

Alexandre Branco Guerra

Análise Numérica do Transistor de Toco Quântico

Recife

2003

Universidade Federal de Pernambuco
Programa de Pós-graduação em Engenharia Elétrica

Análise Numérica do Transistor de Toco Quântico

Dissertação

submetida à Universidade Federal de Pernambuco
como parte dos requisitos para obtenção do grau de

Mestre em Engenharia Elétrica

Alexandre Branco Guerra

Recife, Maio de 2003.

G934a **Guerra, Alexandre Branco**

Análise numérica do transistor de toco quântico /
Alexandre Branco Guerra - Recife: O Autor, 2003.
xiv, 92 f., figs., tabs.

Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de
Pernambuco. CTG. Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Elétrica

Inclui bibliografia.

1. Engenharia Elétrica. 2. Nanoeletrônica. 3. Transporte
eletrônico. 4. Mecânica quântica. 5. Transistor de toco
quântico – análise numérica. I. Título.

621.3 CDD (21. ed.)

BCTG/2005-50



Universidade Federal de Pernambuco
Pós-Graduação em Engenharia Elétrica

PARECER DA COMISSÃO EXAMINADORA DE DEFESA DE
DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE

ALEXANDRE BRANCO GUERRA

TÍTULO
“ANÁLISE NUMÉRICA DO TRANSISTOR ESTUBE
QUÂNTICO”

A comissão examinadora composta pelos professores:
EDVAL JOSÉ PINHEIRO SANTOS, DES/UFPE, EDUARDO
FONTANA, DES/UFPE e ANTÔNIO CARLOS SEABRA, DEE/USP,
sob a presidência do primeiro, consideram o candidato
ALEXANDRE BRANCO GUERRA APROVADO.

Recife, 09 de maio de 2003.



EDVAL JOSÉ PINHEIRO SANTOS



EDUARDO FONTANA



ANTÔNIO CARLOS SEABRA

Ao meu filho,
Hugo Crespo Guerra.

Agradecimentos

Agradeço aos meus pais pelo exemplo de amor, honestidade e de vida, ao meu orientador, Prof. Edval Santos, pela confiança depositada e dedicação em transmitir os seus conhecimentos, à CAPES pelo suporte financeiro e ao projeto *Instituto do Milênio* do CNPq.

ALEXANDRE BRANCO GUERRA

Universidade Federal de Pernambuco

9 de Maio de 2003

Resumo da Dissertação apresentada a UFPE como parte dos requisitos necessários para obtenção do grau de Mestre em Engenharia Elétrica.

Análise Numérica do Transistor de Toco Quântico

Alexandre Branco Guerra

Maio/2003

Orientador: Edval J. P. Santos, Ph.D.

Área de Concentração: Eletrônica

Palavras-chaves: Nanoeletrônica, transporte eletrônico, simulação

O continuado desenvolvimento das técnicas de microfabricação tem possibilitado a manufatura de estruturas com dimensões menores do que o comprimento de coerência de fase do elétron, L_ϕ . Com isso têm surgido diversas propostas de novos dispositivos, dentre eles está o transistor de toco quântico. Esse transistor consiste de um nanofio cuja condutância apresenta um comportamento oscilatório em função do potencial elétrico aplicado ao toco, o qual funciona como a porta do FET. De uma maneira geral, estas estruturas são classificadas de mesoscópicas e não podem ser descritas pela teoria do transporte semi-clássico usual, pois a natureza ondulatória do elétron tem que ser tomada explicitamente em conta. O potencial aplicado ao toco funciona alterando o comprimento efetivo do mesmo e com isso altera o padrão de interferência, mudando a condutância do nanofio. Este fenômeno quântico requer uma voltagem mais baixa e portanto uma menor energia de chaveamento. Além disso, o tamanho reduzido do transistor de toco quântico diminui o tempo que o elétron leva para cruzá-lo e como conseqüência a sua frequência de chaveamento pode chegar à faixa de terahertz. Neste trabalho, é examinado o transistor com um, dois e três tocos, aplicando-se método recursivo para o cálculo da função de Green. O programa não é específico para esse tipo de dispositivo. Também foi desenvolvida uma interface para facilitar a simulação de outros dispositivos quânticos.

Abstract of Dissertation presented to UFPE as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master in Electrical Engineering.

Numerical Analysis of the Quantum Stub Transistor

Alexandre Branco Guerra

May/2003

Supervisor: Edval J. P. Santos, Ph.D.

Area of Concentration: Electronics

Keywords: Nanoelectronics, electron transport, simulation

Number of pages: xiv+93

The continued development of microfabrication techniques has made possible the fabrication of structures with dimensions smaller than the electron phase coherence length, L_ϕ . As a consequence, many proposals of novel devices have been made, among them is the quantum stub transistor. This transistor consists of nanowire whose conductance display an oscillatory behavior as a function of the electric potential applied to the stub, which acts as a FET gate terminal. In general, such structures are classified as mesoscopic and cannot be described by the usual semi-classical transport theory, as the wavelike nature of the electron has to be taken explicitly into account. The electric potential applied to the stub works by varying the stub effective length, and thus altering the interference pattern, changing the nanowire conductance. This quantum phenomenon requires low voltage e therefore less switching energy. Besides, the reduced size of the stub transistor shortens the time the electron will take to go through the device and therefore the switching frequency may reach the terahertz range. In this work, the transistor with one, two and three stubs are examined, by applying the recursive method for the calculation of the Green function. The program is not specific for this kind of device. An interface has also been developed to facilitate the simulation of other quantum devices.

Conteúdo

Agradecimentos	iv
Resumo	v
Abstract	vi
Lista de Tabelas	x
Lista de Figuras	xi
Capítulo 1 Introdução	1
1.1 Noções de mecânica quântica	1
1.2 A estrutura de bandas em semicondutores	5
1.3 Transporte eletrônico clássico	7
1.4 Transporte eletrônico quântico	9
1.5 O Gás Eletrônico Bidimensional (GEB)	13
1.6 Analogias com a óptica	15
1.7 Dispositivos mesoscópicos	17
1.7.1 Dispositivos quânticos de interferência	17
1.7.2 Outros dispositivos mesoscópicos	25
1.8 Simulação de dispositivos mesoscópicos	26
1.9 Organização	27
Capítulo 2 Método de Simulação	30
2.1 A função de Green	31
2.2 O hamiltoniano	33
2.2.1 O hamiltoniano “tight-binding” unidimensional	33

2.2.2	O hamiltoniano “tight-binding” bidimensional	35
2.2.3	O hamiltoniano “tight-binding” tridimensional	37
2.2.4	Hamiltoniano “tight-binding” generalizado	39
2.3	O fio ideal	39
2.4	O problema do espalhamento	42
2.5	Método iterativo	45
2.6	Implementação Computacional	48
Capítulo 3 Interface de Entrada		50
3.1	Formato BMP	50
3.1.1	Cabeçalho do arquivo BMP	51
3.1.2	Cabeçalho da imagem	52
3.1.3	Tabela de cor	52
3.1.4	Dados de pixel	55
3.2	Interface para geração da matriz	55
3.3	Múltiplos níveis de potencial	56
Capítulo 4 Resultados		58
4.1	Aproximação para baixas temperaturas	58
4.2	Fio simples	59
4.3	Fio com impurezas	60
4.4	Transistor de toco quântico	62
4.4.1	Transistor com apenas um toco quântico	64
4.4.2	Transistor de tocos quânticos opostos	67
4.4.3	Transistor com múltiplos tocos quânticos	68
4.5	Considerações finais	70
Capítulo 5 Conclusões e Trabalhos Futuros		74
Apêndice A Programa do Cálculo da Condutância		76
A.1	Rotina principal	76
A.2	Subrotina com o hamiltoniano do transistor	77
A.3	Subrotina para o cálculo de $\langle 0 G^0 0\rangle$	78
A.4	Subrotina para o cálculo de $\langle fatia + 1 G^{(fatia+1)} 0\rangle$	80

A.5	Subrotina para o cálculo de $(N + 1 G^{(N+1)} 0)$	81
A.6	Subrotina para o cálculo de $(N + 1 G^{(N+1)} 0)$	81
A.7	Subrotina para o cálculo da condutância	82
Apêndice B Programa da Interface de Entrada		83

Lista de Tabelas

1.1	Algumas diferenças entre elétrons e fótons.	16
1.2	Métodos de simulação de transporte quântico.	28
3.1	Estrutura <i>BITMAPFILEHEADER</i>	52
3.2	Estrutura <i>BITMAPINFOHEADER</i>	53
3.3	Estrutura <i>RGBQUAD</i>	54

Lista de Figuras

1.1	Quando um elétron incide em uma fenda dupla um padrão de difração irá se formar na tela	4
1.2	A função de onda dentro de uma caixa com barreira potencial infinita.	5
1.3	Diagrama de banda típico de um semiconductor.	5
1.4	Na presença de um campo elétrico E , os elétrons adquirem uma velocidade de deriva superposta a um movimento aleatório	8
1.5	Para $\tau_\phi \gg \tau_m$, o transporte em uma região com coerência de fase é difusivo pois existem vários espalhadores elásticos	10
1.6	Um condutor balístico é interposto entre dois contatos onde uma voltagem externa é aplicada. É assumido que os elétrons passam do condutor para os contatos com uma probabilidade de reflexão desprezível.	11
1.7	Condutância quantizada de um guia de ondas balístico.	12
1.8	A baixas temperaturas todos os estados dentro do círculo de raio k_f estão ocupados no equilíbrio. Na presença de um campo elétrico o círculo é deslocado na direção de eE	14
1.9	A banda de condução e valência estão alinhadas na junção entre o AlGaAs tipo n e o GaAs intrínseco, (a) antes e (b) depois de haver a transferência de carga.	15
1.10	Visão esquemática do interferômetro Mach-Zehnder eletrônico. A barreira no meio da estrutura forma dois caminhos distintos. O potencial aplicado a porta altera a fase da onda eletrônica e com isso muda o padrão de interferência na região de recombinação.	18

1.11	Visão esquemática do acoplador quântico direcional. A voltagem aplicada a porta controle a taxa de tunelamento entre os guias de ondas	21
1.12	Visão esquemática da evolução ao longo da coordenada x da densidade de probabilidade eletrônica na região ativa do acoplador quântico direcional. A entrada na região ativa ocorre em $x=0$, onde apenas o guia de ondas fonte está excitado.	22
1.13	Visão esquemática do transistor de toco quântico, onde V_P é a tensão aplicada ao toco, V_D é a tensão aplicada ao nanofio, W é a largura do nanofio, L_{toco} é o comprimento do toco e L_{ef} é o comprimento efetivo do toco.	23
1.14	Guia de ondas convencional. O padrão de interferência muda com a posição do pistão.	24
2.1	Dispositivo com geometria arbitrária entre dois guias de onda.	31
2.2	Uma cadeia infinita discretizada em um reticulado unidimensional.	33
2.3	Uma cadeia infinita discretizada em um reticulado bidimensional.	35
2.4	Uma cadeia infinita discretizada em um reticulado tridimensional.	38
2.5	Visão esquemática do procedimento iterativo para o cálculo da função de Green G do sistema. A função de Green G^{L+1} relativa ao sistema de tamanho $(L + 1) \cdot M$ relaciona-se a função de Green G^L relativa ao sistema de tamanho $L \cdot M$ através de uma lei recursiva $G^{L+1} = f(G^L)$	46
3.1	Estrutura geral do formato BMP	51
3.2	Figura BMP de um Anel Aharonov-Bohm usada como entrada para a interface de conversão.	56
3.3	Anel de Aharonov-Bohm após ser processado pela interface de conversão.	57
3.4	Figuras utilizadas na geração de 3 níveis de potencial distintos	57
4.1	Representação esquemática de um fio quântico simples.	60

4.2	Condutância normalizada em função da energia incidente de um fio quântico simples. A quantidade de níveis acessíveis aumenta quando aumentamos a largura W do fio, para uma mesma faixa de energia incidente.	61
4.3	Representação esquemática de fios com impurezas aleatórias e periódicas.	61
4.4	Condutância normalizada em função da energia normalizada incidente de fios com impurezas aleatórias e periódicas. Os mesmos parâmetros de simulação são usados em ambos os casos, apenas foi alterado a configuração espacial das impurezas. $W=10nm$, $L=90nm$, $P_W = 10$ e $t=1,62$	62
4.5	Vista esquemática de um transistor com apenas um toco quântico.	63
4.6	O transistor toco simples quântico com apenas um único canal de transmissão aberto. $W=10nm$, $a=0,5nm$, $P_W = 19pixels$, $L_{toco} = 11nm$, $M = 1$ (um modo) e $t = 40,52$	65
4.7	Transistor de toco quântico simples com quatro modos. $W = 10nm$, $a = 0,5nm$, $P_W = 19pixels$, $L_{toco} = 50nm$, $M = 4$ (quatro modos) e $t = 2,53$	66
4.8	Condutância normalizada em função da tensão de porta V_P , para o transistor de toco simples com $L_{toco} = 29nm$	67
4.9	Condutância normalizada em função de tensão da porta V_P , para o transistor de toco simples com $L_{toco} = 50nm$	67
4.10	Condutância normalizada de um transistor toco simples em função da tensão de porta, V_P , e da energia incidente. $L_{toco} = 50nm$ e $W = 10nm$	68
4.11	Condutância normalizada de um transistor de toco simples em função da tensão de porta, V_P . $L_{toco} = 50nm$, $W = 10nm$ e $E = 55,8meV$. O comportamento errático da condutância é consequência de existir mais de um modo excitado.	69
4.12	Vista esquemática do transistor de toco quântico de portas opostas.	69
4.13	Condutância do transistor de toco quântico de portas opostas quântico em função da tensão de porta V_P , $L_{toco} = 50nm$ em ambos os lados.	70
4.14	Vista esquemática do transistor toco duplo quântico.	71

4.15	Condutância de uma transistor toco duplo quântico em função da tensão de porta V_P , a separação entre os tocos S é $10nm$, $L_{toco} = 50nm$ para ambos tocos.	71
4.16	Condutância de uma transistor de toco duplo quântico em função da tensão da porta V_P , a separação entre os tocos S é $20nm$, $L_{toco} = 50nm$ para ambos os tocos.	72
4.17	Vista esquemática do transistor toco triplo quântico.	72
4.18	Condutância de uma transistor toco triplo quântico em função da tensão de porta V_P , a separação entre os tocos S é $18nm$, $L_{estube} = 50nm$ para os três tocos.	73

Capítulo 1

Introdução

Na vida cotidiana não se percebe que a matéria consiste de átomos, pois eles são tão pequenos que os objetos visíveis contêm um número “incontável” deles. Estes objetos são descritos por propriedades macroscópicas tais como dureza e condutividade que, por sua vez, não têm relação óbvia com a estrutura atômica da matéria. A dinâmica dos objetos macroscópicos pode ser predita usando-se as leis da física clássica [1]; as equações do movimento de Newton é uma das abordagens possíveis para a descrição deste tipo de dinâmica. A teoria atualmente utilizada para descrever a dinâmica de partículas na escala atômica, é a mecânica quântica.

Os átomos são extremamente importantes. Sem uma boa teoria atômica da matéria é difícil entender grande parte das propriedades dos sólidos. Obviamente vai ser possível medir a condutividade de um novo material, por exemplo, porém vai ser impossível predizê-la.

Com a possibilidade de um acesso cada vez maior a regiões e/ou objetos cada vez menores, a estrutura atômica torna-se cada vez mais importante, mas muito antes do tamanho de uma átomo individual ser alcançado fenômenos da mecânica quântica podem passar a serem relevantes.

1.1 Noções de mecânica quântica

Descoberta no início do século XX, a mecânica quântica nos fornece uma visão do mundo que é bastante diferente da fornecida pelo nosso senso comum. Desde que ela é uma descrição de fenômenos em uma escala bem menor do que nós normalmente

observamos, não seria de se surpreender que a nossa experiência cotidiana não seja mais válida.

Ao longo da história tem havido uma longa controvérsia a respeito da natureza ondulatória ou corpuscular da luz. Ambas as possibilidades pareciam ter um bom suporte experimental. Apenas com o advento da mecânica quântica se tornou claro que as duas possibilidades são parcialmente verdadeiras. Ainda mais surpreendente é o fato de que a matéria também pode ser descrita como partículas e como ondas. Esta descoberta só foi possível de ser realizada no século passado pois o comprimento de onda associado a objetos macroscópicos é muito reduzido para ser detectado. Este comprimento de onda, inicialmente proposto por de Broglie, é

$$\lambda = \frac{h}{mv}, \quad (1.1)$$

onde $h = 6.63 \cdot 10^{-34} Js$ é a constante de Planck (frequentemente $\hbar = h/2\pi$ é usado), esta constante define a escala na qual o fenômeno quântico torna-se importante, m é a massa do objeto e v é a sua velocidade. Normalmente a natureza ondulatória da matéria é importante apenas para partículas elementares tal como os elétrons. Apenas recentemente se tornou possível verificar a natureza ondulatória de átomos e moléculas. Cada vez mais a natureza ondulatória dos elétrons tem deixado de ser apenas uma curiosidade de laboratório e passando a se tornar importante na eletrônica.

Se a matéria pode ser descrita como ondas, uma questão natural é o que está oscilando? O campo oscilante para matéria é a função de onda e o seu comportamento é dado pela equação de Schrödinger, que é uma equação diferencial parcial cuja forma para um elétrons é:

$$\left(-\frac{\hbar}{2m} \nabla^2 + V(r, t) \right) \Psi(r, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r, t), \quad (1.2)$$

onde $\Psi(r, t)$ é a função de onda e m é a massa do elétron. O primeiro termo é a energia cinética do elétron e $V(r)$ é a energia potencial. Equações diferenciais similares aparecem em muitas áreas da física e elas são em geral difíceis de resolver. Como elas são muito comuns um grande esforço tem sido empregado para encontrar soluções analíticas para casos especiais e em criar algoritmos computacionais eficientes para gerar soluções aproximadas nos demais casos.

Quando a energia potencial na Equação 1.2 é independente do tempo, então é possível resolvê-la fazendo uso de uma separação de variáveis. Esta é uma técnica bastante comum na resolução de equações diferenciais parciais. Neste caso é possível encontrar para $\Psi(r, t)$ solução do tipo

$$\Psi(r, t) = \psi(r)\phi(t), \quad (1.3)$$

onde $\psi(r)$ e $\phi(t)$ são funções apenas das variáveis r e t respectivamente. Fazendo esta separação de variáveis pode-se concluir que a equação de Schrödinger pode ser escrita da seguinte forma

$$\left(-\frac{\hbar}{2m}\nabla^2 + V(r)\right)\psi(r) = E\psi(r), \quad (1.4)$$

onde constante E é energia do estado cuja função de onda é a solução da Equação 1.2. Esta equação é conhecida como equação de Schrödinger independente do tempo. O operador energia total é também conhecido como hamiltoniano do problema. A Equação 1.4 pode ser escrita na forma:

$$H\psi(r) = E\psi(r), \quad (1.5)$$

onde

$$H = -\frac{\hbar}{2m}\nabla^2 + V(r) \quad (1.6)$$

A Equação 1.5 é uma equação de autovalores. Sua solução é a parte espacial das autofunções, bem como os valores autovalores de energia correspondentes. A solução completa da Equação 1.2 é

$$\Psi(r, t) = \psi(r) \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right), \quad (1.7)$$

onde $\psi(r)$ representa a autofunção com energia E .

A equação de Schrödinger é completamente determinística, pois se o valor da função de onda for conhecido em um determinado instante vai ser possível prever o seu valor em qualquer instante no futuro. Portanto, uma onda de matéria não é muito diferente de uma onda clássica. A diferença reside na interpretação da função de onda. A interpretação corrente é que a função de onda representa uma densidade de probabilidade. Na representação usada até agora, a probabilidade de detectar uma partícula em uma determinada posição é proporcional ao quadrado da função de

onda naquele ponto. Isto significa que a mecânica quântica incorpora um elemento fundamental de aleatoriedade na sua formulação.

O valor absoluto da fase da onda não tem significância física conhecida, porém quando duas ondas são adicionadas a diferença relativa de fase vai afetar a amplitude da função de onda como pode ser visto no padrão de interferência mostrado na Figura 1.1.

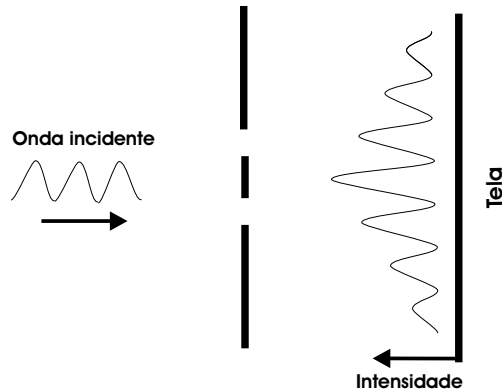


Figura 1.1: Quando um elétron incide em uma fenda dupla um padrão de difração irá se formar na tela

Um caso simples em que a solução analítica da equação de Schrödinger é facilmente encontrada é o problema unidimensional da “partícula em uma caixa”. Pondo um elétron em uma caixa com paredes de potencial infinito, a função de onda vai oscilar dentro da caixa e terá valor zero fora dela como mostrado na Figura 1.2. Nestas condições de contorno, a função de onda dentro do poço terá um múltiplo inteiro da metade do comprimento. Cada múltiplo é um modo. A cada modo é associado um valor diferente de energia dado por:

$$E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mW^2}, \quad (1.8)$$

onde m é a massa do elétron, W é a largura do poço e n é o número do modo. A energia, que classicamente é contínua, agora assume valores discretos. Essa é uma propriedade característica da física quântica.

Se ao invés de uma barreira de potencial infinita, essa barreira for finita, apenas é possível garantir que o primeiro nível de energia seja confinado. Os outros níveis poderão ser ou não confinados dependendo das dimensões da caixa, quando comparada com a altura da barreira.

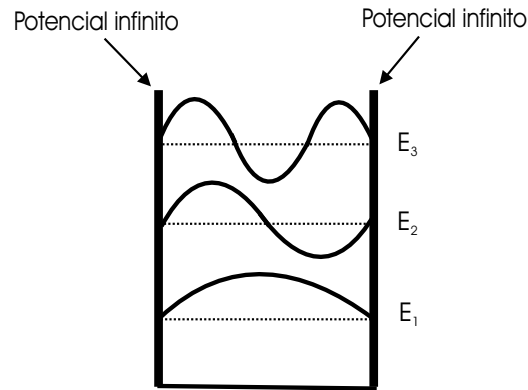


Figura 1.2: A função de onda dentro de uma caixa com barreira potencial infinita.

A mecânica quântica é um assunto vasto e complexo. Uma descrição satisfatória de seus conceitos básicos iria requerer bem mais do que alguns poucos parágrafos. Existem, porém, vários livros textos que abordam a teoria quântica[2, 3, 4, 5].

1.2 A estrutura de bandas em semicondutores

Em átomos isolados os elétrons assumem apenas níveis discretos de energia de maneira análoga ao poço potencial com barreira infinita. Quando muitos átomos são postos juntos como em um sólido, estes níveis discretos se desdobram em bandas de níveis com pequeno espaçamento. Tais bandas algumas vezes se sobrepõem e algumas vezes deixam lacunas de energias proibidas [6]. Estas bandas são descritas por um diagrama do tipo mostrado na Figura 1.3, que mostra as possíveis combinações de energia e vetor de onda k ($k = 2\pi/\lambda$, onde λ é o comprimento de onda). De acordo com

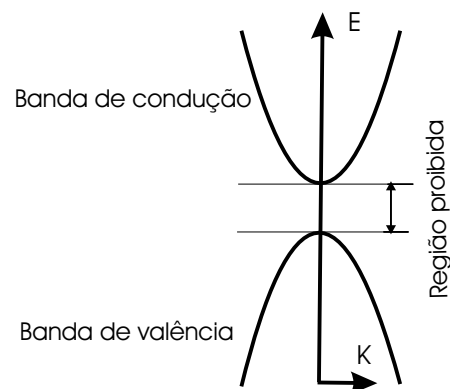


Figura 1.3: Diagrama de banda típico de um semicondutor.

o princípio da exclusão de Pauli, apenas um elétron pode ocupar um determinado

estado. Como um sistema físico tende a se arranjar de tal forma que a energia do sistema seja mínima, os elétrons vão ocupar os estados disponíveis de menor energia. Então, se os níveis de energia forem sendo preenchidos, à temperatura $0K$, desde a energia mais baixa até que todos os elétrons tenham sido utilizados, o mais alto nível de energia ocupado é denominado de *Nível* ou *Energia de Fermi*, (E_F). Em temperaturas maiores que o zero absoluto, alguns elétrons vão ter energia um pouco acima do nível de Fermi, enquanto alguns estados abaixo do nível ficarão vazios. Esta alocação de estados é descrita pela distribuição de Fermi, que dá a probabilidade que um estado com energia E esteja ocupado.

