

INFORMAÇÕES GERAIS DO TRABALHO

Título do Trabalho: Nanotransistor com Tunelamento Ressonante Aplicado a Eletrônica de Alta Frequência

Autor (es): Mateus H. R. Faria, Rafael V. T. da Nobrega, e Ulysses R. Duarte

Palavras-chave: Tunelamento Ressonante, Nanoeletrônica, Telecomunicação

Campus: Formiga

Área do Conhecimento (CNPq): Engenharia Elétrica (3.04.00.00-7); Materiais e Dispositivos Semicondutores (3.04.01.02-0)

RESUMO

Dispositivos com aplicações em optoeletrônica, construídos a partir de heteroestruturas semicondutoras, tem atraído um grande interesse na pesquisa em materiais semicondutores. Para o progresso da tecnologia de tunelamento ressonante, uma forma quântica de transporte de corrente responsável por tais aplicações, é necessário o desenvolvimento de ferramentas computacionais baseadas em modelos físico-matemáticos consolidados pela literatura e verificados experimentalmente. Este projeto, então, é dirigido à modelagem numérica dos efeitos de tunelamento quântico, especificamente o efeito de tunelamento ressonante, com o intuito de obter as curvas de corrente dreno-fonte por tensão dreno-fonte da heteroestrutura semicondutora. Para este fim, foram implementados algoritmos no *software* MATLAB®, apoiados nas equações da mecânica quântica e física do estado sólido. Os casos de estudos analisados ao longo desse projeto podem ser elencados da seguinte forma: i) obtenção do coeficiente de tunelamento através de uma única barreira de potencial pela resolução analítica; ii) obtenção do coeficiente de tunelamento através de uma única barreira de potencial pelo método da matriz transferência; iii) obtenção do coeficiente de tunelamento através de duas barreiras de potencial pelo método da matriz transferência sem polarização externa; iv) obtenção do coeficiente de tunelamento através de duas barreiras de potencial pelo método da matriz de propagação com polarização externa e; v) obtenção da corrente de transporte ao longo do material utilizando-se o método da matriz de propagação e integração pelo método do trapézio. Para a validação das simulações realizadas, ao longo dos diferentes estágios de desenvolvimento, foram realizados contrastes com resultados encontrados na literatura técnica para assegurar a implementação correta dos modelos numéricos. De acordo com os resultados obtidos, as simulações realizadas das curvas de tunelamento em função da posição e as curvas de densidade de corrente em função da tensão aplicada ao material estão em concordância com os resultados encontrados na literatura. Desta forma, considera-se que o objetivo de se obter um simulador de curvas elétricas para sistemas de barreira dupla foi cumprido com sucesso.

INTRODUÇÃO

Materiais semicondutores exibem a característica de átomos de estados de energia permitidos ou proibidos a existência de elétrons. Isto se dá devido a separação energética entre a banda de valência e condução do material. Tais bandas são formadas devido a interações entre os átomos na rede periódica e cristalina do material. Em decorrência, essa rede cria potenciais periódicos cuja influência sobre o elétron é descrita utilizando o modelo da massa efetiva.

Diferentes semicondutores podem ser crescidos uns sobre os outros por processos de cristalização epitaxial de forma a criar heteroestruturas, como GaAs/AlAs/GaAs/AlAs/GaAs. Como a separação energética é diferente para cada semicondutor, criam-se, nesse processo, barreiras de energia potencial ao longo do limite da banda de condução. Tais heteroestruturas formam superredes e permitem o projeto de

dispositivos eletrônicos e fotônicos que funcionam com base na mecânica quântica (TSU; ESAKI, 1973; LEVI, 2003).

Na literatura, destacam-se dois trabalhos da caracterização empírica. O trabalho relatado por Sugiyama, Suzuki e Asada (2011) apresenta um diodo de tunelamento ressonante construído a partir de uma heteroestrutura AlAs/GaAs crescida em um substrato de InP. Tal dispositivo foi utilizado no projeto de um oscilador capaz de operar na faixa de terahertz (THz), mostrando aplicação em telecomunicações como fonte de luz. O outro trabalho de destaque é o de Wensorra et al. (2009) que apresentou uma nanocoluna de AlAs/GaAs rodeada por um terminal de porta circular (*Gate All-Around* - GAA) que permitiu um novo grau de liberdade no controle das características elétricas do dispositivo.

