FÁBIO IZUMI

**MODELAGEM DE CÉLULAS SOLARES nMOS OPERANDO EM
REGIME DE INVERSÃO INDUZIDO POR CARGAS POSITIVAS
NA INTERFACE SiO_xN_y/Si**

São Paulo
2017

FÁBIO IZUMI

**MODELAGEM DE CÉLULAS SOLARES nMOS OPERANDO EM
REGIME DE INVERSÃO INDUZIDO POR CARGAS POSITIVAS
NA INTERFACE SiO_xNy/Si**

Tese apresentada à Escola Politécnica da
Universidade de São Paulo para obtenção
do título de Doutor em Ciências

São Paulo
2017

FÁBIO IZUMI

**MODELAGEM DE CÉLULAS SOLARES nMOS OPERANDO EM
REGIME DE INVERSÃO INDUZIDO POR CARGAS POSITIVAS
NA INTERFACE SiO_xNy/Si**

Tese apresentada à Escola Politécnica da
Universidade de São Paulo para obtenção
do título de Doutor em Ciências

Área de concentração:
Microeletrônica

Orientador:
Prof. Dr. Sebastião Gomes dos Santos
Filho

São Paulo
2017

Este exemplar foi revisado e corrigido em relação à versão original, sob responsabilidade única do autor e com a anuência de seu orientador.

São Paulo, _____ de _____ de _____

Assinatura do autor: _____

Assinatura do orientador: _____

Catálogo-na-publicação

Izumi, Fábio

Modelagem de células solares nMOS operando em regime de inversão induzido por cargas positivas na interface SiOxNy/Si / F. Izumi -- versão corr. - São Paulo, 2017.
140 p.

Tese (Doutorado) - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Departamento de Engenharia de Sistemas Eletrônicos.

1.Célula solar MOS 2.Modelagem 3.Interface SiNxOy/Si 4.C++
5.Centros K I.Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de Engenharia de Sistemas Eletrônicos II.t.

AGRADECIMENTOS

À equipe e aos colegas do LSI, principalmente à Bárbara Siano Alandia e Verônica Christiano, pela colaboração no desenvolvimento do trabalho.

Ao orientador, pelo apoio e sustentação dado ao projeto.

À Capes, pelo custeio do trabalho.

À Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, pela infra-estrutura que permitiu a realização das pesquisas e a redação da tese.

À minha família, pelo apoio e compreensão.

*O que conhecemos é uma gota,
o que não conhecemos é um oceano*

Isaac Newton

RESUMO

O presente trabalho teve como objetivo a modelagem de células solares MOS operando em regime de inversão controlado por centros positivamente carregados na interface $\text{SiN}_x\text{O}_y/\text{Si}$. Este tipo de célula solar foi recentemente fabricada pela primeira vez no âmbito dos trabalhos desenvolvidos no grupo de Superfícies, Interfaces e Deposição Eletroquímica (GSIDE) do LSI/PSI/EPUSP utilizando dielétricos de porta ultra-finos ($\sim 2\text{nm}$). A receita de crescimento de dielétrico ultra-fino desenvolvida foi no sentido de assegurar reprodutibilidade e uniformidade da espessura do dielétrico ao longo de áreas extensas de alguns cm^2 . Baseado nas curvas experimentais CxV_g , GxV_g e IxV_g das células solares fabricadas, foi mostrado para as células fabricadas em substrato tipo P que existem os centros K predominantemente preenchidos com cargas positivas em todos os regimes de operação (acumulação, depleção e inversão). A densidade de cargas positivas (Q_{iq}) na interface $\text{SiN}_x\text{O}_y/\text{Si}$ além de ter resultado positivo, apresentou um comportamento linear com o potencial de superfície (ψ_s) ou com a tensão de porta V_g de acordo com os resultados obtidos através de um simulador numérico desenvolvido para esta aplicação específica. Tal comportamento consistiu no acomodamento das cargas positivas na interface de forma que uma região de depleção profunda (W_d) é formada sem a presença da camada de inversão na condição sem iluminação. Para as células MOS submetidas a diferentes níveis de iluminação, tanto para os dielétricos crescidos a 850°C como também para aqueles que foram crescidos a 700°C , foi constatado que os centros K na interface funcionam como uma região de armazenamento de cargas positivas a medida em que os elétrons tunelam em direção à porta metálica da estrutura MOS. Como resultado, este tipo de comportamento significa uma nova forma de implementar o efeito fotovoltaico.

Palavras-chave: célula solar MOS, modelagem, interface $\text{SiN}_x\text{O}_y/\text{Si}$, C++, centros K .

ABSTRACT

The goal of the present work was the modeling of MOS solar cells operating in an inversion regime controlled by positively charged centers at the SiN_xO_y interface. This type of solar cell was recently manufactured for the first time in the activities developed in the group of Surfaces, Interfaces and Electrochemical Deposition (GSIDE) from LSI/PSI/EPUSP using ultra-thin gate dielectrics ($\sim 2\text{nm}$). The recipe for the growth of ultra-thin dielectrics was developed to ensure reproducibility and uniformity of the dielectrics thickness over large areas of few square centimeters. Based on the experimental curves C_xV_g , G_xV_g e I_xV_g of the manufactured MOS solar cells, it was shown for cells manufactured in P-type substrate that there are K centers dominantly filled with positive charges in all operating regimes (accumulation, depletion and inversion). The positive charge density (Q_{iq}) at the $\text{SiN}_x\text{O}_y/\text{Si}$ interface, in addition to having a positive charge, presented a linear behaviour with the surface potential (ψ_s) or with the gate voltage (V_g) according to the results obtained from a numerical simulator developed for this application. Such behavior consisted of accommodating the positive charges at the $\text{SiN}_x\text{O}_y/\text{Si}$ interface so that a deep depletion region (W_d) is formed without the presence of the inversion layer in the condition without illumination. For MOS cells subjected to different levels of illumination, both for dielectrics grown at 850°C as well as for those grown at 700°C , it was found that the K centers at the $\text{SiN}_x\text{O}_y/\text{Si}$ interface work as a region of positive charge storage as the electrons tunnel from the interface towards the metal gate of the MOS cells. As a result, this type of behaviour means a new way of implementing the photovoltaic effect.

Keywords: MOS solar cell, modelling, MOS, $\text{SiN}_x\text{O}_y/\text{Si}$ interface, C_{++} , K centers.

SUMÁRIO

Lista de ilustrações

Lista de tabelas

Lista de siglas e abreviaturas

Lista de símbolos

1	INTRODUÇÃO, OBJETIVOS, JUSTIFICATIVAS E CONTEÚDO	1
1.1	INTRODUÇÃO	1
1.2	OBJETIVOS	4
1.3	JUSTIFICATIVAS	5
1.4	CONTEÚDO	7
2	REVISÃO DOS MECANISMOS DE TUNELAMENTO E DAS TECNOLOGIAS DE FABRICAÇÃO DE CÉLULAS SOLARES MOS .	9
2.1	DIODOS TÚNEL MOS	9
2.1.1	Origem do diodo túnel	9
2.2	TUNELAMENTO EM DISPOSITIVOS MOS	12
2.2.1	Tunelamento direto ou Tsu-Esaki	12
2.2.2	Tunelamento Fowler-Nordheim	14
2.2.3	Tunelamento por armadilhas	15
2.3	FUNCIONAMENTO DA CÉLULA SOLAR MOS	18
2.4	APERFEIÇOAMENTOS PARA CÉLULAS MOS	29
2.5	“ENERGY HARVESTING”	32
3	PROCEDIMENTOS EXPERIMENTAIS	37
3.1	FABRICAÇÃO DAS CÉLULAS SOLARES MOS	38
3.2	OBTENÇÃO DA DOPAGEM A PARTIR DA CURVA $1/C^2 \times V_g$	42
3.3	PROCEDIMENTO PARA OBTENÇÃO DO POTENCIAL DE SUPERFÍCIE E DA TENSÃO DE FAIXA PLANA	43
3.4	MODELAGEM DA CARACTERÍSTICA $I \times V_g$	44

3.4.1	Regime de acumulação	44
3.4.2	Regime de depleção ($V_{FB} < V_g < 0$)	47
3.4.3	Regime de depleção profunda ($V_g > 0$)	48
4	RESULTADOS EXPERIMENTAIS E DISCUSSÃO	49
4.1	MODELAGEM DAS CARACTERÍSTICAS ELÉTRICAS C-V DE CÉLULAS SOLARES MOS	50
4.2	MODELAGEM DAS CARACTERÍSTICAS ELÉTRICAS I-V DE CÉLULAS SOLARES MOS NOS REGIMES DE ACUMULAÇÃO ($V_g < V_{FB}$) E DEPLEÇÃO ($V_{FB} < V_g < 0$)	61
4.3	MODELAGEM DAS CARACTERÍSTICAS ELÉTRICAS I-V DE CÉLULAS SOLARES MOS PARA $V_g > 0$	65
4.4	MODELAGEM DAS CARACTERÍSTICAS ELÉTRICAS I-V DE CÉLULAS SOLARES VARIANDO A TEMPERATURA E A INTENSIDADE LUMINOSA	67
5	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS	72
	APÊNDICE I - Curvas CxV, GxV E JxV das células MOS	75
	APÊNDICE II - Obtenção de parâmetros a partir das curvas $1/C^2 \times V$	84
	APÊNDICE III - Linguagem C++, fundamentos e estrutura do programa	87
III.1 -	A LINGUAGEM C++	87
III.2 -	FUNDAMENTOS DO PROGRAMA	88
III.2.1 -	Modelamento do potencial	88
III.2.2 -	Distribuição de cargas utilizando método das diferenças finitas no caso unidimensional	89
III.2.3 -	Distribuição de portadores sob efeito de geração óptica	91
III.3 -	ESTRUTURA DO PROGRAMA	101
III.3.1 -	Subrotina para arredondamento de valores	101
III.3.2 -	Subrotina de programação para matriz de diagonalização	102
III.3.3 -	Programa principal	108

APÊNDICE IV - Validação do programa	116
IV.1 - SEM ILUMINAÇÃO	116
IV.1.1 - pMOS	116
IV.1.2 - nMOS	118
IV.2 - COM ILUMINAÇÃO	120
 APÊNDICE V - Obtenção de ψ_s e Q_l e modelagem na região de depleção ...	122
 APÊNDICE VI - Procedimento para a discretização da integral da probabilidade de tunelamento $p_t(\Phi)$	127
 Referências	134

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 - Valores de V_{oc} obtidos por células solares MOS em silício (PULFREY, 1978)	26
Tabela 2.2 - Medição de I_{sc} em algumas amostras (PULFREY, 1978)	27
Tabela 2.3 - Relação entre densidade de cargas fixas e dopagem para célula de Si tipo N (Autor)	29
Tabela 2.4 - Intensidade luminosa em alguns ambientes (EVANCZUK, 2013)	33
Tabela 3.1 - Geometria das células solares MOS: largura de linha (L), distância entre linhas (D), número de linhas ($N^\circ L$), área e perímetro (Cristiano, 2013)	42
Tabela 4.1 - Valores teóricos das dopagens de substrato (N_A) e da tensão de faixa plana (V_{fb}) e diferença de função trabalho metal-semicondutor (ϕ_{MS}) .(Autor)	55
Tabela 4.2 - Valores calculados e simulados de potencial de superfície (ψ_s), densidade de cargas da interface SiN_xO_y/Si (Q_{lq}) e largura da região de depleção (W_d) para $N_A = 4,7 \times 10^{14}$ e $V_{fb} = -0,738$ V (Receita de 850°C) (Autor)	57
Tabela 4.3 - Valores calculados e simulados de potencial de superfície (ψ_s), densidade de cargas da interface SiN_xO_y/Si (Q_{lq}) e largura da região de depleção (W_d) para $N_A = 4,7 \times 10^{14}$ e $V_{fb} = -0,732$ V (Receita de 700°C) (Autor)	57
Tabela 4.4 - Valores ajustados das dopagens N_A nas simulações numéricas (Autor)	59
Tabela 4.5 - Densidade e posição média das armadilhas para as amostras (Autor)	64
Tabela 4.6 - Parâmetros de ajuste para o modelamento dos gráficos $J \times V$ com e sem a ação da luz (Autor)	69
Tabela 4.7 - Parâmetros de ajuste para o modelamento dos gráficos $J \times V$ em função da temperatura (Autor)	71

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1.1 -	Gráfico típico de uma célula solar exibindo os parâmetros I_{sc} , I_{max} , V_{oc} e V_{max} (Autor)	4
Figura 1.2 –	Estrutura de uma célula solar MOS com cargas positivas no óxido de cobertura (Autor)	5
Figura 1.3 –	Estrutura de uma célula solar MOS com cargas positivas na interface óxido-semicondutor (Autor)	6
Figura 2.1 -	Corrente de tunelamento para tensão de polarização V_p ligeiramente positiva em um diodo Esaki (a) e para tensões de polarização $V > V_p$ onde o tunelamento deixa de existir (Adaptado de Esaki, 2010)	9
Figura 2.2 -	Gráfico característico do diodo túnel (a) e componentes da corrente (b) (Adaptado de Tunnel Diode Theory & Operation, 2013)	10
Figura 2.3 -	Tunelamento direto (Autor)	13
Figura 2.4 -	Tunelamento do tipo Fowler-Nordheim (Adaptado de Gehring, 2003)	14
Figura 2.5 -	Componentes do tunelamento por armadilhas para $V_g < 0$, onde TED_{it} , THD_{it} e INE são os índices para as densidades de corrente $J_{TED_{it}}$, $J_{THD_{it}}$ e J_{INE} , respectivamente (Adaptado de Ghetti, 2000)	16
Figura 2.6 -	Esquema simplificado do tunelamento TAT para $V_g > 0$ (Autor)	17
Figura 2.7 -	Efeito fotoelétrico (Autor)	19
Figura 2.8 -	Secção transversal de uma célula solar convencional e dois materiais de cobertura, sendo o meio 2 uma camada anti-reflexiva (Autor)	20
Figura 2.9 -	Geração térmica de portadores em uma célula convencional (Adaptado de Onmori, 2005)	22
Figura 2.10 -	Geração térmica de portadores em uma célula MOS (Autor)	23

Figura 2.11 - Componentes do tunelamento J_{th} , J_d , J_s e J_{rg} em ambiente sem iluminação (adaptado de Pulfrey)	24
Figura 2.12 - Efeitos da luz em célula solar PMOS fabricada em substrato tipo N (Adaptado de Pulfrey, 1978)	25
Figura 2.13 - Secção transversal da célula solar MOS (Adaptado de Pulfrey, 1978)	28
Figura 2.14 - Corte transversal da célula solar MIS com SiO_xN_y (Adaptado de Har-Lavan, 2013).....	30
Figura 2.15 - Secção transversal da célula aperfeiçoada para a melhora do rendimento (Adaptado de Hezel, 1997)	31
Figura 2.16. - Espectro eletromagnético da luz natural (Adaptado de Mazzio, 2014)	34
Figura 2.17. - Espectro eletromagnético de luz fluorescente e de LED branco (Adaptado de Vignati, 2012)	35
Figura 2.18 - Gráficos típicos para célula solar Sanyo AM-1815 (Adaptado de Vignati, 2012)	36
Figura 2.19 - Aparelho desenvolvido por Bereuter <i>et al.</i> com o propósito de fornecer energia a dispositivos implantados em pacientes. Tamanho aproximado: $10 \times 10 \text{ cm}^2$ (Bereuter, 2016)	36
Figura 3.1 - Forno de RTP destacando o aparato de quartzo de baixa massa térmica responsável pela inserção e retirada da amostra de dentro do forno. A seguir em destaque a posição inicial da lâmina de silício (posição A) e posição intermediária (final) da mesma (posição B) (Cristiano, 2013)	40
Figura 3.2 - Obtenção do valor da tensão de banda plana V_{fb} a partir do gráfico $\psi_s \times V_g$ (Autor)	44
Figura 4.1 - Figura 4.1 - Curvas $C \times V_g$ e $G \times V_g$ típicas de uma célula MOS com área de $9 \times 10^{-4} \text{ cm}^2$ e óxido de porta crescido na temperatura de 850°C (Adaptado de Alandia, 2016)	51

Figura 4.2 -	Curvas $C \times V$ e $G \times V$ típicas de uma célula MOS com área de $9 \times 10^{-4} \text{ cm}^2$ e óxido de porta crescido na temperatura de 700°C (Adaptado de Alandia, 2016)	53
Figura 4.3 -	Curvas $1/C^2 \times V$ típicas para amostras fabricadas segundo as receitas (a), 700°C e (b) 850°C . (Autor)	55
Figura 4.4 -	$(n - p + N_A) \times$ profundidade para a amostra de 700°C com $V_g = 2 \text{ V}$ e $N_A = 4,7 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$. (Autor)	58
Figura 4.5 -	$(n - p + N_A) \times$ profundidade para a amostra de 850°C com $V_g = 2 \text{ V}$ e $N_A = 4,2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ (Autor)	58
Figura 4.6 -	Sobreposição dos gráficos de $\psi_s \times V_g$ e $Q_{it} \times V_g$ simulados para os dielétricos crescidos a: (a) 700°C e (b) 850°C (Autor)	60
Figura 4.7 -	Ajuste do tunelamento para Al como metal de porta; $A = 300 \times 300 \text{ } \mu\text{m}^2$; $V_{FB} = -1,4 \text{ V}$; $x_{\text{trap}} = 8 \text{ nm}$; $R_{\text{série}} = 80 \text{ } \Omega$; $\sigma = 7,39 \times 10^{-10} \text{ cm}^2$; óxido 850°C (Autor)	62
Figura 4.8 -	Ajuste do tunelamento para Al como metal de porta; $A = 700 \times 700 \text{ } \mu\text{m}^2$; $V_{FB} = -1,4 \text{ V}$; $x_{\text{trap}} = 8 \text{ nm}$; $R_{\text{série}} = 80 \text{ } \Omega$; $\sigma = 1,07 \times 10^{-9} \text{ cm}^2$; óxido 850°C (Autor)	63
Figura 4.9 -	Ajuste do tunelamento para TiN como metal de porta; $A = 700 \times 700 \text{ } \mu\text{m}^2$; $V_{FB} = -0,7 \text{ V}$; $x_{\text{trap}} = 8 \text{ nm}$; $R_{\text{série}} = 100 \text{ } \Omega$; $\sigma = 9,79 \times 10^{-10} \text{ cm}^2$; óxido 850°C (Autor) ...	63
Figura 4.10 -	Ajuste do tunelamento para Al como metal de porta; $A = 300 \times 300 \text{ } \mu\text{m}^2$; $V_{FB} = -0,9 \text{ V}$; $x_{\text{trap}} = 13,2 \text{ nm}$; $R_{\text{série}} = 80 \text{ } \Omega$; $\sigma = 5,68 \times 10^{-8} \text{ cm}^2$; óxido 700°C (Autor) ..	64
Figura 4.11 -	Referenciais para o ajuste do tunelamento de elétrons para $V_g < 0$ (a) e $V_g > 0$ (b) (Autor)	66
Figura 4.12 -	Ajuste do tunelamento para Al como metal de porta; $A = 300 \times 300 \text{ } \mu\text{m}^2$; $x_{\text{trap}} = 1,2 \text{ nm}$; $R_{\text{série}} = 80 \text{ } \Omega$; $\sigma = 1,01 \times 10^{-8} \text{ cm}^2$; óxido 700°C (Autor)	66
Figura 4.13 -	Ajuste do tunelamento para Al como metal de porta; $A = 700 \times 700 \text{ } \mu\text{m}^2$; $x_{\text{trap}} = 2 \text{ nm}$; $R_{\text{série}} = 80 \text{ } \Omega$; $\sigma = 3,5 \times 10^{-13} \text{ cm}^2$; óxido 850°C (Autor)	67
Figura 4.14 -	Curvas de tunelamento $J \times V$ para diversas fontes de luz externa para $V_g < 0$ (a) e $V_g > 0$ (b) (Autor)	68

Figura 4.15 -	Curvas de tunelamento $J \times V$ para diversas temperaturas para $V_g < 0$ (a) e $V_g > 0$ (b) (Autor)	70
Figura I.1 -	Disposição das regiões do silício onde foram elaboradas as células MOS (Autor)	75
Figuras I.2 -	Dispositivos com porta de Al e área de $300 \times 300 \mu\text{m}^2$ (700°C): Curvas C-V e G-V (direita). (Banco de dados do GSIDE/LSI/PSI/EPUSP).....	76
Figura I.3 -	Dispositivos com porta de Al e área de $300 \times 300 \mu\text{m}^2$ (850°C): Curvas C-V e G-V (direita). (Banco de dados do GSIDE/LSI/PSI/EPUSP).....	77
Figura I.4 -	Curvas $J \times V$ para diversas amostras: (a) 700°C - $300 \times 300 \mu\text{m}^2$; (b) 850°C - $300 \times 300 \mu\text{m}^2$; (c) 850°C - $700 \times 700 \mu\text{m}^2$. (Banco de dados do GSIDE/LSI/PSI/EPUSP)	82
Figura III.1 -	Discretização unidimensional da estrutura MOS (Autor)	90
Figura III.2 -	Diagrama de blocos representando a estrutura do programa (Autor)	112
Figura IV.1 -	Distribuição de elétrons e lacunas em capacitor pMOS com $V_g = -2 \text{ V}$ para dopagem de 10^{14} cm^{-3} (Autor)	116
Figura IV.2 -	Distribuição de potencial em capacitor PMOS para diversas tensões de porta para dopagem de 10^{14} cm^{-3} ; (a) visão geral; (b) visão da região de inversão (Autor)	117
Figura IV.3 -	Distribuição de elétrons e lacunas em capacitor nMOS com $V_g = 2 \text{ V}$, para dopagem de 10^{14} cm^{-3} (Autor)	118
Figura IV.4 -	Distribuição de potencial em capacitor nMOS para diversas tensões de porta para dopagem de 10^{14} cm^{-3} ; (a) visão geral; (b) visão da região de inversão (Autor)	119
Figura IV.5 -	Concentração de portadores para dispositivo MOS com iluminação e dopado com impurezas tipo P a 10^{14} cm^{-3} ; (a) visão geral; (b) visão junto à interface (Autor)	120
Figura VI.1 -	Diagrama de bandas do dispositivo MOS (Autor)	127

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

ASTM	<i>American Society for Testing and Materials</i>
BTB	<i>Band to band</i> (Banda para banda)
BTT	<i>Band to Trap</i> (Banda para armadilha)
CMOS	<i>Complementary MOS</i>
Cobert.	Material de cobertura
Corr.	Corrigido
DI	Deionizada
dip-HF	Solução de ácido fluorídrico a 49%
DT	<i>Direct Tunneling</i> (tunelamento direto)
EPUSP	Escola Politécnica da Universidade de São Paulo
Est.	Estimado
FF	Fator de preenchimento (<i>fill factor</i>)
FN	Fowler-Nordheim
GSIDE	Grupo de Superfícies, Interfaces e Deposição Eletroquímica
LED	<i>Light Emitter Diode</i> (Diodo emissor de luz)
LSI	Laboratório de Sistemas Integráveis
Met.	Metal de porta
MOS	Metal-Óxido-Semicondutor
N. Am.	Número da amostra
OCr.	Orientação cristalográfica
OLED	<i>Organic LED</i> (Diodo emissor de luz orgânico)
PCB	<i>Printed circuit board</i> (Placa de circuito impresso)
PEDOT:PSS	poli(3,4-etilenodioxítiofeno).poli (poliestireno sulfonato)
P3HT	poli(3-hexiltiofeno-2,5-diil)
Ref.	Referência
SRH	Shockley-Read-Hall
TAT	Tunelamento assistido por armadilhas

LISTA DE SÍMBOLOS

α	Ângulo de inclinação de uma reta
$\alpha(\lambda)$	Absorbância em função do comprimento de onda
β	Inverso de $k_B T/q = 0,0259$ V
Γ	Fator de correção vinculada à presença de luz
ϵ	Permissividade dielétrica
η	Eficiência energética
θ	Ângulo de incidência de luz
λ	Comprimento de onda
ν	Frequência da luz
φ	Potencial elétrico de uma partícula
Φ_{barreira}	Energia de barreira
Φ_{Cg}	Energia relativa no metal de porta
Φ_{Cs}	Energia relativa na interface óxido-semicondutor
Φ_f	Energia de Fermi
$\phi(x)$	Potencial elétrico como função de x
ϕ_b	Diferença de potencial entre o portador e a barreira de potencial
ϕ_f	Potencial de Fermi
ρ	Resistividade
σ_T	Secção transversal da armadilha
ψ_s	Potencial de superfície
χ_{Si}	Afinidade eletrônica do silício
Ψ	Função de onda
A	Área, Ampère
Al	Alumínio
Au	Ouro
C_{ox}	Capacitância do óxido
Cr	Cromo
Cs	Césio
CsCl	Cloreto de césio
Cu	Cobre
$^{\circ}\text{C}$	graus Celsius

d	Espessura
Dit	Densidade de interfaces de estados em armadilhas
E	Campo elétrico
E'	Energia
E _c	Energia do nível de condução
E _f	Energia do nível de Fermi
E _g	Largura de banda, em eV
E _v	Energia do nível de valência
F	Farad
G	Condutância
G(x)	Função geração de portadores
H	Passo de discretização
h	Constante de Planck
ħ	Constante de Planck dividido por 2π (h/2π)
HF	Ácido fluorídrico
HNO ₃	Ácido nítrico
HfO ₂	Óxido de háfnio
I	Corrente elétrica
I _{max}	Corrente elétrica máxima de uma célula solar
I _{SC}	Corrente elétrica de curto-circuito
J	Densidade de corrente elétrica
J _{cl}	Densidade de corrente em presença de luz
J _D	Densidade de corrente de tunelamento direto
J _d	Densidade de corrente de difusão
J _G	Densidade de corrente fotogerada
J _{INE}	Densidade de corrente inelástica de elétrons por armadilhas
J _{rg}	Densidade de corrente após recombinação de portadores
J _s	Densidade de corrente de estados junto à superfície
J _{sl}	Densidade de corrente na ausência de luz
J _{TEDit}	Densidade de estados de interface dos elétrons
J _{th}	Densidade de corrente de portadores gerados termicamente
J _{THDit}	Densidade de estados de interface das lacunas
k	Constante dielétrica
k _B	Constante de Boltzmann

I_x	Unidade de luminosidade (1 lúmen/m ²)
m^*	Massa efetiva de uma partícula
m_{diel}	massa efetiva dentro de um dielétrico
n	Concentração de elétrons, índice de refração
N_2	Gás nitrogênio
N_A	Concentração de dopantes aceitadores
N_D	Concentração de dopantes doadores
n_i	Concentração intrínseca de portadores
n_m	Fator de degenerescência da banda
$n_{\text{ph}}(\lambda)$	Número de fótons em função do comprimento de onda
N_{tr}	Concentração de armadilhas
O_2	Gás oxigênio
p	Concentração de lacunas
P_{in}	Potência fornecida pela fonte luminosa à célula solar
p_s	Concentração de lacunas no substrato
Pt	Platina
$P_T(\Phi)$	Probabilidade de tunelamento em função da energia Φ
q	Carga fundamental
Q_{iq}	Densidade de cargas elétricas na interface
Q_{oxc}	Carga fixa no óxido de cobertura sobre a estrutura MOS
Q_s	Carga no silício
r	Coeficiente de reflexão no meio
$R(\lambda)$	Reflectância em função do comprimento de onda
$R_{\text{série}}$	Resistência série
Si	Silício
SiO_2	Dióxido de silício
Si_xN_y	Nitreto de silício de estequiometria variável
T	Temperatura
$T(\lambda)$	Transmitância em função do comprimento de onda
Ti	Titânio
TiO_2	Dióxido de titânio
t_{ox}	Espessura do óxido
Tr	Coeficiente de transmissão
T_1	Probabilidade de tunelamento entre a armadilha e o metal

T_2	Probabilidade de tunelamento entre a armadilha e o substrato
V	Volt
V_{FB}	Tensão elétrica de banda plana
V_g	Tensão elétrica de porta
V_{GB}	Tensão elétrica entre a porta e o substrato
V_K	Tensão elétrica de saturação de carga dos centros K
V_{max}	Tensão elétrica máxima de uma célula solar
V_{OC}	Tensão elétrica de circuito aberto
V_{ox}	Diferença de potencial elétrico no óxido
V_t	Tensão de limiar
v_{th}	Velocidade térmica
W	Watt
W_d	Largura da região de depleção
x_{trap}	Posição da armadilha no óxido
ZnS	Sulfeto de zinco
ZrO_2	Óxido de zircônio

1. INTRODUÇÃO, OBJETIVOS, JUSTIFICATIVAS E CONTEÚDO

1.1. INTRODUÇÃO

Os circuitos integrados (CIs) atuais tem como base as tecnologias CMOS (*metal-oxide-semiconductor*). As tecnologias CMOS (*complementary MOS*) têm sido empregadas em boa parte dos componentes microeletrônicos avançados, tais como processadores, memórias, dispositivos de controle (controladores e chaves, por exemplo) e circuitos integrados para aplicações específicas [1-2].

