

**UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
FACULDADE DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA ELÉTRICA**

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO
DE
PONTOS QUÂNTICOS ACOPLADOS**

MARCUS VINICIUS BATISTUTA

ORIENTADOR: JOSÉ CAMARGO DA COSTA

TESE DE DOUTORADO

PUBLICAÇÃO: PPGENE.TD – 17A/07

BRASÍLIA/DF: MARÇO – 2007

**UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
FACULDADE DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA ELÉTRICA**

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO
DE
PONTOS QUÂNTICOS ACOPLADOS**

MARCUS VINICIUS BATISTUTA

TESE SUBMETIDA AO DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA ELÉTRICA DA FACULDADE DE TECNOLOGIA DA UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR.

APROVADA POR:

**Prof. José Camargo da Costa, Docteur (ENE-UnB)
(Orientador)**

**Prof. Jacobus Willibrordus Swart, Doutor (UNICAMP/SP)
(Examinador Externo)**

**Prof. Paulo César Miranda Machado, PhD (EEEC-UFG)
(Examinador Externo)**

**Prof. Paulo César de Moraes, PhD (FIS-UnB)
(Examinador Interno)**

**Prof. Alexandre Ricardo Soares Romariz, PhD (ENE-UnB)
(Examinador Interno)**

BRASÍLIA/DF, 26 DE MARÇO DE 2007

FICHA CATALOGRÁFICA

BATISTUTA, MARCUS VINICIUS

Modelagem e Simulação de Pontos Quânticos Acoplados [Distrito Federal] 2007.

xiv, 102p., 210 x 297 mm, ENE/FT/UnB, Doutor, Tese de Doutorado – Universidade de Brasília. Faculdade de Tecnologia.

Departamento de Engenharia Elétrica.

1.Pontos Quânticos

2.Nanoeletrônica

3.Dissipação Ohmica

4.Simulação Numérica

I. ENE/FT/UnB

II. Título (série)

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

BATISTUTA, M. V. (2007). Modelagem e Simulação de Pontos Quânticos Acoplados. Tese de Doutorado em Engenharia Elétrica, Publicação PPGENE.TD-17A/07, Departamento de Engenharia Elétrica, Universidade de Brasília, Brasília, DF, 102p.

CESSÃO DE DIREITOS

AUTOR: Marcus Vinicius Batistuta

TÍTULO: Modelagem e Simulação de Pontos Quânticos Acoplados

GRAU: Doutor

ANO: 2007

É concedida à Universidade de Brasília permissão para reproduzir cópias desta tese de doutorado e para emprestar ou vender tais cópias somente para propósitos acadêmicos e científicos. O autor reserva outros direitos de publicação e nenhuma parte dessa tese de doutorado pode ser reproduzida sem autorização por escrito do autor.

Marcus Vinicius Batistuta
SQS-302-D, Apt.605
70.338-040 Brasília – DF – Brasil.

DEDICATÓRIA

À minha família.

AGRADECIMENTOS

Ao meu orientador, pela sua infinita paciência.

Aos amigos que encontrei no caminho.

RESUMO

Esta Tese de Doutorado fundamenta-se na construção de um modelo comportamental para dispositivos mono-elétron, e de sua implementação na forma de um algoritmo numérico, para a simulação da evolução no tempo da dinâmica de transporte de portadores, considerados individualmente. Está focada principalmente no que se refere ao comportamento da dinâmica dos processos de tunelamento dissipativos em células de pontos quânticos acoplados.

O modelo apresentado aqui sustenta-se em princípios físicos fundamentais, como a conservação de carga e de energia. O decaimento a partir de estados metaestáveis, e a partir de situações de desequilíbrio (superposição de estados) é uma consequência natural dos processos dissipativos incluídos no modelo.

Neste trabalho é demonstrada a bi-estabilidade em células que possuem apenas dois pontos quânticos e um único elétron em excesso, e é avaliada quantitativamente e qualitativamente a evolução da dinâmica de estados em células de pontos quânticos acoplados de diferentes configurações.

Questões práticas para a viabilização desta tecnologia são tratadas, como a escolha dos materiais apropriados para a fabricação dessas estruturas. Também é analisado o efeito da temperatura sobre a estabilidade e a dinâmica de operação de células acopladas.

ABSTRACT

This doctoral thesis is aimed in developing a behavior model for single-electron devices, and its implementation in the form of a numeric algorithm, for single carrier's transport dynamics time evolution simulation. It is mainly focused in dissipative dynamics behavior of tunneling processes occurring in coupled quantum dot cells.

The model presented here relies on fundamental physical principles, such as charge and energy conservation. Decay from meta-stable states, and from disequilibria (superposition of states), is a natural outcome of the dissipative processes included in the model.

In this work, bi-stability in cells with only two quantum dots and a single excess electron is demonstrated, and the states' dynamic time-evolution is evaluated in coupled quantum dot cells of different configurations.

Practical issues that could make this technology viable are dealt with, such as the choice of appropriate materials to fabricate these structures. Temperature effects on coupled cells' dynamical stability are also analyzed.

SUMÁRIO:

| | |
|--|-----------|
| 1 – INTRODUÇÃO | 1 |
| 2 – FUNDAMENTOS DA NANOELETRÔNICA | 3 |
| 2.1 – LEI DE MOORE | 3 |
| 2.2 – O TRANSISTOR CMOS | 4 |
| 2.3 – O TRANSISTOR NANO-CMOS | 5 |
| 2.4 – NANO-ELETRÔNICA MONO-ELÉTRON | 5 |
| 2.4.1 - Transistores Mono-elétron (SETs) | 6 |
| 2.4.2 - Pontos Quânticos Acoplados | 9 |
| 2.4.3 - Interface Externa | 12 |
| 2.5 – NANOFABRICAÇÃO | 12 |
| 2.5.1 - Automontagem (<i>Self-assembly</i>) | 13 |
| 2.5.2 - Nanolitografia por STM/AFM | 13 |
| 3 – MODELO PROPOSTO | 14 |
| 3.1 - EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER DEPENDENTE DO TEMPO | 14 |
| 3.2 - PROCESSOS DISSIPATIVOS | 15 |
| 3.2.1 – Processo Dissipativo Ôhmico | 15 |
| 3.2.2 – Processo Dissipativo Radiativo | 16 |
| 3.3– MODELAGEM DE DISPOSITIVOS | 18 |
| 3.3.1 – Modelo <i>Ab Initio</i> | 19 |
| 3.3.2 – Modelo de Capacitâncias | 21 |
| 3.3.3 – Ruído Térmico | 26 |
| 3.3.4 – Dissipação de Calor | 27 |
| 4 – SIMULAÇÃO DE DISPOSITIVOS | 30 |
| 4.1 - SIMULAÇÃO NUMÉRICA 1D | 30 |
| 4.1.1 - Poço com Potenciais Infinitos | 31 |
| 4.1.2 - Célula Mono-elétron com Dois Pontos Quânticos Acoplados | 33 |
| 4.1.3 – Duas Células Acopladas Lateralmente (Temperatura 0K) | 41 |
| 4.1.4 – Duas Células Acopladas Lateralmente com Efeito de Temperatura | 46 |
| 4.2 – SIMULAÇÃO NUMÉRICA 2D | 49 |
| 5 – DISCUSSÃO DE RESULTADOS | 53 |

| | |
|--|-----------|
| 5.1 – CONSERVAÇÃO DE CARGA E ENERGIA | 53 |
| 5.2 – ESTABILIDADE DO ALGORITMO NUMÉRICO | 54 |
| 5.3 – OTIMIZAÇÃO COM ALGORITMOS GENÉTICOS | 54 |
| 5.3.1 – Tempo de Acomodação | 56 |
| 5.3.2 – Limiar de Temperatura (Ruído Térmico) | 57 |
| 6 – CONCLUSÃO | 59 |
| REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS | 61 |
| APÊNDICES | 67 |
| A PROGRAMAS DE SIMULAÇÃO | 68 |
| B PUBLICAÇÃO - JOURNAL OF APPLIED PHYSICS | 97 |

LISTA DE TABELAS

Tabela.1 – Matriz de Capacitâncias C_{ij} (zeptofarad ou 10^{-21}F) – FASTCAP

Tabela.2 – Matriz Inversa P_{ij} (10^{18} / Farad) – MATLAB

Tabela.3 – Potenciais V_i (Volts) – MATLAB

Tabela.4 – Potenciais V_i (Volts) – MATLAB

LISTA DE FIGURAS

- Fig.1 - Configuração Básica de um SET.
- Fig.2 - Estados em células com quatro e dois pontos quânticos.
- Fig.3a - Propagação de estados entre células.
- Fig.3b - Propagação de estados entre células.
- Fig.4 - Implementação de uma porta XOR.
- Fig.5 - Célula sob ação de Potencial Externo
- Fig.6 - Efeito da Autocapacitância
- Fig.7 - Capacitâncias de Acoplamento
- Fig.8 - Esferas de Elementos Finitos – FASTCAP
- Fig.9 - Desvio Padrão (Ruído Térmico) vs. Temperatura
- Fig.10 - Dissipação de Potência
- Fig.11 - Poço de Potenciais Infinitos
- Fig.12 - Evolução da Corrente ($I [A] \times t [s]$)
- Fig.13 - Evolução da Função Densidade de Probabilidade
- Fig.14 - Transição de Corrente ($I [A] \times t [s]$)
- Fig.15 - Etapa-1: Estado inicial quase-estacionário.
- Fig.16 - Etapa-2: Início da aplicação lenta e progressiva da rampa.
- Fig.17 - Etapa-3: Momento da transição através da barreira.
- Fig.18 - Etapa-4: Transição praticamente completada
- Fig.19 - Etapa-5: Remoção lenta e progressiva da Rampa
- Fig.20 - Etapa-6: Estado final quase estacionário
- Fig.21 - Duas Células sem Pontos Quânticos (Estado Final Estacionário)
- Fig.22 - Duas Células Acopladas (Estado Inicial)
- Fig.23 - Duas Células Acopladas (Aplicação de Rampa)
- Fig.24 - Duas Células Acopladas (Transição Completa)
- Fig.25 - Duas Células Acopladas (Estado Final)
- Fig.26 - Corrente de Tunelamento
- Fig.27 - Evolução da Carga
- Fig.28 - Evolução da Carga a 70K (Lado Esquerdo)
- Fig.29 - Evolução da Carga a 70K (Lado Direito)
- Fig.30 - Evolução da Carga a 300K (Lado Esquerdo)

Fig.31 - Evolução da Carga a 300K (Lado Direito)

Fig.32 - Espaço de Diferenças Finitas 2D (40 x 20)

Fig.33 - Evolução Automática de Dispositivos Físicos

Fig.34 - Célula Otimizada

LISTA DE SÍMBOLOS

A – área

C – capacitância

C_{eff} – capacitância efetiva

e – carga fundamental do elétron ($1,602 \times 10^{-19}$ coulombs)

E – energia

\vec{E}_ρ – vetor campo elétrico associado à densidade de carga

E_Ω – campo elétrico de desaceleração (processo de dissipação ohmico)

f – frequência

\vec{F} – vetor força

h – constante de Planck ($6,626 \times 10^{-34}$ J.s)

\hbar – constante de Planck barrada ($1,055 \times 10^{-34}$ J.s)

\vec{H}_ρ – vetor campo magnético associado à densidade de carga

i – número imaginário $\sqrt{-1}$, ou índice inteiro

I – corrente

I_0 – amplitude de corrente do dipolo (regime senoidal)

j – número imaginário $\sqrt{-1}$, ou índice inteiro

J – densidade de corrente

K_B – constante de Boltzmann ($1,38 \times 10^{-23}$ J/K)

L – comprimento

m – massa

n – densidade de probabilidade

q – carga elétrica

Q – carga elétrica total

\vec{r} – vetor posição

R_t – resistência de tunelamento

R_r – resistência de radiativa do dipolo

R_Ω – resistência ohmica da célula

S – fator de amortecimento

t – tempo

T – temperatura

\vec{v} – vetor velocidade
V – potencial
W – potência de radiação
x – coordenada de posição
X – componente real da função de onda
Y – componente imaginária da função de onda
 α – constante auxiliar
 β – constante auxiliar
 ΔE – incerteza ou variação de energia
 Δt – incerteza ou passo de tempo
 Δx – passo em x
 Δs – passo no espaço de coordenadas
 λ – comprimento de onda
 Φ – potencial
 Ψ – função de onda
 ρ – densidade de carga
 ρ_{Ω} – resistividade
 η – impedância do meio
 σ_v – desvio padrão do sinal de ruído térmico
 π – constante pi (3.1415...)

1 – INTRODUÇÃO

O desenvolvimento de uma tecnologia viável de circuitos integrados nano-eletrônicos, com algo em torno de um trilhão de dispositivos em uma área de poucos centímetros quadrados, oferece grandes desafios. Principalmente nos fatores que limitam o número de conexões físicas possíveis entre dispositivos e a dissipação de potência por unidade de área [1].

É grande o potencial de aplicações de circuitos integrados nano-eletrônicos, em termos de capacidade computacional e de armazenamento de informação. Mas entende-se que os níveis de integração requeridos não poderão ser atingidos com a atual tecnologia de dispositivos, hoje representada principalmente pelos transistores CMOS [2].

As dimensões de dispositivos requeridos para a viabilização desta tecnologia, em níveis de integração ainda sem precedentes, terão que ser necessariamente da ordem de poucos nanômetros. Com a redução das escalas, a dinâmica de transporte de um número cada vez mais reduzido de portadores é regida pela mecânica quântica. Nano-estruturas funcionais, com vocação para a implementação de sistemas computacionais, têm sido buscadas [3]. Modelos comportamentais robustos e confiáveis precisam ser desenvolvidos para o entendimento e o aperfeiçoamento destes novos dispositivos nano-eletrônicos.

Neste trabalho decidiu-se optar por uma linha de estudos destinada ao desenvolvimento de um modelo eficaz para o comportamento dinâmico de portadores individuais (elétrons) em dispositivos mono-elétron, como o são os pontos quânticos acoplados, e aplicável eventualmente também a outros dispositivos deste tipo (ex: SETs).

Também foi feita a opção pelo caminho do desenvolvimento de técnicas de simulação numéricas, já que os modelos baseados na mecânica quântica são complexos, de difícil solução analítica, e pouco intuitivos no que se refere à forma de representação da realidade física da dinâmica do transporte de portadores. Isto com o objetivo de tornar possível uma avaliação robusta e confiável do comportamento de diferentes dispositivos.

O modelo proposto neste trabalho foi desenvolvido de forma a obedecer estritamente a princípios físicos fundamentais como a conservação de carga e energia, e inclui um

processo dissipativo ohmico de energia que possibilita apreciar a evolução da dinâmica de transporte na transição de estados em dispositivos nano-eletrônicos mono-elétron [4].

Em síntese, o Capítulo-2 apresenta inicialmente uma visão geral da evolução da tecnologia e introduz os dispositivos mono-elétron. O Capítulo-3 propõe um modelo baseado na equação de Schrödinger, com acoplamento capacitivo e inclui neste modelo os processos dissipativos e o efeito da temperatura. O Capítulo-4 apresenta o algoritmo numérico unidimensional e os resultados de simulações de diferentes configurações de células com dois pontos quânticos acoplados. Também apresenta o algoritmo 2D, e tece considerações sobre a otimização usando algoritmos genéticos. O Capítulo-5 discute alguns dos resultados obtidos com as simulações. Entre estes resultados podemos destacar a conservação de carga e energia, e a otimização de células com o objetivo de reduzir o tempo de acomodação e aumentar a estabilidade em temperaturas finitas de operação.

2 – FUNDAMENTOS DA NANOELETRÔNICA

Este capítulo apresenta inicialmente uma visão geral da evolução tecnológica que tem permitido o aumento nas escalas de integração e a redução das dimensões físicas de dispositivos. Apresenta os dispositivos mono-elétron, no que se refere ao seu funcionamento e modelagem, comparados com a tecnologia atual dos transistores CMOS e NanoCMOS.

Desde o surgimento dos primeiros dispositivos semicondutores, aplicados à microeletrônica, a busca por modelos representativos da dinâmica de transporte de portadores (elétrons e lacunas) tem sido exaustiva. Principalmente com o objetivo de prever em detalhes o comportamento dinâmico de dispositivos, e aplicado ao seu aperfeiçoamento [5].

Com a evolução da tecnologia de fabricação de dispositivos, que agora possuem dimensões nanométricas, uma reformulação dos modelos disponíveis tem sido buscada, principalmente no caso do transistor NanoCMOS [6] [7]. Os efeitos do confinamento de portadores em estruturas tão pequenas não podem ser ignorados. Apenas um entendimento claro através da mecânica quântica, estabelecido na forma de novos modelos consistentes e robustos, pode prover uma análise adequada da operação destes dispositivos, e permitir que sejam consideradas novas configurações.

2.1 – LEI DE MOORE

A conhecida Lei de Moore para circuitos integrados tem apontado o caminho e a direção do desenvolvimento de sistemas computacionais mais rápidos com maior capacidade de processamento [3]. Estes sistemas estão em grande demanda, para a solução de todo tipo de problemas e de desafios tecnológicos, permeando praticamente quase todas as atividades humanas conhecidas. O caminho atual é o da integração em maiores escalas, na direção que aponta para dispositivos cada vez menores e mais rápidos.

A Lei de Moore é resultado de uma análise originalmente realizada em 1965, por Gordon Moore, co-fundador da Intel, onde o número de transistores em circuitos integrados dobraria aproximadamente a cada 24 meses, se o objetivo de minimização dos custos de produção por transistor fosse priorizado [8]. Esta lei é usualmente citada com um período corrigido de 18 meses para a duplicação do número de transistores.

Moore não pretendia estabelecer uma lei para a evolução da densidade máxima de transistores que poderia ser alcançada, com o aperfeiçoamento de processos litográficos. Concluiu que havia um compromisso para a densidade ótima na qual seria obtido o custo mais baixo de produção por transistor. Observou que com uma quantidade maior de transistores integrados, o custo cai proporcionalmente, mas a chance de defeitos de fabricação aumenta consideravelmente com a densidade, reduzindo o rendimento de produção e aumentando o custo unitário [8].

Há um limite físico para a tecnologia de fabricação, mais comum e atualmente mais disseminada, dos transistores CMOS. Transistores NanoCMOS têm sido demonstrados com comprimento de canal de alguns poucos nanômetros. Para comparação podemos considerar as distâncias entre os átomos em uma pastilha de silício mono-cristalino, onde o parâmetro de rede é de 5,4 angstroms ou 0,54 nanômetros. Em um transistor NanoCMOS, com comprimento de canal de 10 nanômetros, podemos contar menos de 20 átomos do cristal de silício enfileirados ao longo do canal. Dimensões desta ordem permanecem um grande desafio para processos nanolitográficos de fabricação [3].

Ainda restam muitas dúvidas se esta nova tecnologia NanoCMOS, ou outras tecnologias de dispositivos nano-eletrônicos, poderá ser fabricada em larga escala, a um custo razoável, ou se estará restrita a poucas aplicações, em situações especiais. Mas a possibilidade de desenvolvimento de sistemas computacionais, com capacidade e velocidade de operação ampliadas, baseados em novas tecnologias, justifica esta busca [9].

2.2 – O TRANSISTOR CMOS

É importante observarmos que a modelagem de transistores de efeito de campo, e especificamente da tecnologia CMOS, utiliza os conceitos fundamentais da mecânica

quântica, mas faz uso principalmente das equações de transporte de portadores (elétrons e lacunas) obtidas pela analogia ao modelo clássico do comportamento de fluídos, ou seja, da hidrodinâmica clássica. É comum encontrarmos livros-texto, principalmente para os cursos de graduação e de pós-graduação em física e engenharia, tratando da fenomenologia de transporte de portadores em cristais semicondutores, iniciando uma análise a partir dos conceitos fundamentais em física do estado sólido, e da mecânica quântica, mas que tratam do comportamento de dispositivos através de modelos baseados na analogia da mecânica dos fluidos, de natureza clássica [9].

2.3 – O TRANSISTOR NANO-CMOS

Com a crescente redução das dimensões do transistor CMOS, e o surgimento da tecnologia NanoCMOS, os efeitos quânticos do confinamento de portadores em espaços da ordem de alguns nanômetros começaram a surgir. Também se observa o surgimento de correntes de tunelamento significativas através de isolantes de porta muito finos. Estes efeitos são levados em conta geralmente, até onde é possível, com a adição de fatores de natureza clássica, sem descartar em qualquer momento o modelo baseado na analogia hidrodinâmica para o comportamento de portadores. É importante observar que o princípio de operação do transistor NanoCMOS é essencialmente o mesmo do transistor CMOS clássico [3] [9].

2.4 – NANO-ELETRÔNICA MONO-ELÉTRON

Por definição a nano-eletrônica mono-elétron trata de dispositivos com dimensões da ordem de nanômetros onde o controle do fluxo de elétrons acontece de forma a tratar cada um de forma individual e não coletivamente, num sentido amplo [10] [11] [12].

A promessa de obtenção de dispositivos mais rápidos, que se acredita ser oferecida por esta tecnologia, pode ser justificada com uma analogia simples. É muito mais fácil que um único veículo solitário trafegue pelas ruas de uma cidade, para chegar ao seu destino rapidamente, do que um grande número de veículos, que podem gerar grandes congestionamentos e enormes atrasos para alcançar os seus destinos finais. Neste caso os

veículos são usados aqui como análogos aos portadores presentes em dispositivos eletrônicos em geral.

Vale lembrar também que quanto menores os dispositivos, menores serão as distâncias a serem percorridas, e menor o tempo decorrido para que estas distâncias sejam vencidas, o que resulta em tempos de transição mais rápidos.

2.4.1 - Transistores Mono-elétron (SETs)

Os SETs foram um dos primeiros nano-dispositivos propostos e viabilizados em laboratório. Estes dispositivos podem controlar o fluxo de corrente, através de processos de tunelamento, entre dois de seus terminais (chamados de fonte e dreno) com uma tensão aplicada ao terceiro terminal (porta), de uma forma análoga ao funcionamento do transistor CMOS clássico, o que justificaria o uso da palavra transistor. As semelhanças cessam aqui. Um SET pode controlar o fluxo de elétrons individualmente. Um de cada vez.

No caso do SET (Single Electron Transistor), o princípio de operação é inequivocamente diferente do transistor CMOS, e a modelagem deste dispositivo precisa ser tratada sem o uso de uma analogia ou referência direta ao modelo hidrodinâmico. Principalmente porque devemos tratar o transporte de elétrons individualmente e não coletivamente.

Uma Teoria Ortodoxa tem guiado o desenvolvimento de modelos comportamentais, principalmente para os SETs [13] [14], e faz algumas aproximações que são apresentadas a seguir.

A quantização das auto-energias do elétron confinado é ignorada. Variações nestes níveis de energia são assumidas irrelevantes em comparação com a energia térmica ($\Delta E \ll k_B T$). No entanto, os efeitos de bloqueio coulombiano só podem ser observados claramente em baixas temperaturas, ou quando as dimensões do dispositivo são muito pequenas, quando a autocapacitância da ilha é muito pequena. Portanto, esta aproximação não é adequada para estruturas com dimensões muito pequenas, limitando a sua aplicação.

O tempo de tunelamento dos elétrons é freqüentemente ignorado. Este tempo também é comumente considerado constante, e calculado a partir dos valores das capacitâncias e das resistências efetivas de tunelamento presentes. Isto numa tentativa de modelagem baseada em parâmetros concentrados. O processo de tunelamento pode ainda ser considerado simplesmente instantâneo. Um modelo de tal natureza não pode avaliar corretamente a dinâmica de tunelamento, e não pode estimar ou prever o desempenho de dispositivos (ex: freqüência máxima de operação, tempos de transição).

Os eventos de tunelamento simultâneos (co-tunelamento) são ignorados. Eventos correlacionados ou acoplados são considerados irrelevantes se a resistência das junções-túnel é muito maior que o quantum de resistência. Esta aproximação limita a concepção e o desenvolvimento de novos dispositivos que possam fazer uso do co-tunelamento.

O princípio de funcionamento do SET baseia-se essencialmente no bloqueio coulombiano, resultante de um efeito de carregamento particularmente acentuado, devido aos pequenos valores de autocapacitância da ilha, que possui dimensões muito pequenas. Este efeito é mais facilmente observado a baixas temperaturas [15] [16]. A Figura-1 apresenta a configuração básica de um SET.

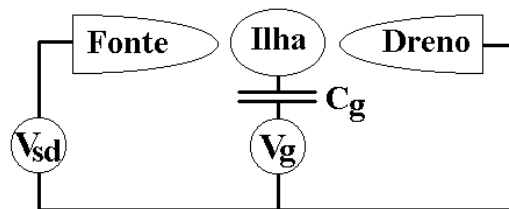


Fig.1 - Configuração Básica de um SET.

Um SET deve ser construído respeitando algumas condições, de forma que o efeito devido à natureza discreta da carga seja observado. A primeira condição fundamental exige que a autocapacitância da ilha deve ser a menor possível, para que a operação possa acontecer em temperaturas mais altas, maximizando o efeito de carregamento com a presença de um único elétron. Esta relação está representada a seguir, na Equação-1.

$$\frac{e^2}{C} \gg k_B T \quad (1)$$

Onde e é a carga fundamental do elétron, C é a autocapacitância da ilha, k_B é a constante de Boltzmann, T a temperatura. O produto $k_B T$ fornece a energia térmica, e a razão e^2/C fornece a energia de carregamento de um único elétron. A primeira deve ser bem menor que a segunda para que sejam observados os efeitos de carregamento, e as oscilações coulombianas na condutância macroscópica observada entre dreno e fonte, em função das tensões aplicadas.

A segunda condição é estabelecida a partir do princípio de incerteza de Heisenberg, para que a incerteza da energia ΔE seja muito menor que a energia de carregamento e^2/C . Assume-se que o tempo de carregamento Δt é igual ao produto $R_t C$, onde R_t é a resistência de tunelamento entre a ilha e a fonte ou o dreno do SET, como apresentado na Equação-2.

$$\Delta E \Delta t = (e^2 / C)(R_t C) \gg h \quad (2)$$

A expressão implica na existência de um limite mínimo para o valor de R_t , que é o quantum de resistência $h/e^2 = 25.8k\Omega$. Onde h é a constante de Planck. Ou seja:

$$R_t \gg h/e^2 \quad (3)$$

Como a resistência de tunelamento R_t não pode ser pequena em relação ao quantum de resistência, a distância física entre as estruturas não pode também ser muito pequena [3] [17].

SETs têm sido propostos no desenvolvimento de tecnologias de redes neurais artificiais, com o objetivo de alcançar grandes escalas de integração com grande tolerância à falhas, e baixa dissipação de potência por unidade de área [18] [19] [20].