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp[(E - E_F)/k_B T]} \quad (1.9)$$

onde T é a temperatura e $k_B = 1,38 \times 10^{-23} J/K$ é a constante de Boltzmann.

Reescrevendo a relação de de Broglie (1.1), obtem-se uma relação entre o vetor de onda e a velocidade.

$$v = \frac{\hbar}{m} k \quad (1.10)$$

Portanto todo elétron que tem vetor de onda diferente de zero terá velocidade e transportará corrente. A razão pela qual não há fluxo de corrente sem um campo elétrico é que a corrente média da nuvem eletrônica é zero, i.e., para cada eletron com vetor de onda k , existe um eletron com vetor de onda $-k$.

Para que uma corrente surja, os elétrons devem ser acelerados. Considerando um material semiconductor a $0K$, onde o nível de Fermi está localizado entre as duas bandas, a banda abaixo do nível de Fermi, chamada banda de valência, estará completamente cheia, não havendo estados vazios para que os elétrons sejam capazes de serem acelerados. A banda acima do nível de Fermi, chamada banda de condução, estará completamente vazia. Este material será portanto um isolante a $0K$. A distância entre banda de condução e de valência é denominada de banda proibida ou “band-gap” do material.

A presença de certos tipos de átomos, denominados de aceitadores, faz com que o nível de Fermi fique próximo da banda de valência; à temperaturas mais altas alguns elétrons da banda de valência vão ser termicamente excitados para estes átomos e o material passará a ser um condutor. Similarmente, a presença de átomos doadores faz com que o nível de Fermi fique próximo da banda de condução e à temperaturas

mais altas esses átomos liberam elétrons para a banda de condução.

Os estados vazios na banda de valência são denominados de buracos. Estes buracos se comportam como elétrons de carga positiva e também transportam corrente. O nível de Fermi pode ser incrementado (decrementado) adicionando-se pequenas quantidades de átomos com elétrons extras, doadores (ou faltando elétrons, aceitadores). Este acréscimo de doadores ou aceitadores é denominado dopagem e altera drasticamente as propriedades elétricas do material.

Elétrons movendo-se através de um cristal semiconductor interagem com os átomos e isto muda as suas propriedades. Dentro do material, o elétron freqüentemente se comporta como se tivesse uma massa diferente que teria no vácuo. Esta massa é a massa efetiva (m^*) e é freqüentemente bem menor que no vácuo. Seu valor é apenas 7% do seu valor normal no arseneto de gálio, GaAs, e 26% no silício, Si, por exemplo. Dentre outras coisas isto significa que o comprimento de onda de de Broglie é proporcionalmente incrementado fazendo com que o fenômeno quântico seja mais fácil de ser observar.

1.3 Transporte eletrônico clássico

Quando um campo elétrico é aplicado a um condutor os elétrons são acelerados. Se esta aceleração continuasse indefinidamente, qualquer campo elétrico, não importando o quão pequeno, iria criar uma corrente infinita. O que as observações mostram, no entanto, é que a corrente é proporcional ao campo elétrico (lei de Ohm). A razão para isso é que os elétrons são espalhados por defeitos, e.g. impurezas, no material de tal modo que o movimento real dos elétrons se aproxima mais do comportamento mostrado na Figura 1.4, isto é, um movimento aleatório superposto a uma pequena velocidade de deriva. Esta corrente líquida é denominada de corrente de deriva.

O espalhamento pode ser de dois tipos: elástico e inelástico. No espalhamento elástico, a energia do elétron é conservada pela colisão e apenas o momento linear é afetado. No espalhamentos inelástico, a energia do elétrons é alterada. Vibrações térmicas da rede cristalina do material (fônons) ou colisões com outros elétrons são causas comuns deste tipo de espalhamento. Uma diferença importante entre estes dois tipos de espalhamento é que o espalhamento inelástico vai tornar aleatória, a

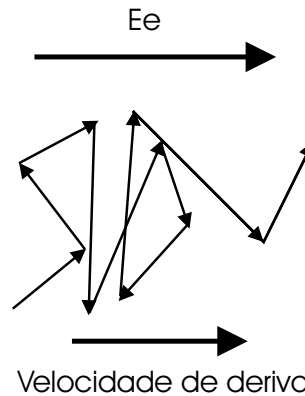


Figura 1.4: Na presença de um campo elétrico E , os elétrons adquirem uma velocidade de deriva superposta a um movimento aleatório .

fase da função de onda, destruindo o fenômeno quântico de interferência necessário para o tipo de dispositivo estudado nesta dissertação.

Se o tempo médio entre eventos de espalhamento é τ , um campo elétrico E vai dar ao elétron uma velocidade média de $v = \mu E$, onde μ é a mobilidade do material e é dado por

$$\mu = \frac{e\tau}{m}. \quad (1.11)$$

este é um importante parâmetro pois é fácil de medir experimentalmente e dele se extrai a taxa de espalhamento no material.

Mesmo sem um campo elétrico, os elétrons vão percorrer caminhos aleatórios no material. Em princípio, dividindo o condutor em duas partes distintas, os elétrons poderão estar passando entre as duas regiões, uma vez que a corrente macroscópica é nula. Se houver diferentes concentrações de elétrons nas duas regiões haverá mais elétrons se movendo para a região com menos elétrons. Esta é a corrente de difusão, que tem importância em muitos dispositivos.

Esta combinação de corrente de difusão e deriva é frequentemente suficiente na análise de dispositivos semicondutores. Quando uma descrição mais apurada é necessária, por exemplo movimento de portadores de carga sujeito a campos de alta intensidade, a utilização da equação de transporte de Boltzmann é mais adequada, pois ela descreve explicitamente a forma de como a distribuição de velocidade dos elétrons é afetada pelo espalhamento e pelo campo elétrico. Na descrição de Boltzmann, assume-se fisicamente que:

- O elétron é descrito como um pacote de ondas (os valores do vetor de onda e

da posição estão bem definidos).

- Durante os vôos livres, os momentos eletrônicos mudam de acordo com as leis de Newton.
- Os vôos livres dos elétrons são interrompidos por colisões instantâneas e pontuais.

Estas suposições não são válidas para dispositivos muito pequenos pois elas avaliam a média dos efeitos de espalhamento, o que é válido apenas se as escalas de tempo são bem maiores que o tempo entre os eventos de espalhamento, além disso elas ignoram os fenômenos relacionados ao transporte quântico.

1.4 Transporte eletrônico quântico

Quando se diminui a temperatura de uma amostra, os eventos de espalhamento inelástico, destruidores de fase, vão ser reduzidos e portanto a distância L_ϕ entre os eventos de espalhamento inelásticos vai aumentar. Para semicondutores com baixa mobilidade ou filmes metálicos policristalinos, a taxa espalhamento elástico será bem maior que o inelástico, isto é, o elétron irá experimentar vários espalhamentos elásticos entre cada espalhamento inelástico, ou ainda, o tempo de relaxação de momento será consideravelmente menor do que o tempo de relaxação de fase: $\tau_m \ll \tau_\phi$. Este fato é ilustrado na Figura 1.5. A relação entre a distância de relaxação de fase L_ϕ e o tempo de relaxação de fase é dada por

$$L_\phi = v_F \tau_\phi, \quad (1.12)$$

onde v_F é a velocidade de Fermi.

Quando o tamanho de uma estrutura aproxima-se de L_ϕ , novos fenômenos vão ocorrer. Esta escala é freqüentemente denominada de mesoscópica, apesar do termo também ser usado para uma larga faixa entre escalas macroscópicas e atômicas. Se o elétron puder tomar caminhos distintos entre dois eventos inelásticos estes caminhos vão interferir. Quando um campo magnético ou elétrico variável muda a fase destes caminhos, a interferência vai mudar a probabilidade de transmissão dos elétrons.

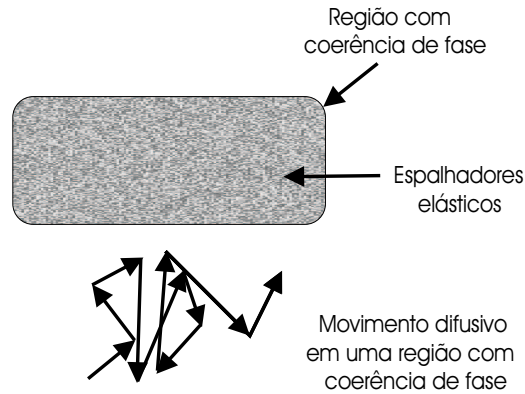


Figura 1.5: Para $\tau_\phi \gg \tau_m$, o transporte em uma região com coerência de fase é difusivo pois existem vários espalhadores elásticos .

Obviamente isto não é bom para a criação de dispositivos eletrônicos confiáveis, pois uma simples impureza pode mudar o padrão de interferência do dispositivo fabricado e com isso a sua condutância. Se a qualidade do material é melhorada ou o tamanho da estrutura é reduzido ainda mais, de modo a fazer com que a estrutura seja menor do que a distância média entre eventos de espalhamento elásticos, a região de transporte balístico é alcançada. Nesta região os elétrons viajam sem sofrer colisão e o transporte eletrônico se assemelha em muitos aspectos aos feixes de luz da óptica geométrica.

Para melhor controlar o movimento dos elétrons, é comum confiná-los em uma direção formando um poço quântico. É possível separar o movimento dos elétrons em três direções ortogonais distintas e tratá-las separadamente.

Se os elétrons estão confinados em uma direção, haverá apenas um número discreto de níveis de energia ou modos nesta direção enquanto nas outras haverá um espectro contínuo. Estes modos tem energias diferentes e é possível mudar a densidade de elétrons até que apenas o mais baixo esteja ocupado. Nestas circunstâncias um Gás Eletrônico Bidimensional (GEB) é formado [7].

Se os elétrons estão confinados em duas direções, um fio quântico é formado (também conhecido como guia de ondas). Da mesma maneira que para um GEB, os níveis de energia dos elétrons podem ser classificados em modos, que irão, em casos ideais, sem espalhamento, dar contribuições independentes para a corrente total. Cada modo dará uma contribuição idêntica, $2e^2/h$, para a condutância do fio. Desta forma o condutor mesoscópico e balístico mostrado na Figura 1.6 terá a condutância dada

pela equação

$$G = \frac{2e^2}{h}M. \quad (1.13)$$

portanto, ao contrário do que ocorre com os fios ôhmicos, onde $G = \sigma W/L$, sendo σ a condutividade, que é uma característica do material, a condutância do fio quântico é independente do comprimento L .

Se o largura do fio for incrementada, o número de modos ocupados também irá mudar e a condutância irá aumentar em passos incrementais a medida que modos adicionais são ocupados. O número de modos propagantes em um dado condutor é dada por

$$M = \text{Int} \left(\frac{W}{\lambda_F/2} \right), \quad (1.14)$$

onde λ_F é o comprimento de onda de Fermi e a função $\text{Int}(x)$ representa o menor inteiro mais próximo de x . Esta quantização da condutância foi observada pela primeira vez em 1988 [8] e desde então tem sido um teste padrão para demonstrar o transporte coerente.

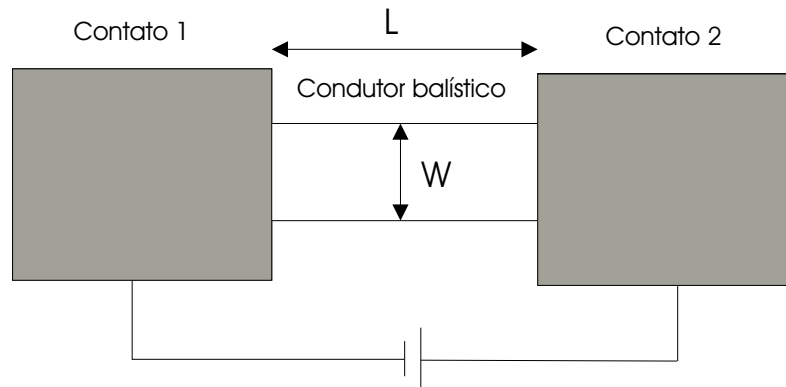


Figura 1.6: Um condutor balístico é interposto entre dois contatos onde uma voltagem externa é aplicada. É assumido que os elétrons passam do condutor para os contatos com uma probabilidade de reflexão desprezível.

A quantização da condutância também pode ser observada decrementando-se a energia de feixe eletrônico incidente no condutor, de modo a diminuir o número de canais acessíveis como mostrado na Figura 1.7.

Quando o condutor mesoscópico não é balístico, isto é, quando os elétrons ao atravessá-lo sofrem espalhamentos elásticos provocados por impurezas ou pela sua

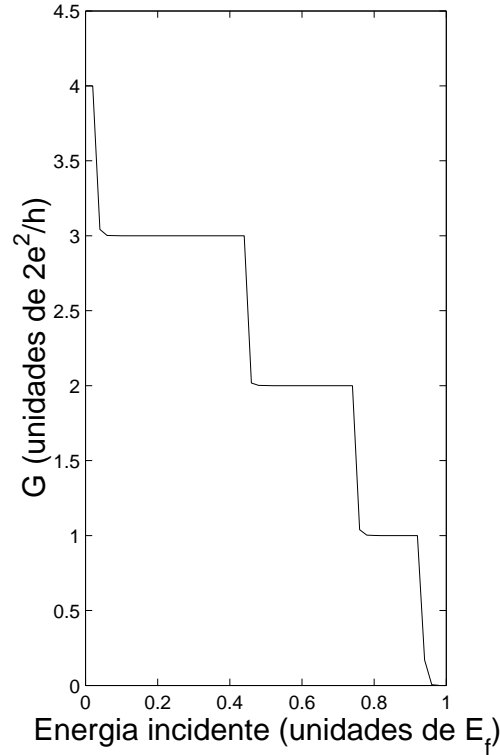


Figura 1.7: Condutância quantizada de um guia de ondas balístico.

geometria arbitrária, a sua condutância é dada pela versão multicanal da fórmula de Landauer [9].

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_{\mu\nu} |t_{\mu\nu}|^2, \quad (1.15)$$

onde $t_{\mu\nu}$ é o coeficiente de transmissão entre o modo de entrada μ e um modo de saída ν . Obviamente esta equação é uma generalização da Equação 1.13. Uma extensão da Equação 1.15 foi feita por Büttiker [10], onde ele considera a situação de um condutor mesoscópico com vários fios quânticos conectados a sua estrutura.

A densidade de corrente em um condutor homogêneo é usualmente expressa como um produto da densidade de elétrons n_s e da velocidade de deriva v_d :

$$J = en_s v_d. \quad (1.16)$$

Em uma primeira análise pode-se pensar que todos os elétrons do condutor contribuem para a corrente, porém este ponto de vista é irreal para um gás degenerado a baixas temperaturas. O que de fato ocorre é que a corrente líquida não é nula apenas

em uma faixa de poucos $k_B T$ do nível de Fermi. Isto leva a uma grande simplificação conceitual pois significa que para entender as propriedades de condução a baixas temperaturas, não é necessário se preocupar com a dinâmica do mar de elétrons inteiro, é suficiente entender a dinâmica dos elétrons com energias próximas ao nível de Fermi.

É fácil ver porque a corrente flui completamente em uma faixa de poucos $k_B T$ do nível de Fermi. Defina a função distribuição $f(k)$ que dá a probabilidade que um estado k esteja ocupado. No equilíbrio, $f(k) = 1$ para todos os elétrons dentro de um círculo de raio igual ao vetor de onda de Fermi, k_F . Um campo elétrico faz com que toda a distribuição seja deslocada de k_d com mostrado na Figura 1.8:

$$[f(k)_{E \neq 0}] = [f(k - k_d)_{E=0}], \quad (1.17)$$

onde $k_d = eE\tau_m/\hbar$. Portanto, em regiões mais profundas do mar de Fermi ($k \ll k_F$) nada acontece, assumindo que o campo é pequeno o suficiente de tal modo que o deslocamento k_d é pequeno comparado como k_F . Os estados que estavam cheios sem campo aplicado continuam cheios com o campo aplicado. É apenas perto de $+k_F$ que os estados que estavam vazios tornam-se cheios; enquanto, perto de $-k_F$ estados que estavam cheios tornam-se vazios. Assim sendo, do ponto de vista de partículas isoladas, o campo elétrico dá a todos os elétrons uma velocidade de deriva, porém do ponto de vista coletivo, o campo elétrico apenas move poucos elétrons de $-k_F$ à $+k_F$. Pode-se então reescrever a densidade de corrente de uma maneira ligeiramente diferente para refletir este ponto de vista:

$$J = e \left(n_s \frac{v_d}{v_F} \right) v_F. \quad (1.18)$$

Deste ponto de vista, a corrente é formada por uma pequena fração do total de elétrons ($n_s v_d/v_f$) que se move com a velocidade de Fermi.

1.5 O Gás Eletrônico Bidimensional (GEB)

Grande parte dos recentes estudos sobre condutores mesoscópicos têm sido baseados em heterojunções de GaAs/AlGaAs [11], onde uma fina camada condutora bidimensional é formada entre a interface de GaAs e AlGaAs. Para entender o porquê desta

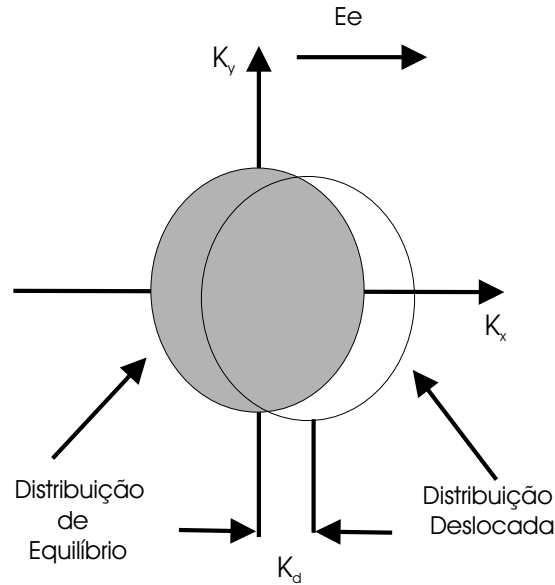


Figura 1.8: A baixas temperaturas todos os estados dentro do círculo de raio k_f estão ocupados no equilíbrio. Na presença de um campo elétrico o círculo é deslocado na direção de eE .

camada ser formada considere que a banda de valência e a banda de condução estejam alinhadas quando as camadas são primeiramente trazidas em contato. O nível de E_F do AlGaAs é mais elevado que o nível de Fermi do GaAs, como mostrado na Figura 1.9. Conseqüentemente os elétrons irão tender a abandonar o n-AlGaAs deixando para trás doadores positivamente carregados. Esta carga positiva vai gerar o potencial eletrostático que fará com que as bandas se deformem.

No equilíbrio, o nível de Fermi é constante em toda parte. A densidade de elétrons tem um pico agudo próximo da interface GaAs-AlGaAs (onde a energia de Fermi está dentro da banda de condução) formando uma camada condutora fina. A concentração de portadores no GEB formado, tipicamente vai de $2 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$ até $2 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ e pode ser depletada aplicando-se uma voltagem negativa na superfície. Esta depleção é o principio da tecnologia “split-gate” [12], onde contatos Schottky metálicos são fabricados na superfície do GEB. Estes contatos Schottky agem como diodos, isto é, quando uma tensão negativa relativa ao GEB é aplicada, não haverá circulação de corrente. Os contatos irão gerar um campo elétrico capaz de penetrar no GEB e depletar os elétrons sob os contatos. Por exemplo, se for desenhado dois contatos metálicos longos e paralelos, tem-se a formação de um fio quântico na região sem metalização, já que nas regiões sob os contatos não haverá portadores. Assim pode-

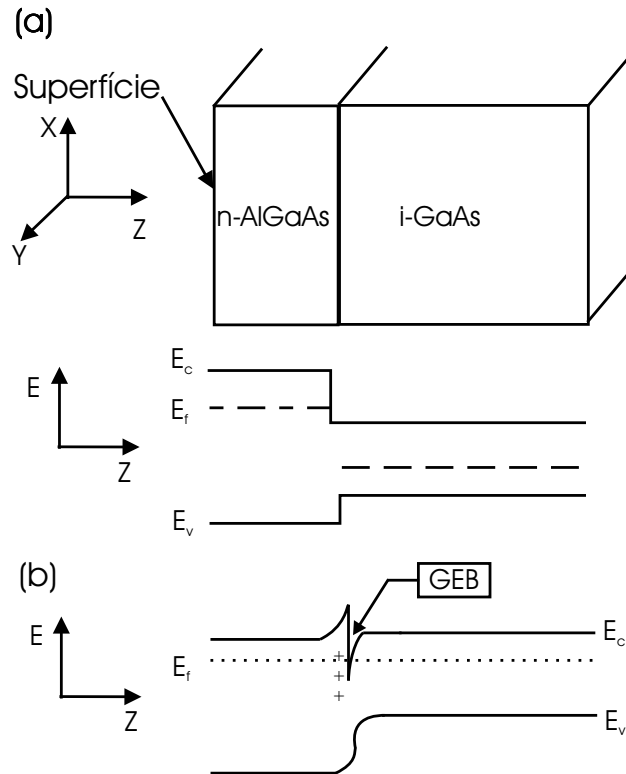


Figura 1.9: A banda de condução e valência estão alinhadas na junção entre o AlGaAs tipo n e o GaAs intrínseco, (a) antes e (b) depois de haver a transferência de carga.

se definir os mais diversos contornos de dispositivos mesoscópicos. Outra técnica para moldar um GEB é utilizando-se corrosão seca, este método apresenta porém o inconveniente de reduzir a mobilidade dos portadores, já que introduz muitos defeitos no material.

1.6 Analogias com a óptica

A equação da onda dos fótons, obtida a partir das equações de Maxwell, é análoga a equação de Schrödinger para elétrons, com o campo elétrico E para fótons fazendo um papel similar ao da função de onda, Ψ , para elétrons. Isto acontece porque a equação da onda pode ser resolvida para obter a probabilidade de transmissão de fótons em determinado meio, portanto, assim como fazemos com a função de onda, o campo elétrico E pode ter uma interpretação probabilística [13].

Comparando as formas independentes do tempo da equação da onda e da equação de Schrödinger, pode-se concluir que a propagação de elétrons através de uma região com potencial variável é análoga à propagação da luz em uma região com índice de re-

fração variável [13]. Estas similaridades podem ser exploradas na concepção de novos dispositivos eletrônicos tendo como base dispositivos ópticos ou os dispositivos da engenharia de microondas [14]. Por outro lado existem algumas diferenças importantes entre elétrons e fótons [15]. Algumas delas são citadas na Tabela 1.1.

Tabela 1.1: Algumas diferenças entre elétrons e fótons.

Propriedade	Elétron	Fóton
Massa	m^*	0
Carga	e	0
Spin	1/2	1
Estatística	Fermi-Dirac	Bose-Einstein
Velocidade	$\ll c$	c/n
Dispersão E vs \vec{k}	não linear	linear

- Fótons são bósons, o que significa que um número qualquer deles pode ocupar um determinado estado. Elétrons são férmions e portanto obedecem ao princípio da exclusão de Pauli, ou seja, apenas um elétron pode ocupar um determinado estado. Uma fibra óptica monomodo, por exemplo, em princípio não tem limites para o número de fótons que transporta, um guia de ondas eletrônico pode conter apenas um número limitado de elétrons, o que limita a corrente através dele.
- A carga dos elétrons faz com que eles interajam fortemente com outros elétrons. Fótons, ao contrário, não interagem. Daí o sucesso dos elétrons no processamento de informações e o dos fótons no transporte de informações
- A relação entre energia e vetor de onda são diferentes. Para fótons temos

$$E = \hbar k \frac{c}{n}, \quad (1.19)$$

onde c é a velocidade da luz no vácuo e n é o índice de refração. Para elétrons temos

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + V. \quad (1.20)$$

Uma diferença é que a energia dos elétrons apresenta uma dependência quadrática com k e a energia dos fótons apresenta uma dependência linear. A diferença mais importante é a inclusão do termo potencial elétrico, V , para o elétron. O termo potencial permite um confinamento maior para elétrons do que o confinamento possível para fótons.

1.7 Dispositivos mesoscópicos

O transistor de efeito de campo (FET) e o transistor bipolar têm posições dominantes na eletrônica da atualidade. Porém, o continuado avanço das técnicas de microfabricação tem possibilitado fabricar estruturas com dimensões menores que o comprimento de coerência de fase do elétron, L_ϕ . De uma maneira geral, estas estruturas são classificadas como mesoscópicas e não podem ser descritas pela teoria tradicional do transporte semi-clássico, pois a natureza ondulatória do elétron tem que ser tomada explicitamente em consideração. Isto significa que, ao contrário do que ocorre com os dispositivos eletrônicos comuns, em que os portadores se difundem e são arrastados por um campo elétrico na estrutura cristalina; os dispositivos mesoscópicos são baseados no transporte coerente dos portadores. Novos dispositivos que trabalham no regime mesoscópico têm sido propostos como substitutos do transistor FET e do transistor bipolar. Apesar de nenhum deles ter ainda obtido sucesso, os ganhos de uma implementação bem sucedida são tão grandes que estimulam a avaliação de novos conceitos.