Existem, contudo, algumas áreas ainda relativamente pouco exploradas para esta tecnologia. Uma delas está relacionada à conversão fotovoltaica em ambientes fechados e de pequena luminosidade (“Energy harvesting”). Dispositivos fotovoltaicos, isto é, aqueles empregados na conversão de energia luminosa em energia elétrica, em sua maioria não empregam tecnologia MOS. As células solares, em geral, são construídas com junções P-N recobertas com camadas anti-reflexivas para minimizar as perdas decorrentes da reflexão da luz.

Para conversão fotovoltaica e outras derivadas, que aproveitam a energia luminosa em diversos ambientes, algumas possibilidades foram estudadas, dentre as quais os diodos túnel MOS, cuja quantidade de publicações tem se tornado significativa [3-8]. Estes dispositivos têm sido empregados em ressonadores [9], chaves [10] e outros dispositivos de alta frequência, devido à sua alta velocidade de resposta e também foram estudados como dispositivo básico para a geração de energia elétrica [11].

Os diodos túnel obtidos a partir de junções P-N seguem o processo descrito pelo seu descobridor, o japonês Leo (Reona) Esaki (1925-), que observou o fenômeno da impedância negativa [12]. Esta junção forma uma região de depleção relativamente estreita, pois a largura dessa região é inversamente proporcional à dopagem [13] e apesar de apresentarem barreiras de potencial finitas, acabam permitindo que os portadores de carga, elétrons e lacunas, as atravessem. Este fenômeno, conhecido como *efeito túnel* ou *tunelamento quântico* [14] foi desenvolvido a partir da Mecânica Quântica, com a ajuda dos estudos feitos por Schrödinger [15].

Estudos semelhantes foram feitos com estruturas MOS utilizando óxidos finos como barreira de potencial entre o semicondutor e o metal [16].

Em tecnologias CMOS convencionais, o tunelamento é um fenômeno indesejado por ser uma forma de perda por fuga de corrente [17], que pode ser minorado com o emprego de óxidos de alta constante dielétrica (k), denominados óxidos “high- k ” [18] adequados ao tamanho dos dispositivos MOS, cujas dimensões diminuem a cada ano [19].

Para um diodo túnel MOS, a preocupação em se obter baixas correntes de fuga não é pertinente, na verdade, é necessário facilitar a condução de portadores através da barreira de potencial formada pelo dielétrico de porta. Além da espessura que influencia o chamado *tunelamento*, outros fatores também contribuem para a passagem de portadores através do dielétrico de porta [20], a saber:

a. Distribuição do campo elétrico no dielétrico [21]

b. Grau de alinhamento das bandas de valência e de condução no semicondutor, provocando o chamado tunelamento indireto [20].

c. Presença de armadilhas no óxido [20].

Um dos pontos que o presente trabalho procurou abordar foi o fenômeno de transporte através de armadilhas, que podem ser devido às irregularidades nas ligações químicas inter-atômicas, no interior do dielétrico de porta. Estas irregularidades costumam induzir níveis de energia permitidos dentro da faixa proibida [20], possibilitando a captura e posterior liberação de portadores, geralmente associada à ação dos campos elétricos.

Atualmente, a tecnologia MOS para as células solares está passando por uma fase de re-estudo [22], após cerca de 40 anos, segundo Har-Lavan e Cahen. A primeira onda nas pesquisas para utilização da tecnologia MOS em células solares data dos anos 1970, coincidindo com a grande crise do petróleo desencadeada pelo conflito dos Seis Dias e a retaliação da Opep, que diminuiu drasticamente a extração da matéria-prima energética.

Na década de 1970 houve publicações sobre as células solares MOS que mostravam suas vantagens e limitações em comparação com as convencionais. O esquema proposto por Pulfrey [23] para a célula solar MOS, em 1978, consistia no emprego de um substrato qualquer, de vidro ou metal, para dar suporte a um ou mais semicondutores. Os casos estudados foram silício e arseneto de gálio (GaAs) combinado com o germânio.

Para o caso do silício, que será abordado com mais profundidade, a lâmina de silício passa por processo de oxidação para obtenção do dielétrico de porta que pode ser (Pulfrey, 1978):

- térmica, utilizando fluxo conjunto de O_2 e N_2 e diversas temperaturas e respectivos tempos de procedimento;
- química, usando diversas soluções HF e HNO_3 em alta temperatura;
- evaporação de materiais que geram vapor de SiO [24], composto instável que, espontaneamente, reage com O_2 gerando SiO_2 :

- anodização do silício, utilizando corrente elétrica (eletrolítica) para forçar a oxidação na superfície;
- oxidação em temperaturas significativamente abaixo das normalmente utilizadas para o procedimento térmico, considerado um processo “natural”, por utilizar o oxigênio do meio.

De todos os procedimentos acima, os que geraram melhores resultados foram os obtidos por oxidação térmica.

Por outro lado, um parâmetro de fundamental importância em células solares MOS é a tensão de circuito aberto, V_{oc} , que é empregado no cálculo da eficiência energética (η) para células solares (Equação 1.2):

$$\eta = \frac{I_{sc} \cdot V_{oc} \cdot FF}{P_{in} \cdot A} \quad (\text{Eq. 1.2})$$

onde I_{sc} é a corrente de curto circuito, A é a área útil da célula, P_{in} é a potência fornecida pela fonte luminosa e FF é o *fill factor*, ou fator de preenchimento:

$$FF = \frac{I_{max} \cdot V_{max}}{I_{sc} \cdot V_{oc}} \quad (\text{Eq. 1.3})$$

Figura 1.1 – Gráfico típico de uma célula solar exibindo os parâmetros I_{sc} , I_{max} , V_{oc} e V_{max}

Fonte: Autor

1.2. OBJETIVOS

Os objetivos do presente trabalho são:

- a. Modelar células solares MOS com base no tunelamento de elétrons em óxido com armadilhas, trabalhando em regime de depleção profunda sem luz.
- b. Elaborar um programa em C++ para modelagem do funcionamento da célula solar MOS operando em regime de inversão induzido por cargas positivas na interface $\text{SiO}_x\text{N}_y/\text{Si}$ com luz.

c. Modelar as características capacitância x tensão de porta (C_xV_g) e densidade de corrente x tensão de porta (J_xV_g) em função da temperatura e da intensidade luminosa.

1.3. JUSTIFICATIVAS

A tecnologia da célula solar MOS apresenta alguns modelos na literatura [6-7, 23-24, 25-27], mas ela não se firmou efetivamente no mercado, devido a alguns fatores:

a. Havia dificuldade para fabricar células MOS com cargas positivas, implantadas no óxido de cobertura, que induzissem o tunelamento, conforme a figura 1.1. Essas cargas não se mantinham estáveis por longos períodos, e precisavam de uma distribuição com certa uniformidade para o dispositivo funcionar satisfatoriamente.

Figura 1.1 – Estrutura de uma célula solar MOS com cargas positivas no óxido de cobertura

Fonte: Autor

b. Havia dificuldade, também, para se fazer camadas de inversão, ou seja, um acúmulo de elétrons na interface que pudesse ter resultados reproduzíveis para as mesmas condições de funcionamento.

A primeira dificuldade foi contornada por implantação de cargas na interface óxido de porta-silício, que ficam uniformemente distribuídas graças à presença de centros K. Esses centros são arranjos particulares de ligações entre os átomos de Si e os átomos de N [28], presentes nos oxinitretos de silício ou óxidos com implantação de nitrogênio.

Figura 1.2 – Estrutura de uma célula solar MOS com cargas positivas na interface óxido-semicondutor

Fonte: Autor

Em relação ao segundo problema, o grupo GSIDE do LSI/EPUSP/USP contornou as dificuldades para fazer uma camada de óxido reproduzível capaz de armazenar cargas positivas na interface, por meio de um adequado controle de fabricação, possibilitando a elaboração de dispositivos capazes de funcionarem como base para células solares MOS operando em regime de inversão induzido por

cargas positivas localizadas na interface SiOxNy/Si. Medidas de caracterizações elétricas I_xV e C_xV foram feitas para constatar a reprodutibilidade.

1.4. CONTEÚDO

A tese foi organizada em 5 capítulos. Nesse primeiro capítulo foram apresentadas a introdução, os objetivos e justificativas. Os capítulos seguintes apresentam os seguintes conteúdos:

Capítulo 2: Revisão dos mecanismos de tunelamento e das tecnologias de fabricação de células solares MOS

Neste capítulo, abordou-se o fenômeno do tunelamento, o começo de seu estudo nos diodos túnel, suas diversas modalidades (direto, Fowler-Nordheim e por armadilhas) e operação nas três regiões de funcionamento do diodo MOS – acumulação, depleção e inversão. Em seguida, foi abordada a tecnologia das células solares MOS, mostrando seus princípios de funcionamento, semelhanças e diferenças em relação às células solares convencionais, desenvolvimento e perspectivas. Uma das aplicações viáveis para a tecnologia de células solares MOS é o “energy harvesting”, para aproveitamento de energia proveniente de outras fontes, particularmente a iluminação artificial.

Capítulo 3: Procedimentos experimentais

Neste capítulo foi abordada a metodologia do projeto, como as fórmulas para a modelagem dos diversos componentes do tunelamento em dispositivos MOS criados no grupo GSIDE e as cargas de interface envolvidas (Q_{Iq}), tendo por base as curvas experimentais I_xV , G_xV e C_xV .

Capítulo 4: Resultados experimentais e discussões

Neste capítulo foram analisados os resultados referentes ao tunelamento, comparando os gráficos experimentais $I \times V$ com os provenientes do modelamento. Foram também analisadas as diversas curvas $C \times V$ e $G \times V$, procurando abordar os fenômenos envolvidos e explicar as particularidades de cada gráfico, nas diversas amostras produzidas. Da mesma forma, foram analisados os resultados das simulações do programa para funcionamento de dispositivo MOS utilizando cargas de interface Q_{it} previamente calculadas com base nos gráficos $C \times V$ acima referidos.

Capítulo 5: Conclusões e Perspectivas Futuras

O item final aborda a análise final do projeto desenvolvido e sua viabilidade como célula solar MOS tipo depleção, para o “energy harvesting”, levando-se em conta os resultados e discussões feitos no capítulo anterior. Também são apresentadas perspectivas possíveis para o desenvolvimento de continuações para o presente trabalho.

2. REVISÃO DOS MECANISMOS DE TUNELAMENTO E DAS TECNOLOGIAS DE FABRICAÇÃO DE CÉLULAS SOLARES MOS

Neste capítulo serão abordados o embasamento teórico e prático do trabalho sobre o tunelamento em dispositivos MOS e seus diversos mecanismos, abordando quais deles são predominantes nos três regimes de funcionamento da estrutura MOS. Também será apresentado neste capítulo uma extensa revisão sobre a tecnologia de fabricação de células solares MOS incluindo aplicações em produção de energia e "Energy Harvesting".

2.1. DIODOS TÚNEL MOS

2.1.1. Origem do diodo túnel

Os diodos túnel foram desenvolvidos a partir de 1958 pelo japonês Leo (Reona) Esaki, por meio da observação de impedâncias negativas, em dispositivos P-N de germânio com dopagem elevada [12]. Por conta disso, os diodos túnel de junção são chamados de diodo Esaki. No diodo Esaki, há a junção de dois semicondutores fortemente dopados, levando à formação de uma região de depleção estreita, da ordem de poucos nanômetros de espessura. A região de depleção funciona como uma barreira de potencial, por onde é possível haver considerável troca de portadores entre os semicondutores, conforme a Figura 2.1 a seguir [29]

Figura 2.1 – Corrente de tunelamento para tensão de polarização V_p ligeiramente positiva em um diodo Esaki (a) e para tensões de polarização $V > V_p$ onde o tunelamento deixa de existir (b)

Fonte: Adaptado de ESAKI L *et al.*, Proc. Jpn. Acad., Ser. B. Phys., Biol. Sci., 2010.

O fenômeno do tunelamento acontece para baixos valores de tensão, sob polarização direta. À medida em que se aumenta a tensão de polarização positiva, a região de depleção também aumenta, diminuindo a corrente de portadores que passam por tunelamento. Por esta razão, para dada faixa de tensão, há o fenômeno da “resistência negativa”, conforme indicado no gráfico da corrente em função da tensão da Figura 2.2 [30]:

Figura 2.2 – Gráfico característico do diodo túnel (a) e componentes da corrente (b)

Fonte: Adaptado de Tunnel Diode Theory & Operation - Disponível em: <<http://www.radio-electronics.com/info/data/semicond/tunneldiode/theory-operation.php>>. Acesso em: 15 set. 2013.

Fenômeno semelhante ocorre na estrutura MOS composta de um semicondutor e um óxido de pequena espessura sobre o qual é depositada uma porta metálica [31]. Esses dispositivos são chamados de diodos túnel MOS e esse fenômeno é atualmente mensurável devido à espessura dos óxidos de porta da ordem de poucos nanômetros. Por isso, há a necessidade de se empregar óxidos com constante dielétrica maior do que a do SiO_2 ($k = 3,9$), para os transistores MOS convencionais. Esses óxidos são chamados de materiais “high-k” [24] como o óxido de háfnio (HfO_2) e de zircônio (ZrO_2).

Para os diversos tipos de diodos túnel, as principais formas de tunelamento são o tunelamento direto (DT) e o tunelamento de Fowler-Nordheim ou FN. Em diodos túnel MOS, o tunelamento por armadilhas no corpo do dielétrico pode ser um componente importante, como será descrito no item 2.3.

O tunelamento através de barreiras de potencial pode ser descrito por meio da equação de Schrödinger. Para estruturas unidimensionais, vale a eq. 2.1 [15]:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + V(x)\Psi = E'\Psi$$

ou, reescrevendo:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \frac{2m^*(V(x) - E')}{\hbar^2} \Psi \quad (\text{Eq. 2.1})$$

onde:

m^* é a massa efetiva do portador;

$V(x)$ é a diferença de potencial entre a barreira e o portador;

E' é a energia do portador, dada por $E' = q\phi$, onde ϕ é o potencial elétrico do elétron;

$\hbar$ é a constante de Planck modificada, dada por $\hbar = \frac{h}{2\pi}$;

Ψ é a função de onda, dada por:

$$\Psi = A \cdot \sin\left(-x \frac{\sqrt{2m^*(V(x) - E')}}{\hbar} + B\right)$$

sendo A e B constantes.

2.2. TUNELAMENTO EM DISPOSITIVOS MOS

Como exposto no item 2.1, o tunelamento também acontece em dispositivos MOS, principalmente em óxidos finos ou com armadilhas cuja densidade é suficiente para desencadear uma considerável densidade de corrente mesmo em óxidos de maior espessura.

Conforme será mostrado nos próximos itens, a corrente de tunelamento depende da distribuição de potencial em função da distribuição de portadores e de carga, descrita pela equação de Poisson (Equação 2.2):

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = -\frac{q(-n(x) + p(x) - N_A)}{\epsilon_{Si}} \quad (\text{Eq. 2.2})$$

que pode ser simplificada no regime de depleção profunda, isto é, quando a região de depleção é relativamente larga e maior do que na região de equilíbrio e existe fuga de corrente por tunelamento, para [32]:

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = -\frac{q(p(x) - N_A)}{\epsilon_{Si}} \quad (\text{Eq. 2.3})$$

Na depleção profunda, a concentração de elétrons se torna consideravelmente menor do que a de lacunas, portadores majoritários em silício tipo P.

2.2.1. Tunelamento direto ou Tsu-Esaki

O tunelamento direto (DT, sigla para *direct tunneling*) é decorrente da própria existência de uma barreira de potencial consideravelmente estreita ($qV_{ox} < q\phi_b$ conforme é mostrado na figura 2.3) que ocorre em óxidos de porta muito finos ($t_{ox} \leq 2$ nm). A figura 2.3 mostra o tunelamento DT através de um dielétrico de pouca espessura:

Figura 2.3 – Tunelamento direto

Fonte: Autor

Gehring [20] reporta que a corrente de tunelamento direto é dada pela equação 2.4:

$$J_D = \frac{4\pi m^* q}{h^3} \int_{E'_{\min}}^{E'_{\max}} Tr_D(E') N(E') dE' \quad (\text{Eq. 2.4})$$

onde $Tr_D(E')$ é o coeficiente de transmissão do portador para tunelamento direto e $N(E')$ é uma função dependente da distribuição eletrônica de portadores conforme segue:

$$N(E') = \int_0^{\infty} f(E') dE' \quad (\text{Eq. 2.5})$$

Para o caso de Maxwell-Boltzmann, a função f é a exponencial característica, dependente da energia de Fermi Φ_F , conforme a equação 2.6:

$$f(E') = e^{\frac{\Phi_f - E'}{k_B T}} = e^{\frac{\phi_f - \phi}{k_B T}} \quad (\text{Eq. 2.6})$$

tornando o fator $N(E')$ igual a, aproximadamente [20]:

$$N(E') = k_B T e^{\frac{\Phi_f}{k_B T}} \quad (\text{Eq. 2.7})$$

Onde k_B é a constante de Boltzmann e T é a temperatura.

O tunelamento direto é predominante em óxidos muito finos, de até (1,5 nm) 15 Å, com baixas concentrações de armadilhas, chegando a atingir valores superiores a 10 mA/cm² para tensão de porta inferiores a 1 V [25].

2.2.2. Tunelamento Fowler-Nordheim

O tunelamento Fowler-Nordheim, ou FN, é o tunelamento que ocorre através de uma barreira triangular quando $qV_{ox} > q\phi_b$, ou seja, no caso de óxidos mais espessos, com mais de 2 nm. A figura 2.4. ilustra o tunelamento FN em um óxido espesso:

Figura 2.4 – Tunelamento do tipo Fowler-Nordheim

Fonte: Adaptado de GEHRING A. **Semiconductor Tunneling in Semiconductor Devices**,
Dissertação de Mestrado da Universidade de Viena, Áustria, 2003.

A equação da densidade de corrente é semelhante à equação 2.4 para o tunelamento direto, segundo Gehring, mas o coeficiente de transmissão Tr_{FN} , que é função do campo elétrico no dielétrico, pode ser escrito como [20]:

$$J_{FN} = \frac{4\pi m_{diel} q}{h^3} \int_{E'_{min}}^{E'_{max}} Tr_{FN}(E') N(E') dE' \quad (\text{Eq. 2.8})$$

$$Tr_d(E') = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_0^{x1} \sqrt{2m_{diel}(E'_c - E'(x))} dx\right) \quad (\text{Eq. 2.9})$$

$$x1 = \frac{E'_c + q\phi_b - E'(x)}{qE} \quad (\text{Eq. 2.10})$$

onde m_{diel} é a massa efetiva dentro do dielétrico, E'_c é o nível de energia de condução, E é o campo elétrico $E'(x) = q\phi(x)$ e a barreira triangular de energia, função de x na Figura 2.4, e $x1$ representa a espessura da barreira triangular, para corrente de tunelamento no nível de energia E'_c .

Após algumas manipulações matemáticas e simplificações na equação 2.8, a densidade de corrente FN torna-se [20]:

$$J_{FN} = \frac{m^* q^3}{8\pi m_{diel} \hbar q \phi_b} E^2 \exp\left(-\frac{4\sqrt{2m_{diel}}(q\phi_b)^{3/2}}{3\hbar q E}\right) \quad (\text{Eq. 2.11})$$

2.2.3. Tunelamento por armadilhas

Segundo Gehring, as correntes de tunelamento podem atingir valores comparáveis às de óxidos finos, se o óxido espesso apresentar uma densidade de armadilhas da ordem de 10^{12} cm^{-3} ou mais [15].

A tensão de porta determina quais portadores predominam no tunelamento. Em tensões negativas, predominam os elétrons, que migram do metal para o semiconductor. Na região de acumulação, devido ao acúmulo de lacunas no silício

Para tensões de porta positivas, os mecanismos de tunelamento obedecem a uma fenomenologia distinta. O tunelamento assistido por armadilhas no dielétrico de porta (TAT: Trap Assisted Tunneling) e o tunelamento direto podem ocorrer concomitantemente com outras componentes de tunelamento presentes dentro do silício, próximo à interface [20, 34]:

Geração de Shockley-Read-Hall (SRH);

Geração Banda-para-armadilha (BTT);

Tunelamento de banda-para-banda (BTB) no silício seguido de tunelamento no óxido.

O tunelamento TAT no dielétrico é formado majoritariamente pela componente inelástica INE, que aproveita uma ou mais armadilhas com menor energia em relação ao portador a ser transportado, de acordo com a figura 2.6, exibindo a corrente de tunelamento ($\overrightarrow{J_{tun}}$) para dada tensão de porta V_g e potencial do óxido V_{ox} :

Figura 2.6 – Esquema simplificado do tunelamento TAT para célula pMOS

Fonte: Adaptado de PULFREY D. L. **MIS Solar Cells: A Review**, IEEE Transactions on Electron Devices, DOI 0018-9383/78/1100-1308\$00.7, p. 1308-1317, 1978.

A componente de geração SRH ocorre para baixas dopagens ($< 10^{16} \text{ cm}^{-3}$), óxidos de menor espessura ($< 3 \text{ nm}$) e em regime de depleção [35]. Neste mecanismo ocorre geração térmica de portadores no silício próxima à interface, seguido de tunelamento através do dielétrico de porta.

O tunelamento assistido por geração BTT é mais pronunciado para dopagens maiores, entre 10^{16} e 10^{20} cm^{-3} , quando as regiões de depleção são menores [13]. Neste mecanismo os elétrons gerados primeiro passam pelas armadilhas localizadas na banda proibida, e depois de ganharem energia pelo efeito fotoelétrico, passam para a banda de condução e tunelam pelo dielétrico de porta [34].

Para tensões de porta maiores, há maior concentração de minoritários na interface óxido-semicondutor, levando a uma barreira adicional de potencial, representada pela banda proibida na região de depleção. O elétron passa diretamente da banda de valência para a de condução dentro do silício. Na sequência, os portadores gerados na banda de condução tunelam através do dielétrico de porta [34].

2.3. FUNCIONAMENTO DA CÉLULA SOLAR MOS

Nas células solares MOS (figura 2.7) ocorre a geração de portadores por efeito fotovoltaico, ou seja, os elétrons na camada de valência recebem a energia proveniente dos fótons – $h\nu$ – e caso ela seja maior do que a largura da banda proibida (E_g) do semicondutor, os elétrons terão energia suficiente para passar da banda de valência à de condução e se tornarem livres, deixando ligações eletrônicas incompletas, isto é, lacunas. Os elétrons livres e as lacunas, por sua vez, compõem a corrente elétrica de geração.

Figura 2.7 – Esquema básico do efeito fotovoltaico em uma célula pMOS

Fonte: Autor

Nas células solares MOS, os fótons devem atravessar a camada de material de cobertura, transparente ao espectro eletromagnético na faixa da luz (comprimento de onda entre 380 e 760 nm) e com certo índice de refração, de tal modo a minimizar as perdas por reflexão [36].

O material de cobertura deve ter uma espessura (d_1) projetada para minimizar a reflexão em certa faixa de frequência eletromagnética, dada pela equação 2.12 [36]:

$$d_1(\lambda) = \frac{\lambda}{4n_1(\lambda)} \quad (\text{Eq. 2.12})$$

onde λ é o comprimento de onda luminosa e n_1 é o índice de refração do meio.

Geralmente há mais de um material de cobertura, utilizando uma camada mais espessa de material comum, como o vidro, considerado neste caso como o material 1, e um filme fino também transparente à luz visível, mas cujo índice de refração (n_2) é dado pela equação 2.13 [36]:

$$n_2 = \sqrt{n_0 n_1} \quad (\text{Eq. 2.13})$$

onde n_0 é o índice de refração do ar.

Figura 2.8 – Secção transversal de uma célula solar convencional e dois materiais de cobertura, sendo o meio 2 uma camada anti-reflexiva

Fonte: Autor

Também é necessário considerar a refletância total da luz (equação 2.14), dependente do ângulo de incidência (θ). A reflectância é um dos fatores importantes na geração de portadores [37]:

$$R(\lambda) = \left(\frac{n_o - n_1}{n_o + n_1} \right)^2 = \frac{r_1^2 + r_2^2 + 2r_1 r_2 \cos \theta}{1 + r_1^2 + r_2^2 + 2r_1 r_2 \cos \theta} \quad (\text{Eq. 2.14})$$

onde $r_1 = \frac{n_2 - n_1}{n_2 + n_1}$ e $r_2 = \frac{n_0 - n_2}{n_0 + n_2}$, n_1 e n_2 dependentes do comprimento de onda.

O silício só poderá aproveitar a parte transmitida da onda eletromagnética: $T(\lambda) = 1 - R(\lambda)$, que compõe a geração óptica dos portadores dentro do silício (Equação 2.15) [26]:

$$G(x) = \sum_0^{\lambda'} T(\lambda) \alpha(\lambda) n_{ph}(\lambda) e^{-\alpha(\lambda)x} \quad (\text{Eq. 2.15})$$

onde α é o coeficiente de absorção e n_{ph} é o número de fótons por unidade de área, ambos dependentes do comprimento de onda. $G(x)$ é a soma de todas as gerações ópticas em comprimentos de ondas inferiores a um certo λ' . Para comprimentos de onda maiores, o semiconductor passa a ser transparente, sendo a absorção desprezível, não sendo possível a geração de fótons.

Além disso, como visto anteriormente, o foco principal num projeto de célula solar MOS é maximizar o rendimento (Equação 1.2). No entanto, a célula MOS tem algumas particularidades em relação à convencional.

Na tecnologia em voga na maioria das células solares, como mostrado na figura 2.9 [37], produz-se uma junção P-N no semiconductor, constituindo uma região de depleção, intermediária. Os raios de luz incidentes são absorvidos e geram pares de portadores nas três regiões, podendo também interferir na recombinação entre elétrons e lacunas.

Figura 2.9 – Componentes da geração óptica de portadores em uma célula solar convencional P-N

Fonte: Autor, com base em apostilas de PSI-5785 (Onmori, 2005)

Na célula MOS, de acordo com a figura 2.10, o silício é uniformemente dopado (tipo P ou tipo N) e a luz incidente passa pelas regiões não cobertas pelo metal, onde o óxido fino está diretamente em contato com o material de cobertura, para ser absorvida pelo silício, gerando pares de portadores. Nas regiões sob o metal, os portadores acabam sofrendo o tunelamento antes de serem induzidos.