2.4.2 - Pontos Quânticos Acoplados

Os Pontos Quânticos Acoplados (*Coupled Quantum Dots* - CQDs) foram propostos como uma possível arquitetura na implementação de funções lógicas [21]. A idéia básica está na construção de células isoladas com um conjunto de pontos quânticos acoplados através de junções-túnel, como mostrado na Figura-2.

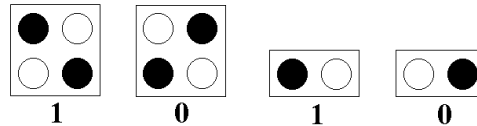


Fig.2 - Estados em células com quatro e dois pontos quânticos.

As células com quatro pontos quânticos acoplados, e dois elétrons em excesso, têm dois estados fundamentais (bi-estabilidade) que podem ser calculados a partir da solução da equação de Schrödinger independente do tempo, com o uso de um hamiltoniano apropriado. A bi-estabilidade explica-se pela força de repulsão entre os dois elétrons, que tendem a ocupar os pontos localizados nos cantos opostos da célula.

No caso da célula com dois pontos quânticos, e um único elétron em excesso, será visto mais adiante, no tratamento do efeito da autocapacitância, proposto neste trabalho, que dá origem a bi-estabilidade.

Para uma modelagem detalhada da dinâmica de tunelamento entre os pontos quânticos, faz-se necessária utilizar a equação de Schrödinger dependente do tempo, com o cálculo da evolução da probabilidade de densidade de carga e da probabilidade de densidade de corrente. A solução analítica não é trivial, o que sugere o caminho da simulação numérica.

A pergunta que deve ser colocada é: Como a energia é dissipada? Para uma determinada situação observada em determinado instante de tempo, onde existe uma superposição de estados, e conseqüentemente uma situação de desequilíbrio, como justificar a convergência para os estados fundamentais disponíveis na configuração?

A redução progressiva da energia cinética do elétron ocorre principalmente devido ao espalhamento das trajetórias dos elétrons nos materiais que compõem a estrutura do

dispositivo. Este processo de espalhamento da função de onda é inelástico para que haja uma dissipação efetiva de energia, com a emissão de fônons ou fótons. Podemos considerar em alguns casos particulares que a energia é dissipada principalmente na forma de calor, e tem natureza ohmica preponderante.

Esta visão deve ser revista em parte, com a rejeição da hipótese do elétron como uma carga pontual, e substituída pela idéia de função de onda, com correspondente densidade de probabilidade de carga e de corrente, que caracterizam de forma completa o estado do elétron nos dispositivos que se deseja estudar.

Os estados das células, resultantes da distribuição de cargas, em situações que permitem a minimização da energia total do sistema, definem os estados de uma lógica binária. Na célula com quatro pontos quânticos há dois elétrons em excesso que tendem a ocupar cantos opostos, para que seja minimizada a sua energia total. Numa visão simples, esta energia resulta das forças eletrostáticas que os repelem. Duas soluções estáveis são possíveis, representando dois estados lógicos.

Da mesma forma que para os SETs, as células de pontos quânticos acoplados devem ser dimensionadas corretamente, para que a bi-estabilidade ocorra, e para que as transições obedeam a uma dinâmica otimizada. A possibilidade de implementar funções lógicas com esta tecnologia requer a propagação de estados entre células, como nas Figura-3a e 3b [22].

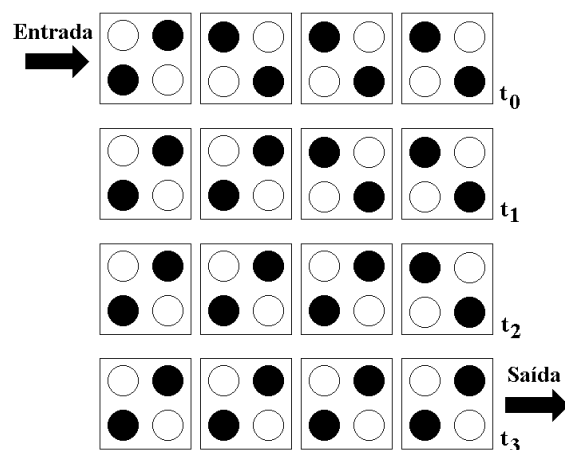


Fig.3a - Propagação de estados entre células.

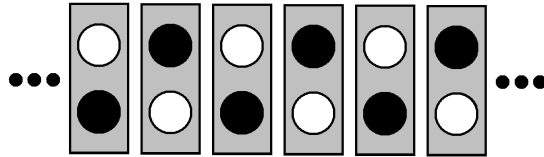


Fig.3b - Propagação de estados entre células.

A propagação dos estados ocorre principalmente pela ação dos campos resultantes da redistribuição de cargas dentro das células. Ou seja, há uma polarização de cada célula, que influencia o estado das suas vizinhas.

A implementação de arquiteturas, baseadas nos princípios mencionados anteriormente, tem sido sugerida por diversos grupos [23] [24] [25] [26] [27] [28] [29]. A viabilidade prática dessas propostas ainda deve ser estabelecida. Uma dessas propostas está representada na Figura-4, para uma porta lógica com função XOR, usando células com pontos quânticos acoplados e dois elétrons em excesso [27].

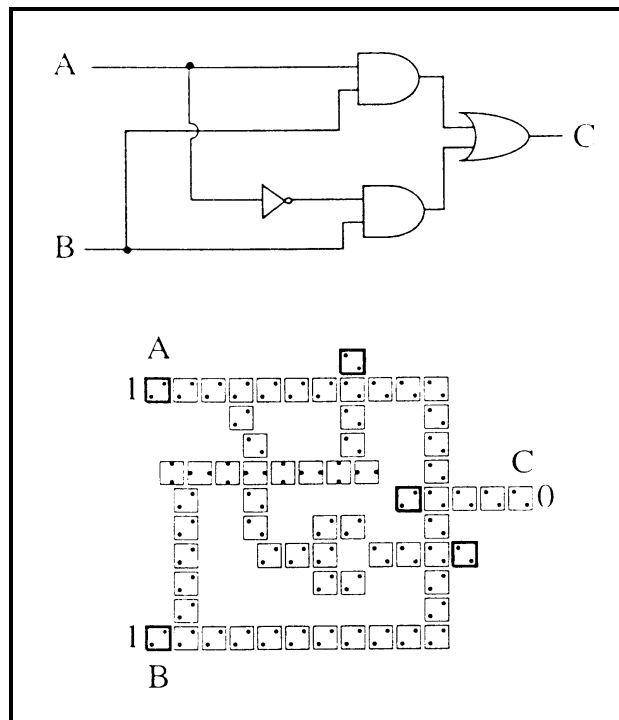


Fig.4 - Implementação de uma porta XOR.

No caso apresentado na Figura-4, um quinto ponto quântico no centro da célula é usado para facilitar o tunelamento dos elétrons, e conseqüentemente facilitar a redistribuição das cargas dentro da célula. Esta tecnologia é denominada de *Quantum Cellular Automata*

(QCA) [25]. Sendo importante observar que não há transferência de cargas (elétrons) entre células. Acredita-se que isto possa reduzir a taxa de dissipação de energia em calor durante a operação, permitindo altas densidades de integração de dispositivos, sem causar elevação significativa da temperatura.

Mas devemos observar que os processos dissipativos de energia, que serão estudados neste trabalho, estão presentes e vão determinar o tempo de duração de transitórios e a dinâmica de estabilização de estados em cada célula, além da forma de propagação de estados em sistemas de células vizinhas.

Pesquisadores já contam, por exemplo, com uma ferramenta CAD para o projeto de sistemas baseados na tecnologia de QCAs, chamada QCA Designer (www.qcadesigner.ca). Mas os modelos comportamentais disponíveis nesta ferramenta ainda são precários, e não consideram o efeito da temperatura.

2.4.3 - Interface Externa

A viabilização da tecnologia de pontos quânticos acoplados, e de SETs, depende da concepção de interfaces elétricas que permitam a entrada e a saída de informações, representadas com níveis de tensão e corrente adequados à realidade dos dispositivos lógicos clássicos, usando tecnologias como a dos circuitos integrados CMOS.

Um candidato natural para esta função é o transistor NanoCMOS [25]. Considerações devem ser feitas sobre a compatibilização das magnitudes das tensões, usadas na representação dos estados lógicos. Também devemos considerar a tecnologia de fabricação, os efeitos de temperatura, e dos níveis de ruído e a compatibilidade eletromagnética do sistema.

2.5 - NANOFABRICAÇÃO

As estruturas funcionais para os diferentes dispositivos propostos, precisam ser fabricáveis [30] e testáveis [31] com as tecnologias atualmente disponíveis, ou com a proposta de

desenvolvimento de novas tecnologias. Há grandes desafios no aperfeiçoamento de técnicas e materiais para sua implementação. Um dos grandes desafios está na fabricação de vários dispositivos, e de suas interligações, a um mesmo tempo, com processos de fabricação em paralelo, como é o caso da fotolitografia. À medida que o tamanho das estruturas diminui, o comprimento de onda usado no processo fotolitográfico deve também diminuir na mesma proporção, para que o processo de gravação de padrões seja efetivamente realizado. Há muitas idéias de como isto pode ser realizado, com um rendimento razoável, mas não há uma solução tecnológica definitiva disponível hoje.

2.5.1 - Automontagem (*Self-assembly*)

Esta técnica oferece vantagens análogas àquelas encontradas na fotolitografia, pela capacidade de fabricação simultânea de uma grande quantidade de estruturas funcionais. O princípio da automontagem é similar ao processo natural de formação de cristais por átomos. As redes, ordenadas e regulares, dos cristais ocorrem por um processo de minimização da energia total do sistema, resultando numa grande densidade de empacotamento dos átomos. Com esta técnica foi possível fabricar redes regulares de pontos quânticos de ouro (*nanoclusters*), interligados por moléculas orgânicas. Esta rede de pontos quânticos acoplados possui propriedades de transporte interessantes e aplicáveis ao desenvolvimento de novos tipos de dispositivos e arquiteturas [32] [33] [34] [35].

2.5.2 - Nanolitografia por STM/AFM

Fabricar dispositivos por escrita direta sobre substratos previamente preparados é uma possibilidade oferecida pelos STMs (*Scanning Tunneling Microscopes*) e os AFMs (*Atomic Force Microscopes*) condutivos [36] [37]. Esta técnica ainda não possibilita a fabricação de um número grande de nano-estruturas funcionais simultaneamente. Mas já há idéias para a paralelização do processo de fabricação [38], o que aumentaria muito o número de dispositivos fabricados ao mesmo tempo. Hoje esta técnica oferece a oportunidade para a prototipagem rápida de dispositivos em laboratório.

3 – MODELO PROPOSTO

Neste trabalho é proposto um modelo comportamental para a dinâmica de transporte de portadores (elétrons) considerados individualmente em cada nano-estrutura, baseado na equação de Schrödinger dependente do tempo [39] [40]. Este modelo também simplifica o cálculo dos potenciais resultantes da interação de cargas introduzindo o uso de uma matriz de acoplamento capacitivo, em uma mesma célula de pontos quânticos acoplados, ou entre células acopladas. Esta abordagem, usando uma matriz de acoplamentos capacitivos, também simplifica a modelagem do efeito de ruído térmico [41] e permite a avaliação da estabilidade de operação em temperaturas finitas.

3.1 - EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER DEPENDENTE DO TEMPO

A equação de Schrödinger dependente do tempo, para um único elétron, é apresentada a seguir. A função de onda (*wavefunction*) ψ é complexa, e sua evolução no tempo e no espaço é calculada a partir da definição do potencial de confinamento V independente do tempo, representando uma distribuição fixa de átomos na estrutura física do dispositivo.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + eV(\vec{r}, t) \right] \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (4)$$

Para que a evolução no tempo do processo, representada por esta equação, seja representativa de uma determinada realidade física, uma função de onda ψ autoconsistente (Obs: Definindo um estado inicial estacionário ou não.) deve ser introduzida no tempo $t = 0$.

Mas esta equação, na sua definição original, não pode representar processos dissipativos de energia (Obs: Ou ainda de ganho de energia), permanecendo sempre a mesma superposição de estados definida pela função de onda ψ , inicialmente definida em $t = 0$.

Observa-se que na formulação proposta não está sendo considerada a presença de campos magnéticos significativos.

Vale lembrar que a equação de Schrödinger, é considerada tanto uma equação de onda, quanto uma forma de equação de difusão [42] [43].

3.2 - PROCESSOS DISSIPATIVOS

Para que seja incluído o efeito de processos dissipativos na equação de Schrödinger original, adicionamos um fator S que atua como um termo de atenuação ou amortecimento da energia cinética total do elétron. Este fator, que é por definição variante no espaço e no tempo, e permite que possamos incluir um processo de troca de energia entre o elétron e o meio material circundante, que constitui o dispositivo físico [44] [45].

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + eV(\vec{r}, t) + S(\vec{r}, t) \right] \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (5)$$

Os princípios físicos fundamentais de conservação de carga e energia ainda são respeitados neste caso. O fator S deve ser escolhido de acordo com a realidade física dos dispositivos que desejamos modelar. Neste trabalho será dada ênfase ao processo dissipativo de natureza ohmica, em estruturas mesoscópicas, já que este pode ser considerado preponderante.

3.2.1 - Processo Dissipativo Ohmico

Neste trabalho foi proposto o uso de um fator S de dissipação na equação de Schrödinger. Este fator S adotado aqui está baseado principalmente na idéia originalmente apresentada no modelo de Caldeira-Leggett [44], que é um dos modelos mais citados atualmente para a representação da dinâmica de processos de tunelamento dissipativos. A idéia central está na proposição de uma forma de atrito viscoso observado pelo elétron em seu deslocamento no material sólido. A força de atrito, por definição, é proporcional à velocidade do elétron no meio, e se opõe ao deslocamento do mesmo. Observou-se que na prática este termo de atrito viscoso pode inibir significativamente os eventos de tunelamento em dispositivos.

Este trabalho propõe a existência física de um campo elétrico de desaceleração associado ao processo ohmico dissipativo, no contexto do transporte de elétrons individuais em nanoestruturas. É necessário verificar experimentalmente a realidade e consistência física deste campo elétrico de desaceleração proposto, e como este pode afetar a dinâmica de outros elétrons presentes na vizinhança. Em síntese, deve ser determinado se este campo existe realmente ou se é uma abstração equivalente ao modelo de atrito viscoso de Caldeira-Leggett.

Uma observação deve ser feita. O amortecimento por processo dissipativo viscoso descrito no modelo de Caldeira-Leggett [46] é uma proposta baseada na ressonância de estados de energia do elétron com aqueles presentes no meio sólido. Mas não fornece detalhes sobre uma dinâmica de comportamento detalhada. A inclusão do campo de desaceleração pode permitir uma melhor compreensão deste fenômeno.

Também se faz necessário justificar a preponderância do processo ohmico, sobre os demais processos dissipativos, entre estes o processo radiativo (*radiative dissipation*), nas escalas de tempo em que os dispositivos irão operar [45].

3.2.2 – Processo Dissipativo Radiativo

A física clássica do eletromagnetismo define que o vetor da força de Lorentz F , percebida por uma determinada concentração de cargas ρ , com deslocamento definido pelo vetor v de velocidade local, é resultante da reação aos vetores de campos elétricos E_ρ e magnéticos H_ρ gerados pela mesma distribuição de cargas (*self-field*). Esta força opõe-se ao movimento desta distribuição de cargas, resultando em desaceleração de sua velocidade, com conseqüente redução da sua energia cinética total e na dissipação desta por processo de radiação [47].

$$\vec{F} = \iiint \rho [\vec{E}_\rho + \vec{v} \times \vec{H}_\rho] dx dy dz \quad (6)$$

Nas células de pontos quânticos acoplados propostas neste trabalho, caracterizadas por estruturas com dimensões de alguns nanômetros ($L = 10 \times 10^{-9}$ m) e constituídas de

materiais com resistividade finita ($\rho_{\Omega} \sim 10^{-5} \Omega.m$), os processos de dissipação ôhmicos são dominantes, como será mostrado a seguir. Lembrando que o valor escolhido para a resistividade foi obtido a partir de um processo de otimização da célula, o que resultou em uma dinâmica de comportamento adequada, e um tempo de acomodação o mais curto possível.

Podemos entender estas células com dois pontos quânticos acoplados, apresentadas neste trabalho, como um dipolo hertziano onde há um fluxo de corrente em uma situação de transição de estados, que pode ser calculado a partir da evolução no tempo da função de onda que representa o único elétron em seu interior. Para um dipolo hertziano [48], no regime permanente senoidal, a potência da radiação emitida é função da magnitude da corrente I_0 , da impedância característica do meio η , do comprimento do dipolo L , e do comprimento de onda λ , como mostrado na Equação-7.

$$W = \frac{\eta \pi I_0^2}{3} \left(\frac{L}{\lambda} \right)^2 \quad [\text{watts}] \quad (7)$$

Nestes mesmos termos, podemos definir para o dipolo hertziano uma impedância característica, com um componente resistivo, denominado resistência de radiação R_r . Esta componente é calculada pela Equação-8, considerando que a permeabilidade e permissividade do meio são aproximadamente unitárias [48].

$$R_r = 80\pi^2 \left(\frac{L}{\lambda} \right)^2 \quad [\Omega] \quad (8)$$

Nas simulações realizadas neste trabalho, a energia do elétron em cada célula não ultrapassou a ordem de 0,1 eV ($1,602 \times 10^{-20}$ joule). Considerando a relação de Planck $\Delta E = h.f = h.c/\lambda$, podemos definir aproximadamente um limite superior para o valor da resistência de radiação, já que $\Delta E = E_i - E_0 < 0,1$ eV.

$$R_r < 80\pi^2 \left(\frac{L \Delta E}{hc} \right)^2 \quad [\Omega] \quad (9)$$

Substituindo os valores mencionados na Equação-9, obtemos: $R_r < 5 \times 10^{-4} \Omega$.

Podemos agora comparar a resistência de radiação R_r com a resistência ôhmica R_Ω da célula, que pode ser calculada aproximadamente pela expressão:

$$R_\Omega \approx \frac{\rho_\Omega L}{A} [\Omega] \quad (10)$$

Substituindo os valores típicos ($L = 10 \times 10^{-9} \text{ m}$, $A = (L/2)^2$, $\rho_\Omega = 1,25 \times 10^{-5} \Omega \cdot \text{m}$) de uma célula na Equação-10, obtemos: $R_\Omega \approx 5 \times 10^3 \Omega$.

Conclui-se que a resistência de radiação é efetivamente muito menor que a resistência ôhmica da célula proposta, indicando que esta célula não é uma fonte de radiação eficiente nas faixas de energias e nos comprimentos de ondas associados, observados nas simulações. Aqui os comprimentos de onda foram sempre maiores que 10 micrômetros, ou seja, três ordens de grandeza maiores que as dimensões das células.

Conseqüentemente, neste trabalho será considerado apenas o processo dissipativo ôhmico, que gera tempos de acomodação muito mais curtos que aqueles que poderiam ser observados como resultado unicamente do processo radiativo.

3.3 – MODELAGEM DE DISPOSITIVOS

Este trabalho apresenta um modelo simples para uma representação mais detalhada da dinâmica de transporte, e principalmente dos processos de tunelamento dissipativos, em células mesoscópicas de pontos quânticos acoplados, respeitando e utilizando princípios físicos fundamentais que incluem a conservação de carga e de energia [49].

3.3.1 – Modelo *Ab Initio*

Para ilustrar esta proposta, faremos inicialmente uso da Figura-5, que mostra uma célula com dois pontos quânticos acoplados através de uma junção-túnel. A célula está sob a ação de um campo elétrico aplicado externamente por uma fonte de tensão controlada. Este campo aplicado pretende substituir provisoriamente a influência da polarização de células vizinhas acopladas. Deve ser notada a preferência de localização do elétron em excesso que existe dentro da célula, na posição mais próxima do terminal positivo, definindo o estado desta célula. A sua presença é representada pela tonalidade escura no ponto quântico do lado esquerdo.

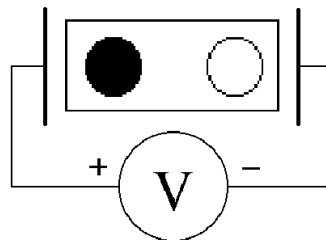


Fig.5 - Célula sob ação de Potencial Externo

Imaginemos que o potencial aplicado externamente é removido, de uma forma gradual, até que a função de onda representativa da dinâmica do elétron decaia em energia por processo dissipativo e defina um estado estacionário, com a maior parte da carga do elétron ocupando ainda, e particularmente neste caso, o ponto quântico à esquerda da célula.

Aqui estamos assumindo a ausência de outros elétrons em excesso, que pudessem estar livres para mover-se entre os pontos quânticos acoplados. Também se assume a ausência de campos magnéticos significativos.

A preferência do elétron em permanecer no ponto quântico à esquerda na célula é explicada pelo efeito de autocapacitância, resultante da redistribuição de cargas na célula, de forma a minimizar a energia total do sistema. Este efeito é tratado em detalhes mais adiante.

Observa-se que a energia do elétron é mínima em um dos estados fundamentais possíveis nesta célula, e que o processo de tunelamento ocorre somente entre o par de pontos

quânticos, em um determinado tempo finito definido principalmente pelo processo dissipativo presente, e pela natureza da barreira.

Neste modelo a junção-túnel não é considerada como uma simples resistência efetiva de tunelamento entre os pontos quânticos. Não são adotadas simplificações, como a invariância de parâmetros no tempo ou quaisquer linearizações, em um sentido macroscópico.

A partir da solução da equação de Schrödinger, incluído o fator de dissipação S , podemos obter a dinâmica da função de onda do elétron na célula.

O elétron não é considerado aqui como uma carga pontual, mas como uma função densidade de probabilidade, com sua carga fundamental distribuída no espaço. A esta função podemos atribuir uma densidade de carga ρ , obtida a partir do valor instantâneo da função de onda (*wavefunction*) ψ , pela Equação-11.

$$\rho = en(\vec{r}, t) = e(\Psi(\vec{r}, t) \cdot \Psi^*(\vec{r}, t)) \quad (11)$$

Da mesma forma, um vetor densidade de corrente \mathbf{J} pode ser também calculado diretamente a partir da função de onda ψ , pela Equação-12.

$$\mathbf{J} = -\frac{iq\hbar}{2m} ((\nabla\Psi)^* \Psi - \Psi^* (\nabla\Psi)) \quad (12)$$

Nesta formulação, a equação de continuidade para as densidades de carga e de corrente é respeitada.

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = -\frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (13)$$

O fator S de dissipação ou amortecimento é obtido como resultado de um processo ohmico preponderante, obtido a partir do cálculo do campo elétrico de desaceleração, na Equação-14, onde ρ_Ω é a resistividade efetiva do material, para o caso unidimensional.

$$E_{\Omega} = \rho_{\Omega} J \quad (14)$$

O fator S de dissipação ou amortecimento é obtido pela Equação-15, também para o caso unidimensional.

$$S(x_0, t) = e \int_0^{x_0} E_{\Omega}(x, t) dx = e \int_0^{x_0} \rho_{\Omega}(x) J(x, t) dx \quad (15)$$

É importante observar que uma solução exata para o campo de desaceleração não é obtida desta forma, já que estamos considerando o efeito macroscópico de espalhamento do elétron pelos átomos no material sólido, na forma de uma constante efetiva de resistividade. A função de onda obtida para o elétron não será exata, mas será um envelope representativo de uma estrutura mais fina, de uma possível solução exata. Uma aproximação mesoscópica conveniente, desde que as dimensões do dispositivo sejam bem maiores que as separações entre os átomos do material sólido.

3.3.2 – Modelo de Capacitâncias

O efeito de acoplamento capacitivo simplificado na forma de uma autocapacitância efetiva, considerada em algumas das simulações realizadas neste trabalho, representa a influência da redistribuição de cargas em torno de cada ponto quântico com conseqüente modificação da profundidade relativa dos poços de energia potencial, que confinam a função de onda do elétron em cada ponto quântico presente na célula, como pode ser observado na Figura-6. Aqui a dimensão da célula esta definida com $L = 10$ nm. Valor que foi usado em várias das simulações realizadas, com a observação de bi-estabilidade em células com apenas dois pontos quânticos, e um único elétron.

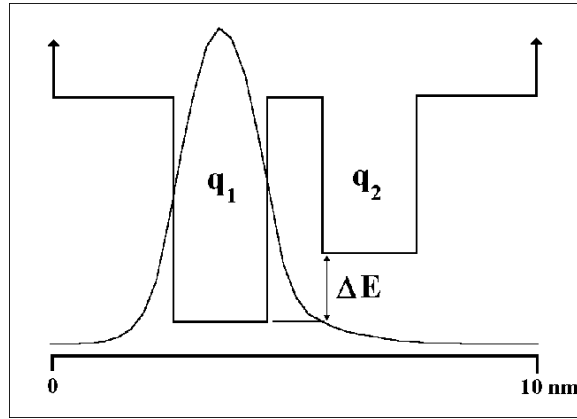


Fig.6 - Efeito da Autocapacitância - Potencial (u.a.) x Posição (m)

Este efeito utiliza aqui um modelo linear simples, descrito pela Equação-16, onde ΔE é a variação relativa do potencial de energia entre os poços. As cargas q_1 e q_2 são as frações da carga fundamental do elétron, que estão localizadas em cada poço ou ponto quântico. C_{eff} é o valor da autocapacitância efetiva, aqui assumida como sendo igual para os dois pontos quânticos, e que modula este efeito.

$$\Delta E = e \frac{(q_1 - q_2)}{C_{\text{eff}}} \quad (16)$$

É importante observar que a soma das cargas q_1 e q_2 não é necessariamente igual à carga fundamental do elétron, já que uma fração desta pode estar localizada em outras regiões da célula, ou até mesmo fora desta [50] [5].

O valor calculado para a capacitância efetiva, presente na Equação-16, pode variar à medida que há interação dos campos elétricos com os materiais que constituem a célula. Tais variações, por exemplo, podem resultar da presença de materiais ferroelétricos, ou ainda da formação regiões de depleção em substratos semicondutores.

Em um quadro mais detalhado devemos considerar a matriz completa de capacitâncias para um determinado sistema de pontos quânticos acoplados. A Equação-17 representa a forma de construção desta matriz, onde V_i é o potencial de cada ponto quântico, C_{i0} é a autocapacitância de cada ponto quântico, e C_{ij} são as capacitâncias de acoplamento. O potencial de referência V_0 é geralmente considerado nulo.

$$C_{i0}(V_i - V_0) + \sum_{j \neq 0} C_{ij}(V_i - V_j) = q_i \quad (17)$$

Por exemplo, para a configuração de duas células, cada uma com dois pontos quânticos e um elétron, como representado na Figura-7. As duas células são acopladas lateralmente. Temos a matriz de capacitâncias representada pela Equação-18, onde as capacitâncias c_{ij} , com $i = j$, são as autocapacitâncias dos pontos quânticos.

