

Francisco Florêncio Batista Júnior

*Propriedades de Transportes em Fios e
Poços Quânticos*

21 de Julho de 2009

UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
CENTRO DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Francisco Florêncio Batista Júnior

*Propriedades de Transportes em Fios e
Poços Quânticos*

Dissertação apresentada ao Departamento de Física da Universidade Federal do Ceará, como parte dos requisitos para a obtenção do Título de Mestre em Física.

Orientador:
Prof. Dr. Gil de Aquino Farias

Fortaleza – CE

21 de Julho de 2009

B337p	Batista Jr., Francisco Florêncio Propriedades de Transportes em Fios e Poços Quânticos / Francisco Florêncio Batista Júnior. - Fortaleza: [s.n.], 2009. 74 f.:il. Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal do Ceará. Departamento de Física. Orientador: Gil de Aquino Farias. 1.Semicondutores. 2.Fio Quântico. 3.Poço Quântico. 4.Tunelamento Ressonante. I. Título. CDD 621.381.52
-------	--

À minha família.

“Nenhum sucesso na vida compensa o fracasso no lar”.
(David O. McKay)

Agradecimentos

Agradeço a Deus e a minha família pela orientação e ajuda que me deram durante este trabalho.

Ao professor Gil de Aquino pela orientação e apoio.

Agradeço ao Andrey pela grande colaboração dada ao presente trabalho e pelas muitas coisas que me ensinou.

Ao Teldo pela ajuda e pelas lições que me deu à distancia.

Ao professor Jeanlex pelas aulas de quântica e pelas discussões.

Ao professor Nilson pelas valiosas aulas que me ensinaram muitas lições.

Aos amigos e colegas de trabalho: Felipe, João Claudio, Andrey, Jusciane, Erlânia, Ítalo, Neto, Heitor, Luci e o pessoal de iniciação científica: Diego Lucena, Diego Rabelo, Leandro, Davi, Rafael e todos os colegas e companheiros de trabalho.

Agradeço a todos os professores da graduação e pós-graduação que me ajudaram direta ou indiretamente.

Aos funcionários do Departamento de Física.

Ao CNPq pelo apoio financeiro.

Enfim, agradeço a todos os que me ajudaram, direta ou indiretamente, para a elaboração e conclusão deste trabalho.

Resumo

Materiais semicondutores são os principais responsáveis pelo grande crescimento da indústria eletrônica e pelo surgimento de novas tecnologias. A criação de heteroestruturas possibilitou um grande impulso à física do estado sólido. Atualmente, o estudo de semicondutores está concentrado em sistemas de dimensionalidade reduzida, como os poços, fios, pontos e anéis quânticos. Neste trabalho, investigamos as propriedades de transporte em fios quânticos heteroestruturados de barreira dupla e em sistemas bidimensionais de barreira simples e dupla.

Iniciamos com o cálculo da energia do confinamento radial no fio quântico $InAs/InP$ de barreira dupla. Usamos um modelo de fio cilíndrico com e sem interfaces graduais. Calculamos as transmissões através das barreiras e estudamos o comportamento das mesmas variando a largura das barreiras, a distância entre elas e o raio do fio. Futuramente utilizaremos estes resultados para o cálculo da corrente elétrica através do dispositivo.

Também investigamos as propriedades de transporte em sistemas bidimensionais com potencial de auto-energia. Utilizamos heteroestruturas formadas por Si/SiO_2 e Si/HfO_2 . Sendo as constantes dielétricas dos óxidos diferentes do silício, resolvemos a equação de Poisson com ε dependente de z . Expandimos o potencial em uma série de Fourier-Bessel, encontrando, por fim, o potencial imagem para as barreiras. Calculamos a corrente elétrica através deste potencial em função da voltagem, variando a temperatura, a distância entre as barreiras. Também levamos em conta as interfaces graduais para o caso de barreira simples.

Abstract

Semiconductor materials are responsible for the large development in electronic industry, what made it possible the creation of new devices. The heterostructures gave a large impulse to the solid-state physics. Semiconductors study is nowadays concentrated in the low-dimensional systems, as quantum wells, quantum wires, quantum dots and quantum rings. In this work, we investigate the transport properties of heterostructured quantum wires of double barrier.

We begin with calculation of radial confinement energy in a quantum wire $InAs/InP$ of double barrier. We use a cylindrical model of wire with gradual and abrupt interfaces. Transmission coefficients are calculated. We study its behavior varying barriers width, distance between them and the wire radius. In the future, we will use these results to calculate electric current through the device.

We also investigate transport properties of bidimensional systems with self-energy potential. We use heterostructures of Si/SiO_2 and Si/HfO_2 . We solve Poisson's equation with ε depending on z , expanding the potential in a Fourier-Bessel series, finding the image potential of the barriers. We calculate the electric current through this potential in function of the applied voltage, varying temperature and the distance between the barriers. We also consider gradual interfaces for the simple barrier case.

Sumário

Lista de Figuras	p. x
1 Introdução	p. 15
1.1 A Estrutura de Bandas	p. 16
1.2 Massa Efetiva	p. 21
1.3 Confinamento Quântico	p. 23
1.4 Fios Quânticos	p. 24
1.5 Dielétricos em Nanoestruturas	p. 26
1.6 Tunelamento Ressonante	p. 29
1.7 Correntes de Tunelamento	p. 32
1.8 Sumário	p. 40
2 Fio Quântico Heteroestruturado de Barreira Dupla	p. 42
2.1 Modelo Teórico	p. 42
2.2 Resultados e discussões	p. 46
3 Efeitos de Potencial de Auto-Energia em Estruturas de Tunelamento Bidimensionais	p. 53
3.1 Modelo Teórico	p. 54
3.1.1 Barreira Simples com Interfaces Abruptas	p. 58
3.1.2 Barreira Simples com Interfaces Não-Abruptas	p. 58
3.1.3 Resultados e Discussões - Barreira Simples	p. 62
3.1.4 Barreira Dupla	p. 66

3.1.5	Resultados e Discussões - Barreira Dupla	p. 66
4	Conclusões e Perspectivas	p. 69
	Referências	p. 71

Lista de Figuras

- 1 (a) Esquema de níveis de energia para dois átomos isolados. (b) Esquema de níveis de energia para os mesmos dois átomos numa molécula diatômica. (c) Esquema de níveis de energia para quatro átomos do mesmo tipo num cristal rudimentar unidimensional. Observe que o nível mais baixo não é desdobrado apreciavelmente porque as autofunções atômicas para esse nível não se superpõem de forma significativa. . . . p. 17
- 2 Representação esquemática de um (a) cristal de parâmetro de rede a e (b) seu potencial periódico. p. 18
- 3 Gráfico qualitativo que mostra o comportamento de E como função (a) do parâmetro Δ e (b) do vetor de onda k , na primeira zona de Brillouin. p. 19
- 4 Energias permitidas em função do vetor k , para uma rede unidimensional de periodicidade a . A linha tracejada é a energia para o caso de um elétron livre. As bandas de energia permitidas e proibidas resultantes aparecem à direita. p. 20
- 5 Representação esquemática de uma heterojunção entre dois semicondutores com *gaps* E_{gap}^B e E_{gap}^W diferentes, onde as bandas de condução e valência apresentam degraus de potencial com alturas V_e e V_h , respectivamente. p. 20
- 6 Gráfico qualitativo dos alinhamentos de banda tipo-I e tipo-II, mostrando as bandas de condução (CB) e valência (VB) em heteroestruturas Si/Si_{1-x}Ge_x. p. 21
- 7 Banda de condução e valência de um semiconductor. Na banda de valência temos o buraco pesado - (hh) e buraco leve - (lh). p. 23
- 8 Confinamento das heteroestruturas em relação a dimensionalidade, de um material bulk-3D (a) até o ponto quântico-0D (d), passando por um poço-1D (b) e um fio quântico-2D (c) e suas respectivas densidades de estados. p. 24

9	Imagens de fios obtida por microscopia de força atômica-AFM.	p. 24
10	(a) Imagem de TEM de dois fios heteroestruturados InP/InAs de diâmetro 40 nm. O primeiro (<i>sample I</i>) apresenta duas camadas de InAs, de espessuras 11.5 nm (azul) e 22.5 nm (vermelho), separadas por três camadas de InP (9.5 nm, 7 nm e 4 nm). O segundo (<i>sample II</i>) apresenta duas camadas praticamente idênticas de InAs, de espessura 15 nm, e três barreiras praticamente idênticas de InP, com 5.8 nm de espessura [22]. (b), (c) Imagens de TEM de um fio heteroestruturado InP/InAs, mostrando sua composição a partir de uma colorização dependente dos parâmetros de rede da estrutura, obtidos numa análise de transformada de Fourier das imagens: identifica-se como verde o parâmetro de rede do InAs e, como vermelho, o do InP [16].	p. 25
11	(a) Esquema físico de um transistor CMOS de canal N (NMOS) e (b) Imagens feitas por Microscopia Eletrônica de Transmissão de uma seção reta do dispositivo. A figura mostra as junções entre o Si policristalino, o SiO_2 com largura de 1.2 nm e o substrato de silício. [24]	p. 28
12	Diagrama de banda de um dispositivo de tunelamento ressonante de barreira dupla para três voltagens diferentes.	p. 30
13	Perfil de um potencial arbitrário subdividido em pequenos pedaços de potencial constante. E_F é a energia de Fermi nos contatos e V é a tensão aplicada sobre o potencial.	p. 31
14	Função distribuição de Fermi para diferentes valores de temperatura.	p. 33
15	(a) - Esboço de uma nanoestrutura consistindo em um dispositivo conectado a seus contatos. (b) - Diagrama de banda para o mesmo dispositivo, mostrando a voltagem V aplicada e as energias de Fermi dos contatos.	p. 35

- 16 À esquerda (a) vemos o modelo de fio quântico heteroestruturado representado em coordenadas cilíndricas e crescido na direção z . Os dois discos escuros representam o material A da barreira, enquanto que a parte mais clara representa o material B entre o qual o primeiro é crescido. À direita (b) vemos o diagrama de banda de nosso modelo. Cada curva representa o potencial com interfaces graduais (linha sólida) e com interfaces abruptas (linha tracejada). Os termos L e B são as larguras das barreira e do poço entre elas, respectivamente. As interfaces graduais têm espessura igual a σ e estão localizadas nas regiões mais escuras. p. 43
- 17 Gráfico mostrando como, para certos valores de r , o potencial efetivo $V_{efet}(z)$ pode anular o confinamento eletrônico (linha tracejada - interface zero) ou criar um confinamento interfacial (linha sólida - interface 15 Å). Valores calculados para um fio de InAs/InP com um raio de 28 Å. . . . p. 46
- 18 Potenciais efetivos de um fio quântico heteroestruturado *InAs/InP* de barreira dupla. Consideramos os casos com interfaces abruptas (a) e com interfaces graduais $\sigma = 2$ nm (b). As curvas foram plotadas para raios com valores $r = 2.7$ nm (linha preta), $r = 2.8$ nm (linha vermelha) e $r = 2.9$ nm (linha azul). p. 48
- 19 Curvas de transmissão (logaritmo) em função da energia do portador para um fio *InP/InAs* com heteroestrutura dupla e interfaces $\sigma = 0$ nm (acima) e $\sigma = 2$ nm (abaixo). Consideramos barreiras com largura $L = 10$ nm, a distância entre elas $B = 5$ nm e alguns valores de raio. . . p. 49
- 20 Curvas de transmissão (logaritmo) em função da energia do portador para um fio *InP/InAs* com heteroestrutura dupla e interfaces $\sigma = 0$ nm (acima) e $\sigma = 2$ nm (abaixo). Consideramos um fio com raio $r = 3.1$ nm, a distância entre as barreiras $B = 5$ nm e alguns valores de largura das barreiras L p. 50
- 21 Curvas de transmissão (logaritmo) em função da energia do portador para um fio *InP/InAs* com heteroestrutura dupla e interfaces $\sigma = 0$ nm (acima) e $\sigma = 2$ nm (abaixo). Consideramos um fio com raio $r = 3.1$ nm, a largura das barreiras $L = 10$ nm e alguns valores da largura do poço entre as barreiras B p. 52

- 22 (a) Modelo da estrutura e diagrama de banda para heteroestrutura $Si/\acute{o}xido$ de barreira simples. L_S representa a largura da barreira e σ_S representa a espessura de cada interface. A linha tracejada representa o perfil do mesmo sistema com interfaces abruptas. (b) Estrutura do modelo e diagrama de banda para a heteroestrutura $Si/\acute{o}xido$ de barreira dupla. L_D representa a largura do poço quântico e σ_D representa a espessura do óxido. A linha sólida representa o diagrama de banda de energia e a linha tracejada representa a função aproximada do potencial usada no modelo de matriz de transferência. p. 55
- 23 (a): Curvas de transmissão x energia do elétron para uma heteroestrutura Si/SiO_2 de barreira simples com $L_S = 3$ nm. As curvas foram plotadas para os casos onde $\sigma_S = 1$ nm com efeito (linha sólida) e sem efeito de auto-energia (linha tracejada). O sistema de interfaces abruptas com efeito imagem também foi considerado (curva de círculos). (b): potencial total com efeitos de carga imagem; (c): potencial sem efeito de carga imagem. p. 60
- 24 (a): Curvas de transmissão x energia do elétron para uma heteroestrutura Si/HfO_2 de barreira simples com $L_S = 3$ nm. As curvas foram plotadas para os casos onde $\sigma_S = 1$ nm com efeito (linha sólida) e sem efeito de auto-energia (linha tracejada). O sistema de interfaces abruptas com efeito imagem também foi considerado (curva de círculos). (b): potencial total com efeitos de carga imagem; (c): potencial sem efeito de carga imagem. p. 61
- 25 Curvas de JxV para uma estrutura Si/SiO_2 de barreira simples, com $\sigma_S = 0$ nm (a) e $\sigma_S = 1$ nm (b). As curvas foram plotadas para os casos com efeito de auto-energia (linha sólida) e sem efeito de auto-energia (linha tracejada). p. 62
- 26 Curvas de JxV para a estrutura Si/HfO_2 de barreira simples, com $\sigma_S = 0$ nm (a) e $\sigma_S = 1$ nm (b). As curvas foram plotadas para os casos com efeito de auto-energia (linha sólida) e sem efeitos de auto-energia (linha tracejada). p. 63
- 27 Curvas de $JxVxT$ para estruturas Si/SiO_2 (a) e Si/HfO_2 (b) de barreira simples com $L_S = 5$ nm, $E_F = 10$ meV e interfaces $\sigma_S = 1$ nm. . . p. 64

- 28 Curvas de $JxVxL_S$ para estruturas Si/SiO_2 (a) e Si/HfO_2 (b) de barreira simples com $E_F = 10$ meV, $\sigma_S = 1$ nm and $T = 50$ K. p. 65
- 29 Curvas de $\ln JxV$ (a) para estruturas Si/SiO_2 de barreira dupla com efeitos de auto-energia (linha sólida) e sem efeitos de auto-energia (linha tracejada). Os gráficos (b) e (c) mostram, respectivamente, o diagrama de banda da estrutura com e sem efeitos de carga imagem. p. 67
- 30 Curvas de $\ln JxV$ (a) para estruturas Si/HfO_2 de barreira dupla com efeitos de auto-energia (linha sólida) e sem efeitos de auto-energia (linha tracejada). Os gráficos (b) e (c) mostram, respectivamente, o diagrama de banda da estrutura com e sem efeitos de carga imagem. p. 68

1 Introdução

Depois da invenção do transistor, a física dos semicondutores foi uma das que mais se desenvolveu. O grande impulso para isso foi a criação de heteroestruturas, que são camadas justapostas de materiais semicondutores diferentes, onde há um confinamento dos portadores de carga [1, 2, 3]. A idéia de fabricar heteroestruturas semicondutoras foi primeiramente proposta por Tsu e Esaki em 1970 [4].

O avanço das técnicas de crescimento de materiais tem possibilitado a criação de novos dispositivos. A física dos semicondutores está atualmente concentrada no estudo dos sistemas de dimensões reduzidas, especialmente os formados por heteroestruturas duplas (DH), como poços, fios, pontos e anéis quânticos. Estas estruturas são artificialmente crescidas e possuem características não observadas em materiais *bulk* (estruturas que não possuem potencial de confinamento).

Uma das maiores motivações para o estudo dos semicondutores são as aplicações tecnológicas. A procura de dispositivos mais rápidos e eficientes tem sido um dos principais motivos para o incentivo de estudos e pesquisas nesta área. Podemos encontrar sistemas como estes em DVD's, CD players e diodos de emissão de luz (LED's).

Este Capítulo destina-se ao estudo de conceitos fundamentais para compreensão de nosso trabalho. Discutiremos a estrutura de bandas dos semicondutores e a aproximação da massa efetiva. Veremos um pouco como se dá o confinamento quântico e também daremos uma pequena introdução sobre os fios quânticos. Em seguida, faremos algumas considerações sobre materiais "*high-k*", materiais com alta constante dielétrica. A seguir, vamos introduzir as técnicas usadas para o cálculo da corrente de tunelamento, que serão usadas nos próximos Capítulos.

1.1 A Estrutura de Bandas

Átomos isolados, como na Fig. 1(a), possuem níveis de energia discretos para os estados eletrônicos, que são caracterizados por orbitais atômicos designados por 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d etc. Ao aproximarmos um grande número de átomos, como na Fig. 1(c), os níveis de energia de cada um são perturbados levemente pela presença dos átomos vizinhos, tornando bem mais complicado o cálculo dos estados eletrônicos nestes sistemas. Como consequência do grande número de átomos presentes em um cristal, e do arranjo periódico dos átomos que formam a rede cristalina, os estados energéticos se organizam de tal maneira que aparecem faixas quase contínuas de energias permitidas - as bandas de energia, separadas por faixas de energias proibidas - os *gaps*. Isto ocorre porque as funções de onda dos elétrons se superpõem, originando as faixas de estados possíveis e energeticamente distintos. Os *gaps* são formados devido às regiões energeticamente proibidas de cada átomo.

Em um cristal semiconductor a temperatura zero, a última banda de energia, denominada *banda de valência*, está completamente cheia. Aumentando a temperatura, os elétrons desta banda podem ser excitados e ganhar energia suficiente para passar à banda seguinte, conhecida como *banda de condução*, que está vazia a $T = 0$ K. Os semicondutores podem ser considerados isolantes a temperatura zero, pois nesta temperatura sua banda de valência está cheia e a banda de condução vazia, porém seu *gap* de energia é inferior a 3 eV. Este tipo de comportamento não ocorre com os metais, pois possuem elétrons na banda de condução mesmo a $T = 0$ K, o que os torna condutores mesmo com esta temperatura.

Através de uma excitação, seja ela por meio do aumento da temperatura ou por absorção de fótons, elétrons vão para a banda de condução, deixando espaços de excitações elementares na banda de valência. Estes se comportam como portadores de carga elétrica positiva, e são chamados de buracos. Estes buracos têm massa, carga e interação com o elétron via potencial coulombiano. A este par elétron-buraco, ligado pela atração de Coulomb, chamamos *exciton*. Os excitons podem propagar-se por toda a rede cristalina e transportar energia, já que sua energia de formação pode ser recuperada pela quebra do par. Entretanto, como é composto por uma carga positiva e outra negativa, tornando-se neutro, não contribui diretamente para a condutividade elétrica.

Apesar da dificuldade em calcular os estados eletrônicos para um sistema de muitos átomos, podemos fazer algumas aproximações, ao menos qualitativas. Uma destas consiste

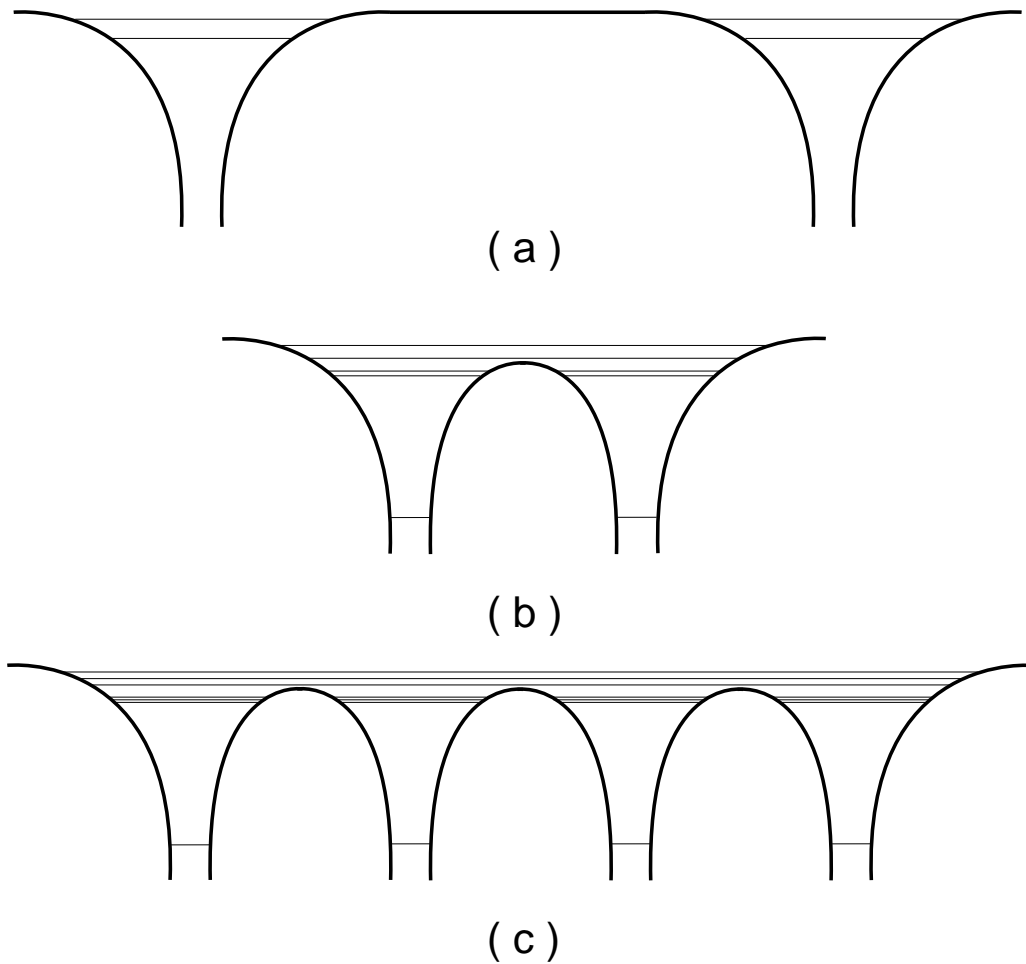


Figura 1: (a) Esquema de níveis de energia para dois átomos isolados. (b) Esquema de níveis de energia para os mesmos dois átomos numa molécula diatômica. (c) Esquema de níveis de energia para quatro átomos do mesmo tipo num cristal rudimentar unidimensional. Observe que o nível mais baixo não é desdobrado apreciavelmente porque as autofunções atômicas para esse nível não se superpõem de forma significativa.

em supor que os núcleos dos átomos são fixos e com posições conhecidas na rede cristalina. Observaremos o comportamento de apenas um elétron e consideramos que todos os outros elétrons são parte integrante dos íons que criam o potencial periódico (ver Fig. 2).[5]

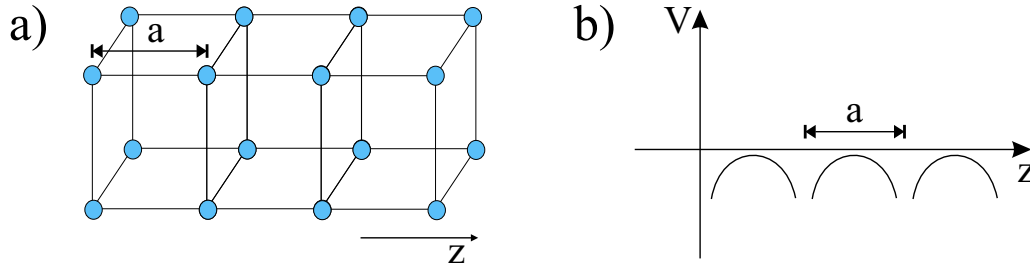


Figura 2: Representação esquemática de um (a) cristal de parâmetro de rede a e (b) seu potencial periódico.

