



DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

2009

Tunelamento de Elétrons em Barreiras Si/SiO_2 e Si/HfO_2

Sidnei Rogério Ferreira

Orientador:

Prof. Dr. Teldo Anderson da Silva Pereira

— Março de 2009 —

Livros Grátis

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

Sidnei Rogério Ferreira

Tunelamento de Elétrons em Barreiras Si/SiO_2 e Si/HfO_2

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Mato Grosso como parte dos requisitos necessários para a obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador:

Prof. Dr. Teldo Anderson da Silva Pereira

Cuiabá-MT

— Março de 2009 —

Dados Internacionais de Catalogação na Fonte

F383t Ferreira, Sidnei Rogério.
Tunelamento de elétrons em barreiras Si/SiO₂ e Si/HfO₂
Sidnei Rogério Ferreira– Cuiabá, 2009.
70 f. ; 30 cm. (inclui tabelas e gráficos.)

Orientador: Teldo Anderson da Silva Pereira

Dissertação (mestrado). Universidade Federal de Mato Grosso.
Instituto de Física. Programa de pós-graduação em Física, 2009.

1. Tunelamento quântico. 2. Transmissão – barreiras
quânticas de potencial. 3. Correntes - tunelamento.
I. Título.

CDU 538.9

Permitida a reprodução parcial ou total desde que citada a fonte.



UNIVERSIDADE FEDERAL DE MATO GROSSO
INSTITUTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
Av. Fernando Corrêa da Costa, s/n - Coxipó - CEP: 78060-900 - Cuiabá, MT – Brasil.
Fone- 65 615 8734/ 8937 E-mail: pgf@fisica.ufmt.br

FOLHA DE APROVAÇÃO

Título: “Tunelamento de Elétrons em Barreiras Si/SiO₂ e Si/HfO₂”

Autor: Sidnei Rogério Ferreira

Dissertação de Mestrado defendida e aprovada em 05 de março de 2009, pela Banca Examinadora:

Prof. Dr. Teldo Anderson da Silva Pereira
Universidade Federal de Mato Grosso - UFMT
Orientador

Prof. Dr. Jeanlex Soares de Sousa
Universidade Federal do Ceará - UFC
Examinador Externo

Prof. Dr. Frederico Ayres de Oliveira Neto
Universidade Federal de Mato Grosso - UFMT
Examinador Interno

Prof. Dr. Jorge Luiz Brito de Faria
Universidade Federal de Mato Grosso – UFMT
Examinador Interno

O segredo da criatividade é saber como esconder as fontes.

Albert Einstein

“Para realizar grandes conquistas, devemos não apenas agir, mas também sonhar; não apenas planejar, mas também acreditar.”

Anatole France

Agradecimentos

Primeiramente agradeço a Deus por ter me dado a coragem necessária para atingir o meu objetivo de finalizar este curso.

À minha mãe, pai e irmãs, Silvia e Sidnéia, por todo o suporte e por estarem sempre presentes nas horas mais difíceis e necessárias.

Ao meu professor e orientador Teldo Anderson, pela orientação e paciência, incentivo, ensinamentos e dedicação, com os quais me conduziu durante este trabalho e que muito colaborou para o meu crescimento.

Aos professores do curso, em especial aos professores Alberto Sebastião e Jorge Brito (Hulk), pelo incentivo e apoio constante.

Aos amigos e companheiros do curso, em especial ao “grupinho”: Waleska, Douglas, Thiago e Pâmela, pelas discussões, bagunças e pelos bons momentos.

À secretária do curso e amiga Dulce, que me acompanha desde a graduação e sempre disposta a ajudar.

Enfim agradeço a todos que de forma direta ou indireta contribuíram para a realização deste trabalho.

Resumo

Nos últimos 15 anos a indústria do silício têm usado o Si/SiO_2 de forma abrangente, devido à baixa potência e a alta performance em aplicações como na tecnologia CMOS (semicondutor de óxido metálico complementar). Entretanto, a necessidade de reduzir a corrente de tunelamento e o consumo de energia em dispositivos Fets (transistor de efeito de campo de semicondutor de óxido metálico), levou à substituição do SiO_2 como porta dielétrica por materiais alternativos, como maior constante dielétrica (high-k dielectric), tais como HfO_2 e ZrO_2 , e a reposição do poli-Si como eletrodo de porta, pelas portas do metal. Neste trabalho os cálculos foram feitos para avaliar os efeitos do potencial de auto-energia em estruturas de barreiras de tunelamento quântico simples e duplas Si/SiO_2 e Si/HfO_2 . O coeficiente de transmissão foi calculado em função da energia do elétron por meio do método de *mult steps*. Como é sabido os efeitos de carga imagem ao perfil do potencial de estruturas com diferentes constantes dielétricas é relevante. Assim, em nossa simulação levamos em consideração os efeitos de carga imagem que usam a aproximação clássica de Stern [19] e estendemos para estruturas 2D de barreiras quânticas simples e duplas. Os resultados demonstram que o efeito de carga imagem modificam fortemente as barreiras de potenciais das estruturas Si/SiO_2 (Si/HfO_2), produzindo deslocamentos, para o vermelho (azul), na energia de transmissão de elétrons através destas barreiras.

Palavras-chave: tunelamento quântico, transmissão em barreiras quânticas de potencial e correntes de tunelamento.

Áreas do conhecimento: Matéria Condensada, Mecânica Quântica e Física do Estado Sólido.

Abstract

In the last 15 years the industry of Silicon have used the Si/SiO_2 on a comprehensive, due to low power and high performance in applications such as CMOS technology (semiconductor oxide complementary metal). However, the need to reduce the tunneling current and power consumption in devices Fets (field-effect transistor of metal oxide semiconductor), led to the replacement of the SiO_2 as door dielectric materials for alternative, higher dielectric constant (high-k dielectric), such as HfO_2 and ZrO_2 , and replacement of poly-Si as the gate electrode, the doors of the metal. In this work the calculations were made to assess the the potential effects of self-energy barriers in structures of quantum tunneling of single and double Si/SiO_2 and Si/HfO_2 . The transmission coefficient was calculated according to the energy of the electron by means of the *mult steps* method. As is known the effect of loading the image profile of the potential for structures with different dielectric constant is relevant. Thus, in our simulation we took into account the effects of load image using the classical approach of Stern [19] and extended to 2D structures of single and double quantum barriers. The results show that the effect of loading the image strongly modify the potential barriers structures Si/SiO_2 (Si/HfO_2), producing shifts to the red (blue), energy transmission of electrons through these barriers. .

Keywords: quantum tunneling, transmission barriers in quantum of potential and current of tunneling.

Conteúdo

Lista de Figuras		viii
Lista de Tabelas		xii
1	Fundamentação Teórica	1
1.1	Introdução	1
1.2	Heteroestruturas Semicondutoras	5
1.3	Efeito de Carga Imagem: Potencial de auto-energia	8
1.4	Tunelamento Quântico	16
1.5	Escopo da Dissertação	21
2	Propriedades eletrônicas de transporte em barreiras quânticas Si/SiO_2 e Si/HfO_2	23
2.1	Introdução	24
2.2	Estados Eletrônicos em um Potencial Unidimensional Arbitrário	25
2.2.1	Potencial de auto-energia para barreiras abruptas	31
2.2.2	Potencial de auto-energia para barreiras não abruptas	34
2.3	Tunelamento de elétrons em Barreiras Si/SiO_2 e Si/HfO_2 abruptas	38
2.4	Tunelamento de elétrons em Barreiras Si/SiO_2 e Si/HfO_2 não abruptas	43
3	Tunelamento de Elétrons em barreiras duplas: Si/SiO_2 e Si/HfO_2	47
3.1	Introdução	48
3.2	Potencial de auto-energia para barreiras duplas abruptas	49
3.3	Tunelamento de elétrons em Barreiras Duplas Si/SiO_2 e Si/HfO_2	55
4	Conclusão e Perspectivas	59

Apêndice	61
Apêndice A - Potencial de Auto-Energia em Barreiras Quânticas Abruptas	62
Referências	69

Lista de Figuras

1	Aumento exponencial do número de transistores de um chip ao longo do tempo.	3
2	<i>Band Offset</i> calculado para um número de materiais dielétricos com constante dielétrica elevada [1].	4
3	Gráfico da constante dielétrica versus gap para representação dos materiais de alta constante dielétrica [7].	4
4	Variação espacial das bandas de condução e valência em heteroestruturas obtidas por alteração do tipo de semiconductor nas camadas.	6
5	Configuração de cargas equivalentes para o problema de uma carga pontual próxima a uma interface [30].	10
6	Barreira quântica com potencial constante V_0 , onde J_I é o fluxo incidente, Ψ_R é a componente da solução da função de onda associada a reflexão e Ψ_T a componente associada a transmissão.	18
7	Perfil de um potencial arbitrário que está subdividido gradualmente em pequenos passos de potenciais.	26
8	Modelo de barreira quântica abrupta, formada por semiconductor-óxido-semiconductor	31
9	Perfil Barreira Si/SiO_2 . (a) perfil do potencial total $V_{(z)} = \Sigma_{im}(z) + \Delta E_{(z)}$, (b) perfil do potencial $\Delta E_{(z)}$ devido as bandas de energia e (c) perfil devido ao potencial de auto-energia $\Sigma_{im}(z)$	33
10	Perfil Barreira Si/HfO_2 . (a) perfil do potencial total $V_{(z)} = \Sigma_{im}(z) + \Delta E_{(z)}$, (b) perfil do potencial $\Delta E_{(z)}$ devido as bandas de energia e (c) perfil devido ao potencial de auto-energia $\Sigma_{im}(z)$	33
11	Perfil de um potencial com interface gradual Si/SiO_2 .(a) perfil do potencial total $V_{(z)} = \Sigma_{im}(z) + \Delta E_{(z)}$, (b) perfil do potencial $\Delta E_{(z)}$ devido as bandas de energia e (c) perfil devido ao potencial de auto-energia $\Sigma_{im}(z)$	37

- 12 Perfil de um potencial com interface gradual Si/HfO_2 . (a) perfil do potencial total $V_{(z)} = \Sigma_{im}(z) + \Delta E_{(z)}$, (b) perfil do potencial $\Delta E_{(z)}$ devido as bandas de energia e (c) perfil devido ao potencial de auto-energia $\Sigma_{im}(z)$ 37
- 13 (a) Coeficiente de Transmissão para barreira Si/SiO_2 com 1nm de largura, sem efeito do potencial de auto-energia (linha tracejada) e com efeito do potencial de auto-energia (linha tracejada), (b) perfil do potencial total $V_{(z)} = \Sigma_{im}(z) + \Delta E_{(z)}$ e (c) perfil do potencial $\Delta E_{(z)}$ devido as bandas de energia. 40
- 14 (a) Coeficiente de Transmissão para barreira Si/SiO_2 com 5nm de largura, sem efeito do potencial de auto-energia (linha tracejada) e com efeito do potencial de auto-energia (linha tracejada), (b) perfil do potencial total $V_{(z)} = \Sigma_{im}(z) + \Delta E_{(z)}$ e (c) perfil do potencial $\Delta E_{(z)}$ devido as bandas de energia. 41
- 15 (a) Coeficiente de Transmissão para barreira Si/HfO_2 com 1nm de largura, sem efeito do potencial de auto-energia (linha tracejada) e com efeito do potencial de auto-energia (linha tracejada), (b) perfil do potencial total $V_{(z)} = \Sigma_{im}(z) + \Delta E_{(z)}$ e (c) perfil do potencial $\Delta E_{(z)}$ devido as bandas de energia. 42
- 16 (a) Coeficiente de Transmissão para barreira Si/HfO_2 com 5nm de largura, sem efeito do potencial de auto-energia (linha tracejada) e com efeito do potencial de auto-energia (linha tracejada), (b) perfil do potencial total $V_{(z)} = \Sigma_{im}(z) + \Delta E_{(z)}$ e (c) perfil do potencial $\Delta E_{(z)}$ devido as bandas de energia. 43
- 17 Modelo de barreira quântica não abrupta, formada por semiconductor-óxido-semiconductor. 44
- 18 (a) Coeficiente de Transmissão para barreira Si/SiO_2 com interface de 1nm e largura de 3nm, sem efeito do potencial de auto-energia (linha tracejada), com efeito do potencial de auto-energia (linha tracejada) e para barreira abrupta de 3nm com potencial $V_{(z)}$, (b) perfil do potencial total $V_{(z)} = \Sigma_{im}(z) + \Delta E_{(z)}$ e (c) perfil do potencial $\Delta E_{(z)}$ devido as bandas de energia. 46

- 19 (a) Coeficiente de Transmissão para barreira Si/HfO_2 com interface de 1nm e largura de 3nm, sem efeito do potencial de auto-energia (linha tracejada), com efeito do potencial de auto-energia (linha tracejada) e para barreira abrupta de 3nm com potencial $V_{(z)}$, (b) perfil do potencial total $V_{(z)} = \Sigma_{im}(z) + \Delta E_{(z)}$ e (c) perfil do potencial $\Delta E_{(z)}$ devido as bandas de energia. 46
- 20 Tunelamento ressonante de elétrons em um sistema de barreiras duplas.(a) esquema de um sistema submetido a uma diferença de potencial V entre um emissor e o coletor.(b) forma qualitativa de corrente de tunelamento em dispositivos de barreiras duplas. 48
- 21 Em (a) modelo de crescimento da barreira dupla, em (b) modelo do potencial devido as bandas de energia. 49
- 22 O potencial de confinamento tem altura ΔE_e e a largura do poço igual à $L = 2a$. Os três primeiros estados de energia previstos pela teoria quântica são mostrados pelas linhas horizontais tracejadas e suas respectivas funções de onda são mostradas em linhas sólidas. 50
- 23 Representação esquemática de uma função de onda em uma barreira dupla simétrica, com (a) energia incidente igual a um estado confinado (em ressonância) e (b) energia diferente de um estado confinado (fora de ressonância). 51
- 24 Perfil da barreira dupla Si/SiO_2 . (a) perfil do potencial total $V_{(z)} = \Sigma_{im}(z) + \Delta E_{(z)}$, (b) perfil do potencial $\Delta E_{(z)}$ devido as bandas de energia e (c) perfil devido ao potencial de auto-energia $\Sigma_{im}(z)$ 54
- 25 Perfil da barreira dupla Si/HfO_2 . (a) perfil do potencial total $V_{(z)} = \Sigma_{im}(z) + \Delta E_{(z)}$, (b) perfil do potencial $\Delta E_{(z)}$ devido as bandas de energia e (c) perfil devido ao potencial de auto-energia $\Sigma_{im}(z)$ 54
- 26 (a) Coeficiente de Transmissão para barreira dupla Si/SiO_2 com largura de poço com $L=5$ nm e barreiras com espessura $\sigma = 1$ nm, sem efeito do potencial de auto-energia (linha tracejada) e com efeito do potencial de auto-energia (linha sólida), (b) representação esquemática de funções de onda que penetram a barreira Si/SiO_2 , em ressonância e fora de ressonância. 56

-
- 27 (a) Coeficiente de Transmissão para barreira dupla Si/HfO_2 com largura de poço com $L=5$ nm e barreiras com espessura $\sigma = 1$ nm, sem efeito do potencial de auto-energia (linha tracejada) e com efeito do potencial de auto-energia (linha sólida), (b) representação esquemática de funções de onda que penetram a barreira Si/HfO_2 , em ressonância e fora de ressonância. 57
- 28 Modelo da barreira dupla para a carga localizada em $z_0 < -(a + \sigma)$ 62

Lista de Tabelas

1	Interpolação linear entre a constante dielétrica do silício ε_1 e a constante dielétrica do óxido ε_2 , na região das interfaces	35
2	Parâmetros dos Materiais. Referências [32, 33, 34, 35, 36]	39

1 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

1.1 Introdução

Os primeiros dispositivos utilizando materiais semicondutores remontam a 1947, quando W.Schockley, W. Brattain e J. Bardeen nos Estados Unidos da América tiveram sucesso em fabricar o primeiro transistor de estado sólido. Os transistores são as unidades fundamentais que compõem os microprocessadores, hoje presentes em todos equipamentos eletrônicos digitais, circuitos de memória de PCs, leitores de CD e DVD, TV e vídeo etc. Àquela época, as dimensões dos transistores ainda eram de alguns centímetros.

A evolução tecnológica dos equipamentos eletrônicos tem por base o avanço da tecnologia dos materiais semicondutores, isso se deve a uma série de técnicas e conhecimentos multidisciplinares que estabelecem um relacionamento na ciência que abrange as atividades na tecnologia de informação, ciências exatas, ciências biológicas e engenharias: a Nanociência e Nanotecnologia. Ela trata das aplicações e desenvolvimento de nanoestruturas e nanodispositivos utilizando, de maneira adequada às necessidades, as propriedades físicas e químicas de novos materiais.

Nos anos 50 e 60 os dispositivos semicondutores eram fabricados com dimensões milimétricas, já chegando mesmo a alguns microns, os primeiros rádios portáteis tinham essa tecnologia. Foi a era de ouro para a corrida à miniaturização dos dispositivos semicondutores e que levou ao desenvolvimento de aparelhos elétricos e eletrônicos cada vez mais compactos como telefones, aparelhos de som, TV, etc; os quais vieram a se tornar comerciais a partir das décadas de 70 e 80.

A revolução da miniaturização continuou nas décadas de 70 e 80, quando se iniciou a fabricação de dispositivos e circuitos integrados digitais contendo componentes com dimensões sub-micrométricas. Este conhecimento permitiu integrar grandes quantidades de circuitos sobre um mesmo substrato semicondutor, de forma que, quanto maior o número de circuitos integrados melhor a funcionalidade no dispositivo. Com a miniaturização nas dimensões dos dispositivos, ocorre um incremento em seu desempenho e uma redução no consumo de energia, o que explica a imensa evolução registrada na eletrônica nas últimas quatro décadas, valendo-se da tecnologia planar de fabricação de circuitos integrados [1].

Na literatura frequentemente, tem sido reportado uma grande quantidade de trabalhos relacionados à nanotecnologia de semicondutores que, possivelmente, num futuro próximo poderão ser aplicados ao desenvolvimento de novos dispositivos [2, 3, 4]. Em meados de 1965 Gordon Moore, um dos fundadores da Intel, previu que a capacidade de um chip de computador dobraria a cada 18 meses em função da miniaturização dos dispositivos e a crescente evolução tecnológica, o que ficou conhecido como lei de Moore. Previsão que vem se confirmando nos dias de hoje. A capacidade de processamento dos chips aumenta exponencialmente com o número de componentes que o compõem. Para que isso ocorra é preciso reduzir o tamanho dos componentes, de forma a capacitar o avanço tecnológico previsto por Moore, Fig. 1.

Com a redução nas dimensões dos dispositivos eletrônicos, cada vez mais próximos da escala atômica, as portas dielétricas precisam ser mais finas, assim os efeitos quânticos não podem ser mais desprezados [5, 6] e devem ser considerados em toda sua generalidade. O uso contínuo do dióxido de silício (SiO_2) como porta dielétrica em dispositivos eletrônicos, como os transistores e capacitores, começou a ter limitações fundamentais

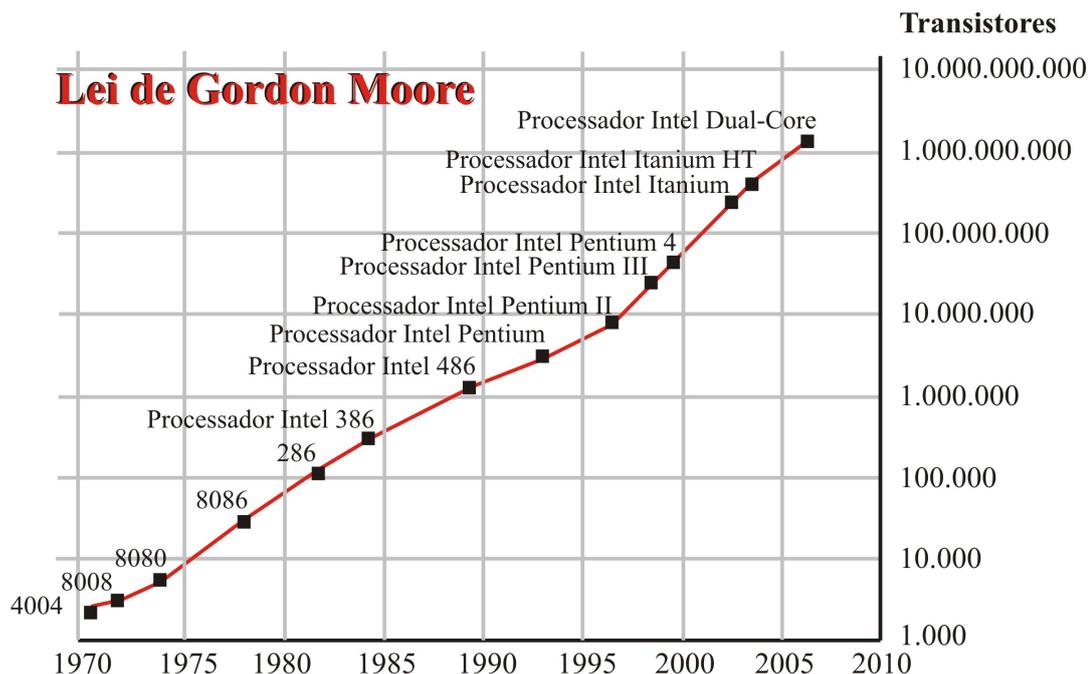


Figura 1: Aumento exponencial do número de transistores de um chip ao longo do tempo.

nos últimos anos. Embora sua espessura esteja abaixo da escala de 20\AA , ainda está longe de alcançar a espessura requerida para o próximo nível desejado de desempenho, abaixo de 10\AA , com correntes de tunelamento aceitáveis.