Figura 2.10 – Componentes da geração óptica de portadores em uma célula MOS

Fonte: Adaptado de PULFREY D. L. **MIS Solar Cells: A Review**, IEEE Transactions on Electron Devices, DOI 0018-9383/78/1100-1308\$00.7, p. 1308-1317, 1978.

Os portadores acabam submetidos ao tunelamento conforme o item 2.2.

Experimentos realizados [23] mostram que a corrente na ausência de luz é significativa e pode ser descrita por:

$$J_{sl} = J_{th} + J_{rg} + J_d + J_s \quad (\text{Eq. 2.16})$$

onde J_{sl} é a densidade de corrente total na ausência de luz, J_{th} é a componente gerada termicamente, J_{rg} é a componente de portadores gerados descontada a recombinação, junto à interface, J_d é a densidade relacionada à difusão de portadores e J_s é a componente de portadores gerados junto à superfície.

As componentes da corrente de tunelamento em ambiente escuro, descritos a partir da equação 2.16 acima, podem ser vistos na figura 2.11 a seguir, representando uma célula PMOS submetida a uma certa tensão de porta V_g .

Figura 2.11 – Componentes do tunelamento J_{th} , J_d , J_s e J_{rg} em ambiente sem iluminação

Fonte: Adaptado de PULFREY D. L. **MIS Solar Cells: A Review**, IEEE Transactions on Electron Devices, DOI 0018-9383/78/1100-1308\$00.7, p. 1308-1317, 1978.

Na presença de luz, a densidade de corrente com luz é a somatória da densidade de corrente total sem luz com a densidade de corrente fotogerada [23]:

$$J_{cl} = J_{sl} + J_G \quad (\text{Eq. 2.17})$$

A densidade de corrente sob efeito da luz depende da tensão de circuito aberto V_{oc} [23]:

$$J_{cl} = J_{sl} \exp(q\Gamma V_{oc} / k_B T) \quad (\text{Eq. 2.18})$$

onde Γ é um fator de correção devido às alterações na concentração de portadores junto à interface em decorrência da recombinação em estado profundo. Esta alteração reflete no potencial de superfície (ψ_s) e também na diferença de potencial do óxido V_{ox} , que é função de ψ_s [32]:

$$V_{ox} = \frac{\sqrt{2q\epsilon_{Si}N_{A(D)}\psi_s}}{C_{ox}} \quad (\text{Eq. 2.19})$$

onde:

q = carga fundamental

ϵ_{Si} = constante dielétrica do silício

$N_{A(D)}$ = concentração de aceitadores (doadores) do silício tipo P (N).

Esta situação pode ser exemplificada na figura 2.12 abaixo, para uma célula PMOS fabricada em substrato tipo N:

Figura 2.12 – Efeitos da luz em célula solar PMOS fabricada em substrato tipo N

Fonte: Adaptado de PULFREY D. L. **MIS Solar Cells: A Review**, IEEE Transactions on Electron Devices, DOI 0018-9383/78/1100-1308\$00.7, p. 1308-1317, 1978.

A tabela 2.1 mostra alguns dos resultados obtidos por Pulfrey [23] tendo por base uma célula feita em Si com SiO₂ como isolante de porta. É possível notar que os melhores resultados, ou seja, os melhores valores de tensão de circuito aberto (V_{oc}), ocorreram para células construídas em substrato tipo P, ou seja, dispositivos nMOS, e orientação cristalográfica $\langle 100 \rangle$. Também, são dignos de nota os resultados para as células com óxido crescido termicamente e os resultados relativamente modestos para os dispositivos cujos óxidos foram crescidos no

ambiente (método natural), devido ao risco de contaminação e ausência de controle de parâmetros como temperatura e umidade, de acordo com a tabela 2.1 a seguir:

Tabela 2.1 – Valores de V_{oc} obtidos para células solares MOS em silício

N. Am.: Número da amostra / OCr : Orientação cristalográfica / Met.: Metal de porta

N. Am.	Tipo do Substrato	OCr	Met.	Método	V_{oc} (mV)	Resistividade ($\Omega.cm$)	Referência
1	P	100	Al	térmico	615	1	[38]
2	P	100	Cr	térmico	600	2	[39]
3	P	100	Ti	químico	550	1	[40]
4	P	100	Al	natural	470	3 a 15	[41]
5	N	111	Au	Deposição de SiO	536	1 a 10	[42]
6	N	100	Au	térmico	444	0,15 a 0,25	[43]
7	N	100	Au	anodização	427	8 a 19	[43]
8	N	111	Pt	térmico	410	5 a 10	[44]
9	N	111	Al	químico	400	1 a 10	[42]

Fonte: PULFREY, 1978 [23].

Por outro lado, a medição da densidade de corrente de curto-circuito J_{sc} também mostrou resultados melhores para as células feitas a partir de silício tipo P, embora a diferença não seja tão evidente e dependa de outros fatores, tais como:

- geometria da célula, que interfere na eficiência ao impor uma certa porcentagem de área não aproveitada para a geração de luz, que também varia em função da inclinação do feixe incidente;

- tipo de material transparente que permite a passagem de luz para o dispositivo (material de cobertura); o índice de refração também contribui para a alteração nos ângulos de incidência do feixe, influenciando na área efetiva do dispositivo;

- metal de porta, que deve ter a menor resistividade e, além disso, ser compatível tanto com o óxido MOS quanto o material de cobertura.

A tabela 2.2 a seguir mostra a corrente de curto-circuito J_{sc} de algumas amostras. Existem dois valores mostrados, o estimado e o corrigido. O valor deste último leva em consideração as imperfeições no contato entre o metal e substrato, que faz diminuir a densidade de corrente efetiva.

Tabela 2.2 - Medição de I_{sc} em algumas amostras

N. Am.: Número da amostra / Cobert.: Material de cobertura / A: Área / N. Apr.: Não aproveitada / Met.: metal condutor / Est.: Estimado / Corr.: Corrigido / Ref.: Referência

N. Am.	Tipo	Cobert.	A total (cm ²)	A N. Apr. (%)	Met.	J_{sc} est. (mA/cm ²)	J_{sc} corr. (mA/cm ²)	Ref.
10	p	TiO ₂	3	1	Ti	28,6	28,3	[41]
11	p	SiO	1	3	Camadas de Cr / Cu / Cr	22,3	21,6	[45]
12	n	SiO	0,33	13	Camadas de Cr / Cu / Cr	24	21,2	[46]
13	p	SiO/ZnS	0,019	74	Au	43,7	25,1	[47]
14	n	SiO/ZnS	0,0078	96	Au	42	21,4	[48]

Fonte: PULFREY, 1978 [23].

Como é possível notar, o silício tipo P com orientação cristalográfica $\langle 1\ 0\ 0 \rangle$ foi o que apresentou melhores resultados na tabela 2.2. Também se pode notar, em geral, a predominância do método de oxidação térmica para a produção do material isolante MOS.

O procedimento adotado por diversos grupos de pesquisa é o da oxidação térmica, seca ou por ação de vapor de água DI, após procedimentos de limpeza para remoção de impurezas, utilizando imersão em solução diluída de ácido fluorídrico ou d-HF (49%) [49] em processo RCA (Alandia, 2015) [34].

O *layout* típico das células solares MOS está ilustrado na Figura 2.13 a seguir. Nota-se uma estrutura MOS (metal - óxido - semiconductor) sobre um substrato e um material transparente anti-reflexivo, usado como cobertura, tal como nas células solares convencionais.

Figura 2.13 – Secção transversal da célula solar MOS

Fonte: Adaptado de PULFREY D. L. **MIS Solar Cells: A Review**, IEEE Transactions on Electron Devices, DOI 0018-9383/78/1100-1308\$00.7, p. 1308-1317, 1978

Com o fim da crise do petróleo, houve uma frequência consideravelmente menor de publicação de artigos na área de células solares MOS, mas atualmente vários métodos de obtenção de energia com produção baixa ou nula de resíduos são novamente temas para pesquisas. A tecnologia MOS para as células solares é uma delas [22].

Recentemente, Har-Lavan e Cahen [22] fizeram um estudo aprofundado sobre a viabilidade de células MOS tipo N combinadas, por heterojunção, com a tecnologia aplicada em OLEDs, como os polímeros PEDOT:PSS - poli(3,4-etilenodioxítiofeno).poli (poliestireno sulfonato) – e P3HT - poli(3-hexiltiofeno-2,5-diil. Os resultados apresentados foram promissores para a continuidade das pesquisas sobre o tema, visando a sua viabilidade comercial.

2.4. APERFEIÇOAMENTOS PARA CÉLULAS MOS

Foram também pesquisados os efeitos das cargas fixas no óxido de cobertura sobre a estrutura MOS (Q_{oxc}), junto à interface com o semicondutor, devido à propriedade de induzir portadores no substrato. Assim, para induzir elétrons a serem tunelados através do dielétrico de porta, cargas fixas positivas são deliberadamente introduzidas no óxido de cobertura final da célula solar. O estudo de Har-Lavan e Cahen [22] reporta as densidades de cargas fixas para cada dopagem. A Tabela 2.3 mostra os valores de Q_{oxc} para célula de silício tipo N [22].:

Tabela 2.3. – Densidade de cargas fixas Q_{oxc} no dielétrico de cobertura em função da dopagem para célula de Si fabricadas em substrato tipo N

Dopagem (cm^{-3}) para Si tipo	Densidade de cargas fixas Q_{oxc}
N	(cm^{-3})
10^{14}	10^{11}
10^{15}	$1,5 \times 10^{11}$
10^{16}	3×10^{11}
10^{17}	$1,2 \times 10^{12}$

Fonte: Har-Lavan, 2015 [22]

Além disso, o nitreto de silício - Si_3N_4 foi proposto como material de cobertura, devido às suas propriedades: que incluem:

- maior estabilidade térmica [50, 51];
- maior capacidade de reter cargas fixas em seu interior [22].

Novos *layouts* foram propostos, implementados e submetidos a publicações, em tempos mais recentes. Num deles [20] foi elaborada uma célula solar MIS com oxinitreto de silício e cargas fixas no material de cobertura, conforme a Figura 2.14:

Figura 2.14 – Corte transversal da célula solar MIS com Si_3N_4 como material de cobertura

Fonte: Adaptado de HAR-LAVAN R., D. CAHEN, **40 years of Inversion-Layer Solar Cells: From MOS to Conduct Polymer/Inorganic Hybrids**, IEEE Journal of Photovoltaics, v. 3, n. 4, p. 1443-1459, 2013.

Uma variação do perfil apresentado na figura 2.14 é a fabricação de superfícies em forma de pirâmides truncadas, para diminuir os efeitos da reflexão da luz, conforme a Figura 2.15. Dessa forma, foi possível obter rendimentos maiores [52]. No mesmo trabalho, íons de Cs^+ foram implantados, dentro de um filme fino de oxinitreto como camada de passivação, gerando eficiências de até 19,3%.

Figura 2.15 – Secção transversal da célula aperfeiçoada para a melhora do rendimento

Fonte: Adaptado de HEZEL R., **Recent progress in MIS solar cells**, Progr. Photovoltaic: Res. Appl., v. 5, n. 2, p. 109–120, 1997.

Para a fabricação das células solares MIS é necessário efetuar as seguintes etapas de processo [52, 53]:

1. Limpeza da superfície do silício, utilizando dip-HF [31, 34].
2. Texturização da superfície no caso da Figura 2.14., por solução de KOH ou NaOH a 30%, em temperaturas entre 80 e 90° C [53].
3. Oxidação da superfície do silício para o crescimento do óxido fino de barreira [53, 54].
4. Depósito do metal de contato (alumínio) por evaporação [53, 54].
5. Sinterização do alumínio depositado [53, 54].
6. Litografia para a definição dos contatos [54].

7. Deposição de CsCl para introduzir os íons Cs^+ [54].

8. Deposição de Si_3N_4 a 250-400°C [54].

9. Deposição do material de cobertura.

2.5. "ENERGY HARVESTING"

A tecnologia para conversão de luz em energia elétrica estende-se para um mercado potencialmente explorável, como o aproveitamento de energia descartada por outros meios, ou *energy harvesting* (em tradução livre, colheita de energia ou colheita energética).

Nesta área, a energia desperdiçada por máquinas, motores e geradores de energia é coletada e transformada para alimentar dispositivos, tais como sensores para atividades médicas [54, 55], recarga de baterias de lítio usadas em telefones celulares [55] e dispositivos de segurança [55].

Os dispositivos de 'colheita energética' geralmente possuem:

- potência relativamente baixa [1];
- valores reduzidos de corrente de curto-circuito I_{sc} e/ou de tensão de circuito aberto V_{oc} , quando atuam ao ar livre [1, 56];
- baixa dependência de tecnologias específicas para o fornecimento de energia [1].

Boa parte dos dispositivos para "energy harvesting" aproveitam a energia luminosa de fontes como lâmpadas e refletores. operando em ambientes internos (*indoor*), não sendo necessário ter um perfil típico de uma célula solar MOS em ambiente exposto à luz solar (por padrão, AM1.5) desde que haja eficiência energética nos ambientes para os quais são projetados.

A tabela 2.4 mostra a iluminação típica em alguns dos dispositivos para *energy harvesting*. Nota-se uma faixa significativa de intensidades luminosas, em mW/cm^2 , cujas diferenças não são percebidas claramente pela maioria dos seres humanos, em decorrência de sua adaptação a diversos locais, por regulação da pupila [2]. Nota-se que os ambientes *indoor* (todos os não externos, na tabela) possuem intensidades luminosas nitidamente inferiores aos ambientes externos.

Tabela 2.4 - Intensidade luminosa em alguns ambientes

Ambiente	Intensidade luminosa (mW/cm^2)
Depósito	0,2 a 0,6
Escritório	0,9 a 1,2
Sala de reunião	1,1 a 1,7
Loja de departamentos	2,1 a 3,2
Externo, nublado	5 a 20
Externo, ensolarado sem nuvens	50 a 100

Fonte: EVANCZUK, 2015

Geralmente não se trabalha com a intensidade radiante incidente em mW/cm^2 , mas com a intensidade luminosa lx (lux), equivalente a 1 lúmen por metro quadrado. Para converter mW/cm^2 em lx , no comprimento de onda padrão (555 nm) [57], utiliza-se:

$$I_r (\text{lx}) = 6830 I_r (\text{W}/\text{m}^2) \quad (\text{Eq. 2.21})$$

Ou seja, 1 mW/cm^2 de luz monocromática a 555 nm corresponde a 6830 lx .

Os dispositivos fotovoltaicos convencionais, tendo por base a tecnologia de junção P-N, são projetados principalmente para ambientes externos. Sua eficiência alcança cerca de 18% [57], o qual não varia significativamente para os diversos ambientes. Ou seja, a célula solar convencional fornecerá bem menos energia dentro de uma loja de departamentos, cuja intensidade luminosa é de até 3,2 mW/cm^2 , segundo a tabela 2.4. Comparando este valor com a mesma célula em ambiente externo, esta ultrapassa 50 mW/cm^2 em condições sem nuvens.

Além disso, a faixa espectral do ambiente externo, como visto na figura 2.16 a seguir [58], é significativamente mais ampla em relação à de ambientes *indoor*, figura 2.17 [57], geralmente iluminados com diversos tipos de lâmpadas, principalmente as fluorescentes e, ultimamente, as baseadas em LEDs.

Figura 2.16. - Espectro eletromagnético da luz natural

Fonte: Adaptado de MAZZIO K. A., LUSCHOMBE C. K., **The future of organics photovoltaics**, Chem. Soc. Rev., v. 44, p. 78-90, 2014.

A figura 2.17 a seguir, por outro lado, exibe as curvas de intensidade luminosa em função do espectro eletromagnético, para duas das principais fontes de luz artificiais: lâmpadas fluorescentes e de LED branco.

Figura 2.17. - Espectro eletromagnético de luz fluorescente e de LED branco

Fonte: Adaptado de VIGNATI S., **Solutions for Indoor Light Energy Harvestings**, Tese de mestrado da Escola de Informação e Tecnologia de Comunicação de Estocolmo, Suécia, 2012.

Nota-se que na figura 2.17 que as faixas de comprimentos de onda emitidas pelas lâmpadas fluorescentes e de LED não vão muito além do limite para a luz visível (760 nm) para os dois casos de iluminação artificial.

As células destinadas aos ambientes *indoor* são melhor projetadas para atuarem nas condições artificiais de iluminação. Elas respondem eficientemente a condições de baixa iluminação, como se pode ver na figura 2.18 abaixo, que mostra uma série de gráficos $I \times V$ para diversas intensidades luminosas utilizando uma célula solar Sanyo AM-1815 feita a partir de silício amorfo e projetada para funcionar em ambientes internos [57]. Os pontos em destaque nos gráficos indicam onde a potência é máxima:

Figura 2.18 – Gráficos típicos para célula solar Sanyo AM-1815

Fonte: Adaptado de VIGNATI S., **Solutions for Indoor Light Energy Harvestings**, Tese de mestrado da Escola de Informação e Tecnologia de Comunicação de Estocolmo, Suécia, 2012.

Um exemplo relativamente recente de dispositivo para "colheita de energia" é um aparelho que usa células fotossensíveis subcutâneas (Figura 2.19), para fornecimento de energia destinada a equipamentos médicos implantados em pacientes, como marcapassos [59].

Figura 2.19 - Aparelho desenvolvido por Bereuter *et al.* com o propósito de fornecer energia a dispositivos implantados em pacientes. Tamanho aproximado: 10 x 10 cm².

Fonte: L. BEREUTER *et al.* **Energy Harvesting by Subcutaneous Solar Cells: A Long-Term Study on Achievable Energy Output**, Annals of Biomedical Society, BMES, 2016.

3. PROCEDIMENTOS EXPERIMENTAIS

Neste capítulo serão apresentados os procedimentos experimentais sobre a modelagem das características elétricas das células solares MOS fabricadas no âmbito dos trabalhos desenvolvidos no grupo de Superfícies, Interfaces e Deposição Eletroquímica (GSIDE) do LSI/PSI/EPUSP utilizando oxinitreto de porta ultra-fino (~2nm). Os oxinitretos de silício empregados no presente trabalho utilizaram a mesma receita empregada no trabalho de mestrado de Siano (2016) [34] onde concluiu-se que existe a presença das ligações incompletas do tipo Si≡N na interface dielétrico-silício capazes de gerar os chamados centros K que podem armazenar cargas de todas as polaridades dependendo da forma de ocupação pelos elétrons: K^0 (neutro quando ocupado por um elétron), K^+ (positivo quando desocupado) e K^- (negativo quando ocupado por dois elétrons). Também, é importante destacar que esses centros K agem com armadilhas anfóteras que podem armadilhar ou um elétron ou uma lacuna de acordo com as equações 3.1 e 3.2 a seguir [60]:

Dadas as características particulares das ligações SiN na proximidade da interface dielétrico-silício junto ao silício cristalino, o estado de preenchimento dos centros K será dependente da tensão aplicada na porta (V_G) conforme será mostrado no próximo capítulo sobre os resultados e discussão. Será mostrado que para a estrutura MOS fabricada em substrato tipo P que os centros K estarão predominantemente preenchidos com lacunas em todos os regimes de operação (acumulação, depleção e inversão) com concentração planar proporcional à tensão de polarização V_G e será o fator determinante na indução de uma região de depleção dentro do silício propícia para, mediante incidência de luz, gerar elétrons os quais irão tunelar através do dielétrico de porta. Baseado nesta característica particular dos nossos oxinitretos crescidos, no capítulo 4 será apresentada a modelagem do funcionamento de células solares MOS operando em regime inversão controlado por centros positivamente carregados na interface oxinitreto/silício, situação ainda não verificada na literatura para células solares MOS.

3.1 FABRICAÇÃO DAS CÉLULAS SOLARES MOS [34]

Foram utilizadas lâminas de silício com 3 polegadas de diâmetro tipo P, dopadas com boro, com espessura de $(380 \pm 25) \mu\text{m}$, orientação $\langle 100 \rangle$ e resistividade na faixa de $1-10 \Omega\text{cm}$. Foi tomado o cuidado de serem replicadas amostras sempre com lâminas do mesmo lote para que não houvesse incertezas com relação à esse parâmetro na hora de analisar os resultados.

A primeira etapa de processo foi a limpeza química das lâminas de silício a fim de remover a contaminação por metais ($< 1 \times 10^{10} \text{cm}^{-2}$) e o material particulado ($< 10 \text{cm}^{-2}$) sem alterar substancialmente a rugosidade superficial inicial ($< 0,05 \text{nmRMS}$). Foi adotada uma limpeza RCA seguida de uma imersão em solução diluída de ácido fluorídrico (“dip” em d-HF) [49, 61-66]. O detalhamento do processo de limpeza (RCA+d-HF) pode ser visto de acordo com as etapas que seguem:

- Enxágue em água deionizada (DI) por 5 min. em fluxo constante e temperatura ambiente;
- Imersão em solução de 4 H_2O + 1 H_2O_2 (30%) + 0,5 NH_4OH (35%) por 15 min na temperatura de 90°C (Etapa RCA-1);
- Enxágue em água deionizada (DI) por 5 min em fluxo constante e temperatura ambiente;
- Imersão em solução de 4 H_2O + 1 HCl (36,5%) por 15 min na temperatura de 90°C (Etapa RCA-2);
- Enxágue em água deionizada (DI) por 5 min em fluxo constante na temperatura ambiente;
- Imersão em solução 80 H_2O + 1 HF (49%) durante 100 s na temperatura ambiente;
- Enxágue em água deionizada (DI) por 3 min em fluxo constante na temperatura ambiente;
- Secagem com jato de nitrogênio (N_2) ultrapuro.

Vale ressaltar que todo o processo limpeza foi feito em uma capela química (com exaustão e fluxo de ar laminar) localizada dentro da sala limpa do LSI/PSI/EPUSP garantindo um ambiente adequado (classe 100) para o processo.

Após o processo de limpeza química, as lâminas de silício foram inseridas dentro de um ambiente de espera em nitrogênio ultrapuro de um forno convencional ultra-limpo a fim de assegurar que não houvesse re-contaminação por metais ou partículas [64]. No processo de oxinitreção térmica rápida, apenas é possível processar uma lâmina por vez, de forma que as outras lâminas ficaram na espera em ambiente de N_2 ultrapuro até o momento de seu processamento.

Para o crescimento do oxinitreto (SiO_xN_y), foi utilizado um forno com aquecimento por resistências e um aparato de quartzo onde apenas uma lâmina é processada por vez na posição vertical. O forno foi aquecido nas temperaturas de processo (700 ou 850°C) adotadas em trabalhos do grupo GSIDE e os gases ultrapuros de entrada tiveram fluxos ajustados na proporção $5N_2 : 1O_2$ (2 l/min. de N_2 e 0,4 l/min. de O_2), sendo que o N_2 foi mantido fluindo dentro do forno durante todo o processo e o O_2 somente foi ligado no momento de realizar a oxinitreção térmica rápida durante intervalos de 300s na temperatura de 700°C ou 80s na temperatura de 850°C seguido de tratamento de passivação na mesma temperatura de processo durante 80s antes da retirada rápida do forno. A pressão total de entrada da mistura de gases (N_2 e O_2) foi mantida constante em 15 psi. O aparato empregado na nitreção térmica rápida pode ser visto na figura 3.1.

Figura 3.1 – Forno de RTP destacando o aparato de quartzo de baixa massa térmica responsável pela inserção e retirada da amostra de dentro do forno. A seguir em destaque a posição inicial da lâmina de silício (posição A) e posição intermediária (final) da mesma (posição B).

Fonte: CHRISTIANO, V. **Fabricação de células solares MOS utilizando oxinitretos de silício obtidos por processamento térmico rápido**. Qualificação (Doutorado) – Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2013

O aparato mostrado na figura 3.1 possui uma vareta de apoio longa cuja extremidade possui pequenos “pinos de fixação” onde foi apoiada a lâmina. Todo o aparato foi fabricado em quartzo a fim de garantir alto grau de limpeza durante o processo e pequenos pinos de apoio com massa térmica desprezível face a massa térmica da lâmina de silício. Desta forma, foi possível assegurar temperatura uniforme na direção radial da lâmina de silício. A velocidade de entrada da vareta foi fixada em aproximadamente 10cm/s para proporcionar uma rampa de subida da temperatura com velocidade de aproximadamente 50°C/s [64-65].

O detalhamento passo-a-passo das etapas de oxinitreção térmica rápida foram os seguintes:

- Passagem de uma das lâmina do ambiente de espera de N_2 ultrapuro para o carregador de quartzo indicado na figura 3.1;
- Posicionamento da lâmina na boca do forno (posição A na figura 3.1) e espera de 240s apenas em fluxo de N_2 ;
- Acionamento do fluxo de O_2 , e espera por 60s, agora na presença dos fluxos de N_2 e O_2 ;
- Ainda com fluxos de N_2 e O_2 ligados e com o auxílio da vareta de apoio, inserimos a lâmina na velocidade aproximada de 10cm/s até a posição intermediária do tubo de quartzo (posição B), em 5 segundos, e foi deixado nessa posição por durante o tempo de processo para crescer um oxinitreto de silício com espessura de 2nm;
- Ainda na posição B, no centro do forno, foi desligado o fluxo de O_2 e a lâmina de silício foi mantida nessa posição por mais 80s, apenas com o fluxo de N_2 ligado, para melhorar a qualidade da interface oxinitreto-silício;
- Foi feito o retorno da vareta até a posição inicial (posição A), na boca do forno, em 5 segundos seguido de espera por mais 300s, ainda com N_2 ligado;
- Foi retirado o aparato de quartzo com a lâmina de dentro do forno, levando-o imediatamente para dentro de uma capela com fluxo laminar seguido de espera por aproximadamente 180s até a lâmina resfriar o suficiente para atingir a temperatura ambiente;
- A lâmina foi removida do carregador de quartzo e armazenada em placa de Petri previamente limpa.

Imediatamente após a obtenção do oxinitreto de porta, as lâminas foram levadas para deposição de aproximadamente 200nm de Al por processo de evaporação térmica em uma metalizadora Auto 306 EDWARDS. Na sequência, foram definidos capacitores MOS quadrados de $300 \times 300 \mu\text{m}^2$ e a estrutura de “espinha de peixe”, de acordo com os trabalhos desenvolvidos por Verônica Cristiano, integrante do GSIDE [65] do LSI/PSI/EPUSP com as dimensões mostradas na tabela 3.1.

Tabela 3.1 – Geometria das células solares MOS: largura de linha (L), distância entre linhas (D), número de linhas (N° L), área e perímetro.

Dispositivo	L (μm)	D (μm)	N° L	Área (cm^2)	Perímetro (cm)
	50x50	50	50	180	1,63	651,6
	50x100	50	100	120	1,09	434,4
	100x100	100	100	90	1,63	325,8
	100x150	100	150	71	1,34	257,0

Fonte: CHRISTIANO, 2013 [65]

Por fim, o óxido crescido nas costas foi removido e uma nova camada de 200 nm de alumínio foi evaporada para formação do contato elétrico traseiro das células solares.