Consideramos o potencial periódico como sendo composto por diversos poços de potencial infinito (sítios) igualmente espaçados na direção z . Utilizamos o operador de simetria discreta [6]

$$\tau(a) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{p}a\right) \quad (1.1)$$

para descrever as translações nos pontos da rede. Chamamos de $|n\rangle$ o estado fundamental localizado no n -ésimo sítio, e $H|n\rangle = E_0|n\rangle$. Como os poços de potencial são idênticos e não interagem entre si, E_0 possui infinitos estados degenerados, um para cada sítio. Os estados $|n\rangle$ não são autoestados de τ , pois $\tau(a)|n\rangle = |n+1\rangle$. Pelo fato de este comutar com o Hamiltoniano, existem estados que são autoestados de $\tau(a)$ e H simultaneamente. No entanto, este operador comuta com o Hamiltoniano, o que implica na existência de estados que sejam autoestados de $\tau(a)$ e H simultaneamente. Podemos ver que os estados

$$|\theta\rangle = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{in\theta} |n\rangle \quad (1.2)$$

obedecem a esta condição, onde θ é real e $-\pi \leq \theta \leq \pi$.

Agora consideramos os potenciais de confinamento finitos. Permanecem a relação $\tau(a)|n\rangle = |n+1\rangle$ e os elementos da diagonal do Hamiltoniano na base dos $|n\rangle$. Ou seja, $\langle n|H|n\rangle = E_0$, são todos iguais, pois os sítios também o são. Porém, não devemos esperar agora que $|n\rangle$ seja autoestado de H , já que neste caso as barreiras de potencial são finitas e as partículas em um sítio podem acessar sítios vizinhos por tunelamento. Assim, o Hamiltoniano na base $|n\rangle$ deve apresentar termos não-nulos fora da diagonal.

Usamos a aproximação conhecida como *tight-binding*, em que consideramos apenas as influências dos primeiros vizinhos. Definimos $\langle n\pm 1|H|n\rangle = -\Delta$ e aplicamos H na função

$|\theta\rangle$ da Eq. (1.2)

$$\begin{aligned} H|\theta\rangle &= E_0 \sum e^{in\theta}|n\rangle - \Delta \sum e^{in\theta}|n+1\rangle - \Delta \sum e^{in\theta}|n-1\rangle \\ &= (E_0 - 2\Delta\cos\theta)|\theta\rangle. \end{aligned} \quad (1.3)$$

Fazendo θ variar de 0 a $\pm\pi$, encontramos que os autovalores do hamiltoniano são $E_0 - 2\Delta$ e $E_0 + 2\Delta$. Neste caso, forma-se uma banda contínua entre estes dois valores de energia. A projeção de $|\theta\rangle$ no espaço das posições é $\theta = ka$, onde k é o vetor de onda do elétron e a é o parâmetro de rede [6]. Assim

$$E(k) = E_0 - 2\Delta\cos(ka), \quad (1.4)$$

onde k varia de $-\pi/a$ a π/a . A região entre estes dois valores de k é conhecida como *primeira zona de Brillouin*. A Fig. 3(a) mostra o comportamento qualitativo de E com Δ ,

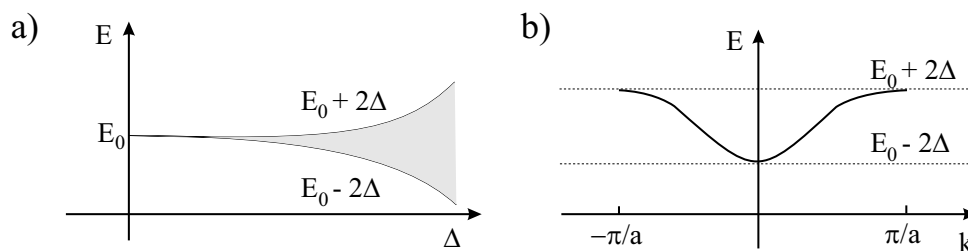


Figura 3: Gráfico qualitativo que mostra o comportamento de E como função (a) do parâmetro Δ e (b) do vetor de onda k , na primeira zona de Brillouin.

parâmetro que está relacionado com a interação entre um sítio e seus primeiros vizinhos. À medida que Δ aumenta, levanta-se a degenerescência do estado E_0 , levando à formação de uma banda de energia, representada pela região cinza no gráfico. A Fig. 3(b) mostra a forma da curva de dispersão definida pela Eq. (1.4), na primeira zona de Brillouin.

Desta maneira, observamos que a presença de um potencial periódico gerado pela rede cristalina leva à formação de bandas de energias contínuas e finitas. Isto ocorre para todos os estados, não apenas para o fundamental [5]. A Fig. 4 mostra as curvas de energia permitidas (linha sólida) em função do vetor k para as seis primeiras zonas de Brillouin. A linha tracejada mostra as energias para um elétron livre. Do lado direito podemos ver as faixas de energias permitidas (regiões cinza) separadas pelos *gaps* (regiões branca).

As atuais técnicas de crescimento de filmes finos permitem o crescimento de heteroestruturas, que são estruturas compostas por dois ou mais materiais semicondutores diferentes [7]. Estes materiais possuem *gaps* de energia diferentes, o que causa uma

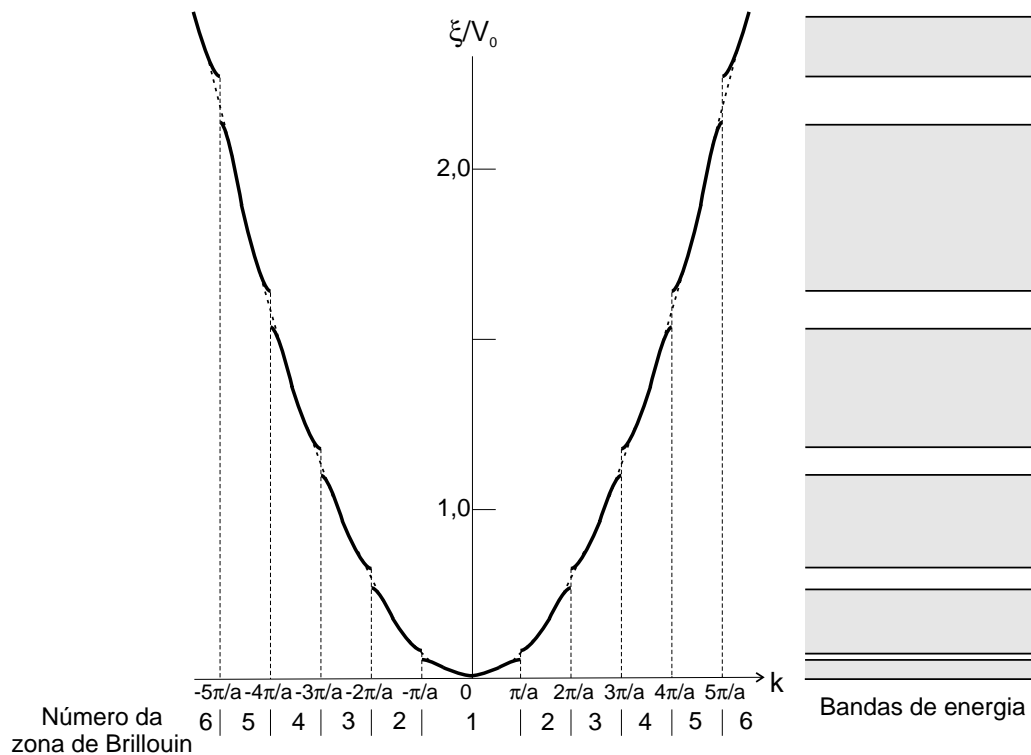


Figura 4: Energias permitidas em função do vetor k , para uma rede unidimensional de periodicidade a . A linha tracejada é a energia para o caso de um elétron livre. As bandas de energia permitidas e proibidas resultantes aparecem à direita.

descontinuidade nas bandas de energia do material. Assim, as bandas de condução e de valência geram degraus de potencial para elétrons e buracos. Na Fig. 5 vemos um esquema que mostra estas bandas em uma junção entre dois materiais semicondutores intrinsecamente diferentes (heterojunção), formando degraus de potencial de altura V_e , para o elétron na banda de condução, e V_h , para o buraco na banda de valência. As alturas destes potenciais são também conhecidas como *band offsets* [8, 9, 10].

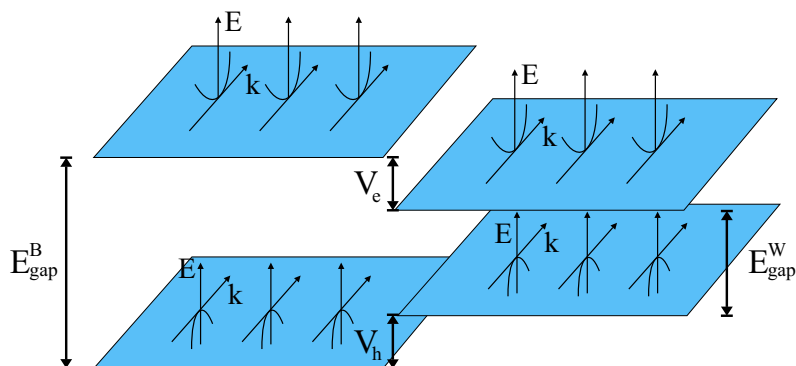


Figura 5: Representação esquemática de uma heterojunção entre dois semicondutores com *gaps* E_{gap}^B e E_{gap}^W diferentes, onde as bandas de condução e valência apresentam degraus de potencial com alturas V_e e V_h , respectivamente.

Pela Fig. 5, vemos que uma estrutura formada por uma camada de um material de *gap* menor crescida entre duas camadas de um outro material de *gap* maior, formará um poço na banda de condução e uma barreira na banda de valência. Esta estrutura é chamada de Tipo-I. Em algumas situações, porém as bandas podem se alinhar de tal maneira que haja a formação de barreiras nas bandas de condução e de valência, chamadas de estruturas Tipo-II [11]. A Fig. 6 ilustra qualitativamente os alinhamentos de banda tipo-I e tipo-II em heteroestruturas Si/Si_{1-x}Ge_x.

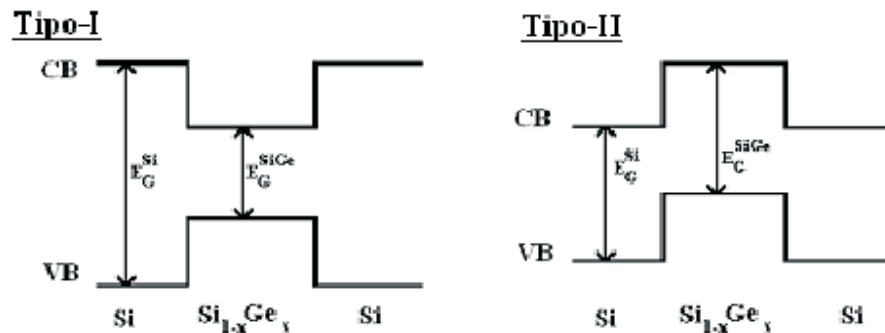


Figura 6: Gráfico qualitativo dos alinhamentos de banda tipo-I e tipo-II, mostrando as bandas de condução (CB) e valência (VB) em heteroestruturas Si/Si_{1-x}Ge_x.

1.2 Massa Efetiva

Para estudar as propriedades eletrônicas em semicondutores, é importante entendermos o conceito de massa efetiva. Para isso, precisamos analisar como os portadores de carga se comportam sob a ação de um campo elétrico externo. Consideramos um elétron movimentando-se através de um cristal. Este elétron pode ser descrito por um pacote de onda com velocidade de grupo $v_g = \partial\omega/\partial\kappa$ e energia $E = \hbar\omega$. Dessa forma, temos que

$$\frac{\partial E}{\partial\kappa} = \hbar v_g. \quad (1.5)$$

O elétron sofre a influência da força elétrica \mathbf{F} , que se relaciona com o campo por $dE = Fdx = \hbar v_g d\kappa$. Pela definição de velocidade, $dx = v_g dt$, o que resulta em

$$F = \hbar \frac{d\kappa}{dt}, \quad (1.6)$$

com $\hbar\kappa$ sendo o momentum do elétron. A Eq. (1.6) representa o princípio fundamental da dinâmica

$$F = m^* a = m^* \frac{dv_g}{dt}. \quad (1.7)$$

Portanto, pela Eq. (1.5)

$$F = m^* \left(\frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E}{\partial \kappa \partial t} \right) = m^* \left(\frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E}{\partial \kappa^2} \frac{d\kappa}{dt} \right) = m^* \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial \kappa^2} \right) F,$$

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial k^2}. \quad (1.8)$$

Esta relação mostra que o potencial da rede cristalina não afeta a forma da variação do momentum no tempo. Em vez disso, ela muda a dependência da energia com o momentum, o que corresponde a mudar a massa efetiva do elétron. Assim, um elétron movendo-se em uma rede sob a ação de uma força elétrica externa, comporta-se como um elétron livre com massa m^* .

Até agora, assumimos que E depende apenas do módulo de \mathbf{k} . Em geral, o comportamento de $E(\mathbf{k})$ não é isotrópico, e pode ser fortemente dependente da direção k_α . De maneira mais geral, a massa efetiva é uma grandeza tensorial com componentes \mathbf{k} na direção α, β dada pela equação

$$m_{\alpha,\beta}^* = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial \kappa_\alpha \partial \kappa_\beta}, \quad (1.9)$$

que é válida para portadores tanto em metais como em semicondutores. As curvaturas da banda de condução e da banda de valência numa heteroestrutura semicondutora não são iguais, logo as massas efetivas dos elétrons e buracos são diferentes. Assim, para a banda de condução, como os elétrons estão agrupados em torno do mínimo dessa banda, todos eles têm aproximadamente a mesma massa efetiva

$$m_e^* = \frac{\hbar^2}{(\partial^2 E / \partial \kappa^2)_{\kappa=\kappa_{mc}}}, \quad (1.10)$$

onde κ_{mc} é o mínimo da banda de condução. A banda de valência de alguns materiais semicondutores é formada por duas bandas de energia, cada uma associada a uma massa efetiva (buraco leve e pesado). A banda do buraco leve (*light hole* - LH) é a banda mais curva entre as duas e a banda do buraco pesado (*heavy hole* - HH) é a banda menos curva. Como os valores das massas efetivas estão associados à curvatura da banda, a massa associada ao buraco pesado é maior do que a massa associada ao buraco leve, originando os nomes leve e pesado, como mostra a Fig. 7.

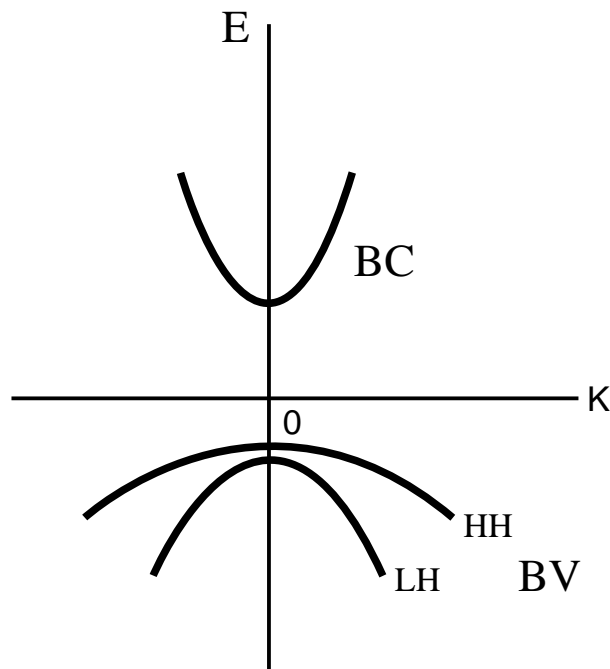


Figura 7: Banda de condução e valência de um semicondutor. Na banda de valência temos o buraco pesado - (hh) e buraco leve - (lh).

1.3 Confinamento Quântico

O confinamento quântico causa uma grande mudança no comportamento dos portadores. A Fig. 8 mostra esquematicamente a redução de dimensionalidade de um sistema $3D$ para um $0D$ e suas respectivas densidades de estados. No material *bulk*, composto por uma única liga ou elemento, os elétrons não possuem confinamento, tendo 3 graus de liberdade, como mostra a Fig. 8(a). Partículas podem ser confinadas em $2D$, como no poço quântico, ficando livres no plano e confinadas em uma única direção, como na Fig. 8(b). Reduzindo ainda mais a dimensionalidade, podemos produzir um confinamento $1D$, como no caso do fio quântico da Fig. 8(c). Obtemos um sistema $0D$ confinando mais uma direção, como é o caso do ponto quântico da Fig. 8(d).

Em sistemas bidimensionais, como no poço quântico, os portadores estão livres no plano, e sua energia é dada por

$$E = \frac{\hbar^2}{2m^*}(k_x^2 + k_y^2) + E_z^{(n)}, \quad (1.11)$$

com $n = 1, 2, 3, \dots$. O espectro de energia é quantizado somente na direção z , em que há confinamento. Para um sistemas unidimensional, como um fio quântico, os portadores

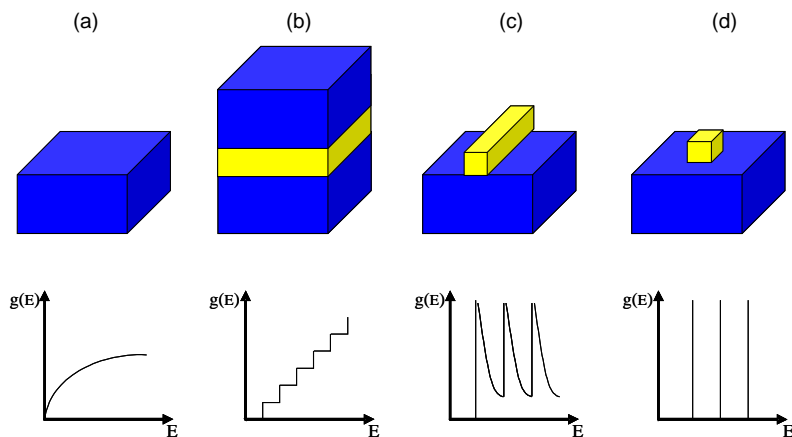


Figura 8: Confinamento das heteroestruturas em relação a dimensionalidade, de um material bulk-3D (a) até o ponto quântico-0D (d), passando por um poço-1D (b) e um fio quântico-2D (c) e suas respectivas densidades de estados.

estão livres apenas na direção x . Assim, temos

$$E = \frac{\hbar^2}{2m^*} k_x^2 + E_y^{(m)} + E_z^{(n)}, \quad (1.12)$$

com $m = 1, 2, 3, \dots$. Ao confinarmos os portadores em todas as direções, como nos pontos quânticos, temos

$$E = E_x^{(l)} + E_x^{(m)} + E_z^{(n)}, \quad (1.13)$$

com $l = 1, 2, 3, \dots$ onde obtemos um espectro de energia completamente discreto. Neste trabalho, estudaremos o confinamento de elétrons em fios quânticos e em sistemas de barreiras com confinamento em uma única direção, como no caso do poço.

1.4 Fios Quânticos

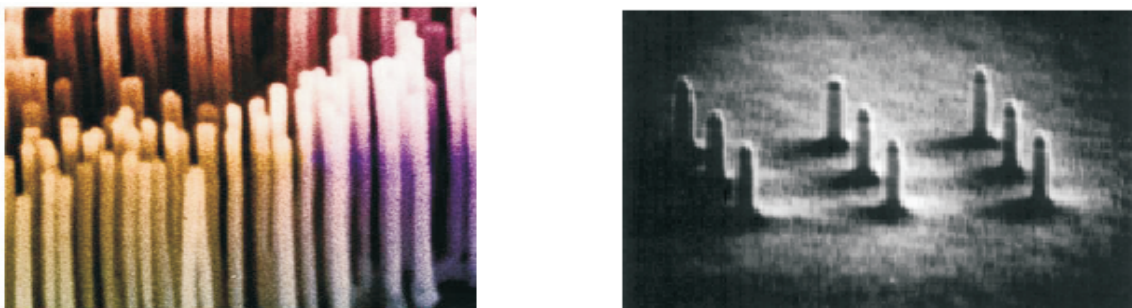


Figura 9: Imagens de fios obtida por microscopia de força atômica-AFM.

Com o avanço das técnicas de crescimento de materiais, tornou-se possível confinar portadores de carga em fios bastante finos, chamados de fios quânticos (*quantum wires*

- QWRs). A Fig. 9 mostra imagens de alguns fios obtida por microscopia de força atômica. Como já vimos, um fio é uma estrutura semicondutora unidimensional, pois possui confinamento em duas direções. Este tem sido usado com sucesso na aplicação de dispositivos opto-eletrônicos e sensores biológicos, onde é necessário um forte confinamento [12]. Partindo de técnicas sofisticadas, tem sido possível sintetizar vários tipos de fios: *core-shell*, em que um fio é coberto por uma camada de outro material; *core-multishell*, onde um fio de um material é coberto por uma sequência de camadas de outros materiais e os fios com heteroestruturas longitudinais [13, 14, 15].