Esforços gastos para encontrar alternativas para o SiO_2 se voltaram a óxidos amorfos, na tentativa de estender os conceitos da estrutura Si/SiO_2 . Os materiais dielétricos encontrados na literatura, que podem substituí-lo possuem, em geral, constantes dielétricas muito elevadas.

O SiO_2 possui um gap largo da ordem de 8.9 eV em comparação com o Si , cujo gap fica em torno de 1.1 eV . Uma propriedade relacionada à diferença de gap entre os materiais é a altura da barreira de potencial presente para tunelamento de elétrons na banda de condução e de buracos na banda de valência. Podemos observar na Fig. 2 que o potencial de confinamento de elétrons em uma heteroestrutura Si/SiO_2 é igual a 3.5 eV ; e para buracos 4.4 eV , em comparação com outras estruturas formadas com materiais de elevada constante dielétrica.

Foi observado por Kawamoto [7] que a maioria dos materiais com constante dielétrica elevada (high-k dielétricos) tem *gap* menor que o *gap* do SiO_2 , isso é mostrado na Fig. 3, que mostra a relação aproximadamente inversa entre *bandgap* e constante dielétrica estática obedecida por alguns dielétricos com constante dielétrica elevada.

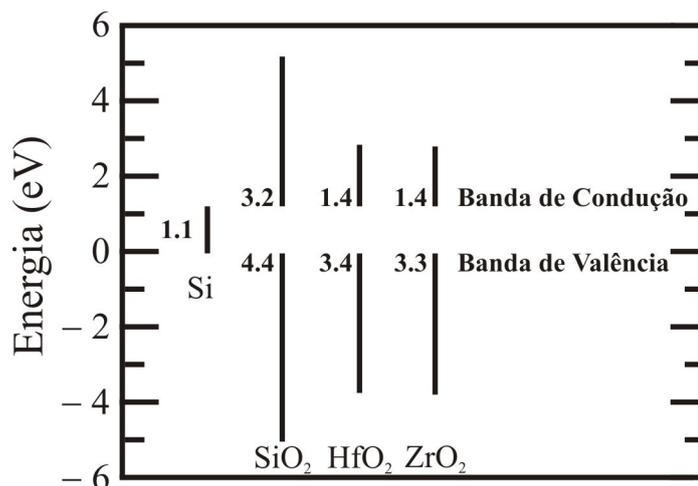


Figura 2: *Band Offset* calculado para um número de materiais dielétricos com constante dielétrica elevada [1].

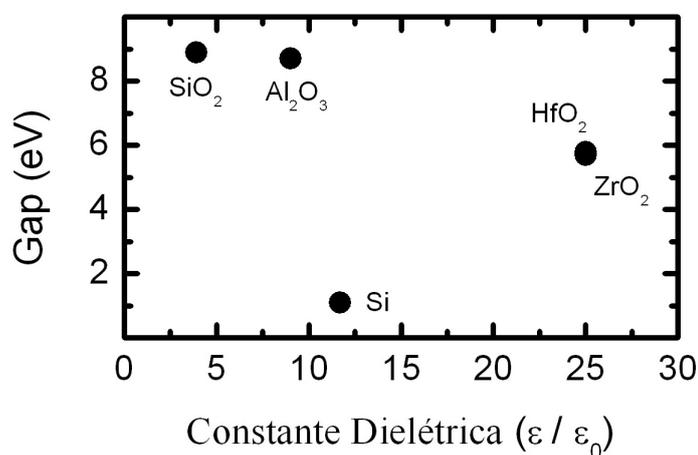


Figura 3: Gráfico da constante dielétrica versus *gap* para representação dos materiais de alta constante dielétrica [7].

A qualidade da interface formada com o *Si* é que diz se alguns dielétricos, com constantes dielétricas elevadas, são viáveis ou não, pois há duas considerações relevantes no crescimento de uma interface: a formação de defeitos e a estabilidade térmica.

1.2 Heteroestruturas Semicondutoras

A viabilização no avanço da fabricação de dispositivos miniaturizados nessas últimas décadas é baseada em pesquisas de estruturas semicondutoras, o que possibilitou o surgimento de novos materiais. Nos dias atuais é possível a produção de heteroestruturas quânticas, que apresentam propriedades ópticas e eletrônicas, distintas das apresentadas pelo semicondutor *bulk*¹, tendo sua forma e composição química controlados com precisão de angstroms. Por serem tão pequenos os fatores de escala (que no caso pode ser largura de camadas e de interface) desses dispositivos tornaram-se bastante proeminentes e determinantes na forma da função de onda dos portadores de carga, afetando diretamente suas propriedades eletrônicas.

Os pioneiros, em 1970, a estudar as propriedades eletrônicas de heteroestruturas semicondutoras com dimensões reduzidas foram Esaki e Tsu [8], o que impulsionou pesquisas nesses sistemas semicondutores. Eles propuseram que estruturas de potenciais unidimensionais baseados em semicondutores, poderiam ser obtidas por justaposição de finas camadas alternadas dos mesmos, assim previram a possibilidade de formação de heteroestruturas de duas formas básicas. A primeira se obtém variando o grau de dopagem em uma matriz semicondutora básica, onde é detectado o encurvamento das bandas de energia; e a segunda forma, mostrada na Fig. 4, origina-se a partir da variação do tipo de semicondutor nas camadas. Nessas heteroestruturas é dada importância ao padrão de descontinuidade nas bandas de energia e às massas efetivas dos portadores - elétrons e buracos.

Este trabalho levou ao desenvolvimento de processos de crescimento de heteroestruturas, dos quais, podemos destacar o processo CVD (*Chemical Vapor Deposition*) onde, após a deposição, há formação de uma região

¹semicondutor *bulk* é caracterizado por conter apenas uma espécie de material em sua composição

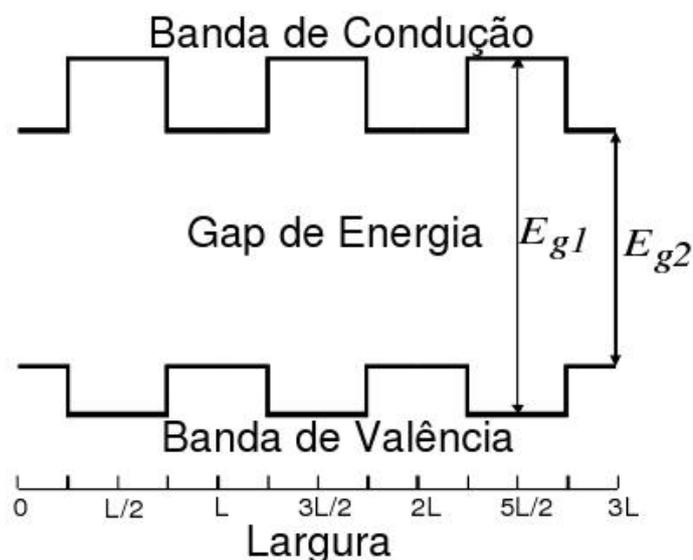


Figura 4: Variação espacial das bandas de condução e valência em heteroestruturas obtidas por alteração do tipo de semiconductor nas camadas.

interfacial óxida, inevitável e necessária para a manutenção de uma boa propriedade de transporte nas interfaces.

Durante as últimas três décadas, o MBE (*Molecular Beam Epitaxy*), a epitaxia² por feixe molecular se estabeleceu como uma técnica excelente para o crescimento de camadas semicondutoras de alta qualidade, tanto para a construção de dispositivos quanto para a pesquisa básica. Esse método apesar de sofisticado é mais flexível no crescimento epitaxial de filmes finos, metais e dielétricos [9]. A idéia básica desse processo foi desenvolvida em 1958, por Günther [10], para a deposição de filmes semicondutores compostos, formados por elementos dos grupos III e V da tabela periódica dos elementos químicos. Arthur [11] foi o primeiro a realizar estudos fundamentais sobre o comportamento cinético da evaporação de *Ga* e *As* em superfícies *GaAs*; e o uso do processo de crescimento de filmes finos para a fabricação de dispositivos foi aplicado por Cho [12, 13] em 1970, e ainda se faz crescimento por MBE de portas óxidas com constantes

²Epitaxia é um processo de acrescentar material a uma estrutura cristalina de modo ordenado, a fim de que o filme reproduza a estrutura cristalina do substrato, onde o material depositado deve possuir características moleculares semelhantes para poder acompanhar o plano de cristalização do substrato

dielétricas elevadas.

A qualidade da interface pode ser analisada por exemplo pela técnica RHEED (*Reflection High Energy Electron Diffraction*), onde o grande problema, no crescimento de materiais, é minimizar o espalhamento por impurezas agregadas das ligas ou irregularidades nas interfaces, para que os portadores possam fluir com menor impedimento possível pelas interfaces, localizadas nas extremidades das bandas de valência e condução, onde ocorre a mudança de uma componente para outra heterojunção³ semicondutora.

A heterojunção ideal é aquela que apresenta uma interface sem distorções devido a variação dos componentes da heteroestrutura, o que não é possível com as atuais técnicas de crescimento.

O potencial de confinamento dos portadores origina-se a partir da fração da diferença entre os gaps de energia dos materiais semicondutores que formam a heterojunção. A grandeza desta fração é denominada *band offset*, e sua determinação é um dos problemas importantes da física de sistemas semicondutores de dimensionalidade reduzida (poços quânticos, barreiras quânticas, fios quânticos e pontos quânticos)[14, 15].

A mudança de um tipo de semicondutor para outro não ocorre localmente, isto é, em um único plano atômico, o que acarretaria em uma heterojunção abrupta, mas como há ligações químicas mistas entre os átomos da interface, isso produz regiões interfaciais (não abruptas).

Um dos modelos teóricos existentes no estudo das propriedades de heteroestruturas abruptas e não abruptas é a teoria da massa efetiva, EMT: *Effective Mass Theory* [16, 17], que consiste em transformar o problema inicialmente complicado do movimento de um portador num cristal, sujeito

³Heterojunção é a interface da união de dois materiais sólidos cujo *gap* entre as bandas de valência e condução seja diferente.

a um potencial externo adicional, num problema mais simples, correspondente ao movimento do portador no espaço livre com o mesmo potencial externo, onde todos os efeitos da estrutura cristalina (potencial interno) estão embutidos em um tensor denominado de massa efetiva, cujos elementos são determinados pelos parâmetros que descrevem essa aproximação para cada tipo de material escolhido. Um problema importante na utilização da EMT em heteroestruturas semicondutoras é a dependência espacial da massa efetiva dos portadores.

De acordo com a teoria clássica, uma carga pontual situada a uma distância d da superfície de um condutor perfeito ocasiona o aparecimento de uma carga de mesmo módulo, mas de sinal contrário, no ponto exatamente oposto com relação à superfície. Caso a carga esteja no interior de um poço quântico a distribuição de cargas fictícias deve ser escolhida de modo a reproduzir exatamente as condições de contorno dentro da região em que o problema está definido, não importando o que ocorra fora dos seus limites. Esse procedimento configura o método das imagens, que será discutido na secção 1.3 deste trabalho. Se houver uma diferença relevante entre as constantes dielétricas dos materiais que formam a heteroestrutura, o efeito ocasionado pelas cargas imagem torna-se relevante.

Para geometria simples, métodos baseados nas cargas imagem apresentam a vantagem de prover soluções analíticas da equação de Poisson.

1.3 Efeito de Carga Imagem: Potencial de auto-energia

Na óptica é comum a utilização da imagem, em particular, olhando para a imagem de um objeto refletida em um espelho, podemos imaginar um objeto em uma determinada posição. Mas o que vemos na verdade são raios luminosos refletidos em uma superfície, e que chegam aos nossos

olhos dando a impressão de haver um objeto em um determinado lugar, mas que na verdade é apenas a imagem do mesmo.

Em 1881 James Clerk Maxwell (1831-1879) no capítulo VII do seu livro “An Elementary Treatise on Electricity” trata da teoria, das cargas-imagem. Fazendo uso dessa teoria muitos problemas relacionados com a distribuição de cargas na superfície de corpos podem ser simplificados ou resolvidos, usando a mesma idéia da imagem em problemas de óptica.

Na eletrostática existem problemas que envolvem condições de contorno nos quais a distribuição de cargas especificadas está de uma forma tal que se torna muito complexo a resolução da equação de Poisson. Então nestes casos pode-se tentar uma abordagem diferente, que consiste na substituição das condições de contorno dadas por uma distribuição de cargas situada fora da região de interesse, que é aquela onde se quer obter o potencial. Essa distribuição de cargas fictícias, chamadas de *cargas imagens*, deve ser escolhida de modo a reproduzir exatamente as condições de contorno dentro da região em que o problema está definido, não importando o que ocorra fora dos seus limites [18]. Esse procedimento configura o *método das imagens*, tratado por Maxwell em seu trabalho.

O mais simples dos problemas, no que diz respeito ao método das imagens é relacionado ao estudo de um sistema formado por uma carga Q , pontual e localizada próximo a uma interface condutora aterrada, mantida num potencial fixo e nulo, devido ao aterramento da interface.

Fisicamente, o que ocorre neste caso é que o plano fica submetido ao campo elétrico gerado pela carga, e isso faz com que seus elétrons se movam, produzindo uma carga elétrica induzida sobre o plano. Essa carga induzida gera um campo elétrico que se soma vetorialmente ao da carga pontual, produzindo o campo total. A interface intercepta todas as linhas de campo que partem da posição da carga pontual. Esta configuração de campo

elétrico poderia ser substituída por uma outra em que se considera uma carga Q em $r_{\vec{Q}}$ e uma carga imagem Q' , situada de forma simétrica em relação à interface, na posição $r_{\vec{Q}'}$, $|r_{\vec{Q}}| = |r_{\vec{Q}'}|$, como se fosse a imagem num espelho.

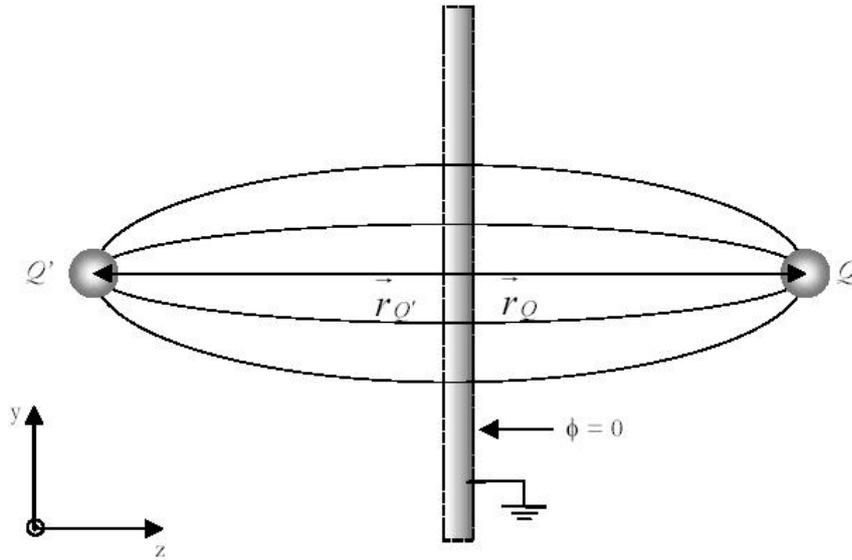


Figura 5: Configuração de cargas equivalentes para o problema de uma carga pontual próxima a uma interface [30].

A presença de uma carga pontual Q localizada em $r_{\vec{0}}$ e um meio que a permissividade dielétrica varia espacialmente, o potencial eletrostático pode ser resolvido através da Equação de Poisson.

Partindo da 1ª lei de Maxwell, onde:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho \quad (1.1)$$

onde \vec{D} é conhecido como deslocamento elétrico e pode ser escrito como:

$$\vec{D} = \varepsilon_{(z)} \vec{E}$$

e

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi(\vec{r})$$

assim a equação 1.1, pode ser escrita da forma:

$$\vec{\nabla}\varepsilon_{(z)}[-\vec{\nabla}\phi(\vec{r})] = \rho \quad (1.2)$$

ou

$$\nabla^2\phi(\vec{r}) = -\frac{\rho}{\varepsilon},$$

que é a equação de Poisson, com a constante dielétrica invariante com a posição.