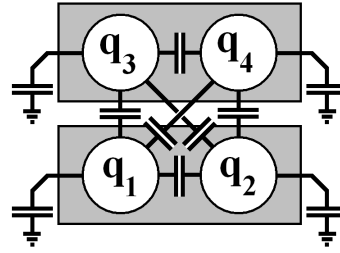


Fig.7 – Capacitâncias de Acoplamento

$$\begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} & c_{24} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} & c_{34} \\ c_{41} & c_{42} & c_{43} & c_{44} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \\ V_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \\ q_4 \end{bmatrix} \quad (18)$$

Durante as simulações, a solução numérica da equação de Schrödinger fornece a distribuição de carga do elétron na célula e em cada ponto quântico. Devemos utilizar a matriz inversa de capacitâncias (p_{ij}) para calcular o valor dos potenciais V_i em cada ponto quântico (Equação-19) em função das cargas. Aqui é assumido que a maior parte da carga concentra-se nos pontos quânticos, o que foi observado na prática durante as simulações.

$$\begin{bmatrix} p_{11} & p_{12} & p_{13} & p_{14} \\ p_{21} & p_{22} & p_{23} & p_{24} \\ p_{31} & p_{32} & p_{33} & p_{34} \\ p_{41} & p_{42} & p_{43} & p_{44} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \\ q_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \\ V_4 \end{bmatrix} \quad (19)$$

Os valores das capacitâncias de acoplamento são extraídos para uma configuração geométrica específica de pontos quânticos com a utilização do aplicativo FASTCAP, (www.fastfieldsolvers.com) que utiliza a técnica de elementos finitos em 3D [51]. Um exemplo é apresentado a seguir, com dois pares de pontos quânticos representando duas células acopladas lateralmente. Os painéis (elementos finitos triangulares em 3D) das

quatro esferas facetadas que representam os pontos quânticos são gerados automaticamente com ferramentas do aplicativo. Aqui as esferas têm raio de 1,0 nm, e são separadas por uma distância de 3,0 nm entre seus centros. A Tabela-1 apresenta o resultado da extração, na forma de uma matriz de capacitâncias, realizado pelo aplicativo FASTCAP.

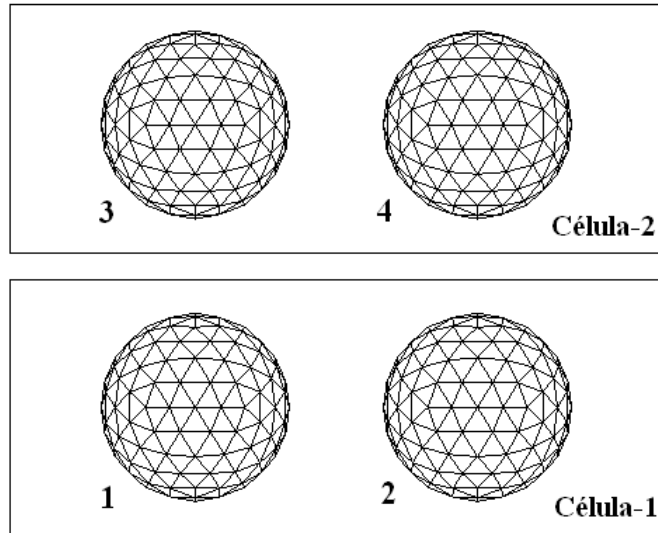


Fig.8 – Esferas de Elementos Finitos – FASTCAP

| | 1 | 2 | 3 | 4 |
|---|--------|--------|--------|--------|
| 1 | 138.2 | -33.95 | -33.94 | -10.98 |
| 2 | -33.95 | 138.2 | -10.98 | -33.94 |
| 3 | -33.94 | -10.98 | 138.2 | -33.95 |
| 4 | -10.98 | -33.94 | -33.95 | 138.2 |

Tabela.1 – Matriz de Capacitâncias C_{ij} (zeptofarad ou 10^{-21}F) – FASTCAP

| | 1 | 2 | 3 | 4 |
|---|--------|--------|--------|--------|
| 1 | 8.6993 | 2.7436 | 2.7436 | 1.9425 |
| 2 | 2.7436 | 8.6993 | 1.9425 | 2.7436 |
| 3 | 2.7436 | 1.9425 | 8.6993 | 2.7436 |
| 4 | 1.9425 | 2.7436 | 2.7436 | 8.6993 |

Tabela.2 – Matriz Inversa P_{ij} (10^{18} /Farad) – MATLAB

Como exemplo, para o caso da carga do elétron presente na Célula-1 estar em determinado instante concentrada no Ponto-1 ($q_1 = -1,602 \times 10^{-19}$, $q_2 = 0$) os potenciais V_i resultantes são mostrados na Tabela-3, calculados com o MATLAB.

| | 1 |
|---|---------|
| 1 | -1.3936 |
| 2 | -0.4395 |
| 3 | -0.4395 |
| 4 | -0.3112 |

Tabela.3 – Potenciais V_i (Volts) – MATLAB

Apenas os potenciais V_3 e V_4 influenciam diretamente o elétron na Célula-2, por este estar confinado apenas a esta célula.

Da mesma forma, para o caso da carga do elétron presente na Célula-2 estar em determinado instante concentrada no Ponto-4 ($q_4 = -1,602 \times 10^{-19}$, $q_3 = 0$) os potenciais V_i resultantes são mostrados na Tabela-4, calculados com o MATLAB.

| | 1 |
|---|---------|
| 1 | -0.3112 |
| 2 | -0.4395 |
| 3 | -0.4395 |
| 4 | -1.3936 |

Tabela.4 – Potenciais V_i (Volts) – MATLAB

Apenas os potenciais V_1 e V_2 influenciam diretamente o elétron na Célula-1, por este estar confinado apenas a esta célula.

3.3.3 – Ruído Térmico

É necessário considerar o efeito da temperatura e do ruído térmico resultante no comportamento e na estabilidade das células de pontos quânticos acopladas estudadas neste trabalho. Esta tarefa é facilitada pela adoção do modelo de capacitâncias de acoplamento.

O efeito de temperatura sobre o comportamento dinâmico da célula pode ser modelado pela inclusão de um potencial aleatório, resultante do ruído de Johnson-Nyquist. Este potencial é incluído como uma componente variante no tempo e aleatória do Hamiltoniano usado no cálculo da evolução da função de onda do elétron presente na célula.

O ruído de Johnson-Nyquist é gerado em dispositivos sólidos pela agitação térmica de portadores de carga, e assume uma densidade espectral de potência aproximadamente constante ou “branca”, em uma banda de frequências de grande amplitude. É geralmente modelado como um potencial aleatório com uma função densidade de probabilidade aproximadamente gaussiana [41].

A partir deste modelo, cada capacitor pode ser considerado uma fonte de sinal que apresenta entre seus terminais um potencial aleatório gaussiano com média zero e com desvio padrão em função da temperatura e do valor da capacitância efetiva, dado pela Equação-20.

$$\sigma_v = \sqrt{\frac{k_b T}{C_{\text{eff}}}} \quad [\text{V}] \quad (20)$$

No caso das células acopladas lateralmente, como mostrado na Figura-7, a flutuação do potencial, observada em cada ponto quântico, é resultado do ruído térmico que surge das capacitâncias de acoplamento. Para esta célula em particular foram extraídos os valores das capacitâncias de acoplamento, como mostrado na Figura-8 e na Tabela-1, usando o aplicativo FASTCAP. A partir do conhecimento destes valores podemos calcular o valor da capacitância efetiva C_{eff} , observada entre cada ponto quântico e o referencial de potencial ou terra. Neste caso $C_{\text{eff}} = 106,0 \times 10^{-21}$ F.

A Figura-9 mostra o gráfico que plota o desvio padrão do potencial aleatório gaussiano do ruído térmico, em função da temperatura absoluta, para esta configuração.

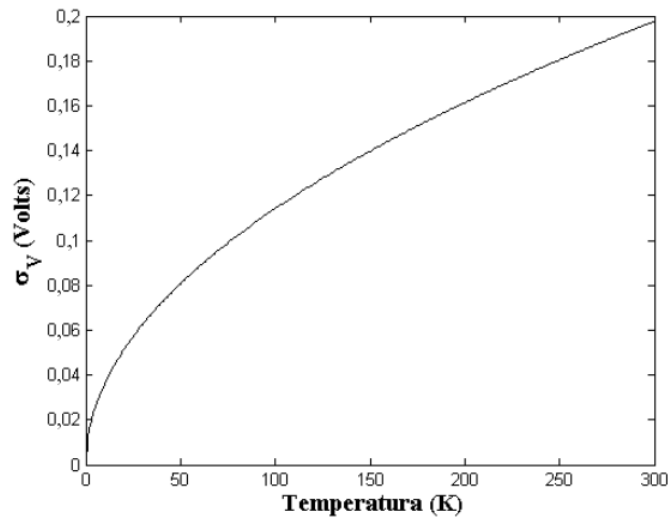


Fig.9 – Desvio Padrão (Ruído Térmico) vs. Temperatura

Para dispositivos com dimensões tão reduzidas, espera-se que exista alguma correlação entre os processos de geração do ruído térmico nas proximidades de cada ponto quântico. Esta correlação entre os sinais de ruído não será incluída neste modelamento, por ser considerada pouco significativa nos casos estudados.

Para uma dada configuração de células de pontos quânticos acoplados existe um valor máximo de temperatura, que limita a sua faixa de operação confiável. Neste trabalho foram feitas algumas simulações, buscando elevar o limiar de temperatura para a estabilidade de células de pontos quânticos acopladas operando em temperaturas finitas. Estes resultados serão apreciados nos Capítulos 5 e 6.

3.3.4 – Dissipação de Calor

A dissipação de calor por unidade de área é um fator limitante da escala de integração de dispositivos eletrônicos convencionais, bem como dos dispositivos propostos neste trabalho.

Há propostas alternativas para a implementação da tecnologia de QCAs (*Quantum-dot Cellular Automata*), e cada uma destas alternativas tecnológicas apresenta diferentes perfis de dissipação de potência em função da frequência de operação [25]. Podemos observar na Figura-10 a região de operação (*QCA Operation Region*), para diferentes implementações da tecnologia de QCAs.

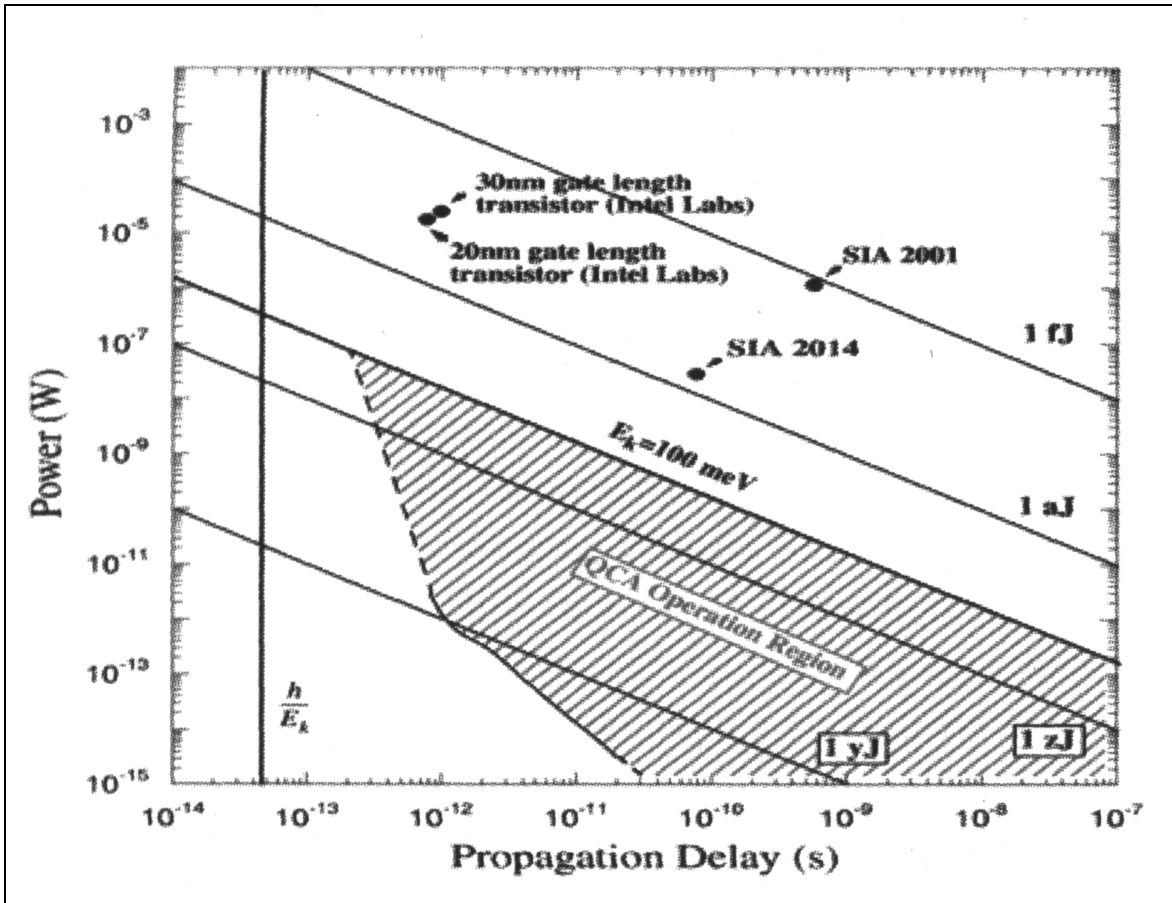


Fig.10 – Dissipação de Potência

No caso das células de pontos quânticos acoplados, constituídos de ilhas metálicas, que são consideradas neste trabalho, observou-se nas simulações tempos de atraso de propagação da ordem de picosegundos, e potência dissipada por célula da ordem de 10^{-10} watts para cada ciclo de transição de estado, em uma frequência de operação em torno de 250 GHz.

Com estes valores podemos estimar a potência dissipada por unidade de área, assumindo que a área efetiva de cada célula é de aproximadamente $1 \times 10^{-16} \text{ m}^2$.

Calcula-se que na operação destas células de pontos quânticos acoplados sejam gerados aproximadamente 10^6 W/m², através de dissipação ôhmica, na situação de 100% de ocupação da área. Em uma área de 1cm² seriam produzidos em torno de 100 W.

Comparando com a tecnologia CMOS de 20 e 30 nm da Intel (Figura-10), podemos observar que esta dissipa potência a uma taxa pelo menos quatro ordens de grandeza superior se comparadas às células de pontos quânticos simuladas neste trabalho, para os mesmos atrasos de tempo.

Dissipar este calor é um problema sério, que limita a área de ocupação reduzindo a escala de integração que pode ser obtida, já que para uma operação confiável as células de pontos quânticos acoplados devem operar em baixas temperaturas.

4 – SIMULAÇÃO DE DISPOSITIVOS

Neste capítulo será apresentado o algoritmo numérico de simulação 1D, com alguns resultados para diferentes configurações de células de pontos quânticos acoplados. Inicialmente o algoritmo é validado com a simulação de um poço de potenciais infinitos. Também serão apresentados resultados de simulações em temperatura finita, na presença de ruído térmico. Algumas considerações serão feitas sobre simulações numéricas 2D. Alguns dos resultados obtidos serão comentados de modo mais extenso nos capítulos seguintes.

Diferentes variedades de nano-estruturas funcionais foram utilizadas neste trabalho no desenvolvimento dos modelos e dos algoritmos numéricos para simulações. Estes algoritmos foram implementados na forma de protótipos com a ferramenta MATLAB, e também transcritos para a linguagem C, na plataforma Borland Builder C++, compilada para computadores pessoais (PCs), com o objetivo de otimização do tempo de processamento. Foram desenvolvidas metodologias e estratégias para que fosse garantida a obtenção de resultados fisicamente consistentes [49].

Com a otimização posterior do código escrito para a ferramenta MATLAB, usando técnicas avançadas da matemática de *arrays* [52], foi possível constatar que o desempenho obtido não era inferior as implementações desenvolvidas em linguagem C. Com vantagem para o MATLAB, que possui uma interface gráfica pronta e facilidade no pós-processamento de resultados.

4.1 - SIMULAÇÃO NUMÉRICA 1D

Para as simulações em uma única dimensão da equação de Schrödinger foi usada uma regra de atualização iterativa discreta (*discrete update-rule*) desenvolvida por Fredkin e Barton em 1975, que é reversível no tempo e garante a conservação de energia, como demonstrado anteriormente por Feynman [53]. As equações usadas são apresentadas a seguir, onde \underline{m} é um número inteiro que representa a posição, em valores discretos, para uma única dimensão.

$$X_m = X_m - \left[\alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (Y_{m+1} - 2Y_m + Y_{m-1}) + \beta \Delta t V_m Y_m \right] \quad (21)$$

$$Y_m = Y_m + \left[\alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (X_{m+1} - 2X_m + X_{m-1}) + \beta \Delta t V_m X_m \right] \quad (22)$$

Onde: $\alpha = \frac{\hbar}{2m}$ e $\beta = \frac{-2}{\hbar}$

Cada uma das componentes, real (X) e imaginária (Y), da função de onda psi, em cada ponto no espaço unidimensional, são calculadas em seqüência. O passo de tempo Δt adotado nas simulações é escolhido de forma a garantir a estabilidade e a convergência do algoritmo para os estados fundamentais disponíveis para o sistema simulado. O potencial V_m é recalculado numericamente a cada passo intermediário do ciclo da simulação, a partir da distribuição de densidade de carga e de corrente, calculadas de acordo com a formulação apresentada anteriormente, que inclui o processo ohmico dissipativo.

4.1.1 - Poço com Potenciais Infinitos

Foi utilizado com o objetivo de validar o modelo e o algoritmo unidimensional, em simulações preliminares, por ser seu comportamento conhecido e bem documentado. Esta configuração é extensamente estudada na maioria dos livros-texto, por sua simplicidade e representatividade da realidade física no domínio quântico.

Na Figura-11 podemos observar o resultado gráfico de uma dessas simulações. Neste caso o poço tem comprimento de 10 nm, e a função de onda do elétron está completamente confinada a este espaço delimitado por paredes de potencial infinito. A função densidade de probabilidade está representada em unidades arbitrárias, em sua evolução no tempo, e calculada como o quadrado do módulo da função de onda psi do elétron obtida a cada passo da simulação.

A condição de contorno inicial foi definida arbitrariamente, sendo resultante da superposição das autofunções para o estado fundamental e para o próximo estado disponível no poço, calculadas em função de suas auto-energias (E_0 e E_1).

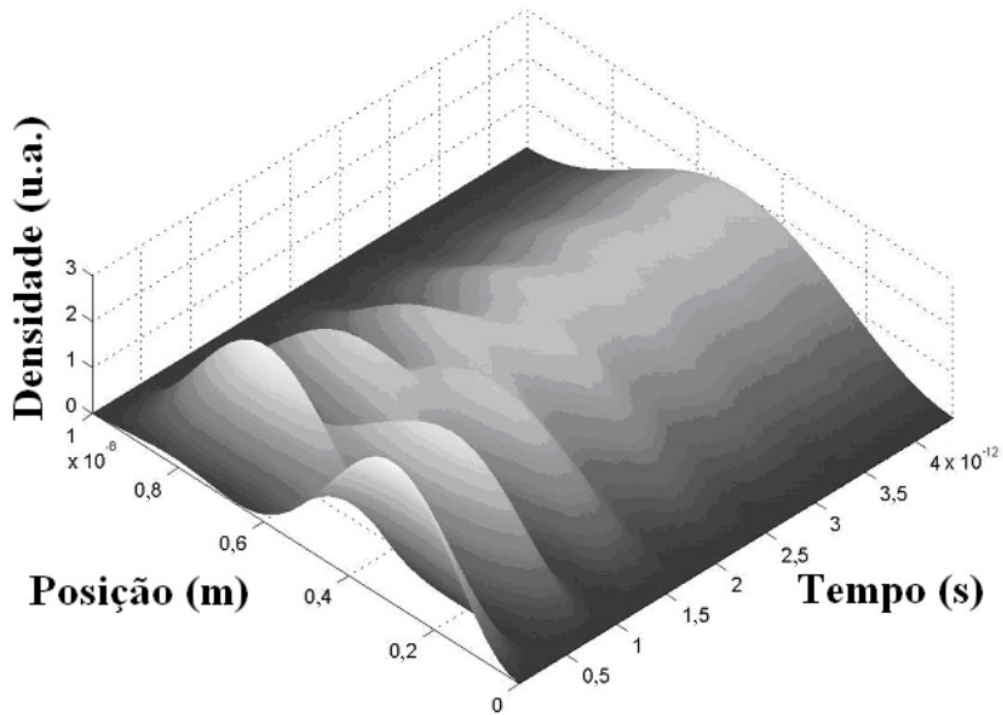


Fig.11 – Poço de Potenciais Infinitos

O resultado mostra a evolução no tempo (0 a 4 picosegundos) da função densidade de probabilidade do elétron, da situação de superposição dos dois primeiros estados, representando claramente um estado não estacionário, até a situação de estado completamente estacionário, quando o elétron atinge o estado fundamental de energia do poço, através de um processo ohmico dissipativo. Observa-se que a frequência da onda obtida na simulação possui exatamente o valor definido pela diferença de energia dos estados em superposição, que pode ser calculada pela relação de Planck, na Equação-23.

$$f = \frac{E_2 - E_1}{h} \quad (23)$$

Para um poço de potenciais infinitos, com dimensão $L = 10\text{nm}$, a energia fundamental $E_1 = 6,0 \times 10^{-22}$ Joules ($\sim 3,7\text{meV}$) e a energia do próximo nível $E_2 = 2,4 \times 10^{-21}$ Joules ($\sim 15\text{meV}$). Neste caso a frequência da transição $f = 2,7 \times 10^{12}$ Hz, para o caso não amortecido.

Podemos apreciar o aparecimento da frequência de oscilação, mesmo no caso amortecido por processo ohmico, como mostrado no gráfico da Figura-12. Neste gráfico é apresentada a evolução no tempo da corrente observada no meio do poço, calculada a partir da função de onda do elétron. Observa-se um decaimento exponencial da magnitude das oscilações, com a frequência prevista pela Equação-23, e definida pelas condições de contorno usadas na simulação. A taxa de decaimento, resultante do processo ohmico, foi definida principalmente pelo valor da resistividade, arbitrariamente escolhida neste caso ($\rho_{\Omega} = 1,25 \times 10^{-5} \Omega.m$).

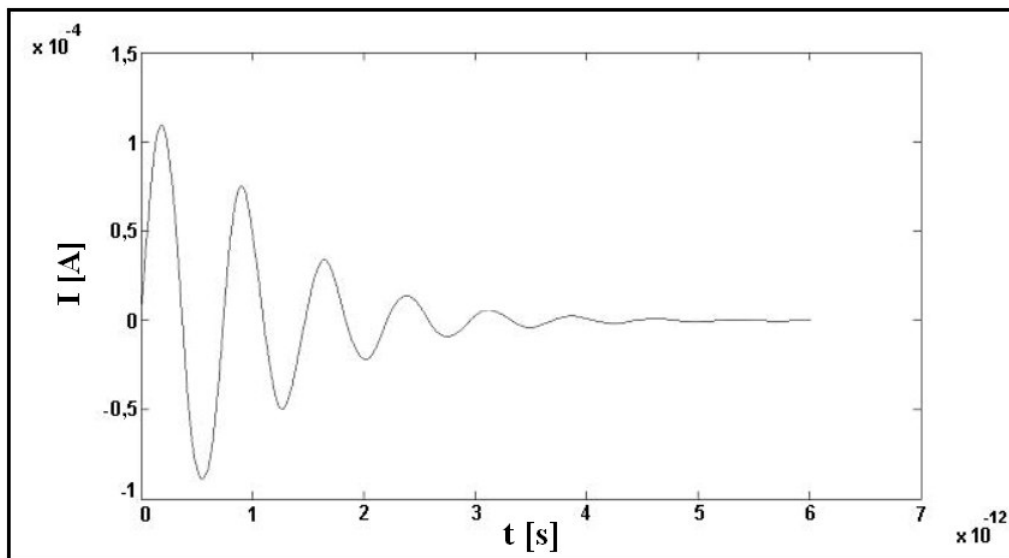


Fig.12 – Evolução da Corrente (I [A] x t [s])

4.1.2 - Célula Mono-elétron com Dois Pontos Quânticos Acoplados

Neste trabalho foi dada ênfase à simulação deste tipo de célula, na tentativa de propor a implementação de sistemas computacionais digitais práticos. É a célula de pontos quânticos acoplados de configuração mais simples, onde a bi-estabilidade tem origem exclusivamente no efeito de autocapacitância, ou como resultado de acoplamento lateral com outras células do mesmo tipo.

Esta simulação foi realizada com o objetivo de avaliar o tempo de transição e a dinâmica do processo de tunelamento entre o par de pontos quânticos, sob a ação de amortecimento ou dissipação de energia de origem ohmica. Também foi incluído o efeito de autocapacitância que determina o surgimento de bi-estabilidade nesta célula.

A simulação foi iniciada com a aplicação de um potencial externo que força o elétron a permanecer no ponto quântico mais à esquerda (mais próximo de $x = 0$), como pode ser observado na Figura-13. Este potencial foi removido progressivamente para que ficasse estabelecido um estado estacionário, com a carga do elétron ocupando quase totalmente o ponto mais à esquerda, devido ao efeito de autocapacitância. Após algum tempo foi aplicado um potencial contrário, para forçar o elétron a tunelar para o ponto quântico mais à direita. Isto gerou um transitório que teve duração de alguns picosegundos, até que a energia do elétron fosse dissipada, fazendo com que a função de onda retornasse a um estado estacionário.