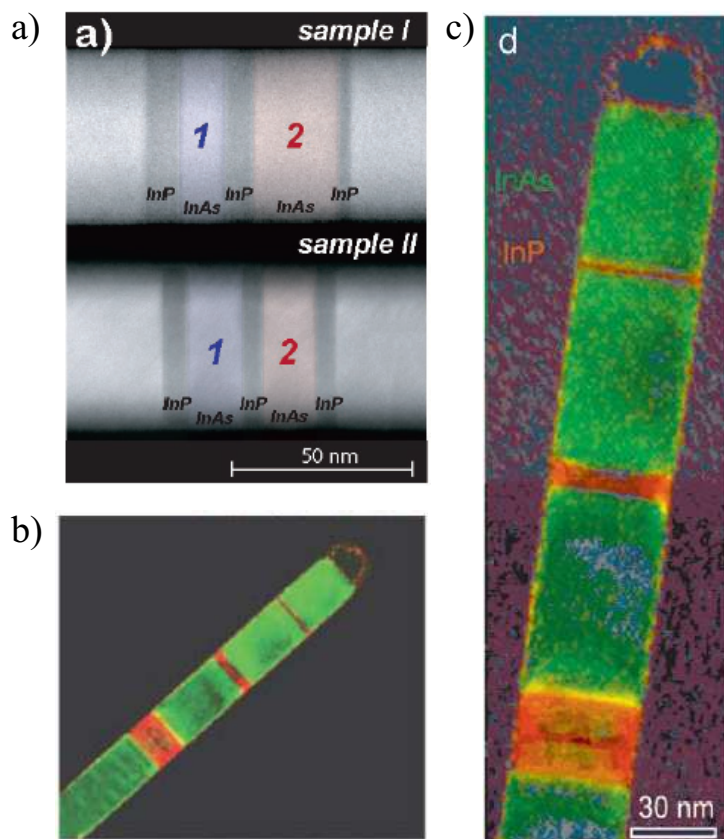


Figura 10: (a) Imagem de TEM de dois fios heteroestruturados InP/InAs de diâmetro 40 nm. O primeiro (*sample I*) apresenta duas camadas de InAs, de espessuras 11.5 nm (azul) e 22.5 nm (vermelho), separadas por três camadas de InP (9.5 nm, 7 nm e 4 nm). O segundo (*sample II*) apresenta duas camadas praticamente idênticas de InAs, de espessura 15 nm, e três barreiras praticamente idênticas de InP, com 5.8 nm de espessura [22]. (b), (c) Imagens de TEM de um fio heteroestruturado InP/InAs, mostrando sua composição a partir de uma colorização dependente dos parâmetros de rede da estrutura, obtidos numa análise de transformada de Fourier das imagens: identifica-se como verde o parâmetro de rede do InAs e, como vermelho, o do InP [16].

Muitos grupos de pesquisa anunciaram o crescimento de fios quânticos heteroestruturados, que são formados por diferentes materiais crescidos na direção de transporte [16]. Algumas aplicações foram sugeridas, tais como guias de onda, diodos de emissão de

luz e lasers [17, 18, 19]. Um trabalho teórico sobre fios com heteroestruturas compostas por PbS, PbSe e PbTe, feito por Y.-M. Lin *et al.* [20], comprovou que sistemas como estes são promissores para aplicações termoelétricas. Um processo híbrido *pulse laser ablation/chemical vapor deposition* (PLA-CVD) foi desenvolvido por Y. Wu *et al.* [21] para a síntese de fios com heteroestruturas Si/SiGe periódicas, e sugeriu-se que estes fios poderiam ser usados como blocos para a construção de circuitos e dispositivos eletrônicos em nanoescala.

Recentemente, o grupo de pesquisa de L. Samuelson anunciou a fabricação de fios *InP/InAs* de alta qualidade [16, 22]. Assim, foi atingido um alto grau de controle sobre o tamanho e o número de elétrons nestes sistemas. A Fig. 10 mostra imagens de TEM destes fios.

1.5 Dielétricos em Nanoestruturas

A fabricação de nanodispositivos requer usualmente a combinação de semicondutores com metais, isolantes e moléculas em uma pequena região do espaço. O comportamento destes sistemas depende fortemente de aplicação de campo elétrico, e muitos problemas interessantes estão relacionados a propriedades dielétricas dos materiais que os constituem, tais como:

- energia de ligação de um portador com a impureza;
- energia de ligação de um éxciton;
- efeito de carga imagem sobre níveis de energia dos portadores;
- efeito de carga imagem sobre energia de ligação de éxcitons e impurezas;
- propriedades óticas;
- propriedades de transporte.

Desta forma, a simulação de nanoestruturas em escala nanométrica torna-se um problema muito importante para desenvolvimento de nanotecnologias.

Desde a fabricação do primeiro transistor, os dielétricos vêm sendo fundamentais na fabricação e operação de dispositivos, bem como no uso como isolantes de interconectores. As aplicações mais comuns dos dielétricos estão relacionadas às importantes funções que

estes desempenham em circuitos integrados como porta dielétrica, elemento de memória dinâmica de acesso randômico e isolantes em transistores (ver Fig. 11). Com a miniaturização das dimensões dos dispositivos, e o conseqüente incremento em seu desempenho, seguido da redução do consumo de energia e o aumento da demanda da ordem de 15 %, a nanotecnologia requer destes dielétricos incrementos significativos em seus desempenhos nos dispositivos nanoestruturados. Alguns fatores são levados em conta no processo de seleção do material dielétrico a ser escolhido [23]:

- estabilidade termodinâmica sobre Si;
- compatibilidade química da porta dielétrica e da porta de contato;
- influência da estrutura eletrônica sobre as correntes de fuga através da interface semiconductor-dielétrico e sobre a eficiência do transistor;
- características das propriedades de transporte;
- formação de defeitos na estrutura;
- compatibilidade química no canal do Transistor de Efeito de Campo (FET: Field Effect Transistor).

Para todas as portas dielétricas finas, a interface com o silício desempenha um papel importante, sendo, em muitos casos, um fator dominante na determinação das propriedades elétricas. O uso contínuo do amorfo SiO₂ (dióxido de silício) como porta dielétrica vem oferecendo vantagens (nas últimas três décadas) no processo de fabricação de dispositivos CMOS (Metal Oxide Semiconductor) devido às propriedades oferecidas por este dielétrico (estabilidade termodinâmica quando em contato com Si, interface Si/SiO_2 e isolamento elétrico de qualidade).

É instrutivo exemplificar a aplicação do SiO_2 e de óxidos “*high-k*” (materiais com constante dielétrica elevada). Para isso, analisemos o princípio de funcionamento de um dispositivo CMOS (**C**omplementary **M**etal-**O**xide **S**emiconductor). A Fig. 11 mostra o esquema físico de um transistor MOSFET (**M**etal **O**xide **S**emiconductor **F**ield **E**ffect **T**ransistor). Os transistores MOSFET’s são componentes fundamentais dos chips lógicos. São a base da moderna tecnologia de semicondutores, fabricados criando-se duas regiões fortemente dopadas tipo-n sobre um substrato de Si fracamente dopado tipo-p (ou vice-versa). Conectados às regiões tipo-n encontram-se a fonte e o dreno, que são terminais de entrada e saída de corrente. A existência de corrente dependerá da tensão aplicada na

porta (gate). Inicialmente o gate era fabricado com uma camada de metal crescida sobre um óxido isolante (daí o nome metal-óxido). Depois usou-se o silício policristalino no lugar do metal. Hoje, a indústria voltou ao uso de metais como porta dielétrica, devido à sua maior eficiência junto a materiais de alta constante dielétrica.

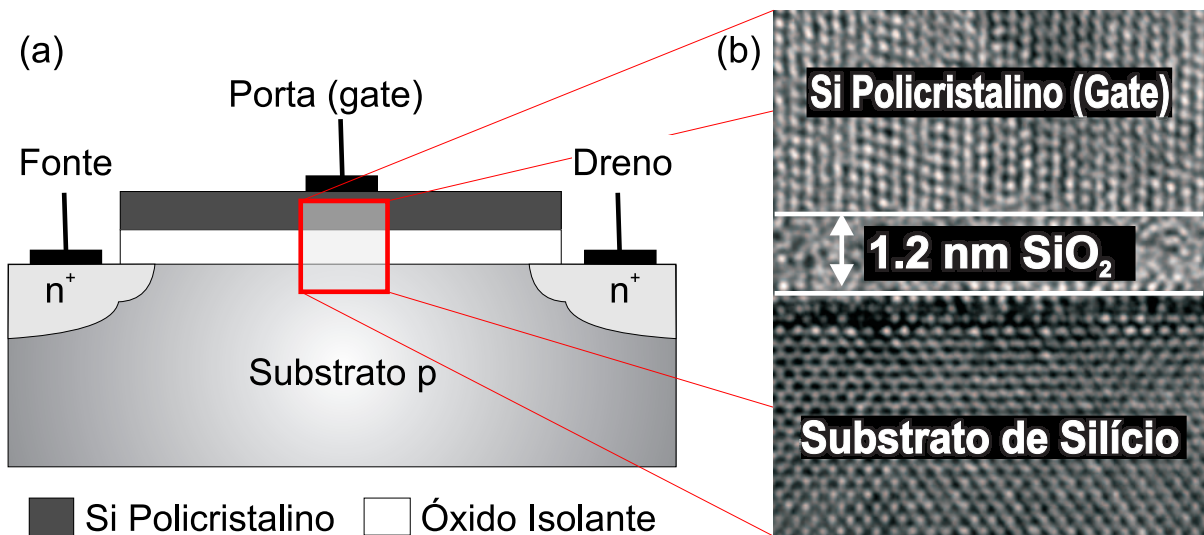


Figura 11: (a) Esquema físico de um transistor CMOS de canal N (NMOS) e (b) Imagens feitas por Microscopia Eletrônica de Transmissão de uma seção reta do dispositivo. A figura mostra as junções entre o Si policristalino, o SiO_2 com largura de 1.2 nm e o substrato de silício. [24]

O transistor MOSFET funciona como uma válvula, alternando entre a existência e a não existência de corrente da fonte para o dreno. No caso do transistor de canal N (NMOS - Fig. 11), o chaveamento é feito através de uma voltagem aplicada ao gate, que deve ser grande o suficiente para vencer a rigidez dielétrica do óxido e criar uma corrente entre fonte e dreno através do substrato. Caso contrário, não haverá corrente elétrica no sistema. O PMOS (transistor de canal P) tem um funcionamento contrário: a baixas tensões na porta, existe corrente; caso contrário, não haverá.

Com a constante necessidade de redução dos dispositivos, as portas tornaram-se cada vez mais finas e o uso de SiO_2 como óxido isolante tornou-se mais limitado devido a correntes de vazamento mais difíceis de controlar. Tais correntes aniquilam a função de chaveamento do dispositivo, o que direcionou pesquisas para a substituição do SiO_2 por um material de constante dielétrica mais elevada [25, 26]. Uma alternativa foi a utilização de óxidos amorfos, entre eles o $SrTiO_3$, HfO_2 e TiO_2 . Dessa forma, nosso sistema torna-se cada vez mais integrado, com menos perdas.

A constante dielétrica é uma medida de quanta carga um material pode armazenar. Materiais “high-k”, tais como o dióxido de háfnio (HfO_2), o dióxido de zircônio (ZrO_2)

e o dióxido de titânio (TiO_2) inerentemente têm uma constante dielétrica ou “k” acima de 3.9, o valor da constante dielétrica do dióxido de silício.

Existem muitos benefícios em se usar materiais “*high-k*”. Toda a indústria de semicondutores luta constantemente contra as perdas de energia nos dispositivos. Essas perdas se tornam maiores com o aumento do número de transistores nos chips. Nesse sentido, os materiais “*high-k*” nos dão uma grande vantagem em relação a outros óxidos, pois diminuem as correntes de perda. Outra vantagem é que, como esses materiais podem ser muitas vezes mais finos que o SiO_2 , eles podem reduzir as perdas na porta em até 100 vezes, melhorando o desempenho do dispositivo. A transição de SiO_2 para materiais “*high-k*” foi uma das mudanças mais significativas na evolução dos transistores MOS, os quais usaram dióxido de silício desde a sua criação, na década de 1960. [24]

1.6 Tunelamento Ressonante

O *Tunelamento Ressonante* é um conceito da mecânica quântica. Ele é observado em partículas que tunelam uma sequência de regiões classicamente proibidas, localizadas entre regiões classicamente permitidas (veja Fig. 12). A região classicamente proibida deve ser fina o suficiente para permitir o tunelamento das partículas. Já a classicamente permitida deve ser larga o suficiente para que haja a formação de autoestados de energia, chamados de estados quase ligados.

A Fig. 12 mostra esquematicamente como funciona um dispositivo de tunelamento ressonante. Na Fig. 12 (a) vemos o potencial com voltagem nula. Os terminais possuem energia de Fermi E_F de acordo com a dopagem do material. Na região entre as barreiras vemos a formação de um estado quase ligado ε_1 . Os parâmetros do dispositivo são escolhidos de forma que, com voltagem nula, este estado esteja acima do nível de Fermi dos contatos. Nenhuma corrente passa através do dispositivo. Na Fig. 12 (b) a tensão é um pouco maior, fazendo com que o autoestado ε_1 diminua em relação à energia das partículas provenientes do contato esquerdo. A única situação favorável para a transmissão é quando ε_1 estiver entre o nível de Fermi e a menor energia dos elétrons deste contato. Neste caso, se algum elétron tiver energia igual a ε_1 , haverá uma probabilidade finita de haver transmissão através da barreira. Na Fig. 12 (c), a energia do autoestado já é menor que os valores de energia favoráveis à transmissão. Isso faz com que a corrente diminua com o aumento da tensão, causando uma “resistência negativa”. Aplicando uma voltagem maior resulta em forte corrente de emissão termoiónica, causando um crescimento substancial

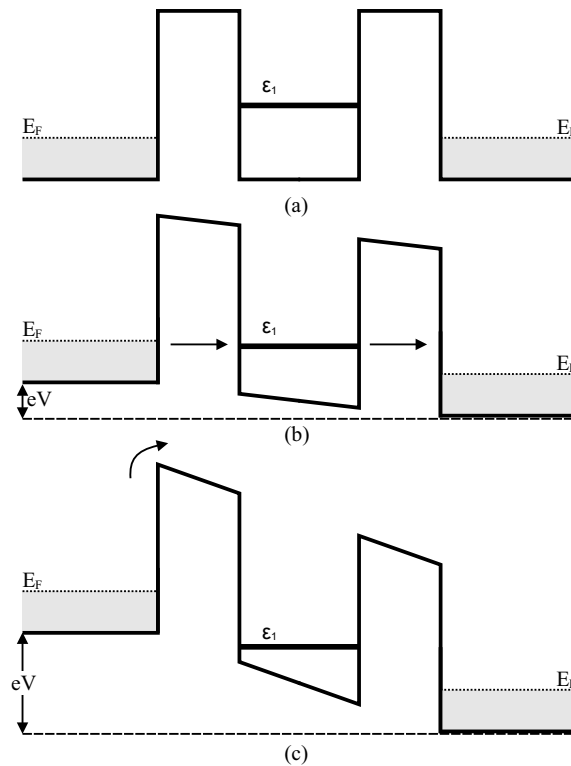


Figura 12: Diagrama de banda de um dispositivo de tunelamento ressonante de barreira dupla para três voltagens diferentes.

na corrente elétrica.

O *Coefficiente de Transmissão* é a probabilidade que uma partícula tem de tunelar através do dispositivo. A fim de calculá-lo, usaremos uma aproximação similar a utilizada por Esaki e Tsu [27] em sua primeira proposta para o tunelamento ressonante. Neste método simples, conhecido como *método da matriz de transferência*, o potencial é dividido em segmentos pequenos o suficiente para que a energia potencial possa ser considerada constante em cada região, como mostra a Fig. 13. Resolvemos a equação de Schrödinger em cada uma dessas partes, aplicando as condições de continuidade das funções de onda e suas derivadas. Para isto, separamos a equação de Schrödinger em duas direções: paralela e perpendicular à direção de transporte. A paralela (em z) é dada por

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) - E \right] \psi_E(z) = 0. \quad (1.14)$$

Numa região de potencial constante, a solução geral desta equação é

$$\psi = Ae^{ikz} + Be^{-ikz}, \quad (1.15)$$

onde

$$k^2 = \frac{2m(E - V)}{\hbar^2}. \quad (1.16)$$

Note que k tem valores reais nas regiões classicamente permitidas e valores imaginários nas regiões classicamente proibidas. Cada região possui seus próprios valores de massa e função de onda: $m_i, \psi_i, i = 1, 2, \dots, n$.

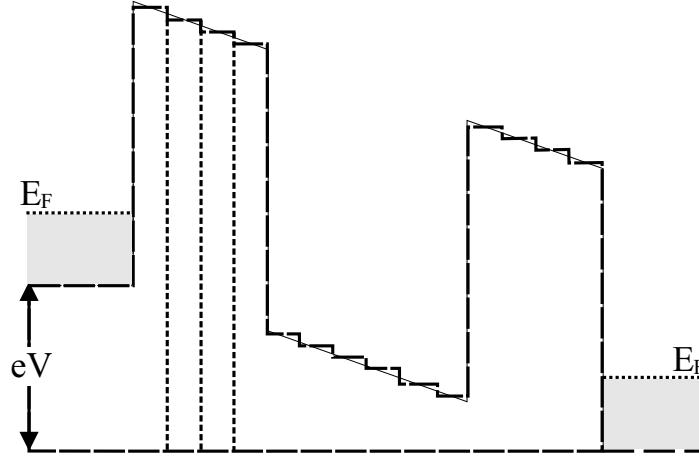


Figura 13: Perfil de um potencial arbitrário subdividido em pequenos pedaços de potencial constante. E_F é a energia de Fermi nos contatos e V é a tensão aplicada sobre o potencial.

Nosso objetivo agora é encontrar a probabilidade de haver transmissão $T(E)$ de um lado ao outro do nosso sistema. Inicialmente, calculamos $T(E)$ entre as duas primeiras regiões (chamadas de regiões 1 e 2). As funções de onda nas duas regiões são

$$\begin{aligned}\psi_1 &= A_1 e^{ik_1 z} + B_1 e^{-ik_1 z} \\ \psi_2 &= A_2 e^{ik_2 z} + B_2 e^{-ik_2 z}.\end{aligned}\quad (1.17)$$

Entre as duas regiões devem existir condições de contorno para a continuidade da função de onda e sua derivada, como segue

$$\begin{aligned}\psi_1(z_0) &= \psi_2(z_0), \\ \frac{1}{m_1} \psi_1'(z_0) &= \frac{1}{m_2} \psi_2'(z_0).\end{aligned}\quad (1.18)$$

Substituindo (1.17) em (1.18), temos

$$A_1 e^{ik_1 z_0} + B_1 e^{-ik_1 z_0} = A_2 e^{ik_2 z_0} + B_2 e^{-ik_2 z_0} \quad (1.19)$$

e

$$\frac{1}{m_1} [ik_1 (A_1 e^{ik_1 z_0} - B_1 e^{-ik_1 z_0})] = \frac{1}{m_2} [ik_2 (A_2 e^{ik_2 z_0} - B_2 e^{-ik_2 z_0})]. \quad (1.20)$$

Combinando as duas últimas equações, resulta em

$$A_1 = \frac{1}{2k_1 m_2} [A_2 e^{i(k_2 - k_1)z_0} (k_1 m_2 + k_2 m_1) + B_2 e^{-i(k_2 + k_1)z_0} (k_1 m_2 - k_2 m_1)]. \quad (1.21)$$

De maneira semelhantemente, podemos encontrar

$$B_1 = \frac{1}{2k_1m_2} [A_2 e^{i(k_2-k_1)z_0} (k_1m_2 + k_2m_1) + B_2 e^{-i(k_2+k_1)z_0} (k_1m_2 - k_2m_1)]. \quad (1.22)$$

Se escrevermos estes resultados na forma matricial, vemos que

$$\begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} A_2 \\ B_2 \end{bmatrix}. \quad (1.23)$$

A matriz M é conhecida como *matriz de transferência* e é dada por

$$M = \frac{1}{2k_1m_2} \begin{bmatrix} C e^{i(k_2-k_1)z_1} & D e^{-i(k_2+k_1)z_1} \\ D e^{i(k_2+k_1)z_1} & C e^{-i(k_2-k_1)z_1} \end{bmatrix}, \quad (1.24)$$

onde $C = k_1m_2 + k_2m_1$ e $D = k_1m_2 - k_2m_1$.

Caso tenhamos n regiões, com $n-1$ interfaces, podemos obter o coeficiente A_n através de aplicações sucessivas da Eq. (1.23), chegando assim ao resultado do coeficiente de transmissão

$$T(E) = \left| \frac{A_n}{A_1} \right|^2. \quad (1.25)$$

Note que este método pode ser generalizado para qualquer tipo de perfil de potencial. Isto possibilita o cálculo da transmissão através de uma estrutura de barreira dupla na presença de um campo elétrico aplicado. Esta generalização também nos permitirá calcular a transmissão em um potencial com efeito de carga imagem, como veremos mais adiante.

1.7 Correntes de Tunelamento

Para um sistema de muitos elétrons, a física quântica traz algumas características adicionais que não aparecem na descrição clássica. Estas características são associadas com o fato de partículas elementares, incluindo os elétrons, serem idênticas, e a impossibilidade, a princípio, de especificarmos o caminho percorrido e a posição de um dado elétron. Além do mais, uma característica interna de uma partícula, o *spin*, desempenha importante papel na física de muitas partículas.

Na mecânica quântica, as partículas possuem um grau de liberdade interno adicional, chamado de spin. Embora se possa compará-lo com rotações clássicas, o spin é, de fato,

uma quantidade estritamente quântica e difere substancialmente de seu análogo clássico. A principal característica quantitativa do spin é uma quantidade adimensional chamada número de spin s . É bem estabelecido experimentalmente que um elétron possui número de spin igual a $1/2$. Se fixarmos um eixo no espaço, a projeção do spin do elétron neste eixo pode ser $+1/2$ ou $-1/2$. Assim, uma completa descrição de um estado eletrônico requer pelo menos dois números quânticos: um correspondente à função de onda espacial n e outro ao spin s .

Existe uma consequência crucial do fato de o número de spin do elétron ser meio-inteiro. O fato é que partículas com spin meio-inteiro obedecem ao princípio da exclusão de Pauli: qualquer estado quântico $\{n, s\}$ pode ser ocupado por apenas uma única partícula. Em outras palavras, dois elétrons em um sistema não podem estar simultaneamente no mesmo estado quântico. Ou seja, dois elétrons só podem estar no mesmo estado de energia se seus spins forem diferentes. É claro que esta restrição leva-nos a uma nova estatística não-clássica de elétrons, chamada estatística de Fermi. Em um sistema em equilíbrio, a ocupação dos níveis de energia é descrita pela função distribuição de Fermi,

$$F_F(E_{n,s}) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E_{n,s} - E_F}{k_B T}}}, \quad (1.26)$$

onde $k_B T$ é a energia térmica do sistema, E_F é a energia ou nível de Fermi, que depende da concentração de elétrons ou da dopagem do material, e $E_{n,s}$ é a energia do estado quântico caracterizado pelos dois números quânticos n e s . A função de Fermi é mostrada na Fig. 14 para diferentes valores de temperatura.