As aplicações dos dispositivos citados vêm da região de resistência diferencial negativa, caracterizada por um pico de corrente seguido de um vale com o aumento da tensão aplicada ao terminal do dispositivo. A figura de mérito deste fenômeno é denominada *peak-to-valley ratio*, PVR. O diferencial em Wensorra et al. (2009) é que diferentes PVRs foram obtidos para tensões na porta do dispositivo.

Dada a importância tecnológica da telecomunicação na economia mundial, é estratégico a pesquisa e o desenvolvimento de dispositivos semicondutores heteroestruturados para simplificação de processos industriais ou mesmo a criação de novos processos. Para tanto, novos dispositivos devem ser validados por meio de simulações computacionais capazes de modelar os fenômenos quânticos de transporte de corrente.

Neste contexto, nesse projeto é desenvolvido em linguagem MATLAB® a modelagem numérica do comportamento das curvas de tunelamento e densidade de corrente para sistemas quânticos de uma e duas barreiras de potencial. As simulações numéricas obtidas são contrastadas com curvas encontradas na literatura técnica, com o intuito de validar o *software*. Os resultados obtidos exibem boa concordância em comparação ao referencial técnico, atestando que o objetivo de se obter um simulador de curvas elétricas para diodos ressonantes foi cumprido com sucesso.

METODOLOGIA

Todos os modelos numéricos utilizados nessa seção foram implementados através do desenvolvimento de algoritmos em linguagem MATLAB®.

O primeiro passo consistiu em resolver o problema do tunelamento em um sistema modelado por uma única barreira finita de potencial, como ilustrado pela Figura 1. Neste sistema, que serve de simplificação para a organização energética da matéria em uma heteroestrutura do tipo AlGaAs/GaAs/AlGaAs, por exemplo, há uma barreira de altura eV_0 e largura L entre os contatos dreno-fonte, onde V_0 é o valor do potencial elétrico e e é o valor da carga elementar.

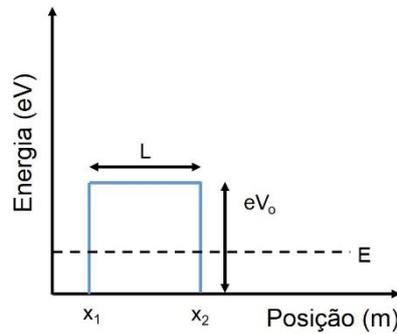


Figura 1 – Ilustração esquemática de um sistema quântico constituído de uma barreira de potencial.

Para resolver este problema, são definidas três regiões distintas: duas regiões no exterior da barreira e uma no interior da barreira de potencial. Em cada região, a equação de Schrödinger é resolvida, impondo-se as condições de contorno, para se encontrar a razão entre a amplitude da onda incidente e a amplitude da onda transmitida. Desta forma, é possível determinar o coeficiente de transmissão de tunelamento para diferentes níveis de energia do elétron incidente.

Posteriormente, o modelo de transmissão de corrente pelo transistor (diodo) é aperfeiçoado por meio do estudo de sistemas quânticos constituídos de duas barreiras de potencial, separadas por um poço quântico, como ilustrado pela Figura 2. Neste sistema, que serve de simplificação para a organização energética da matéria em uma heteroestrutura do tipo AlGaAs/GaAs/AlGaAs/GaAs/AlGaAs, por exemplo, há duas barreiras de potencial de altura eV_0 e largura L , separadas por um poço quântico de largura W .

Em virtude da complexidade do problema, o sistema é resolvido numericamente pelo Método da Matriz de Transferência, na qual o resultado apresenta o coeficiente de transmissão da onda que incide sobre a primeira barreira e é transmitida na saída da segunda barreira. Uma segunda simulação foi construída para analisar o sistema básico, isto é, sem perturbações por campo elétrico externo, o qual representa a polarização na fonte e no dreno do transistor.

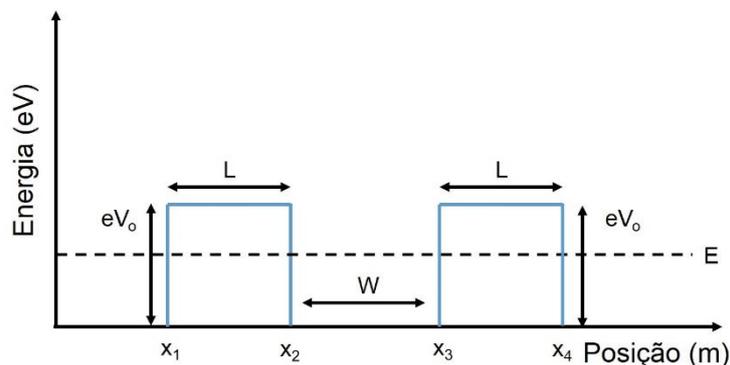


Figura 2 – Ilustração esquemática de um sistema quântico constituído de duas barreiras de potencial.