Quando temos um problema envolvendo distribuições contínuas de cargas, é conveniente incluir essas cargas na densidade de carga total. Isto pode ser feito através do uso de funções delta de Dirac. Se uma dada carga Q está localizada na posição \vec{r}_0 , a densidade de carga associada a essa carga é escrita como

$$\rho(\vec{r}) = Q\delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$$

Então a equação 1.2 pode ser expressa como

$$\vec{\nabla} \cdot (\varepsilon_{(z)} \vec{\nabla} \phi_{(\vec{r})}) = -Q\delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \quad (1.3)$$

Do 1º membro, desta equação, teremos que:

$$\vec{\nabla} \cdot (\varepsilon_{(z)} \vec{\nabla} \phi_{(\vec{r})}) = \varepsilon_{(z)} \nabla^2 \phi_{(\vec{r})} + \vec{\nabla} \varepsilon_{(z)} \vec{\nabla} \phi_{(\vec{r})}$$

que substituindo na Eq.1.3, obtemos:

$$\varepsilon_{(z)} \nabla^2 \phi_{(\vec{r})} + \vec{\nabla} \varepsilon_{(z)} \vec{\nabla} \phi_{(\vec{r})} = -Q\delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \quad (1.4)$$

Uma vez que é desejado considerar interfaces graduais entre diferentes dielétricos, se a permissividade dielétrica (ε) for uma função apenas da coordenada z , pode-se considerar a posição da carga na origem do eixo x e y , e introduzir a coordenada radial ρ bidimensional. Nesta simetria foi utilizada uma solução para $\phi_{(\vec{r})}$ na forma de expansão em Fourier-Bessel, [19].

$$\phi_{(\vec{r})} = \int_0^\infty q J_0(qR) A_q(z) dq, \quad (1.5)$$

onde o coeficiente $A_q(z)$ será determinado a partir da solução da equação de Poisson e $J_0(x)$ é a função de Bessel de ordem zero. Assim;

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

ou após aplicar o operador ∇ , teremos que:

$$\begin{aligned} \nabla^2 \phi = & \int_0^\infty q [J(qR) \nabla^2 A_q(z) \\ & + A_q(z) \nabla^2 J_0(qR) + 2 \nabla J(qR) \nabla A_q(z)] dq \end{aligned} \quad (1.6)$$

Calculando cada termo separadamente e utilizando para o problema o operador ∇ em coordenadas cilíndricas, obtemos;

$$\nabla^2 A_q(z) = A_q''(z) \quad (1.7)$$

$$\nabla^2 J_0(qR) = -q^2 J_0(qR) \quad (1.8)$$

$$\vec{\nabla} J_0(qR) = -q J_1(qR) \hat{a}_R \quad (1.9)$$

$$\vec{\nabla} A_q(z) = A_q'(z) \hat{a}_z \quad (1.10)$$

Aplicando as equações (1.7), (1.8), (1.9) e (1.10) na equação (1.6), temos:

$$\nabla^2 \phi = \int_0^\infty q J_0(qR) [A_q''(z) - q^2 A_q(z)] dq \quad (1.11)$$

Calculando $\vec{\nabla} \varepsilon_{(z)}$ e $\vec{\nabla} \phi_{(r)}$, teremos que:

$$\vec{\nabla}\varepsilon(z) = \varepsilon'(z)\hat{k} \quad (1.12)$$

$$\vec{\nabla}\phi(r) = \int_0^\infty q[-qJ_1(qR)A_q\hat{a}_R + J_0A'_q(z)\hat{k}]dq \quad (1.13)$$

Agora substituindo as equações (1.11), (1.12) e (1.13) na equação (1.4) e usando $\delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$ em termos de coordenadas cilíndricas;

$$\begin{aligned} \int_0^\infty q J_0(qR) \left(A_q''(z) + \frac{\varepsilon'(z)}{\varepsilon(z)} A_q'(z) - q^2 A_q(z) \right) dq \\ = \frac{-Q}{\varepsilon(z)} \frac{1}{R} \delta(R - R_0) \delta(\phi - \phi_0) \delta(z - z_0) \end{aligned} \quad (1.14)$$

Integrando em ϕ : de 0 a 2π , e multiplicando a equação por $RJ_0(q'R)$, teremos:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty Rq J_0(qR)J_0(q'R) \left(A_q''(z) + \frac{\varepsilon'(z)}{\varepsilon(z)} A_q'(z) - q^2 A_q(z) \right) dq \\ = \frac{-Q}{2\pi\varepsilon(z)} J_0(q'R) \delta(R - R_0) \delta(z - z_0) \end{aligned}$$

Integrando em R : de 0 a ∞ :

$$\begin{aligned} \int_0^\infty R J_0(qR)J_0(q'R)dR \int_0^\infty q \left(A_q''(z) + \frac{\varepsilon'(z)}{\varepsilon(z)} A_q'(z) - q^2 A_q(z) \right) dq \\ = \frac{-Q\delta(z - z_0)}{2\pi\varepsilon(z)} \int_0^\infty J_0(q'R) \delta(R - R_0) dR \end{aligned}$$

sendo que:

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

e

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

assim:

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

Integrando e sabendo que para $R_0 = 0$ temos que $J_0(q'0) = 1$;

$$A_q''(z) + \frac{\varepsilon'(z)}{\varepsilon(z)} A_q'(z) - q^2 A_q(z) = \frac{-Q}{2\pi\varepsilon(z)} \delta(z - z_0) \quad (1.15)$$

Se a constante dielétrica independe da posição em z , então $\varepsilon'(z) = 0$ e a solução da equação (1.15) se reduz a:

$$A_q^0(z) = \frac{Q}{4\pi q \varepsilon(z)} e^{-q|z-z_0|}, \quad (1.16)$$

o potencial encontrado será o potencial coulombiano;

$$\phi(\vec{r}) = \frac{Q}{4\pi\epsilon_{(z_0)}|\vec{r} - \vec{r}_0|}, \quad (1.17)$$

divergente na posição da carga. O potencial imagem ou potencial de auto energia determina o efeito da variação espacial da constante dielétrica sobre o potencial na posição da carga. Esse potencial é determinado por:

$$\Sigma_{im}(z_0) = \frac{Q}{2} \int_0^\infty q[A_q(z_0) - A_q^0(z_0)]dq \quad (1.18)$$

onde o fator $\frac{1}{2}$ é considerado devido ao potencial ser uma função de auto-energia. Esta última equação determina o efeito do potencial de auto energia ao longo da direção de crescimento (direção z) de estruturas cuja constante dielétrica varia com a posição, como é o caso de poços e barreiras quânticas formadas por *Si* e *SiO₂* e óxidos high-k.

1.4 Tunelamento Quântico

O Tunelamento de partículas através de barreiras de potencial representa um dos problemas mais fundamentais de Mecânica Quântica, onde se tornou conhecido o efeito túnel, cuja ocorrência é uma das manifestações mais interessantes do comportamento ondulatório da matéria. Ocorre quando uma partícula viola os princípios da mecânica clássica, penetrando ou atravessando uma barreira que possui energia potencial maior que sua energia cinética. Segundo a mecânica quântica as partículas podem exibir comportamento ondulatório ou corpuscular, desta forma essa transmissão ocorre devido ao comportamento ondulatório dessas partículas. O módulo do quadrado da função de onda de uma partícula representa a probabilidade de encontrar a partícula em determinada posição.

O conceito quântico de tunelamento foi primeiro aplicado por Gamov (1928) para explicar o decaimento α em núcleos pesados, e em seguida por Oppenheimer, para a ionização dos átomos de hidrogênio. Na Física do Estado Sólido este efeito foi introduzido inicialmente por Fowler e Nordheim [20] para se estudar a emissão eletrônica em metais e por Zener [21], em 1934, para estudar o movimento de elétrons através de bandas de energia proibidas. Em 1958, este efeito foi incorporado por Leo Esaki na descrição do funcionamento de um diodo túnel, dispositivo que funciona através de tunelamento de elétrons em materiais semicondutores, são largamente usados em circuitos eletrônicos rápidos devido à sua alta frequência de resposta, um marco importante que deu início a era dos dispositivos semicondutores quânticos com grandes modificações na eletrônica da época. Assim, o tunelamento quântico tem se constituído em um instrumento importante para a compreensão da natureza e do comportamento microscópico das partículas que se movimentam em estruturas como barreiras, poços, fios e pontos quânticos.

Nestes estudos é comum o uso de modelos que podem ser divididos em regiões espaciais, nas quais estes potenciais (que descrevem interações entre partículas) podem ser aproximados por patamares constantes. Neste caso, como as regiões de transição dos potenciais entre os patamares vizinhos estão restritos a regiões espaciais muito pequenas, então estas transições do potencial podem ser assumidas como abruptas [22].

Outro aspecto importante está relacionado com a tridimensionalidade dos sistemas físicos dos dispositivos. Alguns de seus aspectos mais fundamentais podem ser estudados através de modelos físicos simples, cujos cálculos são baseados no uso de potenciais unidimensionais. Potenciais unidimensionais oferecem um exemplo instrutivo e o seu uso no estudo de confinamento e tunelamento de portadores de carga, em dispositivos se-

micondutores apresenta-se sempre vantajoso como uma primeira abordagem investigativa, que possibilita obter resultados qualitativos dos aspectos físicos do sistema em questão.

O estudo das propriedades ondulatórias associadas a propagação de uma partícula quântica de massa m e energia cinética E que se movimenta ao longo da direção z e incide sobre um potencial $V(z)$, Fig. 6, pode ser feito através da solução da equação de Schrödinger independente do tempo:

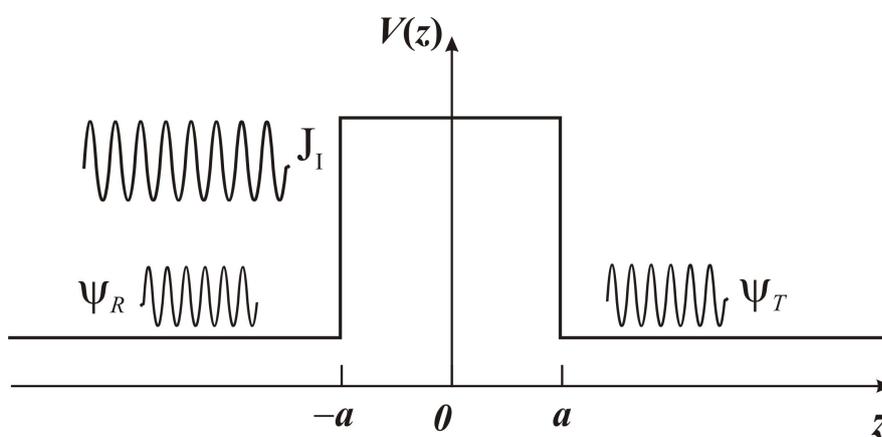


Figura 6: Barreira quântica com potencial constante V_0 , onde J_I é o fluxo incidente, Ψ_R é a componente da solução da função de onda associada a reflexão e Ψ_T a componente associada a transmissão.

$$-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dz^2} \Psi(z) + V(z) \Psi(z) = E \Psi(z) \quad (1.19)$$

Uma vez definida a forma do potencial $V(z)$ é possível obter a solução geral para a função de onda $\Psi(z)$, associada a partícula, a partir dela, identificar suas componentes associadas à incidência [$\Psi_I(z)$], reflexão [$\Psi_R(z)$] e transmissão [$\Psi_T(z)$] do portador neste potencial. Para o problema proposto pelo presente trabalho, o potencial $V(z)$ consiste de uma barreira de potencial $\Delta E_{(z)}$, devido a descontinuidade das bandas de energia dos materiais, na posição de interface entre os mesmos, mais o potencial de

auto energia $\Sigma_{im}(z)$ devido à descontinuidade da constante dielétrica dos materiais na posição da interface (Eq. 1.18).

$$V_{(z)} = \Delta E_{(z)} + \Sigma_{im}(z) \quad (1.20)$$

As densidades de correntes, há fluxos, para cada uma dessas possibilidades de ocorrências (incidência, reflexão e transmissão) podem ser obtidas através da expressão:

$$J_{(z)} = \frac{\hbar}{2m_i} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial Z} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial Z} \Psi \right) \quad (1.21)$$

particularizada para cada uma das componentes da função de onda em questão.

Os coeficientes de reflexão $R_{(E)}$ e transmissão $T_{(E)}$ do portador pelo potencial $V_{(z)}$ são definidos pelas relações:

$$\begin{aligned} R_{(E)} &= \frac{|J_R|}{|J_I|}; \\ T_{(E)} &= \left(\frac{J_T}{J_I} \right) \end{aligned} \quad (1.22)$$

onde J_I , J_R e J_T representam os fluxos incidente, refletido e transmitido, respectivamente. Sendo $V_{(z)}$ um potencial representado por uma função real, então reflexão e transmissão são as únicas possibilidades para as partículas que incidem sobre este potencial, de modo que devemos ter:

$$R_{(E)} + T_{(E)} = 1 \quad (1.23)$$

que representa a conservação do fluxo de probabilidade.

Sendo $V_{(z)}$ constante nos domínios dos feixes incidente, refletido e transmitido, então as componentes da função de onda nestas regiões são descritas por:

$$\begin{aligned}\Psi_I(z) &= C_I e^{iK_1 z} \\ \Psi_R(z) &= C_R e^{-iK_1 z} \\ \Psi_T(z) &= C_T e^{iK_3 z}\end{aligned}\tag{1.24}$$

onde C_I , C_R e C_T representam as respectivas amplitudes e K_1 e K_3 os vetores de onda na região do potencial.

Os fluxos de incidência, reflexão e transmissão a partir das equações (1.21) e (1.24), resultam em respectivamente:

$$\begin{aligned}J_I(z) &= \frac{\hbar K_1}{m} |A_I|^2 \\ J_R(z) &= -\frac{\hbar K_1}{m} |A_R|^2 \\ J_T(z) &= \frac{\hbar K_3}{m} |A_T|^2\end{aligned}\tag{1.25}$$

Substituindo a equação (1.25) na equação (1.22), obtemos:

$$\begin{aligned}R_{(E)} &= \left| \frac{A_R}{A_I} \right|^2; \\ T_{(E)} &= \frac{K_3}{K_1} \left| \frac{A_T}{A_I} \right|^2\end{aligned}\tag{1.26}$$

As razões A_R/A_I e A_T/A_I são obtidas através da solução da equação

de Schrödinger, equação (1.19), ao longo de todo domínio do potencial, levando em consideração as condições de continuidade da função de onda $\Psi_{(z)}$ e da sua derivada primeira $\partial\Psi_{(z)}/\partial Z$ nos pontos de descontinuidade do potencial $V_{(z)}$.

1.5 Escopo da Dissertação

Este trabalho tem como objetivo investigar o tunelamento de elétrons em heteroestruturas formadas por materiais de diferentes constantes dielétricas. Esse estudo foi realizado em barreiras quânticas de Si/SiO_2 e Si/HfO_2 simétricas simples, abruptas e não abruptas; e barreiras duplas abruptas.

No intuito de contornar o problema de polarização elétrica devido ao campo de portadores vizinhos, grande parte dos trabalhos sobre distribuição de potencial utiliza técnicas numéricas, que no caso deste trabalho, o método de cargas imagem apresentou-se como uma boa aproximação nas soluções analíticas da equação de Poisson, devido à geometria do problema.

No Capítulo 1 foi apresentado os principais aspectos teóricos, necessários para a compreensão do trabalho.

No Capítulo 2 é feita uma breve revisão bibliográfica de trabalhos anteriores, é desenvolvido o método de degraus múltiplos proposto por Ando e Itoh para solucionar numericamente a equação de Schrödinger em um potencial arbitrário. Demonstramos que os efeitos de cargas imagem, induzidas pelas diferentes constantes dielétricas, modificam a estrutura eletrônica destas barreiras quânticas. A interpretação dos resultados obtidos foram associados a mudança na transmissão, nesses sistemas quânticos, devido a variação das constantes dielétricas.

No Capítulo 3 é mostrado o tunelamento ressonante em barreiras duplas Si/SiO_2 e Si/HfO_2 e discutidos os resultados obtidos.

No Capítulo 4 são feitas as conclusões destes estudos e futuras perspectivas.

Em seguida é apresentado no Apêndice A o cálculo do potencial de auto-energia para uma barreira dupla, com uma carga puntual localizada no eixo $z = z_0$, em uma das regiões da estrutura, por fim são listadas as referências bibliográficas usadas para a realização deste trabalho.

2 PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DE TRANSPORTE EM BARREIRAS QUÂNTICAS SI/SiO₂ E SI/HfO₂

Neste capítulo iremos estudar sistemas quânticos de baixa dimensionalidade do tipo barreiras quânticas Si/SiO_2 e Si/HfO_2 . Será mostrado que os efeitos de cargas imagem, devido à variação das constantes dielétricas, modificam fortemente a estrutura eletrônica destes sistemas, cujos modelos de tunelamento usados para cálculos de barreiras quânticas existentes são inadequados para descrição destes sistemas. O modelo usado consiste em calcular o coeficiente de transmissão, baseado no método de *mult steps* proposto por Ando e Itoh [22], levando em consideração o efeito do potencial de auto energia $\Sigma_{im}(z)$ que é calculado baseando-se em modelos de carga imagem presente em livros textos da literatura de eletromagnetismo clássico. Os resultados demonstram que o efeito de carga imagem afeta consideravelmente as barreiras de potenciais dos sistemas Si/SiO_2 e Si/HfO_2 , produzindo deslocamentos na energia de transmissão de elétrons através destas barreiras.

2.1 Introdução

Do ponto de vista de alta velocidade, bom desenvolvimento e novas aplicações dos dispositivos eletrônicos e circuitos integrados, é crescente o número de pesquisas que objetivam otimizar processos litográficos que permitem a manufatura de estruturas tão pequenas, a fim de que possam entrar em produção industrial compatível com a demanda de mercado. A miniaturização cada vez maior destas estruturas acaba por revelar a natureza quântica de transporte e confinamento de portadores entre as junções que as compõem. Com isto nos últimos 20 anos, foi grande o interesse em estudos de tunelamento ressonante em poços e estruturas de superredes.

Em mecânica quântica, o cálculo do coeficiente de transmissão pode tornar-se um problema insolúvel, dependendo da forma da barreira de potencial em estudo. Para contornar este problema, foram desenvolvidos vários métodos aproximativos, que dentro de certos limites de validade, permitem obter resultados confiáveis e que representam as propriedades físicas do sistema considerado.

O método mais convencional usado para calcular o coeficiente de transmissão através de uma barreira de potencial, desde que esta varie suavemente em um comprimento de onda de *de Broglie*, para portadores incidentes, é o método de aproximação semi-clássica, também conhecida como aproximação WKB [23], em homenagem a Wentzel, Kramers e Brillouin por terem sido os primeiros a aplicar em problemas de mecânica quântica. Embora o método WKB tenha sido muito usado na literatura, seus resultados falharam ao tentar explicar fenômenos de ressonância, além de produzir resultados incorretos em regiões onde o perfil do potencial varia abruptamente [24]. Entretanto, variações abruptas do potencial são fre-

quentemente encontrados em interfaces entre dois diferentes materiais em uma estrutura de heterojunção.

Chandra e Eastman [25] calcularam o coeficiente de transmissão para uma barreira triangular via métodos numéricos. Gundlach [26] calculou correntes de tunelamento através de uma barreira trapezoidal usando funções Airy nas interfaces. Este mesmo procedimento foi aplicado em barreiras triangulares por Christodoulides e colaboradores [27]. Entretanto estes estudos não são apropriados para investigar, poços quânticos, barreiras e superredes, devido a complicados tratamentos envolvidos nestas análises. Além disso, estes estudos não levam em conta as variações da massa efetiva do elétron entre as regiões que constituem a estrutura. Ando e Itoh [22] apresentaram um método para o cálculo do coeficiente de transmissão através de uma barreira de potencial arbitrária, denominado *matriz de transferência*. Neste método, o potencial arbitrário, a massa efetiva e a constante dielétrica são aproximadas por funções formadas por N segmentos (funções *multisteps*), onde seus valores podem ser considerados constantes. O método é aplicado tanto em situações onde a energia da partícula é maior que a correspondente altura da barreira de potencial quanto em situações com energia menor. Devido a isto, usaremos neste trabalho o método de matriz de transferência para efetuar o cálculo do coeficiente de transmissão de elétrons através de barreiras Si/SiO_2 e Si/HfO_2 simples. No próximo capítulo o mesmo método será usado para barreiras Si/SiO_2 e Si/HfO_2 duplas.

2.2 Estados Eletrônicos em um Potencial Unidimensional Arbitrário

No presente cálculo, em vez de lidar com variações contínuas do potencial $V(z)$, ao longo da direção z , consideramos funções no qual o potencial

$V(z)$, a massa efetiva $m(z)$ e a constante dielétrica $\varepsilon(z)$ são divididas em N segmentos, ao longo dos quais estes valores podem ser considerados constantes.

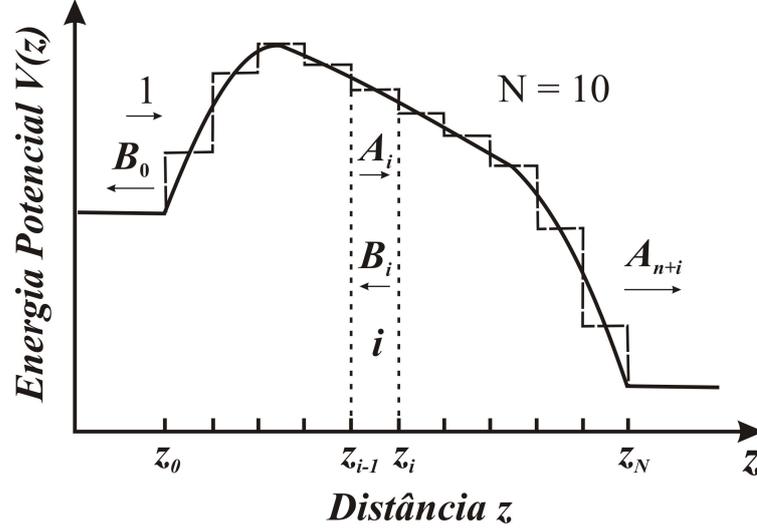


Figura 7: Perfil de um potencial arbitrário que está subdividido gradualmente em pequenos passos de potenciais.

Vamos considerar que o potencial seja uma sequência de N pequenos segmentos. Um exemplo para o caso em que $N = 10$ é mostrado na Fig.7, onde a barreira de potencial $V(z)$, a massa efetiva $m(z)$ e a constante dielétrica $\varepsilon(z)$ são aproximadas pelas respectivas funções:

$$V(z) = V_i = V\left(\frac{z_{i-1} + z_i}{2}\right), \quad (2.1)$$

$$\varepsilon(z) = \varepsilon_i = \varepsilon\left(\frac{z_{i-1} + z_i}{2}\right), \quad (2.2)$$

e

$$m^*(z) = m^*_i = m^* \left(\frac{z_{i-1} + z_i}{2}\right), \quad (2.3)$$

para $z_{i-1} < z < z_i$ ($i = 0, 1, 2, \dots, N, N + 1$).