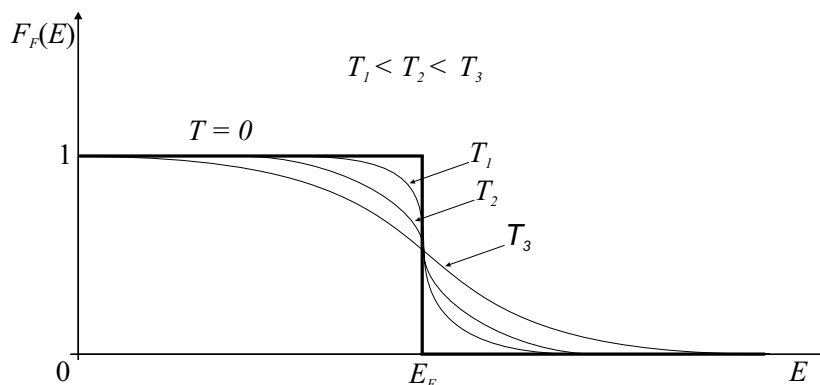


Figura 14: Função distribuição de Fermi para diferentes valores de temperatura.

O número total N de elétrons no sistema pode ser obtido pela condição de normalização

$$\sum_{n,s} F_F(E_{n,s}) = N. \quad (1.27)$$

Se as posições dos níveis de energia forem independentes do spin, $E_{n,s} \equiv E_n$ e a condição de normalização poderá ser reescrita como

$$2 \sum_n F_F(E_n) = N. \quad (1.28)$$

Note que a ocupação de qualquer estado de energia, definido pela Eq. (1.26), é sempre menor ou igual a 1, concordando com o princípio da exclusão de Pauli. Note também que para altos valores de temperatura, a distribuição de Fermi se aproxima da distribuição de Boltzmann

$$F_F(E) \approx e^{\frac{E_F - E}{k_B T}}, \quad (1.29)$$

representada por $T = T_3$ na Fig. 14. No limite para baixas temperaturas, $T \rightarrow 0$, a função F_F é transformada em uma função passo: $F_F(E) = 1$ para níveis de energia abaixo da energia de Fermi, desde que todos os níveis com $E < E_F$ estejam ocupados; e $F_F(E) = 0$ para energias acima de E_F , desde que todos estes níveis estejam vazios. A função de Fermi será utilizada para descrever a distribuição eletrônica nos contatos de nosso dispositivo, tendo um papel importante na determinação da corrente elétrica.

A equação de Schrödinger é uma ferramenta teórica suficiente para tratar problemas de mecânica de um único elétron ou mecânica de elétrons não interagentes. Uma teoria completa da cinética de elétrons em sólidos requer uma abordagem mais ampla do que a utilizada no caso em que a equação de Schrödinger é redutível ao problema de uma única partícula.

Consideramos o caso de transporte quântico mais simples: o transporte independente do tempo, no qual processos inelásticos são descartados. O transporte em nanoestruturas depende da geometria tanto do dispositivo como de seus contatos, os quais conectam o dispositivo a um circuito elétrico externo. Assim, precisamos considerar todo o sistema: o dispositivo e seus contatos.

A Fig. 15 mostra características essenciais do modelo simplificado. Para evitar uma descrição mais detalhada dos contatos, nós os consideramos como reservatórios de elétrons nos quais os processos de relaxação de momento e energia são tão efetivos que o sistema de elétrons permanece em equilíbrio mesmo sob uma voltagem aplicada. As condições de contorno nas extremidade do dispositivo são dadas pelas funções de Fermi. A energia de Fermi dos contatos é igual a E_F . Com a voltagem aplicada, há uma inclinação do potencial, como mostra a Fig. 15(b). Dessa forma, o nível de Fermi no contato esquerdo permanece constante, enquanto o nível no contato direito sofre uma diminuição eV , de

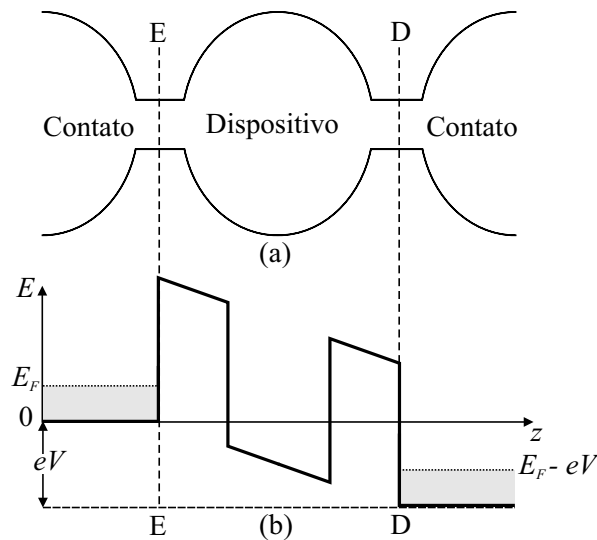


Figura 15: (a) - Esboço de uma nanoestrutura consistindo em um dispositivo conectado a seus contatos. (b) - Diagrama de banda para o mesmo dispositivo, mostrando a voltagem V aplicada e as energias de Fermi dos contatos.

modo que as distribuições eletrônicas se tornam $F_F(E)$ e $F_F(E - eV)$ nos contatos esquerdo e direito, respectivamente. Aqui, E é a energia cinética dos elétrons. Assumimos que nosso problema pode ser resolvido com uma boa precisão pelo método de separação de variáveis, de modo que o potencial pode ser dividido:

$$V(\rho, \varphi, z) = V(\rho, \varphi) + V(z). \quad (1.30)$$

Neste caso, a função de onda total pode ser dividida da mesma maneira e pode ser escrita como

$$\psi(\rho, \varphi, z) = \psi_T(\rho, \varphi)\psi_{||}(z). \quad (1.31)$$

Chamamos os estados $\psi_T(\rho, \varphi) = \psi_{n,l}(\rho, \varphi)$ e suas energias $E_T = E_{n,l}$. Precisamos analisar o comportamento da função de onda longitudinal $\psi_{||}$, já que os elétrons se deslocam nesta direção. Para isso, consideramos as interfaces entre os contatos e o dispositivo. Chamamos de E a interface esquerda e D a interface direita, como mostra a Fig. 15(a). Iniciemos nossa análise considerando a função de onda dos elétrons que atravessam o dispositivo do contato esquerdo ao contato direito

$$\psi_{||,e} = \begin{cases} e^{ik_e(z-z_e)} + r_e e^{-ik_e(z-z_e)} & z \sim z_e \\ t_d e^{ik_d(z-z_d)} & z \sim z_d \end{cases}. \quad (1.32)$$

Isto é, no ponto E esta função consiste em uma parte vinda do contato esquerdo mais uma parte refletida pelo potencial, enquanto que no ponto D existe apenas uma parte que foi transmitida através do dispositivo. Os coeficientes r_e e t_d são as amplitudes das

ondas refletida e transmitida, respectivamente. Estes coeficientes dependem do potencial, da geometria do dispositivo, etc. De forma semelhante, podemos escrever a função de onda dos elétrons atravessando o dispositivo do contato direito ao esquerdo

$$\psi_{\parallel,d} = \begin{cases} t_e e^{-ik_e(z-z_e)} & z \sim z_e \\ e^{-ik_d(z-z_d)} + r_d e^{ik_d(z-z_d)} & z \sim z_d \end{cases}. \quad (1.33)$$

Nas equações (1.32) e (1.33), os valores de k_d e k_e correspondem às componentes paralelas do vetor de onda k_{\parallel} nos pontos D e E , respectivamente. São as componentes dos vetores de onda na direção z .

Uma voltagem externa através do dispositivo também pode ser considerada. Neste caso, os coeficientes das ondas transmitida e refletida se tornam dependentes da tensão V .

Existem algumas relações fundamentais entre os coeficientes t_d , r_d , t_e e r_e . Para descobri-las, devemos considerar a condição de continuidade da corrente para ambas as funções $\psi_{\parallel,e}$ e $\psi_{\parallel,d}$. Para isto, é importante introduzirmos o conceito de *fluxo de probabilidade* ou *densidade de fluxo de partículas*. Na física clássica, a densidade de fluxo é um vetor, o qual especifica a direção do fluxo de partículas e tem módulo igual ao número de partículas atravessando uma unidade de área por unidade de tempo. Na mecânica quântica, esta quantidade é dada pela seguinte relação

$$\mathbf{i} = -\frac{i\hbar}{2m^*}(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*). \quad (1.34)$$

Aplicando a Eq. (1.32) na Eq. (1.34) nas situações em que $z \sim z_e$ e $z \sim z_d$, temos

$$\mathbf{i}_e(z \sim z_e) = -\frac{i\hbar}{2m}(\psi_{\parallel,e}^*(z \sim z_e) \nabla \psi_{\parallel,e}(z \sim z_e) - \psi_{\parallel,e}(z \sim z_e) \nabla \psi_{\parallel,e}^*(z \sim z_e)) \quad (1.35)$$

e

$$\mathbf{i}_e(z \sim z_d) = -\frac{i\hbar}{2m}(\psi_{\parallel,e}^*(z \sim z_d) \nabla \psi_{\parallel,e}(z \sim z_d) - \psi_{\parallel,e}(z \sim z_d) \nabla \psi_{\parallel,e}^*(z \sim z_d)), \quad (1.36)$$

de onde resulta que

$$\mathbf{i}_e(z \sim z_e) = \frac{\hbar k_e}{m}(1 - |r_e|^2) \quad (1.37)$$

e

$$\mathbf{i}_e(z \sim z_d) = \frac{\hbar k_d}{m}(|t_d|^2). \quad (1.38)$$

Como não há criação nem destruição de partículas ao longo do dispositivo, podemos dizer

que a quantidade \mathbf{i} é conservada. Portanto podemos igualar as equações (1.37) e (1.38):

$$k_e(1 - |r_e|^2) = k_d|t_d|^2. \quad (1.39)$$

Se repetirmos o mesmo processo para a Eq. (1.33), chegamos à nossa segunda relação fundamental

$$k_d(1 - |r_d|^2) = k_e|t_e|^2. \quad (1.40)$$

Outras relações podem ser encontradas. Considere as funções $\psi_{||,e}$ e $\psi_{||,d}$. Ambas são soluções da equação de Schrödinger para a mesma energia E . Como estas equações são reais, as funções $\psi_{||,e}$ e $\psi_{||,d}$ também são soluções. Dessa forma, podemos representar as últimas funções da seguinte forma

$$\psi_{||,e}^* = A\psi_{||,e} + B\psi_{||,d}, \quad (1.41)$$

$$\psi_{||,d}^* = C\psi_{||,e} + D\psi_{||,d}, \quad (1.42)$$

onde A , B , C e D são constantes. Substituindo as equações (1.32) e (1.33) nas equações (1.41) e (1.42) e igualando os coeficientes das funções $\exp[\pm ik_e(z - z_e)]$ e $\exp[\pm ik_d(z - z_d)]$ para ambas as versões modificadas das funções (1.41) e (1.42), encontramos oito equações, as quais facilitam a eliminação das constantes A , B , C e D ; encontramos quatro relações fundamentais:

$$1 = r_d r_d^* + t_d t_e^* \quad 1 = r_e r_e^* + t_e t_d^*, \quad (1.43)$$

$$r_e t_e^* + r_d^* t_e = 0 \quad r_d t_d^* + r_e^* t_d = 0. \quad (1.44)$$

Se usarmos as relações (1.39) e (1.40), encontramos

$$k_d^2 |t_d|^2 = k_e^2 |t_e|^2. \quad (1.45)$$

Substituindo as funções de onda das equações (1.32) e (1.33) na Eq. (1.34), nós calculamos o fluxo de elétrons entrando i_{in} e saindo i_{out} através do dispositivo:

$$i_{in} = v_e \quad i_{out} = v_d |t_d|^2, \quad (1.46)$$

onde $v_e = \hbar k_e / m^*$ e $v_d = \hbar k_d / m^*$ são as velocidades dos elétrons nos pontos E e D , respectivamente. A relação entre estas duas quantidades define o coeficiente de transmissão através do dispositivo:

$$T_{e \rightarrow d}(E) = \frac{i_{out}}{i_{in}} = \frac{k_d}{k_e} |t_d|^2. \quad (1.47)$$

O coeficiente de transmissão correspondente para a função $\psi_{\parallel,d}$ é

$$T_{d \rightarrow e}(E) = \frac{k_e}{k_d} |t_e|^2. \quad (1.48)$$

Das relações acima, podemos concluir que

$$T_{e \rightarrow d}(E) = T_{d \rightarrow e}(E) = T(E_{\parallel}) \quad (1.49)$$

onde $E_{\parallel} = \hbar^2 k_{\parallel}^2 / (2m^*)$ é a energia cinética correspondente à componente longitudinal do momento do elétron.

Assim, o coeficiente de transmissão é o mesmo para as duas situações. A relação entre o fluxo de elétrons refletidos e o fluxo de elétrons entrando no dispositivo nos dá o coeficiente de reflexão

$$R(E) = \frac{i_r}{i_{in}} = |r_e|^2 = |r_d|^2. \quad (1.50)$$

Facilmente podemos ver que

$$T(E) + R(E) = 1. \quad (1.51)$$

Agora, iremos considerar a contribuição para a corrente total de todos os elétrons entrando e saindo do dispositivo. Seja um estado de elétrons no contato esquerdo com números quânticos k_{\parallel} , n e l . O número de elétrons neste estado é dado por $2F_F[E(k_{\parallel}, n, l) - E_F]$, onde a função F_F é dada por

$$F_F(E) = \frac{1}{1 + e^{E/k_B T}} \quad (1.52)$$

e o fator 2 aparece por causa da degenerescência devido ao spin. Se o comprimento da conexão vale L_c , o número de elétrons por unidade de comprimento da conexão é $2F_F/L_c$. A contribuição total à corrente elétrica devido aos elétrons atravessando o dispositivo da esquerda pra direita é

$$I_e = \frac{2e}{L_c} \sum_{n,l} \sum_{k_{\parallel} > 0} v_{\parallel} T(E_{\parallel}) F_F [E(k_{\parallel}, n, l) - E_F]. \quad (1.53)$$

Similarmente, a contribuição total à corrente elétrica devido aos elétrons atravessando o dispositivo da direita pra esquerda é

$$I_d = -\frac{2e}{L_c} \sum_{n,l} \sum_{k_{\parallel} < 0} v_{\parallel} T(E_{\parallel}) F_F [E(k_{\parallel}, n, l) - (E_F - eV)]. \quad (1.54)$$

Note que I_e e I_d são partes da corrente elétrica total, enquanto que i define apenas a densidade de fluxo de elétrons, sendo a densidade de corrente $J = I/S$, $J = -ei$.

Portanto, a corrente total atravessando todo o dispositivo é dada pela soma

$$I = I_e + I_d$$

$$I = \frac{2e}{L_c} \sum_{n,l} \sum_{k_{||} > 0} v_{||} T(E_{||}) \{ F_F [E(k_{||}, n, l) - E_F] - F_F [E(k_{||}, n, l) + eV - E_F] \}. \quad (1.55)$$

Podemos substituir o somatório em $k_{||}$ por uma integral

$$\sum_{k_{||}} \{ \dots \} \rightarrow L_c \int \frac{dk_{||}}{2\pi} \{ \dots \} = L_c \int \frac{dE_{||}}{2\pi\hbar v_{||}} \{ \dots \}. \quad (1.56)$$

Substituindo a Eq. (1.56) em (1.55), obtemos

$$I = \frac{e}{\pi\hbar} \sum_{n,l} \int T(E_{||}) [F_F(E_{||} - E_F) - F_F(E_{||} + eV - E_F)] dE_{||}. \quad (1.57)$$

Vemos que a corrente elétrica depende apenas da ocupação dos estados eletrônicos nos contatos e do coeficiente de transmissão. A Eq. (1.57) é geral, e vale tanto para fios como para poços quânticos.

No caso em que a transmissão T é independente dos números quânticos transversais n e l , podemos introduzir uma nova função

$$F(E) = 2 \sum_{n,l} \frac{1}{1 + e^{\frac{E + E_{n,l}}{k_B T}}} \quad (1.58)$$

na integral da Eq. (1.57). Desta maneira, obtemos

$$I = \frac{e}{2\pi\hbar} \int T(E_{||}) [F(E_{||} - E_F) - F(E_{||} + eV - E_F)] dE_{||}, \quad (1.59)$$

onde a integral é feita sobre a energia cinética do movimento longitudinal $E_{||}$. Note que a velocidade do elétron não aparece na expressão final da corrente total. Este resultado pode ser aplicado em uma variedade de diferentes casos, com exceção, em nosso caso, do fio heteroestruturado. Isto ocorre porque as transmissões do fio são dependentes dos números n e l . A Eq. (1.57) é mais geral e deve ser utilizada para o estudo de fios, pois não considera T independente dos números quânticos n e l .

Em estruturas bidimensionais, como poços e barreiras, nosso dispositivo possui dimensão transversal macroscopicamente larga. Isto significa que os números quânticos transversais são os vetores de onda: $n = k_x$, $l = k_y$, e $E_{n,l} = \hbar^2(k_x^2 + k_y^2)/(2m^*)$. A

equação (1.58) pode ser calculada explicitamente:

$$F(E) = S \frac{m^* k_B T}{\pi \hbar^2} \ln[1 + \exp(-E/k_B T)], \quad (1.60)$$

onde S é a área da seção reta do dispositivo. A função $F(E)$ nos dá o número de elétrons com energia E . Portanto, usando a Eq. (1.59), a densidade de corrente total é [27, 51]

$$J = \frac{I}{S} = \left(\frac{e}{2\pi \hbar S} \right) \frac{S m^* k_B T}{\pi \hbar^2} \int T(E_{||}) \left[\ln \left(1 + e^{\frac{-(E_{||} - E_F)}{k_B T}} \right) - \ln \left(1 + e^{\frac{-(E_{||} + eV - E_F)}{k_B T}} \right) \right] dE_{||},$$

$$J = e \frac{m^* k_B T}{2\pi^2 \hbar^3} \int T(E_{||}) \ln \left(\frac{1 + \exp[(E_F - E_{||})/k_B T]}{1 + \exp[(E_F - eV - E_{||})/k_B T]} \right) dE_{||}, \quad (1.61)$$

onde m^* é a massa efetiva e a transmissão $T(E_{||})$ é dada pela equação (1.25). Esta é uma equação de grande utilidade, pois permite-nos calcular as características de corrente-voltagem de uma nanoestrutura e sua dependência com a concentração eletrônica e temperatura. No caso limite quando $T \rightarrow 0$, a equação (1.61) se torna

$$J = (em^*/2\pi^2 \hbar^3) \int_0^{E_F} (E_F - E) T^* T dE, \quad E_F \leq eV$$

$$J = (em^*/2\pi^2 \hbar^3) [eV \int_0^{E_F - eV} T^* T dE + \int_{E_F - eV}^{E_F} (E_F - E) T^* T dE], \quad E_F > eV. \quad (1.62)$$

Este resultado pode ser aplicado a um número qualquer de barreiras. Em nosso caso, aplicamos somente para o caso de uma e de duas barreiras, em heteroestruturas Si/SiO_2 e Si/HfO_2 .

1.8 Sumário

No Capítulo 2, estudaremos as propriedades de transporte em fios quânticos heteroestruturados. Partindo da equação de Schrödinger, usando a aproximação da massa efetiva, iremos calcular a contribuição de energia $E_{\rho, \varphi}$ devido ao confinamento radial. Esta modificará o potencial efetivo visto pelo portador. Com este novo potencial, utilizaremos o método de matriz de transferência estudado neste Capítulo, para o cálculo do coeficiente de transmissão. Levantaremos as curvas de transmissão contra energia do portador variando o raio, a largura do poço entre as barreiras e a largura das mesmas.

No Capítulo 3, estudaremos as propriedades de transporte de sistemas bidimensionais com barreira simples e dupla, compostos por uma heteroestrutura formada por materiais dielétricos e semicondutores, como o Si/SiO_2 e o Si/HfO_2 . Resolveremos a equação de Poisson nestes sistemas, levando em consideração as diferenças entre as constantes dielétricas dos dois materiais. Escreveremos o potencial como uma expansão de Fourier

Bessel, aplicando as condições de contorno e encontrando uma expressão que determina o potencial de auto-energia. Logo em seguida, utilizando mais uma vez o método da matriz de transferência, calcularemos as transmissões em barreiras simples e duplas. Finalmente, calcularemos as curvas de corrente por voltagem para sistemas Si/SiO_2 e Si/HfO_2 de barreira simples e dupla.

No Capítulo 4, temos as conclusões acerca dos trabalhos apresentados nesta dissertação e apresentaremos as perspectivas sobre trabalhos futuros.

2 Fio Quântico Heteroestruturado de Barreira Dupla

Neste Capítulo, estudaremos os efeitos de tunelamento ressonante em um fio quântico composto por uma heteroestrutura, formando duas barreiras na direção de crescimento. Para tal, usaremos um modelo cilíndrico. Por meio do método de separação de variáveis, resolveremos a Equação de Schrödinger em coordenadas cilíndricas, mostrando que a parte radial é dada pela Função de Bessel de primeira espécie e que o potencial efetivo varia com o raio do fio. Resolveremos nosso modelo considerando a existência de interfaces graduais. Outra consideração é a de que as massas efetivas variam com a posição [28]. Por fim, com os resultados de transmissão e corrente obtidos no Capítulo anterior, calcularemos a corrente elétrica e a transmissão através do fio e discutiremos os resultados deste modelo para a heteroestrutura *InAs/InP* de barreira dupla.

2.1 Modelo Teórico

Nosso modelo baseia-se em um fio heteroestruturado cilíndrico crescido na direção z e imerso numa região de potencial infinito, como mostra a Fig. 16(a). A heteroestrutura é formada por dois materiais com diferentes *gaps* de energia. A Fig. 16(b) mostra o diagrama de banda de nosso modelo. O fio é contruído crescendo duas camadas de um material A entre camadas de um material B de gap menor, de modo a formar duas barreiras em série. As barreiras estão localizadas nas regiões em que $B/2 < |z| < B/2 + L$. Nas regiões mais escuras encontram-se as interfaces graduais, que são as transições entre os dois materiais. As interfaces têm espessura σ , as barreiras possuem largura L e a distância entre as duas barreiras é dada por B . A linha tracejada representa o potencial com interfaces abruptas.