1.7.1 Dispositivos quânticos de interferência

O transporte com coerência de fase possibilita a construção dispositivos eletrônicos usando-se fenômenos de interferência análogos aos usados nos interferômetros ópticos. Eles possuem um princípio de operação comum. Uma onda eletrônica incidente é dividida em dois modos que se propagam no dispositivo separadamente e posteriormente são recombinados. Se a diferença de fase entre os modos estiver alterada na recombinação, ocorrerá interferência. Várias estruturas diferentes têm sido propostas para obter este controle de fase.

Interferômetro Mach-Zehnder eletrônico

No interferômetro de Aharonov-Bohm [16], ou interferômetro Mach-Zehnder eletrônico¹, a onda eletrônica é dividida em dois caminhos fisicamente separados. É aplicada uma diferença de potencial entre os caminhos, como mostrado na Figura 1.10. Na recombinação os elétrons vão ser transmitidos ou refletidos, de acordo com a diferença de fase entre os caminhos provocado pelo potencial aplicado à porta (interferência construtiva ou destrutiva, respectivamente).

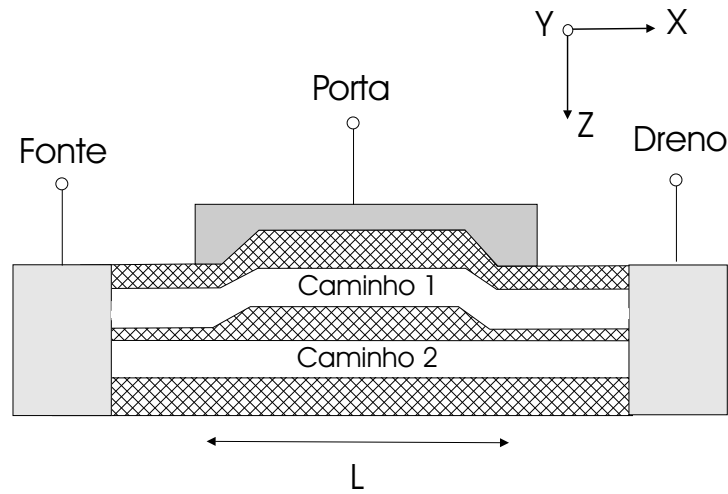


Figura 1.10: Visão esquemática do interferômetro Mach-Zehnder eletrônico. A barreira no meio da estrutura forma dois caminhos distintos. O potencial aplicado a porta altera a fase da onda eletrônica e com isso muda o padrão de interferência na região de recombinação.

A diferença de fase pode ser gerada tanto por um campo elétrico, quanto por um campo magnético, pois ambos são capazes de alterar a fase da onda eletrônica [17]. A lei para mudança de fase, $\Delta\phi_m$, devido a um campo magnético, é a seguinte:

$$\Delta\phi_m = \frac{e}{\hbar} \int_{\text{caminho}} \vec{A} \cdot ds, \quad (1.21)$$

onde \vec{A} é o vetor potencial e a integral é tomada ao longo do caminho percorrido pelo elétron. Tradicionalmente este tipo de interferômetro é controlado por um campo magnético, mas para aplicações como chaveamento digital, os campos elétricos são mais simples de ser gerados.

¹Para fótons, tem-se o interferômetro de Mach-Zehnder.

A mudança de fase, $\Delta\phi_e$, provocada por um campo elétrico, é dada por:

$$\Delta\phi_e = \frac{e}{\hbar} \int V dt, \quad (1.22)$$

onde V é o potencial escalar. Assumindo que a diferença de potencial média entre os dois caminhos da Figura 1.10 é V_{12} e que o elétron se propaga com velocidade longitudinal v_x nestas regiões, usando a equação acima podemos concluir que a diferença de fase provocada campo elétrico é:

$$\Delta\phi_e = \frac{L}{v_x} \frac{eV_{12}}{\hbar}. \quad (1.23)$$

Usando a relação de Landauer, pode-se mostrar que a condutância irá oscilar de maneira senoidal, de acordo com a equação abaixo [18].

$$G = \frac{4e^2}{h} |t_1 t_2|^2 (1 + \cos \Delta\phi_e), \quad (1.24)$$

onde t_1 e t_2 são as amplitudes das funções de onda nos caminhos 1 e 2, respectivamente. Portanto, se diferença de fase entre os dois caminhos for $\Delta\phi_e = 0$ ($V_{12}=0$), a condutância atinge o seu valor máximo $G_{max} = 8e^2|t_1 t_2|/h$. Se $\Delta\phi_e = \pi$, isto é,

$$eV_{12} = \frac{\hbar\pi v_x}{L} \quad (1.25)$$

a interferência é destrutiva e condutância atinge o seu valor mínimo, isto é, ela é anulada.

Pode-se definir alguns parâmetros característicos para o dispositivo. Obviamente o tempo de trânsito através dos caminhos é $t_{tr} = L/v_x$. Se $L = 200nm$ e $v_x = 2 \times 10^7 cm/s$, tem-se $t_{tr} = 1 ps$ e para o potencial destrutivo, $V_{12} = 2meV$. É importante notar que caminhos mais curtos requerem potenciais mais altos. O tempo de trânsito t_{tr} determina a frequência de corte do dispositivo, $\omega_c = 1/(2\pi t_{tr})$. Como os caminhos do dispositivo não necessitam dopagem e podem ter dimensões bastante reduzidas, em princípio, este dispositivo pode operar até a faixa de terahertz.

Este modelo permite uma comparação deste dispositivo com o FET convencional. Considerando que o FET esteja normalmente ligado, com os elétrons do canal de condução com energia de Fermi igual a E_F , a voltagem de limiar para depletar o canal do FET pode ser estimada como:

$$eV_{lim,FET} \approx E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^*} \quad (1.26)$$

Para o Mach-Zehnder ela é dada pela equação 1.25, portanto

$$eV_{lim,Mach-Zehnder} \approx eV_{12} = \frac{\pi \hbar v_x}{L} = \frac{\pi \hbar^2 k_F}{m^* L} = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^*} \frac{2\pi}{k_F L} = eV_{lim,FET} \frac{\lambda_F}{L} \quad (1.27)$$

onde λ_F comprimento de onda de Fermi. Como $\lambda_F \ll L$, pode-se concluir que o dispositivo quântico pode operar com uma voltagem de porta significativamente menor e portanto dissipa menos calor que o FET convencional. Esta propriedade é válida para dispositivos quânticos de interferência em geral, pois enquanto FET usa força “bruta” tendo que depletar, expulsar, os elétrons sob a porta de controle para mudar a condutância, os dispositivos quânticos de interferência têm apenas que mudar a fase da onda eletrônica para alterar a sua condutância. Outra característica que pode ser citada é o fato de que o Mach-Zehnder quântico deve operar conduzindo apenas um único modo em cada guia de ondas, pois o campo elétrico provoca atrasos de fase diferentes em modos distintos e isto faz com que os máximos e mínimos da condutância fiquem indefinidos.

Acoplador direcional quântico

Observa-se na natureza que uma partícula tem uma probabilidade não-nula de tunelar através de uma barreira que classicamente seria intransponível. A probabilidade de tunelar através de uma barreira é reduzida com o aumento da altura e da largura da mesma. O acoplador quântico direcional faz uso deste fenômeno e da interferência quântica.

O acoplador direcional quântico [19, 20] consiste de dois guias de ondas monomodo paralelos denominados de guia de ondas fonte e dreno respectivamente, como mostrado na Figura 1.11. Ele utiliza o acoplamento entre os dois guias de onda de modo análogo ao acoplador direcional óptico de canal duplo [21] (“optical dual-channel directional coupler”) e ao acoplador direcional de multi-cavidade de duplo guia de microondas [22] (“microwave dual-guide multihole directional coupler”).

O modo básico de operação do acoplador direcional quântico é o seguinte: uma pequena tensão é aplicada entre a entrada e a saída do guia de ondas fonte; a saída

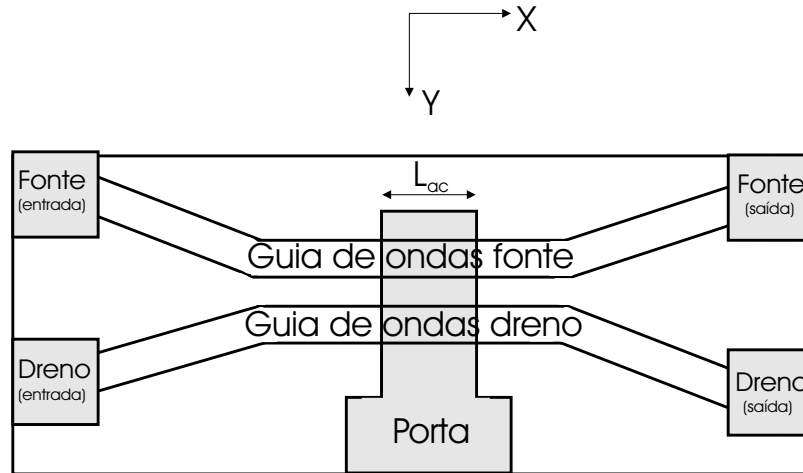


Figura 1.11: Visão esquemática do acoplador quântico direcional. A voltagem aplicada a porta controle a taxa de tunelamento entre os guias de ondas .

do guia de ondas dreno é mantida no mesmo potencial que a saída do guia de ondas fonte e a corrente das duas saídas é medida independentemente; a entrada do guia de ondas dreno é deixada flutuando para prevenir a passagem de qualquer corrente através deste terminal; a tensão da porta controla o grau de acoplamento entre os dois guias de ondas, portanto ela modula o nível de corrente entre os dois terminais.

Se o comprimento de acoplamento L_{ac} for menor que o comprimento de coerência de fase do elétron L_{ϕ} , então os elétrons com energia igual a energia de Fermi na entrada do guia de ondas fonte, mantêm a sua fase enquanto se propagam no acoplador.

Se a barreira entre os dois guias de ondas é pequena o suficiente em altura e largura, então parte da cauda da função de onda da entrada do guia de ondas fonte penetra no guia de ondas dreno excitando modos no mesmo. Desde que a fase do elétron no guia de ondas fonte é única, o processo de tunelamento ocorre em fase ao longo da distância de acoplamento L_{ac} , isto é, tem-se um processo de tunelamento coerente. Como conseqüência, tem-se uma transferência de densidade de probabilidade entre os dois guias de onda.

Isto pode ser entendido considerando que o elétron está inicialmente em um dos dois guias de ondas e a sua função de onda é uma combinação linear de um modo simétrico (energia E_s) e um modo anti-simétrico (energia E_a). A cada modo está associado um fator de fase puro dependente do tempo da forma $\exp(-iE_{a,s}t/\hbar)$. Como cada modo tem energia ligeiramente diferente $\Delta E = E_a - E_s$, os fatores de fase avançam a taxas ligeiramente diferentes e a combinação linear das funções de onda

resultantes corresponde a um elétron que oscila indo e voltando entre os guias de onda a uma frequência de $f = \Delta E/h$. Ou seja, o modo simétrico bombeia o anti-simétrico e vice-versa. Se em $t = 0$, o elétron estiver em um dos guias de onda, ele se moverá para o outro guia de ondas após metade do período de oscilação, isto é, após um tempo de transição $t_t = h/(2\Delta E)$, ou ainda, após percorrer uma distância de transição L_t na região de acoplamento. Além de L_t , o elétron começa a ser transferido de volta para o guia de ondas inicial. Para uma distância exatamente igual a $2L_t$, o elétron é completamente transferido para o guia de ondas original e este processo prossegue de maneira periódica. O processo é ilustrado esquematicamente na Figura 1.12.

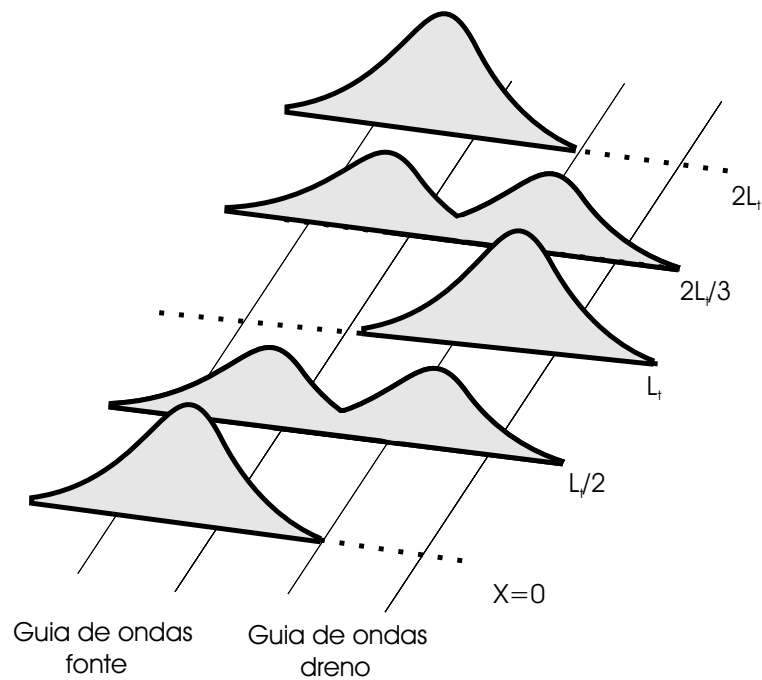


Figura 1.12: Visão esquemática da evolução ao longo da coordenada x da densidade de probabilidade eletrônica na região ativa do acoplador quântico direcional. A entrada na região ativa ocorre em $x=0$, onde apenas o guia de ondas fonte está excitado.

A distância de transição L_t está relacionada com a constante de acoplamento κ da forma mostrada pela equação abaixo:

$$L_t = \frac{\pi}{2\kappa}, \quad (1.28)$$

onde κ é uma função do potencial aplicado a porta.

Transistor de toco quântico

Assim como no interferômetro Mach-Zehnder eletrônico, a razão do grande interesse pelo transistor de toco quântico é seu potencial para processamento ultra rápido de sinais, com pouca dissipação de energia. Uma visão esquemática do dispositivo é apresentada na Figura 1.13, onde V_P é a tensão de porta e V_D é a tensão de dreno.

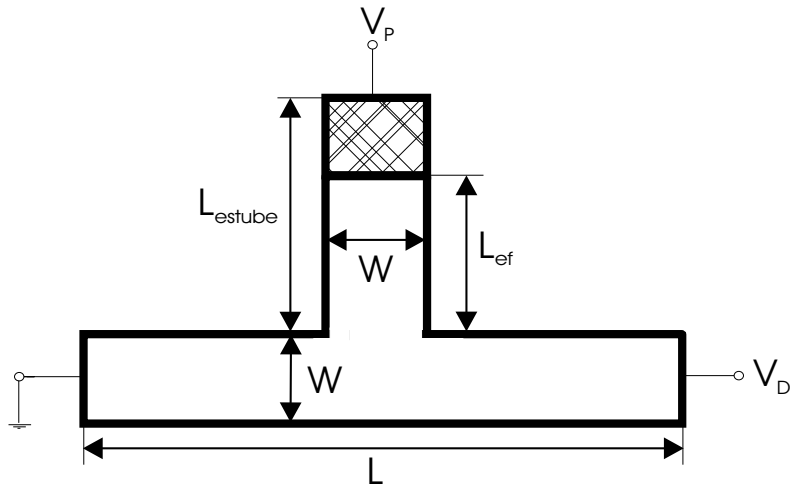


Figura 1.13: Visão esquemática do transistor de toco quântico, onde V_P é a tensão aplicada ao toco, V_D é a tensão aplicada ao nanofio, W é a largura do nanofio, L_{toco} é o comprimento do toco e L_{ef} é o comprimento efetivo do toco.

A tensão de dreno está relacionada com a energia incidente do elétron por $E = eV_D$. Se o comprimento do toco, L_{toco} , é bem maior que o comprimento médio inelástico L_ϕ , então a estrutura representa apenas uma intersecção de dois fios e a transcondutância, $g_m = \partial I_D / \partial V_P$, é zero, onde I_D é a corrente de dreno. Para $L_{\text{toco}} \leq L_\phi$, no entanto, a natureza quântica do transporte eletrônico faz com que a transcondutância g_m seja diferente de zero e a situação muda completamente. O que acontece é similar ao guia de ondas metálico convencional, mostrado na Figura 1.14, onde um pistão é deslocado em uma cavidade para mudar o padrão de interferência do campo eletromagnético. No caso do transistor de toco quântico, a tensão de porta atua como um pistão que muda o comprimento do toco. Isto altera a penetração do elétron dentro do toco e portanto o padrão de interferência. O comprimento efetivo do toco L_{ef} representa a variação do comprimento efetivo com a tensão aplicada a porta. O comprimento do toco para o qual os efeitos quânticos tornam-se importantes tem uma grande dependência da temperatura e do material usado. Em um material semiconductor ultra-puro e à temperaturas do hélio líquido (4,2K) e abaixo, efeitos

coerentes são observados para dimensões da ordem de $1\mu m$ [23].

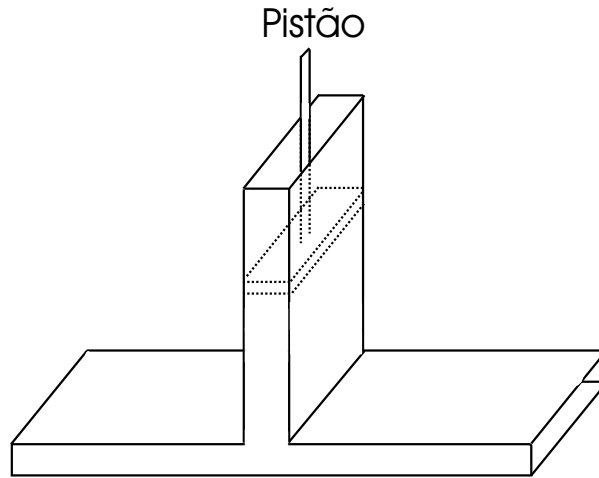


Figura 1.14: Guia de ondas convencional. O padrão de interferência muda com a posição do pistão.

A condutância, G , do transistor de toco quântico apresenta um comportamento oscilatório com a variação do potencial V_P aplicado ao toco, ou seja, em função do comprimento efetivo L_{ef} . Portanto, o canal pode ser aberto ou fechado. O mínimo de G é uma reflexão ressonante ou antiressonância e um máximo de G é uma transmissão ressonante ou simplesmente ressonância [24]. Os zeros de transmissão ocorrem quando L_{ef} satisfaz a relação, $kL_{ef} = n\pi$, onde k é o vetor de onda dos elétrons incidentes, e os máximos quando $kL_{ef} = (n + \frac{1}{2})\pi$. Este dispositivo tem sido fabricado em heterojunções de GaAs/AlGaAs, utilizando-se a técnica de epitaxia por feixe molecular (MBE) [25].

O confinamento lateral dos elétrons faz com que apenas níveis discretos de energia ou modos sejam permitidos. O número de modos transversos é dado pela Equação 1.14. Se mais de um modo se propaga pelo dispositivo, cada modo terá um comprimento diferente de penetração no toco e como consequência o dispositivo irá apresentar um padrão de interferência errático. Portanto, para evitar esse comportamento a energia incidente, E , deve estar na faixa $E_1 \leq E < E_2$, onde E_1 e E_2 são as energias do primeiro e do segundo modos, respectivamente. A energia do n -ésimo modo pode ser estimada, utilizando a aproximação da partícula na caixa de potencial infinito, em conjunto com a aproximação da massa efetiva.

$$E_n = \frac{n^2\pi^2}{W^2} \frac{\hbar^2}{2m^*} \quad (1.29)$$

O elétron pode seguir vários caminhos diferentes quando se propaga pelo dispositivo. O tempo de trânsito t_{tr} pode ser definido como o tempo necessário para que um elétron percorra o toco de ida e volta. Este é o tempo mínimo necessário para que a corrente se adapte a um novo valor do comprimento efetivo do toco. Tempos de trânsito curtos, portanto altas frequências de corte, podem ser obtidos com tocos curtos e densidade de portadores n_s altas, pois $t_{tr} = 2L_{ef}/v_F$, onde $v_F = \hbar\pi n_s W/m^*$ é a velocidade de Fermi dos portadores.

A máxima diferença de caminho entre os possíveis caminhos que o elétron pode seguir no dispositivo é aproximadamente $2L_{toco}$. Portanto o número de mínimos esperado no padrão de interferência é $m + 1$, onde m é o maior inteiro que satisfaz a desigualdade abaixo.

$$L_{toco} \geq (m + \frac{1}{4})\lambda_F \quad (1.30)$$

Por exemplo, para $L_{toco} = 30nm$ e $\lambda_F = 20nm$, temos $m + 1 = 2$.

1.7.2 Outros dispositivos mesoscópicos

Os dispositivos quânticos de interferência usam a quantização de estados transversal à direção de propagação, dispositivos que usam a quantização de estados longitudinal também são possíveis. Dentre eles, pode-se citar:

- Transistor de tunelamento ressonante;
- Transistor de elétron solitário;

Transistor de tunelamento ressonante

O transistor de tunelamento ressonante [26] consiste de duas barreiras de potencial próximas, interrompendo o fluxo de portadores. Um poço de potencial irá se formar entre elas. Se o afastamento entre as barreiras for suficientemente pequeno, apenas estados de energia discretos estarão presentes. Se elétrons incidentes tiverem energia igual a um destes estados, a probabilidade de transmissão irá aumentar. Adicionando-se um terminal de controle (porta) para mudar o potencial no centro do poço, a probabilidade de tunelamento pode ser alterada, ou seja, a corrente através da barreira dupla pode ser controlada.

Transistor de elétron solitário

O tunelamento eletrônico e a interação colombiana elétron-elétron são dois fenômenos usados pelo transistor de elétron solitário [27, 28]. O tunelamento de um único elétron é observado em estruturas de barreira dupla com uma pequena área de seção transversal. Se a capacitância da estrutura C for pequena o suficiente de tal forma que a energia eletrostática potencial e^2/C exceda a energia térmica $k_B T$, ocorre o tunelamento de elétrons isoladamente, daí a denominação, elétron solitário. Controlando-se a carga entre a barreira pode-se controlar a corrente através do dispositivo e com isto tem-se um transistor. Os níveis discretos de energia nesta estrutura estão espaçados de e^2/C e não são decorrentes de uma quantização espacial da função de onda eletrônica e sim da quantização da carga eletrônica. Esta estrutura requer portanto uma revisão da natureza corpuscular do elétron a que estamos acostumados.

Dispositivos mais complexos que os citados acima podem ser criados usando-se a refração [29] ou a difração [30] de ondas eletrônicas. Estes dispositivos usam uma porta de controle para dividir o sinal de entrada em vários sinais de saída e podem realizar funções complexas, como uma conversão analógico digital.

1.8 Simulação de dispositivos mesoscópicos

Para a maioria esmagadora dos casos é impossível encontrar uma solução analítica para o transporte de corrente em dispositivos mesoscópicos devido a complexidade do transporte quântico. Simulações computacionais são portanto ferramentas essenciais. Mesmo quando se considera a simulação computacional, resolver a equação de Schrödinger completa para todas as partículas em um dispositivo é uma tarefa grande demais para qualquer computador convencional. Aproximações devem ser empregadas para reduzir o problema a um tamanho tratável. A aproximação empregada não deve porém ignorar um fenômeno quântico que é relevante para o dispositivo que se deseja simular. Assim, por exemplo, não se deve utilizar um formalismo que como aproximação ignora a interação colombiana elétron-elétron para tentar simular um transistor de elétron solitário, pois esta interação é um mecanismo fundamental para o funcionamento do mesmo. Quando se está interessado nas propriedades elétricas, os elétrons de condução são a parte relevante do sistema. Uma aproximação

usual, conhecida como aproximação de Hartree, é considerar que os elétrons interagem apenas com o potencial eletrostático médio. Isto faz com que o espalhamento elétron-elétron seja ignorado. Sob este panorama é possível usar a equação de Schrödinger da partícula única e incorporar a interação desse eletrons com os demais dentro da aproximação da massa efetiva para determinar a distribuição dos elétrons. Partindo da função de onda gerada, os coeficientes de transmissão são calculados e a condutância do dispositivo é determinada usando a fórmula de Landauer (Equação 1.15).