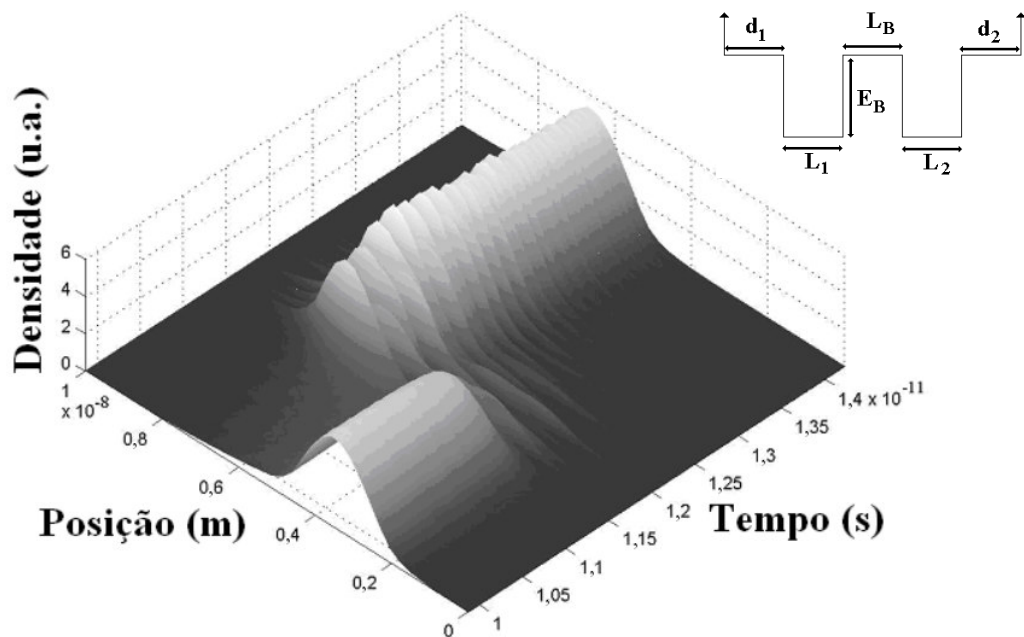


Fig.13 - Evolução da Função Densidade de Probabilidade
(Transição em Célula com dois Pontos Quânticos e um elétron)

Nesta simulação as dimensões da célula foram: $L_1 = 2$ nm, $L_2 = 2$ nm, $d_1 = 2,5$ nm, $d_2 = 2,5$ nm, $L_B = 1$ nm, e $E_B = 7 \times E_0$ (Onde E_0 é a energia fundamental de um poço 1D de 10 nm).

Observa-se na Figura-14 que a densidade de corrente de tunelamento, registrada no meio da célula, não possui uma frequência bem definida, e um decaimento exponencial claro. Isto se deve à presença de vários estados superpostos, e não apenas dois estados como no caso do poço de potenciais infinitos, apresentado anteriormente.

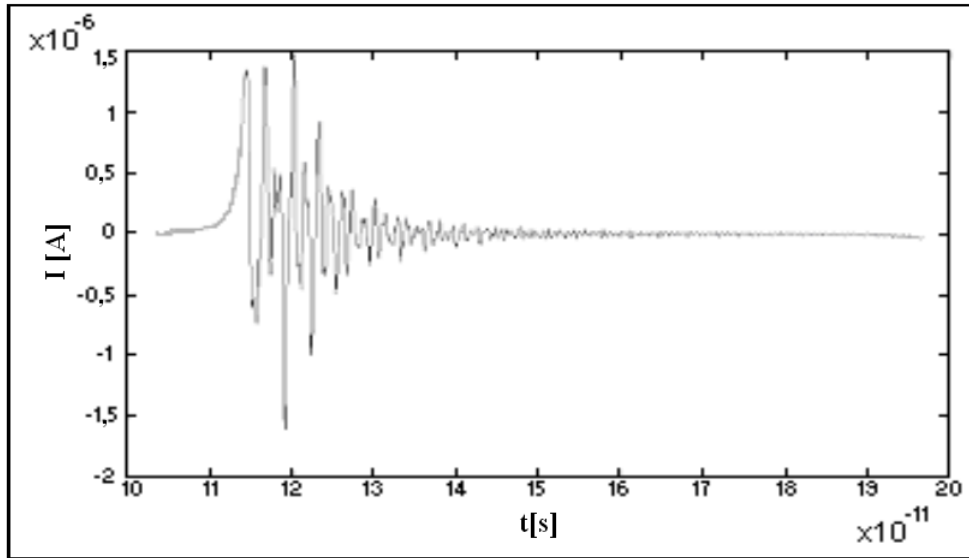


Fig.14 – Transição da Corrente ($I [A] \times t [s]$)
 (Transição em Célula com dois Pontos Quânticos e um elétron)

O comportamento dinâmico obtido para a célula com dois pontos quânticos pode ser entendido pela seqüência de gráficos mostrada a seguir.

Inicialmente (Etapa-1) o elétron, representado pela sua função densidade de probabilidade, encontra-se principalmente no ponto quântico à esquerda da célula, em estado quase estacionário. A função de onda ψ do elétron é representada pela suas componentes real (X) e imaginária (Y). A densidade de corrente instantânea é plotada através do comprimento da célula. As linhas retas representam o perfil do potencial observado pelo elétron na célula, excluído o potencial ôhmico de amortecimento, e incluído o potencial externamente aplicado da rampa. As funções de onda e de densidade de probabilidade estão plotadas em unidades arbitrárias para otimização da visualização. Podemos observar a evolução no tempo da simulação na seqüência de gráficos, para cada etapa. Na etapa seguinte da simulação aplica-se um potencial externo, na forma de uma rampa, com magnitude máxima três vezes maior que a altura da barreira. O objetivo é forçar uma transição do elétron para o poço quântico à direita da célula, com comprimento de 10 nm.

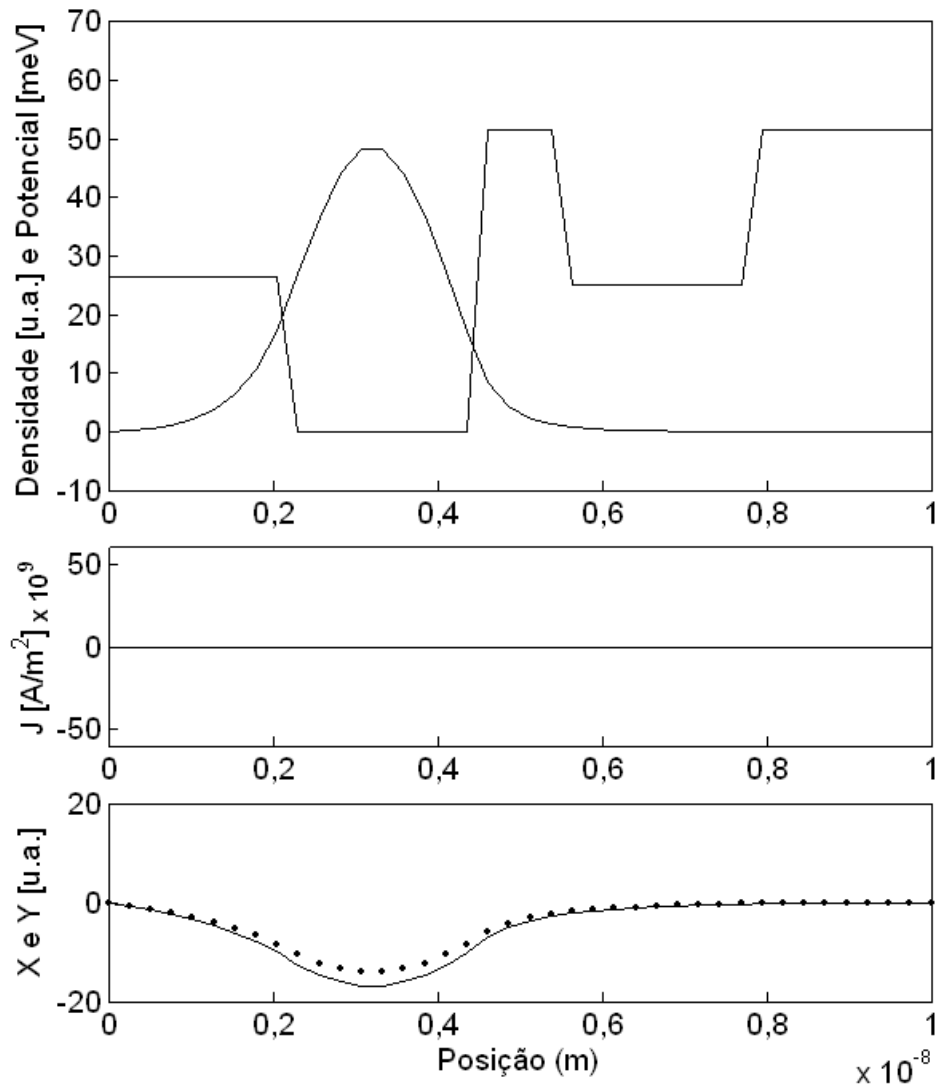


Fig.15 – Etapa-1: Estado inicial quase-estacionário.

À medida que a rampa vai sendo aplicada progressivamente, a distribuição de carga vai modificando-se, como podemos observar no gráfico da Etapa-2.

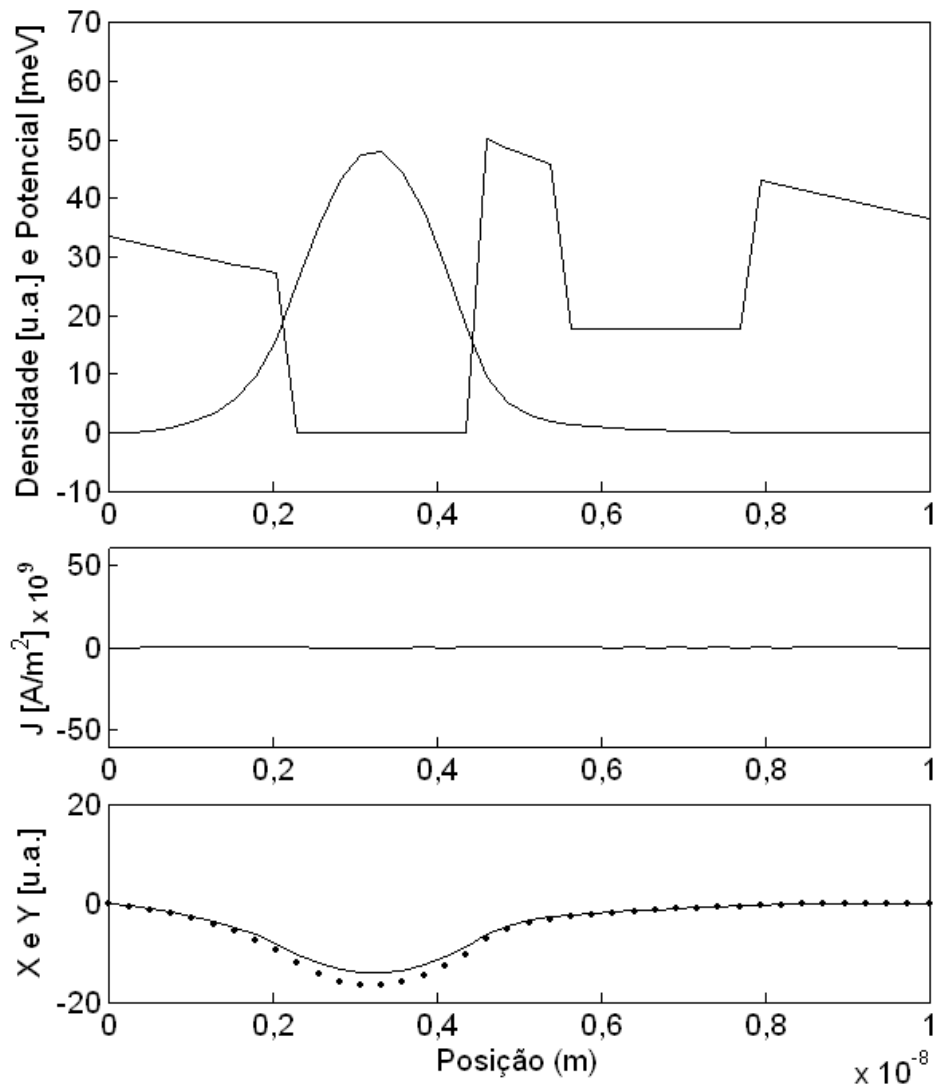


Fig.16 – Etapa-2: Início da aplicação lenta e progressiva da rampa.

Até o ponto em que o início do processo da transição do elétron entre os pontos quânticos (tunelamento) ocorre definitivamente, como podemos observar na Etapa-3.

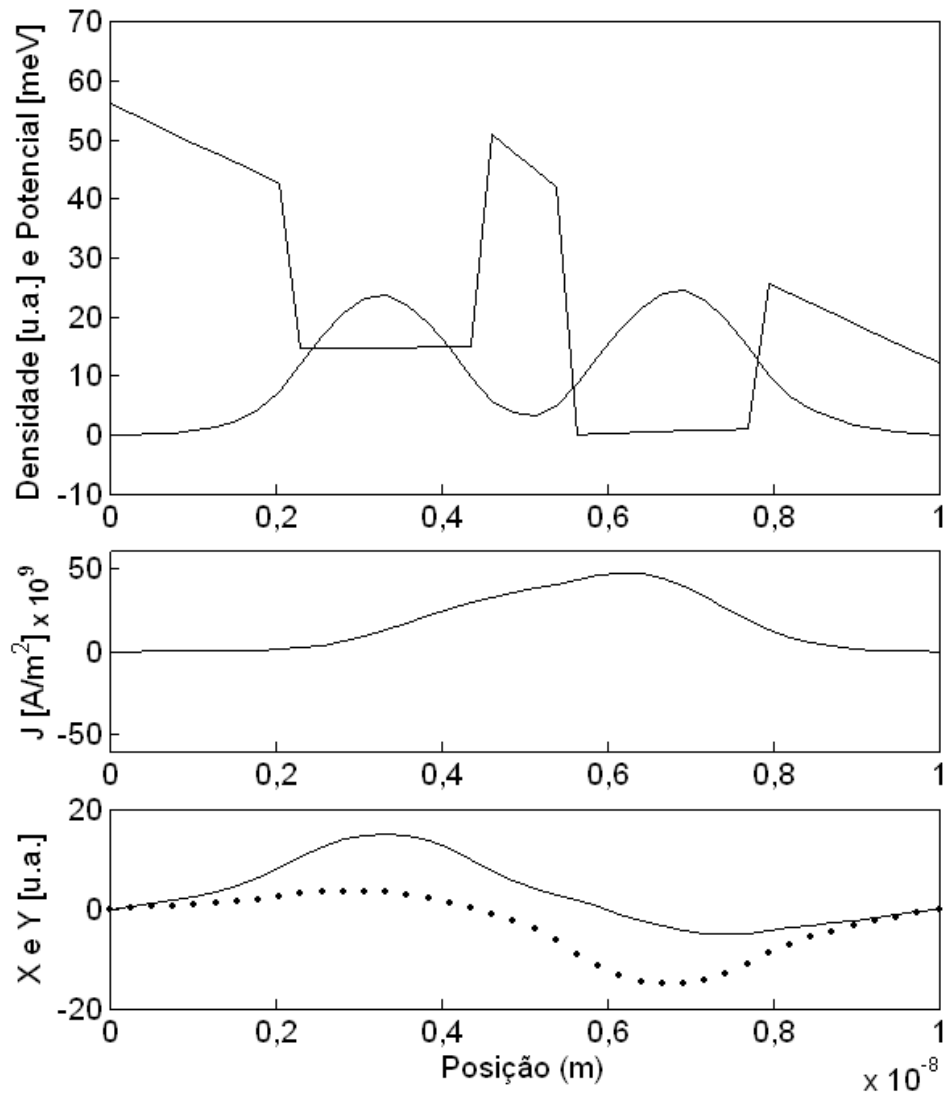


Fig.17 – Etapa-3: Momento da transição através da barreira.

Observa-se em um dado momento da transição (Etapa-3) uma distribuição quase igual da carga do elétron entre os dois poços de potenciais que representam os dois pontos quânticos acoplados através da barreira de potencial. Na Etapa-4 podemos observar a transição praticamente completada.

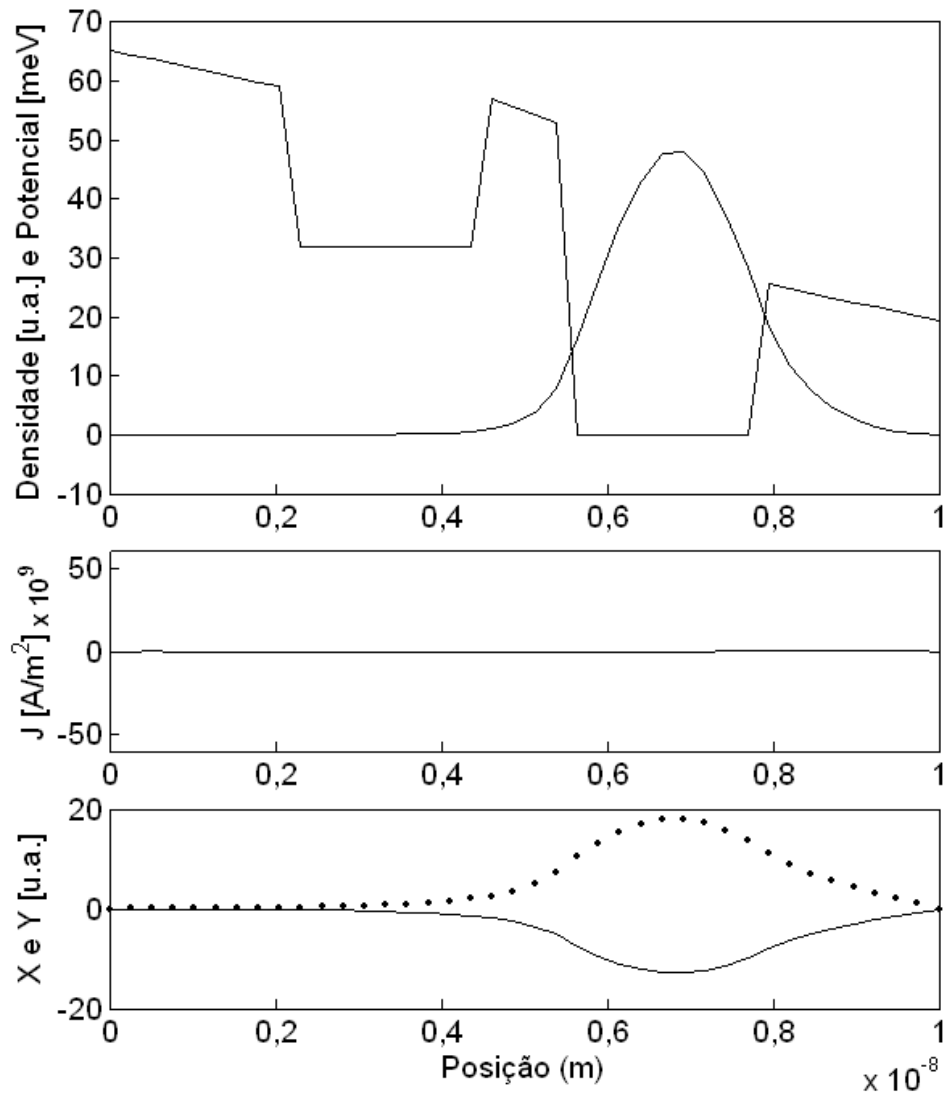


Fig.18 – Etapa-4: Transição praticamente completada

Em seguida a rampa de potencial aplicada é progressivamente e lentamente removida na Etapa-5, permanecendo a distribuição da carga quase imutável, com o elétron localizado principalmente no ponto quântico à direita da célula.

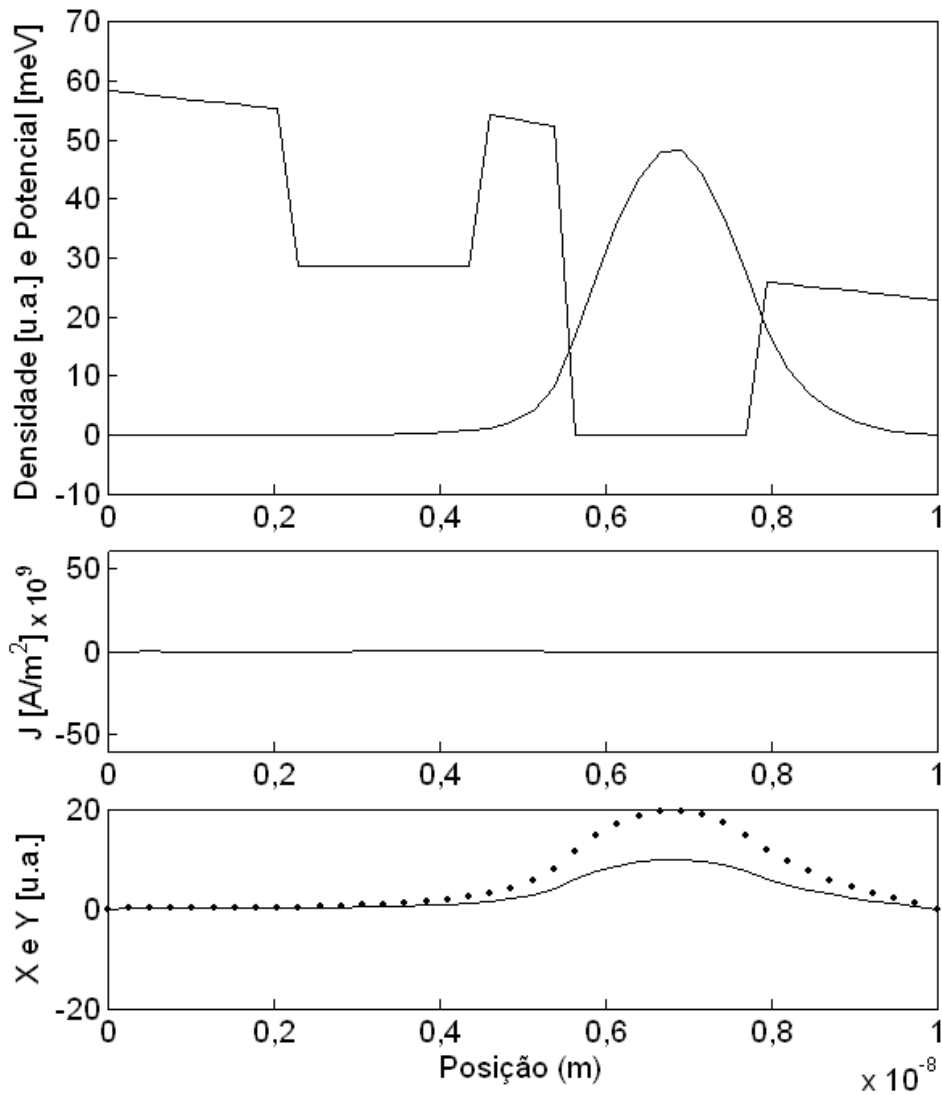


Fig.19 – Etapa-5: Remoção lenta e progressiva da Rampa

Finalmente na Etapa-6 observamos um estado quase estacionário do elétron, ocupando o ponto quântico à esquerda da célula, e permanecendo aí até que um novo ciclo recomece, com a aplicação de uma outra rampa, com orientação oposta à anterior, que forçaria o elétron a uma transição que o faria retornar ao estado inicial da célula. Todo o processo leva apenas alguns poucos picosegundos para completar-se.

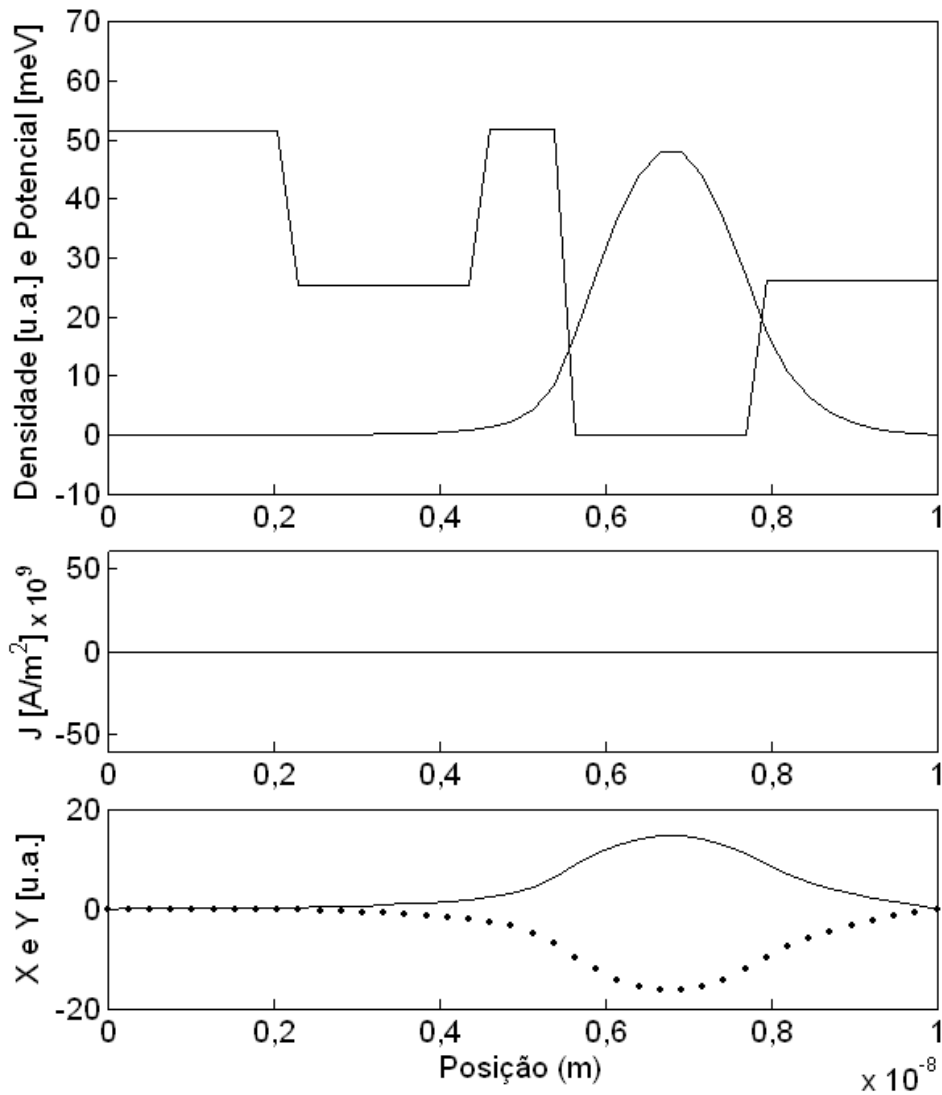


Fig.20 – Etapa-6: Estado final quase estacionário

4.1.3 – Duas Células Acopladas Lateralmente (Temperatura 0K)

Foi realizada inicialmente a simulação numérica com duas células sem pontos quânticos presentes. Os limites físicos das células confinam em seu interior as funções de onda de cada elétron, que interagem entre si por ação de força eletrostática repulsiva. Os potenciais foram calculados a partir da forma integral da equação de Poisson. O resultado da distribuição final de cargas, e o perfil dos potenciais, em um dos dois possíveis estados estacionários, são apresentados na Figura-21.