Note que, devido à simetria do fio, o potencial total não depende da coordenada φ ,

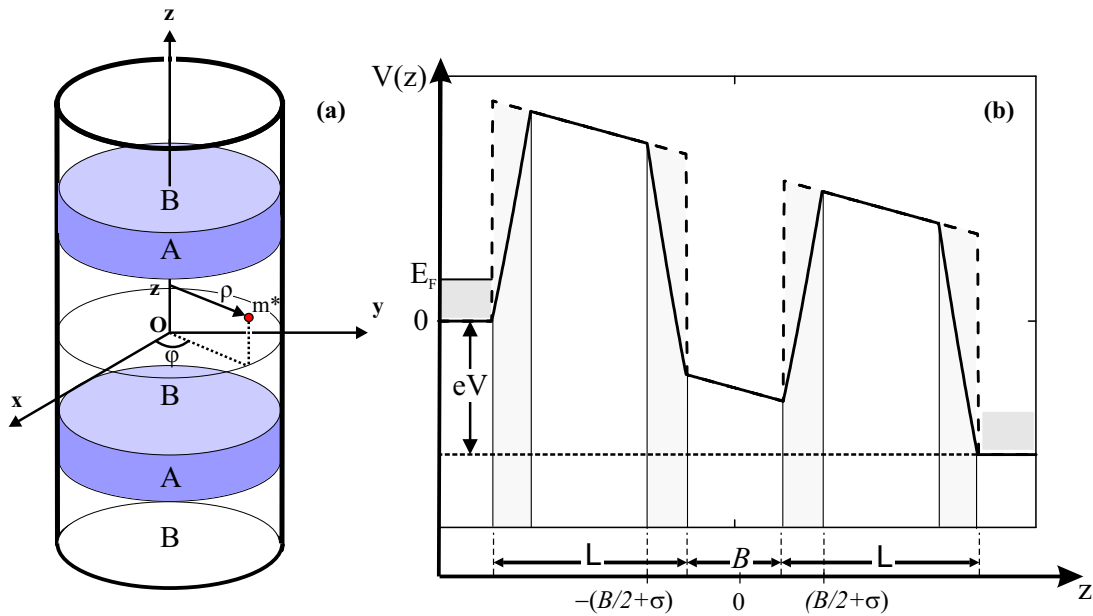


Figura 16: À esquerda (a) vemos o modelo de fio quântico heteroestruturado representado em coordenadas cilíndricas e crescendo na direção z . Os dois discos escuros representam o material A da barreira, enquanto que a parte mais clara representa o material B entre o qual o primeiro é crescido. À direita (b) vemos o diagrama de banda de nosso modelo. Cada curva representa o potencial com interfaces graduais (linha sólida) e com interfaces abruptas (linha tracejada). Os termos L e B são as larguras das barreiras e do poço entre elas, respectivamente. As interfaces graduais têm espessura igual a σ e estão localizadas nas regiões mais escuras.

sendo portanto dado por $V = V_z + V_\rho$. O potencial em z de cada região é determinado experimentalmente para cada material, de modo que

$$V_z = Q[e_1\chi(z) + e_2\chi^2(z)], \quad (2.1)$$

onde Q é o *band-offset* da barreira, e_1 e e_2 são parâmetros experimentais do material e $\chi(z)$ é a *Fração Molar*. Para uma descrição mais realista do problema, levamos em conta a existência de interfaces graduais de espessura igual a σ entre os diferentes materiais. Assumimos que a fração molar varia linearmente com a posição nessas regiões [29], de maneira que

$$\chi(z) = \begin{cases} 0, & z < z_1; \\ \frac{z-z_1}{\sigma}, & z_1 \leq z \leq z_2 \\ 1, & z_2 < z < z_3 \\ 1 - \frac{z-z_3}{\sigma}, & z_3 \leq z \leq z_4 \\ 0, & z > z_4. \end{cases}$$

Já o potencial na direção radial é dado por

$$V_\rho = \begin{cases} 0 & \text{se } 0 \leq \rho \leq r \\ \infty & \text{se } \rho > r \end{cases},$$

onde r é o raio do fio. Usando a aproximação da massa efetiva, resolvemos a Equação de Schrödinger em coordenadas cilíndricas para um elétron dentro do fio

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \psi(\rho, \varphi, z) + [V_\rho(\rho) + V_z(z)] \psi(\rho, \varphi, z) - \frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m^*(z)} \frac{\partial}{\partial z} \psi(\rho, \varphi, z) = E \psi(\rho, \varphi, z), \quad (2.2)$$

onde m^* é a massa efetiva do elétron. Multiplicamos todos os termos da Equação por $-2m/\hbar^2$ e fazemos a separação de variáveis

$$\psi(\rho, \varphi, z) = R(\rho)\Phi(\varphi)Z(z). \quad (2.3)$$

Como o potencial V não depende da coordenada angular φ , obtemos

$$\Phi(\varphi) = A e^{ik_\varphi \varphi}. \quad (2.4)$$

A Eq. (2.4) deve obedecer à condição de periodicidade

$$\begin{aligned} e^{ik_\varphi \varphi} &= e^{ik_\varphi(\varphi+2\pi)} \Rightarrow 1 = e^{ik_\varphi 2\pi} \\ &\Rightarrow \cos(2\pi k_\varphi) + i \operatorname{sen}(2\pi k_\varphi) = 1 \\ &\Rightarrow \cos(2\pi k_\varphi) = 1 \Rightarrow k_\varphi = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \end{aligned} \quad (2.5)$$

Substituindo (2.3) em (2.2), obtemos

$$\begin{aligned} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \Phi Z \frac{\partial R}{\partial \rho} + \frac{RZ}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \Phi - \frac{2m^*}{\hbar^2} [V_\rho(\rho) + V_z(z)] R \Phi Z + m^* \frac{\partial}{\partial z} \frac{R \Phi}{m^*(z)} \frac{\partial Z}{\partial z} \\ = ER \Phi Z \left(-\frac{2m^*}{\hbar^2} \right). \end{aligned} \quad (2.6)$$

Substituímos (2.4) em (2.6), fazendo $k_\varphi = l$. Dividimos os dois lados da equação por RZ e, fazendo as devidas simplificações, obtemos:

$$\frac{1}{R\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial R}{\partial \rho} \right) - \frac{l^2}{\rho^2} - \frac{2m^* V_\rho}{\hbar^2} - \frac{2m^* V_z}{\hbar^2} + \frac{m^*}{Z} \frac{\partial}{\partial Z} \frac{1}{m^*(z)} \frac{\partial Z}{\partial z} = -\frac{2m^* E_z E_\rho E_\varphi}{\hbar^2}. \quad (2.7)$$

A solução da Eq. (2.7) para ρ e φ fica:

$$\frac{1}{R\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial R}{\partial \rho} - \frac{l^2}{\rho^2} - \frac{2m^* V_\rho}{\hbar^2} = -\frac{2m^* E_{\rho,\varphi}}{\hbar^2}.$$

Aqui $V_\rho = 0$, pois nossa região de interesse é o interior do fio, onde a Equação de Schrödinger está sendo resolvida. Assim, obtemos o importante resultado

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dR}{d\rho} + \left(\kappa^2 - \frac{l^2}{\rho^2} \right) R = 0, \quad (2.8)$$

onde

$$\kappa^2 = \frac{2m^* E_{\rho,\varphi}}{\hbar^2}. \quad (2.9)$$

A Eq. (2.8) é a *Equação de Bessel de ordem l* , que tem como solução as *Funções de Bessel de primeira espécie $J_l(\kappa\rho)$* . Nossa função radial é dada pela relação $R(\rho) = AJ_l(\kappa\rho)$. Devemos porém lembrar que na direção radial temos um poço de potencial infinito, de modo que a função de onda $R(\rho)$ deve ser nula nas bordas do fio. Ou seja,

$$R(r) = AJ_l(\kappa r) = 0 \Rightarrow \kappa_{n,l} = \frac{\chi_{n,l}}{r}, \quad (2.10)$$

onde $\chi_{n,l}$ é a n -ésima raiz da *Função de Bessel de ordem l* . Logo, a parte radial da função de onda é dada por

$$R(\rho) = AJ_l\left(\frac{\chi_{n,l}}{r}\rho\right). \quad (2.11)$$

Substituindo (2.10) em (2.9), obtemos

$$E_{\rho,\varphi} = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m^*(z)} \Rightarrow E_{\rho,\varphi} = \frac{\hbar^2}{2m^*(z)} \frac{\chi_{nl}^2}{r^2}. \quad (2.12)$$

Vemos assim que, devido à massa, a energia da parte radial depende de z , de modo que esta deve ser adicionada à energia total vista pelo portador na mesma direção, criando assim um potencial efetivo $V_{efet}(z) = V_z + E_{\rho,\varphi}$. Dessa forma, a solução da Eq. (2.7) será dada por

$$\frac{m^*}{Z} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m^*(z)} \frac{\partial Z}{\partial z} - \frac{2m^*}{\hbar^2} [V_z(z) + E_{\rho,\varphi}(z)] = -\frac{2m^*}{\hbar^2} E, \quad (2.13)$$

onde E é a energia total. A Eq. (2.13) pode ser resolvida por métodos numéricos.

Analisando a Eq. (2.12), vemos que, ao reduzirmos o raio do fio, a contribuição de energia $E_{\rho,\varphi}$ torna-se maior. Dessa forma, para um determinado valor de r pequeno, a contribuição da energia radial pode ser tão grande a ponto de praticamente anular o confinamento em z ou mesmo de mudar totalmente a configuração das barreiras, passando de confinamento tipo I para tipo II. A Fig. 17 mostra o comportamento de $V_{efet}(z)$, $E_{\rho,\varphi}(z)$ e $V_z(z)$ com z para um fio heteroestruturado de barreira dupla *InAs/InP* de raio $r = 28\text{Å}$. Este valor de raio faz com que a contribuição de energia $E_{\rho,\varphi}$ seja grande o suficiente para diminuir a altura das barreiras a um valor próximo de zero. Para uma interface de largura $\sigma = 0$, este efeito anula o confinamento eletrônico. Para o caso de $\sigma = 15\text{Å}$, vemos a

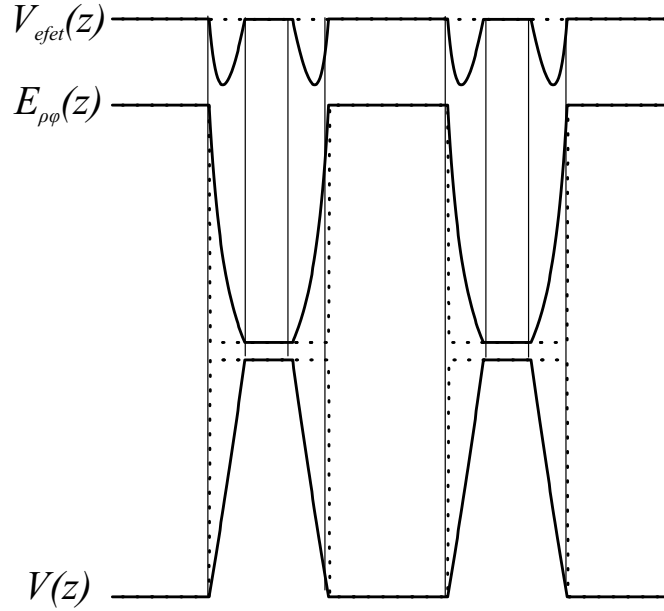


Figura 17: Gráfico mostrando como, para certos valores de r , o potencial efetivo $V_{efet}(z)$ pode anular o confinamento eletrônico (linha tracejada - interface zero) ou criar um confinamento interfacial (linha sólida - interface 15 Å). Valores calculados para um fio de InAs/InP com um raio de 28 Å.

formação de poços nas interfaces da estrutura, causando um *confinamento interfacial*. Este efeito de confinamento foi primeiramente observado por Chaves *et al* [30].

Ao variarmos os números quânticos n e l , há uma mudança na contribuição radial da energia $E_{\rho,\varphi}$, o que altera o potencial efetivo em z . Desta forma, utilizamos a Eq. (1.57) para o cálculo da corrente elétrica através do fio, pois esta não é restrita ao caso em que a transmissão $T(E_{||})$ é independente dos números quânticos transversais n e l . A corrente é dada por

$$I = \frac{e}{\pi\hbar} \sum_{n,l} \int T_{n,l}(E_{||}) [F_F(E_{||} - E_F) - F_F(E_{||} + eV - E_F)] dE_{||}, \quad (2.14)$$

onde F_F é dada pela Eq.(1.52). Assim, precisamos integrar em todas as energia permitidas para cada valor de raio do fio, pois a variação do raio muda o valor de $E_{\rho,\varphi}$ e, conseqüentemente, a forma do potencial efetivo.

2.2 Resultados e discussões

Calculamos as transmissões e curvas de potencial efetivo para um fio quântico heteroestruturado *InAs/InP* de barreira dupla. Os parâmetros do material são $m_{InP} = 0.077m_0$ e $m_{InAs} = 0.027m_0$ para as massas efetivas do elétron, $\varepsilon_1 = -1.083$ eV e $\varepsilon_2 =$

0.091 eV para os parâmetros de interpolação e o band offset da banda de condução é $Q_e = 0.68$.

A Fig. 18 mostra curvas de potencial efetivo de um fio quântico heteroestruturado $InAs/InP$ de barreira dupla. Os gráficos foram plotados juntos tendo o zero como referencial. Usamos dois valores de interfaces: $\sigma = 0$ nm (a) e $\sigma = 2$ nm (b). Os gráficos foram plotados para fios de raio $r = 2.7$ nm (linha preta), $r = 2.8$ nm (linha vermelha) e $r = 2.9$ nm (linha azul). Na Fig. 18(a) vemos como o potencial com interfaces abruptas varia com o aumento do raio. Como vimos neste Capítulo, a energia $E_{\rho,\varphi}$, dada pela Eq. (2.12), deve ser acrescida ao potencial das barreiras, formando um potencial efetivo V_{efet} . Como esta contribuição radial é inversamente proporcional a m^* e a r^2 , a redução do raio do fio provoca um aumento de $E_{\rho,\varphi}$. Como $m_{InP} > m_{InAs}$, a redução do raio provoca redução na altura das barreiras, como mostra a Fig. 18 (a). Note que, quando $r = 2.7$ nm (linha preta), a estrutura é composta de dois poços, diferente da estrutura para $r = 2.9$ nm (linha azul), na qual existem duas barreiras paralelas. Ao fazermos $r = 2.8$ nm, o confinamento do portador praticamente desaparece, como mostra a linha vermelha. A Fig. 18 (b) mostra as curvas de potencial efetivo para o mesmo modelo com interfaces $\sigma = 2$ nm. Na Figura, vemos o mesmo comportamento de aumento das barreiras com o aumento do raio. Neste caso, porém, sempre haverá confinamento. Isto ocorre por causa da geometria dos potenciais com interfaces graduais. Esta mesma geometria pode ser observada na Fig. 17. Isto mostra que, na presença de interfaces graduais, estados confinados nas regiões das interfaces são observados quando reduzimos o raio do fio. Foi observado por Chaves *et al* [30] que o mesmo confinamento também pode ser obtido na presença de um campo magnético longitudinal.

A Fig. 19 mostra curvas de transmissão em função da energia do elétron para um fio heteroestruturado $InAs/InP$ de barreira dupla. Os gráficos foram plotados tendo o zero como referencial. Foi usado o modelo com interfaces abruptas (a) e com interfaces graduais de espessura $\sigma = 2$ nm (b). Fixamos a largura das barreiras em $L = 10$ nm e a distância entre elas em $B = 5$ nm e variamos o raio em $r = 2.7, 2.8, 2.9, 3.0$ e 3.1 nm. Na Fig. 19 (a) vemos como a transmissão varia com o raio para o caso em que $\sigma = 0$ nm. Ao reduzirmos o raio, reduzimos a altura das barreiras e, conseqüentemente, reduzimos o nível do estado quase-ligado formado na região entre as barreiras. Isso provoca um deslocamento do pico de transmissão para a esquerda. O raio é reduzido a tal ponto que as barreiras se tornam poços de potencial. Neste caso, notamos uma brusca mudança no comportamento da transmissão, como mostram as curvas para $r = 2.7, 2.8$ nm. Na Fig. 19 (b) vemos um comportamento semelhante: com a redução do raio há um deslocamento

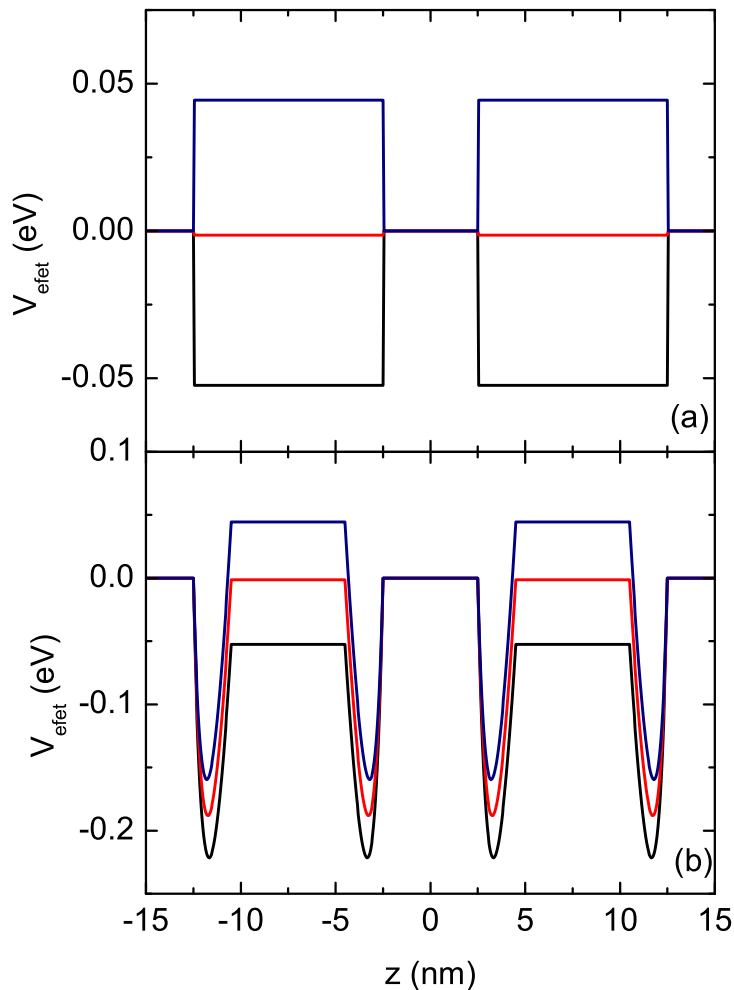


Figura 18: Potenciais efetivos de um fio quântico heteroestruturado *InAs/InP* de barreira dupla. Consideramos os casos com interfaces abruptas (a) e com interfaces graduais $\sigma = 2$ nm (b). As curvas foram plotadas para raios com valores $r = 2.7$ nm (linha preta), $r = 2.8$ nm (linha vermelha) e $r = 2.9$ nm (linha azul).

do pico para a esquerda, significando uma redução do nível ressonante devido à redução da barreira. Comparando (a) e (b), percebemos que a distância do pico até o vale é maior em (b) do que em (a). Isto ocorre porque, com interfaces graduais, existem mais descontinuidades no potencial, o que causa maior reflexão da função de onda incidente na barreira. Esta reflexão produz uma redução da probabilidade de transmissão, o que aumenta a distância do pico para o vale.

Na Fig. 20, estão plotadas as curvas do logaritmo da transmissão pela energia do elétron no fio *InAs/InP* de barreira dupla. Variamos as larguras das barreiras em $L = 5, 10, \text{ e } 15$ nm. Os gráficos foram plotados em relação ao zero. A Fig. 20(a) mostra estas

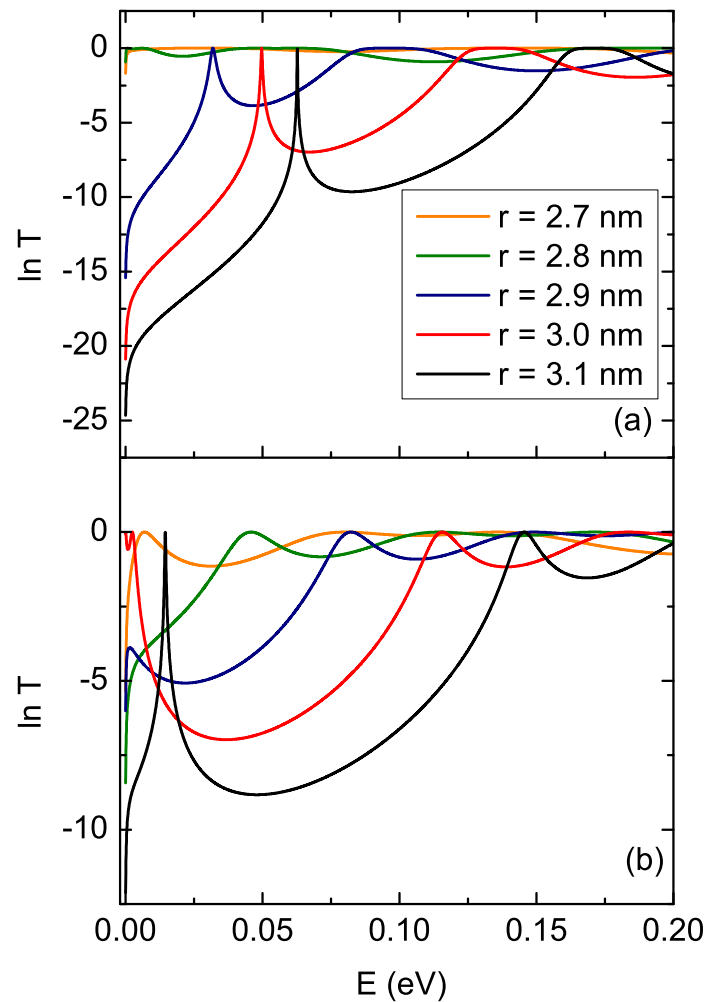


Figura 19: Curvas de transmissão (logaritmo) em função da energia do portador para um fio *InP/InAs* com heteroestrutura dupla e interfaces $\sigma = 0$ nm (acima) e $\sigma = 2$ nm (abaixo). Consideramos barreiras com largura $L = 10$ nm, a distância entre elas $B = 5$ nm e alguns valores de raio.

curvas para o modelo com interfaces abruptas. Vemos que o aumento da largura das barreiras provoca um aumento nas oscilações de transmissão e também um aumento na distância do pico para o vale, o que reduz a largura do pico. Isto resulta em uma menor probabilidade de tunelamento. Como a distância entre as barreiras é mantida constante em $B = 5$ nm, notamos que o único estado ressonante criado entre as barreiras se mantém o mesmo. Na Fig. 20(b), vemos as mesmas curvas do logaritmo da transmissão por energia do portador considerando interfaces graduais de valor $\sigma = 2$ nm. Podemos observar efeitos semelhantes aos da Fig. 20(a). Por causa dos poços de confinamento nas regiões das interfaces, há uma redução do nível ressonante, o que provoca um deslocamento do

pico de transmissão para a esquerda em relação à Fig. 20(a). A curva em preto apresenta um comportamento diferente das demais, pois neste caso não observamos a formação de um pico de transmissão, como em (a). Isto ocorre porque, com uma largura $L = 5$ nm e interfaces $\sigma = 2$ nm, as barreiras se tornam muito finas, o que causa uma grande mudança nas características de transporte dos elétrons através do sistema. Comparando (a) e (b), podemos ver que a distância do pico para o vale é maior em (b), visto que as descontinuidades formadas pelas interfaces em (b) são em maior número que em (a).