3.2. OBTENÇÃO DA DOPAGEM A PARTIR DA CURVA $1/C^2 \times V_g$

A característica $1/C^2 \times V_g$ costuma ser levantada a partir da extração da curva experimental $C \times V_G$ pulsada, isto é, a tensão V_G costuma ser aplicada na forma de degrau de tensão para promover o regime de depleção profunda com patamar final associado a diversas larguras de depleção [34]. Por outro lado, devido à forma particular de funcionamento das nossas células solares e capacitores MOS fabricadas, com base na atuação dos centros K, será mostrado no capítulo 4 que a aplicação de V_g constante impõe naturalmente a depleção profunda o que significa que podemos extrair diretamente a característica $1/C^2 \times V_g$ a partir da curva experimental $C \times V_g$ e obter a dopagem do substrato e a tensão de faixa plana. O

Apêndice II detalha a dedução da obtenção desses parâmetros. Apenas foi repetido a seguir a equação 3.1 que permite obter a dopagem N_A do substrato tipo P empregado a partir da inclinação $tg\alpha$ da curva $1/C^2 \times V_g$:

$$N_A = \frac{2}{q \cdot tg\alpha \cdot A^2 \cdot \epsilon_0 \epsilon_{Si}} \quad (\text{Eq. 3.3})$$

onde:

q = carga fundamental;

$tg\alpha$ = tangente do ângulo de inclinação da reta formada pela parte linear da curva $1/C^2 \times V_g$;

A = área do capacitor MOS;

ϵ_0 = permissividade no vácuo;

ϵ_{Si} = permissividade relativa do silício.

3.3 PROCEDIMENTO PARA OBTENÇÃO DO POTENCIAL DE SUPERFÍCIE E DA TENSÃO DE BANDA PLANA.

Conforme já mencionado no item anterior e, também, baseado no que será mostrado no capítulo 4, as células solares e capacitores MOS fabricados em substrato P entram naturalmente em depleção profunda para $V_g > \phi_{MS}$. Considerando esse comportamento experimental, no Apêndice V foi deduzida a capacitância do silício C_s em função do potencial de superfície ψ_s em regime de depleção profunda a qual é dada por:

$$C_s = \frac{\epsilon_o \epsilon_{Si} [1 - \exp(-\frac{q\psi_s}{k_B T})] \cdot A}{\sqrt{\frac{2\epsilon_o \epsilon_{Si}}{qN_A}} \cdot \sqrt{\frac{k_B T}{q} [\exp(-\frac{q\psi_s}{k_B T}) - 1] + \psi_s}} \quad (\text{Eq. 3.4})$$

onde A é a área do capacitor MOS e N_A é a dopagem.

O potencial de superfície ψ_s na equação 3.4 foi obtido por processo iterativo. Na sequência, a partir dos valores de ψ_s , foi possível levantar a curva de ψ_s em

função de V_g e extrair a tensão V_{FB} (tensão de banda plana) na intersecção da reta obtida com o eixo das abcissas conforme mostrado na figura 3.2.

Figura 3.2 - Obtenção do valor da tensão de banda plana V_{FB} a partir do gráfico $\psi_s \times V_g$

Fonte: Autor

3.4. MODELAGEM DA CARACTERÍSTICA $I \times V_g$

3.4.1. Regime de acumulação

Na região de acumulação, como mostrado na figura 2.5, a densidade de corrente de tunelamento (J) pode ser escrita como em [7]: $J = J_{DTE} + J_{INE} + J_{TEDit}$, sendo J_{DTE} a densidade de corrente de tunelamento direto, J_{INE} a densidade de corrente inelástica por armadilhas e J_{TEDit} é a densidade de corrente de elétrons de porta por estados de interface do anodo [7].

$$J_{TEDit} = \frac{qn_m m^* k_B T}{2\pi^2 \hbar^3} \int_{\Phi_{Cs}}^{\Phi_{Cs}} \ln(1 + \exp(\frac{\Phi - \Phi_f}{k_B T})) P_T(\Phi) \sigma_T D_{it}(\Phi) d\Phi \quad (\text{Eq. 3.5})$$

No tunelamento, existe uma corrente associada aos estados de interface do metal, que constitui parte da corrente total de tunelamento. Pela Equação 3.5, que mostra a corrente J_{TEDit} , nota-se o emprego de uma integral complexa. As constantes associadas à densidade de corrente são:

n_m = fator de degenerescência de banda, dependente da simetria cristalina; para silício com orientação $\langle 100 \rangle$, $n_m = 1$.

m^* é a massa efetiva do elétron, por densidade de estados; sendo a massa do elétron ($9,109383 \times 10^{-28}$ g) vezes o fator de densidade de estados (1,08).

k_B é a constante de Boltzmann ($k_B = 1,38064 \times 10^{-16}$ cm² g s⁻² K⁻¹)

$T = 300$ K

$\hbar$ é a constante de Planck reduzida, equivalente à constante de Planck ($6,62607 \times 10^{-30}$ cm² kg s⁻¹) dividida por 2π . A título de simplificação, a densidade de interfaces de estados D_{it} e o fator σ_T , que é a secção transversal das interfaces, são trabalhadas como constantes. Dessa forma [7]:

$D_{it} = 4 \times 10^{10}$ cm⁻² eV⁻¹, vinculada à diferença $E - E_f = q\phi_f = k_B T \ln(N_A/n_i)$.

σ_T é, em princípio, constante, mas será um fator de ajuste para o casamento entre os cálculos da densidade de corrente J_{TEDit} .

Destaca-se a seguir a integral extraída da Equação 3.5 a fim de explicar a variável $P_T(\Phi)$:

$$\int_{\Phi_{Cg}}^{\Phi_{Cs}} P_T(\Phi) \cdot \ln(1 + \exp(\frac{\Phi_f - \Phi}{k_B T})) d\Phi \quad (\text{Eq. 3.6})$$

onde:

$$P_T(\Phi) = \exp\left\{-\frac{4\pi}{h} \int_{t_{ox}}^0 [2m(\Phi_{barreira}(x) - \Phi)]^{\frac{1}{2}} dx\right\} \quad (\text{Eq. 3.7})$$

onde h é a constante de Planck ($h = 6,62607 \times 10^{-30}$ cm² kg s⁻¹ ou $h = 4,135667 \times 10^{-15}$ eV s⁻¹). $\Phi_{barreira}$ é o nível energético mais alto da barreira (dielétrico). A equação 3.6 não tem solução trivial, sendo melhor usar métodos de discretização conforme detalhado no Apêndice VI.

Na modelagem de J_{INE} , conforme mostrado na figura 2.5 [7], demonstra-se que:

$$J_{INE} = q\sigma N_{tr} v_{th} T_2 p_s \quad (\text{Eq. 3.8})$$

onde σ é a secção transversal da armadilha, N_{tr} é a concentração de armadilhas, v_{th} é a velocidade térmica, T_2 é a probabilidade de tunelamento entre a armadilha e o substrato e p_s é a concentração de lacunas no substrato. Esta equação é válida para na situação em que há o equilíbrio entre J_e e J_h , que são as densidades de corrente de tunelamento inelástico dos portadores. Considera-se que esse equilíbrio ocorre em diferentes posições ao longo do dielétrico sendo que a densidade de corrente assume valor máximo a cerca de 0,8 nm (8 Å) da interface óxido-semicondutor.

σ é um parâmetro de ajuste, de acordo com V_g .

N_{tr} é uma concentração fixa e invariante com V_g .

p_s é a concentração de lacunas no substrato e vale aproximadamente a dopagem, na acumulação, e $p_s = n_i \exp[\frac{q(\phi_f - \psi_s)}{k_B T}]$ na depleção [7].

v_{th} é a velocidade térmica que é constante e que é dada por [7]:

$$v_{th} = \sqrt{\frac{3k_B T}{m^*}} \quad (\text{Eq. 3.9})$$

onde k_B é a constante de Boltzmann ($k = 1,38064 \times 10^{-16} \text{ cm}^2 \text{ g s}^{-2} \text{ K}^{-1}$), m^* é a massa efetiva do elétron que se desloca para o substrato ($1,08 \times 9,109383 \times 10^{-28} \text{ g}$) e T é a temperatura em K (300 K).

De todas as grandezas envolvidas, a probabilidade de tunelamento T_2 é a mais trabalhosa para o cálculo. Ela pode ser calculada da forma similar à probabilidade $P_T(\Phi)$ conforme detalhada no Apêndice VI:

$$T_2(\Phi) = \exp\left\{-\frac{4\pi}{h} \sum_{i=1}^{20} [\sqrt{2m^* (\Phi_{barreira} - \Phi)}] \Delta t\right\}, \quad \Delta t = \frac{t_{ox}}{20} x \frac{x_{trap}}{t_{ox}} \quad (\text{Eq. 3.10})$$

Onde:

$$\Phi_{barreira}(x_i) - \Phi = q\phi_f + 0,55 + \chi_{Si} - qV_g - q\frac{x_{trap}}{t_{ox}}V_{ox}\left(\frac{x_i}{t_{ox}}\right) - \Phi_{ox} \quad (\text{Eq. 3.11})$$

Neste caso, a posição efetiva das armadilhas foi ajustada para $x_{trap} = 0,8$ nm e a espessura do óxido considerada é de $t_{ox} = 2$ nm, com $\phi_f = 0,289$ V (para $N_A = 10^{15}$ cm⁻³), $\chi_{Si} = 4,15$ eV e $\Phi_{ox} = 0,9$ eV. V_g (tensão de porta) e V_{ox} foi calculado de acordo com as regiões de acumulação e depleção. Na acumulação, V_{ox} é dado por $V_{ox} = V_g - V_{FB}$.

3.4.2. Regime de depleção ($V_{FB} < V_g < 0$)

Neste caso podem ser aplicadas as equações do caso anterior, mas devemos levar em conta a mudança de comportamento do dispositivo MOS, em relação ao regime de acumulação. Na região de depleção devemos considerar o potencial de superfície $\psi_s = V_g - V_{ox} - \phi_{MS}$, onde:

$$V_{ox} = -\frac{Q_s}{C_{ox}} \quad (\text{Eq. 3.12})$$

onde Q_s é a carga no silício função da dopagem e da largura da região de depleção W_d , ou seja:

$$Q_s = -qN_A W_d \quad (\text{Eq. 3.13})$$

a qual, por sua vez, depende da raiz de ψ_s

$$W_d = \sqrt{\frac{2\psi_s \epsilon_{Si}}{qN_A}} \quad (\text{Eq. 3.14})$$

A partir das equações 3.12, 3.13 e 3.14, chega-se à equação 3.15, na qual V_{ox} pode ser escrito em função de V_g e de ϕ_{MS} :

$$V_{ox} = \frac{\sqrt{2qN_A \epsilon_{Si} \psi_s}}{C_{ox}} \quad (\text{Eq. 3.15})$$

3.4.3. Regime de depleção profunda ($V_g > 0$)

Nas tensões positivas, a densidade de corrente é formada majoritariamente pelo tunelamento direto e pelo tunelamento por armadilhas [7]. Neste caso, a equação de corrente de elétrons tunelando a partir do silício é dada por [7]:

$$J_{INE} = q\sigma N_{tr} v_{th} T_2 n_s \quad (\text{Eq. 3.16})$$

onde n_s é a concentração gerada de elétrons no substrato proporcional a largura da camada de depleção que função da raiz de ψ_s [7].

4. RESULTADOS EXPERIMENTAIS E DISCUSSÃO

Neste capítulo serão apresentados os resultados e a discussão sobre a modelagem das características elétricas de células solares MOS operando em regime inversão controlado por centros positivamente carregados na interface oxinitreto/silício. Este tipo de célula solar foi recentemente fabricada pela primeira vez no âmbito dos trabalhos desenvolvidos no grupo de Superfícies, Interfaces e Deposição Eletroquímica (GSIDE) do LSI/PSI/EPUSP utilizando dielétricos de porta ultra-finos ($\sim 2\text{nm}$). A receita de crescimento de dielétrico ultra-fino desenvolvida foi no sentido resolver um dos grandes problemas apontados na literatura para as células solares MOS que é a reprodutibilidade e uniformidade da espessura do dielétrico ao longo de áreas extensas de alguns cm^2 (Har-Lavan, 2013).

O presente trabalho se insere no âmbito do projeto "Pesquisa e Desenvolvimento de Células Solares MOS Utilizando Processamento Térmico Rápido (RTP)" referente ao edital temático CNPQ/05/2010 - Linha de Pesquisa 4: Energia Solar Fotovoltaica, com recursos especificamente destinados a construção de células solares MOS sobre grandes áreas em substratos de silício. O procedimento de fabricação de células solares MOS vem sendo então desenvolvido e aprimorado pelo grupo GSIDE/LSI/EPUSP. As células solares MOS desenvolvidas são basicamente diodos túnel MOS ocupando extensas áreas em lâminas de 3 e 4 polegadas de diâmetro.

No início do presente trabalho foi desenvolvido um programa de computador dedicado à modelagem das células solares MOS operando em regime de inversão induzido por cargas positivas localizadas na interface $\text{SiN}_x\text{O}_y/\text{Si}$. Foi empregado o método das diferenças finitas para resolver numericamente as equações de Poisson, transporte de carga e continuidade no caso unidimensional ao longo da estrutura MOS com a possibilidade de variar dinamicamente a carga na interface $\text{SiN}_x\text{O}_y/\text{Si}$ em função da tensão V_g aplicada. Essa possibilidade de simulação foi fundamental para o desenvolvimento do tema do trabalho e teve que ser desenvolvida dado que a mesma não foi encontrada de forma amigável e/ou direta nos programas simuladores comerciais existentes como o Atlas (Silvaco), e isto constitui uma das contribuições do presente trabalho como destacado no resumo. O Apêndice III

mostra em detalhe o equacionamento e a estrutura do programa desenvolvido e o Apêndice IV, por sua vez, apresenta a validação do programa no que se refere: (a) capacitores nMOS e pMOS operando em regime convencional de inversão; (b) distribuição de portadores em células solares MOS sob iluminação.

No presente trabalho, como já mencionado, vamos apresentar a modelagem das características elétricas de células solares MOS desde áreas muito pequenas ($9 \times 10^{-4} \text{cm}^2$) até áreas grandes (4cm^2). O foco da modelagem serão as características elétricas CxV_g e IxV_g das estruturas MOS fabricadas.

4.1. MODELAGEM DAS CARACTERÍSTICAS ELÉTRICAS C-V DE CÉLULAS SOLARES MOS

As características elétricas CxV_g e GxV_g medidas em células MOS com área de $9 \times 10^{-4} \text{cm}^2$ estão apresentadas no Apêndice I e foram extraídas em 5 regiões diferentes em lâminas com 3 polegadas de diâmetro (chanfro, centro, oposto, direita e esquerda). A figura 4.1 ilustra curvas $C \times V_g$ e $G \times V_g$ típicas de uma célula MOS com área de $9 \times 10^{-4} \text{cm}^2$ e dielétrico de porta crescido em 850°C de acordo com o procedimento descrito no capítulo 3 [34].

Figura 4.1 - Curvas $C \times V_g$ e $G \times V_g$ típicas de uma célula MOS com área de $9 \times 10^{-4} \text{ cm}^2$ e óxido de porta crescido na temperatura de 850°C .

Fonte: Adaptado de ALANDIA B. S. **Fabricação e caracterização experimental de diodos tunel MOS Al/SiOxNy/Si(p) e TiN/SiOxNy/Si(p)**, Dissertação de Mestrado da Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, 2016.

Baseado em simulações numéricas unidimensionais utilizando o programa de computador desenvolvido no âmbito do presente trabalho (veja Apêndices III e IV), foi possível explicar a presença dos picos 1 e 2 na curva característica $C \times V_g$ conforme será mostrado detalhadamente em breve. Por outro lado, um fato bem conhecido da literatura é a previsão de que pode haver diminuição da capacitância de acumulação da estrutura MOS quando a corrente através da mesma se intensifica de forma substancial a ponto de modificar a distribuição de cargas [67].

Inicialmente, antes de apresentar as simulações numéricas, é importante explicar qualitativamente a presença dos dois picos de capacitância presentes na curva $C \times V_g$ assim como o pico de condutância presente curva $G \times V_g$, como mostrado na figura 4.1 para um dielétrico típico crescido em 850°C . O primeiro deles (pico 1) está localizado em uma tensão de porta mais negativa, cujo máximo aparece devido à diminuição da capacitância quando a corrente de tunelamento fica suficientemente elevada. O aumento substancial da corrente para tensões de porta suficientemente negativas é corroborado pelo aumento da condutância (figura 4.1) na região do pico 1 de capacitância para tensões mais negativas. O pico 2 de

capacitância de menor tamanho ocorre em uma tensão menos negativa que corresponde aproximadamente à tensão de banda plana (V_{fb2}). Para entender porque o pico 2 aparece, é fácil verificar que ao diminuir a tensão de porta negativamente a partir de 0V atinge-se na tensão V_{fb2} o máximo do pico 2, situação na qual deixa de existir o efeito de blindagem da região de depleção. A partir desse ponto, para tensões mais negativas, a estrutura MOS tende a entrar em regime de acumulação, a corrente de tunelamento tende a subir e, concomitantemente, a capacitância tende a começar a cair, delineando dessa forma o pico 2.

Porém, devido à existência dos centros K localizados no dielétrico junto à interface dielétrico/silício [34] estes passam a ficar carregados positivamente na acumulação e, por sua vez, induzem novamente uma região de depleção no silício. Nesse caso, volta a ocorrer um efeito de blindagem atribuído a essa nova região de depleção, a corrente de fuga volta a cair e a capacitância volta a subir. Concomitantemente, ocorre um máximo de condutância no pico 3 da curva $G \times V_g$ (V_K) porque a corrente de tunelamento passa a suprir o carregamento dos centros K até chegar em uma tensão V_K ligeiramente mais negativa do que V_{fb2} . Mais tarde, após o carregamento aparentemente total dos centros K com cargas positivas, a tensão de banda plana passa para um valor mais alto V_{fb1} correspondente ao pico 1. Nesse caso, quando a tensão V_{fb1} é atingida, deixa de existir novamente o efeito de blindagem da região de depleção. A partir desse ponto, para tensões mais negativas do que V_{fb1} , a estrutura MOS tende a entrar em regime de acumulação, a corrente de tunelamento tende a subir e, concomitantemente, a capacitância tende a começar a cair, delineando dessa forma o pico 1, de acordo com a figura 4.2 a seguir.

Figura 4.2 – Curvas $C \times V_g$ e $G \times V_g$ típicas de uma célula MOS com área de $9 \times 10^{-4} \text{ cm}^2$ e óxido de porta crescido na temperatura de 700°C

Fonte: ALANDIA B. S. **Fabricação e caracterização experimental de diodos tunel MOS Al/SiOxNy/Si(p) e TiN/SiOxNy/Si(p)**, Dissertação de Mestrado da Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, 2016.

Para o dielétrico típico crescido em 700°C , a fenomenologia observada resultou semelhante àquela já descrita para os dielétricos crescidos em 850°C . Apenas cabe observar que os picos 1, 2 e 3 estão melhor delineados porque a corrente de tunelamento acaba sendo maior para 700°C quando $V_g < V_{fb2}$ devido à maior condutância observada nessa faixa (compare a condutância da curva típica na figura 4.1 com a condutância na curva típica da figura 4.2 para $V_g < V_{fb2}$). Essa maior corrente de tunelamento acaba fazendo com que o nível máximo de capacitância atingido seja menor para 700°C , o que aproxima as capacitâncias máximas dos picos 1 e 2 e faz com que fiquem melhor delineados de forma relativa.

Um outro fato muito relevante observado nas figuras 4.1 e 4.2 é o regime de depleção profunda observado para $V_g > V_{fb2}$, ou seja, aparentemente não forma camada de inversão e a largura de depleção aumenta progressivamente com o aumento de V_g . Para sondar a possibilidade de ser um fenômeno de depleção profunda controlado pela tensão V_g que possivelmente estabelece uma corrente de

tunelamento através do dielétrico de porta que acaba drenando toda a camada de inversão como se fosse um degrau de tensão V_g , seguimos as seguintes etapas:

- a) Extração da dopagem do substrato a partir da inclinação na característica $1/C^2 \times V_g$ conforme o procedimento indicado no item 3.2 e do Apêndice II.
- b) Obtenção do potencial de superfície em função da tensão de porta ($\psi_s \times V_g$) e a tensão de faixa plana V_{fb} de acordo com o procedimento indicado no item 3.3 e do Apêndice V.

Foram traçadas as curvas $1/C^2 \times V_G$ para todas as características $C \times V_G$ apresentadas no Apêndice I. A figura 4.3 mostra as curvas $1/C^2 \times V_G$ típicas para capacitores MOS com área $A = (300 \times 300) \mu m^2$ com dielétricos crescidos de acordo com as duas receitas descritas no capítulo 3 nas temperaturas de 700°C e 850°C. É possível observar na figura 4.3 que $1/C^2$ em função da tensão de porta é praticamente linear com excelentes coeficiente de correlação ($R = 0,9976$ para 700°C e $R = 0,9988$ para 850°C). A partir da inclinação dos gráficos típicos indicados na figura 4.3 e dos gráficos $1/C^2 \times V_G$ levantados para todas as curvas $C \times V_g$, obteve-se as dopagens médias para 700 e 850°C conforme indicado na Tabela 4.1. Na sequência, foram obtidos todos os gráficos do potencial de superfície ψ_s em função da tensão de porta V_g que resultaram todos praticamente lineares com excelente coeficiente de correlação ($R > 0,999$). Nos pontos de cruzamento das retas com o eixo horizontal V_g , foram obtidos as tensões de banda plana cujas médias estão indicadas na tabela 4.1 para 700 e 850°C, respectivamente.

Figura 4.3 - Curvas $1/C^2 \times V_g$ típicas para amostras fabricadas segundo as receitas(a), 700°C e (b) 850°C.

(a)

(b)

Fonte: Autor

Tabela 4.1 – Valores teóricos das dopagens de substrato (N_A) e da tensão de banda plana (V_{FB}) e diferença de função trabalho metal-semicondutor (ϕ_{MS})

Amostra	N_A (cm ⁻³)	V_{fb} (V)	ϕ_{MS} (V)
Receita 700°C	$(5,74 \pm 0,32) \times 10^{14}$	-0,732	~-0,8
Receita 850°C	$(4,65 \pm 0,19) \times 10^{14}$	-0,738	~-0,8

Fonte: Autor

O primeiro ponto a destacar na tabela 4.1 é o fato da tensão de faixa plana V_{fb} coincidir aproximadamente com a diferença de função trabalho (ϕ_{MS}) além da relação linear obtida entre o potencial de superfície ψ_s e a tensão V_g . Esses fatos permitem concluir que a estrutura MOS entra em regime de depleção profunda para $V_g > \phi_{MS}$. Além disso, também podemos concluir que a tensão de faixa plana V_{fb2} extraída do pico 2 a partir da característica CxV_g praticamente coincide com a tensão de faixa plana obtida pelo método indicado na tabela 4.1, ou seja, $V_{fb2} = V_{fb} \approx \phi_{MS}$.

Nas tabelas 4.2 e 4.3 são mostrados os valores calculados do potencial de superfície (ψ_s) e da largura de depleção (W_d) para $V_g = \phi_{MS}, -0,5; 0; 0,5; 1; 1,5$ e $2V$, obtidos a partir das equações V.8 (Apêndice V) e A2.2 (Apêndice II), respectivamente. Utilizando a equação V.12 (Apêndice V), reproduzida a seguir, determinamos também a carga na interface SiN_xO_y/Si :

$$QIq = C_{ox} \cdot \frac{1}{q} \cdot \frac{Q_{interface}}{C_{ox}} = C_{ox} \cdot \frac{1}{q} \cdot (V_g - V_{fb} - \psi_s) \quad (4.1)$$

É importante destacar nas tabelas 4.2 e 4.3 que a densidade de cargas positivas na interface SiN_xO_y/Si (QIq) além de ser positiva, aumenta progressivamente a medida que o potencial de superfície ψ_s ou a tensão de porta V_g aumentam. Em outras palavras, a densidade de cargas positivas (QIq) na interface se acomoda de forma que a largura da região de depleção profunda W_d se forme sem uma camada de inversão, tanto para os dielétricos crescidos a $850^\circ C$ (Tabela 4.2) como também para aqueles que foram crescidos a $700^\circ C$ (Tabela 4.3).

Tabela 4.2 - Valores calculados e simulados de potencial de superfície (ψ_s), densidade de cargas da interface $\text{SiN}_x\text{O}_y/\text{Si}$ (Qlq) e largura da região de depleção (W_d) para $N_A = 4,2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ e $V_{fb} = -0,738 \text{ V}$ (Receita de 850°C)

V_g (V)	$V_g - V_{fb}$ (V)	ψ_s calculado (V)	ψ_s simulado (V)	Qlq calculado (10^{12} cm^{-2})	Qlq simulado (10^{12} cm^{-2})	W_d calculado (10^{-4} cm)	W_d simulado (10^{-4} cm)
2	2,738	2,736	2,663	2,993	2,99	2,66	2,66
1,5	2,238	2,236	2,046	2,446	2,45	2,44	2,42
1	1,738	1,739	1,638	1,899	1,90	2,11	2,11
0,5	1,238	1,237	1,207	1,353	1,35	1,82	1,83
0	0,738	0,737	0,720	0,807	0,80	1,36	1,35
-0,5	0,238	0,238	0,232	0,260	0,26	0,74	0,62
-0,738	0	0	-5,2E-08	0	0	0	0

Fonte: Autor

Tabela 4.3 – Valores calculados e simulados de potencial de superfície (ψ_s), densidade de cargas da interface $\text{SiN}_x\text{O}_y/\text{Si}$ (Qlq) e largura da região de depleção (W_d) para $N_A = 4,7 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ e $V_{fb} = -0,732 \text{ V}$ (Receita de 700°C)

V_g (V)	$V_g - V_{fb}$ (V)	ψ_s calculado (V)	ψ_s simulado (V)	Qlq calculado (10^{12} cm^{-2})	Qlq simulado (10^{12} cm^{-2})	W_d calculado (10^{-4} cm)	W_d simulado (10^{-4} cm)
2	2,732	2,707	2,689	6,780	6,78	2,51	2,51
1,5	2,232	2,212	2,197	5,540	5,54	2,26	2,29
1	1,732	1,716	1,704	4,299	4,30	1,99	1,99
0,5	1,232	1,221	1,212	3,058	3,06	1,67	1,66
0	0,732	0,725	0,720	1,817	1,81	1,28	1,27
-0,5	0,232	0,230	0,228	0,576	0,58	0,69	0,62
-0,732	0	0	-5,2E-08	0	0	0	0

Fonte: Autor

A fim de corroborar os valores calculados de potencial de superfície ψ_s e densidade de carga de interface Qlq vinculada aos centros K, realizamos simulações numéricas empregando o programa de computador descrito nos Apêndices III e IV. As figuras 4.4 e 4.5 ilustram os resultados de simulação da distribuição $n - p + N_A$ em função da profundidade no silício com $V_g = 2\text{V}$ e para as receitas de 700°C e 850°C , respectivamente. O critério empregado para determinar a largura de depleção profunda W_d via simulação numérica foi adotar o valor de profundidade em que a distribuição de carga $n - p + N_A$ na região de depleção caia pela metade conforme indicado nas figuras 4.4 e 4.5.

Figura 4.4 – Resultados de simulação de $(n - p + N_A)$ x profundidade no silício para a amostra de 700°C ($V_g = 2$ V e $N_A = 4,7 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$).

Fonte: Autor

Figura 4.5 - Resultados de simulação de $(n - p + N_A)$ x profundidade no silício para a amostra de 850°C ($V_g = 2$ V e $N_A = 4,2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$).

Fonte: Autor

O procedimento empregado para fazer as simulações numéricas foi o seguinte:

a) A densidade de cargas Q_{lq} empregada nas simulações numéricas foi o valor arredondado do valor calculado de Q_{lq} com duas casas depois da vírgula nas tabelas 4.3 e 4.4.

b) A largura da região de depleção W_d , simulada de acordo com o critério apresentado nas figuras 4.4 e 4.5, foi ajustada, por meio do uso de diversas compilações no programa, até coincidir com os valores calculados de W_d .

c) O ajuste de W_d para cada valor de V_g foi realizado através de pequenas variações na concentração de dopantes NA ($N_A = 4,7 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ para 700°C e $N_A = 4,2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ para 850°C).