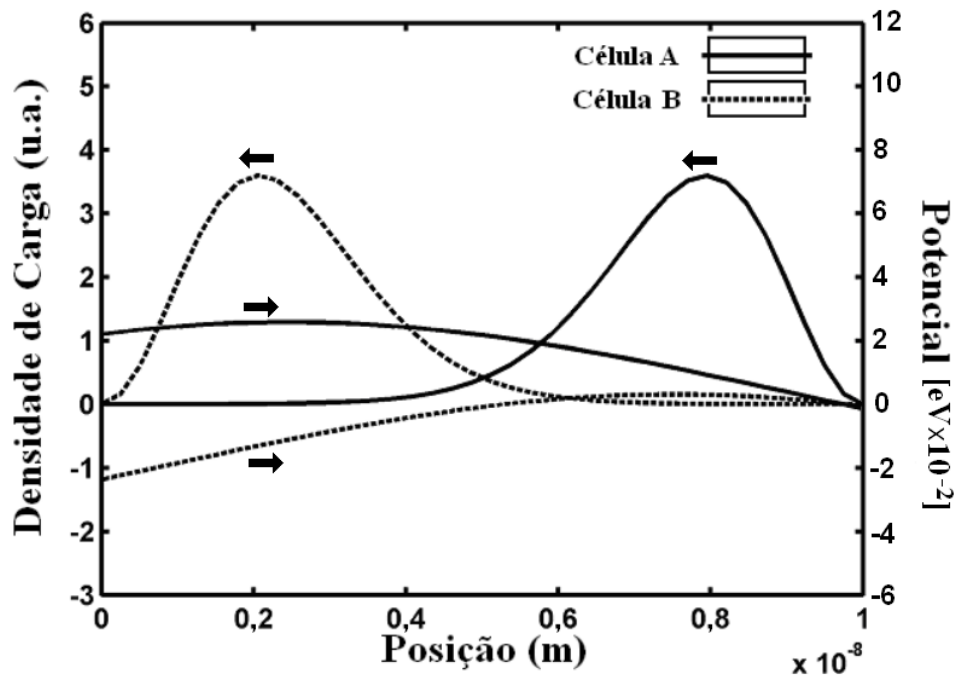


Fig.21 – Duas Células sem Pontos Quânticos (Estado Final Estacionário)

Com duas células acopladas lateralmente, como mostrado originalmente na Figura-7, com dois pontos quânticos, e um elétron, em cada célula, acoplados por capacitâncias, continuam a existir dois estados estáveis possíveis. O estado inicial é mostrado na Figura-22, com os correspondentes perfis de potencial em cada célula.

Uma rampa de potencial é aplicada progressivamente na primeira célula, para forçar uma transição de estados. A rampa tem potencial máximo (Joules) de vinte vezes a energia fundamental E_1 de um poço de potenciais infinitos de 10 nm. Na Figura-23 esta transição já iniciou, com as frações das cargas fundamentais dos elétrons em cada célula distribuídas respectivamente entre os pares de pontos quânticos.

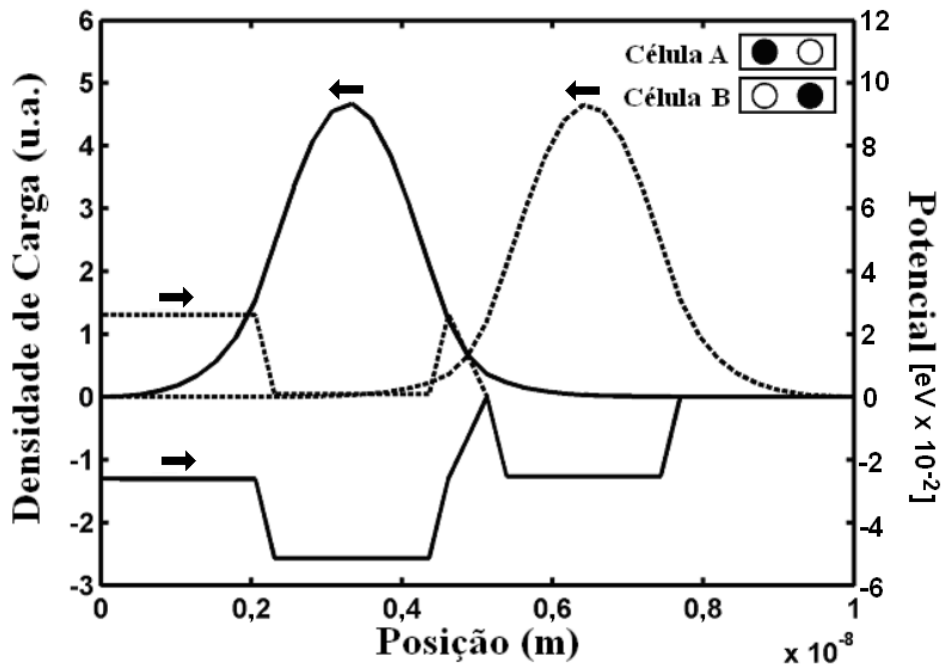


Fig.22 – Duas Células Acopladas (Estado Inicial)

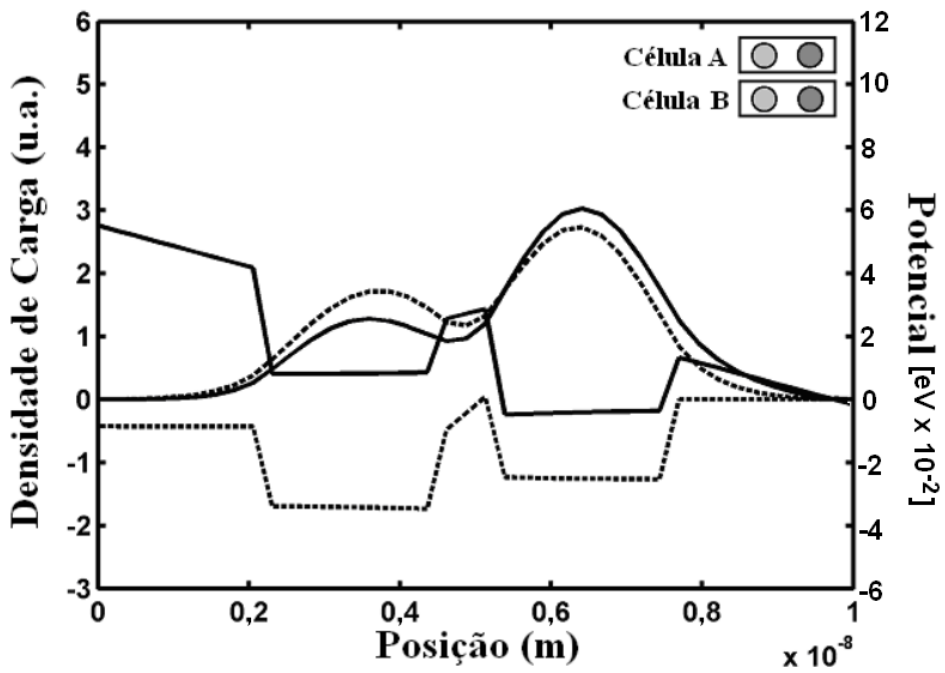


Fig.23 – Duas Células Acopladas (Aplicação de Rampa)

A conclusão da transição de estados pode ser observada na Figura-24, onde a rampa aplicada ainda está presente e sendo progressivamente e lentamente removida.

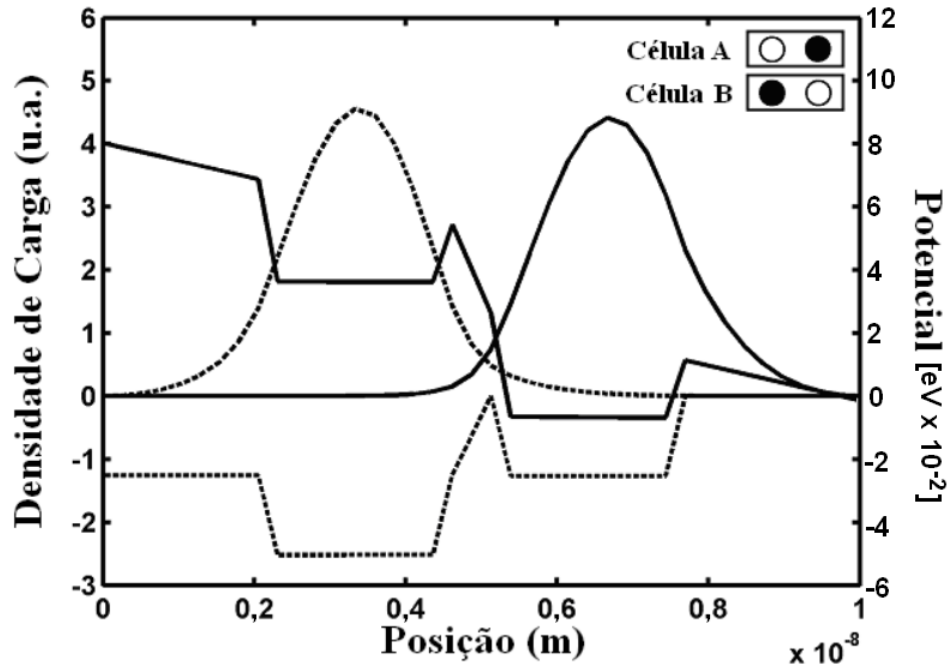


Fig.24 – Duas Células Acopladas (Transição Completa)

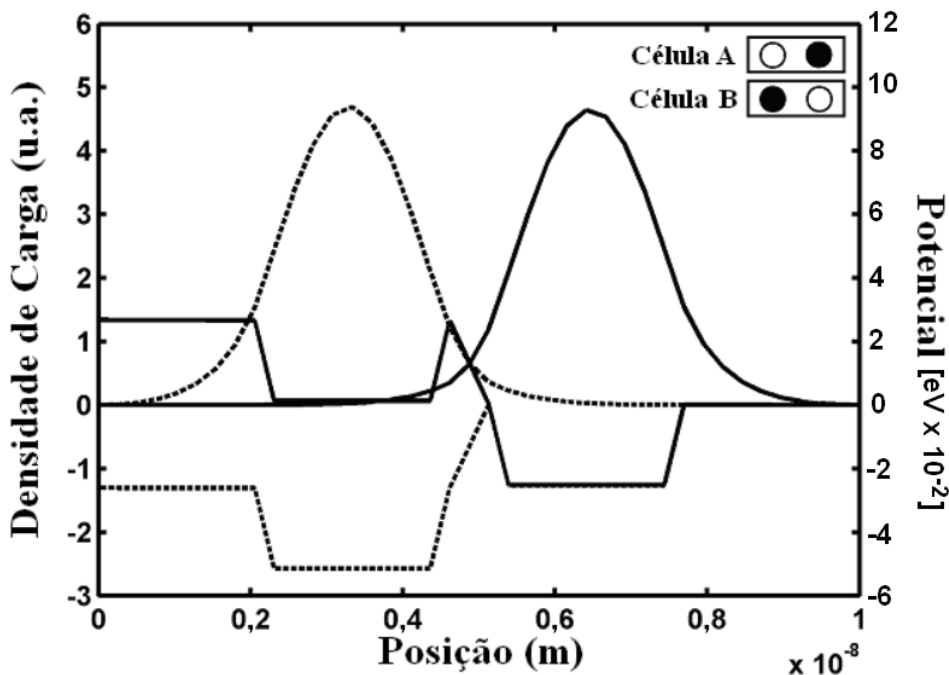


Fig.25 – Duas Células Acopladas (Estado Final)

Finalmente a rampa é completamente removida e o estado estacionário, com a nova distribuição de carga em cada célula é obtido. Podemos ainda apreciar a evolução no tempo da transição de estados a partir dos gráficos mostrados nas Figuras 26 e 27.

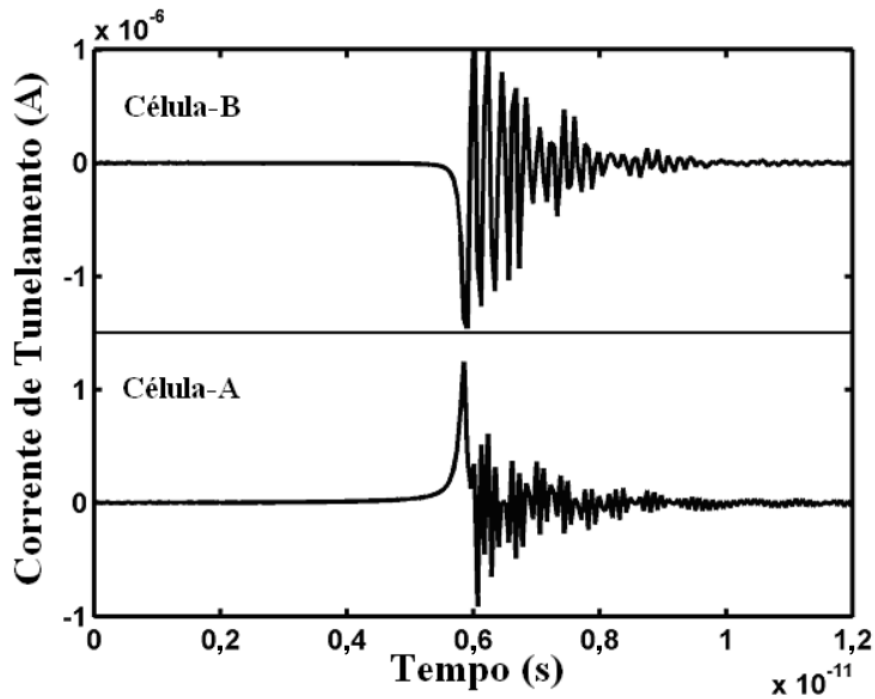


Fig.26 – Corrente de Tunelamento

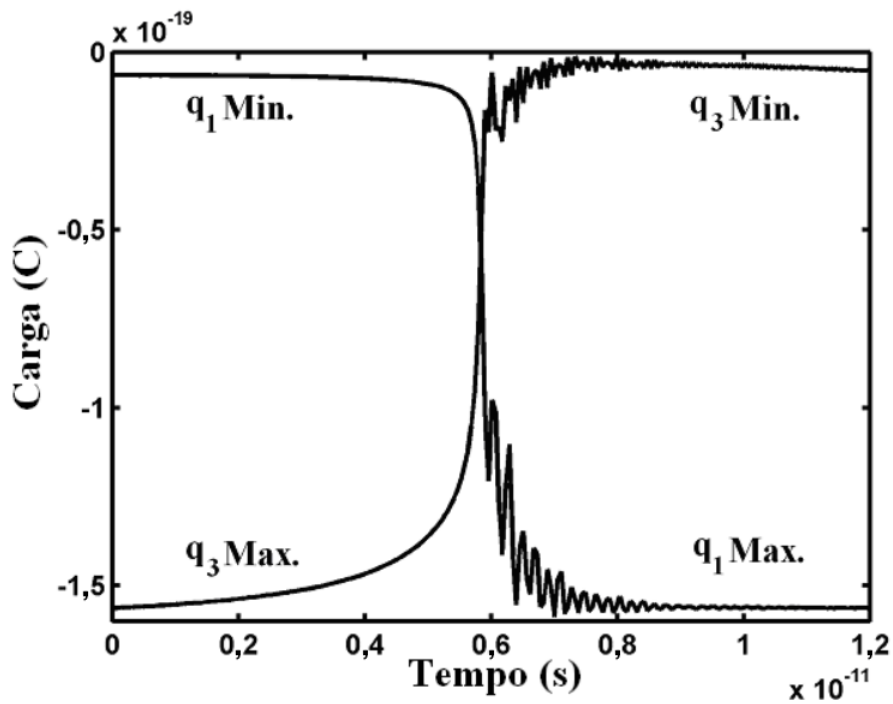


Fig.27 – Evolução da Carga

As Figuras 26 e 27 mostram as correntes de tunelamento e as cargas presentes em cada ponto quântico em função do tempo. Observe que o tempo de transição é da ordem de 4 picosegundos, o que permitiria uma frequência de operação em torno de 250 GHz.

4.1.4 – Duas Células Acopladas Lateralmente com Efeito de Temperatura

Foi incluído na simulação numérica o sinal aleatório gaussiano, com média zero e desvio padrão definido pela Equação-20, em função da temperatura escolhida. Foi usada a mesma configuração anterior: Duas células acopladas lateralmente, cada uma com dois pontos quânticos, com valores de capacitâncias definidas na Tabela-1.

Várias simulações foram realizadas, em um período de tempo de 20 picosegundos, partindo do mesmo estado estacionário observado na Figura-22. Um critério de estabilidade frente ao ruído térmico foi definido. A configuração foi considerada estável desde que não fossem observadas transições de estado pela ação única do ruído térmico, em uma determinada série de simulações.

Observou-se que a configuração permaneceu no estado estacionário inicial, até que a temperatura excedeu o valor de 7K (Kelvin). A partir deste valor, que corresponde a um desvio padrão de 0,03 V (volt), com $C_{\text{eff}} = 106 \times 10^{-21} \text{F}$, a configuração tinha a tendência de trocar de estados em períodos cada vez mais curtos de tempo, proporcionalmente ao aumento da temperatura e da amplitude do sinal de ruído.

Considera-se que o limite superior da temperatura de operação para esta configuração em particular seja 7K. Temperatura esta que pode ser atingida em laboratório, com criostatos usando hélio líquido.

Buscou-se um aperfeiçoamento das características desta configuração, para que esta pudesse operar em temperaturas mais altas. Com a mesma configuração geométrica, foi aumentado em quatro vezes o valor da permissividade elétrica do conjunto. Isto reduziu a magnitude de acoplamento entre os pontos quânticos. Também foi aumentado o valor da resistividade de cada célula para $\rho_{\Omega} = 2,5 \times 10^{-4} \Omega \cdot \text{m}$, de forma a aumentar a taxa de dissipação de energia. A profundidade dos poços representando a região dos pontos quânticos foi dobrada.

Com estas mudanças na permissividade e na resistividade dos materiais que constituem as células, e na altura dos poços sem alterar a geometria das células, obteve-se uma maior

imunidade ao ruído térmico, possibilitando uma operação estável até o limiar aproximado de 300K, com desvio padrão para o sinal de ruído em torno de 0,1 V.

Podemos apreciar os resultados destas simulações nas Figuras 28 a 30. Inicialmente, para a configuração original, a uma temperatura de 70K (Figura-28), podemos observar a carga q_1 no máximo (aproximadamente igual à carga fundamental do elétron) e a carga q_3 quase zero, do lado esquerdo das células A e B respectivamente.

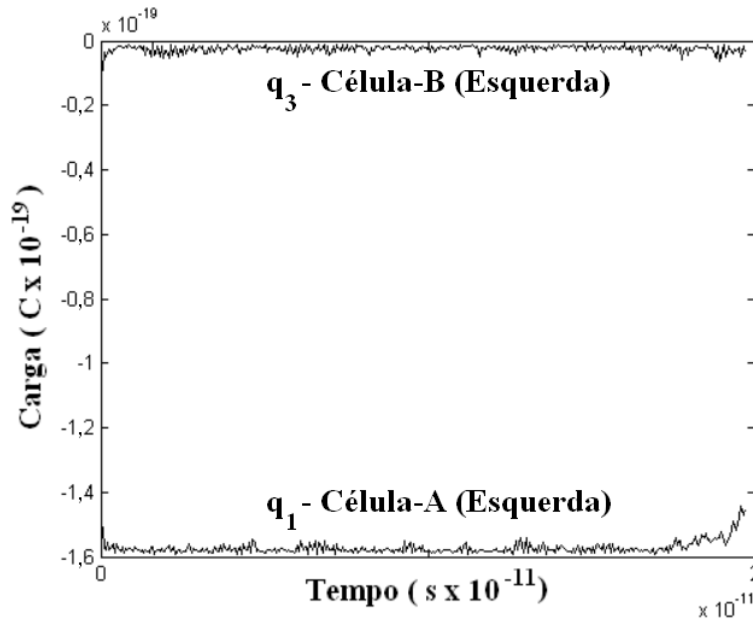


Fig.28 – Evolução da Carga a 70K (Lado Esquerdo)

Da mesma forma, na mesma simulação podemos observar na Figura-29 a carga q_2 quase zero e a carga q_4 no seu máximo, do lado direito das células A e B respectivamente.

A célula permanece estável, no estado definido pela distribuição de cargas originais, durante todo o período de tempo da simulação. Não há indicação que este estado possa ser mudado por ação única do potencial aleatório introduzido, representando o ruído térmico na temperatura de 70K.

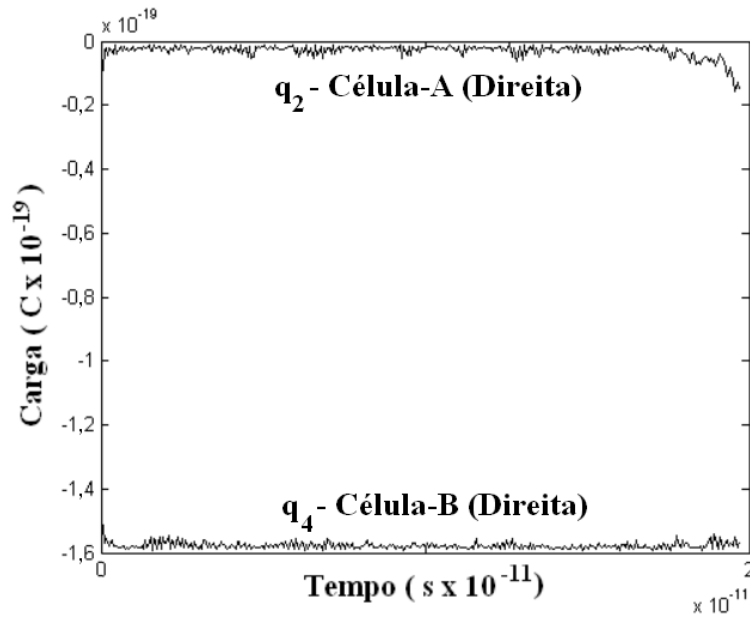


Fig.29 – Evolução da Carga a 70K (Lado Direito)

Em seguida foi feita a simulação na temperatura de 300K, para um par de células otimizadas, como descrito nos parágrafos anteriores. Apesar do par de células manter-se estável, no mesmo estado original, podemos observar nas Figuras 30 e 31 vários e intensos transitórios rápidos na redistribuição das cargas q_1 , q_2 , q_3 e q_4 .

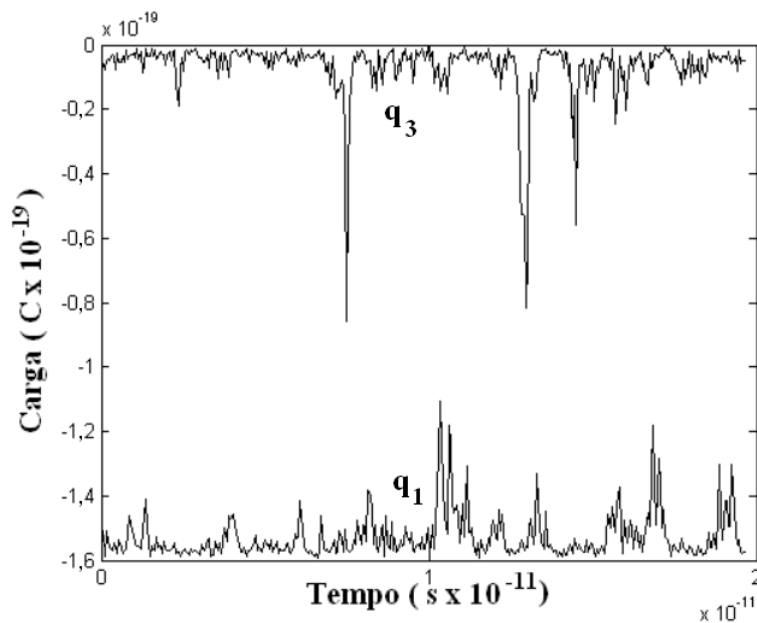


Fig.30 – Evolução da Carga a 300K (Lado Esquerdo)

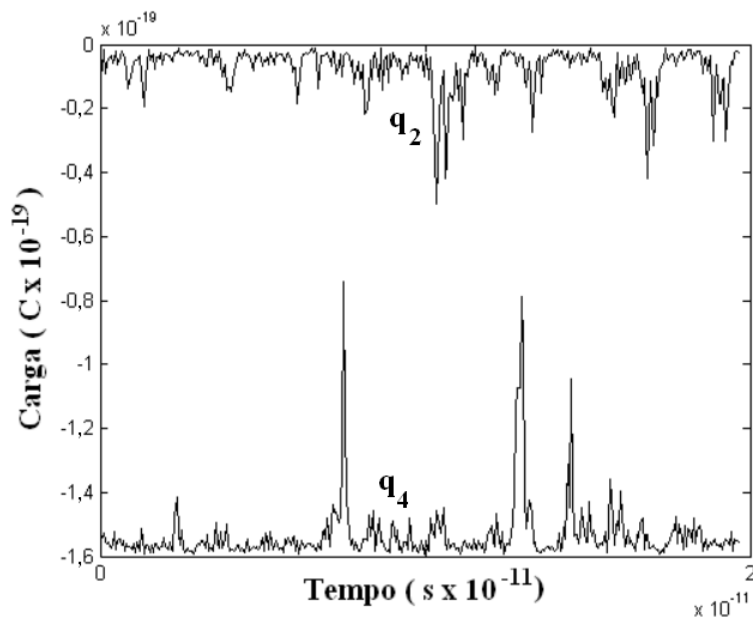


Fig.31 – Evolução da Carga a 300K (Lado Direito)

Na temperatura de 300K, as células otimizadas são apenas marginalmente estáveis, podendo o estado transitar em curtos espaços de tempos. O que sugere a necessidade de otimizar-se ainda mais a configuração do par de células, sendo talvez necessário otimizar também a geometria das mesmas.

4.2 – SIMULAÇÃO NUMÉRICA 2D

Até este ponto foram apresentados o algoritmo de simulação 1D com alguns resultados para diferentes configurações de células com pontos quânticos acoplados.

Os resultados com a técnica 1D permitem mostrar a evolução das densidades de carga e de corrente (que caracterizam o estado da célula) ao longo do eixo longitudinal das células de dois ou mais pontos quânticos. É assumido que o transporte de carga ocorre apenas ao longo desse eixo, como forma de simplificar as simulações.

Outros tipos de células, com distribuições de pontos quânticos topologicamente mais complexas, requerem simulações em 2D, talvez até em 3D. Além de ser desejável incluir, com uma maior liberdade de representação, outras estruturas com formas geométricas diferenciadas.