A equação de Schrödinger unidimensional, que descreve uma partícula que se movimenta através do potencial $V_{(z)}$, usando aproximação da massa efetiva (função envelope), e operador de energia cinética proposto por Ben Daniel e Duke [28]; é descrita na forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m_{(z)}} \frac{d}{dz} \Psi_{(z)} + V_{(z)} \Psi_{(z)} = E \Psi_{(z)} \quad (2.4)$$

na região i , para $z_{i-1} \leq z \leq z_i$. Esta equação pode ser reescrita na forma:

$$\frac{d^2}{dz^2} \Psi_{i(z)} + \frac{2m_{i(z)}}{\hbar^2} (E - V) = 0, \quad (2.5)$$

onde $V_{(z)} = V_i$ e $m_{(z)} = m_i$ na região i . A solução Ψ_i para esta equação é a função de onda na i -ésima região, associada a um elétron com energia E movendo-se através da barreira potencial:

$$\Psi_{i(z)} = A_i e^{iK_i z} + B_i e^{-iK_i z}, \quad (2.6)$$

para $z_{i-1} \leq z \leq z_i$, onde o vetor de onda na região i é:

$$K_i = \sqrt{\frac{2m_i^*}{\hbar^2} (E - V_i)}, \quad (2.7)$$

onde \hbar é a constante de Planck dividida por 2π .

As constantes A_i e B_i na equação (2.6) são obtidas a partir da condição de continuidade da função de onda $\Psi_{i(z)}$ e de sua derivada primeira $\frac{i}{m_i} \frac{d\Psi_i}{dz}$

em cada interface da região i ; estas condições de contorno resulta em:

$$A_i + B_i = A_{i+1}e^{iK_{i+1}(z_i - z_{i+1})} + B_{i+1}e^{-iK_{i+1}(z_i - z_{i+1})} \quad (2.8)$$

$$\frac{K_i}{m_i}(A_i - B_i) = \frac{K_{i+1}}{m_{i+1}}[A_{i+1}e^{iK_{i+1}(z_i - z_{i+1})} - B_{i+1}e^{-iK_{i+1}(z_i - z_{i+1})}]. \quad (2.9)$$

Definindo

$$P_{i(i+1)} = \frac{m_i}{m_{i+1}} \frac{K_{i+1}}{K_i} \quad (2.10)$$

e $z_{i+1} - z_i = h_{i+1}$ como sendo a espessura da região $i + 1$.

Podemos expressar A_{i+1} e B_{i+1} em termos de A_i e B_i na forma de matriz;

$$\begin{bmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{bmatrix} = M_{(i+1)i} \begin{bmatrix} A_i \\ B_i \end{bmatrix}, \quad (2.11)$$

onde definimos a propagação da matriz como

$$M_{(i+1)i} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} (1 + P_{(i+1)i})e^{iK_{i+1}h_{i+1}} & (1 - P_{(i+1)i})e^{iK_{i+1}h_{i+1}} \\ (1 - P_{(i+1)i})e^{-iK_{i+1}h_{i+1}} & (1 + P_{(i+1)i})e^{-iK_{i+1}h_{i+1}} \end{bmatrix}. \quad (2.12)$$

A relação pode se propagar de região à região:

$$\begin{bmatrix} A_{N+1} \\ B_{N+1} \end{bmatrix} = M_{(N+1)N} M_{(N-1)N} \dots M_{10} \begin{bmatrix} A_0 \\ B_0 \end{bmatrix} \quad (2.13)$$

Para estados ligados, temos que $E < V_0$ e V_{N+1} . Portanto, $K_0 = i\alpha_0$ e $K_{N+1} = i\alpha_{N+1}$, onde α_0 e α_{N+1} , são dados por:

$$\alpha_0 = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}(V_0 - E)}, \quad (2.14)$$

e

$$\alpha_{N+1} = \sqrt{\frac{2m_{N+1}}{\hbar^2}(V_{N+1} - E)}. \quad (2.15)$$

As soluções nas regiões 0 e $N + 1$ serão soluções da forma:

$$\Psi_0(z) = B_0 e^{+\alpha_0(z-z_0)}, \quad (2.16)$$

e

$$\Psi_{N+1}(z) = A_{N+1} e^{-\alpha_{N+1}(z-z_{N+1})}, \quad (2.17)$$

onde $A_0 = 0$ e $B_{N+1} = 0$. Note que a última posição z_{N+1} é introduzida para uso da propagação da matriz, e isto é arbitrário (pode ser igual a um conjunto de z_n). Podemos escrever o produto das matrizes como:

$$M_{(N+1)N} \dots M_{10} \equiv \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix}, \quad (2.18)$$

e portanto

$$\begin{bmatrix} A_{N+1} \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ B_0 \end{bmatrix}. \quad (2.19)$$

Para soluções não triviais, a equação satisfaz

$$M_{22}(E) = 0 \quad (2.20)$$

desde que B_0 não possa ser zero (por outro lado, todos os outros termos da matriz são zero). Solucionando a equação (2.20) obtemos os autovalores de E . Na prática, $M_{22}(E)$ é uma função complexa e os autovalores E são reais. Portanto, um método conveniente para encontrar os autovalores é calcular os mínimos de $|M_{22}(E)|$ ou $\log |M_{22}(E)|$, entre o mais baixo e o mais alto nível de energia do perfil do potencial $V_{(z)}$.

A amplitude de transmissão A_{N+1} e o coeficiente de transmissão T , podem ser calculados, fazendo $A_0 = 1$ e $B_{N+1} = 0$ para $i = N + 1$, assim:

$$A_{N+1} = \frac{m_{N+1}}{m_0} \frac{K_0}{K_{N+1}} \frac{1}{M_{22}}, \quad (2.21)$$

e

$$T = \frac{m_0}{m_{N+1}} \frac{K_{N+1}}{K_0} |A_{N+1}|^2. \quad (2.22)$$

O método de degraus múltiplos pode ser generalizado para outras simetrias diferentes da cartesiana, como por exemplo a simetria cilíndrica ou a simetria esférica. Para a simetria cilíndrica as soluções exponenciais dadas pela equação (2.6), $e^{\pm iK_i z}$ são substituídas pelas funções de Bessel e Neumann esféricas.

2.2.1 Potencial de auto-energia para barreiras abruptas

O modelo usado para simular barreiras quânticas abruptas baseia-se em um semiconductor crescido na direção z , intercalando uma barreira óxida (HfO_2 ou SiO_2) com camadas de Si . O óxido é limitado na região $|z| < a$, conforme demonstra a figura (8).

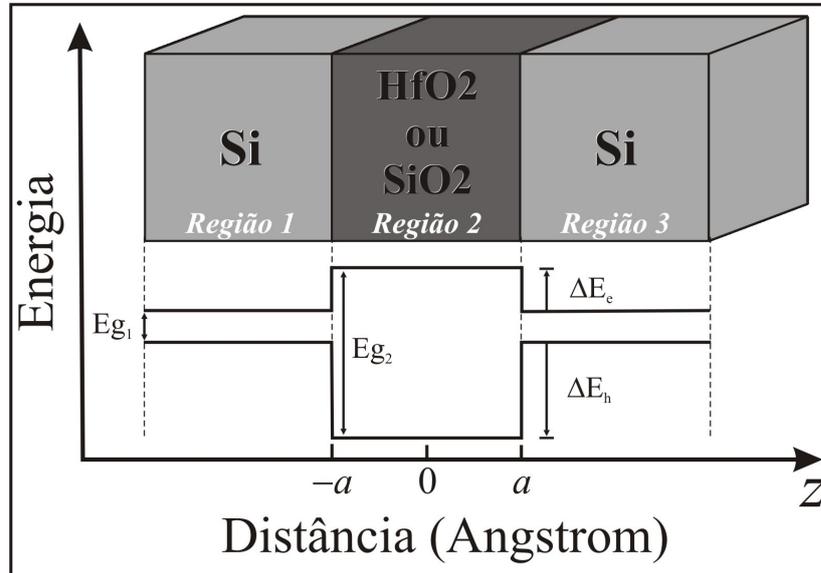


Figura 8: Modelo de barreira quântica abrupta, formada por semicondutor-óxido-semicondutor

O potencial de auto energia $\Sigma_{im}(z)$ é calculado a partir da equação (1.15) para $\varepsilon'_{(z)} = 0$:

$$A_q''(z) - q^2 A_q(z) = \frac{-Q}{2\pi\varepsilon(z)} \delta(z - z_0) \quad (2.23)$$

aplicando as condições de contorno para $A_q(z)$, a qual tende a zero quando $|z| \rightarrow \infty$ e aplicando as condições de continuidade do potencial e de sua derivada primeira na posição da interface. As soluções para a equação (1.18), são dadas por:

$$\Sigma_{zi}^{(1)} = \frac{\varepsilon_2 \lambda Q}{2\pi(\varepsilon_2 + \varepsilon_1)^2} \int_0^\infty \frac{e^{q(2z-L)}}{1 + \lambda^2 e^{-2qL}} dq + \frac{\lambda Q}{16\pi\varepsilon_1(z + \frac{L}{2})}, \quad (2.24)$$

$$\Sigma_{zi}^{(2)} = \frac{\lambda Q}{8\pi\varepsilon_2} \int_0^\infty \frac{e^{q(2z-L)} + 2\lambda e^{-2qL} + e^{-q(2z+L)}}{1 + \lambda^2 e^{-2qL}} dq, \quad (2.25)$$

$$\Sigma_{zi}^{(3)} = \frac{\varepsilon_2 \lambda Q}{2\pi(\varepsilon_2 + \varepsilon_1)^2} \int_0^\infty \frac{e^{-q(2z+L)}}{1 + \lambda^2 e^{-2qL}} dq + \frac{\lambda Q}{16\pi\varepsilon_1(z - \frac{L}{2})}, \quad (2.26)$$

onde os índices representam: (1) para a região à esquerda da barreira, (2) para a região da barreira e (3) para a região à direita da barreira. As constantes dielétricas entre os dois meios, sílicio e óxido, são representadas respectivamente por ε_1 e ε_2 , Q é a carga elementar e L representa a largura da barreira quântica.

Devido às condições de contorno temos que:

$$\lambda = \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}$$

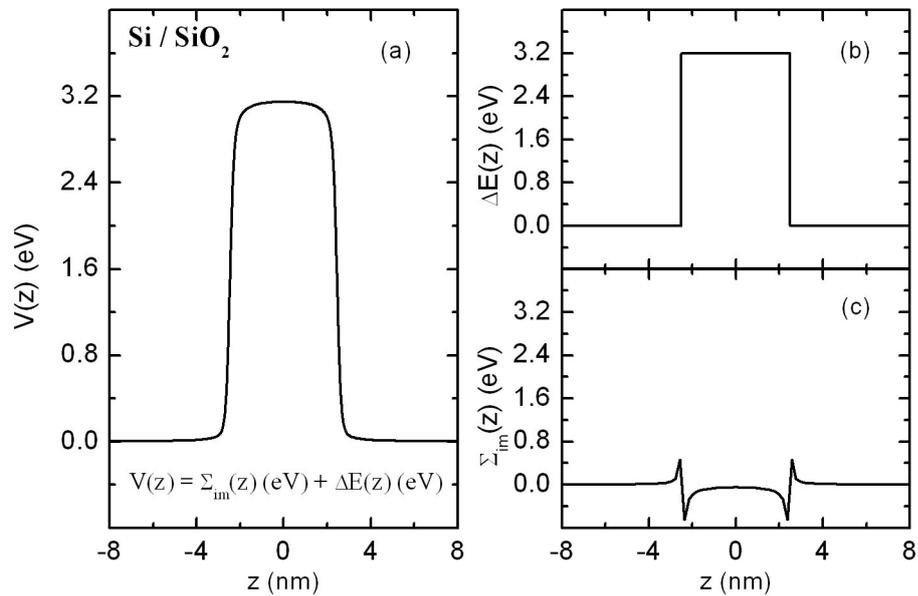


Figura 9: Perfil Barreira Si/SiO_2 . (a) perfil do potencial total $V_{(z)} = \Sigma_{im}(z) + \Delta E_{(z)}$, (b) perfil do potencial $\Delta E_{(z)}$ devido as bandas de energia e (c) perfil devido ao potencial de auto-energia $\Sigma_{im}(z)$.

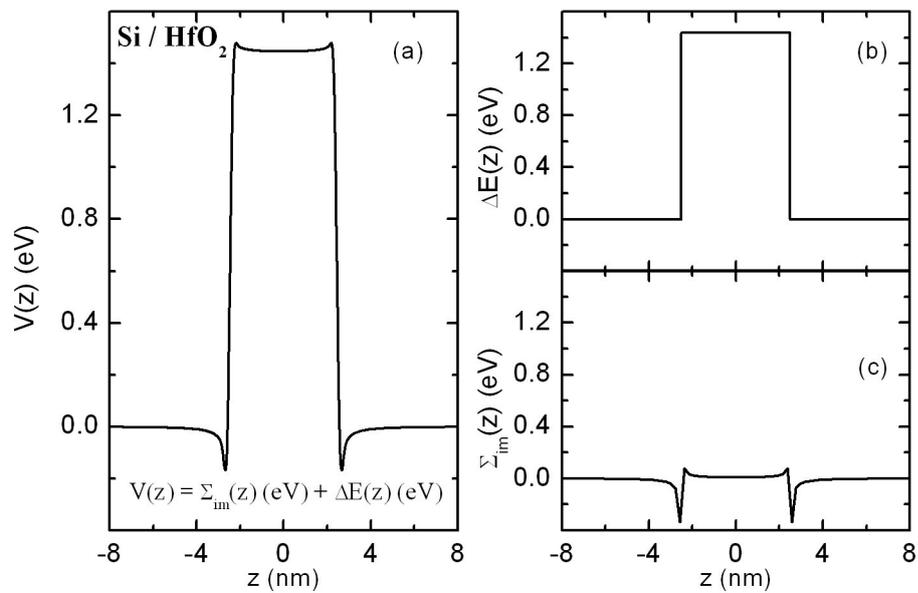


Figura 10: Perfil Barreira Si/HfO_2 . (a) perfil do potencial total $V_{(z)} = \Sigma_{im}(z) + \Delta E_{(z)}$, (b) perfil do potencial $\Delta E_{(z)}$ devido as bandas de energia e (c) perfil devido ao potencial de auto-energia $\Sigma_{im}(z)$.

A figura (9) ilustra o perfil do potencial da barreira Si/SiO_2 abrupta, onde o elétron sente um potencial atrativo quando se movimenta através do óxido SiO_2 e repulsivo quando se movimenta através do semicondutor Si , como mostrado na figura 9(c), isto se deve as diferentes constantes dielétricas dos materiais usados na heteroestrutura. A figura 9(b) traça o perfil do potencial $\Delta E_{(z)}$ devido a descontinuidade das bandas de energia dos materiais. Na figura 9(a) o potencial $V_{(z)} = \Sigma_{im}(z) + \Delta E_{(z)}$ é traçado levando em consideração o efeito do potencial de auto-energia.

A figura (10) ilustra o perfil do potencial da barreira Si/HfO_2 abrupta, onde o elétron sente um potencial repulsivo quando se movimenta através do óxido HfO_2 e atrativo quando se movimenta através do semicondutor Si , como mostrado na figura 10(c). A figura 10(b) traça o perfil do potencial $\Delta E_{(z)}$ devido as bandas de energia dos materiais. Na figura 10(a) o potencial $V_{(z)} = \Sigma_{im}(z) + \Delta E_{(z)}$ é traçado levando em consideração o efeito do potencial de auto-energia.

O potencial de auto-energia $\Sigma_i(z_i)$ diverge na posição das interfaces, ou seja, quando $z \rightarrow \pm L/2$. Para contornar essa divergência, usamos um esquema numérico similar ao *shift* δ introduzido fenomenologicamente por Kumugai e Takagahara [29].

2.2.2 Potencial de auto-energia para barreiras não abruptas

Em barreiras quânticas com interfaces não abruptas, a constante dielétrica varia linearmente nas interfaces através de uma interpolação linear entre a constante dielétrica do silício ε_1 e a constante dielétrica do óxido ε_2 . A Tabela 1 mostra esta interpolação linear para barreiras quânticas baseadas em dielétricos *high-k* ($\varepsilon_2 > \varepsilon_1$) e para barreiras quânticas dielétricas ($\varepsilon_2 < \varepsilon_1$).

Tabela 1: Interpolação linear entre a constante dielétrica do silício ε_1 e a constante dielétrica do óxido ε_2 , na região das interfaces

	$\varepsilon_2 > \varepsilon_1$	$\varepsilon_2 < \varepsilon_1$	
	$\varepsilon_i(z) = \varepsilon_1 + (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)S(z)$	$\varepsilon_i(z) = \varepsilon_1 + (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)S(z)$	
$S(z) =$	1	0	$z < z_1$
	$\frac{-z+a-\sigma}{\sigma}$	$\frac{z+a}{\sigma}$	$z_1 < z < z_2$
	0	1	$ z < z_3$
	$\frac{z-a+\sigma}{\sigma}$	$\frac{-z-a}{\sigma}$	$z_3 < z < z_4$
	1	0	$z > z_4$

O modelo de carga imagem para o cálculo do potencial de auto-energia requer que a solução para a Eq. 1.15, nas regiões interfaciais, obtidas através da função de Green [30], seja dada por:

$$A_q(z) = \alpha I_0(\eta_1) + \beta K_0(\eta_1), \quad (2.27)$$

para a interface à esquerda da barreira, e

$$A_q(z) = \omega I_0(\eta_2) + \nu K_0(\eta_2), \quad (2.28)$$

para a interface à direita da barreira. As grandezas $I_0(z)$ e $K_0(z)$ são funções modificadas de Bessel com argumento imaginário. As constantes α , β , ω e ν são obtidas a partir das condições de contorno. O argumento η_1 das funções de Bessel é dado por;

$$\eta_1 = \begin{cases} q\left(\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}\sigma - a - z\right) \rightarrow \varepsilon_1 > \varepsilon_2 \\ q\left(\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}\sigma + a + z\right) \rightarrow \varepsilon_1 < \varepsilon_2 \end{cases} \quad (2.29)$$

o argumento η_2 é dado por:

$$\eta_2 = \begin{cases} q\left(\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}\sigma - a + z\right) \rightarrow \varepsilon_1 > \varepsilon_2 \\ q\left(\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}\sigma + a - z\right) \rightarrow \varepsilon_1 < \varepsilon_2 \end{cases} \quad (2.30)$$

A equação de Poisson é resolvida numericamente, com a constante dielétrica determinada pela interpolação linear mostrada na Tab.1. Para valores grandes de $|z|$, em um meio em que a constante dielétrica é homogênea, então a solução para $A_q(z)$ tem valor aproximado de;

$$A_q(z) \approx e^{-q|z|} \quad (2.31)$$

As condições de contorno para o potencial requerem que, na posição da carga,

$$A_q(z_0^-) = A_q(z_0^+) \text{ e}$$

$$\left(\frac{dA_q(z)}{dz}\right)_{z_0^+} - \left(\frac{dA_q(z)}{dz}\right)_{z_0^-} = \frac{Q}{2\pi\varepsilon(z_0)} \quad (2.32)$$

A integral da Eq.1.18 é resolvida para grandes valores em $|z|$, satisfazendo a igualdade $z = z_0$ [31].