O termo da energia potencial na equação de Schrödinger dependerá, no entanto, da distribuição de carga através da equação de Poisson. Como a distribuição de carga depende da solução da equação de Schrödinger, estas equações devem ser resolvidas simultaneamente de maneira auto-consistente. Isto é possível resolvendo-se as equações de maneira iterativa. A distribuição de carga calculada irá ser melhorada gradualmente, se aproximando da distribuição de carga real. Esta técnica tem sido utilizada para guias de ondas infinitamente longos onde é possível reduzir o problema a duas dimensões.

Para resolver a equação de Schrödinger em estruturas arbitrárias têm sido empregados tanto métodos dependentes do tempo, quanto métodos independentes do tempo. Uma solução independente do tempo, onde os auto-estados e as auto-funções são diretamente encontradas, é computacionalmente mais eficiente. Uma solução dependente do tempo, por outro lado, dá uma compreensão extra do fluxo de corrente, isto é, ela permite o acompanhamento de fenômenos transitórios tais como a evolução da mudança de estado de uma chave.

Uma grande variedade de algoritmos tem sido empregada na resolução da equação de Schrödinger para dispositivos quânticos de interferência. Dentre eles, tem-se métodos da função de Green [31], diferenças finitas [32] e elementos finitos [33]. Uma descrição sucinta de alguns métodos de simulação é apresentado na Tabela 1.2. Para uma discussão mais completa a referência [34] é indicada.

1.9 Organização

Essa dissertação está dividida em quatro capítulos:

Tabela 1.2: Métodos de simulação de transporte quântico.

Método	Descrição
Matriz Densidade	Expressa uma superposição incoerente de estados de tal maneira que fases aleatórias não precisem ser mencionadas. É difícil incluir eventos espalhamentos neste formalismo.
Hidrodinâmica Quântica	Mantém todas os aspectos das equações de transporte clássicas e faz algumas correções quânticas.
Função de Wigner	Permite uma descrição dos efeitos quânticos usando uma função definida em um espaço de fase em analogia com que é feito com a função distribuição da mecânica clássica. Ela também é conhecida como função distribuição quântica.
Monte Carlo Quântico	Existe um certo número de variações deste método, mas todas eles caracterizam-se por utilizar passeios aleatórios e a equação de Schrödinger como ponto de partida.
Matriz Espalhamento	Representa a solução da equação de Schrödinger para uma amostra que é conectada a dois guias de ondas semi-infinitos. Os elementos desta matriz descrevem as ondas refletidas e transmitidas pelo dispositivo. De maneira similar podemos definir uma matriz de transmissão de um dispositivo cujos seus elementos relacionam as amplitudes das funções de onda que entram com as que saem do mesmo.
Propagação do Feixe	É um método espectral que foi originalmente desenvolvido para o estudo da propagação da luz na atmosfera e depois foi aplicado a propagação de elétrons.
Função de Green	É um método comum de se resolver equações diferenciais, porém neste caso a equação a ser resolvida é a de Schrödinger. Esta função representa a resposta do sistema a função impulso. Obtendo-se a função de Green pode-se calcular a resposta do sistema a qualquer excitação.
Solução Direta	Geralmente resolve-se diretamente a equação de Schrödinger acoplada com a equação de Poisson.

Capítulo 1, que compreende essa introdução, na qual são apresentadas as noções de mecânica quântica, aspectos da estrutura de bandas em semicondutores, o transporte clássico e quântico, o gás de eletrônico bidimensional, analogias com a óptica, os dispositivos mesoscópicos e as técnicas de simulação encontradas na literatura.

Capítulo 2, onde é abordada a técnica da função de Green, o hamiltoniano “tight-binding” e o algoritmo de MacKinnon.

Capítulo 3, onde é apresentado a interface de entrada do programa de simulação. Iniciando por uma rápida abordagem do formato BMP e logo em seguida é apresentado o programa escrito para converter do formato BMP para matriz.

Capítulo 4, tem-se os principais resultados da simulação do transistor de toco quântico.

Capítulo 5, tem-se as conclusões e propostas para a continuação desse trabalho. No fim deste trabalho, são incluídos os apêndices.

Capítulo 2

Método de Simulação

Para simplificar a análise, será assumido que o potencial dentro do dispositivo é igual a zero e que as fronteiras do mesmo são limitadas por barreiras potenciais altas. Mesmo com estas condições de fronteira simplificadas, a natureza bidimensional do dispositivo faz com que o problema de encontrar a probabilidade total de transmissão, T , do elétron através do dispositivo, seja analiticamente intratável. Para obter a condutância do dispositivo usando a fórmula de Landauer-Büttiker, Equação 1.15, é necessário então usar um método numérico para resolver a equação de Schrödinger. Para isso, a geometria do dispositivo tem que ser descrita usando-se um modelo para o hamiltoniano, por exemplo, o hamiltoniano de acoplamento de curto alcance ou primeiros vizinhos “tight-binding”. Para implementar este modelo, a estrutura mostrada na Figura 1.13 é preenchida com um parâmetro de rede suficientemente denso de periodicidade a . Apesar de ser um modelo discreto, o movimento contínuo pode ser simulado com o modelo “tight-binding” do hamiltoniano, quando o parâmetro de rede, a , é bem menor que todas as outras dimensões do problema. Procedendo desta forma, pode-se razoavelmente esperar descrever corretamente a dinâmica do contínuo, ou seja, o limite termodinâmico. De posse do hamiltoniano do dispositivo, H , a equação de Schrödinger é resolvida utilizando o método da função de Green [35, 36], i.e., a equação a ser resolvida tem a forma $(EI - H)G = I$, onde I é a matriz identidade e G é a função de Green. Para simulações de interesse prático a inversão da matriz $(EI - H)$ requer grandes quantidades de memória e grande capacidade processamento. Para contornar este problema usa-se um método iterativo para o cálculo da função de Green [37]. Neste capítulo serão abordados: a técnica da função

de Green, o hamiltoniano “tight-binding” e o algoritmo de Mackinnon.

2.1 A função de Green

Com a técnica da matriz espalhamento, pode-se calcular a resposta de um guia de ondas, devido a excitação em outro guia de ondas, como mostrado na Figura 2.1. A função de Green [3, 38, 39] é um conceito mais poderoso, pois com essa técnica pode-se calcular a resposta em qualquer ponto (dentro ou fora do dispositivo), devido a excitação em qualquer outro ponto. Para o transporte sem interação, as únicas excitações que temos que nos preocupar são aquelas devidas às ondas incidentes nos guias. Para tais excitações, a função de Green e a matriz espalhamento são conceitos relacionados pelas relações de Fisher-Lee [40]. Portanto, do ponto de vista conceitual, a escolha entre um método e outro é uma questão de gosto. O método de Green, porém, apresenta um custo computacional menor, quando se aplica um método iterativo para o cálculo da mesma. O verdadeiro poder da função de Green fica evidente quando se inclui os efeitos de interação: elétron-elétron ou elétron-fônon. Estas interações ocorrem dentro do dispositivo e não podem ser descritas por matrizes de espalhamento.



Figura 2.1: Dispositivo com geometria arbitrária entre dois guias de onda.

Nas simulações referentes a esse trabalho, os elétrons são considerados isolados, ou seja, é assumido que existem poucos elétrons no dispositivo, de tal forma que o potencial é completamente determinado pelo potencial de confinamento e por potenciais externos aplicados a estrutura. Estes potenciais são determinados pela matriz hamiltoniana de entrada, como será visto mais adiante.

O conceito de função de Green aparece em vários contextos físicos incluindo a teoria dos circuitos, a eletrostática e o eletromagnetismo. Toda vez que a resposta R de um sistemas é relacionada a um excitação S por um operador diferencial D_{op}

$$D_{op}R = S. \quad (2.1)$$

Pode-se definir uma função de Green e expressar a resposta do sistema na forma

$$R = D_{op}^{-1}S = GS, \quad (2.2)$$

onde $G \equiv D_{op}^{-1}$, ou $D_{op}^{-1}G = \underline{1}$. A função de Green é a resposta do sistema a função impulso (delta de Dirac).

O objetivo é obter a função de Green para um dispositivo mesoscópico de geometria arbitrária. Basicamente, é necessário resolver a equação diferencial abaixo:

$$(E - H_{op})G(r, r') = \delta(r - r'), \quad (2.3)$$

onde H_{op} é o operador hamiltoniano. Uma abordagem comum para se resolver equações deste tipo, é discretizar a coordenada espacial de tal forma que a função de Green torna-se um matriz:

$$G(r, r') \rightarrow (i|G|j), \quad (2.4)$$

onde o par i e j denota um ponto qualquer em um reticulado discreto bidimensional. Em outras palavras, escolhe-se uma representação de G em uma base de funções impulso, distribuídas espacialmente em cada sítio (i, j) . A equação diferencial 2.3 toma então a forma de uma equação matricial.

$$(EI - H)G = I, \quad (2.5)$$

onde I é a matriz identidade e H é a representação matricial do operador hamiltoniano H_{op} . Pode-se calcular numericamente G invertendo a matriz $(EI - H)$. Resta então saber como obter uma representação matricial do hamiltoniano H conveniente. A melhor maneira de fazer isso é tentar determinar a matriz H em uma dimensão e depois obtê-la para duas e três dimensões. Nesse trabalho apenas é usado o hamiltoniano bidimensional, porém um hamiltoniano tridimensional também pode ser encontrado.

2.2 O hamiltoniano

A dinâmica dos elétrons dentro do dispositivo é governada pelo hamiltoniano

$$H_{op} = \frac{1}{2m}(i\hbar\nabla + eA)^2 + U(r). \quad (2.6)$$

Nesse trabalho, considera-se o vetor potencial igual a zero ($A = 0$) de tal forma que apenas o potencial eletrostático $U(r)$ irá determinar a dinâmica dos elétrons. Neste potencial está embutido o potencial de confinamento eletrônico, isto é, a geometria do dispositivo, e um potencial externo que pode ser eventualmente aplicado ao dispositivo. Como no método utilizado, assume-se que não há interação, a classe de dispositivos adequada para simulação são os dispositivos quânticos de interferência, pois o principio de funcionamento dos mesmos dependem apenas do confinamento e de um potencial externo aplicado. Dispositivos quânticos de interferência com geometrias mais complexas, como o Mach-Zehnder e o acoplador direcional quântico, são mais difíceis de simular e fabricar, pois é mais difícil de ajustar as suas geometrias para o seu correto funcionamento. O transistor de toco quântico, no entanto, possui uma geometria em T simples que é fácil de reproduzir. Como as características de um dispositivo mesoscópico dependem fortemente de sua geometria, a geometria simples do transistor de toco quântico é um possível fator para colocá-lo em posição de destaque entre os outros dispositivos quânticos de interferência.

2.2.1 O hamiltoniano “tight-binding” unidimensional

Para uma dimensão e considerando o vetor potencial igual a zero ($A = 0$), a Equação 2.6 toma a forma:

$$H_{op} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x), \quad (2.7)$$

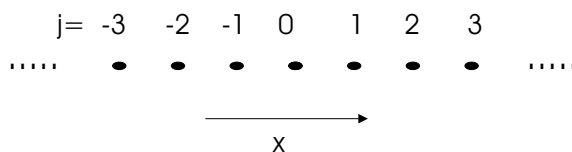


Figura 2.2: Uma cadeia infinita discretizada em um reticulado unidimensional.

Discretizando-se o espaço em uma cadeia unidimensional, como mostrado na Figura 2.2, e aplicando este operador na função de onda ψ , tem-se

$$[H_{op}\psi]_j = \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} \right]_{x=ja} + U_j\psi_j, \quad (2.8)$$

onde $\psi_j \rightarrow \psi(x = ja)$ e $U_j \rightarrow U(x = ja)$. Assumindo que a é pequeno, a derivada primeira pode ser aproximada como

$$\left[\frac{d\Psi}{dx} \right]_{x=(j+\frac{1}{2})a} \simeq \frac{1}{a} [\psi_{j+1} - \psi_j], \quad (2.9)$$

de forma similar a derivada segunda pode ser escrita na forma

$$\left(\frac{d^2\Psi}{dx^2} \right)_{x=ja} \simeq \frac{1}{a} \left\{ \left[\frac{d\Psi}{dx} \right]_{(j+\frac{1}{2})a} - \left[\frac{d\Psi}{dx} \right]_{(j-\frac{1}{2})a} \right\} = \frac{1}{a^2} (\psi_{j+1} - 2\psi_j + \psi_{j-1}). \quad (2.10)$$

Logo a Equação 2.7 é escrita como segue:

$$[H_{op}\psi]_{x=ja} = (U_j + 2t)\psi_j - t\psi_{j-1} - t\psi_{j+1}, \quad (2.11)$$

onde o parâmetro t é dado por

$$t = \frac{\hbar^2}{2ma^2}. \quad (2.12)$$

A Equação 2.11 acima pode ser interpretada como

$$[H_{op}\psi]_{x=ja} = \sum_i H(i, j)\psi_i, \quad (2.13)$$

onde

$$H(i, j) = \begin{cases} U_i + 2t & \text{se } i = j, \\ -t & \text{se } i \text{ e } j \text{ são vizinhos próximos e} \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (2.14)$$

o que corresponde ao modelo “tight-binding” do hamiltoniano unidimensional. Uma cadeia infinita de uma dimensão é portanto representada pela seguinte matriz

$$H = \begin{pmatrix} \ddots & -t & 0 & 0 & 0 \\ -t & U_{-1} + 2t & -t & 0 & 0 \\ 0 & -t & U_0 + 2t & -t & 0 \\ 0 & 0 & -t & U_1 + 2t & -t \\ 0 & 0 & 0 & -t & \ddots \end{pmatrix}. \quad (2.15)$$

A equação de Schrödinger unidimensional independente do tempo pode ser escrita na forma

$$[E - H_{op}]_{x=ja}\psi_{x=ja}(x) = 0. \quad (2.16)$$

Usando o operador hamiltoniano “tight-binding” unidimensional, Equação 2.11, conclui-se que esta equação assume a forma

$$[E - (U_j + 2t)]\psi_j + t\psi_{j-1} + t\psi_{j+1} = 0. \quad (2.17)$$

Fazendo, $U_j + 2t = H_j$ temos

$$[E - H_j]\psi_j + t\psi_{j-1} + t\psi_{j+1} = 0. \quad (2.18)$$

2.2.2 O hamiltoniano “tight-binding” bidimensional

A expressão genérica do hamiltoniano em duas dimensões e para o vetor potencial igual a zero ($A = 0$) é:

$$H_{op} = \frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + U(x, y). \quad (2.19)$$

Novamente, discretizando o espaço, só que desta vez num reticulado bidimensional, como mostrado na Figura 2.3, e aplicando este operador na função de onda ψ , tem-se

$$[H_{op}\psi]_{ij} = \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \right] \psi_{ij} + U_{ij}\psi_{ij}, \quad (2.20)$$

onde $\psi(ij) = \psi(x = ja, y = ia)$ e $U_{ij} = U(x = ja, y = ia)$.

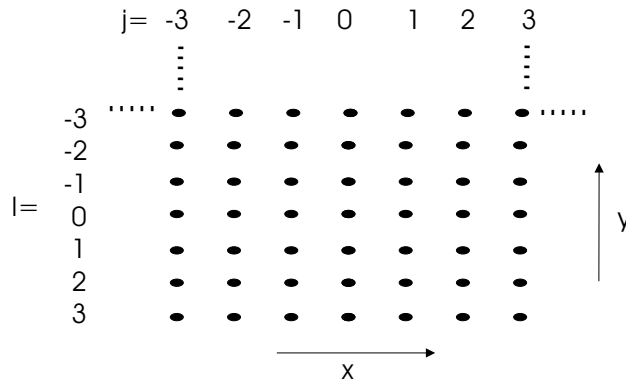


Figura 2.3: Uma cadeia infinita discretizada em um reticulado bidimensional.

Obtem-se que

$$[H_{op}\psi]_{ij} = -[(U_{ij} - 4t)\psi_{ij} + t\psi_{i,j+1} + t\psi_{i+1,j} + t\psi_{i,j-1} + t\psi_{i-1,j}]. \quad (2.21)$$

Assumindo $[H_j\psi]_{ij} = -[(U_{ij}-4t)\psi_{ij}+t\psi_{i+1,j}+t\psi_{i-1,j}]$, pode-se escrever a Equação 2.20 como

$$[H_{op}\psi]_{ij} = [H_j\psi]_{ij} - t\psi_{i,j+1} - t\psi_{i,j-1}. \quad (2.22)$$

Definindo a matriz coluna C_j

$$C_j = \begin{pmatrix} \vdots \\ \psi_{-2j} \\ \psi_{-1j} \\ \psi_{0j} \\ \psi_{1j} \\ \psi_{2j} \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad (2.23)$$

e observando que no operador H_j , o índice j é fixo, a Equação 2.24 pode ser generalizada de forma a relacionar todos os sítios de uma determinada coluna j com os sítios das colunas vizinhas $j + 1$ e $j - 1$, da seguinte maneira

$$[H_{op}\psi]_{ij} = H_j C_j - tC_{j+1} - tC_{j-1}. \quad (2.24)$$

Portanto conclui-se que a equação de Schrödinger bidimensional independente do tempo, $[E - H_{op}]_{ij}\psi_{ij} = 0$, pode ser reescrita na forma

$$(E - H_j)C_j + tC_{j+1} + tC_{j-1} = 0. \quad (2.25)$$

A matriz H_j tem as seguintes elementos:

$$H(i, j') = \begin{cases} U_i + 4t & \text{se } i = j', \\ -t & \text{se } i \text{ e } j' \text{ são vizinhos próximos e} \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (2.26)$$

A representação matricial de H_j é

$$H_j = \begin{pmatrix} \ddots & -t & 0 & 0 & 0 \\ -t & U_{-1} + 4t & -t & 0 & 0 \\ 0 & -t & U_0 + 4t & -t & 0 \\ 0 & 0 & -t & U_1 + 4t & -t \\ 0 & 0 & 0 & -t & \ddots \end{pmatrix}. \quad (2.27)$$

O hamiltoniano bidimensional total H é dado por

$$H = \begin{pmatrix} \ddots & -t & 0 & 0 & 0 \\ -t & H_{-1} & -t & 0 & 0 \\ 0 & -t & H_0 & -t & 0 \\ 0 & 0 & -t & H_1 & -t \\ 0 & 0 & 0 & -t & \ddots \end{pmatrix}. \quad (2.28)$$

2.2.3 O hamiltoniano “tight-binding” tridimensional

Em três dimensões, o hamiltoniano é escrito da forma

$$H_{op} = \frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + U(x, y, z). \quad (2.29)$$

Discretizando-se o espaço num reticulado tridimensional, como mostrado na Figura 2.4, e seguindo o procedimento anterior, isto é, discretizando-se e somando as derivadas parciais obtem-se

$$[H_{op}]_{ijk} = -[(U_{ijk} - 6t)\psi_{i,j,k} + t\psi_{i+1,j,k} + t\psi_{i-1,j,k} + t\psi_{i,j-1,k} + t\psi_{i,j+1,k} + t\psi_{i,j,k+1} + t\psi_{i,j,k-1}]. \quad (2.30)$$

Fazendo $[H]_{jk} = -[(U_{ijk} - 6t)\psi_{i,j,k} + t\psi_{i+1,j,k} + t\psi_{i-1,j,k}]$ e sendo C_j , C_k e C_{jk} as matrizes em que j , k e j e k são fixos respectivamente, obtem-se:

$$[H_{op}\psi]_{ijk} = [H_{jk}C_{j,k}] - tC_{j-1} - tC_{j+1} - tC_{k-1} - tC_{k+1}. \quad (2.31)$$

A equação de Schrödinger independente do tempo tridimensional toma então a forma

$$[E - H_{jk}]C_{j,k} + tC_{j-1} + tC_{j+1} + tC_{k+1} + tC_{k-1} = 0. \quad (2.32)$$

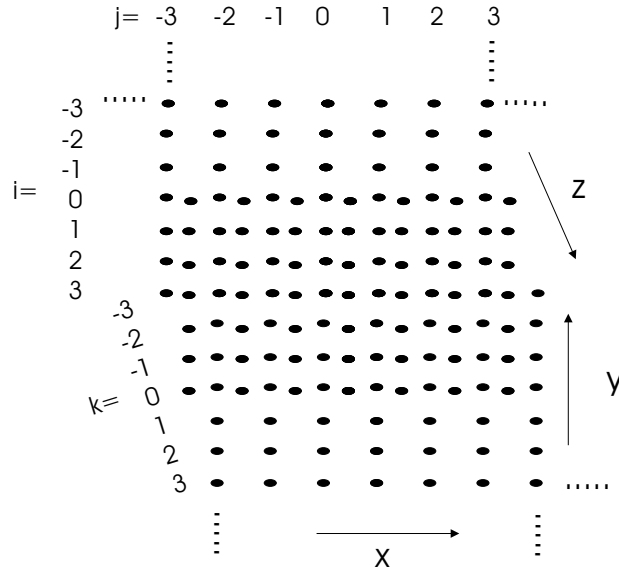


Figura 2.4: Uma cadeia infinita discretizada em um reticulado tridimensional.

Portanto o hamiltoniano total do espaço pode ser particionado em três componentes: o hamiltoniano de uma fatia H_{jk} , o hamiltoniano de um plano H_k e o hamiltoniano total do sólido, H , os quais são descritos por

$$H_{jk} = H(i, j') = \begin{cases} U_i + 6t & \text{se } i = j', \\ -t & \text{se } i \text{ e } j' \text{ são vizinhos próximos e} \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (2.33)$$

Escrevendo em formato matricial, obtém-se:

$$H_{jk} = \begin{pmatrix} \ddots & -t & 0 & 0 & 0 \\ -t & U_{-1} + 6t & -t & 0 & 0 \\ 0 & -t & U_0 + 6t & -t & 0 \\ 0 & 0 & -t & U_1 + 6t & -t \\ 0 & 0 & 0 & -t & \ddots \end{pmatrix}, \quad (2.34)$$

$$H_k = \begin{pmatrix} \ddots & -t & 0 & 0 & 0 \\ -t & H_{-1k} & -t & 0 & 0 \\ 0 & -t & H_{0k} & -t & 0 \\ 0 & 0 & -t & H_{1k} & -t \\ 0 & 0 & 0 & -t & \ddots \end{pmatrix} \quad (2.35)$$

e

$$H = \begin{pmatrix} \ddots & -t & 0 & 0 & 0 \\ -t & H_{-1} & -t & 0 & 0 \\ 0 & -t & H_0 & -t & 0 \\ 0 & 0 & -t & H_1 & -t \\ 0 & 0 & 0 & -t & \ddots \end{pmatrix}. \quad (2.36)$$

2.2.4 Hamiltoniano “tight-binding” generalizado

A matriz hamiltoniana generalizada H_g de uma determinada fatia, para qualquer dimensão, tem como elementos:

$$H_{ij} = \begin{cases} U(r_i) + 2Dt & \text{se } i = j, \\ -\tilde{t}_{ij} & \text{se } i \text{ e } j \text{ são vizinhos próximos,} \\ 0 & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (2.37)$$

onde D é número de dimensões ($D = 1, 2$ e 3 para uma, duas e três dimensões respectivamente) e r_i é o vetor posição para um sítio i da fatia.

Pode-se mostrar que se o vetor potencial for diferente de zero, o fator de acoplamento, \tilde{t}_{ij} , é modificado para

$$\tilde{t}_{ij} = t \exp \left[\frac{ieA \cdot (r_i - r_j)}{\hbar} \right], \quad (2.38)$$

onde, o vetor potencial, A , é avaliado entre os sítios i e j , isto é, em $(r_i - r_j)/2$. Para uma maior discussão da Equação 2.38, veja Feynmann [2].

2.3 O fio ideal

Considerando um fio bidimensional infinitamente longo na direção x e com M sítios na direção y . Se o parâmetro de discretização, a , for muito menor que o comprimento de onda de Fermi, $a \ll \lambda_F$, então pode-se dizer que está sendo simulado um sistema contínuo de largura, $L_{simulado}$, dado por

$$L_{simulado} = L_{fio} + L_{tight-binding} = (M - 1)a + 2a = (M + 1)a \quad (2.39)$$

Nesse modelo “tight-binding”, considera-se o acoplamento ao meio externo nas extremidades do fio. Assumindo que o sistema tem simetria de translação, obtém-se uma equação adicional para se calcular os C_j .

$$C_j = \lambda^j C_0, \quad (2.40)$$

onde, $\lambda = \exp(ika)$ representa o fator de Bloch. As matrizes C_j têm como elementos as amplitudes dos estados da base da célula j consistindo de M sítios.