É apresentado a seguir o algoritmo de simulação numérica em duas dimensões, derivado diretamente do algoritmo unidimensional. A idéia básica é a mesma do algoritmo unidimensional, onde a função de onda é discretizada no espaço e no tempo, e calculada pelo método das diferenças finitas. Aqui o tempo discreto é identificado pelo índice inteiro n , e as coordenadas espaciais discretizadas x e y , identificadas pelos índices u e v respectivamente. A equação discretizada de Schrödinger para um único elétron é apresentada a seguir.

$$\Psi_{u,v}^n = \Psi_{u,v}^{n-1} + i \left[\alpha \frac{\Delta t}{\Delta s^2} (\Psi_{u+1,v}^n + \Psi_{u-1,v}^n + \Psi_{u,v+1}^n + \Psi_{u,v-1}^n - 4\Psi_{u,v}^n) + \beta \Delta t V_m^n \Psi_{u,v}^n \right] \quad (24)$$

Esta equação foi modificada para ser utilizada como uma regra de atualização discreta (*discrete update-rule*) como aquela utilizada e implementada no caso unidimensional, e como descrito por DoRon Motter (<http://www.cise.ufl.edu/~mpf/sch/>). Inclusive com uma matemática de números inteiros, lembrando que a função de onda ψ para o elétron possui partes reais e imaginárias, como é apresentado na Equação-25.

$$\Psi_{u,v}^n = X_{u,v}^n + jY_{u,v}^n \quad (25)$$

Calculamos as componentes de densidade de corrente, nas direções x e y , em cada iteração, para que seja obtida a magnitude do campo elétrico de desaceleração.

$$(J_x)_{u,v}^n = \frac{q\hbar}{m\Delta x} [Y_{u,v}^n (X_{u,v}^n - X_{u-1,v}^n) - X_{u,v}^n (Y_{u,v}^n - Y_{u-1,v}^n)] \quad (26)$$

$$(J_y)_{u,v}^n = \frac{q\hbar}{m\Delta y} [Y_{u,v}^n (X_{u,v}^n - X_{u,v-1}^n) - X_{u,v}^n (Y_{u,v}^n - Y_{u,v-1}^n)] \quad (27)$$

Os potenciais totais locais, que incluem o efeito do campo de desaceleração, são calculados pela Equação-28, em função da resistividade do material:

$$V_{u,v}^n = \Phi_{u,v}^n - \rho_{\Omega} \Delta x \sum_{i=1}^u (J_x)_{i,v}^n = \Phi_{u,v}^n - \rho_{\Omega} \Delta y \sum_{j=1}^v (J_y)_{u,j}^n \quad (28)$$

Para uma iteração alternada das componentes X e Y da função de onda (*discrete update-rule*), para um passo de tempo total fixado em $2\Delta t$, temos finalmente as expressões:

$$X_{u,v} = X_{u,v} - \left[\alpha \frac{\Delta t}{\Delta s^2} (Y_{u+1,v} + Y_{u-1,v} + Y_{u,v+1} + Y_{u,v-1} - 4Y_{u,v}) + \beta \Delta t V_{u,v} Y_{u,v} \right] \quad (29)$$

$$Y_{u,v} = Y_{u,v} + \left[\alpha \frac{\Delta t}{\Delta s^2} (X_{u+1,v} + X_{u-1,v} + X_{u,v+1} + X_{u,v-1} - 4X_{u,v}) + \beta \Delta t V_{u,v} X_{u,v} \right] \quad (30)$$

Assumindo que os passos discretos nas coordenadas espaciais são iguais, temos para cálculo das constantes as seguintes relações:

$$\alpha = \frac{\hbar}{2m} \quad \beta = \frac{-2}{\hbar} \quad \Delta s = \Delta x = \Delta y$$

Em comparação com o algoritmo unidimensional fica evidente um aumento da complexidade, que resulta em um maior esforço computacional necessário à simulação de dispositivos, com diferenças finitas em duas dimensões. Podemos apreciar este aumento do esforço computacional observando que o número de pontos na simulação 1D adotado neste trabalho foi de 40. Comparando com o número de pontos em uma célula 2D, que totaliza $40 \times 20 = 800$ pontos, verificamos a magnitude do aumento do esforço computacional necessário. Lembrando que a célula adotada neste trabalho possui largura de valor igual à metade do comprimento.

Espera-se que haja um aumento aproximado de 20 vezes no tempo de simulação 2D de uma única célula (Figura-32), que hoje é realizada, com o algoritmo 1D, em aproximadamente 1 minuto.

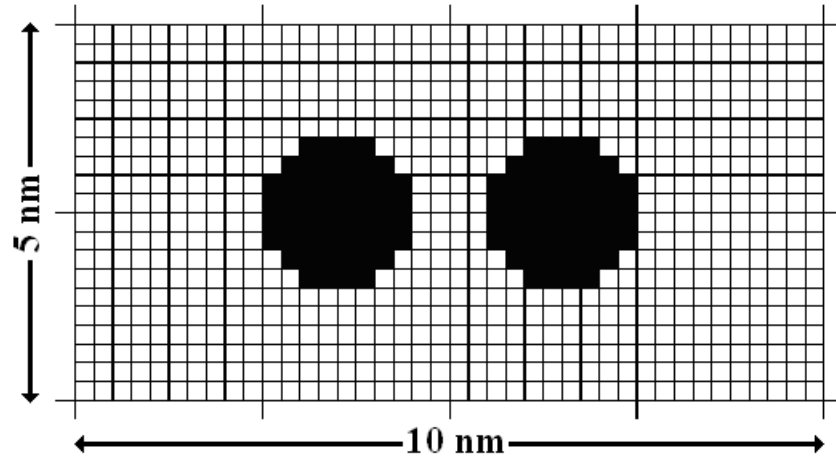


Fig.32 – Espaço de Diferenças Finitas 2D (40 x 20)

5 – DISCUSSÃO DE RESULTADOS

Neste capítulo são discutidos mais profundamente alguns dos resultados obtidos com as simulações 1D. Os aspectos da conservação de carga e de energia, e da estabilidade do algoritmo numérico, são analisados. O potencial de aplicação de técnicas de otimização com algoritmos genéticos no aperfeiçoamento da dinâmica de células de pontos quânticos acoplados, nos termos do limiar de temperatura e do tempo de acomodação, é discutido.

5.1 – CONSERVAÇÃO DE CARGA E ENERGIA

Nas simulações numéricas realizadas para o caso unidimensional, com um único elétron presente em cada célula, para diferentes configurações de células, foi verificado se os princípios de conservação de carga e energia estavam sendo respeitados. Para este propósito foram estabelecidos cálculos numéricos complementares durante as simulações que avaliaram a cada passo de tempo a quantidade total de energia, na ausência e na presença de processos dissipativos, e a quantidade total de carga. As equações adotadas são apresentadas a seguir, para o cálculo dos valores esperados de carga e energia totais [54].

$$\langle E(t) \rangle = i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, t) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} dx \quad (24)$$

$$\langle Q(t) \rangle = q \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) dx \quad (25)$$

Nas simulações realizadas na ausência de processos dissipativos, a energia total do sistema não variou no tempo, permanecendo com um valor constante definido pelas condições de contorno iniciais. Na presença de processos dissipativos a energia total decaiu com um comportamento exponencial até o valor esperado para o estado de energia fundamental do sistema. Estes resultados validaram a hipótese de conservação de energia durante as simulações numéricas com este algoritmo, como esperado.

Observou-se que a conservação de carga não acontecia na simulação numérica, principalmente nos casos onde havia processos dissipativos com magnitudes significativas.

Foi portanto necessário renormalizar a função de onda calculada a cada passo da simulação, para garantir a conservação da carga fundamental do elétron, e garantir o cálculo correto da densidade de corrente e da energia do sistema.

5.2 – ESTABILIDADE DO ALGORITMO NUMÉRICO

Uma análise matemática detalhada dos critérios de estabilidade das simulações numéricas depende de cada configuração adotada para as células, e o grau de acoplamento entre estas. Na prática, o algoritmo numérico de simulação 1D é estável enquanto a seguinte desigualdade é satisfeita:

$$\left| \frac{\alpha \cdot \Delta t}{\Delta x^2} \right| < \frac{1}{2} \quad (33)$$

Onde: $\alpha = \frac{\hbar}{2m}$

Esta condição é válida enquanto os potenciais que aparecem no hamiltoniano da equação de Schrödinger variam lentamente [53]. Uma solução geral para problemas de estabilidade, quando há acoplamentos fortes presentes entre as células, é diminuir o passo de tempo Δt das simulações numéricas até um valor aceitável, em relação ao passo Δx . Infelizmente o tempo total de cada simulação vai aumentar na razão inversa da diminuição do passo de tempo.

É importante observar que certos tipos de acoplamentos podem induzir a oscilações realimentadas com amplitudes crescentes, que podem ter significado físico, não sendo um artefato do algoritmo numérico.

5.3 – OTIMIZAÇÃO COM ALGORITMOS GENÉTICOS

Um dos objetivos considerados originalmente, consistiu no desenvolvimento de algoritmos rápidos [56] de simulação numérica do comportamento dinâmico de portadores em nano-estruturas funcionais.

O objetivo era viabilizar uma busca sistemática rápida no espaço soluções para que fosse possível a otimização automática de dispositivos mono-elétron, segundo critérios simples como o de estabilidade e o de tempo de acomodamento. Estes critérios determinariam funções custo a serem otimizadas globalmente.

A estratégia e a metodologia automática para a concepção de novos dispositivos, utilizando os modelos e os algoritmos de simulação numérica estabelecidos neste trabalho, e as técnicas disponíveis de algoritmos genéticos [57] pode ser ilustrada no fluxograma da Figura-33. Esta mostra de forma simples a natureza da proposta para a evolução e otimização automática de dispositivos, que pode ser estendida a sistemas completos.

No primeiro bloco representamos o processo de expressão do código genético na forma de um determinado dispositivo físico que possa ser simulado. Entre os fatores de interesse, representado por um formato de código genético em particular, podemos citar: as propriedades físicas dos materiais e seus valores (Ex: permissividade e condutividade); as dimensões físicas das células (Ex: comprimento e seção de área); e até mesmo as condições iniciais de distribuição de densidade de carga e corrente para partida da simulação.

No bloco seguinte representamos o processo de simulação numérica, nos termos das equações da física clássica do eletromagnetismo e da mecânica quântica, representada pela equação de Schrödinger.

Com os resultados destas simulações, e principalmente o comportamento da dinâmica de transporte obtida (Especificamente a variação das densidades de carga e de corrente), pode-se estabelecer funções custo caracterizadas pelos valores dos parâmetros de comportamento a serem otimizados. Funções estas que devem ser minimizadas na busca sistemática no espaço de soluções, de acordo com o algoritmo genético adotado.

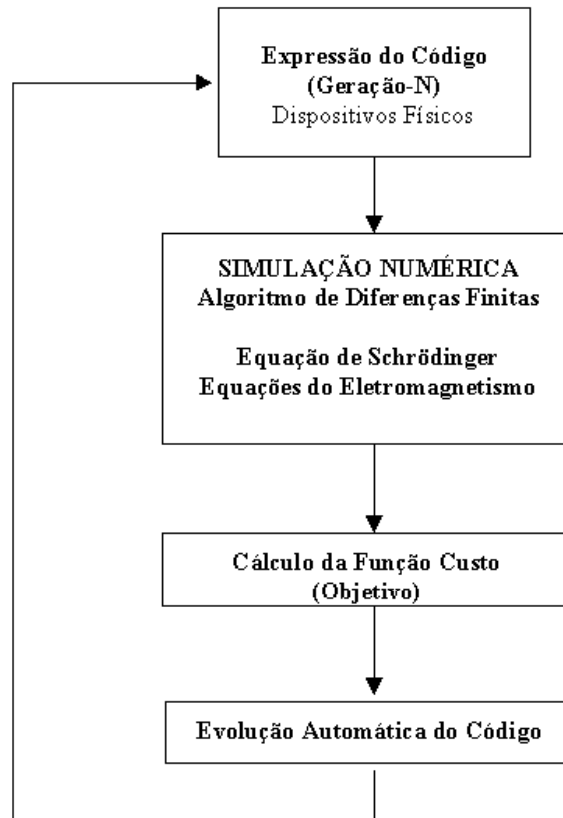


Fig.33 - Evolução Automática de Dispositivos Físicos

5.3.1 – Tempo de Acomodação

A configuração da célula básica com dois pontos quânticos foi otimizada com uma busca sistemática no espaço de soluções usando o paradigma de algoritmos genéticos. Este trabalho foi realizado em cooperação com o aluno de graduação Hermann Biagi. Trabalho este que resultou no seu projeto final de graduação [55] [52].

Conseguiu-se determinar uma configuração otimizada a partir de várias das propriedades da célula, como suas dimensões físicas, a posição dos pontos quânticos dentro da célula, e a resistividade e a permissividade do material. Principalmente no que se refere ao tempo de acomodação e a forma do transitório de estados.

Buscava-se um transitório de curta-duração (da ordem de picosegundos) e uma diferenciação maximizada dos valores das cargas fracionárias que ocupam o par de pontos quânticos da célula, em um dado momento.

A função-custo usada consistia de uma composição da razão de magnitude das cargas fracionárias no par de pontos da célula, e o tempo de acomodação de um transitório forçado sobre a célula.

A configuração final obtida é apresentada na Figura-34, com uma célula de 10 nm de comprimento, com resistividade de $1,25 \times 10^{-5} \Omega \cdot m$ e permissividade elétrica relativa aproximadamente unitária. As dimensões da célula foram: $L_1 = 2 \text{ nm}$, $L_2 = 2 \text{ nm}$, $d_1 = 2,5 \text{ nm}$, $d_2 = 2,5 \text{ nm}$, $L_B = 1 \text{ nm}$, e $E_B = 7 \times E_0$ (Onde E_0 é a energia fundamental de um poço 1D de 10 nm).

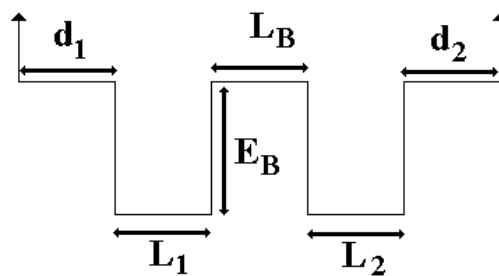


Fig.34 – Célula Otimizada

5.3.2 – Limiar de Temperatura (Ruído Térmico)

Na otimização das células com o objetivo de aumentar o limiar de temperatura em que podem operar com estabilidade, não foram usadas técnicas de algoritmos genéticos. Estas técnicas têm o potencial de aumentar significativamente o limiar de temperatura, se considerarmos os resultados obtidos inicialmente com uma otimização intuitiva.

Nas simulações, alguns fatores foram identificados como contribuindo diretamente para o aumento do limiar de temperatura. Observou-se que o aumento da resistividade permite um comportamento superamortecido que minimiza os efeitos do ruído térmico. Mas um aumento da resistividade estende significativamente o tempo de acomodação.

Observou-se também que um aumento da permissividade elétrica reduz a amplitude do ruído térmico, mas reduz o acoplamento entre pontos quânticos. Um ponto ótimo de compromisso deve ser buscado neste caso.

O aumento da profundidade dos poços de potencial e o conseqüente aumento da altura da barreira de tunelamento também contribuem para o aumento do limiar de temperatura. Um cuidado especial deve ser tomado neste caso para não comprometer a habilidade da célula comutar seu estado.

6 - CONCLUSÃO

Neste trabalho foi desenvolvido um modelo matemático, baseado na equação de Schrödinger, para a dinâmica de transporte de portadores (elétrons) em células de pontos quânticos acoplados, que inclui um processo dissipativo predominantemente ohmico. Esse modelo foi aperfeiçoado com a inclusão de acoplamentos entre pontos quânticos, ou entre células, na forma de uma matriz de capacitâncias que deve ser extraída previamente.

Foi aperfeiçoado um algoritmo numérico 1D, para a simulação de células simples de pontos quânticos acoplados, que implementa a equação de Schrödinger dependente do tempo na forma de uma regra de atualização discreta (*discrete update rule*).

Na simulação numérica implementada é possível obter, a cada instante de tempo, a distribuição detalhada de densidades de carga e de corrente, calculadas a partir da evolução da função de onda (*wavefunction*) associada a cada portador, caracterizando de maneira completa os estados das células.

O comportamento dinâmico obtido da célula, ou conjunto de células, depende das suas características físicas, o que inclui a sua construção geométrica, e as propriedades elétricas dos materiais (Ex: permissividade e resistividade). As simulações numéricas desenvolvidas permitem que sejam avaliadas diferentes configurações de células de forma a otimizar o seu comportamento para determinadas aplicações. Permitem inclusive a avaliação da estabilidade de operação na presença de ruído térmico, em função da temperatura.

A eficácia das simulações 1D está restrita a um conjunto limitado de topologias de células de pontos quânticos acoplados. Estruturas mais complexas, combinando diferentes arquiteturas de dispositivos, requerem maior grau de liberdade, só possível com simulações em duas ou três dimensões. Neste trabalho é proposto um procedimento que adota o mesmo tipo de algoritmo numérico em simulações 2D, com a perspectiva de ser estendido futuramente para 3D.

Eventualmente a fabricação em laboratório de dispositivos mono-elétron, com processos nanolitográficos, utilizando STMs e AFMs condutivos que também podem ser usados como ferramentas de caracterização, possibilitarão avaliar e ajustar o modelo proposto.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] K. F. Gosser, C. Pacha, A. Kanstein, e M. L. Rossmann, Aspects of Systems and Circuits for Nanoelectronics, Proceedings of The IEEE, VOL.85, NO.4, Abril (1997).

- [2] J. C. da Costa et al, Considerations about nanoelectronic GSI processors, Journal of Analog Integrated Circuits and Signal Processing, VOL.24, NO.1, p.59-71 (2000).

- [3] G. Timp, Nanotechnology, Springer-Verlag, New York (1999).

- [4] M. V. Batistuta, M. F. Stella, H. C. Biagi, J. C. da Costa, Simulation of Dissipative Single-Electron Dynamics in Coupled Quantum Wells, IEEE_Proceedings of NanoSingapore 2006, p.1-4, Piscataway - NJ - USA (2006).

- [5] S. Datta, Electronic Transport in Mesoscopic Systems, Cambridge University Press, Cambridge (1995).

- [6] E. Fernández-Díaz, A. Alarcón, e X. Oriols, Modeling Quantum Transport under AC Conditions, IEEE Transactions on Nanotechnology, VOL.4, NO.5, Setembro (2005).

- [7] M. Rudan et al, A coherent extension of the transport equations in semiconductors incorporating the quantum correction – Part I: single-particle dynamics, IEEE Transactions on Nanotechnology, VOL.4, NO.5, Setembro (2005).

- [8] G. Moore, Cramming more components onto integrated circuits, Electronics, VOL.38, NO.8, Abril (1965).

- [9] Y. Taur, e T. H. Ning, Fundamentals of Modern VLSI Devices, Cambridge University Press, Cambridge (1998).

- [10] M. Bayer, Semiconductor physics: One at a time, please, Nature, VOL.418, p.597-598, Agosto (2002).

- [12] M. H. Devoret, R. J. Schoelkopf, Radio-Frequency Single-Electron Transistor: Toward the Shot-Noise Limit, *Nature*, VOL.406, p.1039-1046, Agosto (2000).
- [13] C. Wasshuber, H. Kosina, e Siegfried Selberherr, SIMON - A simulator for single-electron tunnel devices and circuits, *IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems*, VOL.16, NO.9, Setembro (1997).
- [14] H. Ahmed, e K. Nakazato, Single-electron Devices, *Microelectronic Engineering*, VOL.32, p.297-315 (1996).
- [15] S. Banerjee, S. Nozaki, e H. Morisaki, Coulomb-blockade effect observed at room temperature in Ge nanocrystalline films deposited by the cluster-beam evaporation technique, *Applied Physics Letters*, VOL.76, NO.4, Janeiro (2000).
- [16] M. Dorogi et al, Room-temperature Coulomb blockade from a self-assembled molecular nanostructure, *Physical Review B*, VOL.52, NO.12, Setembro (1995).
- [17] G. Fiori et al, Three-dimensional simulation of realistic single electron transistors, *IEEE Transactions on Nanotechnology*, VOL.4, NO.4, Julho (2005).
- [18] J. G. Guimarães, H. C. Carmo, e J. C. da Costa, Single-electron winner-take-all network, *Microelectronics Journal*, VOL.35, NO.2, p.173-178 (2004).
- [19] J. G. Guimarães, L. M. Nóbrega, e J. C. da Costa, Design of a Hamming neural network based on single-electron tunneling devices, *Microelectronics Journal*, VOL.37, NO.6, p.510-518 (2006).
- [20] J. G. Guimarães e J. C. da Costa, Design of a single-electron current source for nanoelectronic devices . *Microelectronics Journal*, Holanda, VOL.35, NO.12, p. 989-996 (2004).
- [21] K.K. Likharev, *Single-Electron Devices and Their Applications*, *Proceedings of The IEEE*, VOL.87, NO.4, Abril (1999).

- [22] A. O. Orlov et al, Experimental demonstration of a binary wire for quantum-dot cellular automata, *Applied Physics Letters*, VOL.74, NO.19, Maio (1999).
- [23] C. R. Graunke et al, Implementation of a crossbar network using quantum-dot cellular automata, *IEEE Transactions on Nanotechnology*, VOL.4, NO.4, Julho (2005).
- [24] C. S. Lent et al, Bistable saturation in coupled quantum dots for quantum cellular automata, *Applied Physics Letters*, VOL.62, NO.7, p.714-716, Fevereiro (1993).
- [25] K. Walus and A. Julliem, Design Tools for na Emerging SoC Technology: Quantum-Dot Cellular Automata, *Proceedings of the IEEE*, VOL.94, NO.6, Junho (2006).
- [26] A. Gin, S. Williams, H. Meng, e P. D. Tougaw, Hierarchical design of quantum-dot cellular automata devices, *Journal of Applied Physics*, VOL.85, NO.7, Abril (1999).
- [27] P. D. Tougaw, e C. S. Lent, Logical devices implemented using quantum cellular automata, *Journal of Applied Physics*, VOL.75, NO.3, Fevereiro (1994).
- [28] G. L. Snider et al, Quantum-dot cellular automata: Review and recent experiments, *Journal of Applied Physics*, VOL.85, NO.8, Abril (1999).
- [29] W. Porod et al, Quantum-dot cellular automata: computing with coupled quantum dots, *Int. J. Electronics*, VOL.86, NO.5, p.549-590 (1999).
- [30] M. Governale et al, Modeling and manufacturability assessment of bistable quantum-dot cells, *Journal of Applied Physics*, VOL.85, NO.5, Março (1999).
- [31] I. Amlani et al, External charge state detection of a double-dot system, *Applied Physics Letters*, VOL.71, NO.12, Setembro (1997).
- [32] D. B. Janes et al, Nanoelectronic device applications of a chemically stable GaAs structure, *Journal of Vacuum Science and Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures*, VOL.17, NO.4, p.1773-1777, Julho (1999).

- [33] M. V. Batistuta et al, Semiconductor patterning techniques based on self-assembled structures, *Journal of Electronic Materials*, VOL.28, No.7, Julho (1999).
- [34] B. L. Walsh et al, Directed self-assembly of metal/semiconductor structures for nanoelectronic devices and circuits, *Journal of Electronic Materials*, VOL.28, NO.7, Julho (1999).
- [35] D.B. Janes et al, Self-Assembled Metal/Molecule/Semiconductor Nanostructures for Electronic Device and Contact Applications, *Journal of Electronic Materials*, VOL.29, No.5, 565 (1999).
- [36] K. Matsumoto et al, Room-temperature single-electron memory made by pulse-mode atomic force microscopy nano oxidation process on atomically flat α -alumina substrate *Applied Physics Letters*, VOL.76, NO.2, Janeiro (2000).
- [37] M. Ara, H. Graaf, e H. Tada, Atomic Force Microscope Anodization of Si(111) Covered with Alkyl Monolayers, *Jpn. J. Appl. Phys.*, VOL.41, p.4894, Julho (2002).
- [38] R. Lüthi et al, Parallel nanodevice fabrication using a combination of shadow mask and scanning probe methods *Applied Physics Letters*, VOL.75, NO.9, Agosto (1999).
- [39] Y. Fu e M. Wilander, Modelling and design of quantum dot cellular automata, *Journal of Applied Physics*, VOL.83, NO.6, Março (1998).
- [40] C. -K. Wang, I. I. Yakimenko, I. V. Zozoulenko, e K. -F. Berggren, Dynamical response in an array of quantum-dot cells, *Journal of Applied Physics*, VOL.84, NO.5, Setembro (1998).
- [41] H. Hartnagel, R. Katilius, e A. Matulionis, *Microwave Noise in Semiconductor Devices*, John Wiley & Sons, New York (2001).
- [42] C. Juang, K. J. Kuhn, e R. B. Darling, *IEEE Journal of Quantum Electronics*, Electric field effects in AlGaAs-GaAs symmetric and asymmetric coupled quantum wells, VOL.27, NO.9, Setembro 1991.

- [43] T. Ando, H. Taniyama, N. Ohtani, e M. Hosoda, Numerically stable and flexible method for solutions of the Schrödinger equation with self-interaction of carriers in quantum wells, IEEE Journal of Quantum Electronics, VOL.38, NO.10, Setembro 1991.
- [44] A. O. Caldeira, e A. J. Leggett, Influence of Dissipation on Quantum Tunneling in Macroscopic Systems Physical Review Letters, VOL.46, NO.4 (1981).
- [45] A. Davidson, Damping in Schrödinger's equation for macroscopic variables, Physical Review A, VOL.41, NO.6, Março (1990).
- [46] A. O. Caldeira, e A. J. Leggett, Quantum Tunnelling in a Dissipative System, Annals of Physics, VOL.149, p.374-456 (1983).
- [47] W. Heitler, The Quantum Theory of Radiation, Dover Publications, Inc., New York (1984).
- [48] S. Ramo, J. R. Whinnery, e T. van Duzer, Fields and Waves in Communication Electronics, John Wiley & Sons, Inc., New York (1993).
- [49] M. V. Batistuta, M. F. Stella, H. C. de Biagi, and J. C. da Costa, Simulation of Dissipative Electron Dynamics in Coupled Quantum Wells, Electrochemical Society Proceedings, Proceedings of the 19th Symposium on Microelectronics Technology and Devices, SBMicro 2004, Porto de Galinhas, Brasil, PV 2004-03, p.151, The Electrochemical Society, Pennington, NJ (2004).
- [50] D. F. Ferry and S. M. Goodnick, Transport in Nanostructures, Cambridge University Press, Cambridge 1997.
- [51] C. B. Whan, J. White, e T. P. Orlando, Full capacitance matrix of coupled quantum dot arrays: Static and dynamical effects, Applied Physics Letters, VOL.68, NO.21, Maio (1996).
- [52] H. C. de Biagi, M. V. Batistuta, M. F. Stella, e J. C. da Costa, Genetic Algorithm Applied in Optimising 1D Coupled Quantum Wells Structures, Student Forum 2005 - Chip

on the Island, 2005, Florianópolis - SC. Proceedings of the Student Forum 2005 - Chip on the Island, São Paulo / Porto Alegre, SBMicro / SBC (2005).