Após realizar as simulações numéricas de acordo com o procedimento anterior, observou-se que os potenciais de superfície simulados praticamente coincidiram com os valores calculados nas tabelas 4.2 e 4.3 o que indica excelente concordância entre a modelagem teórica e a simulação numérica.

Baseado no procedimento empregado na simulação numérica das amostras com dielétricos produzidos a 700°C e a 850°C, os valores de N_A foram ajustados, conforme a tabela 4.4 a seguir:

Tabela 4.4 – Valores ajustados das dopagens NA nas simulações numéricas

Amostra	$N_A \text{ (cm}^{-3}\text{)}$	$V_{FB} \text{ (V)}$
700°C	$4,7 \times 10^{14}$	-0,732
850°C	$4,2 \times 10^{14}$	-0,738

Fonte: Autor

Comparando os valores de dopagem N_A simulados (Tabela 4.4) com os valores obtidos a partir da inclinação $1/C^2 \times V_g$ (Tabela 4.1), podemos concluir, também para o caso da dopagem, uma concordância muito boa entre os valores obtidos experimentalmente e o os valores obtidos via simulação numérica.

A figura 4.6 a seguir mostra a sobreposição dos gráficos de $\psi_s \times V_g$ e $Q_{lq} \times V_g$ simulados para os dielétricos crescidos a 700°C e 850°C, respectivamente.

Figura 4.6 - Sobreposição dos gráficos de $\psi_s \times V_g$ e $Q_{lq} \times V_g$ simulados para os dielétricos crescidos a: (a) 700°C e (b) 850°C.

(a)

(b)

Fonte: Autor

É importante destacar na figura 4.6 que a densidade de cargas positivas na interface $\text{SiN}_x\text{O}_y/\text{Si}$ (Q_{lq}) além de ser positiva, tem comportamento praticamente linear com o potencial de superfície ψ_s ou a tensão de porta V_g . Tal comportamento da densidade de cargas positivas (Q_{lq}) na interface consiste no acomodamento dessa cargas na interface de forma que a largura da região de depleção profunda W_d se forme sem a camada de inversão. Essa fenomenologia aconteceu tanto para os dielétricos crescidos a 850°C (Tabela 4.2) como também para aqueles que foram

crescidos a 700°C (Tabela 4.3) o que significa os centros K na interface funcionam como uma região de armazenamento de cargas positivas a medida em que os elétrons tunelam em direção à porta metálica da estrutura MOS.

4.2. MODELAGEM DAS CARACTERÍSTICAS ELÉTRICAS I-V DE CÉLULAS SOLARES MOS NOS REGIMES DE ACUMULAÇÃO ($V_g < V_{FB}$) E DEPLEÇÃO ($V_{FB} < V_g < 0$)

Considerando os tunelamentos J_{TEDit} e J_{INE} como predominantes, devido à natureza dos dielétricos descritos no item anterior, foram feitos os seguintes procedimentos:

Para o cálculo de J_{TEDit} , foram empregadas as equações expostas no item 3 e no Apêndice VI deste trabalho:

- Equação VI.1 para calcular a densidade de corrente em si;
- Equação VI.2 para o cálculo da integral pertencente à equação anterior;
- Equações VI.3 e VI.12 (sua variante discreta) para o cálculo das probabilidades relacionadas com a equação anterior;
- Equações VI.10 e VI.11 para o cálculo da inflexão de banda ψ_s necessário para o cálculo da equação VI.12;
- Equação VI.14 para calcular as diferenças entre o potencial de barreira fixo e os potenciais locais, necessários para calcular a equação VI.12. -

Por outro lado, o cálculo de J_{INE} empregou as seguintes equações:

- Equação V.17 para o cálculo geral da densidade de corrente;
- Equação V.18 para calcular a velocidade térmica vinculada à equação anterior;
- Equações VI.19 e VI.20 para obtenção de T_2 , vinculada à equação VI.17.

Os parâmetros de ajuste para os gráficos de tunelamento $J \times V_g$ foram:

- a posição das armadilhas x_{trap} em relação à interface óxido-semicondutor, considerando-a mais concentrada em uma região específica;
- o sigma (σ), considerado uma constante em função da tensão de porta.
- Nas amostras, foi considerada a dopagem tipo P de 10^{15} cm^{-3} .

As figuras 4.7 a 4.10 mostram os resultados dos ajustes na região de acumulação e depleção, isto é, para tensão de porta negativa, para diversas amostras de células MOS. Pode-se notar um ajuste bastante adequado entre as curvas medidas e as obtidas por meio do modelamento de J.

A figura 4.7 mostra o ajuste do tunelamento para uma amostra com Al como metal de porta e área $300 \times 300 \mu\text{m}^2$, tratada a 850°C .

Figura 4.7 - Ajuste do tunelamento para Al como metal de porta; $A = 300 \times 300 \mu\text{m}^2$; $V_{\text{FB}} = -1,4 \text{ V}$; $x_{\text{trap}} = 8 \text{ nm}$; $R_{\text{série}} = 80 \Omega$; $\sigma = 7,39 \times 10^{-10} \text{ cm}^2$; óxido 850°C

Fonte: Autor

A figura 4.8 mostra o ajuste do tunelamento para uma amostra com Al como metal de porta, porém com área $700 \times 700 \mu\text{m}^2$, tratada a 850°C .

Figura 4.8 - Ajuste do tunelamento para Al como metal de porta; $A = 700 \times 700 \text{ } \mu\text{m}^2$; $V_{FB} = -1,4 \text{ V}$; $x_{\text{trap}} = 8 \text{ nm}$; $R_{\text{série}} = 80 \text{ } \Omega$; $\sigma = 1,07 \times 10^{-9} \text{ cm}^2$; óxido 850°C

Fonte: Autor

A figura 4.9 mostra o ajuste do tunelamento para uma amostra com Ti como metal de porta e área $700 \times 700 \text{ } \mu\text{m}^2$, tratada a 850°C .

Figura 4.9 - Ajuste do tunelamento para TiN como metal de porta; $A = 700 \times 700 \text{ } \mu\text{m}^2$; $V_{FB} = -0,7 \text{ V}$; $x_{\text{trap}} = 8 \text{ nm}$; $R_{\text{série}} = 100 \text{ } \Omega$; $\sigma = 9,79 \times 10^{-10} \text{ cm}^2$; óxido 850°C

Fonte: Autor

A última amostra é análoga à primeira, mas ela foi submetida a um tratamento térmico com menor temperatura, 700°C, e portanto apresenta óxido com estrutura cristalina menos regular e, portanto, com maior densidade de armadilhas.

Figura 4.10 - Ajuste do tunelamento para Al como metal de porta; $A = 300 \times 300 \text{ } \mu\text{m}^2$; $V_{FB} = -0,9 \text{ V}$; $x_{\text{trap}} = 13,2 \text{ nm}$; $R_{\text{série}} = 80 \text{ } \Omega$; $\sigma = 5,68 \times 10^{-8} \text{ cm}^2$; óxido 700°C

Fonte: Autor

É importante registrar, também, a densidade e a posição média das armadilhas para cada amostra, segundo a tabela 4.5

Tabela 4.5 - Densidade e posição média das armadilhas para as amostras

Amostra	Densidade de armadilhas (cm ⁻³)	Posição das armadilhas (Å)
Al, 700°C, (300x300) μm^2	10^{17}	13,2
Al, 850°C, (300x300) μm^2	10^{15}	8,0
Al, 850°C, (700x700) μm^2	10^{15}	8,0
TiN, 850°C, (700x700) μm^2	10^{15}	8,0

Fonte: Autor

A densidade de armadilhas para 700°C é maior devido a pior qualidade da rede dos átomos dentro do isolante. Para o valor da seção de captura σ estar na mesma faixa dos valores adotados para 850°C, em torno de 10^{-9} cm^2 para o Al, foi necessário aumentar a estimativa para a densidade de *traps*. O aumento precisou ser de 100 vezes, de 10^{15} para 10^{17} cm^{-3} .

4.3. MODELAGEM DAS CARACTERÍSTICAS ELÉTRICAS I-V DE CÉLULAS SOLARES MOS PARA $V_g > 0$

Para $V_g > 0$ a modelagem adotada é a mesma, utilizando, para as mesmas amostras, posicionamentos médios e densidades das armadilhas semelhantes, tensões de banda plana e resistências em série. Na faixa de $V_g > 0$ predomina o regime de depleção profunda e as seções de captura σ foram recalculados para melhor se ajustarem às curvas experimentais.

Foi necessário considerar a quantidade de elétrons tunelando a partir da interface. Para isso utilizou-se a equação 3.16 no lugar da equação 3.8 para o cálculo da densidade de tunelamento inelástico de elétrons por armadilhas J_{INE} .

É importante destacar que existem diferenças de referencial, de acordo com a tensão de porta. Para $V_g < 0$, a corrente está no sentido de saída do metal de porta para o semicondutor, e para V_g , a corrente segue para o sentido oposto, conforme as figuras 4.11 a seguir. Por isso, existem diferenças nos valores das posições efetivas das armadilhas.

Figura 4.11 - Referenciais para o ajuste do tunelamento de elétrons para $V_g < 0$ (a) e $V_g > 0$ (b)

Fonte: Autor

Foram feitos ajustes nas amostras de Al, a 700°C (Figura 4.12) e a 850°C (Figura 4.13), com áreas de 300x300 μm^2 .

Figura 4.12 – Ajuste do tunelamento para Al como metal de porta; $A = 300 \times 300 \mu\text{m}^2$; $x_{\text{trap}} = 1,2 \text{ nm}$; $R_{\text{série}} = 80 \Omega$; $\sigma = 1,01 \times 10^{-8} \text{ cm}^2$; óxido 700°C

Fonte: Autor

Figura 4.13 – Ajuste do tunelamento para Al como metal de porta; $A = 700 \times 700 \mu\text{m}^2$; $x_{\text{trap}} = 2 \text{ nm}$; $R_{\text{série}} = 80 \Omega$; $\sigma = 3,5 \times 10^{-13} \text{ cm}^2$; óxido 850°C

Fonte: Autor

4.4. MODELAGEM DAS CARACTERÍSTICAS ELÉTRICAS I-V DE CÉLULAS SOLARES VARIANDO A TEMPERATURA E A INTENSIDADE LUMINOSA

Foram ajustadas curvas de tunelamento $J \times V$ medidas com o dielétrico crescido a 700°C , $(300 \times 300) \mu\text{m}^2$ e alumínio como metal de porta. A densidade de armadilhas N_{tr} foi estimada em 10^{19} cm^{-3} , indicando uma estrutura com várias ligações incompletas, devido à temperatura de tratamento relativamente baixa. Os efeitos da luz usando LED, lâmpada de halogênio e micro-lâmpada incandescente são apresentados na figura 4.14, cujos gráficos já foram ajustados de acordo com a metodologia empregada para o tunelamento de elétrons.

Figuras 4.14 - Curvas de tunelamento $J \times V$ para diversas fontes de luz externa para $V_g < 0$ (a) e $V_g > 0$ (b)

(a)

(b)

Fonte: Autor

É importante destacar que a célula responde à intensidade luminosa com um densidade de corrente de tunelamento aumentando substancialmente na faixa $V_{fb} < V_g < 0$, devido à geração óptica de portadores dentro da região de depleção. Para $V_g < V_{fb}$, a variação é menos substancial para a célula operando em regime de acumulação. Para $V_g > 0$, a geração óptica dentro da região de depleção promove

aumento de densidade de corrente representada pelo deslocamento dos patamares com o aumento da intensidade luminosa.

A célula solar apresentou uma resposta considerável à lâmpada halógena, com densidade de corrente superior a 1 A/cm^2 . A resposta ao LED também é bastante significativa. Com menor potência, a micro-lâmpada apresentou resultados mais próximos do gráfico sem luz.

A seguir, a tabela 4.6 mostra os parâmetros principais dos gráficos da célula solar testada sob efeito de luz. Na acumulação, a posição média das armadilhas não variou, mas na depleção é possível notar um valor menor, mais próximo da interface. A inclinação dos gráficos nesta região depende deste fator.

Tabela 4.6 – Parâmetros de ajuste para o modelamento dos gráficos $J \times V$ com e sem a ação da luz

Fonte de luz	$\sigma \text{ (cm)}$	$x_{\text{trap}} \text{ (Å)}$
$V_g < 0$		
Sem luz	$1,64 \times 10^{-9}$	13
Micro-lâmpada	$3,20 \times 10^{-9}$	13
LED	$5,31 \times 10^{-9}$	13
Halogênio	$6,45 \times 10^{-7}$	15
$V_g > 0$		
Sem luz	$3,36 \times 10^{-10}$	3
Micro-lâmpada	$6,38 \times 10^{-12}$	1
LED	$1,12 \times 10^{-10}$	1
Halogênio	$1,19 \times 10^{-9}$	1

Fonte: Autor

Por outro lado, as figuras 4.15 a seguir mostram o efeito da temperatura, entre 40°C e 200°C . A célula responde à temperatura com uma densidade de corrente de tunelamento aumentando na faixa $V_{fb} < V_g < 0$, devido à geração térmica de portadores dentro da região de depleção. Para $V_g < V_{fb}$, a variação deixa de existir para a célula operando em regime de acumulação. Para $V_g > 0$, a geração térmica

dentro da região de depleção promove aumento de densidade de corrente representada pelo deslocamento dos patamares com o aumento da temperatura.

Figuras 4.15 - Curvas de tunelamento $J \times V$ para diversas temperaturas para $V_g < 0$ (a) e $V_g > 0$ (b)

(a)

(b)

Fonte: Autor

A seguir, a tabela 4.7 mostra os parâmetros principais dos gráficos da célula solar testada sob os diversos patamares de temperatura. É importante destacar que

a posição efetiva das armadilhas no dielétrico x_{trap} foi estimada em 1,3 nm (13 Å) da interface quando os elétrons são injetados majoritariamente a partir da mesma e x_{trap} está na faixa de 0,1 a 0,3 nm da interface quando os elétrons estão majoritariamente sendo injetados a partir da porta metálica.

Tabela 4.7 – Parâmetros de ajuste para o modelamento dos gráficos $J \times V$ em função da temperatura

Temperatura (°C)	σ (cm)	x_{trap} (Å)
$V_g < 0$		
27	$1,64 \times 10^{-9}$	13
40	$1,67 \times 10^{-9}$	13
80	$1,74 \times 10^{-9}$	13
120	$1,75 \times 10^{-9}$	13
160	$2,71 \times 10^{-9}$	13
200	$2,72 \times 10^{-9}$	13
$V_g > 0$		
27	$3,36 \times 10^{-10}$	3
40	$4,71 \times 10^{-10}$	3
80	$4,71 \times 10^{-10}$	3
120	$2,29 \times 10^{-10}$	2
160	$1,30 \times 10^{-8}$	2
200	$2,32 \times 10^{-9}$	1

Fonte: Autor

5. CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS

Neste capítulo, serão apresentadas as principais conclusões e possíveis perspectivas futuras sobre o trabalho de células solares MOS operando em regime de inversão controlado por centros positivamente carregados na interface oxinitreto/silício. Este tipo de célula solar foi recentemente fabricada pela primeira vez no âmbito dos trabalhos desenvolvidos no grupo de Superfícies, Interfaces e Deposição Eletroquímica (GSIDE) do LSI/PSI/EPUSP utilizando dielétricos de porta ultra-finos ($\sim 2\text{nm}$). A receita de crescimento de dielétrico ultra-fino desenvolvida foi no sentido de assegurar reprodutibilidade e uniformidade da espessura do dielétrico ao longo de áreas extensas de alguns cm^2 .

Os resultados das caracterizações $C \times V_g$, $G \times V_g$ e $I \times V_g$ mostraram a presença de dois picos de capacitância presentes na curva $C \times V_g$ assim como o um pico de condutância presente curva $G \times V_g$. O primeiro deles (pico 1) está localizado em uma tensão de porta mais negativa, entre $-1,60$ e $-1,63$ V de acordo com as figuras 4.1 e 4.2, chamada de V_{fb1} , cujo máximo aparece devido à diminuição da capacitância quando a corrente de tunelamento fica suficientemente elevada. O aumento substancial da corrente para tensões de porta iguais a V_{fb1} é corroborado pelo aumento da condutância na região do pico 1 de capacitância para tensões tais que $V_g < V_{fb1}$. O pico 2 de capacitância de menor tamanho ocorre em uma tensão menos negativa, em torno de $-0,73$ V de acordo com as figuras 4.1 e 4.2, que corresponde aproximadamente à tensão de banda plana (V_{fb2}). O pico 2 aparece porque ao diminuir a tensão de porta negativamente a partir de 0V atinge-se na tensão V_{fb2} o máximo do pico 2, situação na qual deixa de existir o efeito de blindagem da região de depleção. A partir desse ponto, para tensões mais negativas, a estrutura MOS tende a entrar em regime de acumulação, a corrente de tunelamento tende a subir e, concomitantemente, a capacitância tende a começar a cair, delineando dessa forma o pico 2. Porém, devido à existência dos centros K localizados no dielétrico junto à interface dielétrico/silício estes passam a ficar carregados positivamente na acumulação e, por sua vez, induzem novamente uma região de depleção no silício. Nesse caso, volta a ocorrer um efeito de blindagem atribuído a essa nova região de depleção, a corrente de fuga volta a cair e a capacitância volta a subir. Concomitantemente, ocorre um máximo de condutância

no pico 3 da curva $G \times V_g$ (V_K) porque a corrente de tunelamento passa a suprir o carregamento dos centros K até chegar em uma tensão V_K ligeiramente mais negativa do que V_{fb2} .

Foi desenvolvido um programa de computador dedicado à modelagem das células solares MOS operando em regime de inversão induzido por cargas positivas localizadas na interface $\text{SiN}_x\text{O}_y/\text{Si}$. Foi empregado o método das diferenças finitas para resolver numericamente as equações de Poisson, transporte de carga e continuidade no caso unidimensional ao longo da estrutura MOS com a possibilidade de variar dinamicamente a carga na interface $\text{SiN}_x\text{O}_y/\text{Si}$ em função da tensão V_g aplicada. Essa possibilidade de simulação foi fundamental para o desenvolvimento do tema do trabalho e teve que ser desenvolvida dado que a mesma não foi encontrada de forma amigável e/ou direta nos programas simuladores comerciais existentes.

É importante destacar que a densidade de cargas positivas na interface $\text{SiN}_x\text{O}_y/\text{Si}$ (Q_{lq}) além de ter resultado positivo para células nMOS, tem comportamento praticamente linear com o potencial de superfície ψ_s ou com a tensão de porta V_g . Tal comportamento consiste no acomodamento dessa cargas na interface de forma que a largura da região de depleção profunda W_d se forme sem a camada de inversão. Essa fenomenologia aconteceu tanto para os dielétricos crescidos a 850°C como também para aqueles que foram crescidos a 700°C o que significa os centros K na interface funcionam como uma região de armazenamento de cargas positivas a medida em que os elétrons tunelam em direção à porta metálica da estrutura MOS.

Foi observado que as células solares construídas respondem à intensidade luminosa com uma densidade de corrente de tunelamento aumentando substancialmente na faixa $V_{fb} < V_g < 0$, devido à geração óptica de portadores dentro da região de depleção. Para $V_g < V_{fb}$, a variação é menos substancial para a célula operando em regime de acumulação. Para $V_g > 0$, a geração óptica dentro da região de depleção promove aumento de densidade de corrente representada pelo deslocamento dos patamares com o aumento da intensidade luminosa.

Como perspectiva para futuros trabalhos a serem realizados em continuação a este trabalho de doutorado, podemos destacar:

- a) modelagem do comportamento dos centros de armadilhamento interfacial para fabricação de células solares para diferentes níveis de luminosidade para a aplicação de “energy harvesting”
- b) modelagem das células solares MOS operando em regime inversão controlado por centros positivamente carregados na interface oxinitreto/silício para diferentes espessuras de material dielétrico de porta e para diferentes dopagens do substrato.

APÊNDICE I

CURVAS CxV, GxV E JxV DAS CÉLULAS MOS

As curvas CxV e GxV dos dispositivos MOS construídos foram obtidas pelo grupo no equipamento medidor de capacitância HP 4280A, disponível no grupo de superfícies, interfaces e deposição eletroquímica do LSI/PSI/EPUSP, na frequência de 1 MHz e utilizando sinal de entrada no formato rampa simples, em passo de 0,01V (Alandia, 2015) [34].

Foram consideradas cinco regiões: chanfro, centro, oposto, direita e esquerda, nesta disposição, conforme a figura I.1:

Figura I.1 - Disposição das regiões do silício onde foram elaboradas as células MOS

Fonte: Autor

Para a medida, as lâminas foram ser fixadas em um porta-amstras, acoplado a um microscópio óptico para a observação das células e de suas localizações, conforme a figura I.1. As pontas de prova foram colocadas para fazer o contato elétrico na região de porta dos dispositivos. A fim de proteger as amostras de vibrações, ondas eletromagnéticas e luz provindas do exterior, o porta-amstras foi isolado em uma caixa de alumínio anodizado preto.

Para a medição das curvas, a tensão de porta inicial foi de 2 V, induzindo cada dispositivo a estar em regime de inversão. A tensão fornecida pelo equipamento foi diminuindo progressivamente, até $V_g = -2$ V, quando a célula MOS atinge o regime de acumulação.

A seguir, na figura I.2, seguem os gráficos C-V e G-V, feitos a partir dos dados coletados e reproduzidos por meio do programa Origin para dispositivos MOS com óxido crescido a 700°C, na região central:

Figuras I.2 – Dispositivos com porta de Al e área de $300 \times 300 \mu\text{m}^2$ (700°C): Curvas C-V e G-V (direita)

Fonte: Banco de dados do GSIDE/LSI/PSI/EPUSP.

Nas figuras I.3 a seguir, são apresentados os gráficos C-V e G-V, feitos a partir dos dados coletados e reproduzidos por meio do programa Origin para dispositivos MOS com óxido crescido a 850°C. As medidas foram feitas em todas as cinco regiões consideradas na figura I.1.

Figuras I.3 – Dispositivos com porta de Al e área de (300x300) μm^2 (850°C): Curvas C-V e G-V (direita)

(Continua na próxima página)

(Continua na próxima página)

(Continua na próxima página)

(Continua na próxima página)

Fonte: Banco de dados do GSIDE/LSI/PSI/EPUSP.

Após a obtenção das curvas CxV e GxV, foram feitas as curvas JxV por meio do equipamento HP 4140, localizado junto ao HP 4280A. Da mesma forma, a tensão de entrada é uma rampa simples, com passo de 0,01 V, setado como corrente máxima 10 mA. Além da medição sem a presença de luz, foram também utilizadas fontes de luz para avaliar o comportamento do dispositivo:

- Luz halógena a 105,7 mW/cm²;

- LED a 42,3 mW/cm².

A seguir, nas figuras I.4, seguem-se os gráficos da corrente em função da tensão para diversas amostras. Os valores de densidade de corrente estão em módulo e em escala logarítmica, sendo negativos para $V_g < 0$:

Figuras I.4 – Curvas JxV para diversas amostras: (a) 700°C - 300x300 μm²; (b) 850°C - 300x300 μm²; (c) 850°C - 700x700 μm²

(a)

(b)

(Continua na próxima página)

(c)

Fonte: Autor

APÊNDICE II

OBTENÇÃO DE PARÂMETROS A PARTIR DAS CURVAS $1/C^2 \times V$

Neste apêndice, é possível verificar como as curvas $1/C^2 \times V$ nos permitem obter parâmetros relevantes para os dispositivos MOS:

- a *largura de depleção* W_d ;
- o *potencial de Fermi* ϕ_f ;
- a *dopagem* no silício N_A .

A largura de depleção W_d é escrita como uma função direta da capacitância, conforme a equação A2.1:

$$W_d = \frac{\epsilon_0 \epsilon_{Si} A}{C} \quad (A2.1)$$

onde ϵ_0 é a permissividade no vácuo, ϵ_{Si} é a permissividade relativa do silício, A é a área do dispositivo e C é a capacitância.

Por outro lado, a região de depleção é expressa pela equação A2.2:

$$W_d = \sqrt{\frac{2\epsilon_0 \epsilon_{Si}}{qN_A} \psi_s} \quad (A2.2)$$

onde q é a carga fundamental e ψ_s é o potencial de superfície o qual, conforme mostrado no apêndice VI, é função direta do potencial de porta ($\psi_s \sim V_g + K$).

Modificando a equação A2.1, de forma a isolar a capacitância, teremos:

$$C = \frac{\epsilon_0 \epsilon_{Si} A}{W_d} \quad (A2.3)$$

Colocando ao quadrado a equação A2.3:

$$C^2 = \left(\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_{Si} A}{W_d} \right)^2 \quad (A2.4)$$

e substituindo A2.2 em A2.4:

$$C^2 = \frac{(\varepsilon_0 \varepsilon_{Si} A)^2}{\frac{2\varepsilon_0 \varepsilon_{Si}}{qN_A} \psi_s} = \frac{qN_A}{2\psi_s} \varepsilon_0 \varepsilon_{Si} A^2 \quad (A2.5)$$

O termo $1/C^2$ é simplesmente o inverso deste termo:

$$\frac{1}{C^2} = \frac{2\psi_s}{qN_A \varepsilon_0 \varepsilon_{Si} A^2} \propto \frac{2(Vg + K)}{qN_A \varepsilon_0 \varepsilon_{Si} A^2} \quad (A2.6)$$

Por outro lado, o gráfico $1/C^2 \times V_g$ nos permite obter a tangente da curva, que é aproximadamente uma reta no regime de inversão, onde V_g é consideravelmente maior que $-|V_{fb}|$.

$$tg\alpha = \frac{\Delta(1/C^2)}{\Delta V_g} \quad (A2.7)$$

Ora, a variação de $1/C^2$ acaba por eliminar o termo ϕ_i , que não depende diretamente de V_g :

$$\Delta\left(\frac{1}{C^2}\right) = \frac{2(Vg_2 + K)}{qN_A \varepsilon_0 \varepsilon_{Si} A^2} - \frac{2(Vg_1 + K)}{qN_A \varepsilon_0 \varepsilon_{Si} A^2} = \frac{2(\Delta V_g)}{qN_A \varepsilon_0 \varepsilon_{Si} A^2} \quad (A2.8)$$

Logo, a tangente da curva pode ser escrita por:

$$tg\alpha = \frac{2}{q.N_A.\epsilon_0\epsilon_{Si}A^2} \quad (A2.9)$$

Dessa forma, a dopagem pode ser escrita isolando o termo da equação A2.9:

$$N_A = \frac{2}{q.tg\alpha.A^2.\epsilon_0\epsilon_{Si}} \quad (A2.10)$$

A função de Fermi, por sua vez, é calculada em função da dopagem:

$$\phi_f = \frac{k_B T}{q} \ln\left(\frac{N_A}{n_i}\right) \quad (A2.11)$$

onde n_i é a concentração intrínseca de portadores, k é a constante de Boltzmann e T é a temperatura em Kelvin. Para $T = 300$ K, temperatura considerada nas simulações, $kT/q = 0,0259$ V.

APÊNDICE III

LINGUAGEM C++, FUNDAMENTOS E ESTRUTURA DO PROGRAMA

DESENVOLVIDO PARA A TESE

III.1. A LINGUAGEM C++

A linguagem C++ foi desenvolvida a partir do C, em 1979, a partir de experimentos desenvolvidos pelo programador dinamarquês Bjarne Stroustrup [68], como derivação orientada a objetos. De início era conhecido pelo nome de “C with Classes”, mas seu nome mudou para C++ em 1983.