Substituindo isto na Equação 2.18, escrita em função do hamiltoniano, H_0 , tem-se

$$\begin{aligned} (E - H_0)C_j + tC_j\lambda + tC_{j-1} &= 0 \\ \lambda C_j &= t^{-1}(H_0 - E)C_j - C_{j-1}, \end{aligned} \quad (2.41)$$

o que combinado com,

$$\lambda C_{j-1} = C_j, \quad (2.42)$$

leva a seguinte equação:

$$\begin{pmatrix} C_j \\ C_{j-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t^{-1}(H_0 - E) & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_j \\ C_{j-1} \end{pmatrix}. \quad (2.43)$$

Este problema é resolvido solucionando a equação de autovalores e autovetores da forma $AV = \lambda V$, onde

$$V = \begin{pmatrix} C_j \\ C_{j-1} \end{pmatrix} \quad (2.44)$$

e

$$A = \begin{pmatrix} t^{-1}(H_0 - E) & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.45)$$

Como a matriz do primeiro membro da Equação 2.43 tem $2M$ entradas, a equação característica do sistema $\det(A - \lambda I) = 0$ tem $2M$ autovalores, distintos ou não, e $2M$ autovetores correspondentes a estes autovalores. Além disso, se λ é um autovalor do sistema λ^{-1} também o será, para λ complexo ou real[41]. Tais soluções representam M ondas eletrônicas propagando-se para esquerda e M ondas eletrônicas propagando-se

para direita classificadas de acordo com o critério mostrado abaixo:

$$\lambda \rightarrow \begin{cases} \text{Im}(\lambda)=0 & \begin{cases} \lambda < 1 \rightarrow \text{evanescentes para direita} \\ \lambda < 1 \rightarrow \text{evanescentes para esquerda} \end{cases} \\ \text{Im}(\lambda) \neq 0 & \begin{cases} \text{Im}(\lambda) > 0 \rightarrow \text{propagando para direita} \\ \text{Im}(\lambda) < 0 \rightarrow \text{propagando para esquerda} \end{cases} \end{cases} . \quad (2.46)$$

Seja $u_1(-), \dots, u_M(-)$ as soluções que propagam para esquerda de C_0 correspondentes a $\lambda_1(-), \dots, \lambda_M(-)$ e $u_1(+), \dots, u_M(+)$ as soluções que propagam para direita de C_0 correspondentes a $\lambda_1(+), \dots, \lambda_M(+)$. Definindo

$$U(\pm) = (u_1(\pm), \dots, u_M(\pm)) \quad (2.47)$$

e

$$\Lambda(\pm) = \begin{pmatrix} \lambda_1(\pm) & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_M(\pm) \end{pmatrix} , \quad (2.48)$$

como $U(\pm)$ são auto-vetores, qualquer solução para direita ou para esquerda, em $j = 0$, assume o formato

$$C_0(\pm) = U(\pm)C(\pm), \quad (2.49)$$

onde $C(\pm)$ é um vetor apropriado consistindo de coeficientes de expansão. Como apenas a fase muda na direção x , para um j genérico obtem-se

$$C_j(\pm) = U(\pm)\Lambda(\pm)^j C(\pm) \quad (2.50)$$

Escrevendo

$$C_j(\pm) = U(\pm)\Lambda(\pm)^{j-j'}\Lambda(\pm)^{j'}C(\pm), \quad (2.51)$$

mas

$$C_{j'}(\pm) = U(\pm)\Lambda(\pm)^{j'}C(\pm), \quad (2.52)$$

multiplicando esta expressão a esquerda por $U(\pm)^{-1}$ tem-se

$$\begin{aligned} U(\pm)^{-1}C_{j'}(\pm) &= U(\pm)^{-1}U(\pm)\Lambda(\pm)^{j'}C(\pm) \\ U(\pm)^{-1}C_{j'}(\pm) &= \Lambda(\pm)^{j'}C(\pm). \end{aligned} \quad (2.53)$$

Pondo isso na Equação 2.51

$$C_j(\pm) = U(\pm)\Lambda(\pm)^{j-j'}U(\pm)^{-1}C_{j'}(\pm), \quad (2.54)$$

o que pode ser escrito como

$$C_j(\pm) = (U(\pm)\Lambda(\pm)U(\pm)^{-1})^{j-j'}C_{j'}(\pm), \quad (2.55)$$

fazendo $F(\pm) = U(\pm)\Lambda(\pm)U(\pm)^{-1}$, conclui-se que

$$C_j(\pm) = F(\pm)^{j-j'}C_{j'}(\pm). \quad (2.56)$$

portanto, se não houver espalhamento o problema está resolvido.

2.4 O problema do espalhamento

Considere agora o problema mais geral do espalhamento para um fio finito na direção x , dividido em N fatias ou células. Assumindo que para $j \leq 0$ e $j > N$ tem-se reservatórios perfeitos, primeiro, separa-se as amplitudes de C_0 na célula 0 em ondas incidentes à direita e ondas refletidas para esquerda

$$C_0(\pm) = C_0(+) + C_0(-). \quad (2.57)$$

Usando a Equação 2.56, a amplitude na célula -1 é escrita como

$$\begin{aligned} C_{-1} &= F(+)^{-1}C_0(+) + F(+)^{-1}C_0(-) \\ C_{-1} &= F(-)^{-1}[C_0 - C_0(+)] + F(+)^{-1}C_0(-) \\ C_{-1} &= F(-)^{-1}C_0 + [F(+)^{-1} - F(-)^{-1}]C_0. \end{aligned} \quad (2.58)$$

Pondo isso na Equação 2.25, obtem-se a equação do movimento na célula 0

$$\{E - (H_0 - tF(-)^{-1})\} C_0 + t[F(+)^{-1} - F(-)^{-1}]C_0(+) + tC_1 = 0. \quad (2.59)$$

Fazendo $\tilde{H}_0 = H_0 - tF(-)^{-1}$, tem-se

$$(E - \tilde{H}_0) C_0 + tC_1 = -t[F(+)^{-1} - F(-)^{-1}]C_0(+). \quad (2.60)$$

Por outro lado na célula $N + 1$, tem-se apenas ondas se propagando para direita, portanto

$$C_{N+2} = F(+)C_{N+1}, \quad (2.61)$$

Logo, a equação do movimento na célula $N + 1$ torna-se

$$\begin{aligned} (E - H_{N+1})C_{N+1} + tC_N + tC_{N+2} &= 0 \\ (E - H_{N+1})C_{N+1} + tC_N + tF(+)C_{N+1} &= 0, \end{aligned} \quad (2.62)$$

fazendo $\tilde{H}_{N+1} = H_{N+1} - tF(+)$ chega-se a

$$(E - \tilde{H}_{N+1})C_{N+1} + tC_N = 0. \quad (2.63)$$

O objetivo é obter a relação funcional $C_{N+1} = f(C_0)$. Para tal fim, usa-se o conceito de função de Green, escrevendo

$$\begin{aligned} (E - \tilde{H})G &= 1 \\ G &= (E - \tilde{H})^{-1}, \end{aligned} \quad (2.64)$$

onde

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} H_0 & -t & \dots & 0 & 0 \\ -t & . & -t & \dots & 0 \\ . & -t & . & -t & \dots \\ . & 0 & -t & . & -t \\ . & 0 & 0 & -t & \tilde{H}_{N+1} \end{pmatrix}. \quad (2.65)$$

Definindo a matriz excitação

$$S = \begin{pmatrix} s_0 \\ s_1 \\ s_2 \\ s_3 \\ \vdots \\ s_{N+1} \end{pmatrix}, \quad (2.66)$$

onde s_n é a excitação na célula n . A relação entre os valores de C_j e os da função de Green obedece a seguinte relação matricial

$$\begin{pmatrix} C_0 \\ C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ \vdots \\ C_{N+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (0|G|0) & \dots & (0|G|N+1) \\ (1|G|0) & \dots & . \\ (2|G|0) & \dots & . \\ (3|G|0) & \dots & . \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ (N+1|G|0) & \dots & (N+1|G|N+1) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_0 \\ s_1 \\ s_2 \\ s_3 \\ \vdots \\ s_{N+1} \end{pmatrix}. \quad (2.67)$$

Olhando para a Equação 2.60, conclui-se que a excitação na célula zero é dada por $s_0 = -t[F(+)^{-1} - F(-)^{-1}]C_0(+)$. Como as demais células não sofrem excitação externa, tem-se $s_1 = s_2 \dots = s_{n+1} = 0$. Olhando para a Equação 2.67 e levando em conta que na célula $N + 1$ só existem ondas propagando-se para direita, tem-se

$$C_{N+1}(+) = C_{N+1} = -t(N + 1|G|0)[F(+)^{-1} - F(-)^{-1}]C_0(+). \quad (2.68)$$

Similarmente

$$\begin{aligned} C_0(-) &= C_0 - C_0(+) \\ C_0 &= \{-t(0|G|0)[F^{-1}(+) - F^{-1}(-)] - 1\}C_0. \end{aligned} \quad (2.69)$$

De acordo com a Equação 2.49, pode-se escrever

$$C_{N+1} = C'_{N+1}U(+), \quad (2.70)$$

onde C'_{N+1} é um vetor consistindo de coeficientes de expansão em canais de condução distintos, ou seja, $C'_{N+1} = (C'_{N+1}{}^\nu \dots C'_{N+1}{}^\mu)$. De maneira análoga,

$$C_0 = C'_0U(+), \quad (2.71)$$

onde $C'_0 = (C'_0{}^\nu \dots C'_0{}^\mu)$. Portanto a Equação 2.68, pode ser escrita na forma

$$\begin{aligned} C'_{N+1}U(+) &= -t(N + 1|G|0)[F(+)^{-1} - F(-)^{-1}]C'_0U(+) \\ \frac{C'_{N+1}}{C'_0(+)} &= -tU^{-1}(+)(N + 1|G|0)[F(+)^{-1} - F(-)^{-1}]U(+), \end{aligned} \quad (2.72)$$

Fazendo $t'_{\mu\nu} = C'_{N+1}{}^\mu/C'_0{}^\nu$, tem-se

$$t'_{\mu\nu} = \{-tU^{-1}(+)(N + 1|G|0)[F(+)^{-1} - F(-)^{-1}]U(+)\}_{\mu\nu}. \quad (2.73)$$

A corrente associada a uma onda espalhada é proporcional ao quadrado da função de onda multiplicada pela velocidade, então pode-se escrever $t'_{\mu\nu} = \sqrt{v_\nu/v_\mu} t_{\mu\nu}$. Portanto, o coeficiente de transmissão $t_{\mu\nu}$ para uma onda incidente no canal ν com velocidade v_ν e uma onda de saída no canal μ com velocidade v_μ é

$$t_{\mu\nu} = \sqrt{\frac{v_\mu}{v_\nu}} \{-tU^{-1}(+)(N + 1|G|0)[F(+)^{-1} - F(-)^{-1}]U(+)\}_{\mu\nu}. \quad (2.74)$$

Analogamente, pode-se mostrar que o coeficiente de reflexão para um canal incidente ν e um canal de saída μ é

$$r_{\mu\nu} = \sqrt{\frac{v_\mu}{v_\nu}} (U^{-1}(-) \{-t(0|G|0)[F^{-1}(+) - F^{-1}(-)] - 1\} U^{-1}(+))_{\mu\nu} \quad (2.75)$$

Em termos do coeficiente de transmissão $t_{\mu\nu}$, a condutância é dada pela versão multicanal da formula de Landauer (Equação 1.15).

2.5 Método iterativo

O reticulado que descreve o dispositivo pode ser dividido em fatias e cada fatia pode ser associada a um número inteiro. Encontrando-se uma lei recursiva do tipo $G^{L+1} = f(G^L)$, onde L denota o número de fatias da parte do sistema cuja função de Green já é conhecida, como mostrado na Figura 2.5. A função de Green G do sistema pode ser avaliada a cada adição de uma nova fatia. Para obter esta lei recursiva, utiliza-se a equação de Dyson

$$G = G_0 + G_0 V G, \quad (2.76)$$

onde V é um potencial de perturbação. No caso particular em estudo, a perturbação é fruto da adição de uma nova fatia ao sistema. Buscando uma relação entre V e G^L , é possível encontrar a lei recursiva desejada. Calculando a função de Green de maneira iterativa, ao invés de inverter a matriz $(EI - \tilde{H})^{-1}$, diminui-se o custo computacional do algoritmo de $(M \times N)^2$ para $(M \times N)$, onde M e N são a largura e comprimento do sistema expressos em número de sítios respectivamente.

Considerando um conjunto de N fatias e usando a notação de Dirac, o hamiltoniano “tight-binding” toma a forma

$$H_N = \sum_{ij} \tilde{H}_{ij} |i\rangle \langle j|, \quad (2.77)$$

onde $\tilde{H}_{ij} \neq 0$ apenas se i e j são vizinhos próximos e $\tilde{H}_{ii} \neq 0$. Se adicionarmos uma nova fatia, tem-se

$$H_{N+1} = H_N + \tilde{H}_{N,N+1} |N\rangle \langle N+1| + \tilde{H}_{N+1,N} |N+1\rangle \langle N| + \tilde{H}_{N+1,N+1} |N+1\rangle \langle N+1|, \quad (2.78)$$

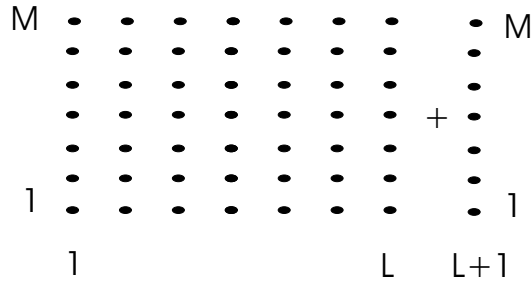


Figura 2.5: Visão esquemática do procedimento iterativo para o cálculo da função de Green G do sistema. A função de Green G^{L+1} relativa ao sistema de tamanho $(L+1) \cdot M$ relaciona-se a função de Green G^L relativa ao sistema de tamanho $L \cdot M$ através de uma lei recursiva $G^{L+1} = f(G^L)$.

ou ainda,

$$H_{N+1} = H_N + V_N |N \rangle \langle N+1| + V_N^\dagger |N+1 \rangle \langle N| + \tilde{H}_{N+1}^0 |N+1 \rangle \langle N+1|, \quad (2.79)$$

onde $V_N = \tilde{H}_{N,N+1}$, $\tilde{H}_{N+1}^0 = \tilde{H}_{N+1,N+1}$ e $V_N^\dagger = \tilde{H}_{N+1,N}$.

Usando também a notação de Dirac para expressar função de Green

$$g_N = \sum_{ij} (i|G^N|j)|i \rangle \langle j|. \quad (2.80)$$

Por definição tem-se

$$(E1_N - H_N)g_N = 1_N, \quad (2.81)$$

onde $1_N \equiv \sum_i I|i \rangle \langle i|$.

Nota-se que

$$\begin{aligned} \sum_k \langle i|E1_N - H_N|k \rangle \langle k|g_N|j \rangle &= I\delta_{ij} \\ \sum_k (EI\delta_{ik} - \tilde{H}_{ik})(k|G^N|j) &= I\delta_{ij}. \end{aligned} \quad (2.82)$$

Pode-se decompor o hamiltoniano adicionado de uma fatia H_{N+1} da Equação 2.79 em uma parcela sem acoplamento com a fatia adicionada H_{N+1}^0 , isto é, com $V_N = 0$, e outra devido ao acoplamento com a fatia adicionada H_{N+1}^1 , isto é, uma parcela devido a perturbação, de tal forma que o Hamiltoniano total é:

$$H_{N+1} = H_{N+1}^0 + H_{N+1}^1 \quad (2.83)$$

A representação matricial de H_{N+1}^0 é

$$H_{N+1}^0 = \begin{pmatrix} H_N & 0 \\ 0 & \tilde{H}_{N+1}^0 \end{pmatrix}, \quad (2.84)$$

o que substituindo na equação abaixo.

$$(E1_N - H_{N+1}^0)g_{N+1}^0 = 1_{N+1} \quad (2.85)$$

resulta no sistema

$$\begin{pmatrix} E - H_N & 0 \\ 0 & E - \tilde{H}_{N+1}^0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_N^{(N+1)(0)} & F_1^{(N+1)(0)} \\ F_2^{(N+1)(0)} & (N+1|G^{(N+1)(0)}|N+1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.86)$$

que tem como solução $F_1^{(N+1)(0)} = F_2^{(N+1)(0)} = 0$, $g_N^{(N+1)(0)} = g_N$, $(N+1|G^{(N+1)(0)}|N+1) = (E - \tilde{H}_{N+1}^0)^{-1}$, $(i|G^{(N+1)(0)}|j) = (i|G^{(N)}|j)$ para $i, j = 1 \dots N$, $(i|G^{(N+1)(0)}|N+1) = (N+1|G^{(N)}|i) = 0$ para $i, j = 1 \dots N$.

Usando a equação de Dyson (Equação 2.76), pode-se concluir que a função de Green obedece a seguinte relação

$$g_{N+1} = g_{N+1}^0 + g_{N+1}^0 H_{N+1}^1 g_{N+1}. \quad (2.87)$$

Aplicando $\langle N+1|$ à esquerda e $|N+1\rangle$ à direita, tem-se

$$\begin{aligned} (N+1|G^{N+1}|N+1) &= (N+1|G^{(N+1)(0)}|N+1) + \\ & (N+1|G^{(N+1)(0)}|N+1)V_N^\dagger(N|G^{(N+1)}|N+1), \end{aligned} \quad (2.88)$$

Aplicando $\langle N|$ à esquerda e $|N+1\rangle$ à direita na Equação 2.87

$$\begin{aligned} (N|G^{(N+1)}|N+1) &= (N|G^{(N+1)(0)}|N)V_N(N+1|G^{(N+1)}|N+1) \\ &= (N|G^{(N)}|N)V_N(N+1|G^{(N+1)}|N+1) \end{aligned} \quad (2.89)$$

Da solução da Equação 2.86, sabe-se que $(N|G^{(N+1)(0)}|N+1) = 0$. Logo, tem-se

$$\begin{aligned} (N+1|G^{(N+1)}|N+1) &= (N+1|G^{(N+1)(0)}|N+1)[1 + \\ & V_N^\dagger(N|G^{(N)}|N)V_N(N+1|G^{(N+1)}|N+1)]. \end{aligned} \quad (2.90)$$

O termo $V_N^\dagger(N|G^{(N)}|N)V_N$ corresponde a uma perturbação devido a adição de uma nova fatia, ou seja, ele representa H_{N+1}^1 . Da definição de função de Green conclui-se que:

$$[(N+1|G^{(N+1)}|N+1)]^{-1} = (E - \tilde{H}_{N+1}^0 - V_N^\dagger(N|G^{(N)}|N)V_N), \quad (2.91)$$

Fazendo $N = j$ e lembrando que $V_N = \tilde{H}_{N,N+1}$ e $\tilde{H}_{N+1}^0 = \tilde{H}_{N+1,N+1}$ tem-se

$$[(j+1|G^{(j+1)}|j+1)]^{-1} = (E - \tilde{H}_{j+1,j+1} - \tilde{H}_{j+1,j}(j|G^{(j)}|j)\tilde{H}_{j,j+1}). \quad (2.92)$$

Aplicando os operadores $\langle N+1|$ e $|j'\rangle$ na Equação 2.87 e lembrando que $(N+1|G^{(N+1)(0)}|j') = 0$

$$(N+1|G^{(N+1)}|j') = (N+1|G^{N+1}|N+1)V_N^\dagger(N|G^N|j'), \quad (2.93)$$

fazendo $N = j$, $j' = 0$ e lembrando que $V_N^\dagger = \tilde{H}_{N+1,N}$

$$(j+1|G^{(j+1)}|0) = (j+1|G^{(j+1)}|j+1)\tilde{H}_{j+1,j}(j|G^{(j)}|0). \quad (2.94)$$

Usando a condição inicial $(0|G^{(0)}|0) = (EI - \tilde{H}_0)^{-1}$ e as Equações 2.92 e 2.94, a função de Green total do sistema $(N+1|G|0)$, necessária para o cálculo do coeficiente de transmissão $t_{\mu\nu}$ na Equação 2.74, pode ser calculada de maneira iterativa, como desejado.

2.6 Implementação Computacional

O algoritmo de cálculo foi implementado com sucesso [42] utilizando o aplicativo MATLAB [44]. Os passos são como segue:

1. Lê a geometria do dispositivo usando a interface entrada;
2. Inicializa os parâmetros de simulação (os valores do fator de acoplamento t , da energia incidente e da voltagem inicial);
3. Calcula a matriz da função de Green;

(a) enquanto $E \leq E_{min}$ (E é uma grandeza que se deseja variar, pode ser a energia incidente ou uma voltagem aplicada ao dispositivo)

- (b) $fatia = 1$;
- (c) calcula $\langle 0|G^{(0)}|0\rangle$;
- (d) $fatia = 2$;
- (e) enquanto $fatia < N$
- (f) calcula $\langle fatia + 1|G^{(fatia+1)}|0\rangle$;
- (g) $fatia = fatia + 1$;
- (h) fim
- (i) $fatia = N$;
- (j) calcula $\langle N + 1|G^{(N+1)}|0\rangle$;
- (k) calcula a condutância;
- (l) $E = E + passo$;
- (m) fim

4. Traça o gráfico da função $g = f(E)$.

Capítulo 3

Interface de Entrada

Como foi apresentado no capítulo anterior, a geometria do dispositivo precisa ser transformada em uma matriz para que a simulação possa ser realizada. Com a finalidade de facilitar e tornar mais intuitiva a entrada de dados, foi desenvolvida uma interface para conversão da geometria em matriz [45]. Para não ter que desenvolver todo um ambiente de interface gráfica, optou-se por se utilizar um programa de desenho, i.e., o dispositivo é desenhado usando-se um programa já existente, tais como: *Paint*[®] do *Microsoft Windows*[®], *Gimp* [46] do *Linux*, etc; o desenho é salvo no formato mapeado a bit, BMP. O programa desenvolvido gera a matriz hamiltoniana de entrada que descreve o dispositivo.

A geometria do nanodispositivo é definida pela energia potencial de confinamento do elétron. Como foi visto no capítulo anterior, este potencial é utilizado na construção do hamiltoniano de entrada do dispositivo. Pode-se estabelecer uma relação entre a geometria do dispositivo e a energia potencial que descreve o mesmo da seguinte forma: um potencial infinito significa que o elétron tem probabilidade zero de ser encontrado nesta região.

3.1 Formato BMP

O formato BMP [47] é composto de quatro estruturas: o cabeçalho de arquivo, o cabeçalho de imagem, a tabela de cor e os dados de pixel. Estas estruturas estão dispostas na ordem mostrada na Figura 3.1 e são descritas à seguir.



Figura 3.1: Estrutura geral do formato BMP

3.1.1 Cabeçalho do arquivo BMP

Todo arquivo BMP começa com uma estrutura *BITMAPFILEHEADER*, ou cabeçalho do arquivo, cujos campos são mostrados na Tabela 3.1. A função principal desta estrutura é servir como uma assinatura que identifica o formato do arquivo. Três checagens podem ser feitas para garantir que o arquivo que está sendo lido, é de fato um arquivo BMP:

- Os primeiros dois bytes do arquivo deve conter o caracter ASCII “B” seguido de “M”;
- Se no sistema de arquivos sendo utilizado é possível determinar o tamanho exato do arquivo em bytes, pode-se comparar o tamanho do arquivo com o valor no campo *bfsize*;
- Os campos *bfReserved1* e *bfReserved2* devem ser zero.

O cabeçalho do arquivo também especifica a localização dos dados de pixel no arquivo. Quando se está decodificando um arquivo BMP deve-se usar o campo *bfOffbits* para determinar o “offset” do começo do arquivo até onde os dados de pixel começam. A maioria dos aplicativos gráficos geram arquivos BMP com os dados de pixel imediatamente após a estrutura *BITMAPINFOHEADER* ou da tabela de cor, se ela estiver presente. Algumas aplicativos, porém, põem bytes adicionais entre essas

Tabela 3.1: Estrutura *BITMAPFILEHEADER*.

Nome do Campo	Tamanho em bytes	Descrição
<i>bfType</i>	2	Contém o carácter "BM" que identifica o tipo de arquivo
<i>bfsz</i>	4	Tamanho do arquivo
<i>bfReserved1</i>	2	Sem uso
<i>bfReserved2</i>	2	Sem uso
<i>bfOffbits</i>	4	<i>Offset</i> para começar dados de pixel

estruturas e as dos dados de pixel. Fazendo-se uso do campo *bfOffbits* evita-se este tipo de ambigüidade.

3.1.2 Cabeçalho da imagem

O cabeçalho de imagem, ou estrutura *BITMAPINFOHEADER*, segue imediatamente após a estrutura *BITMAPFILEHEADER* e os seus campos são mostrados na Tabela 3.2. Esta estrutura dá as dimensões da imagem e quantos bits são usados por pixel, além disso ela informa se o arquivo apresenta algum tipo de compressão de dados e qual o tipo de compressão usado.