Para simular tais efeitos perturbatórios, foi necessário construir uma nova simulação baseada no Método da Matriz de Propagação. Com tal método numérico, foi possível simular o tunelamento por potenciais de formato arbitrário após ajustes do passo e de parâmetros da simulação. Em seguida, uma função de construção de perfil de potencial foi desenvolvida para alimentar o motor da simulação do tunelamento ressonante.

Finalmente, após obter as curvas de transmissão por energia de incidência, o trabalho foi direcionado a obter curvas de tensão por corrente em sistemas de barreira dupla, dada por:

$$J = \left(\frac{em}{2\pi^2 \hbar^3} \right) \cdot \int_0^{E_f} (E_f - E) T^* \cdot T \cdot dE, \quad V \geq E,$$

$$J = (em/2\pi^2 \hbar^3) \left[V \int_0^{E_f - V} T^* \cdot T \cdot dE + \int_{E_f - V}^{E_f} (E_f - E) \cdot T^* \cdot T \cdot dE, \quad V \leq E_f \right] \quad (1)$$

onde h é a constante de Planck, T é o coeficiente de tunelamento, V a diferença de potencial elétrico aplicado entre o dreno e a fonte, E_f a energia de Fermi e a E a energia dos elétrons incidentes na heteroestrutura.

Tal equação descreve a densidade de corrente aproximada no caso do zero absoluto, 0 K. Para tanto, o método de integração do trapézio foi implementado. Testes de ajuste do motor da simulação foram realizados utilizando a curva do trabalho de Tsu e Esaki (1973). Por fim, as características físicas de diversos sistemas de barreira dupla da literatura foram listados para serem simulados.

RESULTADOS E DISCUSSÕES

A Figura 3 apresenta a validação entre a simulação realizada no MATLAB® e os resultados dos trabalhos de Harrison (2012) para uma única barreira de potencial, de 10 nm de largura. Pelo contraste entre as curvas simuladas e da referência, nota-se que a simulação, neste estágio, está satisfatória.

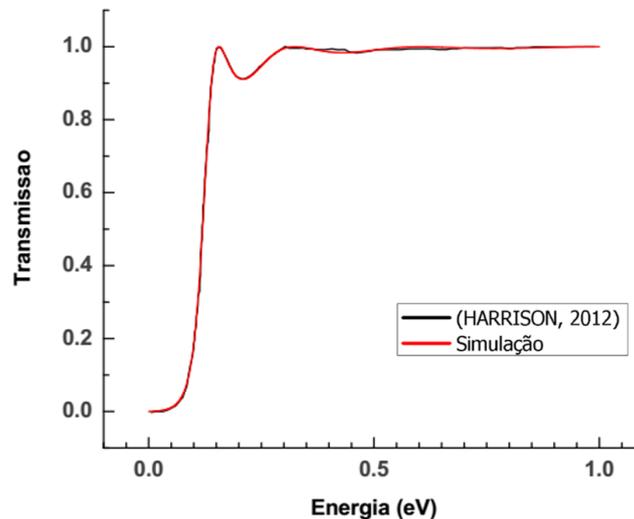


Figura 3 – Contraste do coeficiente de transmissão simulado com resultado encontrado na literatura (HARRISON, 2012).

Após o contraste para um sistema de barreira única, dois testes foram realizados para sistemas de barreira dupla. O primeiro, da Figura 4, apresenta o coeficiente de transmissão para sistemas sem polarização externa.