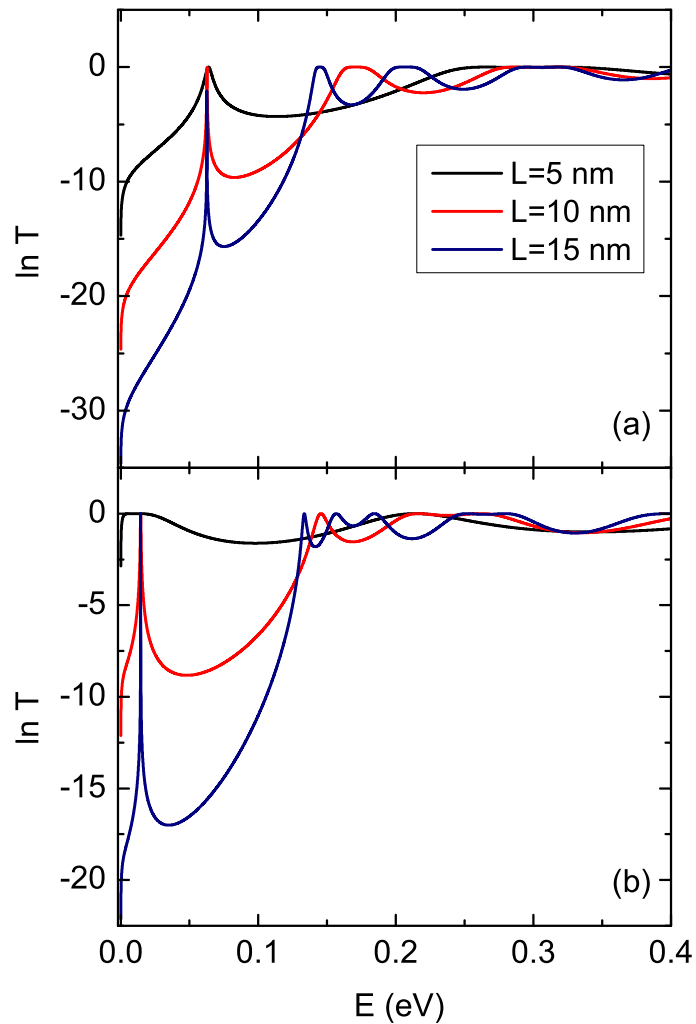


Figura 20: Curvas de transmissão (logaritmo) em função da energia do portador para um fio $InP/InAs$ com heteroestrutura dupla e interfaces $\sigma = 0$ nm (acima) e $\sigma = 2$ nm (abaixo). Consideramos um fio com raio $r = 3.1$ nm, a distância entre as barreiras $B = 5$ nm e alguns valores de largura das barreiras L .

A Fig. 21 mostra as curvas de logaritmo da transmissão por energia do elétron variando a distância B entre as barreiras em 5, 10 e 15 nm. A Figura mostra estas

curvas para o modelo com interfaces abruptas (a) e com interfaces graduais (b). Na Fig. 21(a) vemos que existe apenas um estado ressonante quando $B = 5$ e 10 nm. Fazendo $B = 15$ nm, percebemos a criação de mais um estado ressonante. Isto ocorre porque, ao aumentarmos B , o poço entre as barreiras pode ter um número maior de estados de energia. Na Fig. 21(b) vemos as mesmas curvas para $\sigma = 2$ nm. A distância do pico para o vale aumenta pelas mesmas razões mostradas nas duas últimas Figuras - devido ao aumento do número de descontinuidade no potencial. Vemos pela Fig. 21(b) que os estados ressonantes são deslocados para a esquerda em relação aos estados da Fig. 21(a), o que é explicado pelos poços formados nas regiões das interfaces, diminuindo o nível dos estados. Com $B = 10$ nm (curva vermelha), há a formação de dois estados ressonantes, um a mais do que em (a). A criação deste novo estado ocorre por causa dos potenciais de confinamento nas interfaces, fazendo com que o poço englobe mais estados de energia do que no caso com interfaces abruptas.

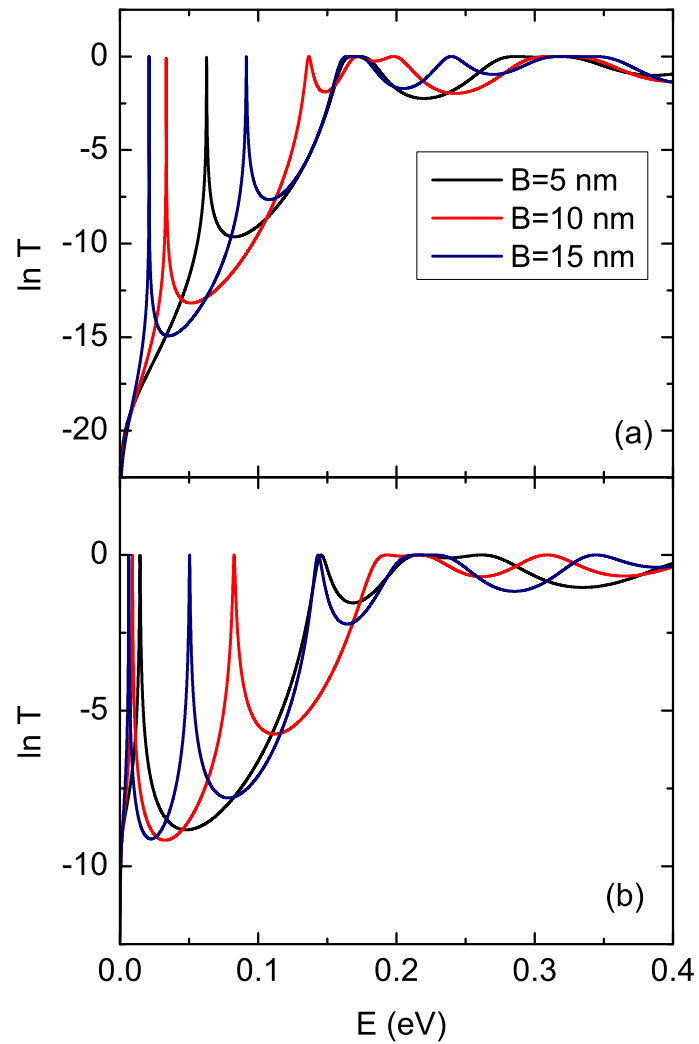


Figura 21: Curvas de transmissão (logaritmo) em função da energia do portador para um fio $InP/InAs$ com heteroestrutura dupla e interfaces $\sigma = 0$ nm (acima) e $\sigma = 2$ nm (abaixo). Consideramos um fio com raio $r = 3.1$ nm, a largura das barreiras $L = 10$ nm e alguns valores da largura do poço entre as barreiras B .

3 Efeitos de Potencial de Auto-Energia em Estruturas de Tunelamento Bidimensionais

Após o trabalho de Esaki e Tsu sobre tunelamento [27], este efeito tem se tornado importante em muitas aplicações tecnológicas, dentre elas o diodo de tunelamento ressonante. Estes têm sido fabricados em heteroestruturas tais como o $GaAs/AlGaAs$ [31, 32, 33]. À medida que os dispositivos se tornam menores, particularmente o CMOS (Complementary Metal Oxide Semiconductor), onde uma fina camada de SiO_2 é usada como porta isolante, esta fina camada de óxido se torna suscetível a perdas de corrente via tunelamento através do óxido. Por outro lado, a espessura da camada de SiO_2 usada como porta dielétrica em CMOS alcançou os limites fundamentais em torno de 1 nm [34, 35, 36]. Transistores SiO_2 com espessura de 0.8 nm também foram obtidos em laboratório. Entretanto, a necessidade de reduzir as perdas em transistores FETS (Complementary Metal Oxide Semiconductor Field Effect) tem levado à substituição da porta SiO_2 por óxidos com alta constante dielétrica (materiais high-k), tais como o HfO_2 e o ZrO_2 [35], e à substituição do *poly-Si* como o eletrodo da porta por metais [37]. As correntes de perda podem aumentar o consumo do dispositivo ou diminuir sua eficiência e previsões acuradas sobre correntes de tunelamento através de camadas extremamente finas de óxidos são de grande importância para a fabricação de futuras gerações de dispositivos. Entretanto, o problema é complicado pela necessidade de cálculos nas interfaces do $Si/Óxido$.

Na literatura, existem diversos métodos e aproximações para tunelamento através de camadas muito finas de óxidos [38, 39, 40, 41, 42, 43]. Os dois métodos mais comuns são baseados na aproximação de Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB) [44] e no formalismo da *matriz de transferência* [45, 27]. Städele e colaboradores [42] estudaram efeitos de tunelamento em finas camadas de SiO_2 , levando em consideração a influência dos defeitos na

Tabela 1: Parâmetros do Si , SiO_2 e HfO_2 usados nos cálculos numéricos.

Material	$\varepsilon/\varepsilon_0$	Eg (eV)	$m_{e,\perp}^*/m_0$
Si	11.7	1.1	0.173
SiO_2	3.9	8.9	0.3
HfO_2	25.0	5.8	0.836

superfície do material e correções de força imagem no tunelamento de massa efetiva. Neste Capítulo, calculamos os efeitos do potencial imagem em estruturas de tunelamento Si/SiO_2 e Si/HfO_2 de barreira simples e dupla. O coeficiente de transmissão foi calculado como função da energia do elétron por meio da técnica da matriz de transferência [45]. Como é bem conhecido, os efeitos de carga imagem no perfil do potencial da estrutura são grandes quando materiais com grande diferença entre suas constantes dielétricas estão presentes, tais como os já mencionados. Em nossas simulações, levamos em conta os efeitos de carga imagem, os quais usam a aproximação clássica de Stern [46]. Extendemos o problema para o caso 2D de barreira simples e dupla. Resultados mostram que os efeitos de potencial imagem modificam fortemente o perfil da barreira de potencial, mudando as energias dos estados ressonantes pra mais (Si/SiO_2) ou pra menos (Si/HfO_2).

3.1 Modelo Teórico

Nosso modelo baseia-se em uma heteroestrutura formada por uma ou duas barreiras de óxido crescidas entre regiões de silício na direção z . A Fig. 22(a) representa uma estrutura de uma única barreira com largura L_S e interfaces graduais entre a barreira e o silício de espessura σ_S , como mostra a Fig. 22. Em $|z| \leq (a - \sigma_S)$, encontra-se o material que forma a barreira de potencial. Em nossas simulações, usamos o SiO_2 e o HfO_2 , que são óxidos com constantes dielétricas bem diferentes da constante dielétrica do silício (ver tabela 1). Esta diferença produzirá um potencial imagem Σ_{im} adicional, de forma que o potencial efetivo seja $V_{Efet}(z) = \Delta E_e(z) + \Sigma_{im}(z)$, onde $\Delta E_e(z)$ é a descontinuidade entre as bandas de energia. As outras duas regiões ($|z| > (a - \sigma_S)$) são compostas por silício. As interfaces estão localizadas na regiões $(a - \sigma_S) \leq |z| \leq a$. Nestas camadas, os parâmetros massa efetiva do portador $m_i^*(z)$, potencial de confinamento $V(z)$ e a constante dielétrica $\varepsilon(z)$ são tratados como uma interpolação linear entre os valores da região da barreira e das outras duas regiões. Faremos um desenvolvimento teórico sobre o modelo de barreira simples com interfaces graduais (Fig. 22(a)) e em seguida faremos uma generalização para o modelo de barreira dupla com interfaces abruptas (Fig. 22(b)). A tabela 1 mostra

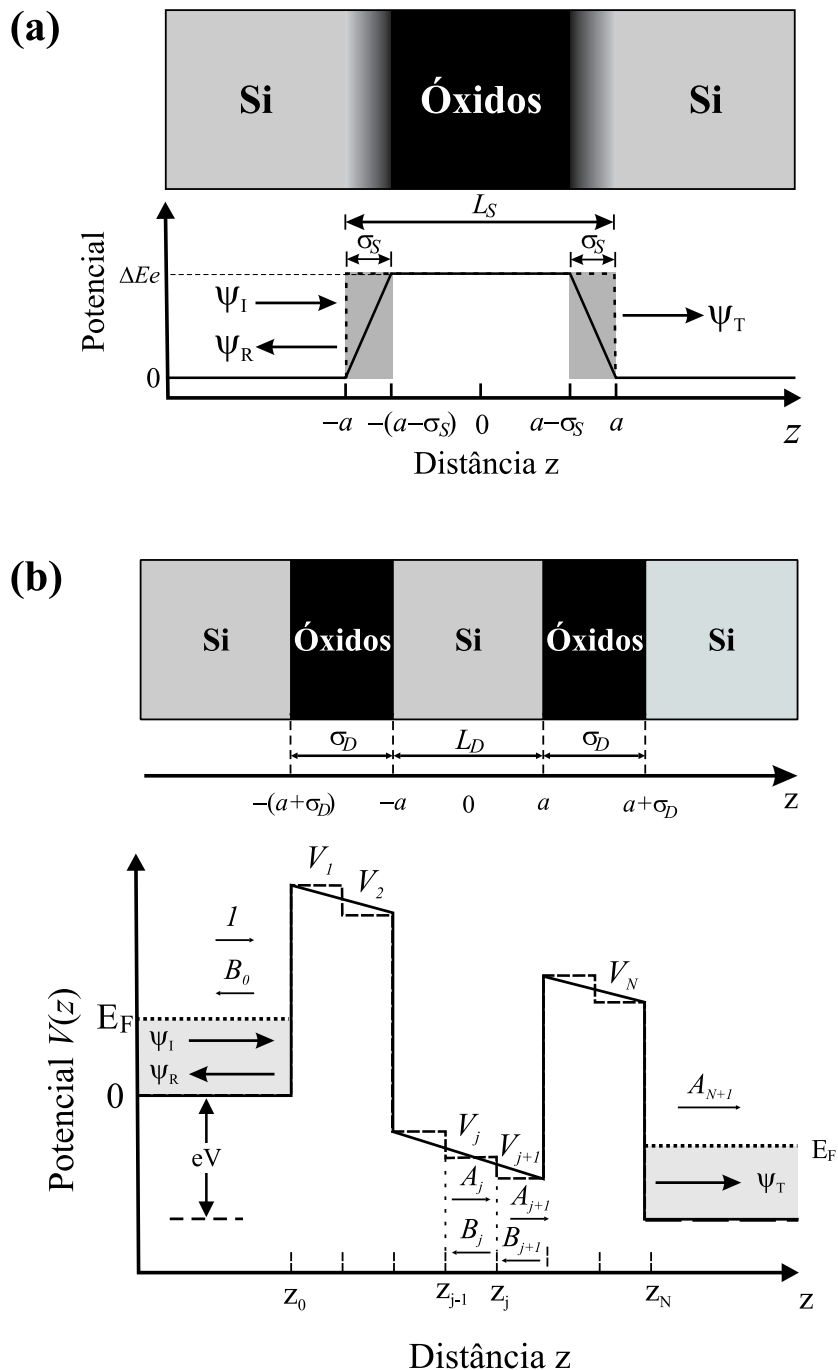


Figura 22: (a) Modelo da estrutura e diagrama de banda para heteroestrutura *Si*/óxido de barreira simples. L_S representa a largura da barreira e σ_S representa a espessura de cada interface. A linha tracejada representa o perfil do mesmo sistema com interfaces abruptas. (b) Estrutura do modelo e diagrama de banda para a heteroestrutura *Si*/óxido de barreira dupla. L_D representa a largura do poço quântico e σ_D representa a espessura do óxido. A linha sólida representa o diagrama de banda de energia e a linha tracejada representa a função aproximada do potencial usada no modelo de matriz de transferência.

valores de algumas constantes usadas no cálculo.

Existe um potencial eletrostático $\phi(\mathbf{r})$ devido à presença de uma carga pontual Q lo-

calizada em \mathbf{r}_0 . A carga localiza-se em um meio cuja permissividade ε varia espacialmente (Fig. 22). O potencial $\phi(\mathbf{r})$ é, portanto, solução da Equação de Poisson

$$\nabla \cdot [\varepsilon(z) \nabla \phi(\mathbf{r})] = -Q \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0), \quad (3.1)$$

que pode ser reescrita como

$$\varepsilon(z) \nabla^2 \phi(\mathbf{r}) + \nabla \varepsilon(z) \nabla \phi(\mathbf{r}) = -Q \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0). \quad (3.2)$$

Como a constante dielétrica depende apenas da coordenada z , podemos escolher a posição da carga pontual coincidindo com a origem do plano xy . Definimos uma coordenada radial R , de modo que o potencial $\phi(\mathbf{r})$ pode ser escrito como uma expansão de Fourier-Bessel [47]

$$\phi(R, z) = \int_0^\infty q J_0(qR) A_q(z) dq, \quad (3.3)$$

onde J_0 é a função de Bessel de ordem zero. O coeficiente $A_q(z)$ é uma função a ser determinada a partir das condições de contorno nas interfaces do poço. O potencial eletrostático $\phi(R, z)$ e o deslocamento elétrico $\varepsilon_i \partial \phi_i / \partial z$ devem ser contínuos nas posições das interfaces, $z = \pm a$ e $z = \pm(a - \sigma_S)$. Usando a Eq. (3.3), iremos calcular cada membro da Eq. (3.2). Primeiramente,

$$\nabla^2 \phi = \int_0^\infty q \nabla^2 [J_0(qR) A_q(z)] dq.$$

Aplicando o operador ∇ , obtemos

$$\nabla^2 \phi = \int_0^\infty q [J_0(qR) \nabla^2 A_q(z) + A_q(z) \nabla^2 J_0(qR) + 2 \nabla J_0(qR) \nabla A_q(z)] dq \quad (3.4)$$

e calculamos cada um destes termos utilizando o operador ∇ em coordenadas cilíndricas

$$\nabla^2 A_q(z) = A_q''(z), \quad (3.5)$$

$$\nabla^2 J_0(qR) = -q^2 J_0(qR), \quad (3.6)$$

$$\nabla J_0(qR) = -q J_1(qR) \hat{a}_R, \quad (3.7)$$

$$\nabla A_q(z) = A_q'(z) \hat{a}_z. \quad (3.8)$$

Aplicando (3.5), (3.6), (3.7) e (3.8) em (3.4), obtemos

$$\nabla^2 \phi = \int_0^\infty q J_0(qR) [A_q''(z) - q^2 A_q(z)] dq. \quad (3.9)$$

Em seguida, calculamos $\nabla\varepsilon(z)$ e $\nabla\phi(R)$:

$$\nabla\varepsilon(z) = \varepsilon'(z)\widehat{k}, \quad (3.10)$$

$$\nabla\phi(R) = \int_0^\infty q[-qJ_1(qR)A_q\widehat{u}_R + J_0A'_q(z)\widehat{k}]dq. \quad (3.11)$$

Substituindo as Eqs. (3.9), (3.10) e (3.11) na Eq. (3.2) e usando $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ em coordenadas cilíndricas, temos

$$\int_0^\infty qJ_0(qR)(A''_q(z) + \frac{\varepsilon'(z)}{\varepsilon(z)}A'_q(z) - q^2A_q(z))dq = -\frac{Q}{\varepsilon(z)}\frac{1}{R}\delta(R - R_0)\delta(\phi - \phi_0)\delta(z - z_0).$$

Se integrarmos em ϕ de 0 a 2π e multiplicarmos a equação por $RJ_0(qR)$, obtemos

$$\int_0^\infty RqJ_0(qR)J_0(q'R) \left(A''_q(z) + \frac{\varepsilon'(z)}{\varepsilon(z)}A'_q(z) - q^2A_q(z) \right) dq = -\frac{Q}{2\pi\varepsilon(z)}\delta(R - R_0)\delta(z - z_0).$$

Integramos em R de 0 a ∞ ,

$$\int_0^\infty RJ_0(qR)J_0(q'R)dR = \frac{1}{q}\delta(q - q')$$

e

$$\int_0^\infty J_0(q'R)\delta(R - R_0)dR = J_0(q'R_0).$$

Dessa forma, temos que

$$\int_0^\infty q \left(A''_q(z) + \frac{\varepsilon'(z)}{\varepsilon(z)}A'_q(z) - q^2A_q(z) \right) \frac{1}{q}\delta(q - q')dq = -\frac{Q}{2\pi\varepsilon(z)}\delta(z - z_0)J_0(q'R_0).$$

Integrando e sabendo que para $R_0 = 0$ temos que $J_0(q'0) = 1$, concluímos que o coeficiente $A_q(z)$ satisfaz à equação diferencial

$$A''_q(z) - q^2A_q(z) + \frac{\varepsilon'(z)}{\varepsilon(z)}A'_q(z) = -\frac{Q}{2\pi\varepsilon(z_0)}\delta(z - z_0). \quad (3.12)$$

As derivadas da Eq. (3.12) são com respeito a z . As condições de contorno são tais que $A_q(z) \rightarrow 0$ quando $|z| \rightarrow \infty$. Se a permissividade fosse independente de z , a solução de (3.12) seria

$$A_q^0(z) = [Q/4\pi\varepsilon(z_0)q] \exp(-q|z - z_0|), \quad (3.13)$$

e o potencial seria o coulombiano $Q/4\pi\varepsilon(z_0)|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|$, o qual diverge na posição da carga. O potencial imagem na posição z_0 da carga pontual, incluindo a variação espacial em ε , é dado por

$$\Sigma(z) = \frac{Q}{2} \int_0^\infty q[A_q(z_0) - A_q^0(z_0)]dq. \quad (3.14)$$

O fator $\frac{1}{2}$ surge porque o potencial imagem é uma auto-energia. A energia requerida para

colocar uma carga Q no ponto \mathbf{r}_0 é uma integral em Q que vai de zero a seu valor final, o qual é metade do valor obtido ao multiplicarmos a carga pelo potencial obtido na solução da equação de Poisson. A Eq. (3.14) fornece a interação de energia de todas as cargas imagens sobre a carga pontual, excluindo a interação da carga consigo mesma.