A altura da imagem em geral é um valor sem sinal. A utilização de um valor negativo para o campo *biHeight* especifica que os dados de pixel estão ordenados de cima para baixo e não de baixo para cima, como é o usual. Imagens com um valor *biHeight* negativo não podem sofrer compressão.

3.1.3 Tabela de cor

A tabela de cor segue imediatamente após o cabeçalho de imagem. Quando o número de bits por pixel é 1, 4 ou 8 (valor do campo *biBitCount* do cabeçalho de imagem) a tabela de cor consiste de um mapa de cores, onde cada entrada no mapa é uma

Tabela 3.2: Estrutura *BITMAPINFOHEADER*

Nome do Campo	Tamanho em bytes	Descrição
<i>biSize</i>	4	O tamanho do cabeçalho deve ser 40
<i>biWidth</i>	4	Largura da imagem
<i>biHeight</i>	4	Altura da imagem
<i>biPlanes</i>	2	Deve ser 1
<i>biBitCount</i>	2	Número de bits por pixel
<i>biCompression</i>	4	Tipo de compressão usada
<i>biSizeImage</i>	4	Deve ser 0 se não houver compressão
<i>biXPelsPerMeter</i>	4	Resolução preferencial em bits por metros
<i>biYPelsPerMeter</i>	4	Resolução preferencial em bits por metros
<i>biClrUsed</i>	4	Número de entradas na tabela de cor que são de fato usadas
<i>biClrImportant</i>	4	Número de cores significativas

Tabela 3.3: Estrutura *RGBQUAD*

Nome do Campo	Tamanho em bytes	Descrição
<i>rgbBlue</i>	1	Valor da cor azul
<i>rgbGreen</i>	1	Valor da cor verde
<i>rgbRed</i>	1	Valor da cor vermelha
<i>rgbReserverd</i>	1	Deve ser zero

estrutura *RGBQUAD* (veja a Tabela 3.3). A estrutura *RGBQUAD* contém os valores RGB das cores utilizadas no arquivo. O número máximo de cores possíveis de um formato específico é dado por $2^{biBitCount}$, que é igual ao número máximo de estruturas *RGBQUAD* presentes no mapa de cores.

Um arquivo BMP com *8bits* por pixel tem no máximo 256 entradas no mapa de cores e cada byte de dados de pixel é um índice referente ao mapa de cores. Um arquivo BMP com *4bits* por pixel tem no máximo 16 entradas no mapa de cores e cada byte de dados de pixel possui dois índices do mapa de cores para dois pixels contínuos. Um arquivo BMP com *1bit* por pixel (monocromático) possui apenas duas entradas no mapa de cores e cada byte de dados de pixel contém 8 índices do mapa de cores para 8 pixels contínuos, isto é, cada bit representa um pixel. Um arquivo BMP com *24bits* por pixel não requer mapa de cores e cada conjunto de três bytes dá diretamente o valor RGB do pixel.

Arquivos BMP com 4 e *8bits* por pixel podem sofrer compressão, enquanto arquivos monocromáticos não. O tipo de compressão usada por arquivos BMP é o RLE (“*Run Length Encoded*”). Ao invés de armazenar um valor para cada pixel o RLE armazena um número, N , seguido de um índice. Isto significa que os próximos N pixels possuem a cor do índice.

3.1.4 Dados de pixel

Os dados de pixel são os dados da imagem em si e se encontram logo depois da tabela de cor, se ela estiver presente. Caso esta estrutura não estiver presente, os dados de pixel vêm imediatamente após a estrutura *BITMAPINFOHEADER*.

As linhas de dados de pixel são ordenadas no arquivo de baixo para cima. O número de linhas de dados de pixel é dado pela campo *biHeight* no cabeçalho de imagem. As linhas de pixel são armazenadas como múltiplos de *4bytes*.

No caso de um BMP monocromático, cada bit dos dados de pixel representa um pixel, como já vimos. Se o bit não está marcado, o pixel é mostrado como a primeira entrada do mapa de cores, o que equivale a cor preta. Se o bit estiver marcado, o pixel tem a cor da segunda entrada na tabela de cor, o que equivale a cor branca.

3.2 Interface para geração da matriz

A interface para geração da matriz hamiltoniana foi escrita utilizando-se a linguagem de programação C [48]. O algoritmo começa descartando os primeiros *18bytes* do arquivo BMP e lendo os próximos *4bytes*. Estes bytes são adicionados para formar uma variável única que representa a largura da imagem. O processo é repetido com os próximos quatro bytes para que se obtenha a altura da imagem. De posse da largura da imagem, o algoritmo calcula o comprimento da linha dos dados de pixel. Como já foi dito, essas linhas são armazenadas em arquivos BMP, como um múltiplo de quatro bytes. Nesse cálculo, o algoritmo divide a largura da imagem por 32 (número de bits de *4bytes*) e arredonda a largura da imagem dividida para o múltiplo de quatro bytes mais próximo e maior que o número calculado. Já com o tamanho das linhas de dados de pixel, o algoritmo vai para o byte 62 e começa a ler os dados de pixel. Para endereçar cada bit individualmente uma máscara foi implementada, pois é possível apenas endereçar bytes diretamente. As informações dos pixels lidos são então armazenadas em uma matriz auxiliar. O próximo passo é mapear a matriz auxiliar em uma matriz final. A matriz final descarta os elementos das linhas de dados de pixel maiores que a largura da imagem, para compensar os possíveis bits extras adicionados no formato de arquivo BMP. Os passos do algoritmo são resumidos a seguir:

1. Lê a largura da imagem;
2. Lê a altura da imagem;
3. Computa o tamanho da linha dos dados de pixel;
4. Lê os dados de pixel;
5. Constrói a matriz auxiliar;
6. Constrói a matriz final;
7. Chama o algoritmo de cálculo;
8. Fim.

Como exemplo considere o anel de Aharonov-Bohm mostrado na Figura 3.2 salvo em formato BMP monocromático. O resultado do processamento pela a interface de entrada é mostrado na Figura 3.3.



Figura 3.2: Figura BMP de um Anel Aharonov-Bohm usada como entrada para a interface de conversão.

Pode-se então considerar que o potencial de confinamento tem apenas dois valores, $V = 1$ e $V = 0$. Representado no arquivo BMP por duas cores: branca e preta. O formato BMP monocromático é escolhido, devido a relação direta que existe entre os pontos de imagem representando o dispositivo e o arquivo de imagem.

3.3 Múltiplos níveis de potencial

Apesar da interface de entrada ser apenas capaz de gerar matrizes com dois níveis de potencial, 0 ou 1, também é possível gerar matrizes com múltiplos níveis de potencial

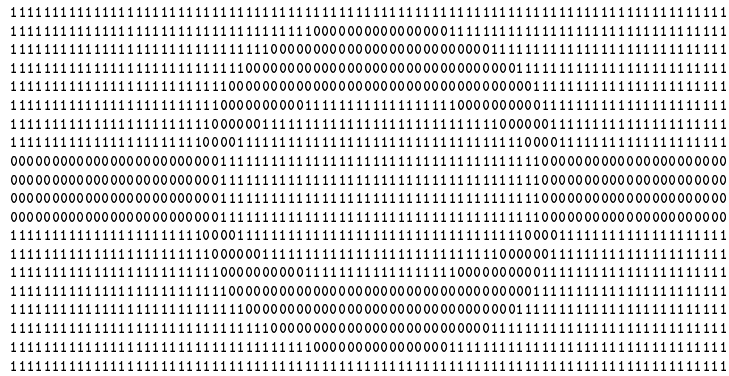


Figura 3.3: Anel de Aharonov-Bohm após ser processado pela interface de conversão.

fazendo uso de figuras auxiliares. Suponha que se quer associar às cores: preta, cinza claro e cinza escuro, da figura base mostrada na Figura 4.3(a), os níveis de potencial 0, 0,5 e 1, respectivamente. Para isso pinta-se a figura base de preto nas regiões cinza claro, e de branco nas regiões cinza escuro. Convertendo-se assim o arquivo em dois arquivos monocromáticos. Processa-se a figura auxiliar 1, com a interface de conversão, gerando a matriz auxiliar 1. Partindo novamente da figura base, pinta-se as regiões cinza escuro de preto e as regiões cinza claro de branco. Converte-se o arquivo resultante para o formato monocromático. Processa-se a figura auxiliar 2, com a interface de conversão. Multiplicando-se a matriz de saída por 0,5, gera-se assim a matriz auxiliar 2. Somando a matriz auxiliar 1 com a matriz auxiliar 2 temos a matriz final com três níveis de potencial, como desejado. Seguindo esse procedimento, pode-se, então, gerar vários níveis de potencial aumentando o número de cores da figura base.

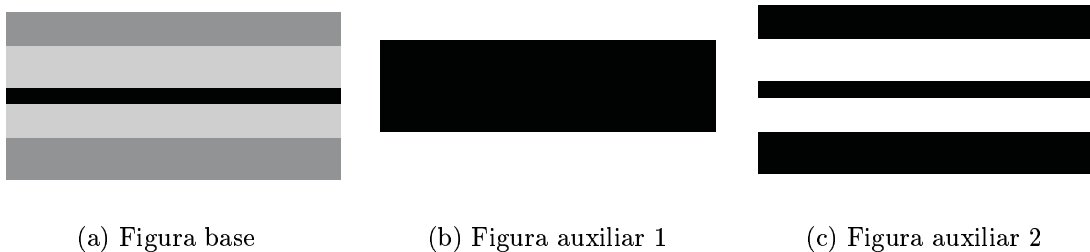


Figura 3.4: Figuras utilizadas na geração de 3 níveis de potencial distintos

Em um desenvolvimento futuro, pode-se utilizar o arquivo BMP de 24bits, evitando esse tipo de artifício.

Capítulo 4

Resultados

Neste capítulo são apresentados os resultados das simulações realizadas. Inicialmente é discutida a aproximação para baixas temperaturas, para em seguida apresentar resultados de simulação de diversos fios quânticos, até chegar ao transistor de teco quântico.

4.1 Aproximação para baixas temperaturas

A fórmula de Landauer, Equação 1.15, desconsidera o efeito térmico, sendo assim, ela é exata apenas no zero absoluto ($0K$). No entanto, pode-se considerar que o zero absoluto é uma boa aproximação para dispositivos onde a energia térmica $k_B T$ é menor que o espaçamento entre os níveis discretos de energia, ΔE . Este fato é levado em consideração no dimensionamento da largura do dispositivo. Como foi apresentado na Equação 2.39, uma estrutura com $P_W = M$ sítios na direção y representa um fio de largura $M - 1$. Portanto, a relação entre a largura física do fio, W , e a largura do fio em pixels, P_W , utilizada na interface de entrada, pode ser escrita da forma:

$$W = (P_W + 1)a. \quad (4.1)$$

No programa desenvolvido [42], as amplitudes das funções de onda espalhadas são invariantes para qualquer das seguintes regras de transformação:

- (i) $\lambda' = \eta\lambda$ e $L' = \eta L$, onde λ representa os comprimentos de onda envolvidos no problema, enquanto L representa as dimensões que definem a estrutura ge-

ométrica do dispositivo. Para uma massa efetiva fixa m^* , esta transformação também requer a mudança de todas as energias do problema de acordo com a regra $E' = E/\eta^2$.

- (ii) $m^{*'} = \eta m^*$ e $E' = E/\eta$. Esta transformação deixa os comprimentos de onda inalterados.

Portanto, os resultados numéricos apresentados nesta dissertação podem ser aplicados a estruturas com outras dimensões e massas efetivas. Tanto a energia quanto a condutância, quando expressos no MKS, são números tão pequenos que vão além da precisão do computador utilizado. Para contornar esse problema, o programa utiliza unidades normalizadas. A energia de Fermi, E_F é a unidade de energia e $2e^2/h$ é a unidade de condutância. Conseqüentemente, o fator de acoplamento t da Equação 2.12 deve ser expresso em função de E_F , para que ele seja uma função do parâmetro de normalização utilizado. Como $m = \hbar^2/(2\lambda_F^2 E_F)$, o fator de acoplamento t pode ser escrito como:

$$t = E_F \left(\frac{1}{2\pi} \right)^2 \left(\frac{\lambda_F}{a} \right)^2. \quad (4.2)$$

Nas simulações em que a tensão da porta, V_P , é alterada, considera-se que ela decai linearmente. Para um cálculo mais exato será necessário resolver a equação de Poisson.

Nas próximas secções são apresentados os resultados obtidos para a simulação de diversas nanoestruturas, tais como: fio simples, fio com impurezas e o transistor de toco quântico.

4.2 Fio simples

Quando se considera o fio quântico, os níveis de energia podem ser obtidos na aproximação do potencial infinito, $E_n = \pi^2 \hbar^2 n^2 / (2mW^2)$. No início da simulação, escolhe-se a energia incidente de maneira que os canais de transmissão estejam abertos, a medida que a simulação progride os canais são fechados. Assim sendo, espera-se que a

condutância diminua em degraus. A estrutura do fio quântico utilizado na simulação é mostrado na Figura 4.1.

Os resultados são apresentados na Figura 4.2. Nessas simulações, a energia do elétron incidente é decrementada a cada passo. Para a primeira simulação, mostrada na Figura 4.2(a), os parâmetros utilizados são $W = 10nm$, $L = 50nm$, $P_W = 19$ e $t = 10, 13$. Dobrando-se a largura do fio, o número de níveis acessíveis aumenta para uma mesma faixa de energia incidente. Isto é mostrado na segunda simulação, Figura 4.2(b), onde $W = 20nm$, $L = 50nm$, $P_W = 39$ e $t = 10, 13$. Esse resultado é esperado, uma vez que a separação entre os níveis quânticos de energia é inversamente proporcional ao quadrado da largura.

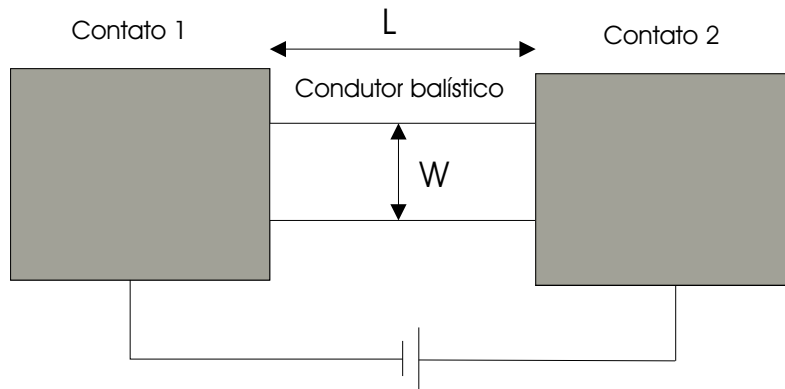


Figura 4.1: Representação esquemática de um fio quântico simples.

Se a energia for normalizada em termos da energia do primeiro nível antes de dobrar a largura ($E_1 = \pi^2 \hbar^2 / (2mW^2)$). Então, no primeiro exemplo tem-se três níveis: E_1 , $E_2 = 4E_1$ e $E_3 = 9E_1$. Após dobrar a largura, tem-se $E'_6 = 36E'_1 = (36/4)E_1 = 9E_1$, portanto seis níveis, como de fato obtido na simulação.

4.3 Fio com impurezas

Os fios convencionais operam em um regime difusivo clássico e não são muito sensíveis a pequenas variações nos parâmetros do material, tais como dimensões e presença de pequenas impurezas. Dispositivos mesoscópicos, no entanto, não são muito robustos neste sentido, pois as suas características operacionais dependem bastante dos parâmetros do material. Por exemplo, a presença de uma pequena impureza ou uma pequena variação da estrutura geométrica podem mudar, de maneira significativa, a

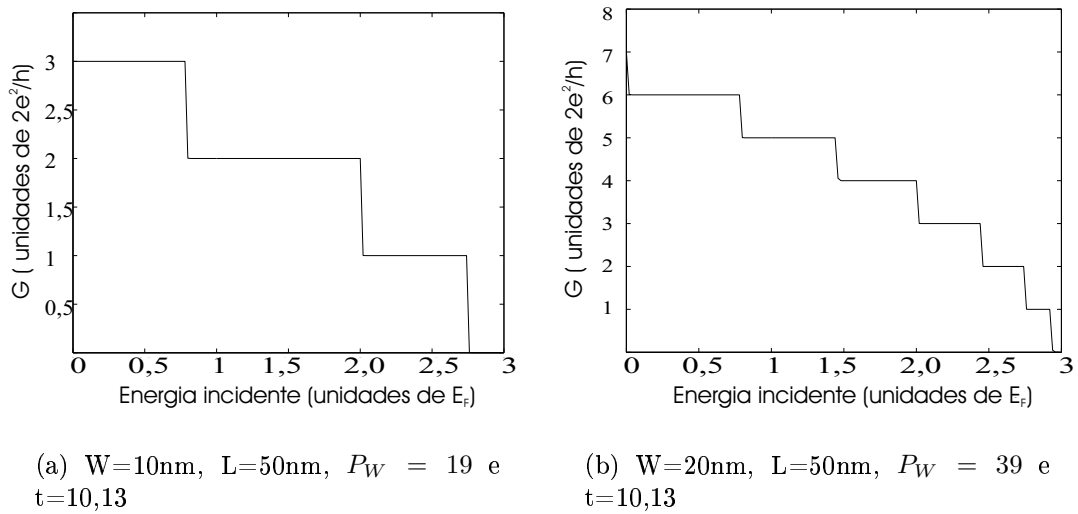


Figura 4.2: Condutância normalizada em função da energia incidente de um fio quântico simples. A quantidade de níveis acessíveis aumenta quando aumentamos a largura W do fio, para uma mesma faixa de energia incidente.

transmissão do elétron através da amostra. Em outras palavras, a transmissão do elétron através de dispositivos mesoscópicos é específica para uma dada configuração espacial de espalhadores elásticos e para uma dada energia de Fermi. Para ilustrar este fato, é simulado um fio com impurezas em posições aleatórias e um outro fio com impurezas em posições espacialmente periódicas. A estrutura utilizada na simulação são mostradas na Figura 4.3. Em ambas simulações são utilizados os mesmos parâmetros e o mesmo número de impurezas, ou seja, $W = 10\text{nm}$, $L = 90\text{nm}$, $P_W = 10$ e $t = 1,62$. Os resultados são apresentados na Figura 4.4.

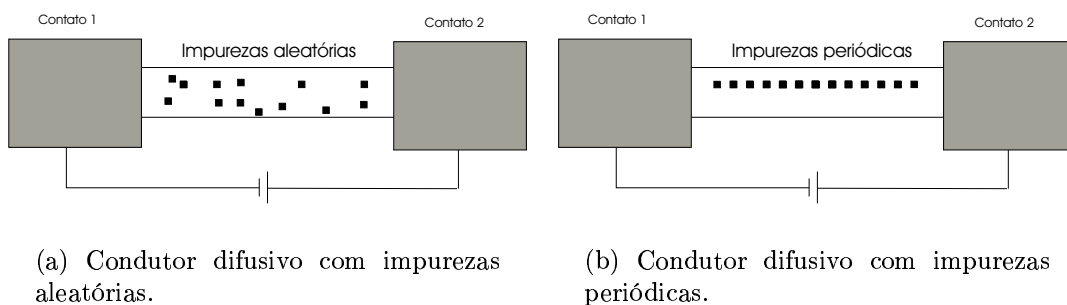
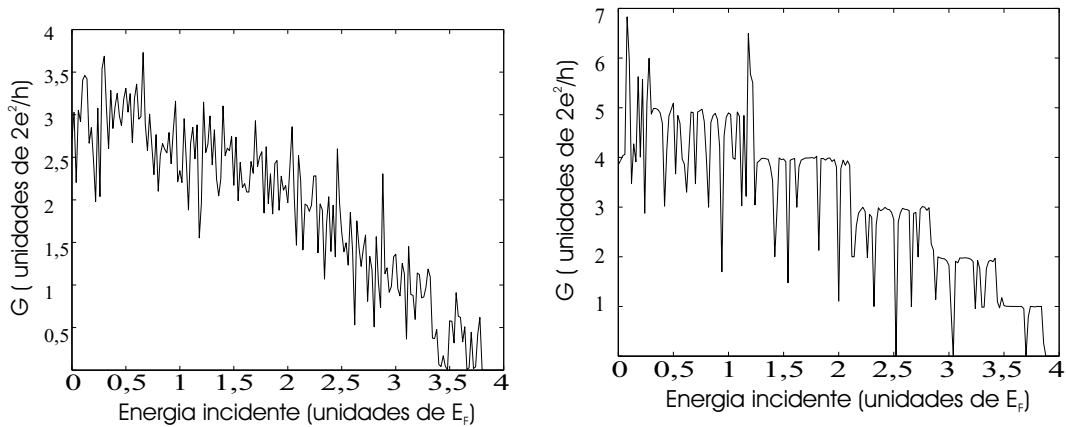


Figura 4.3: Representação esquemática de fios com impurezas aleatórias e periódicas.

Com os resultados obtidos, percebe-se que a configuração espacial das impurezas funciona com uma “impressão digital” do dispositivo. O que não é bom para a



(a) Condutor difusivo com impurezas aleatórias.

(b) Condutor difusivo com impurezas periódicas

Figura 4.4: Condutância normalizada em função da energia normalizada incidente de fios com impurezas aleatórias e periódicas. Os mesmos parâmetros de simulação são usados em ambos os casos, apenas foi alterado a configuração espacial das impurezas. $W=10\text{nm}$, $L=90\text{nm}$, $P_W = 10$ e $t=1,62$.

reprodutibilidade dos mesmos. Portanto, dispositivos mesoscópicos confiáveis só poderão ser explorados quando atingirmos uma tecnologia capaz de controlar as flutuações de fase de uma fração pequena de 2π . Reduzindo a praticamente zero, a quantidade de defeitos na região crítica do dispositivo.

4.4 Transistor de toco quântico

Na literatura de microondas, alguns autores preferem usar a palavra *estube*, portuguesa do inglês “*stub*”, que significa “toco”. Nesse trabalho, a palavra toco é utilizada. O transistor de toco quântico é um fio com um toco; sobre o toco, pode-se aplicar um potencial elétrico. O diagrama esquemático é mostrado na Figura 4.5. Se o comprimento do toco, L_{toco} , for maior que o caminho livre médio para espalhamentos inelásticos, então a estrutura é simplesmente a junção de dois fios e a transcondutância, $g_m = \partial I_D / \partial V_G$, é nula, onde I_D é a corrente no fio e V_G é o potencial aplicado ao toco. Portanto, para que o efeito transistor ocorra o toco tem que ser menor que o comprimento livre médio para espalhamentos inelásticos.

A razão do grande interesse por esse tipo de nanodispositivo é seu potencial para processamento ultrarrápido de sinais, com pouca dissipação de energia. Dispositivos de

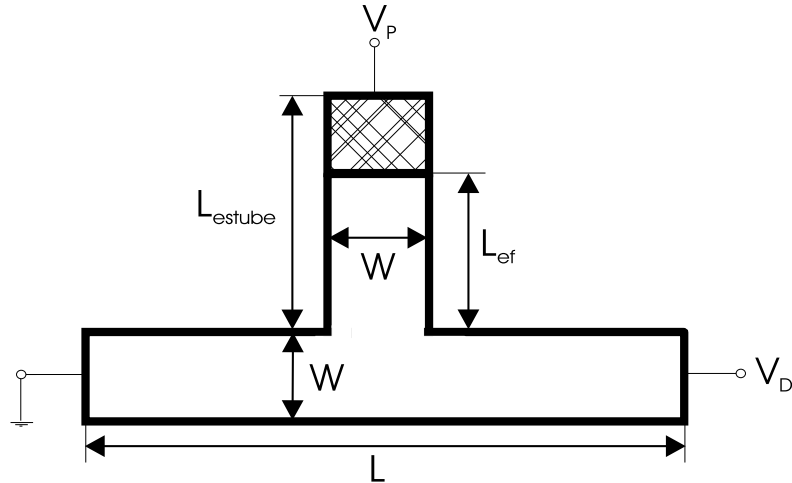


Figura 4.5: Vista esquemática de um transistor com apenas um toco quântico.

interferência quântica, como os transistores de toco quântico, funcionam com base na mudança no padrão de interferência dos elétrons em função de um potencial externo aplicado. Esse fenômeno quântico requer bem menos energia do que o transistor FET tradicional. Combinado com isso tem-se o tamanho reduzido desses transistores, o que contribui para uma maior velocidade, uma vez que diminui o tempo de propagação do elétron através do dispositivo; podendo atingir frequências de comutação da ordem de terahertz [52].

