200.html>.
- [62] S. A. Campbell, "The Science and Engineering of Microelectronic Fabrication," *Oxford University Press*, **476**, 688, 2001.
- [63] K. Vedam, "Spectroscopic ellipsometry: a historical overview," *Thin Solid Films*, **313-314**, 1–9, 1998.
- [64] H. Fujiwara, *Spectroscopic Ellipsometry Principles and Applications*. Wiley, 2007.
- [65] J. Als-Nielsen and D. McMorrow., *Elements of Modern X-Ray Physics*, 2 ed. Chichester, UK: John Wiley & Sons Ltd, 2011.
- [66] M. Yasaka, "X-ray thin-film measurement techniques, V: X-ray reflectivity measurement," *Rigaku J.*, **26**, 8, 1–9, 2010.
- [67] M. Mayer, "SIMNRA - Computer simulation of RBS, ERDA and NRA." [Online]. Available:



<http://home.mpcdf.mpg.de/~mam/Download.html>.

- [68] R. G. Southwick and W. B. Knowlton, "Stacked dual-oxide MOS energy band diagram visual representation program (IRW student paper)," *IEEE Trans. Device Mater. Reliab.*, **6**, 2, 136–145, 2006.
- [69] "Multi-Dielectric Energy Band Diagram Program." [Online]. Available: <http://na-boisestate.edu/research-areas/multi-dielectric-energy-band-diagram-program/>.
- [70] S. L. Matlow and E. L. Ralph, "Ohmic Aluminum-n-Type Silicon Contact," **541**, 1959, 1–4, 2004.
- [71] M. Finetti, P. Ostoja, S. Solmi and G. Soncini, "Aluminum-Silicon ohmic contact on "shallow" n+/p junctions", *Solid-State Electronics*, **23**, 100, 255–262, 1980.
- [72] Crofton, J, Porter, L. M. and Williams, J. R., "The Physics of Ohmic Contacts to SiC", *Phys. Stat. Solid*, **202**, 581, 1997.
- [73] M. J. Bozack, "Surface studies on SiC as related to contacts", *Phys. Stat. Solid*, **202**, 549, 1997.
- [74] B. Pécz, "Contact formation in SiC devices," *Appl. Surf. Sci.*, **184**, 1–4, 287–294, 2001.
- [75] A. Kakanakova-geor, T. Marinova, C. Arnodob, S. Cassetteb, and C. Brylinskib, "Characterization of ohmic and Schottky contacts on SiC", *Thin Solid Films*, **343-344**, 637-641, 1999.
- [76] A. S. G. B. E. Deal, "General Relationship for the Thermal Oxidation of Silicon," *J. Appl. Phys.*, **36**, 12, 3770–3778, 1965.
- [77] C. Harris and V. Afanasev, "SiO<sub>2</sub> as an insulator for SiC devices," *Microelectron. Eng.*, **36**, 14, 167–174, 1997.
- [78] K. Luthra, "Some new perspectives on oxidation of silicon carbide and silicon nitride," *J. Am. Ceram. Soc.*, **74**, 5, 1095–1103, 1991.
- [79] S. A. Corrêa, C. Radtke, and et al., "Presence and Resistance to wet Etching of Silicon Oxycarbides at the SiO<sub>2</sub>/SiC Interface," *Electrochem. Solid-State Lett.*, **11**, 9, H258–

- H261, 2008.
- [80] C. Onneby and C. G. Pantano, "Silicon oxycarbide formation on SiC surfaces and at the SiC/SiO<sub>2</sub> interface," *J. Vac. Sci. Technol. A*, **15**, 3, 1597–1602, 1997.
- [81] C. Radtke, I. J. R. Baumvol, J. Morais, and et al., "Initial stages of SiC oxidation investigated by ion scattering and angle-resolved x-ray photoelectron spectroscopies," *Appl. Phys. Lett.*, **78**, 23, 3601–3603, 2001.
- [82] C. Da Silva, J. Justo, and I. Pereyra, "Crystalline silicon oxycarbide: Is there a native oxide for silicon carbide?," *Appl. Phys. Lett.*, **84**, 24, 4845–4847, 2004.
- [83] S. Wang, S. Dhar, A. Ahyi, and et al., "Bonding at the SiC-SiO<sub>2</sub> interface and the effects of nitrogen and hydrogen," *Phys. Rev. Lett.*, **98**, 2, p. 26101, 2007.
- [84] R. Buczko, S. Pennycook, and S. Pantelides, "Bonding arrangements at the Si-SiO<sub>2</sub> and SiC-SiO<sub>2</sub> interfaces and a possible origin of their contrasting properties," *Phys. Rev. Lett.*, **84**, 5, 943–946, 2000.
- [85] M. J. Biercuk, D. J. Monsma, C. M. Marcus, J. S. Backer, and R. G. Gordon, "Low-temperature atomic-layer-deposition lift-off method for microelectronic and nanoelectronic applications," *Appl. Phys. Lett.*, **83**, 12, 2405–2407, 2003.
- [86] J. Yota, H. Shen, and R. Ramanathan, "Characterization of atomic layer deposition HfO<sub>2</sub>, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, and plasma-enhanced chemical vapor deposition Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> as metal–insulator–metal capacitor dielectric for GaAs HBT technology," *J. Vac. Sci. Technol. A Vacuum, Surfaces, Film.*, **31**, 1, 01A134, 2013.
- [87] I. P. K. F. Albertin, M.A. Valle, "Study Of MOS Capacitors With TiO<sub>2</sub> And SiO<sub>2</sub> / TiO<sub>2</sub> Gate," *J. Integr. Circuits Syst.*, **2**, 89–93, 2007.
- [88] F. P. Heiman and G. Warfield, "The Effects of Oxide Traps on the MOS Capacitance," *IEEE Trans. Electron Devices*, ED-12, 4, 167–178, 1965.
- [89] P. K. Chu, *Advances in Solid State Circuit Technologies*. INTECH, 2010.
- [90] L.-F. Wu, Y.-M. Zhang, H.-L. Lv, and Y.-M. Zhang, "Atomic-layer-deposited Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and