A figura (11) ilustra o perfil do potencial da barreira Si/SiO_2 não abrupta. Este perfil é plotado para uma barreira com largura $L = 3nm$ e interface gradual $\sigma = 1nm$ de espessura. A interface é crescida para dentro da barreira, de forma que, para o maior valor do potencial ($V_{(z)} = 3.2eV$) a largura da barreira é de 1nm, conforme pode ser observado na figura 11(b). O potencial de auto-energia é contínuo na região da interface, conforme pode ser observado na figura 11(c), e isto se deve ao fato de que nesta região a constante dielétrica é simulada por uma função linear, conforme

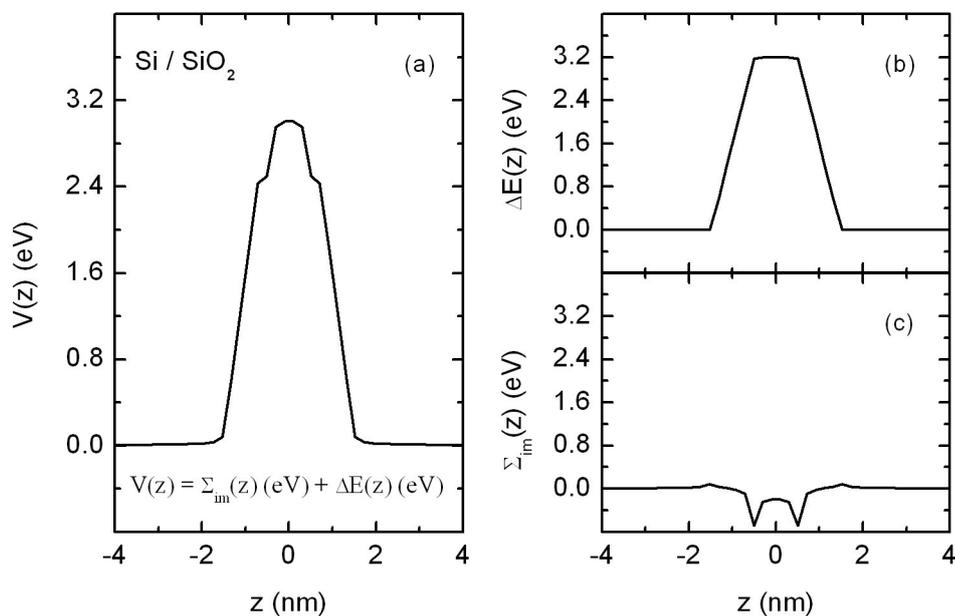


Figura 11: Perfil de um potencial com interface gradual Si/SiO_2 . (a) perfil do potencial total $V_{(z)} = \Sigma_{im}(z) + \Delta E_{(z)}$, (b) perfil do potencial $\Delta E_{(z)}$ devido as bandas de energia e (c) perfil devido ao potencial de auto-energia $\Sigma_{im}(z)$.

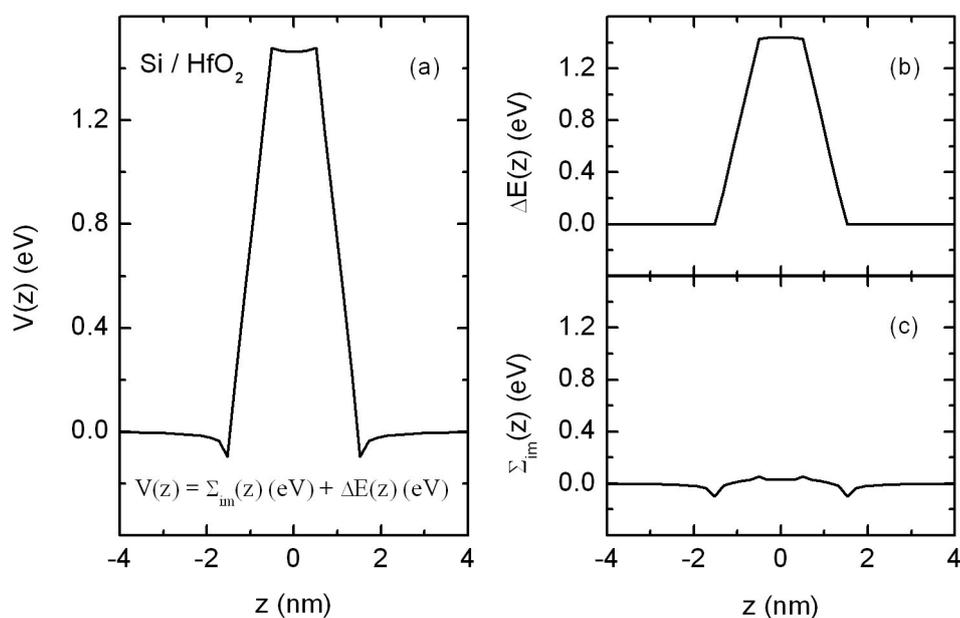


Figura 12: Perfil de um potencial com interface gradual Si/HfO_2 . (a) perfil do potencial total $V_{(z)} = \Sigma_{im}(z) + \Delta E_{(z)}$, (b) perfil do potencial $\Delta E_{(z)}$ devido as bandas de energia e (c) perfil devido ao potencial de auto-energia $\Sigma_{im}(z)$.

Tab. 1.

Na figura (12) o perfil do potencial da barreira Si/HfO_2 não abrupta é plotado para uma barreira com largura $L = 3nm$ e interface gradual $\sigma = 1nm$, crescida para dentro da barreira. A figura 12(a) ilustra o potencial total $V_{(z)}$, a figura 12(b) ilustra o potencial $\Delta E_{(z)}$ devido a descontinuidade das bandas de energias dos materiais e a figura 12(c) ilustra o potencial de auto-energia devido à variação linear da constante dielétrica dos materiais na posição da interface, o qual é contínuo nesta região.

2.3 Tunelamento de elétrons em Barreiras Si/SiO_2 e Si/HfO_2 abruptas

Com a constante redução das geometrias dos transistores, até onde o material que compõe a porta dielétrica (Si/SiO_2), tenha espessura da ordem de apenas algumas camadas atômicas, o tunelamento de portadores (elétrons e buracos) através do material dielétrico, e o conseqüente aumento na dissipação da energia por efeito joule são questões críticas que vem sendo investigadas na literatura nos últimos anos.

Em nosso estudo a respeito do tunelamento de elétrons através da barreiras Si/SiO_2 e Si/HfO_2 abruptas, consideramos um modelo simples de barreira, silício-óxido-silício, no qual a diferença entre as constantes dielétricas destes materiais produz modificações consideráveis na estrutura eletrônica desses sistemas. Os parâmetros necessários para o cálculo numérico das propriedades eletrônicas dessas estruturas constam na tabela 2 [32, 33, 34, 35, 36].

Os resultados obtidos para o cálculo do coeficiente de transmissão de elétrons através das barreiras demonstram que o efeito do potencial de auto-energia produz deslocamentos na energia de transmissão dos elétrons.

Tabela 2: Parâmetros dos Materiais. Referências [32, 33, 34, 35, 36]

<i>Materiais</i>	$E_g(eV)$	$\varepsilon/\varepsilon_0$	$m_{e,\perp}/m_0$
<i>Si</i>	1.1	11.7	0.173
<i>SiO₂</i>	8.9	3.9	0.3
<i>HfO₂</i>	5.8	25.0	0.836

A figura (13) ilustra os resultados obtidos do cálculo do coeficiente de transmissão de elétrons, através do potencial $V_{(z)}$ da barreira SiO_2 abrupta: a figura 13(a) mostra a curva do coeficiente de transmissão de elétrons através do potencial $V_{(z)}$ com efeito do potencial de auto-energia (linha sólida) e através do potencial $V_{(z)}$ sem o efeito do potencial de auto-energia (linha tracejada). A barreira de potencial $V_{(z)}$ possui largura de 1nm para este caso e altura de $3.2eV$, proveniente do *band offset* da estrutura Si/SiO_2 , conforme ilustra as figuras 2 e 13(c). A figura 13(b) ilustra o potencial total $V_{(z)}$ com efeito do potencial de auto-energia $\Sigma_{im}(z)$. Conforme é mostrado na figura 11(a) o efeito do potencial de auto-energia produz um *red shift* (deslocamento para o vermelho) na energia de transmissão do elétron, em torno de 600 meV. Isso se deve ao fato de que, na região da barreira, o elétron sente um potencial atrativo (constante dielétrica do SiO_2 menor que a constante dielétrica do Si). Este potencial, atrativo na barreira e repulsivo na região do semicondutor suaviza o perfil do potencial, como pode ser observado nas figuras 13(b) e 13(c), que plotam o potencial $V_{(z)}$ com e sem o efeito de carga imagem, respectivamente.

Na figura (14) é plotado o resultado obtido para o tunelamento de elétrons através de uma barreira larga Si/SiO_2 abrupta com $L = 5nm$. A figura 14(a) a curva sólida representa o coeficiente de transmissão em função da energia do elétron que tunela através do potencial $V_{(z)}$ levando em consideração o efeito do potencial de auto-energia. Este potencial $V_{(z)}$ é plotado na figura 14(b). A curva tracejada na figura 14(a) representa o tunelamento do elétron através do potencial $V_{(z)} = \Delta E_{(z)}$, sem o efeito

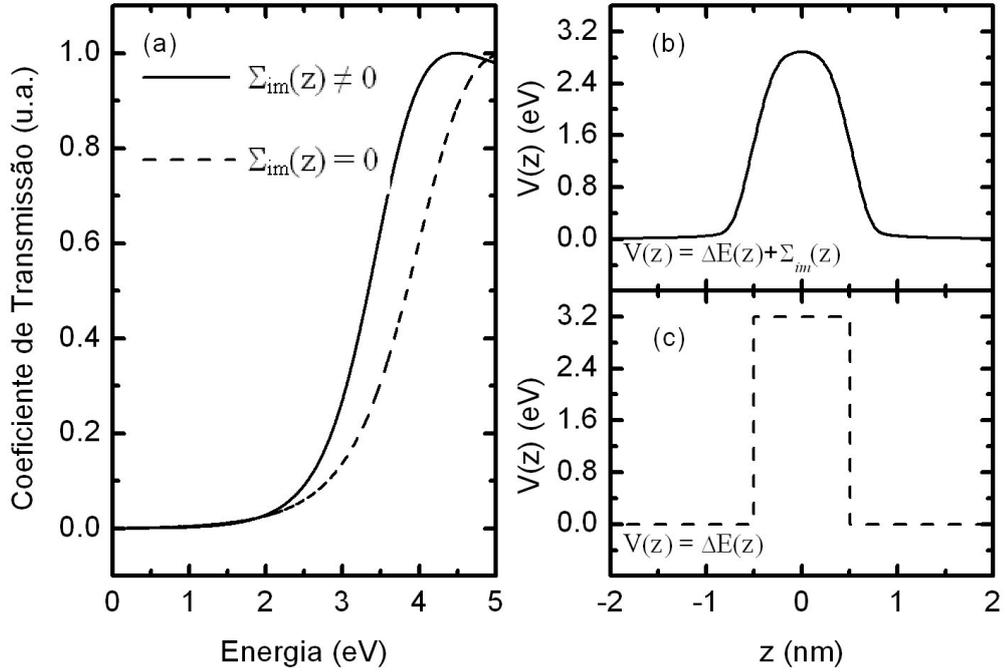


Figura 13: (a) Coeficiente de Transmissão para barreira Si/SiO_2 com 1nm de largura, sem efeito do potencial de auto-energia (linha tracejada) e com efeito do potencial de auto-energia (linha tracejada), (b) perfil do potencial total $V(z) = \Sigma_{im}(z) + \Delta E(z)$ e (c) perfil do potencial $\Delta E(z)$ devido as bandas de energia.

do potencial de auto-energia, plotado na figura 14(c). O efeito do potencial Σ_{im} diminui a amplitude de oscilação do coeficiente de transmissão além de produzir uma diferença na energia de transmissão do elétron de aproximadamente 100 meV, como se observa na figura 14(a).

A figura (15) ilustra o resultado obtido para o perfil do potencial $V(z)$ e a curva do coeficiente de transmissão em função da energia do elétron. Na figura 15(b) é traçada a barreira Si/HfO_2 com espessura de 1nm. Neste perfil é levado em consideração o efeito do potencial de auto-energia. Em 15(c) é traçada o perfil do potencial $V(z) = \Delta E(z)$ da barreira sem efeito do potencial de auto-energia e 15(a) traça o coeficiente de transmissão em função da energia do elétron, com efeito do potencial de auto-energia (linha sólida) e sem efeito do potencial de auto-energia (linha tracejada). O efeito

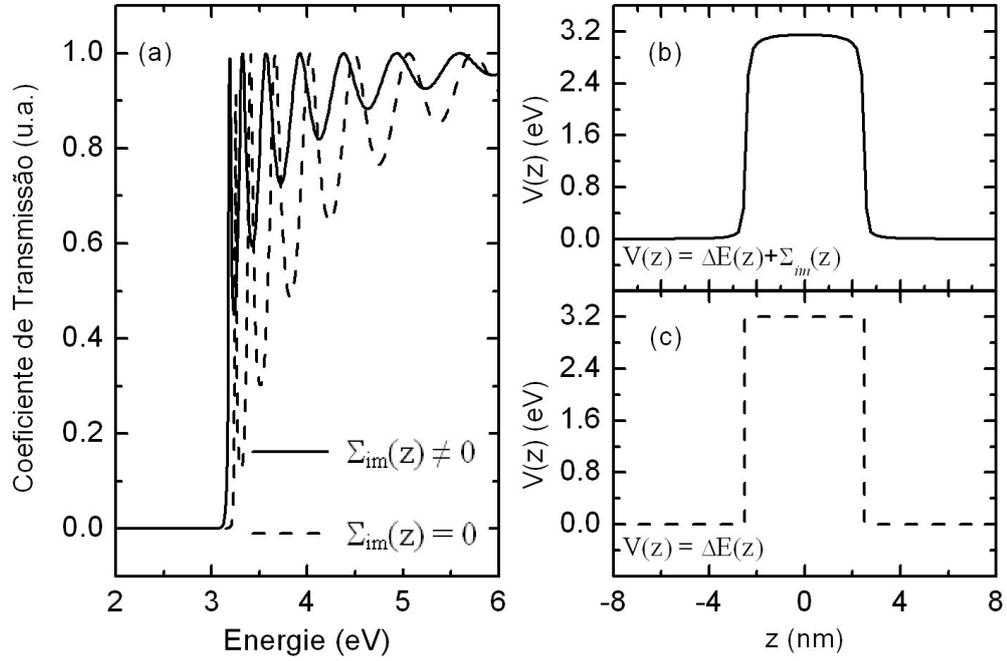


Figura 14: (a) Coeficiente de Transmissão para barreira Si/SiO_2 com 5nm de largura, sem efeito do potencial de auto-energia (linha tracejada) e com efeito do potencial de auto-energia (linha tracejada), (b) perfil do potencial total $V_{(z)} = \Sigma_{im}(z) + \Delta E_{(z)}$ e (c) perfil do potencial $\Delta E_{(z)}$ devido as bandas de energia.

do potencial de auto-energia produz um *blue shift* (deslocamento para o azul) na energia de transmissão do elétron, em torno de 600 meV. Na barreira Si/HfO_2 o elétron sente um potencial atrativo quando se movimenta através do semiconductor Si e repulsivo quando se movimenta através do óxido HfO_2 , ($\varepsilon_{(Si)} < \varepsilon_{(HfO_2)}$). A divergência do potencial na posição da interface, somada à grande diferença entre as constantes dielétricas dos materiais ($\varepsilon_{(Si)}/\varepsilon_{(HfO_2)} = 0,47$), e o fato de usarmos uma barreira estreita ($L = 1nm$), cria nas regiões interfaciais cúspides que poderíamos chamar de poços quânticos com larguras extremamente pequenas, da ordem de $0,4nm$ e profundidade da ordem de 700 meV. Embora Pereira e colaboradores [37] tenham mostrado que para poços quânticos Si/HfO_2 podem ocorrer confinamento de portadores na região interfacial entre o Si e o HfO_2 , em barreiras estreitas Si/HfO_2 não foi observado estados confina-

dos de elétrons. Entretanto na região da interface, elétrons com energias entre 0 e 50 meV tem probabilidade diferente de zero de tunelar através das regiões, conforme pode ser observado no gráfico da figura 15(a).

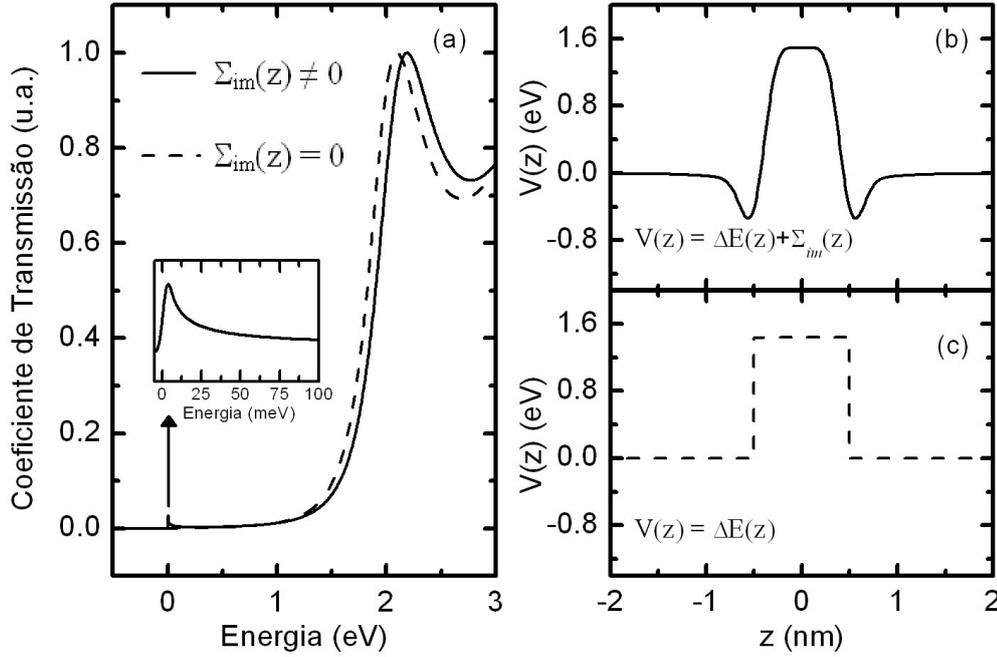


Figura 15: (a) Coeficiente de Transmissão para barreira Si/HfO_2 com 1nm de largura, sem efeito do potencial de auto-energia (linha tracejada) e com efeito do potencial de auto-energia (linha tracejada), (b) perfil do potencial total $V(z) = \Sigma_{im}(z) + \Delta E(z)$ e (c) perfil do potencial $\Delta E(z)$ devido as bandas de energia.

A figura (16) representa o resultado obtido para o perfil do potencial $V(z)$ e a curva do coeficiente de transmissão em função da energia do elétron. Na figura 16(b) é traçada a barreira Si/HfO_2 com espessura de 5nm. Neste perfil é levado em consideração o efeito do potencial de auto-energia. Em 16(c) é traçada o perfil da barreira sem efeito do potencial de auto-energia e 16(a) traça o coeficiente de transmissão em função da energia do elétron, com efeito do potencial de auto-energia (linha sólida) e sem efeito do potencial de auto-energia (linha tracejada). O efeito do potencial de auto-energia produz um *blue shift* (deslocamento para o azul) na energia

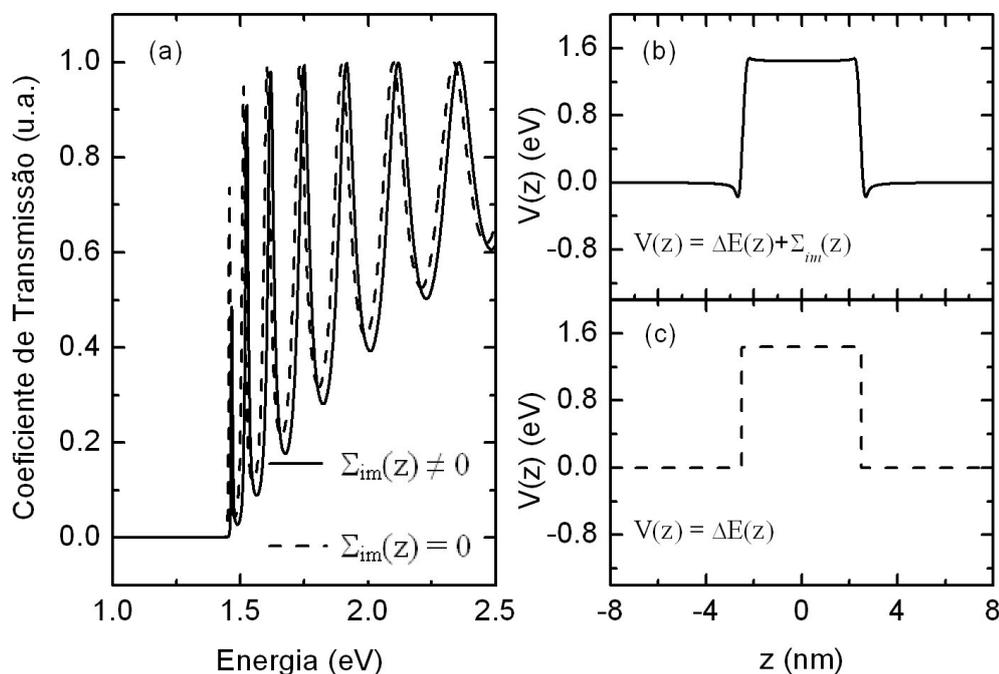


Figura 16: (a) Coeficiente de Transmissão para barreira Si/HfO_2 com 5nm de largura, sem efeito do potencial de auto-energia (linha tracejada) e com efeito do potencial de auto-energia (linha tracejada), (b) perfil do potencial total $V(z) = \Sigma_{im}(z) + \Delta E(z)$ e (c) perfil do potencial $\Delta E(z)$ devido as bandas de energia.

de transmissão do elétron, em torno de 600 meV. As cúspides (vales) criadas são devido ao efeito de carga imagem, pelo fato de que o potencial é atrativo no semicondutor e repulsivo no óxido ($\epsilon_{(Si)} < \epsilon_{(HfO_2)}$). Observe-se neste caso que para barreiras largas a profundidade das cúspides interfaciais tem profundidade menor do que a profundidade das cúspides criadas em barreiras estreitas, como observado na figura 15(a).