Para que a interferência ocorra é necessário que o elétron se propague em apenas um modo, para que isso ocorra deve-se ter $k_B T < E_1$, usando a Equação 1.29 conclui-se que:

$$W < \hbar\pi\sqrt{\frac{1}{2m^*k_B T}}. \quad (4.3)$$

Considerando o arseneto de gálio, GaAs, ($m^* = 0.07m_0$) e para a temperatura ambiente ($T = 295K$), a largura do fio do transistor de toco quântico deve satisfazer a desigualdade

$$W < 14nm. \quad (4.4)$$

Nas simulações será utilizado $W = 10nm$. Esta largura é pequena demais para o estado da arte da tecnologia de litografia, apesar de provavelmente ela ser alcançável em um futuro não tão distante.

Da Equação 1.14 conclui-se que para uma condução de modo único ($M = 1$), deve-se ter:

$$\lambda_F = 2W, \quad (4.5)$$

Para o valor de W escolhido, tem-se $\lambda_F = 20nm$. O parâmetro de rede utilizado é $a = 0,5nm$, o que corresponde a uma figura com $P_W = 19$. Também foi utilizado um parâmetro de rede $a = 0,25nm$ ($P_W = 39$), com a finalidade de aumentar a precisão dos resultados, porém não foram encontradas discrepâncias significativas entre as duas escolhas, o que é de se esperar, pois ambas as opções são descrições apropriadas do limite contínuo ($\lambda_F \ll a$). Com base nesse resultado, optou-se por utilizar $a = 0,5nm$, com o propósito de reduzir o custo computacional das simulações. Usando a Equação 4.2 e os valores de a e λ_F calculados, conclui-se que o fator de acoplamento normalizado para que o transporte ocorra é um único modo, é $t = 40,52$. Este é o valor do fator de acoplamento t usado para obter os resultados, a menos que se diga o contrário.

Nas próximas subsecções, os transistores estão classificados de acordo com o número de tocos.

4.4.1 Transistor com apenas um toco quântico

Considere a nanoestrutura com um único toco como mostrado na Figura 4.5. Usando uma energia incidente inicial igual a do primeiro modo $E_1 = 53meV$, o gráfico da condutância normalizada em função da energia incidente normalizada é mostrado na Figura 4.6. O resultado confirma que o dispositivo realmente tem apenas um único modo. O potencial elétrico aplicado à porta é fixado em zero, $L = 73,3nm$ e $L_{toco} = 11nm$.

Considerando agora um dispositivo com quatro canais de transmissão abertos, os espalhamentos, devidos unicamente a estrutura geométrica do dispositivo, fazem com que surja um padrão de interferência entre os diferentes modos. O gráfico da condutância normalizada em função da energia incidente normalizada é mostrado na Figura 4.7. Nesta simulação, $W = 10nm$, $P_W = 19pixels$, $L_{toco} = 50nm$, $M =$

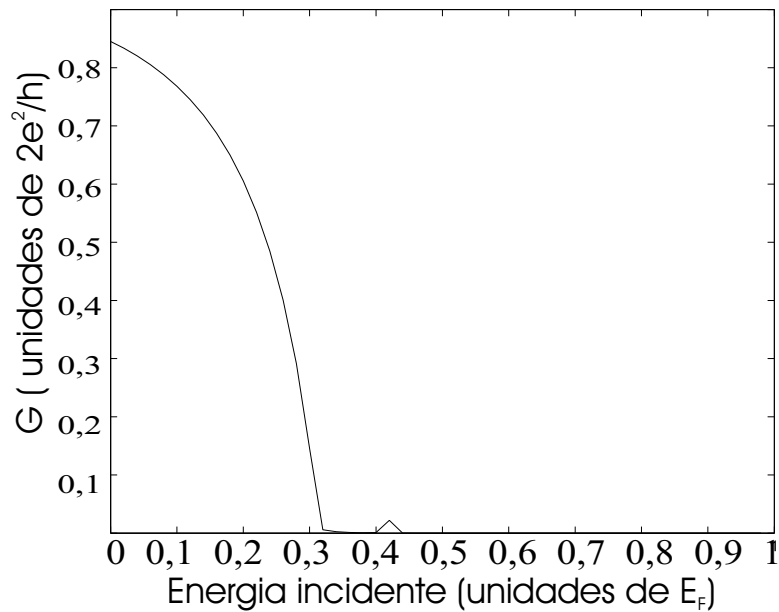


Figura 4.6: O transistor toco simples quântico com apenas um único canal de transmissão aberto. $W=10nm$, $a=0,5nm$, $P_W = 19pixels$, $L_{toco} = 11nm$, $M = 1$ (um modo) e $t = 40,52$.

4 (quatro modos) e $t = 2,53$. É interessante comparar este resultado com os da Figura 4.2, onde os condutores são puramente balísticos.

Nas duas simulações seguintes, a energia incidente (determinada pelo potencial de dreno) é fixada em uma posição, de forma a obter apenas um canal aberto, ou seja, a energia incidente E e o fator de acoplamento t normalizados são 1 e 40,52 respectivamente, e o potencial aplicado à porta é alterado. A condutância normalizada em função da tensão da porta são apresentadas nas Figuras 4.8 e 4.9. Os resultados mostram que a condutância varia entre zero e um, com a variação da tensão de porta. Na Figura 4.8, tem-se dois zeros da condutância ou duas antirressonâncias. Na Figura 4.9, tem-se três antirressonâncias. Para para testar a veracidade da Equação 1.30, dois valores de L_{toco} são usados. A energia incidente é $53meV$ e $\lambda_F = 20nm$. Portanto, para $L_{toco} = 29nm$, tem-se $m = 1$ e o número de mínimos é $m + 1 = 2$. Para $L_{toco} = 50nm$, tem-se $m = 2$ e o número de mínimos é $m + 1 = 3$. O que está de acordo com os resultados das simulações.

A condutância normalizada em função da energia incidente e do potencial elétrico da porta é mostrada na Figura 4.10. Nota-se que para valores em que energia incidente passa a excitar mais de um modo, a condutância se comporta de maneira errática,

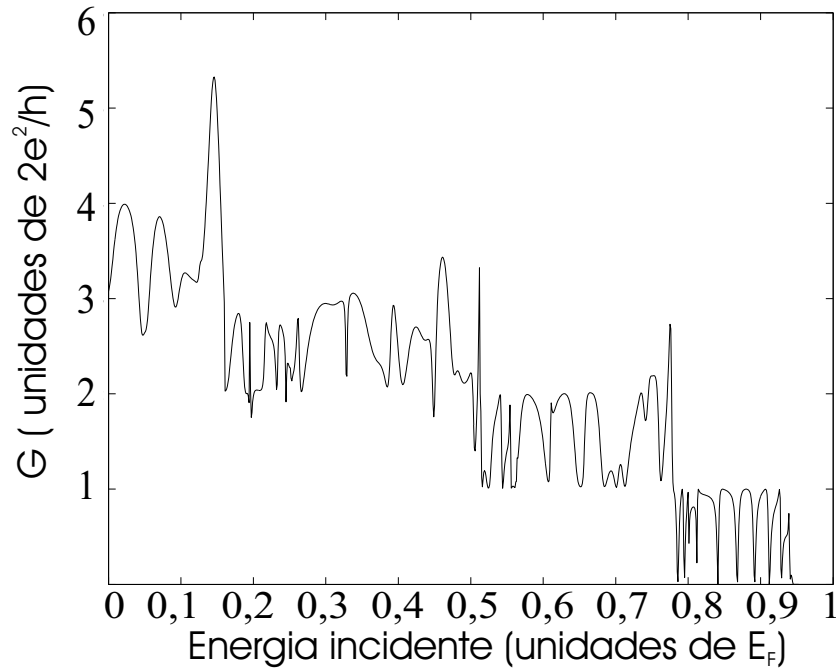


Figura 4.7: Transistor de toco quântico simples com quatro modos. $W = 10nm$, $a = 0,5nm$, $P_W = 19pixels$, $L_{toco} = 50nm$, $M = 4$ (quatro modos) e $t = 2,53$.

como já havia sido apontado no primeiro capítulo.

Para por em destaque o comportamento do dispositivo com mais de um modo propagante. O gráfico para uma energia incidente específica de $E = 55,8meV$ é traçado separadamente e mostrado na Figura 4.11. Pode ser observado o comportamento errático da condutância pelo fato de existir mais de um modo excitado.

Estes resultados são interessantes, pois comprovam que é possível controlar a transmissão no canal, aplicando-se um potencial de controle ao toco, o que é útil em uma lógica digital, por exemplo. A maior dificuldade prática na implementação deste transistor é que a largura da região de antiressonância é estreita demais, o que implica na necessidade de ajustar o potencial de porta com grande precisão para obter a região de corte do transistor. Este problema de ajuste fino, necessário na construção de dispositivos quânticos de interferência, foi inicialmente apontado por Landauer[49].

Nas próximas seções serão examinadas geometrias que possam alargar essas regiões. O alargamento das regiões de bloqueio (antiressonância) é desejável para que o comportamento do transistor como chave seja bem definido.

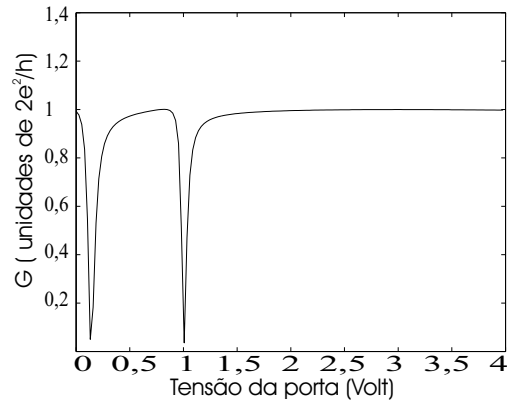


Figura 4.8: Condutância normalizada em função da tensão de porta V_P , para o transistor de teco simples com $L_{toco} = 29nm$.

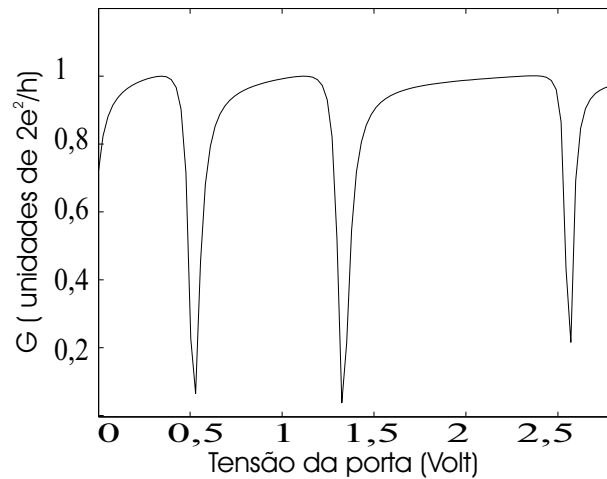


Figura 4.9: Condutância normalizada em função de tensão da porta V_P , para o transistor de teco simples com $L_{toco} = 50nm$.

4.4.2 Transistor de tocos quânticos opostos

A primeira geometria a ser considerada é o transistor de tocos quânticos opostos. Este transistor tem dois tocos em lados opostos do fio principal, como mostrado na Figura 4.12. A condutância em função da tensão de porta é mostrada Figura 4.13. A presença dos tocos opostos estreita as regiões de antiressonância e alarga as regiões de ressonância.

Portanto, o uso de tocos opostos não vai de encontro ao objetivo de alargar a região para melhorar o comportamento desse transistor como chave.

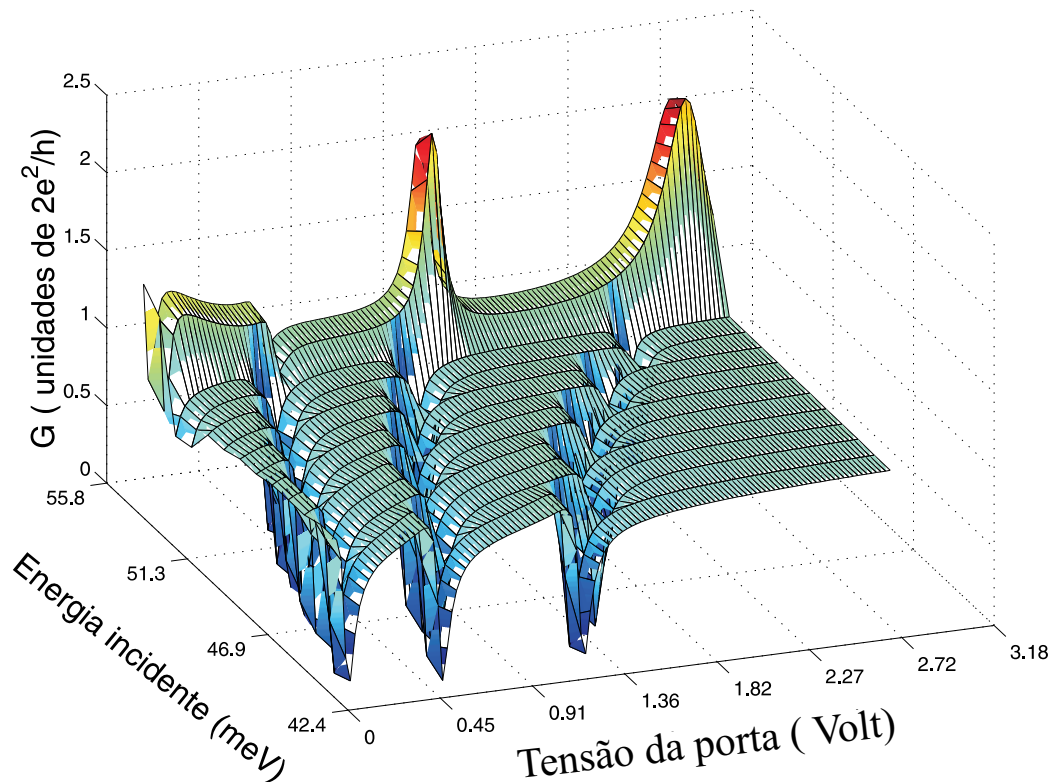


Figura 4.10: Condutância normalizada de um transistor toco simples em função da tensão de porta, V_P , e da energia incidente. $L_{toco} = 50nm$ e $W = 10nm$.

4.4.3 Transistor com múltiplos tocos quânticos

No trabalho de Deo e Jayannavar sobre guias de onda com múltiplos tocos [50], observa-se que é possível criar bandas de bloqueio utilizando tocos em série, espaçados igualmente. O objetivo então é aplicar essa idéia para o caso do transistor de toco quântico, mas é interessante estudar o efeito de uma quantidade pequena de tocos em série. Portanto, será feita simulações com dois e três tocos para examinar o efeito do número de tocos, sobre a largura da região de bloqueio ou antirressonância.

Transistor de toco duplo quântico

O desenho de um transistor de toco duplo é mostrado na Figura 4.14. A separação entre os tocos é representado pela letra S . Na Figura 4.15 é apresentado o resultado da simulação da condutância. No mesmo gráfico, está superposta a condutância do transistor com um único toco para efeito de comparação.

Na simulação, a separação entre os tocos é $S = 10nm$. O resultado, apresentado na

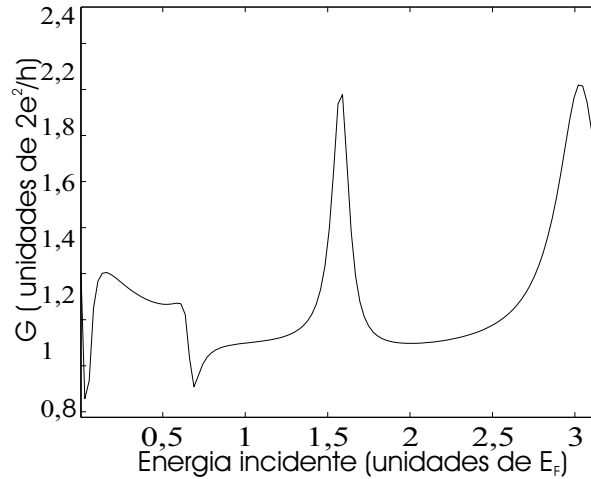


Figura 4.11: Condutância normalizada de um transistor de toco simples em função da tensão de porta, V_P . $L_{toco} = 50nm$, $W = 10nm$ e $E = 55,8meV$. O comportamento errático da condutância é consequência de existir mais de um modo excitado.

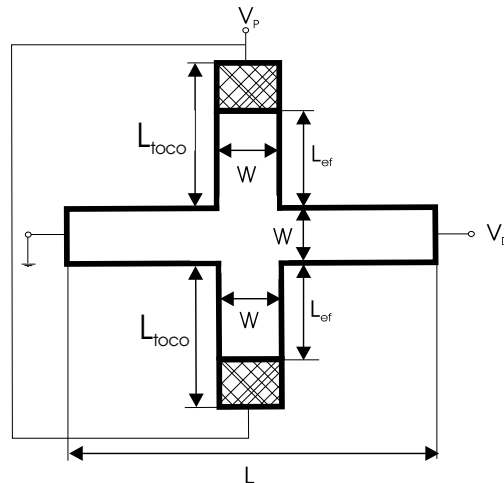


Figura 4.12: Vista esquemática do transistor de toco quântico de portas opostas.

figura, mostra que as regiões de antiressonância são substituídas por antiressonâncias duplas. Aumentando-se a separação S para $20nm$, as antiressonâncias duplas dão lugar a regiões de bloqueio mais largas, como mostrado na Figura 4.16.

Transistor de toco triplo quântico

Para um transistor de toco triplo quântico, cujo a vista esquemática é apresentada na Figura 4.17, a região de bloqueio torna-se ainda mais larga. O resultado da simulação é apresentado na Figura 4.18, onde a separação S é $18nm$.

No toco triplo, aparecem três antiressonâncias próximas (tripletto). A posição dessas antiressonâncias é função do afastamento entre os tocos.

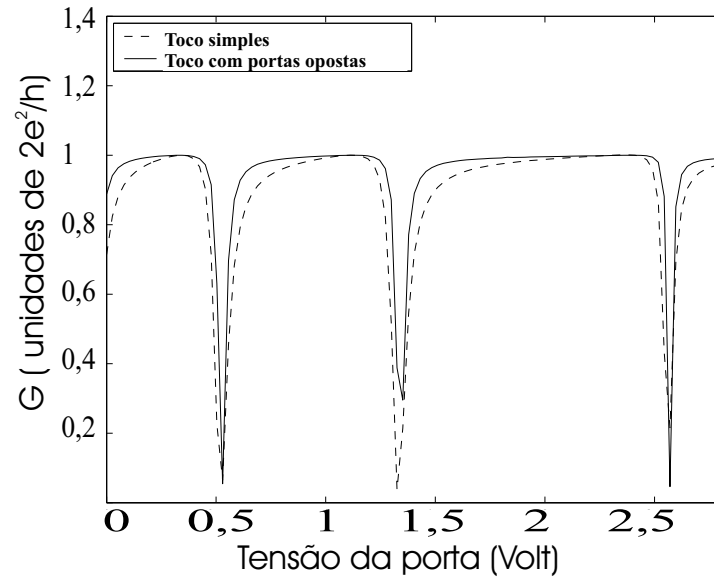


Figura 4.13: Condutância do transistor de toco quântico de portas opostas quântico em função da tensão de porta V_P , $L_{toco} = 50nm$ em ambos os lados.

4.5 Considerações finais

Com base nos resultados obtidos de simulação, propõe-se que o transistor de toco quântico pode ter sua região de bloqueio ou antiressonância alargada, se houver uso de múltiplos tocos, escolha adequada da separação entre os tocos, escolha adequada da largura do fio e uso de material de alto grau de cristalinidade.

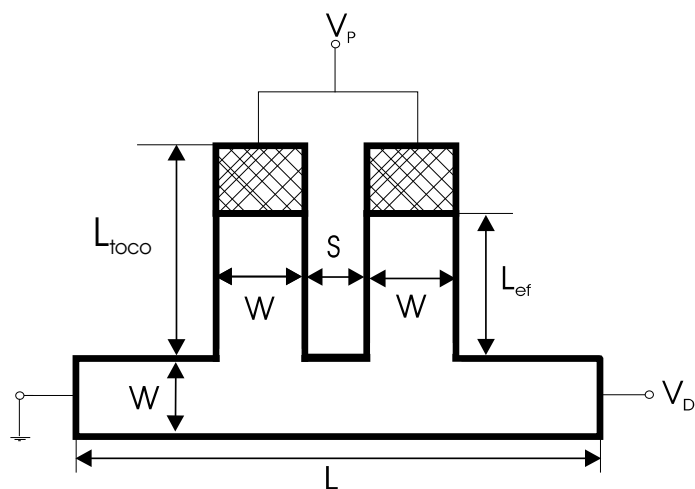


Figura 4.14: Vista esquemática do transistor toco duplo quântico.

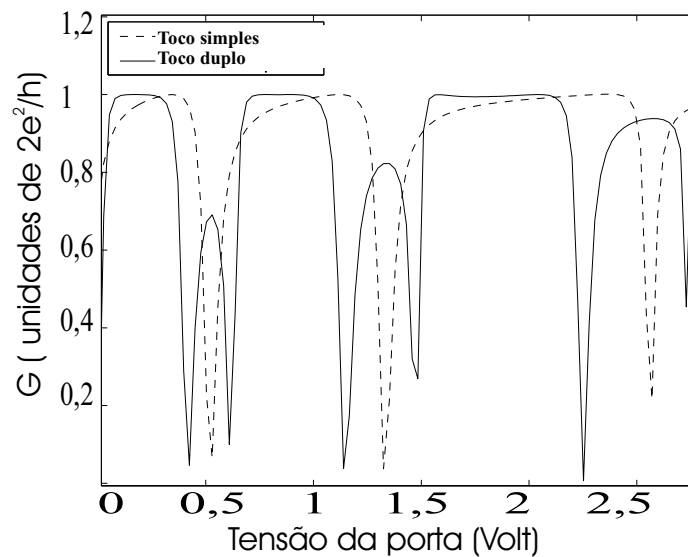


Figura 4.15: Condutância de uma transistor toco duplo quântico em função da tensão de porta V_P , a separação entre os tocos S é $10nm$, $L_{toco} = 50nm$ para ambos tocos.

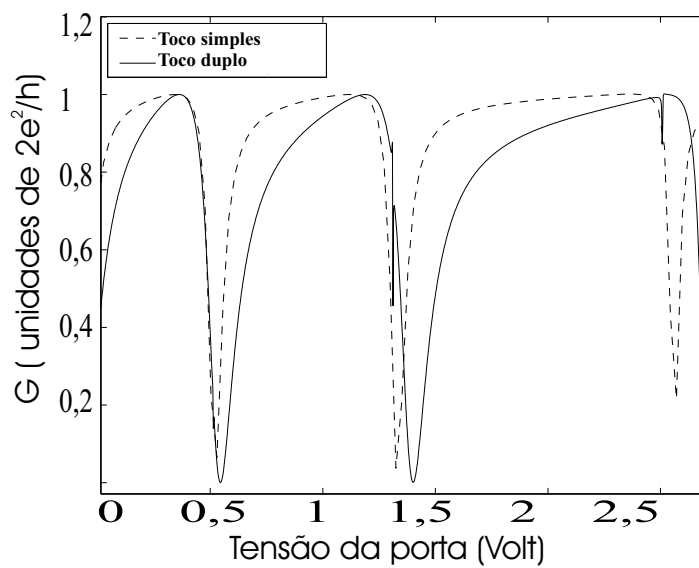


Figura 4.16: Condutância de uma transistor de toco duplo quântico em função da tensão da porta V_P , a separação entre os tocos S é $20nm$, $L_{toco} = 50nm$ para ambos os tocos.

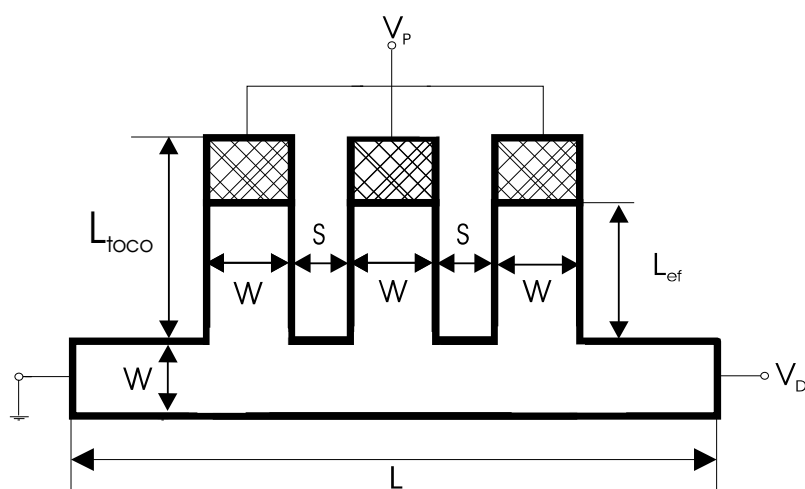


Figura 4.17: Vista esquemática do transistor toco triplo quântico.