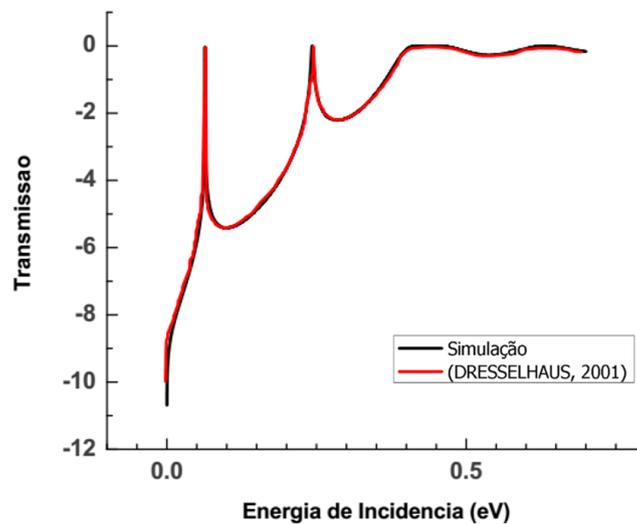


Figura 4 – Validação para um sistema de barreira dupla a partir da curva de Dresselhaus (2001). O sistema é composto por barreiras idênticas com largura de 5 nm e altura de 300 meV separadas por um poço de 6 nm de comprimento. A curva está em escala semilog na base decimal.

De acordo com os resultados da Figura 4, notam-se determinados picos para algumas energias. Tais picos se devem ao efeito de ressonância da função de onda do elétron dentro do sistema. Isto ocorre por causa da formação de níveis de energia de ressonância no sistema. Em tais níveis, o elétron, a grosso modo, não enxerga as barreiras e é integralmente transmitido. Porém, como evidencia a Figura 4, pequenas variações da energia de incidência afetam profundamente a quantidade de elétrons transmitidos.

Já o segundo sistema de dupla barreira avaliado consistiu no cálculo do coeficiente de transmissão levando-se em conta a aplicação de uma polarização externa, a qual é distribuída ao longo de todo o material. Os resultados obtidos dessas simulações estão mostrados na Figura 5.

De acordo com os resultados apresentado na Figura 5, discrepâncias entre as curvas começam a se tornar mais evidentes, porém o simulador construído ainda se mostra válido para as análises.

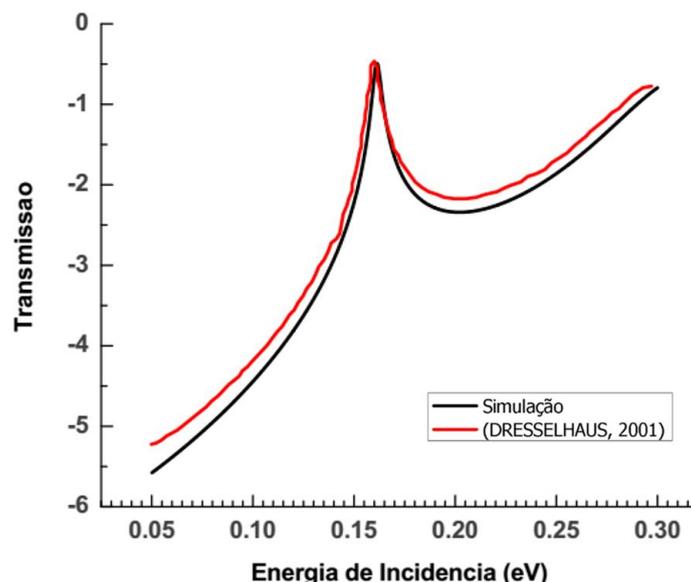


Figura 5 – Validação para o mesmo sistema da Figura 2 sob tensão elétrica a partir da curva de Dresselhaus (2001). O campo elétrico aplicado é de 10^7 V/m. A curva está em escala semilog na base decimal.

Finalmente, o último estudo consistiu em calcular a densidade de corrente de transmissão entre dreno e fonte a partir da formulação da Equação (1).

As primeiras tentativas de contraste foram feitas utilizando-se as curvas de Tsu e Esaki (1973) como referência. Tais tentativas se mostraram dispendiosas e optou-se, então, a contrastar o mesmo sistema a partir do trabalho de Forrest e Meijer (1990). Esses resultados estão expostos na Figura 6.