2.4 Tunelamento de elétrons em Barreiras Si/SiO_2 e Si/HfO_2 não abruptas

Nesta secção serão apresentados os resultados do tunelamento de elétrons obtidos à partir do cálculo numérico em barreiras quânticas não abruptas Si/SiO_2 e Si/HfO_2 , com interfaces graduais de espessura iguais

a 1nm. Os parâmetros utilizados para simular essas barreiras estão descritos na Tab.2. O modelo da barreira é formado por uma camada de óxido (SiO₂ ou HfO₂) localizada na região $|z| \leq (a - \sigma)$, entre duas camadas do semicondutor Si localizadas nas regiões $|z| \geq a$. Entre estes materiais consideramos a existência de uma interface gradual de espessura σ , localizada nas regiões $(a - \sigma) \leq |z| \leq a$, conforme figura 16.

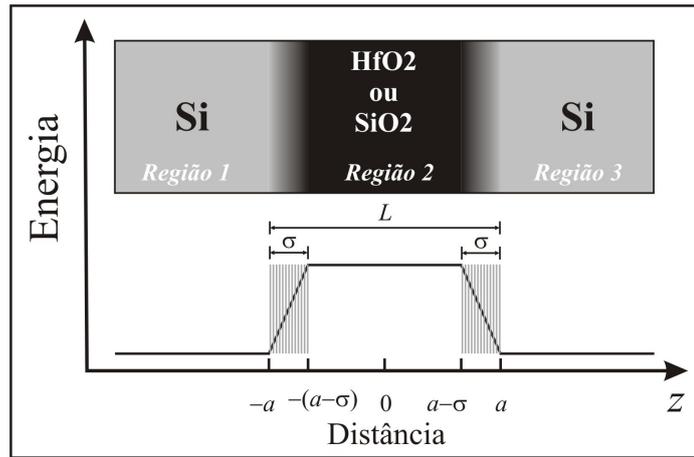


Figura 17: Modelo de barreira quântica não abrupta, formada por semicondutor-óxido-semicondutor.

Nestas camadas interfaciais parâmetros como massa efetiva $m_i^*(z_i)$, potencial de confinamento $V_{(z)}$ e a constante dielétrica $\epsilon_{(z)}$ são tratados como uma interpolação linear entre os parâmetros do Si e os parâmetros do óxido.

A figura (18) mostra o resultado obtido para o perfil do potencial $V_{(z)}$ da barreira Si/SiO₂ com largura $L = 3nm$ e interfaces de 1 nm e a curva do coeficiente de transmissão em função da energia do elétron. A barreira é larga na base ($L = 3nm$) e estreita no topo ($L = 1nm$). Isto se deve ao fato de que as interfaces são crescidas para dentro da barreira, diminuindo sua largura linearmente a medida que o potencial aumenta, conforme observado na figura 18(c), que traça o perfil $V_{(z)} = \Delta E_{(z)}$ sem efeito do potencial de auto-energia e na figura 18(b) que traça o perfil do potencial $V_{(z)} = \Delta E_{(z)} + \Sigma_{im}(z)$, com efeito do potencial de auto-energia. A figura 18(a)

representa o gráfico do coeficiente de transmissão do elétron através da barreira $V_{(z)}$ com e sem o efeito do potencial de auto-energia, linha sólida e linha tracejada, respectivamente. Além destas curvas também é plotado o coeficiente de transmissão de elétrons através do potencial $V_{(z)}$ abrupto, com barreira de largura $L = 3nm$, e com efeito do potencial de auto-energia. Esta última curva é plotada para fins de comparação, e o que se observa é que o coeficiente de transmissão tem amplitude de oscilações mais acentuadas para barreiras abruptas.

A figura (19) ilustra o resultado obtido para o perfil do potencial $V_{(z)}$ da barreira Si/HfO_2 de largura $L = 3nm$ e interfaces de 1nm e a respectiva curva do coeficiente de transmissão em função da energia do elétron. Como as interfaces são crescidas para dentro da barreira, a barreira é larga na base ($L = 3nm$) e estreita no topo ($L = 1nm$), diminui a largura linearmente à medida que o potencial aumenta, o que é notado na figura 19(c), que traça o perfil $V_{(z)} = \Delta E_{(z)}$ sem efeito do potencial de auto-energia e na figura 19(b) é traçado o perfil do potencial $V_{(z)} = \Delta E_{(z)} + \Sigma_{im}(z)$, com efeito do potencial de auto-energia. As cúspides formadas têm largura e profundidade extremamente pequenas, o que impede o confinamento de elétrons. A figura 18(a) ilustra o coeficiente de transmissão do elétron através da barreira $V_{(z)}$ com e sem efeito do potencial de auto-energia, linha sólida e linha tracejada, respectivamente. Também é mostrado o coeficiente de transmissão de elétrons através do potencial $V_{(z)}$ abrupto, com barreira de largura $L = 3nm$ com efeito do potencial de auto-energia. O que é feito para efeito de comparação, pois é observado que o coeficiente de transmissão tem amplitude de oscilação mais acentuado para barreiras abruptas e se comparado com a figura 18(a) da barreira Si/SiO_2 a amplitude é mais elevada do que para a barreira Si/HfO_2 , o que mostra que a probabilidade de transmissão de elétrons é maior na estrutura Si/SiO_2 .

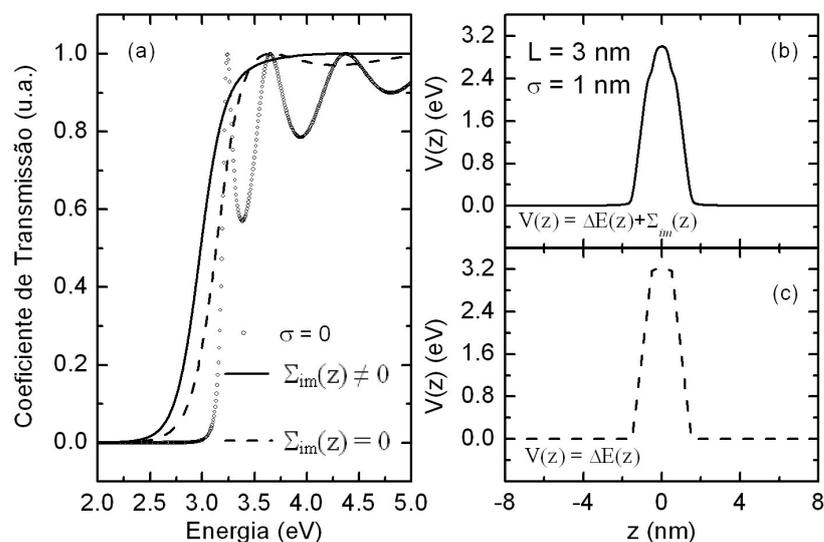


Figura 18: (a) Coeficiente de Transmissão para barreira Si/SiO_2 com interface de 1nm e largura de 3nm, sem efeito do potencial de auto-energia (linha tracejada), com efeito do potencial de auto-energia (linha tracejada) e para barreira abrupta de 3nm com potencial $V(z)$, (b) perfil do potencial total $V(z) = \Sigma_{im}(z) + \Delta E(z)$ e (c) perfil do potencial $\Delta E(z)$ devido as bandas de energia.

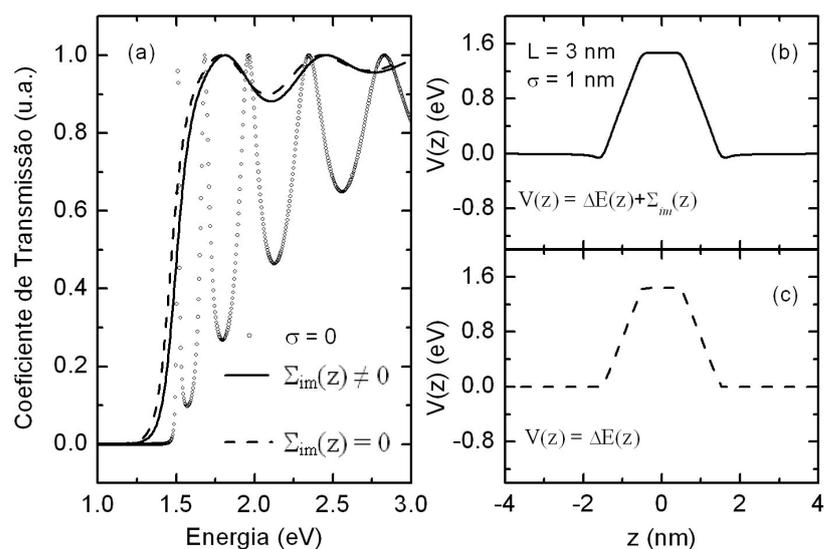


Figura 19: (a) Coeficiente de Transmissão para barreira Si/HfO_2 com interface de 1nm e largura de 3nm, sem efeito do potencial de auto-energia (linha tracejada), com efeito do potencial de auto-energia (linha tracejada) e para barreira abrupta de 3nm com potencial $V(z)$, (b) perfil do potencial total $V(z) = \Sigma_{im}(z) + \Delta E(z)$ e (c) perfil do potencial $\Delta E(z)$ devido as bandas de energia.

3 TUNELAMENTO DE ELÉTRONS EM BARREIRAS DUPLAS: SI/SiO₂ E SI/HfO₂

Neste capítulo iremos calcular o coeficiente de transmissão de elétrons através de barreiras duplas Si/SiO_2 e Si/HfO_2 . O cálculo baseia-se no método de *mult steps* proposto por Ando e Itoh [22], e é consistente com a aproximação da massa efetiva. O potencial de tunelamento $V_{(z)}$ é obtido levando em consideração a diferença entre as constantes dielétricas dos materiais que constitui cada heteroestrutura. O modelo usado para calcular o potencial de auto-energia $\Sigma_{im}(z)$, devido a variação da constante dielétrica, baseia-se no método clássico de cargas imagens. Os resultados mostram que, devido a diferença das constantes dielétricas, o efeito do potencial de auto-energia desloca o coeficiente de transmissão e o pico de ressonância destas heteroestruturas, em comparação ao estudo dessas grandezas sem o efeito do potencial de auto-energia.

3.1 Introdução

O tunelamento ressonante de elétrons em barreiras duplas, foi teoricamente idealizado e investigado por Esaki e Tsu [16], e observado experimentalmente, nos laboratórios da IBM, por Esaki, Tsu e Chang [38], utilizando um dispositivo de barreiras duplas com *GaAs/GaAlAs*, como mostrado na Fig.20. A corrente flui através da heteroestrutura entre os dois eletrodos e a ressonância ocorre quando a energia de Fermi (E_F) na região do emissor se alinha com um nível ressonante dentro do poço quântico.

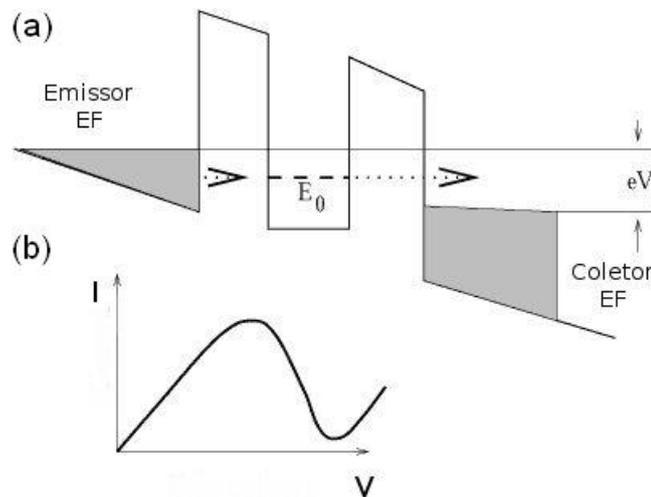


Figura 20: Tunelamento ressonante de elétrons em um sistema de barreiras duplas. (a) esquema de um sistema submetido a uma diferença de potencial V entre um emissor e o coletor. (b) forma qualitativa de corrente de tunelamento em dispositivos de barreiras duplas.

A conservação de energia implica também na conservação de momento paralelo às camadas para que seja possível o alinhamento do nível do poço com o nível de Fermi E_F no emissor. Assim, quando o nível ressonante se desalinha do nível de Fermi, a conservação do momento deixa de existir, produzindo uma queda brusca da corrente, que é refletida na curva $(I \times V)$ como uma condutância diferencial negativa.

Como o objetivo deste trabalho é calcular as propriedades de transporte em heteroestruturas semicondutoras, faremos uso da técnica de matriz de

transferência para o cálculo das propriedades de transporte em semicondutores.

3.2 Potencial de auto-energia para barreiras duplas abruptas

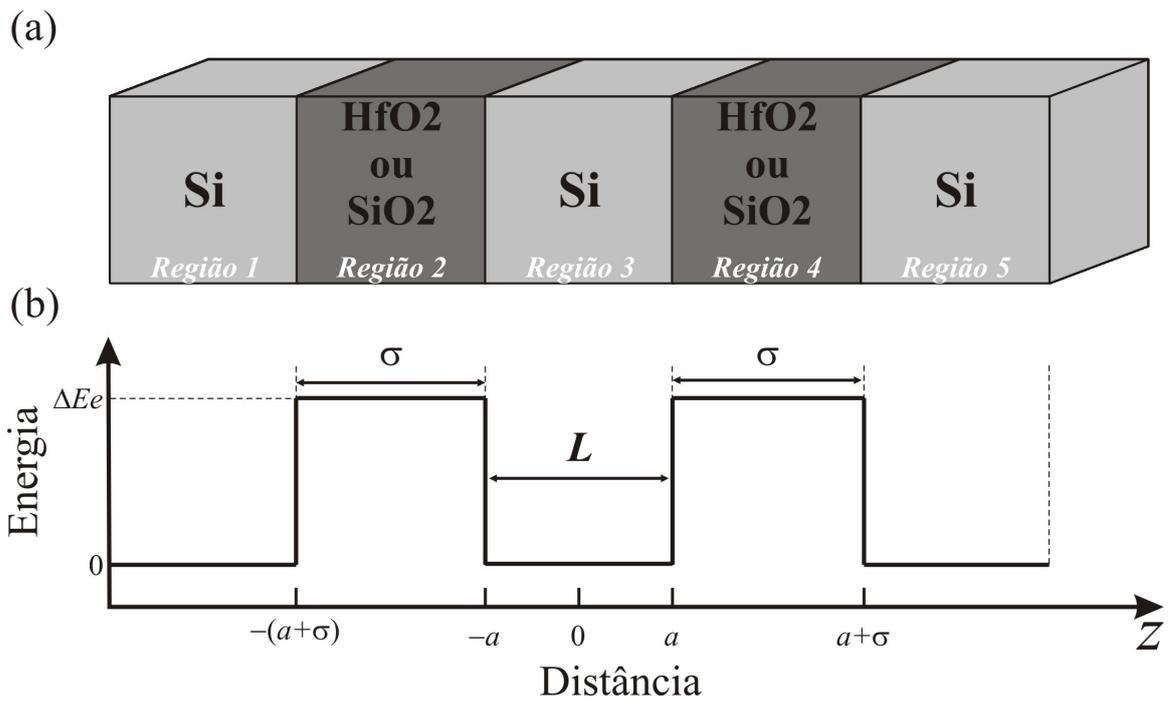


Figura 21: Em (a) modelo de crescimento da barreira dupla, em (b) modelo do potencial devido as bandas de energia.

Uma barreira de tunelamento ressonante é um dispositivo semicondutor que envolve o tunelamento de portadores (elétrons ou buracos) através de uma barreira de potencial de pequena espessura. Em geral, a estrutura de banda tem perfil como o do potencial mostrado na figura 21(b). No modelo usado para simular barreiras duplas, a camada com material de menor *gap* de energia (*Si*), crescido na direção *z*, é intercalado por um material de *gap* de energia maior (*SiO₂* ou *HfO₂* - barreiras de tunelamento). O semicondutor é limitado pela região definida por $|z| > (a + \sigma)$ e $|z| < a$. As demais regiões, $a < |z| < a + \sigma$ são ocupadas pelo dielétrico, conforme é mostrado na figura 21(a).

O poço de potencial formado entre as duas barreiras de óxidos pode confinar elétrons na banda de condução e buracos na banda de valência. Neste poço quântico o portador tem apenas 2 graus de liberdade, comportando-se como partícula livre no plano xy . Na direção do confinamento, eixo z , o portador possui níveis discretos de energia, conforme mostrado na figura 22.

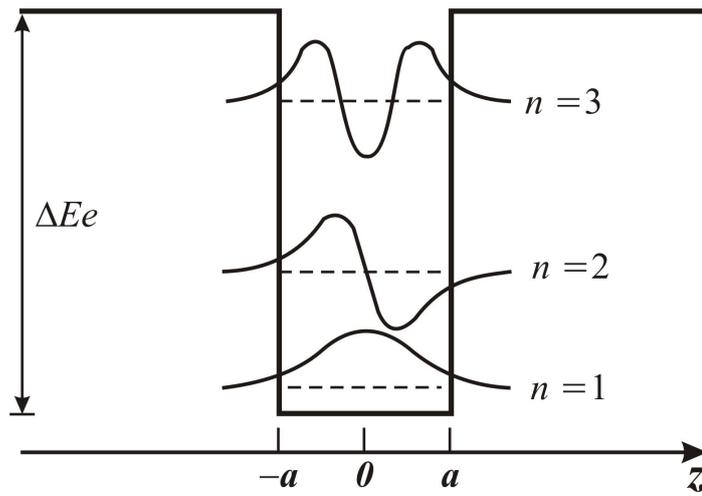


Figura 22: O potencial de confinamento tem altura ΔE_e e a largura do poço igual à $L = 2a$. Os três primeiros estados de energia previstos pela teoria quântica são mostrados pelas linhas horizontais tracejadas e suas respectivas funções de onda são mostradas em linhas sólidas.

A pequena espessura (tipicamente menor que 10 nm) das duas barreiras óxidas permite injeção de portadores à partir da região *bulk*, região onde $z < -(a + \sigma)$ do exemplo mostrado na figura 21(a), para a região do poço onde $|z| < a$, através do processo de tunelamento, sobre certas condições, isto é, se a energia do portador que incide na interface, onde $z = -(a + \sigma)$ estiver em ressonância com um estado confinado no poço quântico. Portanto, a probabilidade de transmissão de portadores em estruturas com barreiras duplas é fortemente dependente da energia do elétron (ou buraco) incidente.