Tanto o C e o C++ são considerados linguagens de nível intermediário, ou seja, sua interface não é tão próxima da linguagem humana como o Java, cujos comandos também se baseiam, embora não completamente, na linguagem C [68, 69]. Por outro lado, seus comandos não chegam a ser tão fáceis de operar pelos processadores quanto o Assembly, exemplo de linguagem de “baixo nível”. Comparado à linguagem C, o C++ apresenta uma interface mais próxima da linguagem humana.

Existem outras diferenças entre o C e o C++ e elas concentram-se principalmente na estética e em algumas funcionalidades [69].

Alguns exemplos:

- o uso de “cin” e “cout” no lugar de “scanf” e “printf”, respectivamente;
- a necessidade de explicitar o tipo de dado para comandos “printf” e “scanf”, isto é, se são números inteiros (%d) ou reais (%f) ou de maior precisão (acrescentar um “l” antes de “d” ou “f”)

Ex.:

printf (“Digite um número inteiro: %d” , n) para C

Cout << “Digite um número inteiro: “ << n para C++

- não é necessário escrever a função “return 0” no final do programa principal do C++, ao contrário do programa principal do C;

- algumas funções presentes no C não existem em C++, como a função “malloc” para alocação de memória:

```
int *x = malloc( sizeof(int) );
int *x_array = malloc( sizeof(int) * 10 );

free( x );
free( x_array );
```

usando a linguagem C;

```
int *x = new int;
int *x_array = new int[11];

delete x;
delete[] x_array;
```

usando C++.

- por outro lado, a biblioteca do C++ é significativamente maior, permitindo a escrita de maior quantidade de funções não previstas para o uso em C.

Atualmente, existem compiladores que trabalham tanto para o C quanto para o C++, podendo lidar com programas híbridos, com comandos das duas linguagens. Os mais conhecidos, dentre os compiladores *opensource* (gratuitos), são o “Dev-C++” e o “CodeBlocks”.

III.2. FUNDAMENTOS DO PROGRAMA

III.2.1. Modelamento do Potencial

Inicialmente, foram feitas simulações em compilador C++ para a distribuição clássica de portadores, modelada pela equação de Boltzmann. e distribuição de potencial modelada pela equação de Poisson, dada pela equação III.1 [32]:

$$\nabla^2 \phi = \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = -\frac{\rho}{\varepsilon} \quad (\text{Eq. III.1})$$

onde ϕ é o potencial, y é o eixo unidimensional adotado, ρ é a resistividade e ε é a constante dielétrica, ambas em função de y . A resistividade é dada pela equação III.2 [62]:

$$\rho(x) = q(-n(x) + p(x) + C) \quad (\text{Eq. III.2})$$

onde C é a dopagem efetiva no substrato em átomos/cm³ em um dado ponto “i” (negativo se o saldo de impurezas for aceitador e positivo se o saldo de impurezas for doador), n e p são as concentrações de elétrons e lacunas também calculadas em um dado ponto “i”.

Para o cálculo do potencial, devemos utilizar algum método de derivação. O método escolhido foi o das diferenças finitas.

III.2.2. Distribuição de cargas utilizando método das diferenças finitas no caso unidimensional

O método das diferenças finitas foi empregado para obter cada potencial local ϕ_i em um dado ponto “i”, com passo h sobre o eixo “x”. Para resolver numericamente a equação de Poisson, dividimos as diversas camadas do capacitor MOS (silício policristalino, dielétrico e silício) numa única linha com passo de discretização “ h ” para o silício e h' para o óxido, como mostrado na figura III.1 a seguir.

Figura III.1 – Discretização unidimensional da estrutura MOS.

Fonte: Autor

Referindo-nos à cada ponto “i” da figura III.1, temos os pontos “i-1” e “i+1” como sendo, respectivamente o ponto anterior e o ponto posterior. A derivada no ponto “(i+1)/2” pode ser obtido numericamente por:

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{i+1/2} = \frac{\phi(i+1) - \phi(i)}{h} \quad (\text{Eq. III.3})$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{i-1/2} = \frac{\phi(i) - \phi(i-1)}{h}$$

Tomando-se também a derivada no ponto “(i-1)/2” juntamente com o resultado da Eq. III.3, podemos determinar a derivada de segunda ordem conforme segue:

$$\left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right|_i = \frac{\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{i+1/2} - \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{i-1/2}}{h} = \frac{\phi(i+1) + \phi(i-1) - 2\phi(i)}{h^2} \quad (\text{Eq. III.4})$$

Portanto, podemos reescrever a Equação III.4 da seguinte forma:

$$\nabla^2 \phi|_i = \frac{\phi(i+1) + \phi(i-1) - 2\phi(i)}{h^2} \quad (\text{Eq. III.5})$$

Assim, nos pontos onde a densidade da carga elétrica for não nula teremos:

$$\nabla^2 \phi \Big|_i = \frac{\phi(i+1) + \phi(i-1) - 2\phi(i)}{h^2} = -\frac{\rho}{\varepsilon}$$

$$\frac{\phi(i+1) + \phi(i-1) - 2\phi(i)}{h^2} + \frac{\rho}{\varepsilon_{meioi} \cdot \varepsilon_o} = 0 \quad (\text{Eq. III.6})$$

Onde ρ é dado pela Eq. III.2 acima.

III.2.3 Distribuição de portadores sob efeito de geração óptica

A geração óptica de portadores se dá no semiconductor através do aparecimento de pares elétron-lacuna, isto é, a energia de um fóton é transferida para um elétron de um átomo. Dessa forma, o elétron pode passar da banda de valência para a banda de condução, gerando um par elétron-lacuna. O balanço entre a geração e a recombinação é a taxa líquida de geração de portadores, representada por uma função G .

Após a geração, uma corrente poderá existir em regime quase estacionário quando os portadores forem capazes de atravessar o óxido, nos diodos túnel MOS, sob efeito do tunelamento.

O efeito da geração óptica na equação da continuidade segundo Yeh e DeMassa [26] é dada pela Equação III.7:

$$\frac{d^2 n'(x)}{dx^2} - \frac{n'(x)}{L_n^2} + \frac{1}{D_n} G(x) = 0 \quad (\text{Eq. III.7})$$

$$G(x) = \sum_0^{\lambda'} T(\lambda) \alpha(\lambda) n_{ph}(\lambda) e^{-\alpha(\lambda)x}$$

Onde $n'(x)$ é a função excesso de elétrons ($n'(x) = n(x) - n_0$), $G(x)$ é a geração líquida de elétrons, L_n é o comprimento de difusão para elétrons, D_n é o coeficiente de difusão de elétrons, $T(\lambda)$ é o coeficiente de transmissão de dado comprimento de onda λ , $\alpha(\lambda)$ é a absorvância e $n_{ph}(\lambda)$ é a irradiância. As funções α e n_{ph} dependem de condições fornecidas a partir de Yeh e DeMassa [26].

Distribuição da função excesso de lacunas $p'(x)$ considerando o campo elétrico

A densidade de corrente de lacunas é dada pela Equação III.15:

$$J_p(x) = q\mu_p E(x)p'(x) - qD_p \frac{dp'(x)}{dx} \quad (\text{Eq. III.15})$$

Por outro lado, temos a equação de continuidade dada pela Equação III.16:

$$\frac{dp'(x)}{dx} = G(x) - \frac{p'(x)}{\tau_p} - \frac{1}{q} \frac{dJ_p}{dx} \quad (\text{Eq. III.16})$$

Substituindo a Equação III.15 na Equação III.16, temos a equação da continuidade função do excesso de lacunas e do campo elétrico conforme segue:

$$\frac{dp'(x)}{dx} = G(x) - \frac{p'(x)}{\tau_p} - \frac{1}{q} \left(q\mu_p \frac{dE(x)}{dx} p'(x) + q\mu_p E(x) \frac{dp'(x)}{dx} - qD_p \frac{d^2 p'(x)}{dx^2} \right)$$

ou

$$\frac{d^2 p'(x)}{dx^2} - \beta \cdot E(x) \frac{dp'(x)}{dx} - \left(\frac{1}{L_p^2} + \beta \cdot \frac{dE(x)}{dx} \right) p'(x) + \frac{G(x)}{D_p} = 0 \quad (\text{Eq. III.17})$$

Sendo $\beta = (q / kT)$, L_p é o comprimento de difusão e D_p é a constante de difusão para lacunas.

As condições de contorno para a resolução da Equações III.17 são dadas pelas Equações III.18:

$$p'(x = 0) = 0 \quad (\text{Eq. III.18a})$$

$$\left. \frac{\partial p'}{\partial x} \right|_{x=0} = \frac{J_{Tp}(x=0) + q(p'(x=0) - p_o)\mu_p E(x=0)}{qD_p} \quad (\text{Eq. III.18b})$$

onde J_{Tp} é a corrente de tunelamento de lacunas através do dielétrico de porta, D_p é a constante de difusão para lacunas, μ_p é a mobilidade dos elétrons, p_o é a concentração de lacunas em equilíbrio no substrato e q é a carga elementar.

Para resolvermos a equação III.17, podemos lançar mão do método das diferenças finitas, aplicado anteriormente para o cálculo do potencial elétrico. Como resultado, temos:

$$\begin{aligned} x_i &= i \frac{x_j}{n} \\ a_i &= -\beta \cdot E(x_i) \\ b_i &= -\left(\frac{1}{L_p^2} + \beta \frac{dE(x_i)}{dx}\right) \\ c_i &= -\frac{G_p(x_i)}{D_p} \\ \frac{dp'(x_i)}{dx} &= \frac{p'_{i+1} - p'_{i-1}}{2h} \\ \frac{d^2 p'(x_i)}{dx^2} &= \frac{p'_{i+1} - 2p'_i + p'_{i-1}}{h^2} \end{aligned} \quad (\text{Eq. III.19})$$

Onde h é o passo de discretização, e para cada $i = 0, 1, 2, \dots, n$ que define um ponto de simulação, a_i e b_i são dois parâmetros dependentes do campo elétrico e c_i é uma função que depende da geração líquida de lacunas.

A Equação III.17 escrita na forma discreta fica:

$$\frac{p'_{i-1} + p'_{i+1} - 2p'_i}{h^2} + a_i \frac{p'_{i-1} + p'_{i+1}}{2h} + b_i p'_i - c_i = 0$$

Ou

$$(2 - ha_i)p'_{i-1} + (-4 + 2h^2 b_i)p'_i + (2 + ha_i)p'_{i+1} = 2h^2 c_i \quad (\text{Eq. III.20})$$

As condições de contorno são dadas por:

$$p'(x = x_{n+1}) = p'_{n+1} = 0$$

$$\frac{p'(x_1) - p'(x_2)}{h} = \frac{J_{Tp}(x=0) + q(p'_1 - p_o)\mu_p E(x_1)}{qD_p} \text{ ou}$$

$$p'(x_1) = p'_1 = \frac{J_{Tp}(x=x_1) - q\mu_p E(x_1)p_o + \frac{qD_p}{h} p'_2}{\left(\frac{qD_p}{h} + q\mu_p E(x=x_1)\right)} = \frac{\frac{J_{Tp1}}{\mu_p} - qE_1 p_o + \frac{k_B T}{h} p'_2}{\left(\frac{k_B T}{h} + qE_1\right)} \quad (\text{Eq. III.21})$$

onde J_{Tp} é a corrente de tunelamento de elétrons através do dielétrico de porta, D_p é a constante de difusão para lacunas, μ_p é a mobilidade para lacunas, E_1 é o campo elétrico na interface óxido/silício do lado do silício, $(D_p/\mu_p) = (kT/q)$ e q é a carga elementar.

Contudo, vale lembrar que o projeto considera a concentração total de lacunas, e não o excesso delas, escrito por $p'(x) = p(x) - p_o$.

Modificando a equação III.20 para as lacunas

$$(2 - ha_i)(p_{i-1} - p_o) + (-4 + 2h^2 b_i)(p_i - p_o) + (2 + ha_i)(p_{i+1} - p_o) = 2h^2 c_i$$

resulta na equação III.22:

$$(2 - ha_i)p_{i-1} + (-4 + 2h^2 b_i)p_i + (2 + ha_i)p_{i+1} = 2h^2 (b_i p_o + c_i)$$

Ou

$$(2 - ha_i)p_{i-1} + (-4 + 2h^2 b_i)p_i + (2 + ha_i)p_{i+1} = 2h^2 c'_i \quad (\text{Eq. III.22})$$

Sendo $c'_i = c_i + b_i p_o$.

A equação III.21 é reescrita para:

$$p'(x_1) = \frac{\frac{J_{Tp1}}{\mu_p} - qE_1 p_o + \frac{k_B T}{h} (p_2 - p_0)}{\left(\frac{k_B T}{h} + qE_1 \right)} = p(x_1) - p_0$$

$$p(x_1) = \frac{\frac{J_{Tp1}}{\mu_p} - qE_1 p_o + \frac{k_B T}{h} (p_2 - p_0) + p_0 \left(\frac{k_B T}{h} + qE_1 \right)}{\left(\frac{k_B T}{h} + qE_1 \right)}$$

Resultando na equação III.23:

$$p(x_1) = \frac{\frac{J_{Tp1}}{\mu_p} + \frac{k_B T}{h} p_2}{\left(\frac{k_B T}{h} + qE_1 \right)} \quad (\text{Eq. III.23})$$

A Equação III.22 pode ser escrita na forma matricial considerando um total de (n-1) parâmetros desconhecidos ($p_2, p_3, \dots, p_{n-1}, p_n$) conforme segue

$$\begin{vmatrix} -4+2h^2b_2 & 2+ha_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2-ha_3 & -4+2h^2b_3 & 2+ha_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2-ha_{n-1} & -4+2h^2b_{n-1} & 2+ha_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2-ha_n & -4+2h^2b_n \end{vmatrix} \mathbf{X} = \begin{vmatrix} p_2 \\ p_3 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ p_{n-1} \\ p_n \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 2h^2c'_2 - (2-ha_2)p_1' \\ 2h^2c'_3 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ 2h^2c'_{n-1} \\ 2h^2c'_{n-1} - (2-ha_n)p_{n+1}' \end{vmatrix}$$

(Eq. III.24)

O formato geral da equação matricial pode ser escrito como:

$$\begin{vmatrix} y_2 & z_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ w_3 & y_3 & z_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & w_{n-1} & y_{n-1} & z_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & w_n & y_n \end{vmatrix} \mathbf{X} = \begin{vmatrix} p_2 \\ p_3 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ p_{n-1} \\ p_n \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} u_2 \\ u_3 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ u_{n-1} \\ u_n \end{vmatrix}$$

(Eq. III.25)

ou

$$[A].[p] = [u] \quad (\text{Eq. III.26})$$

A solução da equação matricial pode ser obtida através do método de Gauss-Jordan para diagonalização da matriz $[A]$ estendida (ou $[A_e]$) a qual é dada por:

$$[A_e] = \left| \begin{array}{cccccccc|c} y_2 & z_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & u_2 \\ w_3 & y_3 & z_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & u_3 \\ 0 & . & . & . & 0 & 0 & 0 & 0 & . \\ 0 & 0 & . & . & . & 0 & 0 & 0 & . \\ 0 & 0 & 0 & . & . & . & 0 & 0 & . \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & w_{n-1} & y_{n-1} & z_{n-1} & u_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & w_n & y_n & u_n \end{array} \right| \quad (\text{Eq. III.27})$$

Na primeira etapa do processo de diagonalização, os termos $w_3, \dots, w_n$ devem ser anulados a partir de combinações lineares com outras linhas. A regra começa pela primeira linha dividindo-a por y_2 , multiplicando-a por $(-w_3)$ e somando-a com a segunda linha. O procedimento geral sempre começa pela linha 1 e de maneira sequencial vai-se tomando sempre a linha subsequente. De forma geral, toma-se a linha “i” dividindo-a pelo termo a_{ii} , multiplicando-a por $(-a_{i+1,i})$ e somando-a com a linha “i+1” para obter a nova linha “i+1”.

Na segunda etapa do processo de diagonalização, os termos $z_2, z_3, \dots, z_{n-1}$ são anulados. A regra começa pela última linha dividindo-a por y_n , multiplicando-a por $(-z_{n-1})$ e somando-a com a penúltima linha. O procedimento geral sempre começa pela linha (n-1) e de maneira sequencial vai-se pegando a linha imediatamente antecedente. De forma geral, toma-se linha “i” dividindo-a por a_{ii} , multiplicando-a por $(-a_{i-1,i})$ e somando-a com a linha “i-1” para obter a nova linha “i-1”.

Ao final das duas etapas de diagonalização, obtemos a matriz estendida na seguinte forma:

$$[A_e] = \begin{vmatrix} a_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & u_2' \\ 0 & a_{22} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & u_3' \\ 0 & . & . & . & 0 & 0 & 0 & 0 & . \\ 0 & 0 & . & . & . & 0 & 0 & 0 & . \\ 0 & 0 & 0 & . & . & . & 0 & 0 & . \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_{n-2,n-2} & 0 & u_{n-1}' \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_{n-1,n-1} & u_n' \end{vmatrix} \quad (\text{Eq. III.28})$$

Portanto, a solução do sistema de equações fica sendo: $p_2 = u_2'/a_{11}$, $p_3 = u_3'/a_{22}$, ..., $p_{n-1} = u_{n-1}'/a_{n-2,n-2}$, $p_n = u_n'/a_{n-1,n-1}$.

Distribuição da função excesso de elétrons $n'(x)$ considerando o campo elétrico

A equação da densidade de corrente para elétrons é dada por:

$$J_n(x) = q\mu_n E(x)n'(x) + qD_n \frac{dn'(x)}{dx} \quad (\text{Eq. III.21})$$

A equação da continuidade, por sua vez, é dada por:

$$\frac{dn'(x)}{dx} = G(x) - \frac{n'(x)}{\tau_n} + \frac{1}{q} \frac{dJ_n}{dx} \quad (\text{Eq. III.22})$$

Substituindo a Equação III.21 na Equação III.22, resulta:

$$\frac{dn'(x)}{dx} = G(x) - \frac{n'(x)}{\tau_n} + \frac{1}{q} \left(q\mu_n \frac{dE(x)}{dx} n'(x) + q\mu_n E(x) \frac{dn'(x)}{dx} + qD_n \frac{d^2 n'(x)}{dx^2} \right)$$

ou

$$\frac{d^2 n'(x)}{dx^2} + \beta \cdot E(x) \frac{dn'(x)}{dx} + \left(-\frac{1}{L_n^2} + \beta \cdot \frac{dE(x)}{dx} \right) n'(x) + \frac{G(x)}{D_n} = 0 \quad (\text{Eq. III.23})$$

Adotaremos também as constantes d_i , e_i e f_i , análogas as constantes a_i , b_i e c_i definidas para a obtenção do excesso de lacunas, ou seja:

$$d_i = \beta.E(x) = -a_i$$

$$e_i = -\frac{1}{L_n^2} + \beta \cdot \frac{dE(x)}{dx} \quad (\text{Eq. III.24})$$

$$f_i = -\frac{G(x)}{D_n}$$

Como resultado, a Equação III.24 escrita na forma discreta fica sendo:

$$-\frac{n'_{i-1} + n'_{i+1} - 2n'_i}{h^2} + d_i \frac{-n'_{i-1} + n'_{i+1}}{2h} + e_i n'_i - f_i = 0$$

ou

$$-(2 + hd_i)n'_{i-1} + (4 + 2h^2e_i)n'_i + (-2 + hd_i)n'_{i+1} = 2h^2f_i \quad (\text{Eq. III.25})$$

As condições de contorno são dadas por:

$$n'(x = x_{n+1}) = n'_{n+1} = 0$$

$$\frac{n'(x_1) - n'(x_2)}{h} = -\frac{J_{Tn}(x=0) + q(n'_1 + n_o)\mu_n E(x_1)}{qD_n}$$

Resultando na Equação III.26:

$$n'(x_1) = n'_1 = \frac{-\left(J_{Tn}(x=x_1) + q\mu_n E(x_1)n_o\right) + \frac{qD_n}{h}n'_2}{\left(\frac{qD_n}{h} + q\mu_n E(x=x_1)\right)} = \frac{-\left(\frac{J_{Tn1}}{\mu_n} + qE_1n_o\right) + \frac{k_B T}{h}n'_2}{\left(\frac{k_B T}{h} + qE_1\right)} \quad (\text{Eq. III.26})$$

onde J_{Tn} é a corrente de tunelamento de elétrons através do dielétrico de porta, D_n é a constante de difusão para elétrons, μ_n é a mobilidade para elétrons, E_1 é o campo elétrico na interface óxido/silício do lado do silício, $(D_n/\mu_n) = (kT/q)$ e q é a carga elementar.

As equações III.25 e III.26 serão convertidas em função da concentração de elétrons, uma vez que utilizam excesso de elétrons como variáveis. Os procedimentos são os mesmos para o caso das lacunas.

Dessa forma, a equação III.25 pode ser reescrita para:

$$-(2 + hd_i)n_{i-1} + (4 + 2h^2e_i)n_i + (-2 + hd_i)n_{i+1} = 2h^2f'_i \quad (\text{Eq. III.27})$$

Onde $f'_i = f_i + e_in_0$.

Da mesma forma que no caso da equação III.13, a equação III.26 será reescrita, mas em função dos elétrons:

$$n(x_1) = \frac{-\frac{J_{Tn1}}{\mu_n} + \frac{k_B T}{h} n_2}{\left(\frac{k_B T}{h} + qE_1\right)} \quad (\text{Eq. III.28})$$

A Equação III.27 pode ser escrita na forma matricial considerando um total de (n-1) parâmetros desconhecidos $(n_2', n_3', \dots, n_{n-1}', n_n')$ conforme segue:

$$\begin{vmatrix} -4+2h^2e_2 & 2+hd_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2-hd_3 & -4+2h^2e_3 & 2+hd_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & . & . & . & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & . & . & . & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & . & . & . & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2-hd_{n-1} & -4+2h^2e_{n-1} & 2+hd_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2-hd_n & -4+2h^2e_n \end{vmatrix} \mathbf{X} \begin{vmatrix} n_2' \\ n_3' \\ . \\ . \\ . \\ n_{n-1}' \\ n_n' \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 2h^2f'_2 - (2-hd_2)n_1' \\ 2h^2f'_3 \\ . \\ . \\ . \\ 2h^2f'_{n-1} \\ 2h^2f'_n - (2-hd_n)n_{n+1}' \end{vmatrix}$$

(Eq, III.29)

O formato geral da equação matricial pode ser escrito como:

$$\begin{vmatrix} s_2 & t_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ r_3 & s_3 & t_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & . & . & . & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & . & . & . & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & . & . & . & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & r_{n-1} & s_{n-1} & t_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & r_n & s_n \end{vmatrix} \times \begin{vmatrix} n_2' \\ n_3' \\ . \\ . \\ . \\ n_{n-1}' \\ n_n' \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} o_2 \\ o_3 \\ . \\ . \\ . \\ o_{n-1} \\ o_n \end{vmatrix} \quad (\text{Eq. III.30})$$

ou

$$[A].[n] = [o] \quad (\text{Eq. III.31})$$

A solução da equação matricial pode ser obtida através do método de Gauss-Jordan para diagonalização da matriz $[A]$ extendida a qual é dada por:

$$[A_e] = \begin{vmatrix} s_2 & t_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & o_2 \\ r_3 & s_3 & t_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & o_3 \\ 0 & . & . & . & 0 & 0 & 0 & 0 & . \\ 0 & 0 & . & . & . & 0 & 0 & 0 & . \\ 0 & 0 & 0 & . & . & . & 0 & 0 & . \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & r_{n-1} & s_{n-1} & t_{n-1} & o_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & r_n & s_n & o_n \end{vmatrix} \quad (\text{Eq. III.32})$$

Na primeira etapa do processo de diagonalização, os termos $r_3, \dots, r_n$ devem ser anulados a partir de combinações lineares com outras linhas. A regra começa pela primeira linha, dividindo-a por y_2 , multiplicando-a por $(-w_3)$ e somando-a com a segunda linha. O procedimento geral sempre começa pela linha 1 e de maneira sequencial vai-se pegando sempre a linha subsequente. De forma geral, toma-se linha “i”, dividindo-a por a_{ii} , multiplicando-a por $(-a_{i+1,i})$ e somando-a com a linha “i+1” para obter a nova linha “i+1”.

Na segunda etapa do processo de diagonalização, os termos $z_2, z_3, \dots, z_{n-1}$ são os que devem ser anulados. A regra começa pela última linha dividindo-a por y_n , multiplicando-a por $(-z_{n-1})$ e somando-a com a penúltima linha. O procedimento geral sempre começa pela linha (n-1) e de maneira sequencial vai-se pegando a linha imediatamente antecedente. De forma geral, toma-se linha “i” dividindo-a por a_{ii} , multiplicando-a por $(-a_{i-1,i})$ e somando-a com a linha “i-1” para obter a nova linha “i-1”.

Ao final das duas etapas de diagonalização, obtemos a matriz estendida na seguinte forma:

$$[A_e] = \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & o_2' \\ 0 & a_{22} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & o_3' \\ 0 & . & . & . & 0 & 0 & 0 & 0 & . \\ 0 & 0 & . & . & . & 0 & 0 & 0 & . \\ 0 & 0 & 0 & . & . & . & 0 & 0 & . \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_{n-2,n-2} & 0 & o_{n-1}' \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_{n-1,n-1} & o_n' \end{pmatrix} \quad (\text{Eq. III.33})$$

Portanto, a solução do sistema de equações fica sendo: $n_2' = o_2' / a_{11}$, $n_3' = o_3' / a_{22}$, ..., $n_{n-1}' = o_{n-1}' / a_{n-2,n-2}$, $n_n' = o_n' / a_{n-1,n-1}$.

Desta forma, é possível resolver a equação de Poisson para o cálculo do potencial elétrico, para a distribuição de cargas sob efeito de iluminação.

III.3. ESTRUTURA DO PROGRAMA

III.3.1 Subrotina para arredondamento de valores

Esta subrotina serve para arredondar valores de resultados, particularmente os de densidade de elétrons e lacunas em cada ponto do dispositivo, para diminuir o tempo de escrita nos arquivos binários. Nas simulações foram usados cerca de 16.000 pontos.

```
{
// chave que abre a série de comandos para determinada etapa //

double resp, intcasa;
char arred[51];
intcasa = casa + 1; // número de casas decimais mais um algarismo
significativo //
gcvt (value, intcasa, arred); // transforma um número em string //
```

```

    resp = atof (arred); // transforma um string em um número double (real) //
    return resp;

}
// chave para fechar a série de comandos //

```

III.3.2 Subrotina de programação para matriz de diagonalização

Uma matriz de ordem n , cuja primeira linha é omitida, é formada por três diagonais pode ser transformada em três vetores: a diagonal principal será um vetor de ordem $n-1$ e as secundárias, de ordem $n-2$. Chamaremos a matriz de $[A]$.

Na subrotina chamada de “matrizediagonais”, a diagonal principal será preenchida com variáveis $y_2, y_3, \dots, y_n$, a secundária inferior será preenchida com variáveis $w_3, w_4, \dots, w_n$ e a secundária superior, pelas variáveis $z_2, z_3, \dots, z_n$. Um quarto vetor é a matriz coluna $[u]$ que representa a resposta do produto da matriz $[A]$ pela matriz coluna representada pelos portadores (chamemos de $[v]$). Ou seja,

$$[A]x[v]=[u].$$

Para diagonalizar a matriz, podemos lançar mão do método de Gauss-Jordan, como já mencionado anteriormente, utilizando a matriz estendida $[A_e]$, com os elementos de $[A]$ mais os elementos de $[u]$, e utilizar a subrotina.