3.1.1 Barreira Simples com Interfaces Abruptas

Em barreiras com interfaces abruptas, a Eq. (3.12) se reduz a

$$A_q''(z) - q^2 A_q(z) = -\frac{Q}{2\pi\epsilon(z_0)}\delta(z - z_0) \quad (3.15)$$

e as soluções da Eq. (3.14) são dadas por

$$\Sigma^{(1)}(z_i) = \frac{\epsilon_2 \lambda Q}{2\pi(\epsilon_1 + \epsilon_2)^2} \int_0^\infty \frac{e^{q(2z-L)}}{1 + \lambda^2 e^{-2qL}} dq + \frac{\lambda Q}{16\pi\epsilon_1(z + L/2)}, \quad (3.16)$$

$$\Sigma^{(2)}(z_i) = \frac{\lambda Q}{8\pi\epsilon_2} \int_0^\infty \frac{e^{q(2z-L)} + 2\lambda e^{-2qL} + e^{-q(2z+L)}}{1 + \lambda^2 e^{-2qL}} dq, \quad (3.17)$$

$$\Sigma^{(3)}(z_i) = \frac{\epsilon_2 \lambda Q}{2\pi(\epsilon_1 + \epsilon_2)^2} \int_0^\infty \frac{e^{-q(2z+L)}}{1 + \lambda^2 e^{-2qL}} dq + \frac{\lambda Q}{16\pi\epsilon_1(z - L/2)}, \quad (3.18)$$

onde os índices (1), (2) e (3) denotam, respectivamente, a região à esquerda da barreira, a região da barreira e a região à direita da barreira. As constantes dielétricas entre os dois meios, silício e óxido, são representadas respectivamente por ϵ_1 e ϵ_2 . A constante $\lambda = (\epsilon_2 - \epsilon_1)/(\epsilon_2 + \epsilon_1)$ surge devido às condições de contorno. Q é a carga elementar e L representa a largura da barreira. O potencial imagem de auto-energia $\Sigma_i(z_i)$ diverge na posição das interfaces, ou seja, quando $z \rightarrow \pm L_S/2$. Para contornar esta divergência, usamos um esquema numérico similar ao *shift* δ introduzido fenomenologicamente por Kumagai e Takagahara[48].

3.1.2 Barreira Simples com Interfaces Não-Abruptas

Em barreiras quânticas com interfaces não-abruptas, a constante dielétrica varia linearmente nas interfaces através de uma interpolação linear entre a constante dielétrica do silício ϵ_1 e a constante dielétrica do óxido ϵ_2 . A tabela 2 mostra esta interpolação linear para barreiras quânticas baseadas em dielétricos *high-k* ($\epsilon_2 > \epsilon_1$) e para barreiras quânticas dielétricas ($\epsilon_2 < \epsilon_1$).

O modelo de carga imagem para o cálculo do potencial de auto-energia requer que a solução para a Eq. (3.12), nas regiões interfaciais, obtidas através da função de Green

Tabela 2: Interpolação linear entre a constante dielétrica do silício ε_1 e a constante dielétrica do óxido ε_2 , na região das interfaces.

	$\varepsilon_2 > \varepsilon_1$	$\varepsilon_2 < \varepsilon_1$	
	$\varepsilon_i(z) = \varepsilon_1 + (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)S(z)$	$\varepsilon_i(z) = \varepsilon_1 + (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)S(z)$	
$S(z) =$	1	0	$z < z_1$
	$(-z + a - \sigma_s)/\sigma_s$	$(z + a)/\sigma_s$	$z_1 < z < z_2$
	0	1	$ z < z_3$
	$(z - a + \sigma_s)/\sigma_s$	$-(z + a)/\sigma_s$	$z_3 < z < z_4$
	1	0	$z > z_4$

[49], seja dada por $A_q(z) = \alpha I_0(\eta_1) + \beta K_0(\eta_1)$ para a interface à esquerda da barreira, e $A_q(z) = \omega I_0(\eta_2) + \nu K_0(\eta_2)$ para a interface à direita da barreira. As grandezas $I_0(z)$ e $K_0(z)$ são funções de Bessel modificadas com argumento imaginário. As constantes α, β, ω e ν são obtidas a partir das condições de contorno. O argumento η_1 das funções de Bessel é dado por

$$\eta_1 = \begin{cases} q\left(\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}\sigma - a - z\right), & \varepsilon_2 > \varepsilon_1 \\ q\left(\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}\sigma + a + z\right), & \varepsilon_2 < \varepsilon_1 \end{cases},$$

e o argumento η_2 é dado por

$$\eta_2 = \begin{cases} q\left(\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}\sigma - a + z\right), & \varepsilon_2 > \varepsilon_1 \\ q\left(\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}\sigma + a - z\right), & \varepsilon_2 < \varepsilon_1 \end{cases}.$$

A equação de Poisson é resolvida numericamente, com a constante dielétrica determinada pela interpolação linear mostrada na tabela 2. Para grandes valores de $|z|$, em um meio onde a constante dielétrica é homogênea, $A_q(z)$ tem um valor aproximado igual a

$$A_q(z) \sim \exp(-q|z|). \quad (3.19)$$

As condições de contorno para o potencial requerem que $A_q(z_{0-}) = A_q(z_{0+})$ e

$$\left(\frac{dA_q(z)}{dz}\right)_{z_{0+}} - \left(\frac{dA_q(z)}{dz}\right)_{z_{0-}} = \frac{Q}{2\pi\varepsilon(z_0)}. \quad (3.20)$$

A integral da Eq. (3.14) é resolvida para grandes valores de $|z|$, satisfazendo à igualdade $z = z_0$.

A Fig. 23(a) mostra curvas da probabilidade de transmissão vs. a energia do elétron para uma estrutura Si/SiO_2 de barreira simples. As curvas foram plotadas para os casos em que $\Sigma_{im} \neq 0$; $\sigma_S = 1$ nm (linha sólida), $\Sigma_{im} = 0$; $\sigma_S = 1$ nm (linha tracejada) e

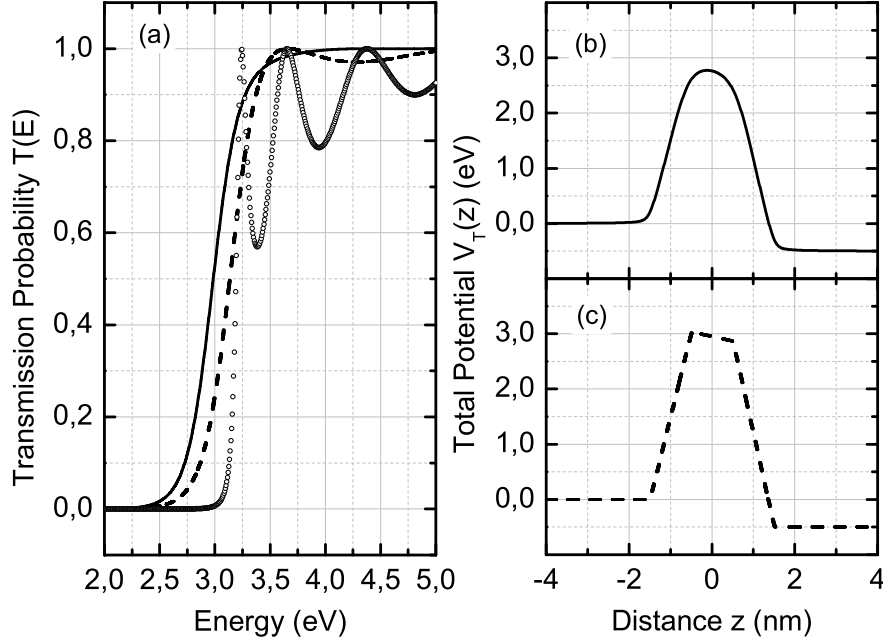


Figura 23: (a): Curvas de transmissão x energia do elétron para uma heteroestrutura Si/SiO_2 de barreira simples com $L_S = 3$ nm. As curvas foram plotadas para os casos onde $\sigma_S = 1$ nm com efeito (linha sólida) e sem efeito de auto-energia (linha tracejada). O sistema de interfaces abruptas com efeito imagem também foi considerado (curva de círculos). (b): potencial total com efeitos de carga imagem; (c): potencial sem efeito de carga imagem.

$\Sigma_{im} \neq 0$; $\sigma_S = 0$ nm (curva de círculos). A distância do pico para o vale da transmissão é maior com interfaces abruptas do que no caso com interfaces graduais. Isto ocorre porque há uma maior reflexão da função de onda na barreira quando $\sigma_S = 0$ nm, de maneira que temos uma probabilidade de tunelamento menor do que no caso com interfaces graduais. Adicionando efeitos de auto-energia, vemos uma redução na distância do pico para o vale da transmissão, porque o efeito deixa o potencial mais suave, reduzindo as reflexões da função de onda na barreira. A mudança mais significativa para o cálculo das transmissões ocorre quando variamos as interfaces - de gradual para abrupta. Isso mostra que o efeito de carga imagem não tem uma influência muito grande nas propriedades de transporte. A Fig. 23(b) mostra o diagrama de banda para o caso em que Σ_{im} e $\sigma_S \neq 0$. Elétrons na estrutura sentem um potencial atrativo enquanto movem-se através do silício e sentem um potencial repulsivo ao moverem-se através do SiO_2 , pois $\epsilon_{Si} > \epsilon_{SiO_2}$ [50]. O caráter atrativo do potencial de carga imagem no Si (e repulsivo no SiO_2) deixa o potencial total $V_T(z)$ mais suave próximo às interfaces. A Fig. 23(c) mostra o diagrama de banda para

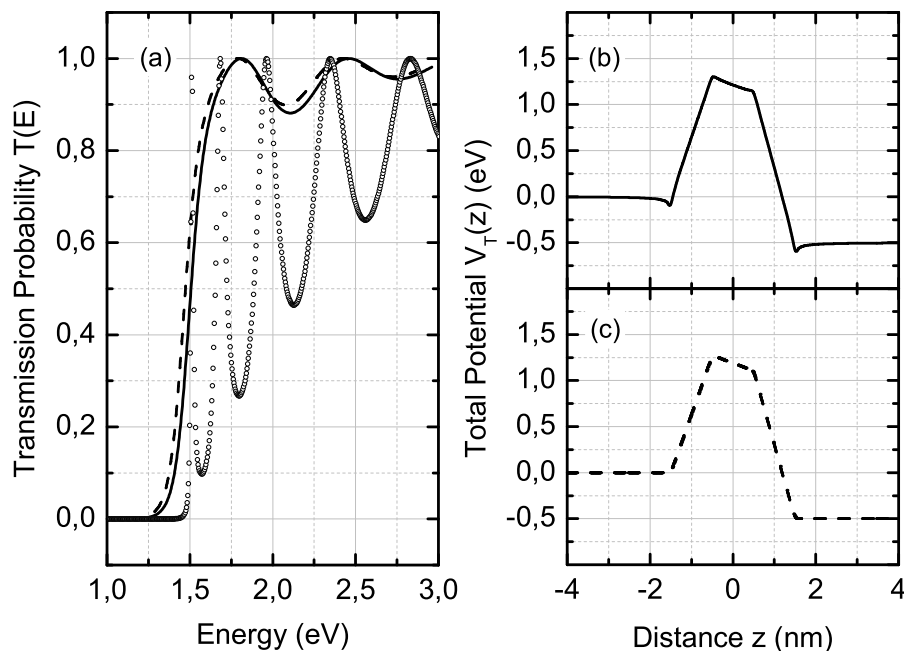


Figura 24: (a): Curvas de transmissão x energia do elétron para uma heteroestrutura Si/HfO_2 de barreira simples com $L_S = 3$ nm. As curvas foram plotadas para os casos onde $\sigma_S = 1$ nm com efeito (linha sólida) e sem efeito de auto-energia (linha tracejada). O sistema de interfaces abruptas com efeito imagem também foi considerado (curva de círculos). (b): potencial total com efeitos de carga imagem; (c): potencial sem efeito de carga imagem.

o caso onde $\Sigma_{im} = 0$.

A Fig. 24(a) mostra curvas da probabilidade de transmissão vs. a energia do elétron para uma estrutura Si/HfO_2 de barreira simples. As curvas foram plotadas para os casos em que $\Sigma_{im} \neq 0$; $\sigma_S = 1$ nm (linha sólida), $\Sigma_{im} = 0$; $\sigma_S = 1$ nm (linha tracejada) e $\Sigma_{im} \neq 0$; $\sigma_S = 0$ nm (curva de círculos). Interfaces abruptas aumentam a distância do pico para o vale da transmissão, como no caso da Fig. 23, mas com efeitos de carga imagem vemos um aumento na distância, diferente da estrutura Si/SiO_2 . Neste caso, a barreira de HfO_2 aumenta as reflexões da função de onda, de maneira que temos uma probabilidade de tunelamento menor do que sem o efeito. A mudança mais significativa para o cálculo das transmissões, como no caso da Fig. 23, ocorre quando variamos as interfaces - de gradual para abrupta. Isso mostra mais uma vez que o efeito de carga imagem não tem uma influência muito grande nas propriedades de transporte. A Fig. 24(b) mostra o diagrama de banda para o caso com $\Sigma_{im}, \sigma_S \neq 0$. Elétrons movendo-se na estrutura sentem um potencial repulsivo no Si e um potencial atrativo no HfO_2 , pois

$\varepsilon_{Si} < \varepsilon_{HfO_2}$. O caráter repulsivo do potencial imagem no Si (atrativo no HfO_2) faz com que apareçam cúspides próximas às interfaces do potencial total $V_T(z)$. A Fig. 23(c) mostra o diagrama de banda para o caso em que $\Sigma_{im} = 0$.

3.1.3 Resultados e Discussões - Barreira Simples

Usando as Eqs. (1.62), calculamos a corrente em função da diferença de potencial aplicada às estruturas Si/SiO_2 e Si/HfO_2 de barreira simples a temperatura zero. Consideramos barreiras com largura $L_S = 5$ nm e uma energia de Fermi $E_F = 10$ meV. As transmissões foram calculadas para cada potencial efetivo $V_{efet} = \Delta E + \Sigma_{im}$ pelo método da matriz de transferência.

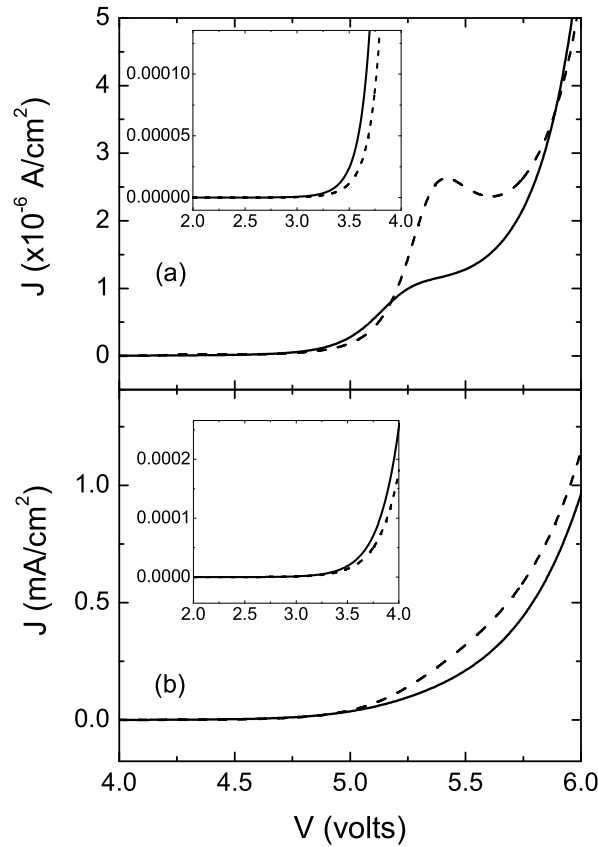


Figura 25: Curvas de $J \times V$ para uma estrutura Si/SiO_2 de barreira simples, com $\sigma_S = 0$ nm (a) e $\sigma_S = 1$ nm (b). As curvas foram plotadas para os casos com efeito de auto-energia (linha sólida) e sem efeito de auto-energia (linha tracejada).

A Fig. 25 mostra curvas de $J \times V$ para a estrutura Si/SiO_2 de barreira simples. Os gráficos mostram duas curvas: a linha sólida para o sistema onde os efeitos de auto-energia são considerados e a linha tracejada para o caso sem efeito. A Fig. 25(a) representa tais

curvas de $J \times V$ com interfaces abruptas. Comparando as duas curvas, concluímos que a corrente é maior sem os efeitos de carga imagem. Isto se deve ao fato de que o potencial efetivo é repulsivo nas interfaces da barreira, pois $\varepsilon_{Si} > \varepsilon_{SiO_2}$, o que causa a redução da corrente elétrica através do dispositivo. A Fig. 25(b) representa duas curvas de $J \times V$ para o mesmo sistema de (a), mas com interfaces $\sigma_S = 1$ nm. Sem efeitos de auto-energia a corrente é maior do que com efeitos, assim como no caso da Fig. 25(a). Também podemos notar uma diminuição nas oscilações de corrente em comparação com as curvas de (a). Esta redução ocorre por causa da adição de interfaces graduais à barreira. Isto deixa o potencial mais suave do que antes, causando menos reflexão da função de onda incidente na barreira. Assim, vemos uma redução das flutuações de transmissão e corrente.

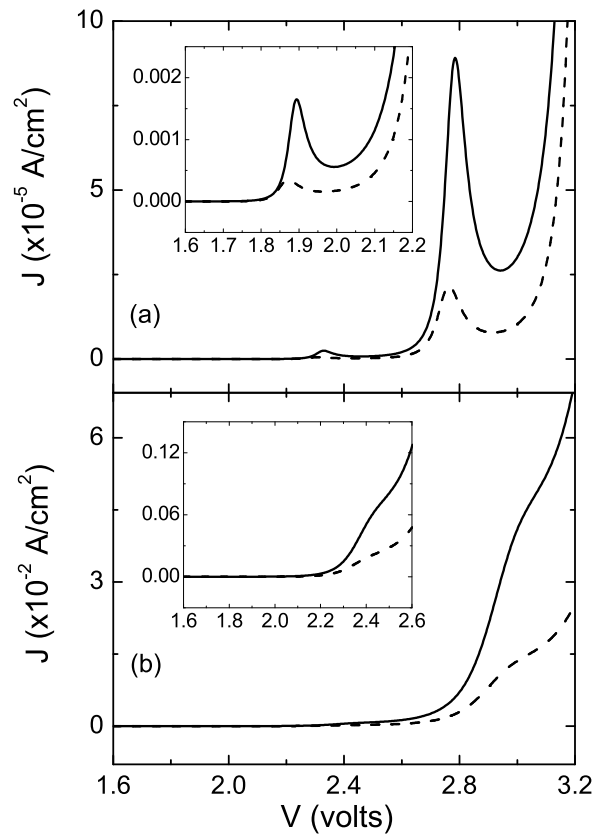


Figura 26: Curvas de $J \times V$ para a estrutura Si/HfO_2 de barreira simples, com $\sigma_S = 0$ nm (a) e $\sigma_S = 1$ nm (b). As curvas foram plotadas para os casos com efeito de auto-energia (linha sólida) e sem efeitos de auto-energia (linha tracejada).

A Fig. 26 mostra dois gráficos para $J \times V$ com $\Sigma_{im} = 0$ (linha tracejada) e $\Sigma_{im} \neq 0$ (linha sólida). Eles foram calculados para uma estrutura Si/HfO_2 com interfaces $\sigma_S = 0$ nm e $\sigma_S = 1$ nm. Os valores foram obtidos para barreiras com largura $L_S = 5$ nm a temperatura zero. Correntes com efeito de auto-energia são maiores do que correntes

para o caso sem efeito. Isto ocorre porque $\varepsilon_{Si} < \varepsilon_{HfO_2}$, de maneira que o potencial é atrativo nas interfaces, causando um aumento nas correntes através da barreira. A diferença entre correntes com e sem interfaces graduais é que, como no caso da Fig. 25, o potencial efetivo se torna mais suave com $\sigma_S > 0$, aumentando os valores de corrente e reduzindo suas oscilações.

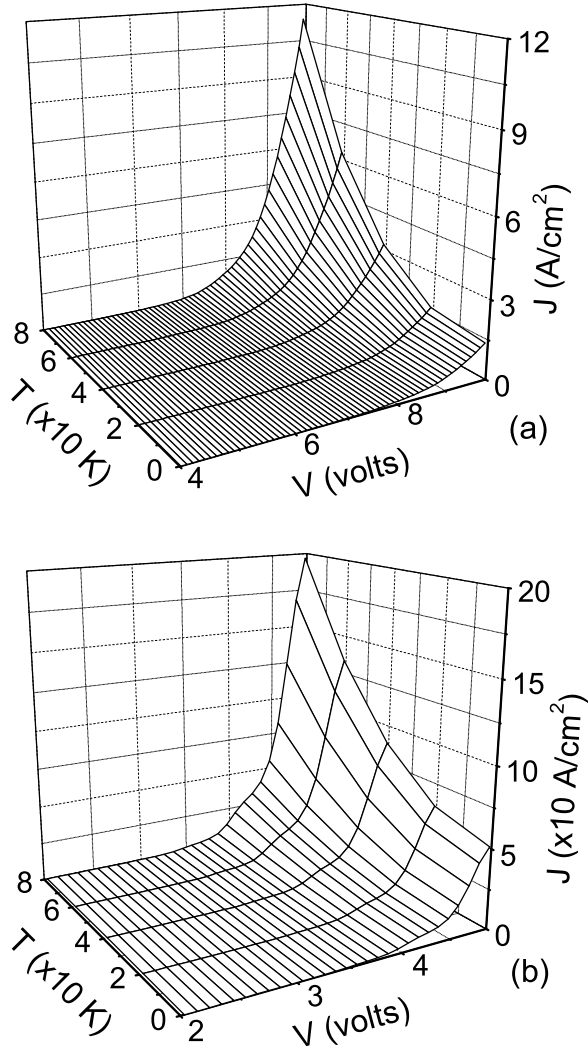


Figura 27: Curvas de $J \times V \times T$ para estruturas Si/SiO_2 (a) e Si/HfO_2 (b) de barreira simples com $L_S = 5$ nm, $E_F = 10$ meV e interfaces $\sigma_S = 1$ nm.

Na Fig. 27, usamos a Eq. (1.61) para calcular as curvas de $J \times V \times T$ para Si/SiO_2 (a) e Si/HfO_2 (b). Fizemos isso para barreiras com largura $L_S = 5$ nm e interfaces $\sigma_S = 1$ nm. Ao aumentarmos a temperatura, vemos um aumento no valor da corrente, como é bem conhecido na literatura. Também podemos notar que as correntes da Fig. 27(a) têm menos oscilações do que as da Fig. 27(b). Isto ocorre porque o perfil de potencial da estrutura Si/SiO_2 se torna mais suave que o do Si/HfO_2 , causando menos reflexão na

barreira e uma menor oscilação de corrente. As correntes da Fig. 27(b) são maiores do que em (a), porque o perfil de potencial do Si/HfO_2 é atrativo nas regiões das interfaces, enquanto que o do Si/SiO_2 é repulsivo nas mesmas regiões. Outra característica que podemos observar em (b) é que a corrente começa a crescer com valores de voltagem menores do que em (a), porque a altura da barreira de SiO_2 é da ordem de duas vezes a altura do HfO_2 .