A probabilidade de penetração para a barreira dupla pode ser calculada de forma análoga ao cálculo da probabilidade de transmissão para

a barreira simples, mas o resultado é modificado pela existência de estados ligados na região do poço. A função de onda do elétron que tunela com a mesma energia de um nível confinado torna-se maior na região do poço. Por simetria, o coeficiente de transmissão de elétrons que tunelam em ressonância (energia do elétron incidente igual a um nível de energia confinado) através de uma barreira dupla é igual a 1. A função de onda de elétrons que tunelam fora de ressonância (energia do elétron incidente diferente dos níveis de energia confinados) torna-se menor na região do poço, resultando no decrescimento da probabilidade de transmissão. Um diagrama esquemático do elétron tunelando em ressonância e fora de ressonância é mostrado na figura 23.

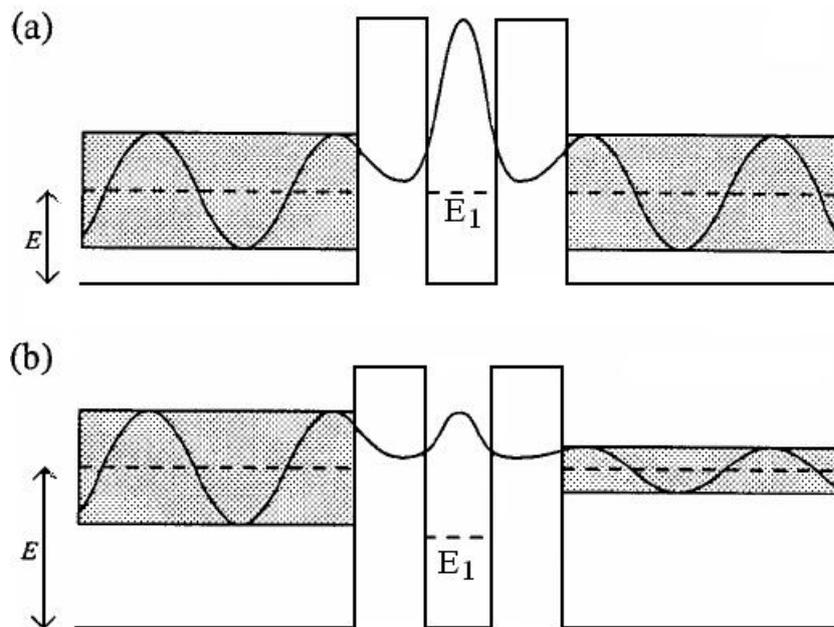


Figura 23: Representação esquemática de uma função de onda em uma barreira dupla simétrica, com (a) energia incidente igual a um estado confinado (em ressonância) e (b) energia diferente de um estado confinado (fora de ressonância).

O potencial de auto energia $\Sigma_{im}(z)$ é calculado a partir da equação (1.15):

$$A_q''(z) - q^2 A_q(z) = \frac{-Q}{2\pi\epsilon(z)} \delta(z - z_0). \quad (3.1)$$

O desenvolvimento do cálculo para encontrar o potencial imagem em barreiras duplas, para uma carga localizada na região $z_0 < -a$, envolvendo as condições de contorno apropriadas para Eq. (1.15), é mostrado no Apêndice A, sendo os cálculos para as demais regiões feitos de forma análoga.

As soluções do potencial de auto-energia, para uma carga localizada na região $z_0 < -(a + \sigma)$ (1), $-(a + \sigma) < z_0 < -a$ (2), $-a < z_0 < a$ (3), $a < z_0 < a + \sigma$ (4) e $z_0 > a + \sigma$ (5), da Eq. (1.18), em barreiras duplas abruptas são, respectivamente, dadas por:

$$\Sigma_{im}^{(1)} = -\frac{Q}{8\pi\epsilon_1} \int_0^\infty \frac{\Lambda + \Gamma e^{2q\sigma}}{1 + \Gamma\Lambda e^{-2q\sigma}} e^{2q(z+a)}, \quad (3.2)$$

$$\Sigma_{im}^{(2)} = \frac{Q}{8\pi\epsilon_2} \int_0^\infty \left[\frac{1 - \Lambda e^{2q(z+a)} + \Gamma e^{-2q(z+(a+\sigma))} - \Gamma\Lambda e^{2q\sigma}}{1 + \Gamma\Lambda e^{-2q\sigma}} - 1 \right] dq, \quad (3.3)$$

$$\Sigma_{im}^{(3)} = -\frac{Q}{8\pi\epsilon_1} \int_0^\infty \left[\frac{\zeta_2 e^{2q(z+a)} + 2 + \zeta_1 e^{-2q(z+a)}}{1 - \zeta_1 \zeta_2 e^{4qa}} \right] dq, \quad (3.4)$$

$$\Sigma_{im}^{(4)} = \frac{Q}{8\pi\epsilon_2} \int_0^\infty \left[\frac{1 - \Lambda e^{-2q(z-a)} + \Gamma e^{2q(z-(a+\sigma))} - \Gamma\Lambda e^{2q\sigma}}{1 + \Gamma\Lambda e^{2q\sigma}} - 1 \right] dq, \quad (3.5)$$

$$\Sigma_{im}^{(5)} = -\frac{Q}{8\pi\varepsilon_1} \int_0^\infty \frac{\Lambda + \Gamma e^{-2q\sigma}}{1 + \Gamma\Lambda e^{-2q\sigma}} e^{-2q(z-a)}, \quad (3.6)$$

onde:

$$\Gamma = \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{\varepsilon_2 + \varepsilon_1},$$

$$\Lambda = \frac{1 - \lambda\zeta_1 e^{4q(a-\sigma)}}{\lambda - \zeta_1 e^{4q(a-\sigma)}},$$

$$\lambda = \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2},$$

$$\zeta_1 = \frac{1 + \lambda\Gamma e^{2q\sigma}}{\lambda + \Gamma e^{2q\sigma}},$$

e

$$\zeta_2 = \frac{1 + \lambda\Gamma e^{-2q\sigma}}{\lambda + \Gamma e^{-2q\sigma}}.$$

As constantes dielétricas entre os dois meios, sílicio e óxido, são representadas respectivamente por ε_1 e ε_2 , Q é a carga elementar.

A figura (24) ilustra o perfil do potencial da barreira dupla Si/SiO_2 abrupta, onde o elétron sente um potencial atrativo quando se movimenta através do óxido SiO_2 e repulsivo quando se movimenta através do semicondutor Si , como mostrado na figura 24(c), assim como no caso da

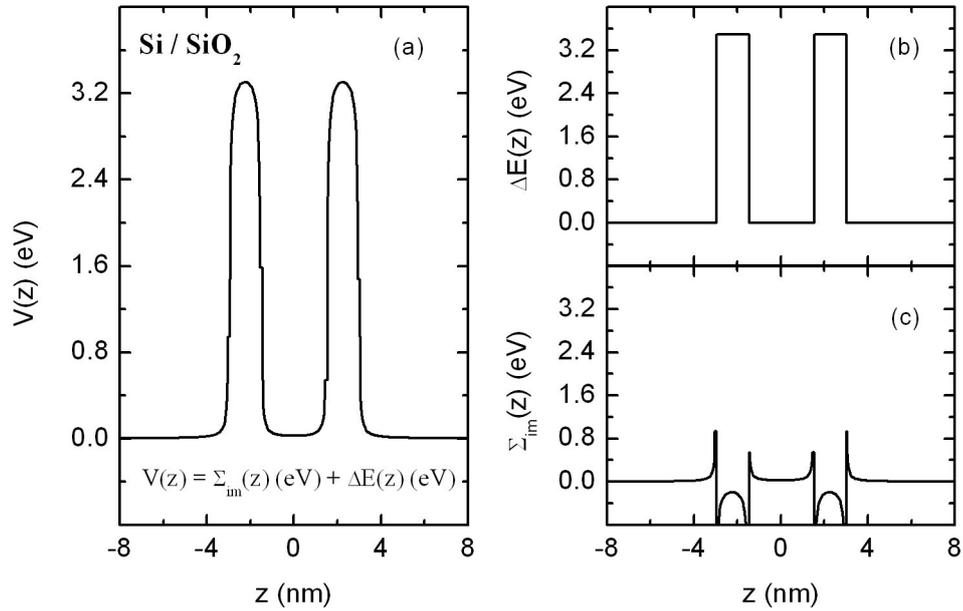


Figura 24: Perfil da barreira dupla Si/SiO_2 . (a) perfil do potencial total $V_{(z)} = \Sigma_{im}(z) + \Delta E_{(z)}$, (b) perfil do potencial $\Delta E_{(z)}$ devido as bandas de energia e (c) perfil devido ao potencial de auto-energia $\Sigma_{im}(z)$.

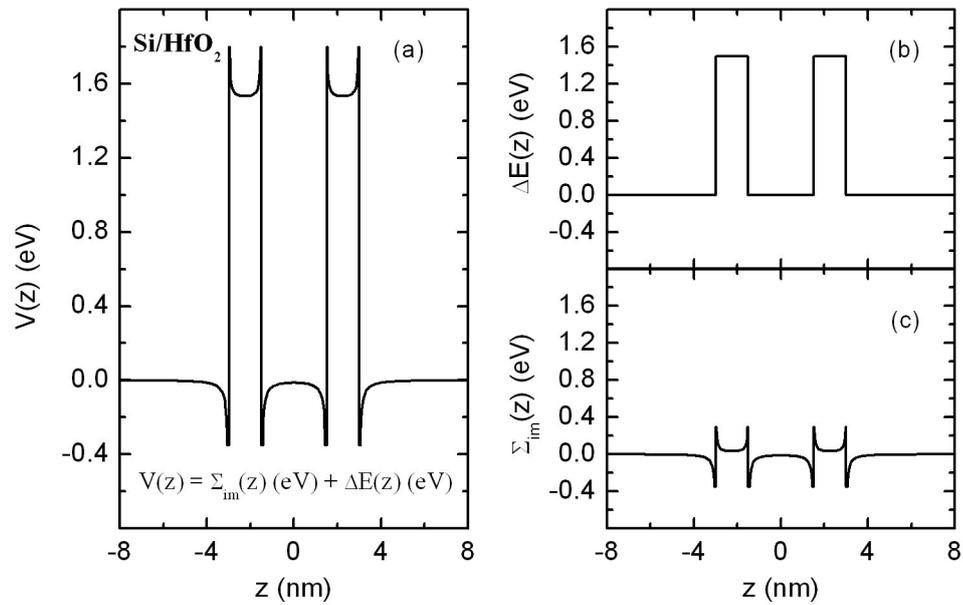


Figura 25: Perfil da barreira dupla Si/HfO_2 . (a) perfil do potencial total $V_{(z)} = \Sigma_{im}(z) + \Delta E_{(z)}$, (b) perfil do potencial $\Delta E_{(z)}$ devido as bandas de energia e (c) perfil devido ao potencial de auto-energia $\Sigma_{im}(z)$.

barreira simples, isto se deve as diferentes constantes dielétricas dos materiais usados na heteroestrutura (o potencial é atrativo na região onde a constante dielétrica é menor). A figura 24(b) traça o perfil do potencial $\Delta E_{(z)}$ devido a descontinuidade das bandas de energia dos materiais. Na figura 24(a) o potencial $V_{(z)} = \Sigma_{im}(z) + \Delta E_{(z)}$ é traçado levando em consideração o efeito do potencial de auto-energia.

A figura (25) ilustra o perfil do potencial da barreira dupla Si/HfO_2 abrupta, onde o elétron sente um potencial repulsivo quando se movimenta através do óxido HfO_2 e atrativo quando se movimenta através do semicondutor Si , como mostrado na figura 25(c). A figura 25(b) traça o perfil do potencial $\Delta E_{(z)}$ devido as bandas de energia dos materiais. Na figura 25(a) o potencial $V_{(z)} = \Sigma_{im}(z) + \Delta E_{(z)}$ é traçado levando em consideração o efeito do potencial de auto-energia. Assim como no caso das barreiras simples o potencial de auto-energia $\Sigma_i(z_i)$ diverge na posição das interfaces.

3.3 Tunelamento de elétrons em Barreiras Duplas Si/SiO_2 e Si/HfO_2

Nosso modelo para o tunelamento de elétrons através de barreiras duplas Si/SiO_2 e Si/HfO_2 abruptas, levamos em consideração um modelo do tipo silício-óxido-silício-óxido-silício, no qual a diferença entre as constantes dielétricas destes materiais produz modificações consideráveis na estrutura eletrônica desses sistemas. Assim como no modelo de barreiras simples, os parâmetros necessários para o cálculo numérico das propriedades eletrônicas dessa heteroestrutura estão na tabela 2.

A figura 26(a) ilustra os resultados obtidos do cálculo do coeficiente de transmissão de elétrons, através do potencial $V_{(z)}$ da barreira dupla SiO_2 abrupta sem o efeito do potencial de auto-energia (linha tracejada)

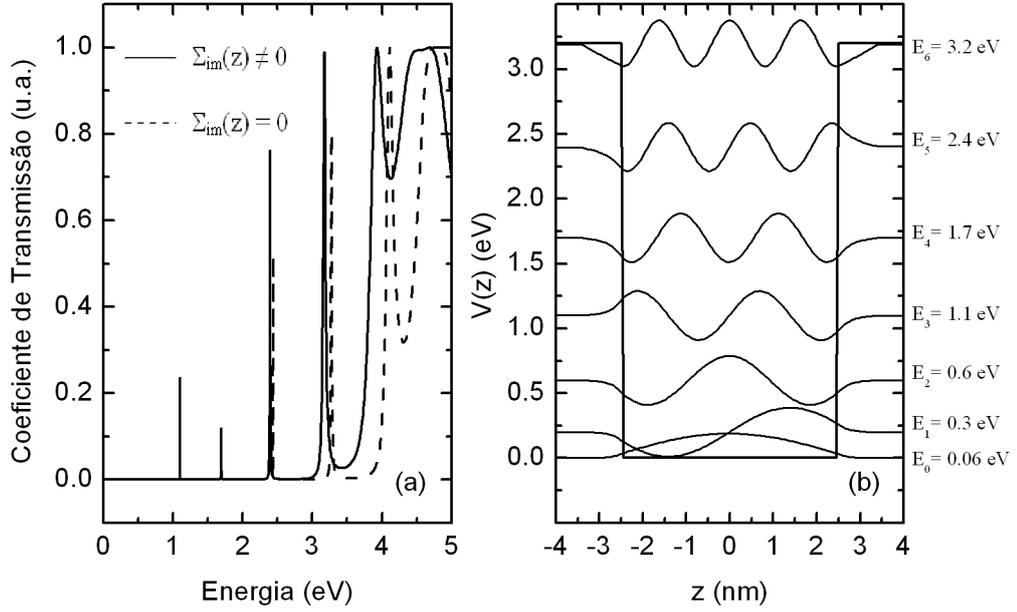


Figura 26: (a) Coeficiente de Transmissão para barreira dupla Si/SiO_2 com largura de poço com $L=5$ nm e barreiras com espessura $\sigma = 1$ nm, sem efeito do potencial de auto-energia (linha tracejada) e com efeito do potencial de auto-energia (linha sólida), (b) representação esquemática de funções de onda que penetram a barreira Si/SiO_2 , em ressonância e fora de ressonância.

e com o efeito do potencial de auto-energia (linha sólida). As barreiras de potencial possuem espessuras $\sigma = 1$ nm e altura $V_{(z)} = 3.2$ eV, provenientes do *band offset* da estrutura Si/SiO_2 , e a região do poço tem largura $L = 5$ nm, conforme mostrado na figura 26(b). O efeito do potencial de auto-energia produz um *red shift* (deslocamento para o vermelho) na energia de transmissão do elétron, devido às regiões de barreira, o elétron sente um potencial atrativo (constante dielétrica do SiO_2 menor que a constante dielétrica do Si). Este potencial, atrativo na barreira e repulsivo na região do semiconductor suaviza o perfil do potencial. A figura 26(b) mostra a energia dos estados ligados no poço Si/SiO_2 que é formado na região $|z| < a$. A energia do quarto ao sétimo estado excitado no poço quântico coincide com os primeiros quatro picos de energia de transmissão mostrados na figura 26(a), energia menor que 3.5 eV.

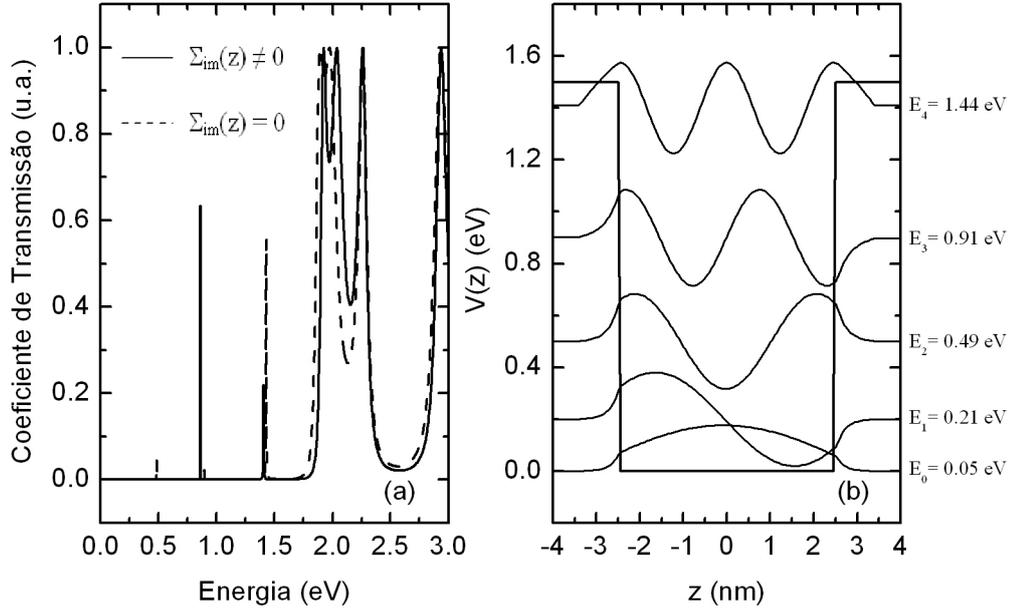


Figura 27: (a) Coeficiente de Transmissão para barreira dupla Si/HfO_2 com largura de poço com $L=5$ nm e barreiras com espessura $\sigma = 1$ nm, sem efeito do potencial de auto-energia (linha tracejada) e com efeito do potencial de auto-energia (linha sólida), (b) representação esquemática de funções de onda que penetram a barreira Si/HfO_2 , em ressonância e fora de ressonância.

Embora os resultados apresentados não mostram picos de transmissão com probabilidade igual a 1, para energias menores que 3.5 eV, supõe-se que estes quatro picos representam tunelamento ressonante de elétrons, tendo em vista que a energia destes picos coincidem com a energia de estados confinados na região do poço.

A figura 27(a) ilustra os resultados obtidos do cálculo do coeficiente de transmissão de elétrons, através do potencial $V_{(z)}$ da barreira dupla HfO_2 abrupta sem o efeito do potencial de auto-energia (linha tracejada) e com o efeito do potencial de auto-energia (linha sólida). A figura 27(b) mostra a energia dos estados ligados no poço Si/HfO_2 que é formado na região $|z| < a$. A energia do segundo ao quarto estado excitado no poço quântico coincide com os primeiros três picos de energia de transmissão mostrados na figura 27(b), com energia menor que 1.5 eV. Embora estes resultados

apresentados não mostram picos de transmissão com probabilidade igual a 1, supõe-se que estes estados representam tunelamento ressonante de elétrons, tendo em vista que a energia destes picos coincidem com a energia de estados confinados na região do poço. O efeito do potencial de auto-energia produz um *blue shift* (deslocamento para o azul) na energia de transmissão do elétron. Nas barreiras Si/HfO_2 o elétron sente um potencial atrativo quando se movimenta através do semiconductor Si e repulsivo quando se movimenta através do óxido HfO_2 , ($\varepsilon_{(Si)} < \varepsilon_{(HfO_2)}$). A divergência do potencial na posição da interface, somada à grande diferença entre as constantes dielétricas dos materiais ($\varepsilon_{(Si)}/\varepsilon_{(HfO_2)} = 0,47$), e ao fato de usarmos barreiras estreitas ($L=1$ nm) cria nas regiões interfaciais cúspides (pequenos poços quânticos) com larguras extremamente pequenos (0,4 nm) e profundidade da ordem de 700 meV, o que não caracteriza confinamento, neste caso; pois a eficiência das transições eletrônicas depende da combinação de alguns parâmetros, como: massa efetiva $m_i^*(z)$, profundidade do potencial $\Delta E(z)$, e principalmente do efeito do potencial de auto-energia $\Sigma_{im}(z)$. Estes parâmetros combinados poderiam conduzir o portador ao confinamento nas regiões interfaciais, conforme foi observado por Pereira e colaboradores [37], o que não foi verificado neste trabalho.