[53] A.J.G. Hey, editor, Feynman and Computation, Perseus Books, New York (1999).

[54] R. Eisberg, e R. Resnick, Quatum Physics, John Wiley & Sons, New York (1985).

[55] H. C. de Biagi, Modelagem de mecanismos de transporte de carga em estruturas nanoeletrônicas, com o emprego de computação evolutiva, Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Engenharia de Redes de Comunicação) - Universidade de Brasília, orientador: Jose Camargo da Costa (2005).

[56] A. Calmon, J. C. da Costa, M. V. Batistuta, Efficient simulation of single-electron dynamics in coupled quantum dots, VI Fórum de Estudantes em Microeletrônica - SFORUM 2006, Ouro Preto - MG. Proceedings of the SFORUM 2006, Sao Paulo e Porto Alegre, SBMicro & SBC (2006).

[57] T. Bäck, U. Hammel, e H. -P. Schwefel, Evolutionary computation: comments on the history and current state, IEEE Transactions on Evolutionary Computation, VOL.1, NO.1, Abril (1997).

APÊNDICE-A PROGRAMAS DE SIMULAÇÃO

A.1 – INTRODUÇÃO

Neste apêndice serão apresentados os programas MATLAB usados nas simulações numéricas da dinâmica de transporte de elétrons em estruturas de poços quânticos acoplados. Será apresentado um fluxograma (Figura-A.1) representativo dos processos gerais da simulação, além das listagens comentadas dos programas.

Duas categorias de programas MATLAB foram usadas. A primeira, representada pela listagem celula.m, destina-se a simulação de uma única célula com dois pontos quânticos acoplados, e um elétron. A segunda, representada pela listagem celulas.m, destina-se a simulação de um par de células com dois pontos quânticos acoplados, e com um elétron em cada uma.

Também serão apresentados resultados na forma de gráficos, onde são plotados alguns dos principais parâmetros de interesse, tais como:

- A evolução das Densidades de Carga e dos Potenciais, em cada célula.

- A Densidade de Corrente de Tunelamento e a Energia Total em função do tempo

A.2 - FLUXOGRAMA

Nos programas MATLAB usados, a primeira etapa do processo refere-se a inicialização das constantes, matrizes e variáveis em geral. Várias constantes físicas são usadas, tais como a carga fundamental do elétron e a constante de Planck, representadas no sistema métrico internacional.

Na etapa seguinte é calculada a função de onda inicial, em cada ponto do *array* representado na célula. Sem uma inicialização correta a dinâmica resultante não será representativa dos processos que se deseja simular. Na maioria das simulações usou-se o artifício de iniciar a função de onda (wavefunction) com uma sobreposição do estado de energia fundamental e o próximo estado de energia da célula. Isto tem algumas vantagens, como uma distribuição de densidade de carga que se concentra inicialmente em um dos lados da célula.

Devido ao fato de que não há conservação de carga perfeita para o algoritmo utilizado, foi necessário incluir uma função de onda auxiliar, cujo formato está sempre sendo normalizado, de forma a possibilitar o cálculo correto das densidades de carga e de corrente, que definem o estado da célula, e dos potenciais presentes nas células.

Uma vez calculados os parâmetros necessários em cada iteração, as funções de onda são atualizadas. Primeiro a componente real X, e depois a componente imaginária Y.

Em seguida são calculadas e totalizadas as energias em cada célula, e todo o processo é repetido, até que o contador indique um limite, fazendo com que o programa encerre e os resultados sejam armazenados para pós-processamento.

Todos os programas usados apresentam em tempo real a evolução no tempo da densidade de carga e dos potenciais, em cada célula. Os gráficos da energia total e da densidade de corrente podem ser obtidos posteriormente ao encerramento dos programas, pois são armazenados em memória.

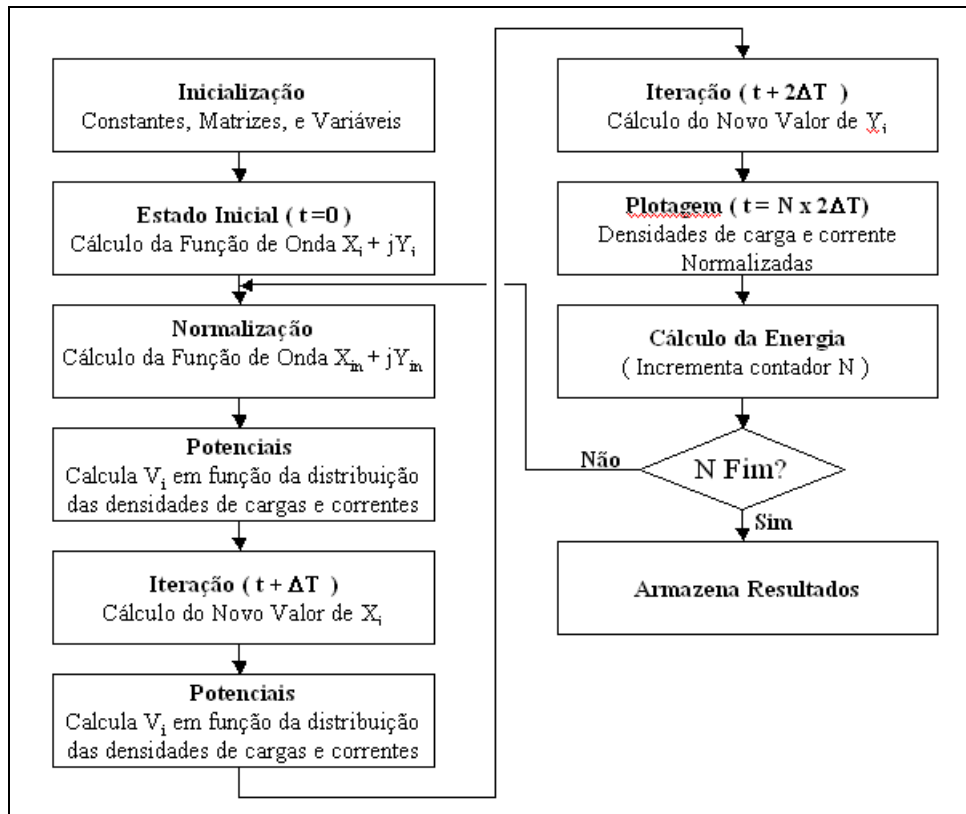


Fig.A.1 – Fluxograma Básico

A.3 – LISTAGEM DO CÓDIGO COMENTADA

A seguir são apresentadas as listagens completas dos programas MATLAB celula.m e celulas.m, que simulam uma única célula e um par de células acopladas, respectivamente. Os comentários ao longo do programa são encabeçados pelo símbolo “%”, indicando que esta linha contém apenas texto, e não é executada.

A.3.1 – Célula Única com Dois Pontos Quânticos Acoplados (celula.m)

```
%celula.m
%Simulação de uma única célula-a

clear
home
tic

%Constantes
m = 9.110e-31; %Massa Efetiva do Elétron [Kg]
q = 1.602e-19; %Carga Fundamental [C]
h = 6.626e-34; %Constante de Plank [J.s]
h_ = h/(2*pi); %Constante de Plank [J.s]
c = 3e8; %Velocidade da Luz [m/s]
L = 10e-9; %Comprimento total = 10nm

P = 3e-2; %Polarização [Joule/coulombs]

A = (L/2)^2; %Seção de área da célula [m^2]

mi0 = 1.25e-6; %permeabilidade magnética do vácuo [H/m]
e0 = 8.854e-12; %permissividade elétrica do vácuo [F/m]

c2 = 0; %contador

Ro = 0.5e12 * A; %Resistividade Total usada [ohms.m],Ro = 1.25e-5 ohm.m
```

$N = 40$; %Número de Células do Array.

$dx = L/(N-1)$; %Incremento espacial [m]

$dt = dx/c$; %Incremento temporal [s]

$dt = 1.0940e-016$; %Incremento no tempo [s]

%constantes auxiliares

$\alpha = \hbar/(2*m)$;

$\beta = -2/\hbar$;

tempo = 0; %Marcador de tempo

conta = 0; %Contador

%Inicialização de valores para a deriva da carga total

%(Critério de conservação de carga)

mincarga_a = 1;

maxcarga_a = 1;

%Define os valores do array-x (posição)

$x = 0:dx:L$;

$tam = \text{length}(x)$; %são iguais para células a e b

%Inicialização

$E1 = (\pi^2)*(\hbar^2)/(2*m*(L^2))$; %Energia fundamental do poço infinito

$Xa = 0*x$; %psi real de a

$Ya = 0*x$; %psi imaginário de a

$Xan = 0*x$; %psi real de a, normalizado

$Yan = 0*x$; %psi imaginário de a, normalizado

$na = 0*x$; %densidade de probabilidade em a

%Derivadas

D2Xa = 0*x;

DXa = 0*x;

D2Ya = 0*x;

DYa = 0*x;

Ja = 0*x; %densidade de corrente

Ea = 0*x; %campo elétrico

Va = 0*x; %energia potencial

V1a = 0*x; %poço (Joules)

V2a = 0*x; %efeito capacitância (Joules)

V3a = 0*x; %rampa (Joules)

TT = 0*(1:720); %array-tempo

JBa = 0*(1:720); %Densidade de corrente na barreira

Carga_a = 0*(1:720); %Carga total

%Cargas nos poços

cla = 0*(1:720);

cra = 0*(1:720);

%Definição dos Poços

V1a(1:tam) = 7 * E1;

V1a(10:18) = 0;

V1a(23:31) = 0;

%Inicialização de psi

%Sobreposição de níveis de energia E1 e E2 (Não-Estacionário)

psi1 = (h_*pi*pi)/(2*L*L*m);

```

psi2 = (2*h_*pi*pi)/(L*L*m);
%p/ t = 0
Xa = (1/sqrt(L)) * ( sin((pi/L)*x) + sin((2*pi/L)*x) );

%p/ t = dt
Ya = (1/sqrt(L)) * (-sin(psi1*(dt))*sin((pi/L)*x) + -sin(psi2*(dt))*sin((2*pi/L)*x));

%Carga OK?
sum(Ya.^2 + Xa.^2)/3.9e9

%Normalização Inicial (só para garantir)
KNa = 1/sqrt(sum(Ya.^2 + Xa.^2)/3.9e9);
Ya = KNa * Ya;
Xa = KNa * Xa;

%Calcula a evolução das funções de onda
conta = 0;
c1=0;
mE = 0; %Valor máximo do campo E
mV = 0; %valor máximo do potencial V
mJ = 0; %Valor máximo da densidade de corrente J

%INÍCIO DO LOOP DA SIMULAÇÃO
while (c1<720) %Fixa número de iterações, típico=360

    %Armazena Psi Normalizado
    Xa1n = Xan;
    Ya1n = Xan;

    %Normalização
    KNa = 1/sqrt(sum(Ya.^2 + Xa.^2)/3.9e9);
    Yan = KNa * Ya;
    Xan = KNa * Xa;

```

```

%Cálculo de Ja e Jb
DXa = [0 diff(Xan)];
DYa = [0 diff(Yan)];

Ja = -(q*h/(m*A*dx))*(DXa.*Yan - DYa.*Xan); %[A/m^2]
mJ = max(abs(Ja));

%Cálculo de Ea
Ea = Ja * Ro; %[V/m]

mE = max(abs(Ea)); %valor máximo para plotagem

%Calculo de V2 (capacitância)
na = (Xan.^2 + Yan.^2);

c2 = c2 + 1; %incrementa contador

carga1a = - q * sum(na(10:18)) * dx; %poço1a
carga2a = - q * sum(na(23:31)) * dx; %poço2a

V2a(1:18) = P * carga1a; %[Joules]
V2a(23:40) = P * carga2a; %[Joules]

%Cálculo de V[K]

%Integração numérica para cálculo de Va e Vb
V4a = dx * cumsum(Ea) * q; %[Joules]

%Ajuste dos Potenciais
%LAPLACE
V3a(23:31) = V3a(27);
V3a(10:18) = V3a(14);
V3a(1:10) = linspace(V3a(1),V3a(10),10);

```



```
V3a(18:23) = linspace(V3a(18),V3a(23),6);
V3a(31:40) = linspace(V3a(31),V3a(40),10);
```

```
Va = V4a + V1a + V2a + V3a;
```

```
%Ajuste Va
```

```
Va = Va - min(Va);
```

```
mV = max(abs(Va)); %valor máximo de Va para plotagem
```

```
%Cálculo de X
```

```
D2Ya = [0 diff(Ya,2) 0];
```

```
Xa1 = Xa; %Armazena
```

```
Xa = Xa - (alfa*(dt/(dx^2))*(D2Ya)+ beta*dt*Va.*Ya); %iteração em X
```

```
conta = conta + 1; %incrementa contador
```

```
%Cálculo de Ja
```

```
DXa = [0 diff(Xan)];
```

```
DYa = [0 diff(Yan)];
```

```
Ja = -(q*h_/(m*A*dx))*(DXa.*Yan - DYa.*Xan); %[A/m^2]
```

```
mJ = max(abs(Ja)); %valor máximo de Ja para plotagem
```

```
%Cálculo de Ea
```

```
Ea = Ja * Ro; %[V/m]
```

```
mE = max(abs(Ea)); %valor máximo de Ea para plotagem
```

```
%Calculo de V2 (efeito da capacitância)
```

```
na = (Xan.^2 + Yan.^2);
```

```
c2 = c2 + 1; %incrementa contador
```

```
carga1a = - q * sum(na(10:18)) * dx; %poço1a
```

```
carga2a = - q * sum(na(23:31)) * dx; %poço2a
```

```
V2a(10:18) = P * carga1a; %[Joules]
```

```
V2a(23:31) = P * carga2a; %[Joules]
```

```
%Cálculo de V[K]
```

```
%Integração numérica para cálculo de Va
```

```
V4a = dx * cumsum(Ea) * q; %[Joules]
```

```
%Ajuste dos Potenciais
```

```
%LAPLACE
```

```
V3a(23:31) = V3a(27);
```

```
V3a(10:18) = V3a(14);
```

```
V3a(1:10) = linspace(V3a(1),V3a(10),10);
```

```
V3a(18:23) = linspace(V3a(18),V3a(23),6);
```

```
V3a(31:40) = linspace(V3a(31),V3a(40),10);
```

```
Va = V4a + V1a + V2a + V3a;
```

```
%Ajuste Va
```

```
Va = Va - min(Va);
```

```
mV = max(abs(Va));
```

```
%Calculo de Y
```

```
D2Xa = [0 diff(Xa,2) 0];
```

```
Ya1 = Ya; %Armazena
```

```
Ya = Ya + (alfa*(dt/(dx^2))*(D2Xa)+ beta*dt*Va.*Xa); %iteração Y
```

```
conta = conta + 1; %incrementa contador
```

```
if(conta == 500) %condição para plotagem e armazenamento de valores
```

```

%rampa depois de 180
if c1 > 180
    V3a = ((c1-180)/180)*linspace(1e-20,0,40); %[J]
end

if c1 > 360
    V3a = ((720 - c1)/360)*linspace(1e-20,0,40); %[J]
end

%rampa
%if c1 <= 180
%    V3a = (c1/180)*linspace(1e-20,0,40); %[J]
%end

%if c1 > 180
%    V3a = ((360 - c1)/180)*linspace(1e-20,0,40); %[J]
%end

qra = - q * sum(na(21:40)) * dx; %poço2a
qla = - q * sum(na(1:20)) * dx; %poço2a

%PLOTAGENS
plot(x,1e-7 *(Xan.^2 + Yan.^2),'k'); %Plota densidade normalizada
hold on;
axis([0 L -10 100]); %Define Eixos
plot(x, (1e3*1/1.602e-19)*Va,'k'); %Plota Potencial [meV]
hold off

drawnow; %Força desenho do gráfico em tempo real

conta = 0; %zera contador
c1 = c1 + 1; %incrementa contador

TT(c1) = tempo; %Armazena base de tempo

```

```

JBa(c1) = Ja(20); %Armazena corrente na barreira da célula-a

%Registro da deriva da carga total não normalizada
if(mincarga_a >= Carga_a(c1))
    mincarga_a = Carga_a(c1);
end

if(maxcarga_a <= Carga_a(c1))
    maxcarga_a = Carga_a(c1);
end

cla(c1) = q1a; %Carga a esquerda
cra(c1) = q1a; %Carga a direita

%Cálculo da Energia
DTXa = (Xa - Xa1)/(2*dt);
DTYa = (Ya - Ya1)/(2*dt);
ETa(c1) = - h_ * sum(Xa.*DTYa - Ya.*DTXa)*dx; %Energia total

end;

tempo = tempo + 2*dt; %incremento do tempo

end;

%Imprime valores:
maxcarga_a
mincarga_a

toc

%Plotagem Final
figure;

```

```

axes('FontSize',14);
axis([0 L -10 100]); %Define Eixos
hold on;
plot(x,1e-7 *(Xan.^2 + Yan.^2),'k'); %Plota densidade normalizada
plot(x, (1e3*1/1.602e-19)*Va,'k'); %Plota Potencial [meV]
ylabel('Densidade [u.a.] e Potencial [meV]');
xlabel('Posição (m)');
hold off

```

%RECURSOS PARA PLOTAGEM

```

%Usar: plot(TT,cla,TT,cra); para plotar carga.
%Usar: plot(TT,cla<cra); para plotar critério de estado.
%Usar: plot(TT,ETa/1.602e-19);
%para plotar Energia[eV].
%Usar: plot(TT,ETa);
%para plotar Energia [J].
%Usar: plot(TT,JBa); para plotar corrente na barreira.
%Usar: axes('FontSize',14); para redefinir tamanho do font.
%Usar: ylabel('Densidade e Potencial (u.a.)');
%Usar: xlabel('Posição (m)');

```

A.3.2 – Par de Células com Dois Pontos Quânticos Acoplados (celulas.m)

%celulas.m

%Simulação de duas células acopladas

clear

home

tic

%Constantes

m = 9.110e-31; %Massa Efetiva do Elétron [Kg]

q = 1.602e-19; %Carga Fundamental [C]

h = 6.626e-34; %Constante de Plank [J.s]

h_ = h/(2*pi); %Constante de Plank [J.s]

c = 3e8; %Velocidade da Luz [m/s]

L = 10e-9; %Comprimento total = 10nm

A = (L/2)^2; %Seção de área da célula [m^2]

mi0 = 1.25e-6; %permeabilidade magnética do vácuo [H/m]

e0 = 8.854e-12; %permissividade elétrica do vácuo [F/m]

er = 4; %permissividade relativa;

%Temperatura

Temperatura = 0;%70; % [Kelvin]

Kbolt = 1.38e-23; % [Joule/K]

Ceff = 106e-21;

VK = sqrt(Kbolt*Temperatura/(er*Ceff))

%Nota: 0 a 0.2 volts (0 a 300K com Ceff = 106e-21F e er=1)

c2 = 0; %contador

%Matriz de Capacitâncias

C(1,1)= 0.1380;
C(1,2)= -0.0330;
C(1,3)= -0.0330;
C(1,4)= -0.0100;
C(2,1)= -0.0330;
C(2,2)= 0.1380;
C(2,3)= -0.0100;
C(2,4)= -0.0330;
C(3,1)= -0.0330;
C(3,2)= -0.0100;
C(3,3)= 0.1380;
C(3,4)= -0.0330;
C(4,1)= -0.0100;
C(4,2)= -0.0330;
C(4,3)= -0.0330;
C(4,4)= 0.1380;

%Ajuste das capacitâncias

C = er * 1.0e-018 * C;

%Ro = 0.5e12 * A; %Resistividade Total usada [ohms.m],Ro = 1.25e-5 ohm.m

Ro = 20 * 0.5e12 * A;

N = 40; %Número de Células do Array.

dx = L/(N-1); %Incremento espacial [m]

dt = 1.0940e-016; %Incremento de tempo

%Constantes auxiliares

alfa = h_/(2*m);

beta = -2/h_;

tempo = 0; %Marcador de tempo

conta = 0; %Contador

```

%Inicialização de valores para a deriva da carga total
%(Critério de conservação de carga)
mincarga_a = 1;
maxcarga_a = 1;
mincarga_b = 1;
maxcarga_b = 1;

%Define os valores do array-x (posição)
x = 0:dx:L;
tam = length(x); %são iguais para células a e b

%Inicialização
E1 = (pi^2)*(h_^2)/(2*m*(L^2)); %Energia fundamental do poço infinito

Xa = 0*x; %psi real de a
Xb = 0*x; %psi real de b
Ya = 0*x; %psi imaginário de a
Yb = 0*x; %psi imaginário de b

Xan = 0*x; %psi real de a
Xbn = 0*x; %psi real de b
Yan = 0*x; %psi imaginário de a
Ybn = 0*x; %psi imaginário de b

na = 0*x;
nb = 0*x;

%Derivadas
D2Xa = 0*x;
D2Xb = 0*x;
DXa = 0*x;
DXb = 0*x;

```


$$D2Y_a = 0 * x;$$

$$D2Y_b = 0 * x;$$

$$DY_a = 0 * x;$$

$$DY_b = 0 * x;$$

$$J_a = 0 * x; \% \text{densidade de corrente}$$

$$J_b = 0 * x; \% \text{densidade de corrente}$$

$$E_a = 0 * x; \% \text{campo elétrico}$$

$$E_b = 0 * x; \% \text{campo elétrico}$$

$$V_a = 0 * x; \% \text{energia potencial}$$

$$V_b = 0 * x; \% \text{energia potencial}$$

$$V1_a = 0 * x; \% \text{poço (Joules)}$$

$$V1_b = 0 * x; \% \text{poço (Joules)}$$

$$V2_a = 0 * x; \% \text{efeito capacitância (Joules)}$$

$$V2_b = 0 * x; \% \text{efeito capacitância (Joules)}$$

$$V3_a = 0 * x; \% \text{ruído-temperatura (Joules)}$$

$$V3_b = 0 * x; \% \text{ruído-temperatura (Joules)}$$

$$V4_a = 0 * x; \% \text{ruído-temperatura (Joules)}$$

$$V4_b = 0 * x; \% \text{ruído-temperatura (Joules)}$$

$$TT = 0 * (1:360); \% \text{array-tempo}$$

$$JB_a = 0 * (1:360); \% \text{Densidade de corrente na barreira}$$

$$JB_b = 0 * (1:360); \% \text{Densidade de corrente na barreira}$$

$$\text{Carga}_a = 0 * (1:360); \% \text{Carga total}$$

$$\text{Carga}_b = 0 * (1:360); \% \text{Carga total}$$

$\% \text{Cargas nos poços}$

$$cla = 0 * (1:360);$$

```
clb = 0*(1:360);
```

```
cra = 0*(1:360);
```

```
crb = 0*(1:360);
```

```
%Definição do Poço
```

```
V1a(1:tam) = 14 * E1;
```

```
V1b(1:tam) = 14 * E1;
```

```
V1a(10:18) = 0;
```

```
V1b(10:18) = 0;
```

```
V1a(23:31) = 0;
```

```
V1b(23:31) = 0;
```

```
%Inicialização de psi
```

```
%Sobreposição de níveis de energia E1 e E2 (Não-Estacionário)
```

```
psi1 = (h_ * pi * pi) / (2 * L * L * m);
```

```
psi2 = (2 * h_ * pi * pi) / (L * L * m);
```

```
%p/ t = 0
```

```
Xa = (1/sqrt(L)) * ( sin((pi/L)*x) + sin((2*pi/L)*x) );
```

```
Xb(1:tam) = Xa(tam - (1:tam) + 1);
```

```
%p/ t = dt
```

```
Ya = (1/sqrt(L)) * (-sin(psi1*(dt))*sin((pi/L)*x) + -sin(psi2*(dt))*sin((2*pi/L)*x));
```

```
Yb(1:tam) = Ya(tam - (1:tam) + 1);
```

```
%Carga OK?
```

```
sum(Ya.^2 + Xa.^2)/3.9e9
```

```
sum(Yb.^2 + Xb.^2)/3.9e9
```

```
%Normalização Inicial (só para garantir)
```

```
KNa = 1/sqrt(sum(Ya.^2 + Xa.^2)/3.9e9);
```

```
Ya = KNa * Ya;
```

```
Xa = KNa * Xa;
```

```
KNb = 1/sqrt(sum(Yb.^2 + Xb.^2)/3.9e9);
```

```
Yb = KNb * Yb;
```

$$X_b = K_{Nb} * X_b;$$

%Calcula a evolução das funções de onda

conta = 0;

c1=0;

mE = 0; %Valor máximo do campo E

mV = 0; %valor máximo do potencial V

mJ = 0; %Valor máximo da densidade de corrente J

while (c1<360) %Fixa iterações

%Normalização

Xa1n = Xan;

Ya1n = Xan;

Xb1n = Xbn;

Yb1n = Xbn;

KNa = 1/sqrt(sum(Ya.^2 + Xa.^2)/3.9e9);

Yan = KNa * Ya;

Xan = KNa * Xa;

KNb = 1/sqrt(sum(Yb.^2 + Xb.^2)/3.9e9);

Ybn = KNb * Yb;

Xbn = KNb * Xb;

%Cálculo de Ja e Jb

DXa = [0 diff(Xan)];

DYa = [0 diff(Yan)];

DXb = [0 diff(Xbn)];

DYb = [0 diff(Ybn)];

Ja = -(q*h_/(m*A*dx))*(DXa.*Yan - DYa.*Xan); %[A/m^2]

mJa = max(abs(Ja));