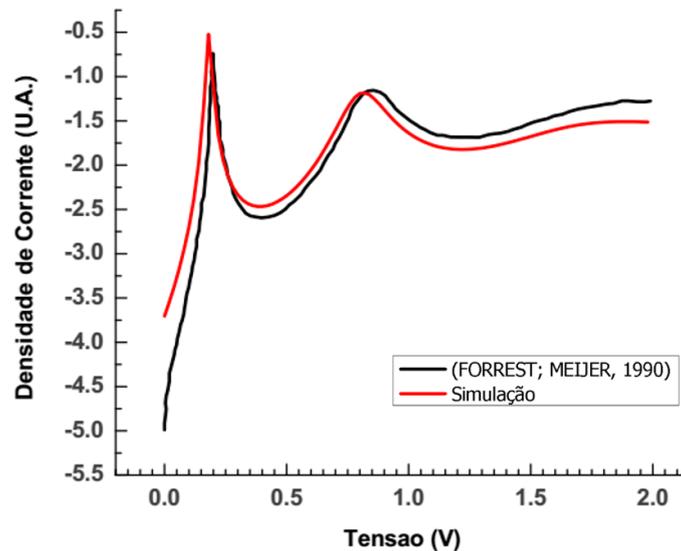


Figura 6 - Característica I-V de um sistema de barreiras idênticas com largura de 2 nm e altura de 500 meV separadas por um poço de 5 nm de comprimento. Resultado foi contrastado com o trabalho de Forrest e Meijer (1990).

De acordo com os resultados da Figura 6, as limitações da simulação começam a ficar mais aparentes. A curva obtida não casa perfeitamente com a referência. Entretanto, é válido lembrar que modelos foram buscados e refinados gradativamente ao longo do projeto. Por exemplo, a discrepância para as tensões mais altas pode ser explicada se a referência utilizou um modelo de não-parabolicidade de bandas, na qual a massa efetiva do elétron varia para energias de incidência grandes. Além disso, as regiões de resistência diferencial negativa foram identificadas com sucesso. Nessas, a característica é a diminuição da densidade de corrente com o aumento da tensão devido ao tunelamento ressonante no sistema. Portanto, considera-se que o objetivo de obter um simulador de curvas elétricas para sistemas de barreira dupla foi cumprido com sucesso.

CONCLUSÕES:

A partir dos resultados apresentados, a compreensão do comportamento quântico de tunelamento foi aprofundada. Ficam mais claras as relações entre as autoenergias que governam o comportamento de onda na matéria. O mecanismo de resistência diferencial negativa também se mostra comprovado, mesmo que por modelos simples comparados ao encontrado na literatura. Tal mecanismo é responsável pela alta resposta em frequência de dispositivos de tunelamento ressonante. As simulações podem ser posteriormente refinadas, utilizando-se um método de passo variável, no qual o esforço computacional pode ser concentrado nas interfaces do sistema, e pela implementação da equação de densidade de corrente para temperaturas acima do zero absoluto. O projeto ainda está em andamento e seguirá pela coleta de

diferentes configurações encontradas na literatura e as respectivas simulações para diodos em regime de corrente alternada.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS:

DRESSELHAUS, M. S.. **Solid state physics part 1: Transport Properties of Solids**. [S.L.: s.n.], 2001. 228 p.

FORREST, Katherine; MEIJER, Paul H. E.. Tunneling Calculations for GaAs-AlxGa(1-x)As Graded Band-gap Sawtooth Superlattices. **IEEE Journal of Quantum Electronics**, [S.L.], v. 26, n. 6, p. 1067-1074, jun. 1990.

HARRISON, Paul. **Quantum wells, wires and dots: Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructures**. 2 ed. Inglaterra: Wiley, 2005. 482 p.

LEVI, Anthony. **Applied quantum mechanics: For Engineers and Physicists**. 1 Ed. New York: Cambridge University Press, 2003. 523 p.

SUGIYAMA, Hiroki; SUZUKI, Safumi; ASADA, Masahiro. Room-temperature Resonant-tunneling-diode Terahertz Oscillator Based on Precisely Controlled Semiconductor Epitaxial Growth Technology. **NTT Technical Review**, Japão, v. 9, n. 10, p. 1-7, out. 2011.

TSU, R.; ESAKI, L.. Tunneling in a finite supelattice. **Appl. Phys. Lett**, New York, v. 22, n. 11, p. 562-564, jun. 2018.

WENSORRA, J. et al. Gate-controlled quantum collimation in nanocolumn resonant tunneling transistors. **Nanotechnology**, Alemanha, v. 20, p. 1-6, out. 2009.

Participação em Congressos, publicações e/ou pedidos de proteção intelectual:

O desenvolvimento do presente trabalho culminou nos seguintes indicadores:

- **Capacitação de discente:**

Por meio deste trabalho, o discente Matheus Faria, obteve uma vaga para capacitação na Oficina USP de Fabricação de Circuitos Integrados Tecnologia SOI nMOSFET 2018. A oficina foi ministrada pelo Laboratório de Sistemas Integráveis (LSI) em conjunto com o Laboratório de Microeletrônica (LME) no Departamento de Engenharia de Sistemas Eletrônicos da Escola Politécnica da USP, na cidade de São Paulo/SP em meados de julho de 2018.