- HfO<sub>2</sub> on InAlAs: A comparative study of interfacial and electrical characteristics,” *Chinese Phys. B*, **25**, 10, 108101, 2016.
- [91] “Infineon Technologies,” [Online]. Available: <https://www.infineon.com/cms/en/product>.
- [92] F. Roccaforte, “Richardson’s constant in inhomogeneous silicon carbide Schottky contacts,” *J. Appl. Phys.*, **93**, p. 9137, 2003.
- [93] L. Boussouar, “Investigation of barrier inhomogeneities in Mo/4H-SiC Schottky diodes,” *Microelectron. Eng.*, **88**, 969–975, 2011.
- [94] T. Nakamura, T. Miyanagi, H. Tsuchida, I. Kamata, and T. Jikimoto, “Improvement in Electrical Performance of Schottky Contacts for High-voltage Diode,” **485**, 721–724, 2005.
- [95] “ORTEC.” [Online]. Available: <http://www.ortec-online.com/>.
- [96] J. F. Ziegler, “SRIM.” [Online]. Available: <http://www.srim.org>.
- [97] M. Depas, L. Van Meirhaeghe, W. H. Lallere, and F. Cardon, “A quantitative analysis of capacitance peaks in the impedance of Al/SiO<sub>2</sub>/p-Si tunnel diodes,” *Semicond. Sci. Technol.*, **7**, 1476-1483, 1992.
- [98] F. Nava *et al.*, “Minimum Ionizing and Alpha Particles Detectors Based on Epitaxial Semiconductor Silicon Carbide,” *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, **51**, 1, 238–244, 2004.
- [99] F. Ruddy, A. Dulloo, J. Seidel, and et al, “The charged particle response of silicon carbide semiconductor radiation detectors,” *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. A Accel. Spectrometers, Detect. Assoc. Equip.*, **505**, 159, 2003.

## 8. Publicações do autor relacionados ao doutorado

### 8.1 Artigos Completos Publicados em Revistas

Kaufmann, Ivan R.; Pereira, Marcelo B.; Boudinov, Henri I. *Schottky Barrier Height of Ni/TiO<sub>2</sub>/4H-SiC MIS diodes*. **Semiconductor Science and Technology**, **30**, 125002, 2015.

Kaufmann, Ivan R.; Pick, Ana C.; Pereira, Marcelo B.; Boudinov, Henri I. *Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/4H-SiC structure for He<sup>++</sup> energy detection in RBS experiments*. **Journal of Instrumentation**, **11**, P10013, 2016.

Kaufmann, Ivan R.; Pick, Ana C.; Pereira, Marcelo B.; Boudinov, Henri I. *Metal-Insulator-SiC Schottky structures using HfO<sub>2</sub> and TiO<sub>2</sub> dielectrics*. **Thin Solid Films**, **621**, 184-187, 2017.

### 8.2 Artigos Completos Publicados em Congressos

Kaufmann, Ivan R.; Pereira, Marcelo B.; Boudinov, Henri I. *Apparent Schottky Barrier Height of MIS Ni/SiC diodes*. **Proc. SBMICRO, IEEE Explore** 2015.

Kaufmann, Ivan R.; Pick, Ana C.; Pereira, Marcelo B.; Boudinov, Henri I. *Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/4H-SiC Schottky diodes*. **Proc. SBMICRO, IEEE Explore** 2017 (a ser publicado).

### 8.3 Resumos Publicados em Anais de Congressos

**Kaufmann, Ivan R.**; Boudinov, H. I. *Extraction of the Schottky barrier height by Thermionic Emission and Norde Theory of Ni/SiC diodes*. XIII Brazilian MRS Meeting Congress, 2014.