4 CONCLUSÃO E PERSPECTIVAS

Neste trabalho apresentamos um estudo do tunelamento de elétrons em sistemas quânticos do tipo barreiras Si/SiO_2 e Si/HfO_2 , simples (abrupta e não abrupta) e duplas (abruptas), onde demonstramos que o efeito do potencial de auto-energia, devido às cargas imagem, modificam a estrutura eletrônica destas barreiras.

O SiO_2 apesar das boas características físicas, o seu uso contínuo têm oferecido limitações fundamentais, o que faz com que novos materiais sejam estudados afim de suprir essas limitações. Um dos materiais, que confere boas características físicas é o HfO_2 , pois a sua constante elétrica elevada supri algumas das limitações do SiO_2 .

Os formalismos usados foram baseados na aproximação da massa efetiva e função envelope. Para a solução da equação de Schrodinger usamos o método de *mult steps* proposto por Ando e Itoh [22] e calculamos o potencial de auto-energia (devido às cargas imagem) nas barreiras solucionando a equação de Poisson e assim determinamos o coeficiente de transmissão de elétrons para as heteroestruturas Si/SiO_2 e Si/HfO_2 , sem o efeito do potencial de auto-energia e com o efeito do potencial de auto-energia.

Inicialmente o tunelamento de elétrons foi estudado em barreiras simples abruptas e depois em barreiras simples não abruptas, com interfaces graduais simuladas por uma função linear. Os resultados demonstram que o efeito da carga imagem juntamente com a diferença entre as constantes dielétricas dos materiais afetam consideravelmente as barreiras de potenciais Si/SiO_2 e Si/HfO_2 , produzindo deslocamentos na energia de trans-

missão de elétrons através destas barreiras, *red shift* (deslocamento para o vermelho) no caso da heteroestrutura Si/SiO_2 e *blue shift* (deslocamento para o azul) no caso da heteroestrutura Si/HfO_2 .

Na presença de interfaces graduais nas barreiras Si/SiO_2 e Si/HfO_2 é observado que além dos deslocamentos de energia o coeficiente de transmissão têm amplitudes de oscilação menos acentuados do que no caso de barreiras abruptas.

O método *mult step* usado exige uma elevada precisão na energia do elétron incidente para o cálculo do coeficiente de transmissão de elétrons que tunelam em ressonância com estados confinados no poço. Apesar da dificuldade encontrada para calcular estes estados ressonantes, os resultados apresentados demonstram que o tunelamento de elétrons ocorre e que o efeito do potencial de auto-energia modifica a energia de transmissão do elétron.

O efeito do potencial de auto-energia, devido às cargas imagem, se torna interessante, pois ocasiona uma diferença de até 600 meV na energia de transmissão do elétron, provocando deslocamentos no coeficiente de transmissão e na polarização.

Nas estruturas em que as constantes dielétricas sofrem grandes variações entre os meios, torna-se relevante estudar os efeitos do potencial de auto-energia. A variação linear da constante dielétrica nas interfaces de barreiras não abruptas conduz a uma transição suave do potencial imagem pela interface, em oposição ao caso abrupto, onde há divergências e descontinuidades.

Embora o coeficiente de transmissão de portadores através de barreiras quânticas não tenham comprovação experimental, a curva da corrente de tunelamento em função do potencial eletrostático, aplicado nas extremi-

dades da estrutura, que pode ser observada experimentalmente, depende do coeficiente de transmissão para ser calculada. Este fato nos remete a algumas perspectivas para trabalhos futuros:

1. Estudo do efeito de campo elétrico (Efeito Stark) sobre tunelamento de elétrons através de barreiras quânticas Si/SiO_2 e Si/HfO_2 ;
2. Cálculo da corrente de tunelamento em barreiras quânticas Si/SiO_2 e Si/HfO_2 abruptas;
3. Cálculo da corrente de tunelamento em barreiras quânticas Si/SiO_2 e Si/HfO_2 não abruptas, com interfaces graduais simuladas por interpolação linear;
4. Efeito do potencial de auto-energia sobre corrente de tunelamento em barreiras Si/SiO_2 e Si/HfO_2 .

APÊNDICE A - Potencial de Auto-Energia em Barreiras Quânticas Abruptas

Será considerado um modelo de estrutura para barreiras duplas onde a constante dielétrica muda abruptamente entre os meios onde se encontra uma carga pontual. A figura 28 mostra o modelo usado para calcular o potencial de auto-energia em barreiras duplas com interfaces abruptas. Vamos considerar inicialmente, uma carga pontual localizada no eixo z , limitada em uma região definida por $z < -(a + \sigma)$.

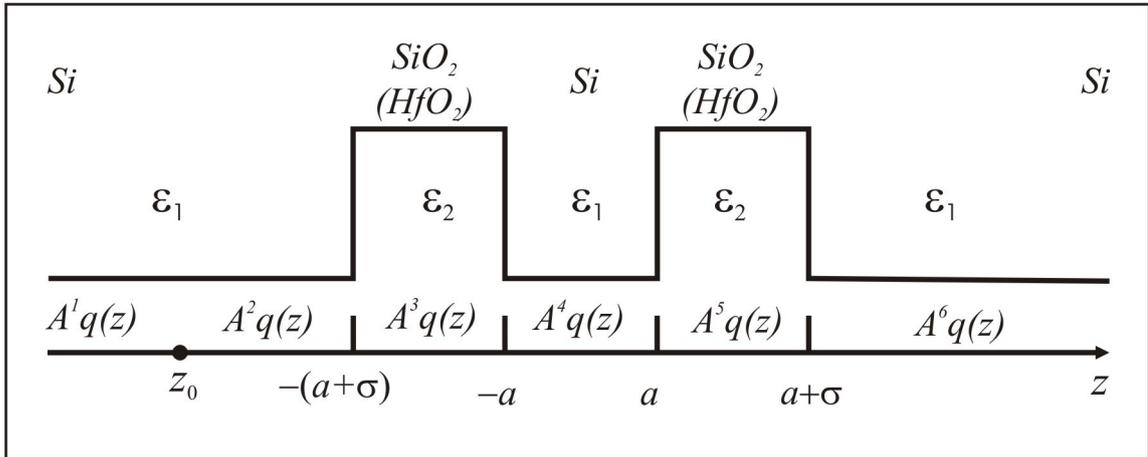


Figura 28: Modelo da barreira dupla para a carga localizada em $z_0 < -(a + \sigma)$.

Nesta região, onde localiza-se a carga, o coeficiente $A_q(z)$ satisfas a equação:

$$A''_q(z) - q^2 A_q(z) = -\frac{Q\delta(z - z_0)}{2\pi\epsilon(z)}. \quad (A.1)$$

As demais regiões o coeficiente $A_q(z)$ satisfaz a seguinte equação:

$$A''_q(z) - q^2 A_q(z) = 0. \quad (A.2)$$

Sendo as soluções destas equações diferenciais, dadas por:

$$\begin{aligned}
 A_q^1(z) &= Ae^{qz} & z < z_0 \\
 A_q^2(z) &= Be^{qz} + Ce^{-qz} & z_0 < z < -a \\
 A_q^3(z) &= De^{qz} + Fe^{-qz} & -a < z < -(a - \sigma) \\
 A_q^4(z) &= Ge^{qz} + He^{-qz} & -(a - \sigma) < z < a - \sigma \\
 A_q^5(z) &= Je^{qz} + Ke^{-qz} & a - \sigma < z < a \\
 A_q^6(z) &= Le^{-qz} & z > a
 \end{aligned}$$

As grandezas A, B, C, D, F, G, H, J, K e L são determinadas à partir das condições de contorno, que dizem respeito à continuidade do potencial e da sua derivada primeira nas interfaces.

O potencial é determinado pela Eq.(1.5), onde apenas o coeficiente $A_q(z)$ depende da variável z . Na posição da carga $z = z_0$, o potencial é contínuo e a descontinuidade da sua derivada primeira é determinada por:

$$\left(\frac{dA_q}{dz} \right)_{z=z_0} - \left(\frac{dA_q}{dz} \right)_{z=z_0^+} = -\frac{Q}{2\pi\epsilon_{(z_0)}},$$

da continuidade do potencial, $A_q^1(z = z_0) = A_q^2(z = z_0)$ e descontinuidade da sua derivada primeira, obtemos as seguintes equações:

$$C = \frac{Q}{4\pi\epsilon_1} e^{qz_0}, \tag{A.3}$$

$$A = B + \frac{Q}{4\pi\epsilon_1} e^{-qz_0}. \tag{A.4}$$

Em $z = -(a + \sigma)$, $A_q^2(z = -(a + \sigma)) = A_q^3(z = -(a + \sigma))$ e $\varepsilon_1 A_q'^2(z = -(a + \sigma)) = \varepsilon_2 A_q'^3(z = -(a + \sigma))$, daí obtemos as seguintes equações:

$$B = \frac{2\varepsilon_2 D}{\varepsilon_2 + \varepsilon_1} - \Gamma C e^{2q(a+\sigma)}, \quad (\text{A.5})$$

$$C = \frac{2\varepsilon_2 F}{\varepsilon_2 + \varepsilon_1} - \Gamma B e^{-2q(a+\sigma)}, \quad (\text{A.6})$$

onde

$$\Gamma = \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{\varepsilon_2 + \varepsilon_1}.$$

Em $z = -a$; $A_q^3(z = -a) = A_q^4(z = -a)$ e $\varepsilon_2 A_q'^3(z = -a) = \varepsilon_1 A_q'^4(z = -a)$, onde obtemos as seguintes equações:

$$G = \frac{2\varepsilon_2 D}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} + \lambda H e^{2qa}, \quad (\text{A.7})$$

$$H = \frac{2\varepsilon_2 F}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} + \lambda G e^{-2qa}, \quad (\text{A.8})$$

onde

$$\lambda = \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}.$$

Em $z = a$; $A_q^4(z = a) = A_q^5(z = a)$ e $\varepsilon_1 A_q^4(z = a) = \varepsilon_2 A_q^5(z = a)$, onde obtemos as seguintes equações:

$$J = \frac{2\varepsilon_1 G}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} + \lambda K e^{-2qa}, \quad (\text{A.9})$$

$$K = \frac{2\varepsilon_1 H}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} - \lambda J e^{2qa}, \quad (\text{A.10})$$

Em $z = a + \sigma$, $A_q^5(z = a + \sigma) = A_q^6(z = a + \sigma)$ e $\varepsilon_2 A_q^5(z = a + \sigma) = \varepsilon_1 A_q^6(z = a + \sigma)$, daí obtemos a seguinte equação:

$$J = \Gamma K e^{-2q(a+\sigma)} \quad (\text{A.11})$$

Substituindo q Eq.(A.11) em (A.10) e (A.9), temos que:

$$K = \frac{2\varepsilon_1 H}{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)(1 + \lambda \Gamma e^{-2q\sigma})}, \quad (\text{A.12})$$

$$K = \frac{2\varepsilon_1 G}{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)(\lambda + \Gamma e^{-2q\sigma})} e^{2qa}. \quad (\text{A.13})$$

Substituindo a Eq.(A.12) em (A.13), obtem-se:

$$H = \zeta_1 G e^{2qa}, \quad (\text{A.14})$$

onde:

$$\zeta_1 = \frac{1 + \lambda \Gamma e^{-2q\sigma}}{\lambda + \Gamma e^{-2q\sigma}}.$$

Substituindo a Eq.(A.14) em (A.8) e (A.7), temos:

$$G = -\frac{2\varepsilon_2 F e^{2qa}}{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)(\lambda - \zeta_1 e^{4qa})}, \quad (\text{A.15})$$

$$G = \frac{2\varepsilon_2 D}{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)(1 - \lambda \zeta_1 e^{4qa})}. \quad (\text{A.16})$$

Substituindo a Eq.(A.15) em (A.16):

$$D = -\Lambda F e^{2qa}, \quad (\text{A.17})$$

onde:

$$\Lambda = \frac{1 - \lambda \zeta_1 e^{4qa}}{\lambda - \zeta_1 e^{4qa}}$$

Em $z = -(a + \sigma)$, temos que:

$$D = \frac{2\varepsilon_1 B}{\varepsilon_2 + \varepsilon_1} + \Gamma F e^{2q(a+\sigma)}, \quad (\text{A.18})$$

$$F = \frac{2\varepsilon_1 C}{\varepsilon_2 + \varepsilon_1} + \Gamma D e^{-2q(a+\sigma)}. \quad (\text{A.19})$$

Substituindo a Eq.(A.17) em (A.18) e (A.19):

$$F = -\frac{2\varepsilon_1 B e^{-2qa}}{(\varepsilon_2 + \varepsilon_1)(\Lambda + \Gamma e^{-2q\sigma})}, \quad (\text{A.20})$$

$$F = \frac{2\varepsilon_1 C}{(\varepsilon_2 + \varepsilon_1)(1 + \Gamma \Lambda e^{-2q\sigma})}. \quad (\text{A.21})$$

Substituindo a Eq.(A.20) em (A.21), teremos:

$$B = -\left(\frac{\Lambda + \Gamma e^{2q\sigma}}{1 + \Gamma \Lambda e^{-2q\sigma}}\right) \frac{Q}{4\pi q \varepsilon_1} e^{q(z_0+2a)}. \quad (\text{A.22})$$

Lembrando que:

$$A_q^2(z) = B e^{qz} + C e^{-qz},$$

então fazendo as devidas substituições teremos que:

$$A_q^2(z) = \frac{Q}{4\pi q \varepsilon_1} e^{-q(z-z_0)} - \left(\frac{\Lambda + \Gamma e^{-2q\sigma}}{1 + \Gamma \Lambda e^{-2q\sigma}}\right) \frac{Q}{4\pi q \varepsilon_1} e^{q(z+z_0+2a)}. \quad (\text{A.23})$$

tendo que:

$$A_q^0(z = z_0) = \frac{Q}{4\pi q \varepsilon_1},$$

e se $z = z_0$ a Eq.(A.23) será dada por:

$$A_q^2(z = z_0) = \frac{Q}{4\pi q \varepsilon_1} - \left(\frac{\Lambda + \Gamma e^{-2q\sigma}}{1 + \Gamma \Lambda e^{-2q\sigma}} \right) \frac{Q}{4\pi q \varepsilon_1} e^{2q(z_0+a)}. \quad (\text{A.24})$$

Substituindo esta última equação na Eq.(1.18) obtemos o potencial de auto-energia para $z < -a$:

$$\Sigma_{im}(z_0) = -\frac{Q}{8\pi \varepsilon_1} \int_0^\infty \frac{\Lambda + \Gamma e^{2q\sigma}}{1 + \Gamma \Lambda e^{-2q\sigma}} e^{2q(z+a)}. \quad (\text{A.25})$$

Referências

- [1] G. D. Wilk, R. M. Wallace and J. M. Anthony, *J. Appl. Phys.* **89**, 5243 (2001).
- [2] Quantum Theory of the Optical and Eletronic Properties of Semiconductors. Hartmut Haug and Stephan W. Kloch, 1994, terceira edição.
- [3] S. Tang, R. M. Wallace, A. Seabaugh and D. King-Smith, *Appl. Surf. Sci.*, **135**, 137 (1998).
- [4] A. A. Demkov and O. F. Sankey, *Phys. Rev. Lett.*, **83**, 2038 (1999).
- [5] Seung-Gu lim, Stas Kriventsov and Thomas N. Jackson, *J. Appl. Phys.*, **91**, 4500 (2002).
- [6] D. F. Holcomb, “Quantum eletrical transport in samples of limited dimensions”, *Am. J. Phys.*, vol 67, p.274. April 1999.
- [7] A. Kawamoto, PhD Thesis, Departament of Electrical Enginneering Stanford University (2001).
- [8] R. Tsu and L. Esaki, *J. Res. Dev.***14**, 61 (1970).
- [9] J. R. Arthur, *Surface Science* **500**, 189 (2002).
- [10] K. G. Günther and Z. *Naturforschg.* **A13**, 1081 (1958).
- [11] J. R. Arthur, *J. Phys. Chem. Solids* **28**, 2257 (1967).
- [12] A. Y. Cho, *J. Appl. Phys.* **41**, 782 (1970).
- [13] A. Y. Cho, *J. Vac. Sci. Technol B***3**, 1224 (1986).
- [14] G. Duggan, *J. Vac. Sci. Technol B***3**, 1224 (1986).
- [15] H. Kroemer, *Surf. Sci.* **174**, 299 (1986).
- [16] R. Tsu, and L. Esaki, *Appl. Phys. Lett.***22**, 562 (1973).
- [17] L. Esaki and R. Tsu, *IBM Res. Note*, RC-2418 (1969).
- [18] Machado, Kleber Daum. *Teoria do Eletromagnetismo* v.1, 2 ed., Ponta Grossa: Editora UEPG, 2004.
- [19] Stern, F. *Phys. Rev. B* v.**17**, 5009 (1978).

- [20] R. H. Fowler, L. Nordheim, Proc. Roy. Soc. London **A119**, 173 - 181 (1928).
- [21] C. Zener, Proc. Roy. Soc. London **A145**, 523 (1934).
- [22] Y. Ando and T. Itoh, J. Appl. Phys. **61**, 1497 (1987).
- [23] C.B. Duke, Em Tunneling in solids, Solid State Physics, Vol. **10**, editado pr E. Seitz, D. Turnbull e H. Ehrenreich (Academic New York), 1969.
- [24] A. Messiah, Quantum Mechanics, Amsterdam (North-Holland), 1961.
- [25] A. Chandra and L.F. Eastman, J. Appl. Phys. **53**, 9165 (1982).
- [26] K.H. Gundlach, Solid-State Electron, **9**, 949 (1966).
- [27] D.N. Christodoulides, A.G. Andrean, R.I. Joseph and C.R. Wesgate, Solid-States Electron, **28**, 821 (1985).
- [28] D. J. Ben Daniel and C. B. Duke, Phys. Rev., **152**, 683 (1966).
- [29] M. Kumagai e T. Takagahara, Phys. Rev. B,**40**, 12359 (1989).
- [30] T.A.S. Pereira, Propriedades Eletrônicas de Poços Quânticos Baseados em Si, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Ceará, 2002.
- [31] T.A.S. Pereira, Confinamento Dielétrico versus Quântico em Nanoestruturas, Tese de Doutorado, Universidade Federal do Ceará, 2006.
- [32] T.A.S. Pereira, M.G. Bezerra, J.A.K. Freire, V.N. Freire and G.A. Farias, Brazilian Journal Physics, **36**, 347 (2006)
- [33] J. Cazaux, Semicond. Sci. Technol.,**13**, 827 (1998).
- [34] S. Sayan, T. Emge, E. Garfurkel, X. Zhao, L. Wielunski, R.A. Bartynki, D. Vanderbilt, J.S. Suehle and M.B.-Holl, J. Appl. Phys., **96**, 7485 (2004).
- [35] B. Brar, G.D. Wilk and A.C. Seabaugh, Appl. Phys. Lett., **69**, 2728 (1996).
- [36] J.R. Chelikowsky and M. Schlüter, Phys. Rev. B, **15**, 4020 (1977).
- [37] T.A.S. Pereira, J.S. de Sousa, G.A. Farias, J.A.K. Freire, M.H. Degani and V.N. Freire, Appl. Phys. Lett., **87**, 171904 (2005).
- [38] L. L. Chang, Leo Esaki, R. Tsu, App. Phys. Lett. **24**, 593 (1974).

Livros Grátis

(<http://www.livrosgratis.com.br>)

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)
[Baixar livros de Matemática](#)
[Baixar livros de Medicina](#)
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)
[Baixar livros de Meteorologia](#)
[Baixar Monografias e TCC](#)
[Baixar livros Multidisciplinar](#)
[Baixar livros de Música](#)
[Baixar livros de Psicologia](#)
[Baixar livros de Química](#)
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)
[Baixar livros de Serviço Social](#)
[Baixar livros de Sociologia](#)
[Baixar livros de Teologia](#)
[Baixar livros de Trabalho](#)
[Baixar livros de Turismo](#)