Nesta parte do programa, poderemos chamar os vetores de diagprinc, diagsec1, diagsec2 e prod (elementos do vetor $[u]$), desta forma:

```

matrizediagonais (char carga, double passo[], double a[], double b[], double c[],
double portador[], double param_1, double param_n, int limit, int ref, double dop)

```

// a subrotina pede o passo de simulação, os vetores a, b, c, que são coeficientes para cálculo da distribuição de portadores, e do próprio vetor que representa esses portadores; param_1 é o valor do elétron ou lacuna próximo ao início do vetor e param_n é o valor dos mesmos portadores no final do vetor //

```

{

double diagpri[NUMAX], diagsec1[NUMAX], diagsec2[NUMAX], prod[NUMAX];

double aux, value, acresc;

// nome dos vetores diagonal principal, diagonal inferior, superior e matriz-coluna
u, //

// respectivamente; aux1 é um vetor auxiliar para fazer os cálculos //

int q, r;

// q será a variável entre 2 e n (NUM_SI ou NUM_OX) que indica o índice dos
elementos dos vetores //

// cálculo dos valores iniciais //

// ponto ref é o ponto de referência, equivalente ao ponto vizinho à interface óxido-
silício //

acresc = ((KTQ/passo[ref]) * (2 - (passo[ref] * a[ref])))/((KTQ/passo[ref]) + KTQ * a[ref]
- 1));

// acresc é parte da fórmula para o cálculo do elemento  $y_{ref}$  da diagonal principal //

```

Dentro da subrotina, é preciso tornar os valores de w da diagonal inferior nulos. Para isso, é necessário estabelecer combinações lineares. Por exemplo, para as linhas 2 e 3, em torno do primeiro elemento do vetor diagsec1:

$$\begin{vmatrix}
 y_2 & z_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & u_2 \\
 w_3 & y_3 & z_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & u_3 \\
 0 & . & . & . & 0 & 0 & 0 & 0 & . \\
 0 & 0 & . & . & . & 0 & 0 & 0 & . \\
 0 & 0 & 0 & . & . & . & 0 & 0 & . \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & w_{n-1} & y_{n-1} & z_{n-1} & u_{n-1} \\
 & & & & & 1 & & & \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & w_n & y_n & u_n
 \end{vmatrix}$$

$$\left| \begin{array}{cccccc} y_2 & z_2 & 0 & 0 & \dots & \dots & u_2 \\ w_3 & y_3 & z_3 & 0 & \dots & \dots & u_3 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & & & \dots \end{array} \right|$$

Multiplicando a segunda linha por $-w_3$ e dividindo por y_2 , teremos:

$$\left| \begin{array}{cccccc} -w_3 & -\frac{z_2 w_3}{y_2} & 0 & 0 & \dots & \dots & -\frac{u_2 w_3}{y_2} \\ w_3 & y_3 & z_3 & 0 & \dots & \dots & u_3 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & & & \dots \end{array} \right|$$

Ou seja, em termos de C++, teremos:

Aux1[2] = - diagpri[2]/diagsec1[4]; // é o valor do fator de multiplicação da segunda linha //

Diagsec2[2] = diagsec2[2] * aux1[2]; // o valor da diagonal secundária na segunda linha é multiplicado pelo fator de multiplicação //

Prod[2] = prod[2] * aux1[2];

O valor de diagpri[2] será modificado por último, para minimizar os erros:

Diagpri[2] = - diagsec1[4]; // a multiplicação do valor de diagpri[2] com aux1[2] vai resultar simplesmente no valor de diagsec1[4], com o sinal invertido //

Por sua vez, a terceira linha recebe a soma da segunda e da terceira linha (isso inclui também a matriz produto; neste caso, o valor novo do elemento na posição 3 é o seu valor antigo somado com o valor do elemento da posição 2):

$$\left| \begin{array}{cccccc} -w_3 & -\frac{z_2 w_3}{y_2} & 0 & 0 & \dots & \dots & -\frac{u_2 w_3}{y_2} \\ 0 & y_3 - \frac{z_2 w_3}{y_2} & z_3 & 0 & \dots & \dots & u_3 - \frac{u_2 w_3}{y_2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & & & \dots \end{array} \right|$$

Na terceira linha:

O valor da diagonal principal passa a ser a soma de seu antigo valor com o do elemento acima, ou seja, o da diagonal secundária superior na segunda linha:

Em C++: `diagpri[4] = diagpri[4] + diagsec2[2];`

Isso também vale para o elemento da matriz-coluna produto nesta linha:

Em C++: `prod[4] = prod[4] + prod[2];`

O valor da diagonal secundária inferior é, de toda forma, a soma de seu antigo valor com o do elemento acima. Como são valores iguais e de sinais trocados, a soma é zero. Portanto, simplesmente impõe-se 0 neste elemento: `diagsec1[4] = 0;`

Já o valor da diagonal secundária inferior na terceira linha não muda, pois envolve a soma do valor antigo com o do elemento da mesma coluna na linha anterior, que é zero. Não é preciso escrever nenhum comando para `diagsec2[4]`.

Repete-se o procedimento para as linhas abaixo até a n-ésima linha da matriz, tendo o cuidado de sempre descer uma linha por vez. Assim, na primeira interação usam-se as segunda e terceira linhas, na segunda interação, as terceira e quarta linhas, e assim por diante.

Generalizando, para o C++ temos:

For (`q=2; q<=n; i++`)

{

// modificação dos valores da q-ésima linha //

`Aux1[q] = - diagsec1[q+1]/diagpri[i]; Diagsec2[q]= diagsec2[q]*aux1[q];` // a diagonal secundária superior no ponto q vai passar a ter o valor multiplicado pelo valor recebido por `aux1[q]` //

`Prod[q] = prod[q]*aux1[q];` // o vetor produto também vai ser multiplicado pelo valor recebido por `aux1[q]` //

Diagpri[q]= - diagsec1[q+1]; // o valor de diagpri[q] passa a ser multiplicado pelo valor recebido por aux1[q]; como esse valor se torna igual ao de diagsec1[q+1] com o sinal invertido, vale a substituição direta //

// modificação dos valores dos elementos da linha abaixo da q-ésima //

Diagsec1[q+1]=0; // o valor novo de diagsec1[q+1] é zero, equivalente à soma do valor anterior com o do novo valor adotado por diagpri[q];

Diagpri[q+1] = diagpri[q+1] + diagsec2[q]; // o valor de diagpri[q+1], que até então não foi alterado, passa a ser a soma do seu valor original com o novo valor adotado pelo item acima na matriz, ou seja, diagsec2[q] //

Prod[q+1] = prod[q+1] + prod[i]; // o valor do elemento do vetor “prod” na posição q+1 passa a ser a soma do valor antigo com o do valor na posição q //

}

Faz-se um procedimento semelhante, desta vez subindo as linhas, de n até chegar a 2.

$$\left| \begin{array}{cccc} & & & \dots \\ & & & \dots \\ & & \dots & \\ \dots & 0 & Y'_{n-1} & Z'_{n-1} & U'_{n-1} \\ & & 1 & 1 & \\ \dots & 0 & 0 & Y'_n & U'_n \end{array} \right|$$

Os valores dos elementos dos vetores já foram modificados no procedimento anterior. Logo, não chamaremos mais pelos antigos símbolos. A esta altura, todos os valores da diagonal secundária 1 serão nulos.

Multiplicando a n-ésima linha por um fator – Z'_{n-1}/Y'_n , teremos o valor da diagonal principal nesta linha igual ao valor da diagonal secundária na posição n-1, com o sinal invertido. O valor de U'_n também terá de ser multiplicado por esse fator:

$$\begin{array}{cccccc}
 & & & & \dots & \\
 & & & & \dots & \\
 & & \dots & & & \\
 \dots & \dots & Y'_{n-1} & Z'_{n-1} & U'_{n-1} & \\
 & \dots & 0 & 1 & 1 & \\
 \dots & 0 & 0 & - & -\frac{Z'_{n-1}U'_n}{Y'_n} & \\
 & & & Z'_{n-1} & & \\
 & & & 1 & &
 \end{array}$$

Em C++:

```
Prod[n] = - prod[n]*diagsec2[n-1]/diagpri[n];
```

Diagpri[n] = - diagsec2[n-1]; // a mudança do valor de diagpri[n] terá de ser depois da mudança do valor de prod[n], caso contrário aquele valor não será alterado //

O próximo procedimento é passar para a linha n-1, somando todos os valores desta linha com os da linha posterior. É necessário fazer o mesmo procedimento para a matriz-coluna produto, somando o elemento da linha n-1 com o da linha n.

$$\begin{array}{cccccc}
 & & & & \dots & \\
 & & & & \dots & \\
 & & \dots & & & \\
 \dots & \dots & Y'_{n-1} & 0 & U'_{n-1} - \frac{Z'_{n-1}U'_n}{Y'_n} & \\
 & & 1 & & & \\
 \dots & 0 & 0 & - & -\frac{Z'_{n-1}U'_n}{Y'_n} & \\
 & & & Z'_{n-1} & & \\
 & & & 1 & &
 \end{array}$$

Neste caso, são poucos os procedimentos necessários: modificar o valor da função prod[n-1] e do elemento diagsec2[n-1], no C++:

```
Prod[n-1] = prod[n-1] + prod[n]; // o valor de prod[n] já foi previamente modificado //
```

```
Diagsec2[n - 1] = 0;
```

Em termos gerais:


```

For (q = NUMAX; q > 2; q--)

{

Prod[q] = prod[q] * diagsec2[q - 1] / diagpri[q];

Diagpri[q] = - diagsec2[q - 1];

Prod[q - 1] = prod[q - 1] + prod[q];

Diagsec2[q - 1] = 0;

}

```

Por fim, resolve-se o sistema de equações, sabendo-se que a matriz já está diagonalizada:

```

For (q = 2; q <= NUMAX; q++)

portador[q] = prod[q]/diagpri[q];

```

III.3.3 Programa principal

O programa principal (main) reúne as subrotinas acima e compila-as, utilizando uma quantidade de passos (usualmente, 16.000), definida por uma constante NUMAX. O cálculo do tamanho do passo (h) também é calculado no programa principal. Inicialmente, a dopagem (chamada de NA) não é calculada, mas sim definida como uma constante.

Para o cálculo das matrizes de diagonalização, chama-se simplesmente a subrotina, mudando os parâmetros conforme a natureza do portador e a presença ou ausência de portadores em processo de tunelamento no óxido. Assim, para lacunas:

```

{

    if (opcaoproc == 'n') // ausência de tunelamento //

        matrizediagonais ('l', step, kA, kB, kC, vetor, vetor[NUM_OX], p_in, l-1,
NUM_OX+1, NA);

    else if (opcaoproc == 's') // mudança do referencial para presença de tunelamento
//

        matrizediagonais ('l', step, kA, kB, kC, vetor, vetor[0], p_in, l-1, 1, NA); //
cálculo da densidade de lacunas usando a matriz de diagonalização //

```

E, para elétrons, substitui-se "p_in" por "n_in" e 'l' (de lacunas) por 'e' (de elétrons). O parâmetro kA também é substituído por kAe = - kA.

Os parâmetros de simulação são declarados e calculados no programa principal, e incluem, além da dopagem NA citada anteriormente:

- espessura do óxido;
- espessura do silício;
- tensão de porta;
- número de pontos de simulação;
- densidade de armadilhas no óxido.

Após a definição dos parâmetros, faz-se a inicialização dos vetores e o carregamento dos valores iniciais, guardando-os em arquivos binários (.dat). Os arquivos são os seguintes:

Posição.dat (posição dos passos de simulação);

Elétrons.dat (dados da concentração de elétrons em cada passo);

Lacunas.dat (dados da concentração de lacunas);

Potencial.dat (dados do potencial);

Campo.dat (dados do campo elétrico);

Derivada.dat (dados da derivada do campo elétrico).

Cada um deles armazena os dados em todos os passos de simulação, e são manipulados pelos comandos *fread* (que lê os dados) e *fwrite* (para reescrevê-los).

Então, pode-se opinar por imprimir os valores iniciais ou passar para os procedimentos de simulação propriamente ditos. Define-se um número fixo de loops, que podem ser:

- gerais (*Lop*);
- de diagonalização para rodar a subrotina (*k*);
- para rodar o potencial (*m*).

Para cada *loop* geral, executa-se automaticamente um cálculo de diagonalização e um de potencial. Os comandos executados pelos *loops* de derivada e de potencial são independentes entre si e fazem parte dos comandos executados pelo *loop* geral, ou seja:

```
For (i_ext = 0; i_ext <= Lop; i_ext ++)
```

```
// comandos gerais //
```

```
For (i = 0; i <= k; i ++)
```

```
// comandos da derivada e da diagonalização //
```

```
For (j = 0; j <= m; j ++)
```

```
// comandos do potencial //
```

```
}
```

No *loop* de potencial, a partir dos valores dos portadores obtidos e armazenados por meio dos arquivos *elétrons.dat* e *lacunas.dat*, é feito o cálculo da derivada de acordo com a equação de Poisson vista anteriormente no item III.2.1. (Eq. III. 1):

$$\nabla^2 \phi = \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = -\frac{\rho}{\varepsilon} \quad (\text{Eq. III.1})$$

Onde ϕ é o potencial, y é o eixo unidimensional adotado, ρ é a resistividade e ε é a constante dielétrica, ambas em função de y .

Para o cálculo do potencial, devemos utilizar algum método de derivação. O método escolhido foi o das diferenças finitas. Conforme já visto anteriormente, a resistividade pode ser expressa pela equação III.2 do item III.2.1.:

$$\rho(x) = q(-n(x) + p(x) + C) \quad (\text{Eq. III. 2})$$

Que é equivalente ao comando:

```
if (i < NUM_OX)
```

```
    deraux[i] = (- N + P) * CGA_FUND / (EOX * E_ZERO); // cálculo da derivada em
um ponto do óxido //
```

```
    else if (i < n) // n é o número necessário para alcançar uma espessura pré-definida
no silício //
```

```
        deraux[i] = (- N + P - NA) * CGA_FUND / (ES * E_ZERO); // cálculo da derivada
em um ponto do silício //
```

Ao final da simulação, todos os dados são gravados em arquivos .txt, cada qual representando uma categoria (elétrons, lacunas, campo elétrico, potencial

elétrico, derivada do campo elétrico e posição), reproduzindo o conteúdo gravado nos respectivos arquivos .dat.

A ideia primordial do programa pode também ser explicada pelo diagrama a seguir, representado pela série de figuras III. 1 que representa a sequência das principais tarefas, de (a) até (h).

O bloco A representa o programa principal, enquanto o bloco a ele subordinado A' é a parte sujeita aos *loops* gerais. No interior, existem os blocos D e E, representando os comandos para calcular portadores e potencial, respectivamente, cada qual com seus próprios *loops*. Eles, e particularmente o bloco D, interagem com as subrotinas B (matriz de diagonalização) e C (arredondamento de dados).

Quando há convergência nos dados gravados dos arquivos .dat referentes aos elétrons, lacunas e potencial, eles são liberados para gravação nos arquivos .txt.

Figura III.2 - Diagrama de blocos representando a estrutura do programa: (a) estrutura básica, após a criação dos arquivos .dat; (b) cálculo dos portadores usando a diagonalização; (c) arredondamento dos valores calculados; (d) 'loop' para o bloco de portadores; (e) reescrita dos arquivos pelo bloco que calcula o potencial (e também campo e derivada), após receber os dados dos portadores e efetuar os cálculos; (f) 'loop' do potencial; (g) 'loop' geral para recomençar o processo, entre (b) e (f); (h) após o processo de simulação, os dados são liberados.

- A - Programa principal
- A' - Conjunto de comandos dentro do loop geral
- B - Subrotina 'Matrizdiagonais'
- C - Subrotina 'Arredondar'

(a)

(Continua na próxima página)

(b)

(c)

(d)

(Continua na próxima página)

(e)

(f)

(g)

(Continua na próxima página)

Fonte: Autor

APÊNDICE IV

VALIDAÇÃO DO PROGRAMA

IV.1. SEM ILUMINAÇÃO

Inicialmente, foram feitos estudos sobre os capacitores pMOS e nMOS e a simulação em C++ da distribuição de potencial e de cargas sem iluminação (sem geração óptica).

Os parâmetros utilizados foram:

- Dopagem: 10^{14} e 10^{15} cm^{-3}
- Espessura do silício: $50 \mu\text{m}$
- Espessura do óxido: 2 nm
- Tensões de porta: $0,5$ a $5,0 \text{ V}$ (nMOS) e $-0,5$ a $-5,0 \text{ V}$ (pMOS)
- Número de pontos de simulação: 16.000

IV.1.1. pMOS

Seguem-se os gráficos do capacitor pMOS, por meio da compilação dos programas em C++. Foram usados 16.000 pontos para a simulação.

Figura IV.1 – Distribuição de elétrons e lacunas em capacitor pMOS com $V_g = -2 \text{ V}$ para dopagem de 10^{14} cm^{-3}

Fonte: Autor

Na Figura IV.1 pode-se notar que, na região de substrato, o valor dos portadores se mantém constante, mas na região de depleção há diminuição no valor de elétrons e aumento no valor de lacunas. A região de inversão junto à interface óxido-substrato apresenta uma quantidade significativa de portadores minoritários, de acordo com o esperado para uma tensão de porta $V_g = -2$ V significativamente menor que a tensão de limiar, no caso $V_t = -0,46$ V.

A distribuição de potencial elétrico em Volts vista na Figura IV.2 mostra a típica curva característica da tensão na região de inversão, para algumas tensões de porta, conforme se segue:

Figura IV.2 – Distribuição de potencial em capacitor PMOS para diversas tensões de porta para dopagem de 10^{14} cm⁻³; (a) visão geral; (b) visão da região de inversão

(a)

(b)

Fonte: Autor

De acordo com a Figura IV.2, os resultados do potencial elétrico são relativamente baixos ($|V| < 10^{-2}$ V), mas aumentando significativamente à medida que se aproxima do limite da região de depleção, onde a derivada da curva vai se tornando menor, até o potencial elétrico atingir cerca de - 0,6 V, para um potencial de porta inferior a - 1 V. Na região de inversão, onde se forma o canal (para tensões de porta abaixo da tensão de limiar), a curva de potencial assume um formato parabólico típico, e na interface com o óxido a tensão equivale a aproximadamente - 0,8 V. Dentro do óxido, o potencial elétrico varia a partir deste último valor, até a tensão de porta fornecida.

Conforme o esperado, para um valor superior à tensão de limiar, neste caso $V_g = -0,5$ V, houve apenas um ligeiro aumento na tensão na região do silício próxima à interface com o óxido. Neste caso, não se pode afirmar, propriamente, sobre a formação de uma camada de inversão.

IV.1.2. nMOS

Os procedimentos adotados para o nMOS são os mesmos dos feitos para o pMOS, isto é, verificadas as distribuições de portadores e de potencial ao longo da espessura do dispositivo. Também foram usados 16.000 pontos para a simulação.

Figura IV.3 – Distribuição de elétrons e lacunas em capacitor nMOS com $V_g = 2$ V, para dopagem de 10^{14} cm^{-3}

Fonte: Autor

Os resultados da distribuição de portadores mostrados na Figura IV.3 foram semelhantes aos encontrados no modelo pMOS (Fig. IV.2). O mesmo se pode afirmar na Figura IV.4 a seguir, que mostra a distribuição de potencial, se compararmos com a Figura IV.2 do pMOS.

Figura IV.4 – Distribuição de potencial em capacitor nMOS para diversas tensões de porta para dopagem de 10^{14} cm^{-3} ; (a) visão geral; (b) visão da região de inversão

(a)

(b)

Fonte: Autor

As observações feitas na Figura IV.2, sobre o comportamento do potencial elétrico em função da distância, no capacitor pMOS, são válidas para a Figura IV.4, que mostra um capacitor equivalente nMOS. Salienta-se que nos capacitores nMOS a tensão de porta e os potenciais elétricos são positivos, ao contrário dos capacitores pMOS.

IV.2. COM ILUMINAÇÃO

Em presença da luz, a geração óptica decorrente da absorção do espectro eletromagnético acarreta maior concentração de portadores na região de depleção, ampliando-a.

Nas simulações, o aumento na depleção, para dopagem de 10^{14} cm^{-3} , foi expressivo, passando de 2,4 para 6,8 nm. Foram utilizados 16.000 passos na simulação.

Figura IV.5 – Concentração de portadores para dispositivo MOS com iluminação e dopado com impurezas tipo P a 10^{14} cm^{-3} ; (a) visão geral; (b) visão junto à interface

(a)

(Continua na próxima página)

(b)

Fonte: Autor

APÊNDICE V

OBTENÇÃO DOS PARÂMETROS ψ_s E Q_s E MODELAGEM DA REGIÃO DE DEPLEÇÃO

A capacitância C_s medida pelo aparelho HP4280 é o resultado da capacitância do óxido C_{ox} e a da região de depleção C_{depl} , dispostas em série, em frequência de 1 MHz.

Ela pode ser calculada a partir da derivada da carga do semiconductor dentro da região de depleção em relação ao potencial de superfície (inflexão) ψ_s , ou seja:

$$C_s = -\frac{dQ_s}{d\psi_s} \quad (\text{Eq. V.1})$$

Para calcularmos a carga Q_s , deveremos lançar mão da equação de Poisson, considerando estado não estacionário e regime de depleção profunda:

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = -\frac{q(p(x) - N_A)}{\epsilon_{Si}} \quad (\text{Eq. V.2})$$

A Equação V.2 pode ser reescrita apenas em termos de N_A , a concentração de elementos aceitadores:

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = -\frac{qN_A[\exp(-\frac{q\phi(x)}{k_B T}) - 1]}{\epsilon_{Si}} \quad (\text{Eq. V.3})$$

Considerando:

$$2 \cdot \left(\frac{d\phi}{dx}\right) \cdot \frac{d^2\phi}{dx^2} = \frac{d}{dx} \left(\frac{d\phi}{dx}\right)^2$$

pode-se escrever:

$$2 \cdot \left(\frac{d\phi}{dx} \right) \cdot - \frac{qN_A [\exp(-\frac{q\phi(x)}{k_B T}) - 1]}{\epsilon_0 \epsilon_{Si}} = \frac{d}{dx} \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2$$

ou

$$- 2 \cdot (d\phi) \cdot \frac{qN_A [\exp(-\frac{q\phi(x)}{k_B T}) - 1]}{\epsilon_0 \epsilon_{Si}} = d \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 \quad (\text{Eq. V.4})$$

Esta equação pode ser integrada nos dois lados, chegando a:

$$\int_0^{\psi_s} - 2 \frac{qN_A [\exp(-\frac{q\phi(x)}{k_B T}) - 1]}{\epsilon_0 \epsilon_{Si}} d\phi = \int_0^{E_s} d \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2$$

ou seja, integrando o termo da esquerda entre 0 e o valor do potencial de superfície, e o termo da direita entre 0 e o campo E_s , lembrando que $-d\phi(x)/dx = E(x)$, teremos:

$$- \frac{2 \cdot q \cdot N_A}{\epsilon_0 \epsilon_{Si}} \left\{ \left[- \frac{k_B T}{q} \cdot \exp(-\frac{q\phi(x)}{k_B T}) \right] - \phi \right\}_0^{\psi_s} = E_s^2$$

ou

$$- \frac{2 \cdot q \cdot N_A}{\epsilon_0 \epsilon_{Si}} \left\{ - \frac{k_B T}{q} \cdot [\exp(-\frac{q\psi_s}{k_B T}) - 1] - \psi_s \right\} = E_s^2$$

ou

$$\frac{2 \cdot q \cdot N_A}{\epsilon_0 \epsilon_{Si}} \left\{ \frac{k_B T}{q} \cdot [\exp(-\frac{q\psi_s}{k_B T}) - 1] + \psi_s \right\} = E_s^2 \quad (\text{Eq. V.5})$$

Como $Q_s = -A\epsilon_{Si}E_s$ [27], então teremos, a partir da Equação V.5, a expressão da carga:

$$Q_s = -A \sqrt{2 \cdot q \cdot N_A \epsilon_0 \epsilon_{Si}} \sqrt{\frac{k_B T}{q} \cdot [\exp(-\frac{q\psi_s}{k_B T}) - 1] + \psi_s} \quad (\text{Eq. V.6})$$

Calculando a derivada da carga em termos de ψ_s :

$$\frac{dQ_s}{d\psi_s} = -\sqrt{2 \cdot q \cdot N_A \epsilon_o \epsilon_{Si}} \frac{A}{2 \sqrt{\frac{k_B T}{q} \cdot [\exp(-\frac{q\psi_s}{k_B T}) - 1] + \psi_s}} [-\exp(-\frac{q\psi_s}{k_B T}) + 1]$$

ou, considerando a Equação V.1 e

$$\frac{\sqrt{2 \cdot q \cdot N_A \epsilon_o \epsilon_{Si}}}{2} = \epsilon_o \epsilon_{Si} \cdot \frac{1}{\sqrt{2 \frac{\epsilon_o \epsilon_{Si}}{q N_A}}}, \text{ temos:}$$

$$C_s = \frac{\epsilon_o \epsilon_{Si} [1 - \exp(-\frac{q\psi_s}{k_B T})] \cdot A}{\sqrt{\frac{2 \epsilon_o \epsilon_{Si}}{q N_A}} \cdot \sqrt{\frac{k_B T}{q} [\exp(-\frac{q\psi_s}{k_B T}) - 1] + \psi_s}} \quad (\text{Eq. V.7})$$

Que é a Equação 3.2 do item “Metodologia”.

O parâmetro ψ_s pode ser trabalhado em função dele próprio, ou melhor, de seu exponencial ($\exp(-q\psi_s/k_B T)$). Ele será recalculado até atingir um valor de convergência:

$$C_s = \frac{\epsilon_o \epsilon_{Si} [1 - \exp(-\frac{q\psi_s}{k_B T})] \cdot A}{\sqrt{\frac{2 \epsilon_o \epsilon_{Si}}{q N_A}} \cdot \sqrt{\frac{k_B T}{q} [\exp(-\frac{q\psi_s}{k_B T}) - 1] + \psi_s}}$$

ou

$$\sqrt{\frac{k_B T}{q} [\exp(-\frac{q\psi_s}{k_B T}) - 1] + \psi_s} = \frac{\epsilon_o \epsilon_{Si} [1 - \exp(-\frac{q\psi_s}{k_B T})] \cdot A}{\sqrt{\frac{2 \epsilon_o \epsilon_{Si}}{q N_A}} \cdot C_s}$$

Elevando os dois lados da igualdade ao quadrado, teremos:

$$\frac{k_B T}{q} [\exp(-\frac{q \psi_s}{k_B T}) - 1] + \psi_s = \left\{ \frac{\varepsilon_o \varepsilon_{Si} [1 - \exp(-\frac{q \psi_s}{k_B T})] \cdot A}{\sqrt{\frac{2 \varepsilon_o \varepsilon_{Si}}{q N_A} \cdot C_S}} \right\}^2$$

Dessa forma, chegamos ao valor do potencial de superfície dado pela equação V.8 (equação 3.3 no texto principal):

$$\psi_s = \left\{ \frac{\varepsilon_o \varepsilon_{Si} [1 - \exp(-\frac{q \psi_s}{k_B T})] \cdot A}{\sqrt{\frac{2 \varepsilon_o \varepsilon_{Si}}{q N_A} \cdot C_S}} \right\}^2 - \frac{k_B T}{q} [\exp(-\frac{q \psi_s}{k_B T}) - 1] \quad (\text{Eq. V.8})$$

(fórmula geral)

Podemos começar o processo de convergência a partir de um valor ψ_s inicial, obtido a partir da região onde a capacitância é constante (e mínima), e a exponencial ($\exp(-q\psi_s/k_B T)$) assume valores desprezíveis, devido ao valor de ψ_s ser suficientemente elevado ($> 2\phi_s$). A capacitância é aqui chamada de capacitância de referência (C_{ref}).