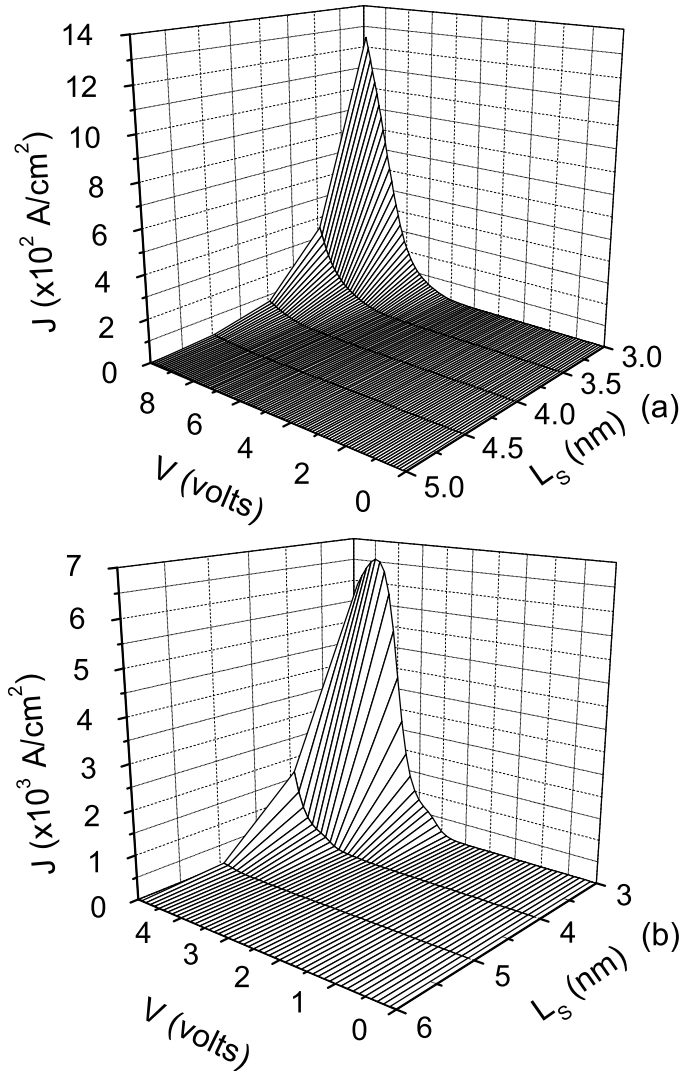


Figura 28: Curvas de $J \times V \times L_S$ para estruturas Si/SiO_2 (a) e Si/HfO_2 (b) de barreira simples com $E_F = 10$ meV, $\sigma_S = 1$ nm and $T = 50$ K.

A Fig. 28 mostra curvas de $J \times V \times L_S$ para Si/SiO_2 (a) e Si/HfO_2 (b) a $T = 50$ K. Fixando valores de tensão e aumentando a largura da barreira L_S , observamos que a corrente vai a zero primeiro em (a) do que em (b). Isto ocorre porque a barreira de SiO_2 é mais alta que a de HfO_2 , de forma que as correntes em (b) são maiores do que em (a), como no caso da Fig. 27. Na Fig. 28(b), a corrente começa a aumentar com

voltagens menores do que em (a), por causa da diferença entre as alturas das barreiras, como explicamos na Fig. 27.

3.1.4 Barreira Dupla

Barreiras duplas são formadas por uma camada de Si , gerando um poço quântico com largura L_D , situado na região $|z| \leq a$ entre as duas camadas de óxidos (SiO_2 ou HfO_2), de espessura σ_D , situados nas regiões $(a + \sigma_D) \geq |z| \geq a$. A estrutura de barreira dupla aparece quando consideramos camadas de Si nas regiões $|z| \geq (a + \sigma_D)$, como mostrado na Fig. 22 (b). Neste modelo, consideramos apenas interfaces abruptas, devido à dificuldade em calcular efeitos de auto-energia para estruturas com quatro interfaces. Entretanto, investigaremos os efeitos causados pelo acréscimo de interfaces graduais no modelo de barreira simples.

A região $|z| \geq (a + \sigma_D)$ do silício possui energia de Fermi E_F . Entre as barreiras, há uma formação de pelo menos um estado quase ligado. Os parâmetros do dispositivo são escolhidos de tal maneira que, a voltagem zero, o menor estado tem energia maior que E_F . Quando aplicamos uma tensão através do dispositivo, distorcemos o potencial, como mostra a Fig. 22 (b). Ao aumentarmos a voltagem, o nível de Fermi da camada externa de silício se aproxima do primeiro nível quase ligado. Quando eles são iguais, observamos um pico de corrente através do dispositivo, de maneira que os elétrons podem tunelar livremente através das barreiras. Este efeito é chamado de *tunelamento ressonante*. Neste Capítulo, observamos os efeitos de tunelamento ressonante em estruturas Si/SiO_2 e Si/HfO_2 de barreira dupla. Usamos o método de matriz de transferência explicado na seção 1.6 para efetuar os cálculos de transmissão. Generalizamos os resultados obtidos com a estrutura de barreira simples semelhantes às Eqs. (3.16), (3.17) e (3.18) para o cálculo do potencial de auto-energia na estrutura de barreira dupla com interface abrupta.

3.1.5 Resultados e Discussões - Barreira Dupla

Usando as Eqs. (1.62), calculamos a corrente em função da diferença de potencial aplicada às estruturas Si/SiO_2 e Si/HfO_2 de barreira dupla a temperatura zero. Consideramos barreiras com largura $L_S = 5$ nm e uma energia de Fermi $E_F = 10$ meV. As transmissões foram calculadas para cada potencial efetivo $V_{efet} = \Delta E + \Sigma_{im}$ pelo método da matriz de transferência.

A Fig. 29(a) mostra curvas de $\ln J \times V$ para uma estrutura Si/SiO_2 de barreira dupla, com largura das barreiras $\sigma_D = 3$ nm e distância entre elas de $L_D = 3$ nm a temperatura zero. A energia de Fermi é $E_F = 10$ meV. Existe a formação de três estados quase ligados entre as barreiras do dispositivo, de forma que observamos a formação de três picos finos de corrente abaixo da voltagem correspondente à altura da barreira. As correntes foram calculadas para os casos em que $\Sigma_{im} = 0$ (linha tracejada). Com efeitos de auto-energia, o nível dos estados aumenta em comparação com os níveis no caso em que $\Sigma_{im} = 0$, por causa do potencial repulsivo nas interfaces. Portanto, vemos um deslocamento dos picos de corrente para a direita em relação à curva tracejada. As Figs. 29 (b) e 29 (c) mostram o diagrama de banda para o sistema com $\Sigma_{im} \neq 0$ e $\Sigma_{im} = 0$, respectivamente. À medida que a temperatura aumenta, vemos apenas um alargamento dos picos, significando uma maior faixa de energia possível para o tunelamento da estrutura.

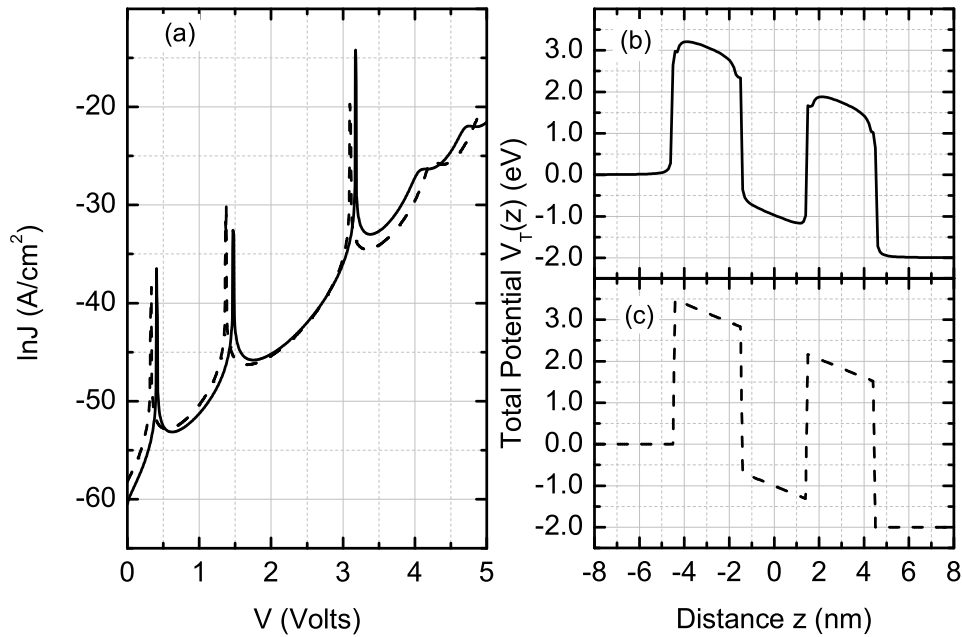


Figura 29: Curvas de $\ln J \times V$ (a) para estruturas Si/SiO_2 de barreira dupla com efeitos de auto-energia (linha sólida) e sem efeitos de auto-energia (linha tracejada). Os gráficos (b) e (c) mostram, respectivamente, o diagrama de banda da estrutura com e sem efeitos de carga imagem.

A Fig. 30(a) mostra curvas de $\ln J \times V$ para uma estrutura Si/HfO_2 de barreira dupla, com largura das barreiras $\sigma_D = 3$ nm e distância entre elas de $L_D = 3$ nm a temperatura zero. A energia de Fermi é $E_F = 10$ meV. Existe a formação de dois estados quase ligados entre as barreiras do dispositivo, de forma que observamos a formação de dois picos finos

de corrente abaixo da voltagem correspondente à altura da barreira. As correntes foram calculadas para os casos em que $\Sigma_{im} \neq 0$ (linha sólida) e $\Sigma_{im} = 0$ (linha tracejada). Com efeitos de auto-energia, o nível dos estados diminui em comparação com os níveis no caso em que $\Sigma_{im} = 0$, devido ao potencial atrativo nas interfaces. Portanto, vemos um deslocamento dos picos de corrente para a esquerda em relação à curva tracejada. As Figs. 30 (b) e 30 (c) mostram o diagrama de banda para o sistema com $\Sigma_{im} \neq 0$ e $\Sigma_{im} = 0$, respectivamente. À medida que a temperatura aumenta, apenas vemos um alargamento dos picos de corrente, significando uma maior faixa de energias possíveis para o tunelamento da estrutura.

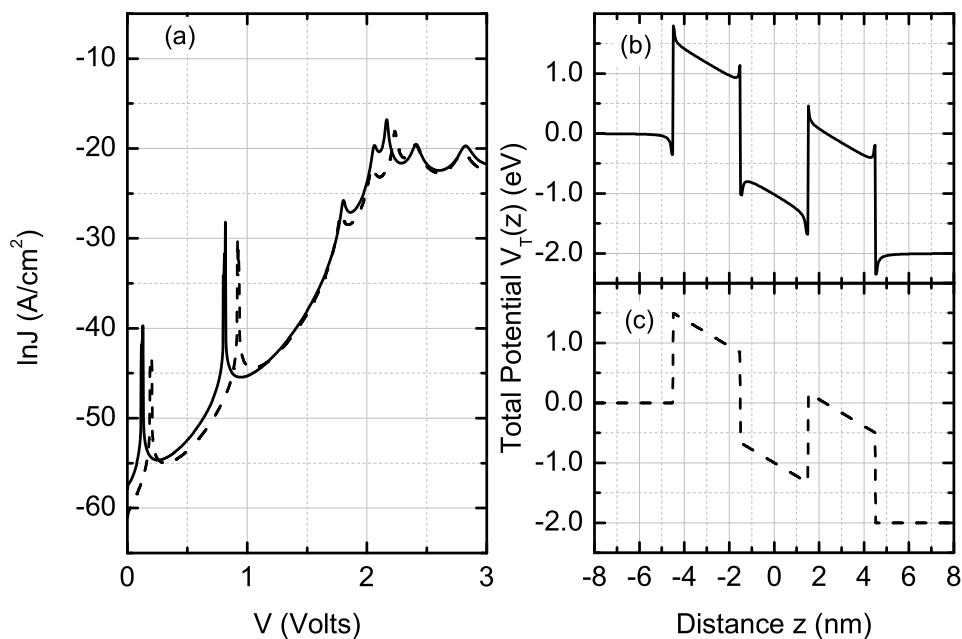


Figura 30: Curvas de $\ln J \times V$ (a) para estruturas Si/HfO_2 de barreira dupla com efeitos de auto-energia (linha sólida) e sem efeitos de auto-energia (linha tracejada). Os gráficos (b) e (c) mostram, respectivamente, o diagrama de banda da estrutura com e sem efeitos de carga imagem.

4 Conclusões e Perspectivas

Neste trabalho, realizamos um estudo das propriedades de transporte de heteroestruturas de baixa dimensionalidade, como os fios quânticos e estruturas bidimensionais de barreiras simples e dupla. No fio, resolvemos a equação de Schrödinger dentro da aproximação da massa efetiva, encontrando a contribuição de energia radial. Calculamos as transmissões no potencial efetivo de um fio heteroestruturado *InAs/InP* como função da energia, variando os valores de raio, largura das barreiras e distância entre elas.

Dentre os principais resultados de fio quântico, podemos destacar que

- O confinamento radial produz uma energia adicional $E_{n,l}$, proporcional à n -ésima raiz de Bessel de ordem l , de modo que o potencial efetivo é dado por $V_{efet} = V(z) + E_{n,l}$.
- As interfaces graduais mudam significativamente o comportamento do nosso sistema, podendo, para raios suficientemente pequenos, criar confinamentos nas regiões das interfaces.
- Existe um certo raio crítico abaixo do qual as barreiras se transformam em poços de potencial, o que muda completamente o comportamento das propriedades de transporte do fio.

Também estudamos sistemas bidimensionais de barreira simples e dupla com efeitos de auto-energia. Resolvemos a equação de Poisson com $\varepsilon(z)$ variando com a posição devido à heteroestrutura. Expandimos o potencial como uma expansão de Fourier-Bessel, substituindo na equação de Poisson e chegando a uma equação diferencial que nos dá a solução do potencial. Calculamos o potencial de auto-energia devido à diferença entre as constantes dielétricas dos materiais. Usamos camadas de *SiO₂* ou *HfO₂* entre camadas de *Si*. Em seguida, plotamos gráficos de corrente elétrica para barreiras simples e duplas.

Dentre os principais resultados de barreiras bidimensionais com efeito de auto-energia, podemos destacar:

- A diferença entre as constantes dielétricas dos materiais que formam a heteroestrutura resulta em um potencial com barreira atrativa para o Si/HfO_2 e repulsiva para o Si/SiO_2 , causando aumento ou redução da corrente elétrica, respectivamente.
- As interfaces graduais diminuem as oscilações de corrente elétrica no sistema, pois com elas o potencial se torna mais suave e há menos reflexão da função de onda incidente na barreira.
- Em barreira dupla, há um(a) aumento (redução) dos níveis de energia ressonantes em relação ao potencial sem o efeito imagem para a heteroestrutura Si/SiO_2 (Si/HfO_2), pois as barreiras são repulsivas (atrativas).

No decorrer deste trabalho notamos algumas áreas ainda a ser trabalhadas.

- Calcular a corrente elétrica através do fio quântico heteroestruturado de barreira dupla.
- Adicionar um campo magnético na direção de transporte do fio e estudar os efeitos que isto causa na corrente.
- Cálculo da densidade de estados para super-redes formadas em fios quânticos heteroestruturados.

Referências

- [1] G. Y. Xu, A. Z. Li, Y. Y. Li, L. Wei, Y. G. Zhang, C. Lin e H. Li, *Appl. Phys. Lett.* **89** 161102 (2006).
- [2] F. Suarez, D. Fuster, L. Gonzalez, Y. Gonzalez, J. M. Garcia e M. L. Dotor *Appl. Phys. Lett.* **89** 091123 (2006).
- [3] L. H. Li, M. Rossetti, G. Patriarche, A. Fiore, *J. Crys. Growth* **301**, 959 (2007).
Appl. Surf. Sci. **234**, 38 (2004).
- [4] L. Esaki e R. Tsu, *IBM J. Res. Dev.* **14**, 61 (1970).
- [5] Sergio M. Rezende, *Materiais e Dispositivos Eletrônicos*, 2a edição (2004).
- [6] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Revised Edition (1994).
- [7] Jasprit Singh, *Physics of Semiconductors and their Heterostructures*, McGraw Hill (1993).
- [8] W. I. Wang e F. Stern, *J. Vac. Sci. Technol. B* **3**, 1280 (1985).
- [9] E. H. Li, *Physica E* **5**, 215 (2000).
- [10] L. Yang, J. R. Watling, R. C. W. Wilkins, M. Boriçi, J. R. Barker, A. Asenov e S. Roy, *Semicond. Sci. Tech.* **19**, 1174 (2004).
- [11] V. Y. Aleshkin e N. A. Bekin, *J. Phys.: Condens. Matter* **9**, 4841 (1997).
- [12] Yi Cui, Qingqiao Wei, Hongkun Park e Charles M. Lieber, *Science*, **293**, 1289 (2001).
- [13] L. J. Lauhon, M. S. Gudiksen, D. Wang, and C. M. Lieber, *Nature* **420**, 57 (2002).
- [14] H.-J. Choi, J. C. Johnson, R. He, S.-K. Lee, F. Kim, P. Pauzauskie, J. Goldberger, R. J. Saykally, and P. Yang, *J. Phys. Chem. B* **107**, 8721 (2003).
- [15] J. Goldberger, R. He, Y. Zhang, S. Lee, H. Yan, H.-J. Choi and P. Yang, *Nature* **422**, 599 (2003).
- [16] M. T. Björk, B. J. Ohlsson, T. Sass, A. I. Persson, C. Thelander, M. H. Magnusson, K. Deppert, L. R. Wallenberg and L. Samuelson, *Nano Lett.* **2**, 87 (2002)
- [17] M. S. Gudiksen, L. J. Lauhon, J. Wang, D. C. Smith and C. M. Lieber, *Nature* **415**, 617 (2002).
- [18] C. L. N. Oliveira, A. Chaves, E. W. S. Caetano, M. H. Degani and J. A. K. Freire, *Microelectr. J.* **36** 1049 (2005)

- [19] D. Li, Y. Wu, R. Fan, P. Yang and A. Majumdar, *Appl. Phys. Lett.* **83**, 3186 (2003).
- [20] Y.-M. Lin and M. S. Dresselhaus, *Phys. Rev. B* **68** 075304 (2003).
- [21] Y. Wu, R. Fan and P. Yang, *Nano Lett.* **2**, 83 (2002).
- [22] A. Fuhrer, L. E. Fröberg, J. N. Pedersen, M. W. Larsson, A. Wacker, M.-E. Pistol and L. Samuelson, *Nano Lett.* **7**, 243 (2007).
- [23] G. D. Wilk, R. M. Wallace e J. M. Anthony, *J. Appl. Phys.* **89** 5243 (2001).
- [24] R. Chau, S. Datta, M. Doczy, Brian Doyle, Jack Kavalieros e Matthew Metz, *Elect. Dev. Lett.* **25**, 6 (2004).
- [25] T. A. S. Pereira, J. S. de Sousa, G. A. Farias, J. A. K. Freire, M. H. Degani, e V. N. Freire, *Appl. Phys. Lett.* **87**, 171904 (2005).
- [26] T. A. S. Pereira, M. G. Bezerra, J. A. K. Freire, V. N. Freire, e G. A. Farias, *Brazilian Journal of Physics* **36**, 347 (2006).
- [27] R. Tsu e L. Esaki, *Appl. Phys. Lett.* **22** 562 (1973).
- [28] E. C. Ferreira, J. A. P. da Costa and J. A. K. Freire, *Physica E* **17**, 222 (2003).
- [29] C. L. N. Oliveira, J. A. K. Freire and G. A. Farias, *Appl. Surf. Sci.* **234**, 38 (2004).
- [30] A. Chaves, J. A. K. Freire, e G. A. Farias, *Phys. Rev. B* **78**, 155306 (2008).
- [31] Wangping Wang, Ying Hou, Dayuan Xiong, Ning Li, Wei Lu, Wenxing Wang, Hong Chen, Junming Zhou, E. Wu and Heping Zeng, *Appl. Phys. Lett.* **92**, 023508 (2008).
- [32] H. Y. Long, M. Long, Y. Hua, W. L. Chen and Z. Y. Ping, *Chinese Phys. Lett.* **23**, 697 (2006).
- [33] M. O. Vassell, Johnson Lee and H. F. Lockwood, *J. Appl. Phys.* **54**, 5206 (1983).
- [34] D. A. Muller, T. Sorch, S. Moccio, F. H. Baumann, K. Evans-Lutterodt and G. Timp, *Nature* **399**, 758 (1999).
- [35] G. D. Wilk, R. M. Wallace and J. M. Anthony, *J. Appl. Phys.* **89**, 5243 (2001).
- [36] A.G. Nassiopoulou, A. Olzierski, E. Tsoi, A. Salonidou, M. Kokonou, T. Stoica, L. Vescan, *International Journal of Nanotechnology* **6**, 1 (2009).
- [37] S. Bhowmick and K. Alam, *J. Appl. Phys.* **104**, 124308 (2008).
- [38] Khairurrijal, W. Mizubayashi, S. Miyazaki and M. Hirose, *J. Appl. Phys.* **87**, 3000 (2000).
- [39] Y. T. Hou, M. F. Li, Y. Jin and W. H. Lai, *J. Appl. Phys.* **91**, 258 (2002).
- [40] R. Clerc, A. Spinelli, G. Ghibaudo and G. Pananakakis, *J. Appl. Phys.* **91**, 1400 (2002).
- [41] F. Berz, *Semicond. Sci. Technol.* **8**, 243 (1993).

- [42] M. Stadele, F. Sacconi, A. Di Carlo and P. Lugli, J. Appl. Phys. **93**, 2681 (2003).
- [43] H. Guo, K. Diff, G. Neofotistos and J. D. Gunton, Appl. Phys. Lett. **53**, 131 (1988).
- [44] C. B. Duke, *Tunneling in Solids*(Solid State Physics Vol. 10, Academic, New York, USA, 1969).
- [45] Y. Ando and T. Itoh, J. Appl. Phys. **61**, 1497 (1987).
- [46] F. Stern, Phys. Rev. B **17**, 5009 (1978).
- [47] Frank Stern, Phys. Rev. B **17**, 12 (1978).
- [48] M. Kumagai e T. Takagahara, Phys. Rev. B **40**, 12359 (1989).
- [49] T.A.S. Pereira, Propriedades Eletrônicas de Poços Quânticos Baseados em Si, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Ceará, 2002.
- [50] T. A. S. Pereira, J. A. Freire, V. N. Freire and G. A. Farias, Appl. Phys. Lett. **88**, 42114 (2006).
- [51] V. V. Mitim, V. A. Kochelap, M. A. Stroschio, *Quantum Heterostructures: Microelectronics and Optoelectronics* (Cambridge University Press, Cambridge, UK)(1999).