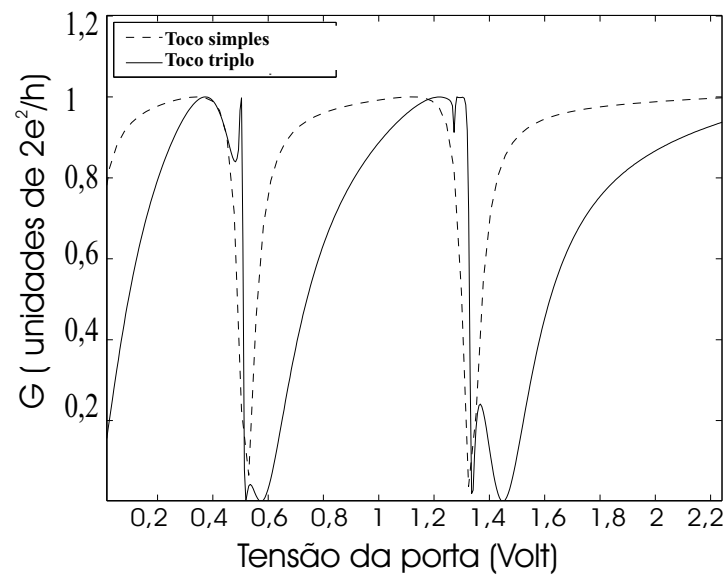


Figura 4.18: Condutância de uma transistor teco triplo quântico em função da tensão de porta V_P , a separação entre os tocos S é $18nm$, $L_{estube} = 50nm$ para os três tocos.

Capítulo 5

Conclusões e Trabalhos Futuros

Foi apresentado nesta dissertação a análise numérica do transistor de toco quântico usando o modelo “tight-binding” para o hamiltoniano que descreve o dispositivo e o método iterativo para o cálculo da função de Green. Para facilitar a entrada de dados foi desenvolvida um programa para facilitar a entrada de dados associados à geometrias complexas.

Nossos resultados foram apresentados para dimensões particulares. No entanto, foram apresentadas leis de transformações que fazem com que esses resultados sejam aplicáveis a estruturas mesoscópicas de qualquer tamanho, desde que elas sejam menores do que o caminho livre inelástico médio.

Dentre os dispositivos quânticos de interferência acreditamos que o transistor de toco quântico seja o mais promissor, pois o mesmo possui uma geometria simples, o que é crítico em dispositivos mesoscópicos devido a forte correlação existente entre a geometria e características elétricas dos mesmos. Os resultados demonstram que o transistor de toco quântico possui máximos e mínimos da condutância bem definidos apenas quando ele transporta um único modo na sua estrutura, o que está em completa concordância com a literatura disponível. Propõe-se nesse trabalho que seja utilizada uma geometria de múltiplos tocos, para contornar o problema da região estreita de antiressonância observada no transistor de toco quântico simples. Os resultados demonstram que realmente há um alargamento da região de bloqueio quando se utiliza tocos duplos e triplos, o que pode ser facilitar a implementação prática deste tipo de dispositivo.

Para a continuação desse trabalho, pode-se sugerir as seguintes atividades:

- Simular outros dispositivos quânticos de inferência, como o Mach-Zehnder eletrônico ou o acoplador direcional, usando o algoritmo de cálculo da condutância;
- Considerar o efeito do espalhamento térmico nas simulações fazendo uso da formula de Landauer generalizada para uma temperatura qualquer;
- Considerar o efeito de campos magnéticos nas simulações fazendo uso de um hamiltoniano apropriado;
- Considerar o efeito da distribuição de cargas fazendo com que o termo potencial da equação de Schrödinger dependa da equação de Poisson;
- O custo computacional do algoritmo de cálculo da condutância pode ser reduzido ainda mais na simulação de estruturas simples como um transistor de múltiplos tocos, pois os fios podem ser particionados em regiões em que a propagação é exatamente conhecida;
- Desenvolver uma interface de entrada que seja capaz de ler arquivos BMP coloridos para facilitar a representação de distribuição de potencial mais complexa;
- Expandir o algoritmo para problemas de geometria cilíndrica;
- Implementar um algoritmo 3D;
- Acrescentar efeitos de temperatura.

Apêndice A

Programa do Cálculo da Condutância

A.1 Rotina principal

```
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%  
% Programa calculo da condutancia de um fio quantico          %  
% (c)1999-2000 Edval J. P. Santos                            %  
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%  
Vconf = 1;  
Ener= 1;  
t=40.5285;           %Inicializa os parâmetros da simulação  
a=0;  
k=1;  
ki=1;  
    while a<=54      %Calcula a condutância do transistor enquanto  
                    %a voltagem da porta for menor que 54  
        camada = 1;  
        calculeG0;  
        camada = 2;  
        while camada < Lx  
            calculeGmais1;  
            camada = camada + 1;  
        end  
end
```

```

camada = Lx;
GNmais1;
conduz;
a=a+0.5;
end yfaixa=0:0.5:a;           %Traça o gráfico com o resultado
plot(yfaixa,Cond,'r')

```

A.2 Subrotina com o hamiltoniano do transistor

```

N= 30; % Comprimento
M=9; % Largura
Z=
[1,1,1,1,1,0,0,0,0,;
1,1,1,1,1,0,0,0,0,;
1,1,1,1,1,0,0,0,0,;
1,1,1,1,1,0,0,0,0,;
1,1,1,1,1,0,0,0,0,;
1,1,1,1,1,0,0,0,0,;
1,1,1,1,1,0,0,0,0,;
1,1,1,1,1,0,0,0,0,;
1,1,1,1,1,0,0,0,0,;
1,1,1,1,1,0,0,0,0,;
1,1,1,1,1,0,0,0,0,;
1,1,1,1,1,0,0,0,0,;
1,1,1,1,1,0,0,0,0,;
1,1,1,1,1,0,0,0,0,;
1,1,1,1,1,0,0,0,0,;
0,0,0,0,0,0,0,0,0,;
0,0,0,0,0,0,0,0,0,;
0,0,0,0,0,0,0,0,0,;
0,0,0,0,0,0,0,0,0,;
1,1,1,1,1,0,0,0,0,;
1,1,1,1,1,0,0,0,0,;
1,1,1,1,1,0,0,0,0,;

```

```

1,1,1,1,1,0,0,0,0,;
1,1,1,1,1,0,0,0,0,;
1,1,1,1,1,0,0,0,0,;
1,1,1,1,1,0,0,0,0,;
1,1,1,1,1,0,0,0,0,;
1,1,1,1,1,0,0,0,0,;
1,1,1,1,1,0,0,0,0,;
1,1,1,1,1,0,0,0,0,;
1,1,1,1,1,0,0,0,0,;
1,1,1,1,1,0,0,0,0,;
1,1,1,1,1,0,0,0,0,;
1,1,1,1,1,0,0,0,0,;
]

```

```

Lx=N;
Ly= M;
Del=8;
X=zeros(30,9);
for z=13:17,j=1:9;
    X(z,j)=a./j; %Aplica uma voltagem que
end;          %decai linearmente no estube
V=X+Z;

```

A.3 Subrotina para o cálculo de $\langle 0|G^0|0\rangle$

```

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% Programa calculo da condutancia de um fio quantico           %
% (c)1999-2000 Edval J. P. Santos                               %
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

H0 = zeros(M);
for j = 1:M,
    H0(j,j)= V(camada,j) + 4*t; %Lê a primeira fatia
end;          %do dispositivo e monta a matriz H0

```

```

for j = 1:M-1,
    HO(j,j+1)= -t;
    HO(j+1,j)= -t;
end;

I= eye(M);
T= [(HO - Ener*I)/t -I;I zeros(M)]; % T equivale ao primeiro termo
                                     %do membro direito da equação 2.46

[AV,D] = eig(T); %Calcula autovetores e autovalores
% D= autovalores
% AV= autovetores

Ud = zeros(M);
Ld = zeros(M);
Ue = zeros(M);
Le = zeros(M);
kd = 1;
ke = 1;
for i=1:2*M          %Usa o critério mostrado na equação 2.49
    if imag(D(i,i))== 0 %para determinar a direção de propagação
        if D(i,i)< 1
            if D(i,i)> -1
                Ld(kd,kd) = D(i,i);
                Le(kd,kd) = 1/D(i,i);
                for jj=1:M
                    Ud(jj,kd) = AV(jj+M,i);
                    Ue(jj,kd) = AV(jj,i);
                end;
                kd = kd + 1;
            end;
        end;
    end;
end;

```

```

end;
    if imag(D(i,i)) > 0
        Ld(kd,kd) = D(i,i);
        Le(kd,kd) = conj(D(i,i));
        for jj=1:M
            Ud(jj,kd) = AV(jj+M,i);
            Ue(jj,kd) = AV(jj,i);
        end;
        kd = kd + 1;
    end;
end;

ED = Ld; Condideal(ki) = trace(abs(ED^(2*N))); ki= ki + 1;
Hp = H0- t*(Ue*inv(Le)*inv(Ue));
G = inv(Ener*I - Hp);
jG = G;

```

A.4 Subrotina para o cálculo de $\langle fatia + 1 | G^{(fatia+1)} | 0 \rangle$

```

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% Programa calculo da condutancia de um fio quantico           %
% (c)1999-2000 Edval J. P. Santos                               %
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

Hn = zeros(M);
for j = 1:M,           %Monta a matriz Hn
    Hn(j,j)= V(camada,j) + 4*t;
end;
for j = 1:M-1,
    Hn(j,j+1)= -t;
    Hn(j+1,j)= -t;
end;

```



```

Hn = zeros(M);
for j = 1:M,
    Hn(j,j)= V(camada,j) + 4*t;
end;

                                %Monta Hn

for j = 1:M-1,
    Hn(j,j+1)= -t;
    Hn(j+1,j)= -t;
end;

Hp = Hn - t*(Ud*Ld*inv(Ud));
G= inv(Ener*I - Hp - t*t*G);%Equivale a equação 2.95 do método iterativo
jG = -t*G*jG;%Equivale a equação 2.97 do método iterativo

```

A.7 Subrotina para o cálculo da condutância

```

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% Programa calculo da condutancia de um fio quantico                %
% (c)1999-2000 Edval J. P. Santos                                  %
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

tr = -t*inv(Ud)*jG*Ud*(Le - Ld);
Cond(k)=0.0;
for z=1:M, for j=1:M    %Calcula a condutância normalizada
                    %Usando a equação 1.15
    Cond(k) = Cond(k) + abs(tr(z,j)*tr(z,j));
end;
end;
k = k + 1;

```

Apêndice B

Programa da Interface de Entrada

```
/* imatrix.c 1.0*/
/* Transforma imagem monocromática BMP em matrix de dados */
/* (c) 2003 - Alexandre Branco Guerra */
#include<stdio.h> /* Manipulação arq. em alto nível */
#include<stdlib.h> /* ANSI C exit protótipo */
#include<math.h> /* Arredondar (funcao ceil)*/

int main(int argc,char *argv[]) {
    FILE *fp; /* Ponteiro para arquivo */
    FILE *fptr;
    int lrg,lrg1,lrg2,lrg3,lrg4;
    int alt,alt1,alt2,alt3,alt4;
    int offsetdados=62;
    double compvarr,ajuste,Bmptam;
    long int offset;
    unsigned int mask;
    int i,j,n,img,bit;
    int aux[1000000];
    int M[1000000];
    int b,c;
    int x,y,h;
    int w;
```

```

if (argc!=2)
{
    printf("\n\n\nFormato: %s nome_do_arquivo\n\n\n",argv[0]);
    exit(1);
}
if ((fp=fopen(argv[1],"r"))==NULL)
{
    printf("\n Nao posso abrir o arquivo %s. \n",argv[1]);
    exit(1);
}
offset=18;
fseek(fp,offset,0);
lrg1=getc(fp);          /* Lê os 4 bytes de largura */
lrg2=getc(fp)*256;
lrg3=getc(fp)*256*256;
lrg4=getc(fp)*256*256*256;
lrg=lrg1+lrg2+lrg3+lrg4;
fptr=fopen("ler.txt","w");
printf("\n A largura da imagem em pixels eh:%d \n",lrg);
fprintf(fptr,"\n A largura da imagem em pixels eh:%d \n",lrg);
alt1=getc(fp);          /* Lê os 4 bytes de altura */
alt2=getc(fp)*256;
alt3=getc(fp)*256*256;
alt4=getc(fp)*256*256*256;
alt=alt1+alt2+alt3+alt4;
printf("\n A altura da imagem em pixels eh: %d \n",alt);
fprintf(fptr,"\n A altura da imagem em pixels eh: %d \n",alt);

if ((lrg%32)!=0)          /*Arquivos BMP são guardados de modo que as */
    ajuste=(ceil(lrg/32)+1); /* as linhas de varredura são multiplas de */
else
    ajuste=(ceil(lrg/32)); /* 4 bytes */

```

```

    compvarr=ajuste*32;      /* ceil retorna um double */
                             /* e a entrada de ceil deve ser um double */
                             /* dai o ajuste*/

printf("\n O comprimento de cada
linha armazenada no disco tem:%lf bytes\n",compvarr/8);
fprintf(fptr,"\n O comprimento
de cada linha armazenada no disco tem:%lf bytes\n",compvarr/8);

Bmptam=compvarr*alt/8;

printf("\n O campo de dados de imagem tem:%lf bytes\n",Bmptam);
fprintf(fptr,"\n O campo de dados de imagem tem:%lf bytes\n",Bmptam);
printf("\n O offset de dados eh %d bytes\n\n\n",offsetdados);
fprintf(fptr,"\n O offset de dados eh %d bytes\n\n\n",offsetdados);
n=1;
b=0;
printf("\n\n Os pixes lidos sao(com btis em excesso) \n\n");
fprintf(fptr,"\n\n Os pixes lidos sao(com bits em excesso) \n\n");
fseek(fp,offsetdados,0); /* aponta para dados de imagem*/
while(n<=alt){
n++;
i=1;
    while (i<=(compvarr/8)) {
        i++;
        mask=0x80;      /* mascara para leitura dos dados */
        img=getc(fp);   /* A linha inferior da imagem eh */
        for(j=0;j<8;j++) { /* a primeira varrida da esq para dir*/
            bit=(mask & img) ? 1:0;
            printf("%d",bit);
            fprintf(fptr,"%d",bit);
            aux[b]=bit;
            mask >>=1;
        }
    }
}

```

```

        b++;
    }
}

printf("\n");
fprintf(fptr, "\n");
}
b=0;
if ((lrg%32)==0)
    for (n=1;n<=(lrg*alt);n++)
        {M[b]=aux[b];
        b++;
        }
else
    {y=0;
    h=0;
    while (h<=(alt-1)){
    x=0;
    n=0;
    while (n<=lrg){
        n++;
    M[y]=aux[((int)compvarr)*h+x];
    x++;
    y++;
    }
        /* Descarta bits em excesso */
    y--;
    h++;
    }
}

printf("\n A matriz eh \n\n");
fprintf(fptr, "\n A matriz eh \n\n");
b=0;

```

```
for (n=1;n<=(alt);n++)
{
for (x=1;x<=lrg;x++)
{c=M[b];
printf("%d",c);
fprintf(fptr,"%d",c);
b++;
}
printf("\n");
fprintf(fptr,"\n");
}
fclose(fptr);
}
```

Bibliografia

- [1] GOLDSTEIN, H. **Classical Mechanics**. Massachusetts: Addison-Wesley, 1980.
- [2] FEYNMAN, R. P. **The Feynman Lectures on Physics, Vol III**. New York: Addison-Wesley, 1965.
- [3] SHIFF, L. I. **Quantum Mechanics**. New York: McGraw-Hill, 1968.
- [4] SAKURAY, J. J. **Modern Quantum Mechanics**. New York: McGraw-Hill, 1968.
- [5] EISBERG, R.; RESNICK, R. **Fisica Quântica**. Rio de Janeiro: Ed. Campus, 1979.
- [6] BLAKEMORE, J.S. **Solid State Physics**. Cambridge: Cambridge University Press, 1995.
- [7] ANDO, T.; FOWLER, A.B.; STERN, F. Electronic properties of two dimensional electron systems. *Rev. Mod. Phys.*, vol 54, n. 2, p. 437, 1982.
- [8] WEES, B.J.; HOUTEN, H.; BEENAKKER, C.W.J.; WILLIAMSON, J.G. ; KOUWENHOUSE ; MAREL, D.; FOXON, C.T. Quantized Conductance of Point Contacts in a Two-Dimensional Electron Gas. *Phys. Rev. Lett.*, vol 60, p. 884, 1988.
- [9] LANDAUER, R. Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction. *IBM J. Res. Dev.*, vol. 1, p. 223, 1957.
- [10] BUTTIKER, M. Symmetry of electrical conduction. *IBM J. Res. Dev.*, vol. 32, n. 3, p. 317, 1988.

- [11] THORNTON, T.J.;PEPPER, M.; AHMED, H.;ANDREWS, D; DAVIES, G.J. One-dimensional conduction in the 2D electron gas of a GaAs-AlGaAs Heterojunction. *Phys. Rev. Lett.*, vol. 56, n. 11, p. 1198, 1986.
- [12] TAYLOR, R.P. The role of surface-gate technology for AlGaAs/GaAs nanostructures. *Nanotechnology*, vol. 5, p. 183, 1994.
- [13] DATTA, S. em **Electronic Transport in Mesoscopic Systems**, Cap. 7, p. 277, Cambridge: Cambridge University Press, 2001.
- [14] FROHNE, H.R.;MCLENNAN, M.J.;DATTA, S, *J. Appl. Phys.*,v 66,p.2699, 1989
- [15] GAYLORD, T.K.;HENDERSON, G.N.; GLYTISIS, E.N. Application of electromagnetics formalism to quantum-mechanical electron-wave propagation in semiconductors *J. Opt. Soc. Am. B*, vol. 10, p. 333, 1993.
- [16] DATTA, S.; MELLOCH, M.R.;BANDYOPADHYAY S.;LUNDSTROM, M.S. Proposed structure for large quantum interference effects. *Appl. Phys. Lett.*, vol. 48, n. 7, p. 487, 1986.
- [17] FEYNMAN, R. P. **The Feynman Lectures on Physics, Vol II.** 15-50, New York: Addison-Wesley, 1965.
- [18] MITIN, V. V.;KOCHEALAP V. A.;STROSCIO, M. A. **Quantum Heterostructures: Microelectronics and Optoelectronics.** Cap 9,p. 392, Cambridge: Cambridge University Press, 1990.
- [19] ALAMO, J.A.;EUGESTER, C.C. Quantum field-effect directional coupler. *Appl. Phys. Lett.*, vol. 56, p. 78, 1990.
- [20] TSUKADA, N.; WIECK, A.D.; PLOOG K. Proposal of a Novel Electron Wave Coupled Devices”, *Appl. Phys. Appl. Phys. Lett.*, vol. 56, p. 2527, 1990.
- [21] HUNSPERGER, R.G. **Integrated Optics: Theory and Technology.** p. 108, Berlin: Springer, 1985.
- [22] COLLINS, R.E. **Fundamentals for Microwave Engineering.** p. 273, New York: Mc-Graw Hill, 1966.

- [23] PALM, T.;THYLEN, L.;NILSSON, O.;SVENSSON, C. Quantum interference devices and field-effect transistors: A switch energy comparison. *J. Appl. Phys. Lett.*, vol. 74, n. 1, p. 687, 1993.
- [24] SINGRA, P.D.;RAICHEV, O.E.;JAYNNAVAR, A.M. Quantum Waveguide Transport in Serial Loop Structures. *cond-mat/9411028 e Phys. Rev. B* vol 50, n. 16, p. 11629, 1994.
- [25] DEBRA, P.;RAICHEV, O.E.;VASILOPOULOS, P.;RAHMAN, M.;PERRIN, R.;MITCHELL W.C. Ballistic electron transport in stubbed quantum waveguide: experiment and theory. *cond-mat/0002284 e Phys. Rev. B* vol 61, n. 16, p. 10950, 2000.
- [26] CHAO, K.A.;WILLANDER, M.; GALPERIN, Yu.M. Resonant tunneling: from model Hamiltonian to modern electronic devices'. *Phys. Scripta*, vol. T54, p. 119, 1994.
- [27] LIKHAREV, K.K. Correlated discrete transfer of electrons in ultrasmall tunnel junctions. *IBM J. Res. Dev.*, vol. 12, n. 1, p. 144, 1988.
- [28] KASTNER, M.A. The single-electron transistor. *Rev. Mod. Phys.*, vol. 64, n. 3, p. 849, 1992.
- [29] SPECTOR, J.;STORMER, H.L.;BALDWIN K.W.;PFEIFFER, L.N.;WEST, K.W. , Refractive switch for two-dimensional electrons. *Appl. Phys. Lett.*, vol. 56, p. 2433, 1990.
- [30] BANDYOPADHYAY, S;BERNSTEIN, G.H; POROD, W. Quantum Devices Based on Phase Coherent Lateral Quantum Transport. *Proceedings of the International Symposium on Nanostructure Physics and Fabrication* eds. M.A. Reed, W.P. Kirk, College Station, Texas, Academic Press, p. 183, 1989.
- [31] NIXON, J.A.;DAVIES, J.H; BARANGER, H.U. Breakdown of quantized conductance in point contacts using realistic potentials. *Phys. Rev. B*, vol. 43, p. 12638, 1991.

- [32] HESS, K.;REGISTER L.F.;MACUCCI M. Toward a standard model in nanostructure transport problems including dissipation. Quantum confinement: Physics and applications, Eds. M. Cahay, S. Bandyopahyay et.al., Electrochemical society, New Jersey, p. 3, 1994.
- [33] LENT, C.S.; KIRTER, D.J. The quantum transmitting boundary method. J. Appl. Phys., vol. 67, p. 6353, 1990
- [34] HESS K.;LEBURTON J.P.;RAVAIOLI U. **Computational electronics**. Boston: Kluwer Academic , 1991.
- [35] ANDO, T. Quantum point contacts in magnetic fields. Phys. Rev. B, vol. 44, p. 8017, 1991.
- [36] NIKOLIÉ, K.;MACKINNON, A. Conductance and conductance fluctuations of narrow disordered quantum wires. Phys. Rev. B, vol. 50, p. 11008, 1994.
- [37] MACKINNON, A. The Calculation of Transporte Properties and Density of States of Disordered Solids. Z. Phys. B, vol. 59, p. 385, 1985.
- [38] INKSON, J. C. **Many-body Theory of Solids**. New York: Plenum , 1984.
- [39] ECONOMOU, E. N. **Green's Functions in Quantum Physics, Springer Series in Solid-state Sciences, vol. 7** . Heidelberg: Springer-Verlag, 1983.
- [40] FISHER, D.S.;LEE, P.A. Phys. Rev. B., vol. 23, p. 6851, 1981.
- [41] BRINKMANN, H. W.; KLOTZ, E.A. **Linear Algebra and Analitic Geometry**. Massachusetts: Addison-Wesley, 1971.
- [42] SANTOS, E. J. P. **Simulation of the DC conductance of ballistic quantum devices**, Em Proceedings of the SMicro 2002,N. I. Morimoto,R. P. Ribas,R Verdonck, Editors, PV2002-8, p. 56-62, The Electromechanical Society Proceedings Series, Pennington, NJ (2002)
- [43] ANDERSON, E. **LAPACK Users Guide**. Philadelphia: SIAM, 1992.
- [44] LOAN, C. F. V. **Introduction to Scientific Computing: A Matrix-Vector Approach Using MATLAB**. Prentice-Hall, Massachusetts, 1997.

- [45] GUERRA, A. B. ; SANTOS, E. J. P. CAD front-end for nanodevice design. Em Proceeding of II Students Forum on Microelectronics, Porto Alegre, RS (2002).
- [46] <http://www.gimp.org>
- [47] MURRAY, J.;VANRIPER, W. **Encyclopedia of Graphics File Formats**. Melksham: O'Reilly and Associates , 1996.
- [48] SCHILDT, H. **C, completo e total**. São Paulo: Makron Books, 1996.
- [49] LANDAUER, R. Advanced Technology and Truth in Advertising. *Physica A*, vol. 168, p. 75, 1990.
- [50] DEO, S. P.;JAYANNAVAR, A. M. Quantum Waveguide Transport in Serial and Loop Structures. *Phys. Rev B*, vol. 50(16), p. 11629, 1994.
- [51] DAS, M. P. e GREEN, F. The Landauer Formula: a Magic Mantra Revisited”, Preprint, cond-mat/0304573.
- [52] V. V. Mitin, V. A. Kochelap, and M. A. Stroscio, in “*Quantum heterostructures: microelectronics and optoelectronics*,” Chapter 9, pp. 393, Cambridge University Press, Cambridge (1999).
- [53] Alexandre B. Guerra and Edval J. P. Santos, “Numerical Analysis of the Quantum Stub Transistor” submetido para publicação.