Neste caso, o valor do potencial inicial pode ser desenvolvido como segue até chegar à Equação V.9:

$$\psi_s = \psi_{inicial} = \left\{ \frac{\varepsilon_o \varepsilon_{Si} [1 - (0)] \cdot A}{\sqrt{\frac{2 \varepsilon_o \varepsilon_{Si}}{q N_A} \cdot C_{ref}}} \right\}^2 - \frac{k_B T}{q} [(0) - 1] \quad \text{ou}$$

$$\psi_{inicial} = \left\{ \frac{\varepsilon_o \varepsilon_{Si} \cdot A}{\sqrt{\frac{2 \varepsilon_o \varepsilon_{Si}}{q N_A} \cdot C_{ref}}} \right\}^2 + \frac{k_B T}{q} \quad \text{ou}$$

$$\psi_{inicial} = \left(\frac{\epsilon_o \epsilon_{Si} \cdot A}{C_{ref}} \right)^2 \cdot \frac{q N_a}{2 \epsilon_o \epsilon_{Si}} + \frac{k_B T}{q} \quad (\text{Eq. V.9})$$

De fato, este valor de ψ_s inicial só será igual para os pontos onde a tensão de porta é bem maior que a de linear. Nos demais pontos, ele será bem diferente, e então será necessário utilizar a fórmula geral, aplicando a exponencial do ψ_s previamente calculado, até o valor resultante desta fórmula convergir.

A tensão de porta V_g é dada pela equação V.10:

$$V_g = V_{FB} + \psi_s - \frac{Q_I}{C_{ox}} \quad (\text{Eq. V.10})$$

sendo V_{FB} a tensão de banda plana e V_{ox} a diferença de potencial no óxido, que pode ser expressa (Equação V.11):

$$V_{ox} \approx 0 \quad (\text{Eq. V.11})$$

Assim, isolando a carga e aplicando a equação V.11 em V.10, temos a equação V.12:

$$\frac{Q_I}{C_{ox}} = V_g - V_{FB} - \psi_s \quad (\text{Eq. V.12})$$

A razão de cargas $QIq = Q_I/q$, dessa forma, pode ser facilmente obtida a partir da equação V.8, chegando à expressão vista na equação V.12:

$$QIq = \frac{Q_I}{q} = C_{ox} \cdot \frac{1}{q} \cdot \frac{Q_I}{C_{ox}} = C_{ox} \cdot \frac{1}{q} \cdot (V_g - V_{FB} - \psi_s) \quad (\text{Eq. V.12})$$

Nota-se que a Eq. VI.1 envolve uma integral complexa. As constantes associadas à densidade de corrente são:

n_m = fator de degenerescência de banda, dependente da simetria cristalina; para silício do tipo < 1 0 0 >, $n_m = 1$.

m^* é a massa efetiva do elétron, por densidade de estados; é a massa do elétron ($9,109383 \times 10^{-28}$ g) vezes o fator de densidade de estados (1,08).

k é a constante de Boltzmann ($k = 1,38064 \times 10^{-16}$ cm² g s⁻² K⁻¹)

$T = 300$ K

$\hbar$ é a constante de Planck reduzida, equivalente à constante de Planck ($6,62607 \times 10^{-30}$ cm² kg s⁻¹) dividida por 2π . A título de simplificação, a densidade de estados de interfaces de estados D_{it} e o fator σ_T , que é a secção transversal das interfaces, são trabalhadas como constantes. Dessa forma:

$D_{it} = 4 \times 10^{10}$ cm⁻² eV⁻¹, vinculada à diferença $E - E_f = q\phi_f = kT \ln(N_A/n_i)$.

σ_T é, a princípio, constante, mas será um fator de ajuste para o casamento entre os cálculos da densidade de corrente J_{TEDit} .

A integral

$$\int_{\Phi_{Cs}}^{\Phi_{Cg}} P_t(\Phi) \cdot \ln\left(1 + \exp\left(\frac{\Phi_f - \Phi}{kT}\right)\right) d\Phi \quad (\text{Eq. VI.2})$$

$$\text{Sendo } P_T(\Phi) = \exp\left\{-\frac{4\pi}{h} \int_{x_{ox}}^0 2m[\Phi_{barreira}(x) - \Phi]^{\frac{1}{2}} dx\right\} \quad (\text{Eq. VI.3})$$

onde

h é a constante de Planck ($h = 6,62607 \times 10^{-30} \text{ cm}^2 \text{ kg s}^{-1}$ no sistema CGS e $h = 4,135667 \times 10^{-15} \text{ eV s}^{-1}$ no sistema que envolve eV. O valor h é um intermediário entre esses valores.

Φ_{barreira} é o nível energético mais alto da barreira (óxido), não tem solução trivial. Foi empregado um método de discretização com n passos, cada um equivalente a $H = (\Phi_{\text{cs}} - \Phi_{\text{cg}})/n$.

O ponto inicial da integração é dado por:

$\Phi_f - \Phi_{\text{cg}} = -q V_g$ (para energia em eV, a diferença é numericamente igual a V_g).

Ao longo do óxido, a cada passo, temos:

$$\Phi_f - \Phi_1 = -q V_g - H \text{ (Eq. VI.4)}$$

$$\Phi_f - \Phi_n = -q V_g - nH \text{ (Eq. VI.5)}$$

O ponto final da integração é dado por:

$$\Phi_f - \Phi_{\text{cs}} = \Phi_f - (\Phi_{\text{cg}} + q\phi_f + 0,55 - q\psi_s) \text{ (Eq. VI.6)}$$

Onde $\phi_f = \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{N_A}{n_i}\right)$ e ψ_s é o potencial de superfície, dada por:

$$\psi_s = V_g - V_{\text{ox}} - V_{\text{FB}} = V_g - \frac{\sqrt{2q\epsilon_{\text{Si}} N_A \psi_s}}{C_{\text{ox}}} - V_{\text{FB}} \text{ (Eq. VI.7)}$$

ou

$$\psi_s + \frac{\sqrt{2q\epsilon_{\text{Si}} N_A \psi_s}}{C_{\text{ox}}} - V_g + V_{\text{FB}} = 0 \text{ (Eq. VI.8)}$$

Considerando $X = \sqrt{\psi_s}$, teremos uma equação de segundo grau:

$$X^2 + \frac{\sqrt{2q\epsilon_{Si}N_A}}{C_{ox}} X - V_g + V_{FB} = 0 \text{ ou } X^2 + BX + C = 0 \text{ onde } B = \frac{\sqrt{2q\epsilon_{Si}N_A}}{C_{ox}} \text{ e } C = -V_g + V_{FB}$$

Resolvendo esta equação, teremos

$$X = \frac{1}{2}[-B \pm \sqrt{B^2 - 4C}] \text{ (Eq. VI.9)}$$

ou:

$$\psi_s = X^2, \psi_s > 0,$$

Resultando em

$$\psi_s = \frac{1}{4}[B^2 \pm 2\sqrt{B^2 - 4C} + B^2 - 4C] \text{ ou}$$

$$\psi_s = \frac{1}{2}[B^2 \pm \sqrt{B^2 - 4C} - 2C] \text{ (Eq. VI.10)}$$

B é constante e vale $B = \frac{\sqrt{2q\epsilon_{Si}N_A}}{C_{ox}} = \frac{2 \times 10^{-7} \sqrt{2 \times 1,6 \times 10^{-19} \times 8,85 \times 10^{-14} \times 1,7 \times 10^{15}}}{8,85 \times 10^{-14} \times 1,7} = 1,05 \times 10^{-2}$

C é função de V_g , $C = -V_g + V_{FB}$, onde:

$$V_{FB} = \phi_{MS} - \frac{Q_{iq}}{C_{ox}} \text{ (Eq. VI.11)}$$

Para $V_g > 0$, V_{FB} tende a ϕ_{MS} , pois $\frac{Q_{iq}}{C_{ox}} > 0$ e ocorre depleção profunda.

Para $\phi_{MS} < V_g < 0$, $V_{FB} \cong \phi_{MS}$ pois $\frac{Q_{iq}}{C_{ox}} \cong 0$.

$V_g < \phi_{MS}$, vale a equação VI.11 em sua forma geral, pois $\frac{Q_{iq}}{C_{ox}} > 0$ na região de acumulação.

Fazendo a discretização da integral dada pela Eq. VI.3, deveremos calcular, para cada passo H da integral em função da energia, o valor de $P_T(\Phi)$:

$$P_T(\Phi) = \exp\left\{-\frac{4\pi}{h} \sum_{i=1}^{20} [\sqrt{2m^* (\Phi_{barreira} - \Phi)}] \Delta t\right\}, \quad \Delta t = \frac{t_{ox}}{20} \quad (\text{Eq. VI.12})$$

O potencial de barreira $\Phi_{barreira}$ é uma função de x , que deve ser definido a cada passo para a função probabilidade de tunelamento, que será chamado de h .

$$\Phi = \Phi_{cg} + H \quad (\text{Eq. VI.13})$$

$$\Phi_{barreira} - \Phi = \Phi_{barreira} - (\Phi_{cg} + H) \quad (\text{ sinal de menos no H})(\text{Eq. VI.14})$$

Junto à interface metal-óxido, o potencial de barreira, que é a diferença entre o nível da barreira e o potencial E_{cg} , é igual a 0,8 eV. Apenas o potencial de barreira varia dentro do óxido.

Fazendo a igualdade energética na banda de silício, entre o ponto de andamento definido por H e o ponto final (interface óxido-semicondutor), temos:

$$qV_g + (\Phi_{barreira} - \Phi_{cg}) + qV_{ox} \left(\frac{t_{ox} - n\Delta t}{t_{ox}} \right) + \Phi_{ox} = q\phi_f + 0,55 + \chi_{Si}$$

ou

$$\Phi_{barreira} - \Phi_{cg} = q\phi_f + 0,55 + \chi_{Si} - qV_g - qV_{ox} \left(\frac{t_{ox} - n\Delta t}{t_{ox}} \right) - \Phi_{ox} \quad (\text{Eq. VI.15})$$

Substituindo Φ_{cg} por $\Phi + H$, temos:

$$\Phi_{barreira} - \Phi = q\phi_f + 0,55 + \chi_{Si} - qV_g - qV_{ox} \left(\frac{t_{ox} - n\Delta t}{t_{ox}} \right) - \Phi_{ox} - H \quad (\text{Eq. VI.16})$$

onde Φ_{ox} é a distância entre o nível E_C de condução do óxido e o nível de vácuo, e vale 0,9 eV. t_{ox} é a espessura do óxido $t_{ox} = 2$ nm. Os segmentos Δt são os tamanhos dos passos da espessura ($\Delta t = t_{ox}/n = 2/20 = 0,1$ nm, considerando $n = 20$). χ_{Si} é a afinidade eletrônica do silício e vale 4,15 eV. A diferença de potencial ϕ_f é de 0,287 V para $N_A = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$.

Para o modelamento da corrente de tunelamento por meio de um centro de armadilhas efetivo no dielétrico de porta (J_{INE}), adota-se a fórmula descrita na equação VI.17 [33]:

$$J_{INE} = q\sigma N_{tr} v_{th} T_2 p_s \quad (\text{Eq. VI.17})$$

onde σ é a secção transversal da armadilha, N_{tr} é a concentração de armadilhas, v_{th} é a velocidade térmica, T_2 é a probabilidade de tunelamento entre a armadilha e o substrato e p_s é a concentração de lacunas no substrato. Esta fórmula vale para locais onde há o equilíbrio entre J_e e J_h , que são as densidades de corrente de tunelamento inelástico dos portadores [33]. Considera-se que esse equilíbrio ocorre em diferentes posições ao longo do dielétrico sendo que a densidade de corrente é assume valor máximo a cerca de 8 Å (0,8 nm) da interface óxido-semicondutor.

- σ é um parâmetro de ajuste, de acordo com V_g .
- N_{tr} é uma concentração fixa e invariante com V_g .
- P_s é a concentração de lacunas no substrato, e vale aproximadamente a dopagem, na acumulação, e $p_s = n_i \exp[\frac{q(\phi_f - \psi_s)}{kT}]$ na depleção.

- V_{th} é a velocidade térmica que é constante e vale [62]:

$$v_{th} = \sqrt{\frac{3k_B T}{m^*}} \quad (\text{Eq. VI.18})$$

onde k_B é a constante de Boltzmann ($k = 1,38064 \times 10^{-16} \text{ cm}^2 \text{ g s}^{-2} \text{ K}^{-1}$), m^* é a massa efetiva do elétron que se desloca para o substrato ($1,08 \times 9,109383 \times 10^{-28} \text{ g}$) e T é a temperatura em Kelvin (300 K).

De todas as grandezas envolvidas, a probabilidade de tunelamento T_2 é a mais trabalhosa para o cálculo. Ela pode ser calculada da forma similar à probabilidade P_t , com algumas adaptações[15, 20]:

$$T_2(\Phi) = \exp\left\{-\frac{4\pi}{h} \sum_{i=1}^{20} [\sqrt{2m^*(\Phi_{barreira} - \Phi)}] \Delta t\right\}, \quad \Delta t = \frac{t_{ox}}{20} x \frac{x_{trap}}{t_{ox}} \quad (\text{Eq. VI.19})$$

onde:

$$\Phi_{barreira}(x_i) - \Phi = q\phi_f + 0,55 + \chi_{Si} - qV_g - q \frac{x_{trap}}{t_{ox}} V_{ox} \left(\frac{x_i}{t_{ox}} \right) - \Phi_{ox} \quad (\text{Eq. VI.20})$$

Neste caso, $x_{trap} = 0,8 \text{ nm}$ e $t_{ox} = 2 \text{ nm}$, com $\phi_f = 0,289 \text{ V}$ (para $N_a = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$), $\chi_{Si} = 4,15 \text{ eV}$ e $\Phi_{ox} = 0,9 \text{ eV}$.

V_{ox} deve ser calculado de acordo com as regiões (acumulação e depleção).

No primeiro caso, V_{ox} é dado por $V_{ox} = V_g - \frac{Q_{iq}}{C_{ox}}$, dado que o potencial de superfície ψ_s

pode ser considerado desprezível na acumulação. No segundo caso, $V_{ox} = \frac{\sqrt{2q\epsilon_{Si}N_A\psi_s}}{C_{ox}}$,

sendo que V_{ox} é negativo na acumulação, anula-se quanto $V_g = V_{FB}$ e torna-se positivo na região de depleção. V_g é considerado sempre positivo pela convenção adotada no cálculo da barreira.

REFERÊNCIAS

- [1] MATHEWS I. *et al.*, **Performance of III-V Solar Cells as Indoor Light Energy Harvester**, IEEE Journal of Photovoltaics, p. 1-6, 2015.
- [2] EVANCZUK S. **Specialized ICs, PV Cells Enable Energy Harvesting from Indoor Lighting**, Digi-Key Electronics. 2015. Disponível em: <<http://www.digikey.com/en/articles/techzone/2015/feb/specialized-ics-pv-cells-enable-energy-harvesting-from-indoor-lighting>>. Acesso em: 23 jan. 2017.
- [3] TODD C. D. **Tunnel-diode applications**, IEEE Vol. 80, Issue 4, 1961.
- [4] GREEN M. A. *et al.* **Minority Carrier MIS Tunnel Diodes and Their Application to Electron and Photovoltaic Energy Conversion I. Theory**, Solid State Electron, v. 17, p. 551-572, 1974.
- [5] SILVACO, INC. **Luminous**. Disponível em: <<http://www.silvaco.com/content/kbase/luminous.pdf>>. Acesso em: 20 set. 2013.
- [6] LIN C. *et al.* **A Comprehensive Study of Inversion Current in MOS Tunneling Diodes**, IEEE, v. 48, n. 9, p. 2125-2130, 2001.
- [7] GHETTI A. *et al.* **Self-consistent simulation of quantization effects and tunneling current in ultra-thin gate oxide MOS devices**, Proc. Simulation of Semiconductor Processes and Devices, p. 239-242, 1999.
- [8] IELMINI D. *et al.* **Modelling of SILC Based on Electron and Hole Tunneling – Part I: Transient Effects**, IEEE Trans. Electron Devices, v. 47, n. 6, p. 1258-1265, 2000.
- [9] FIGUEIREDO J. M. L. *et al.* **Resonant tunneling diode optoelectronic integrated circuits**, SPIE v. 7608, 76080I-1, 2010.
- [10] O'REAN P. G. **The Application of Tunnel Diodes to Switching and Logical Circuits**, tese de doutorado da California Institute of Technology, 1964.

- [11] KUHLMANN B. **Simulation and Optimization of Metal–Insulator–Semiconductor Inversion-Layer Silicon Solar Cells**, IEEE, vol. 47, n. 11, p. 2167-2178, 2000.
- [12] ESAKI, L. **New Phenomenon in Narrow Germanium p-n Junctions**, Phys. Rev. v. 109, Issue 2, p. 603-604, 1958.
- [13] HU, CHENMING C. **Modern Semiconductor Devices for Integrated Circuits**, 1^a ed., Cap. 5, pg. 157-194, 2009. Disponível em: <https://people.eecs.berkeley.edu/~hu/Chenming-Hu_ch5.pdf>. Acesso em: 15 abr 2015.
- [14] MERZBACHER, E. **The Early History of Quantum Tunneling**, Physics Today, p. 44-49, 2002.
- [15] RAZAVY M. **Quantum Theory of Tunneling**, 2^a ed., Cap. 2, p. 17-29, World Scientific, 2014.
- [16] VEXLER M. I. *et al.* **Compact quantum model for a silicon MOS tunnel diode**, Microelectronic Engineering, v. 59, Issues 1-4, p. 161-166, Elsevier, 2001.
- [17] YANG K. J., C. HU **MOS Capacitance Measurements for High-Leakage Thin Dielectrics**, IEEE Transactions on electron devices, v. 46, n. 7, 1999.
- [18] RIBES G. *et al.*, **Review of High-k Dielectrics Reliability Issues**, IEEE Transactions on device and materials reliability, v. 5, n. 1, 2005.
- [19] INTEL TECHNOLOGIES, **Intel® 14 nm technology**. Disponível em: <<http://www.intel.com/content/www/us/en/silicon-innovations/intel-14nm-technology.html>>. Acesso em: 9 set. 2016.
- [20] GEHRING A. **Semiconductor Tunneling in Semiconductor Devices**, Dissertação de Mestrado da Universidade de Tecnologia de Viena, Áustria, 2003.
- [21] POOLE I. **Tunnel Diode Theory & Operation**. Disponível em: <<http://www.radio-electronics.com/info/data/semicond/tunneldiode/theory-operation.php>>. Acesso em: 15 mai. 2014.

- [22] HAR-LAVAN R., D. CAHEN, **40 years of Inversion-Layer Solar Cells: From MOS to Conduct Polymer/Inorganic Hybrids**, IEEE Journal of Photovoltaics, v. 3, n. 4, p. 1443-1459, 2013.
- [23] PULFREY D. L. **MIS Solar Cells: A Review**, IEEE Transactions on Electron Devices, DOI 0018-9383/78/1100-1308\$00.7, p. 1308-1317, 1978.
- [24] G. RIBES *et al.*, **Review of High-k Dielectrics Reliability Issues**, IEEE Transactions on Device and Materials Reliability, v. 5, n. 1 pg. 5-19 (2005)
- [25] GODFREY, R.B.; M.A GREEN. **A 15% efficient silicon MIS solar cell**, Appl. Phys. Lett. v. 33, n. 7, p. 637-639, 1978.
- [26] YEH D. K., DEMASSA T. A. **Computer analysis of Induced-inversion layer MOS solar cells**, Solid-State Electronics, p. 283-292, 1984.
- [27] HO F. D., **Computer Modelling of Inversion Layer MOS Solar Cells and Arrays**, Relatório Final submetido a George C. Marshall Space Flight Center, Universidade do Alabama, Huntsville, EUA, 1991.
- [28] LENAHAN P. M., COCHRANE C. J., CAMPBELL J. P., RYAN J. P., **Electrically Detected Magnetic Resonance in Dielectric Semiconductor Systems of Current Interest**, ECS Transactions, v. 35, Issue 4, pg. 605-627 (2011)
- [29] ESAKI L *et al.*, Proc. Jpn. Acad., Ser. B. Phys., Biol. Sci., 2010.
- [30] Tunnel Diode Theory & Operation - Disponível em: <<http://www.radio-electronics.com/info/data/semicond/tunneldiode/theory-operation.php>>. Acesso em: 15 set. 2013.
- [31] VEXLER M. I. *et al.* **Compact quantum model for a silicon MOS tunnel diode**, Microelectronic Engineering, v. 59, Issues 1-4, pg. 161-166, Elsevier (2001)
- [32] SELBERHERR S. **Analysis and Simulation of Semiconductor Devices**, Springer-Verlag, Wien, New York, 1984.

- [33] GHETTI, A *et. al.* **Tunneling into Interface States as Reliability Monitor for Ultrathin Oxides**, IEEE Transactions on Electron Devices, v. 47, n. 12, pg. 2358-2365, 2000.
- [34] ALANDIA B. S. **Fabricação e caracterização experimental de diodos tunel MOS Al/SiOxNy/Si(p) e TiN/SiOxNy/Si(p)**, Dissertação de Mestrado da Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, 2016.
- [35] LIN, C. H. *et. al.* **A comprehensive study of inversion current in MOS tunneling diodes**. IEEE Transactions on Electron Devices, v. 48, n. 9, pg. 2125 – 2130, 2001.
- [36] DOBROWOLSKI, J. A., **Handbook of Optics: Fundamentals, Techniques, and Design**, v. 1, 2^a ed., cap. 42 (Optical properties of films and coatings), McGraw-Hill, 1995
- [37] ONMORI, R. K. **PSI-5785 Técnicas de Caracterização de Células Solares de Silício Aula 03 – Modelo Elétrico de Célula Solar**, Laboratório de Microeletrônica da Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, 2005.
- [38] GREEN M. A., R. B. GODFREY, L. W. DAVIES, Proc. 12th ZEEE Photo. Spec. Conf., p. 896, 1976.
- [39] DELAHOY A. E., W. A. ANDERSON, J. K. KIM, Proc. 1st C.E.C. Photovoltaic Solar Energy Conf., p. 308, 1977.
- [40] FABRE E., J. MICHEL, Y. BAUDET, Proc. 12th IEEE Photovoltaic Spec. Conf., pp. 904—906. IEEE, New York, 1976.
- [41] CHARLSON E. J., J. C. LIEN, J. Appl. Phys., v. 46, p. 3982, 1975.
- [42] PONPON J. P., R. STUCK, P. SIFFERT, Proc. 12th ZEEE Photo. Spec. Conf., p. 900, 1976.
- [43] CHILDS R., J. FORTUNA, J. GENECKO, S. J. FONASH, Proc. 12th ZEEEPPhoto. Spec. Conf.,p. 862, 1976.

- [44] MATSUMAMI H., S. MATSUMOTO, and T. TANAKO, in Proc. 12th ZEEE Photo. Spec. Conf., p. 917, 1976.
- [45] ANDERSON W. A., S. M. VERNON, A. E. DELAHOY, J. K. KIM, P. MATHE, J. Vac. Sei. Tech., v. 13,p. 1158, 1976.
- [46] LILLINGTON D. R., W. G. TOWNSEND, Appl. Phys. Lett.,v. 28, p. 97, 1976.
- [47] KIPPERMAN A. H. M., M. H. OMAR, Appl. Phys. Lett., v. 28, p. 620, 1976.
- [48] SHEVENOCK S., FONASH S., GENECKO J., Electron Devices Meeting, 1975 International 21, 211, 1975.
- [49] KERN, W.; PUOTINEN, D.A. **Cleaning solution based on hydrogen peroxide for use in silicon semiconductor technology RCA Rev.**, v. 31, p. 187-205, 1970.
- [50] J. Z. JIANG *et al.*, **Hardness and thermal stability of cubic silicon nitride**, Journal of Physics, v. 13, n. 22, 2001.
- [51] HUFF H., D. GILMER, **High Dielectric Constant Materials: VLSI MOSFET Applications**, 1^a ed., Springer, 2005.
- [52] HEZEL R., **Recent progress in MIS solar cells**, Progr. Photovoltaic: Res. Appl., v. 5, n. 2, p. 109–120, 1997.
- [53] MARKVART T., L. CASTANER, **Practical Handbook of Photovoltaics**, 1^a ed., Academic Press, 2003.
- [54] BYRNES S. **Schottky-Barrier and MIS solar cells**, NSE Final Presentation, 2008.
- [55] PRIYA S., D. J. INMAN, **Energy Harvesting Technologies**, Preface, p. v, 2009. Acesso em: 27 jan. 2017.
- [56] WOODS K., F. ASHRAFZADEH, H. RATHNAYAKE **Organic Solar Cell Energy Harvesting, Control, Optimization, and Commericalization – Challenges**

and Opportunities, 4th IEEE International Symposium on Power Electronics for Distributed Generation Systems (PEDG), Rogers AR, 2013.

[57] VIGNATI S., **Solutions for Indoor Light Energy Harvestings**, Tese de mestrado da Escola de Informação e Tecnologia de Comunicação de Estocolmo, Suécia, 2012.

[58] MAZZIO K. A., LUSCHOMBE C. K., **The future of organics photovoltaics**, Chem. Soc. Rev., v. 44, p. 78-90, 2014.

[59] L. BEREUTER *et al.* **Energy Harvesting by Subcutaneous Solar Cells: A Long-Term Study on Achievable Energy Output**, Annals of Biomedical Society, BMES, 2016.

[60] YANG, Q. **Charged Silicon Nitride Films: Field-Effect Passivation of Silicon Solar Cells and a Novel Characterization Method through Lifetime Measurements**. MSc. (mestrado) – Arizona State University, Arizona, 2014.

[61] KERN, W. The evolution of silicon wafer cleaning technology. **J. Electrochem. Soc.**, v. 137, n. 6, p. 1887, 1990.

[62] KERN, W. **Handbook of semiconductor wafer cleaning technology**. 1st ed., Noyes Publications, 1993 (ISBN: 978-0-8155-1331-5).

[63] KERN, W.; REINHARDT, K.A. **Handbook wafer cleaning technology**. 2nd ed., William Andrew, 2008 (ISBN:978-0-8155-1554-8).

[64] SANTOS, S. G. dos F. **Oxidação térmica rápida do silício: influência dos procedimentos de limpeza e dos perfis temporais de temperatura na qualidade dos óxidos de porta MOS**. Tese (doutorado) – Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 1996.

[65] CHRISTIANO, V. et. al. Physical characterization of ultrathin silicon oxynitrides grown by Rapid Thermal Processing aiming to MOS tunnel devices. **IOP Conference Series: Materials Science and Engineering**, v. 76, p. 012002-05, 2015.

[66] CHRISTIANO, V. **Fabricação de células solares MOS utilizando oxinitretos de silício obtidos por processamento térmico rápido**. Qualificação (Doutorado) – Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2013.

[67] CHRISTIANO, V. Caracterização física e elétrica de filmes dielétricos de Al_2O_3 e $Al_xHf_{1-x}O_y$ para estruturas high k MOS. Dissertação (Mestrado) – Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2012.

[68] History of C++ - Disponível em: <<http://www.cplusplus.com/info/history/>>. Acesso em: 18 set. 2013.

[69] Differences between C and C++ - Disponível em: <<http://www.cprogramming.com/tutorial/c-vs-c++.html>>. Acesso em: 12 abr. 2014.