Jb = -(q*h_/(m*A*dx))*(DXb.*Ybn - DYb.*Xbn); %[A/m^2]

$$mJb = \max(\text{abs}(Jb));$$

$$mJ = \max(mJa, mJb);$$

%Cálculo de Ea e Eb

$$Ea = Ja * Ro; \%[V/m]$$

$$Eb = Jb * Ro; \%[V/m]$$

$$mEa = \max(\text{abs}(Ea));$$

$$mEb = \max(\text{abs}(Eb));$$

$$mE = \max(mEa, mEb);$$

%Calculo de V2 (capacitância)

$$na = (Xan.^2 + Yan.^2);$$

$$nb = (Xbn.^2 + Ybn.^2);$$

$$c2 = c2 + 1;$$

$$\text{carga1a} = -q * \text{sum}(na(10:18)) * dx; \%poço1a$$

$$\text{carga1b} = -q * \text{sum}(nb(10:18)) * dx; \%poço1b$$

$$\text{carga2a} = -q * \text{sum}(na(23:31)) * dx; \%poço2a$$

$$\text{carga2b} = -q * \text{sum}(nb(23:31)) * dx; \%poço2b$$

$$qc(1,1) = \text{carga1a};$$

$$qc(2,1) = \text{carga1b};$$

$$qc(3,1) = 0;$$

$$qc(4,1) = 0;$$

$$VC = C \setminus qc;$$

$$V2b(10:18) = -q * VC(3,1); \%[Joules]$$

$$V2b(23:31) = -q * VC(4,1); \%[Joules]$$

```
qc(1,1) = 0;
```

```
qc(2,1) = 0;
```

```
qc(3,1) = carga2a;
```

```
qc(4,1) = carga2b;
```

```
VC = C\qc;
```

```
V2a(10:18) = -q*VC(1,1); %[Joules]
```

```
V2a(23:31) = -q*VC(2,1); %[Joules]
```

```
%Calculo V3(Temperatura) aplicadas em a e b.
```

```
V3a(10:18) = q*VK*randn;
```

```
V3b(10:18) = q*VK*randn;
```

```
V3a(23:31) = q*VK*randn;
```

```
V3b(23:31) = q*VK*randn;
```

```
%Cálculo de V[K]
```

```
Va(1) = 0;
```

```
Vb(1) = 0;
```

```
%Integração numérica para cálculo de Va e Vb
```

```
V4a = dx * cumsum(Ea) * q; %[Joules]
```

```
V4b = dx * cumsum(Eb) * q; %[Joules]
```

```
%Ajuste dos Potenciais
```

```
V2a = V2a + V3a;
```

```
V2b = V2b + V3b;
```

```
V2a(31:40) = V2a(30); %[Joules]
```

```
V2b(31:40) = V2b(30); %[Joules]
```

```
V2a(1:9) = V2a(10); %[Joules]
```

```
V2b(1:9) = V2b(10); %[Joules]
```

```
V2a(19) = V2a(9); %[Joules]
```

```
V2b(19) = V2b(9); %[Joules]
```

```

V2a(22) = V2a(32); %[Joules]
V2b(22) = V2b(32); %[Joules]
Vca = linspace(V2a(19),V2a(22),4);
Vcb = linspace(V2b(19),V2b(22),4);
V2a(20) = Vca(2); %[Joules]
V2b(20) = Vcb(2); %[Joules]
V2a(21) = Vca(3); %[Joules]
V2b(21) = Vcb(3); %[Joules]

Va = V4a + V1a + V2a;
Vb = V4b + V1b + V2b;

%Ajuste Va
Va = Va - min(Va);

%Ajuste Vb
Vb = Vb - min(Vb);

mV = max(max(abs(Va)),max(abs(Vb)));

%Cálculo de X
D2Ya = [0 diff(Ya,2) 0];
D2Yb = [0 diff(Yb,2) 0];

Xa1 = Xa; %Armazena
Xa = Xa - (alfa*(dt/(dx^2))*(D2Ya)+ beta*dt*Va.*Ya);

Xb1 = Xb; %Armazena
Xb = Xb - (alfa*(dt/(dx^2))*(D2Yb)+ beta*dt*Vb.*Yb);

conta = conta + 1;

%Cálculo de Ja e Jb
DXa = [0 diff(Xan)];

```

DYa = [0 diff(Yan)];

DXb = [0 diff(Xbn)];

DYb = [0 diff(Ybn)];

Ja = $-(q \cdot h / (m \cdot A \cdot dx)) \cdot (DXa \cdot Yan - DYa \cdot Xan)$; %[A/m²]

mJa = max(abs(Ja));

Jb = $-(q \cdot h / (m \cdot A \cdot dx)) \cdot (DXb \cdot Ybn - DYb \cdot Xbn)$; %[A/m²]

mJb = max(abs(Jb));

mJ = max(mJa, mJb);

%Cálculo de Ea e Eb

Ea = Ja * Ro; %[V/m]

Eb = Jb * Ro; %[V/m]

mEa = max(abs(Ea));

mEb = max(abs(Eb));

mE = max(mEa, mEb);

%Calculo de V2 (capacitância)

na = $(Xan.^2 + Yan.^2)$;

nb = $(Xbn.^2 + Ybn.^2)$;

c2 = c2 + 1;

carga1a = $-q \cdot \text{sum}(na(10:18)) \cdot dx$; %poço1a

carga1b = $-q \cdot \text{sum}(nb(10:18)) \cdot dx$; %poço1b

carga2a = $-q \cdot \text{sum}(na(23:31)) \cdot dx$; %poço2a

carga2b = $-q \cdot \text{sum}(nb(23:31)) \cdot dx$; %poço2b

qc(1,1) = carga1a;

qc(2,1) = carga1b;

qc(3,1) = 0;

qc(4,1) = 0;

VC = C\qc;

V2b(10:18) = -q*VC(3,1); %[Joules]

V2b(23:31) = -q*VC(4,1); %[Joules]

qc(1,1) = 0;

qc(2,1) = 0;

qc(3,1) = carga2a;

qc(4,1) = carga2b;

VC = C\qc;

V2a(10:18) = -q*VC(1,1); %[Joules]

V2a(23:31) = -q*VC(2,1); %[Joules]

%Calculo V3(Temperatura) aplicadas em a e b.

V3a(10:18) = q*VK*randn;

V3b(10:18) = q*VK*randn;

V3a(23:31) = q*VK*randn;

V3b(23:31) = q*VK*randn;

%Cálculo de V[K]

%Integração numérica para cálculo de Va e Vb

V4a = dx * cumsum(Ea) * q; %[Joules]

V4b = dx * cumsum(Eb) * q; %[Joules]

%Ajuste dos Potenciais

V2a = V2a + V3a;


```

V2b = V2b + V3b;
V2a(31:40) = V2a(30); %[Joules]
V2b(31:40) = V2b(30); %[Joules]
V2a(1:9) = V2a(10); %[Joules]
V2b(1:9) = V2b(10); %[Joules]
V2a(19) = V2a(9); %[Joules]
V2b(19) = V2b(9); %[Joules]
V2a(22) = V2a(32); %[Joules]
V2b(22) = V2b(32); %[Joules]
Vca = linspace(V2a(19),V2a(22),4);
Vcb = linspace(V2b(19),V2b(22),4);
V2a(20) = Vca(2); %[Joules]
V2b(20) = Vcb(2); %[Joules]
V2a(21) = Vca(3); %[Joules]
V2b(21) = Vcb(3); %[Joules]

```

```

Va = V4a + V1a + V2a;
Vb = V4b + V1b + V2b;

```

```

%Ajuste Va

```

```

Va = Va - min(Va);

```

```

%Ajuste Vb

```

```

Vb = Vb - min(Vb);

```

```

mV = max(max(abs(Va)),max(abs(Vb)));

```

```

%Calculo de Y

```

```

D2Xa = [0 diff(Xa,2) 0];

```

```

D2Xb = [0 diff(Xb,2) 0];

```

```

Ya1 = Ya;

```

```

Ya = Ya + (alfa*(dt/(dx^2))*(D2Xa)+ beta*dt*Va.*Xa);

```

```

Yb1 = Yb;
Yb = Yb + (alfa*(dt/(dx^2))*(D2Xb)+ beta*dt*Vb.*Xb);

conta = conta + 1;

if(conta == 500)

qra = - q * sum(na(21:40)) * dx; %poço2a
qrb = - q * sum(nb(21:40)) * dx; %poço2b

qla = - q * sum(na(1:20)) * dx; %poço2a
qlb = - q * sum(nb(1:20)) * dx; %poço2b

plot(x,1e-7 *(Xan.^2 + Yan.^2),'k'); %Plota densidade célula-a
hold on;
plot(x,1e-7 *(Xbn.^2 + Ybn.^2),'k--'); %Plota densidade célula-b
plot(x, 1e3*(1/1.602e-19)*Va,'k');
plot(x, 1e3*(1/1.602e-19)*Vb,'k--');
axis([0 L -10 100]);
hold off

drawnow; %Força desenho do gráfico

conta = 0;
c1 = c1 + 1;

%Armazena variáveis
TT(c1) = tempo;
JBa(c1) = Ja(20); %corrente na barreira da célula-a
JBb(c1) = Jb(20); %corrente na barreira da célula-b
Carga_a(c1) = dx * sum(Xan.^2 + Yan.^2);
Carga_b(c1) = dx * sum(Xbn.^2 + Ybn.^2);

%Registro da deriva da carga total

```

```

if(mincarga_a >= Carga_a(c1))
    mincarga_a = Carga_a(c1);
end

```

```

if(mincarga_b >= Carga_b(c1))
    mincarga_b = Carga_b(c1);
end

```

```

if(maxcarga_a <= Carga_a(c1))
    maxcarga_a = Carga_a(c1);
end

```

```

if(maxcarga_b <= Carga_b(c1))
    maxcarga_b = Carga_b(c1);
end

```

%Cargas a direita e a esquerda das células a e b

```

cla(c1) = qla;
clb(c1) = qlb;
cra(c1) = qra;
crb(c1) = qrb;

```

%Cálculo da Energia

```

DTXa = (Xa - Xa1)/(2*dt);
DTYa = (Ya - Ya1)/(2*dt);
DTXb = (Xb - Xb1)/(2*dt);
DTYb = (Yb - Yb1)/(2*dt);
ETa(c1) = - h_ * sum(Xa.*DTYa - Ya.*DTXa)*dx; %Energia total
ETb(c1) = - h_ * sum(Xb.*DTYb - Yb.*DTXb)*dx; %Energia total

```

```

end;

```

```

tempo = tempo + 2*dt; %incremento do tempo

```

```
end;
```

```
%Imprime valores:
```

```
maxcarga_a
```

```
maxcarga_b
```

```
mincarga_a
```

```
mincarga_b
```

```
toc
```

```
%Recursos:
```

```
%Usar: plot(TT,cla,TT,clb,TT,cra,TT,crb); para plotar carga.
```

```
%Usar: plot(TT,cla<cra,TT,crb<clb); para plotar critério de estado.
```

```
%Usar: plot(TT,1e3*ETa/1.602e-19,TT,1e3*ETb/1.602e-19); [eV]
```

```
%Usar: plot(TT,JBa,TT,JBb); para plotar corrente nas barreiras.
```

```
%Plotagem Final
```

```
figure;
```

```
axes('FontSize',14);
```

```
axis([0 L -10 100]); %Define Eixos
```

```
hold on;
```

```
%Plota densidades normalizadas
```

```
plot(x,1e-7*(Xan.^2 + Yan.^2),'k',x,1e-7*(Xbn.^2 + Ybn.^2),'k--');
```

```
plot(x, (1e3*1/1.602e-19)*Va,'k',x,(1e3*1/1.602e-19)*Vb,'k--'); %Plota Potencial [meV]
```

```
ylabel('Densidade [u.a.] e Potencial [meV]');
```

```
xlabel('Posição (m)');
```

```
hold off
```

A.4 – RESULTADOS GRÁFICOS DAS SIMULAÇÕES

A seguir são apresentados alguns resultados de simulações na forma de gráficos. Os potenciais e a energia total estão plotados em meV. As densidades de carga estão em unidades arbitrárias. As densidades de corrente são plotadas em A/m^2 .

A.4.1 – Célula Única com Dois Pontos Quânticos Acoplados

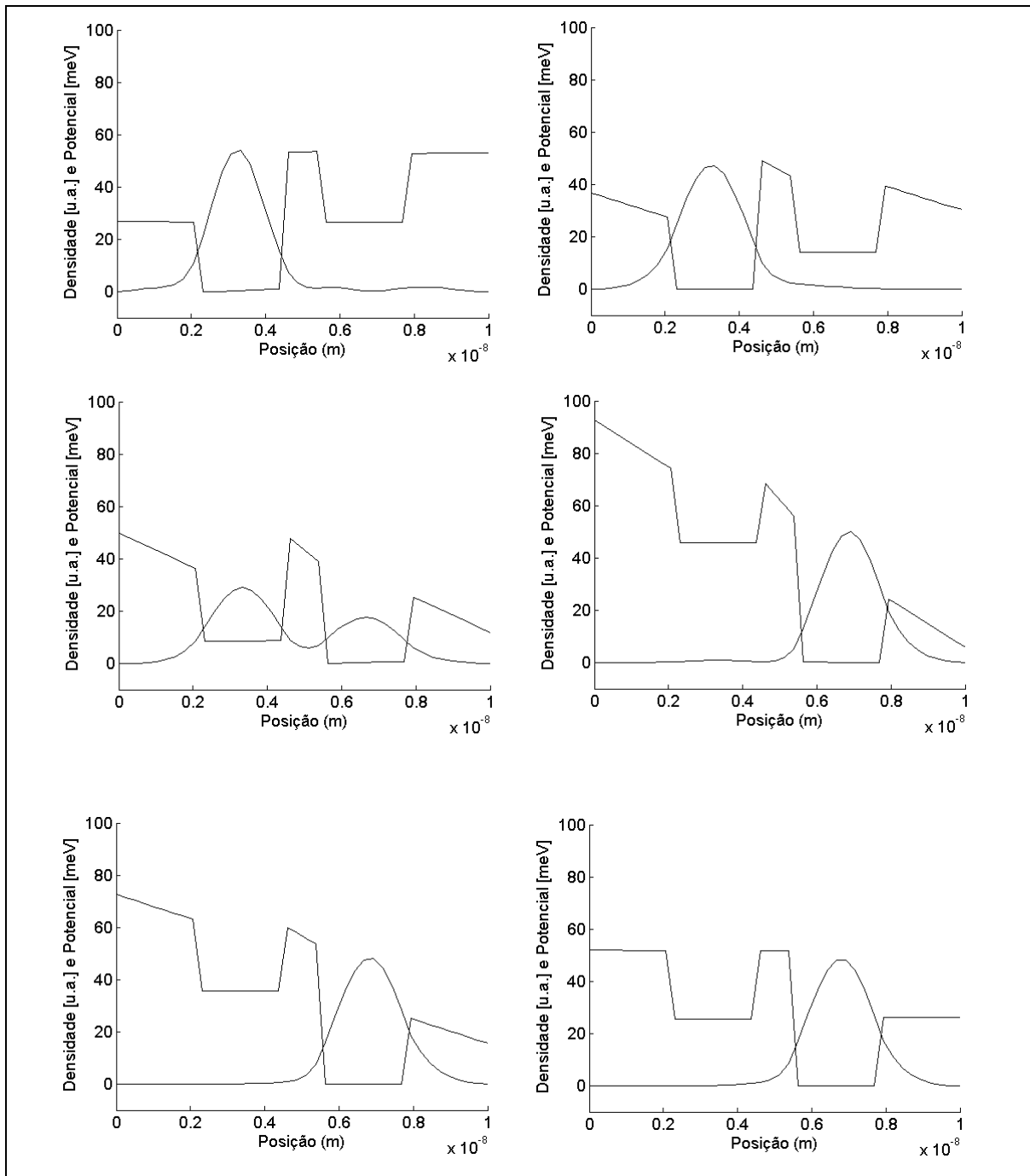


Fig.A.2 – Sequência de Evolução – Célula com dois pontos quânticos

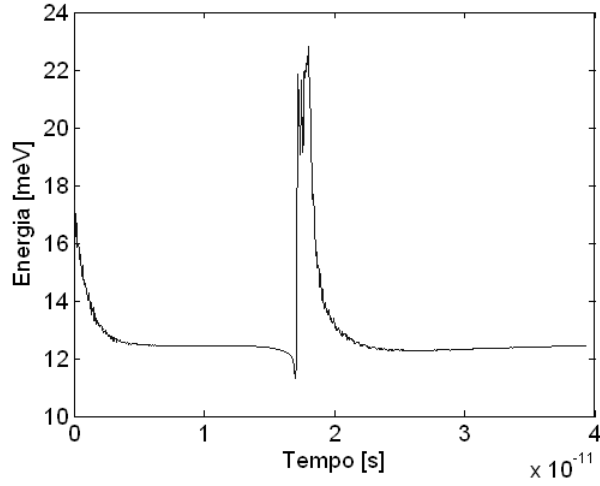


Fig.A.3 – Evolução da Energia Total – Célula com dois pontos quânticos

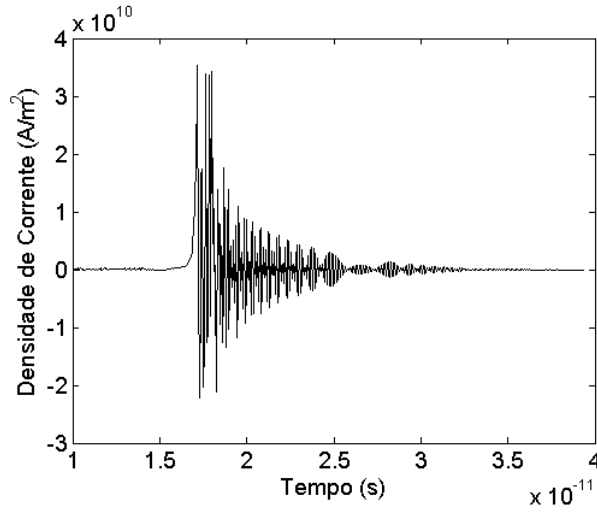


Fig.A.4 – Evolução da Densidade de Corrente – Célula com dois pontos quânticos

A.4.2 – Par de Células com Dois Pontos Quânticos Acoplados

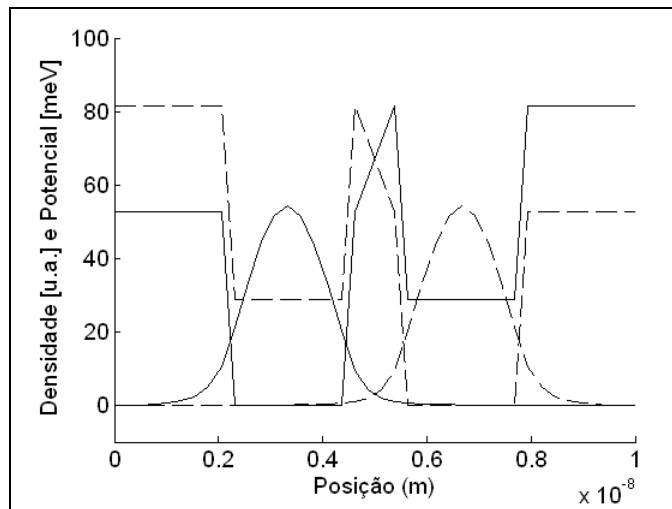


Fig.A.5 – Estado Estacionário – Duas Células Acopladas (0 K)

Dissipative transport dynamics in coupled quantum dots

M. V. Batistuta,^{a)} M. F. Stella, H. C. de Biagi, and J. C. da Costa
Departamento de Engenharia Eletrica, Universidade de Brasilia, P.O. Box 4386, Brasilia-DF 70904-970, Brazil

(Received 5 August 2006; accepted 17 November 2006; published online 24 January 2007)

A linear one-dimensional dissipative model is proposed and applied in obtaining numerical simulation results for coupled double quantum dot cells, for single-electron transport dynamics on each cell. Field coupling between cells is modeled simply from a matrix of mutual capacitances. Bistability with only one excess electron on each cell, in a pair of coupled double-dot cells, is demonstrated. Behavior prediction and performance evaluation, for applications such as computational system implementation, are made possible. It is understood from the simulations that balanced dissipation rates are essential for the implementation of optimized single-electron devices, with short settling times. © 2007 American Institute of Physics. [DOI: 10.1063/1.2430787]

INTRODUCTION

As the next generations of integrated circuits are developed, proposals for working devices with nanoscale physical dimensions are emerging, which may enable higher integration scales. Single electronics has been proposed as an alternative to complementary metal oxide semiconductor (CMOS) technology, beyond its predicted performance limits,⁷ with devices such as coupled quantum wells (CQWs) and coupled quantum dots (CQDs).¹ These devices include Coulomb blockade effects and modulated tunneling transport phenomena. The design of high-density integrated circuits based on single-electron devices requires a detailed understanding of quantum transport phenomena, with the development of consistent models and robust numerical simulation strategies.

Lent *et al.*² have proposed a basic cell structure for the implementation of cellular automata, using coupled quantum dots, with four dots and two excess electrons. Two stable states are considered possible in such a cell, from the interaction of the electron pair. Double-dot cells have also been proposed,³ enabling bistability with just a single excess electron. Logic states can be attributed to such cells, from the electric charge distribution. An evolution of this scheme was also proposed in the form of laterally coupled double-dot single-electron cells, which form a binary wire or string, for implementing quantum dot cellular automata.⁶ In Fig. 1 the dark dot in the cell indicates where most of the charge is located.

This work aims to model the dynamical behavior of electron transport in mesoscopic structures, where a complete description of given system's state is obtained from the electronic charge and current density distribution probability, at a given moment, for a single electron in a single cell or for a reduced number of electrons in multiple coupled cells. From that point of view, consistent charge transport dynamics' model for coupled quantum wells, or dots, is desired in order to understand in detail the resulting overall behavior of any physical implementation.

This work presents a one-dimensional physical model, without the simplifications of an orthodox theory,¹ which has been guiding many of the developments in simulating and modeling of single electronics. That theory makes use of three following simplifying assumptions: the energy quantization is ignored, the tunneling time is zero, and cotunneling processes are not considered at all. The model presented in this work is one dimensional, based on Schrödinger's equation,⁸ for the dissipative dynamical behavior of single electrons in coupled quantum dots and in coupled quantum dot cells.

A numerical algorithm was developed for this one-dimensional model, so that the time evolution of charge and current probability densities in coupled quantum dot structures could be obtained, respecting the fundamental principles of charge and energy conservation.

That development resulted in a model for dissipative Ohmic behavior in mesoscopic coupled cell structures based primarily on the Caldeira-Leggett⁴ idea of a linear viscous friction coefficient associated with a quantum system. The model presented here includes a deceleration field, linearly proportional to the probability current density, acting directly on electron's dynamic damping behavior.

TRANSPORT DYNAMICS IN TWO COUPLED DOUBLE-DOT CELLS

Each double-dot cell has a single excess electron, which may tunnel through the barrier that exists between the pair of quantum dots, under the action of static and time-varying potentials. For each electron separate Schrödinger's equation is used. In the case of two coupled double-dot cells, two

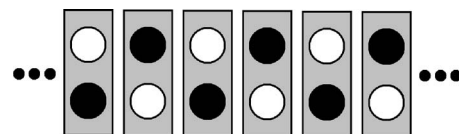


FIG. 1. Wire or string of laterally coupled double-dot cells.

^{a)}Electronic mail: mvbatist@terra.com.br

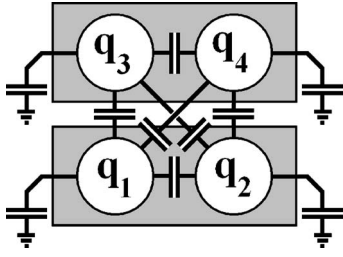


FIG. 2. Capacitances in a pair of coupled cells.

equations are necessary, as presented in Eqs. (1a) and (1b), where e is the fundamental electronic charge and m is the effective mass.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + eV_a(x,t) + S_a(x,t) \right] \Psi_a(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi_a(x,t)}{\partial t}, \quad (1a)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + eV_b(x,t) + S_b(x,t) \right] \Psi_b(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi_b(x,t)}{\partial t}. \quad (1b)$$

For simplification, the derivatives with respect to the y and z coordinates are considered to be equal to zero. In the coupled cell case, each electron has a separate time-varying wave function (Ψ_a and Ψ_b) in one dimension. Field coupling between these neighboring cells is modeled through effective capacitances, as presented in Fig. 2.

Charges q_1 and q_2 in the quantum dots of cell a and charges q_3 and q_4 in cell b will define additional potential differences that will be added to the total potential observed, due to the composition of materials present in the structure, which acts upon the excess electrons. Potential profiles in the cells, outside and between dots, are calculated from Laplace's equation. It is assumed that at any time most of the excess electronic charge is located inside one of the dots of each cell. In this way, there is no need to solve Poisson's equation.

Charge probability density distributions (ρ_a and ρ_b), at a given time, are calculated from the instant values of the wave functions, for each cell, from Eqs. (2a) and (2b).

$$\rho_a(x,t) = en_a(x,t) = e[\Psi_a(x,t)\Psi_a^*(x,t)], \quad (2a)$$

$$\rho_b(x,t) = en_b(x,t) = e[\Psi_b(x,t)\Psi_b^*(x,t)]. \quad (2b)$$

The total charge inside each dot, at a given time, is calculated for each cell from Eqs. (3a) and (3b). Integration of charge density distribution is carried out for each dot's domain in one dimension, where A is the effective cross-sectional area of the cell.

$$q_{ia}(t) = A \int_i \rho_a(x,t) dx, \quad (3a)$$

$$q_{ib}(t) = A \int_i \rho_b(x,t) dx. \quad (3b)$$

From the classical theory of electromagnetism, electric charges in conductors (defined as the total charge q_i in each of the quantum dots) and their potentials (V_i) are directly related by the definition of mutual capacitances (C_{ij}) between any pair of conductors in a particular structure. In Eq. (4), V_0 is the reference potential, usually having a zero value. C_{i0} is defined as dot's capacitance to reference ground.

$$C_{i0}(V_i - V_0) + \sum_{j \neq 0} C_{ij}(V_i - V_j) = q_i. \quad (4)$$

In general, and for a very simple case of two coupled double quantum dot cells (Fig. 2), Eq. (4) can be expressed in matrix form, as shown in Eq. (5). Constants c_{ij} are the elements of this matrix, which couples charges and potentials observed on each of the dots, in both cells. In that matrix, $c_{ij} = c_{ji}$ due to symmetry.

$$\begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} & c_{24} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} & c_{34} \\ c_{41} & c_{42} & c_{43} & c_{44} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \\ V_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \\ q_4 \end{bmatrix}. \quad (5)$$

The time evolution of the probability current densities (J_{xa} and J_{xb}) in each cell is calculated from Eqs. (6a) and (6b), directly from the wave functions of each excess electron.

$$J_{xa}(x,t) = -\frac{ie\hbar}{2m} \left[\left(\frac{\partial \Psi_a}{\partial x} \right)^* \Psi_a - \Psi_a^* \left(\frac{\partial \Psi_a}{\partial x} \right) \right], \quad (6a)$$

$$J_{xb}(x,t) = -\frac{ie\hbar}{2m} \left[\left(\frac{\partial \Psi_b}{\partial x} \right)^* \Psi_b - \Psi_b^* \left(\frac{\partial \Psi_b}{\partial x} \right) \right]. \quad (6b)$$

Dissipation of kinetic energy, in this model, is the result of an Ohmic process, which is believed to be consistent with the size and time scales involved here.⁴ An electric deceleration field is calculated, with Eqs. (7a) and (7b), from the probability current densities observed on each cell and the effective conductivity of the material (σ_a and σ_b).

$$E_{\Omega a}(x,t) = \frac{J_{xa}(x,t)}{\sigma_a(x)}, \quad (7a)$$

$$E_{\Omega b}(x,t) = \frac{J_{xb}(x,t)}{\sigma_b(x)}. \quad (7b)$$

In this work S_a and S_b are time-varying damping potentials imposed to electrons' wave functions in order to drive them to a stationary, fundamental energy state.

$$S_a(x,t) = e \int_0^x E_{\Omega a}(u,t) du, \quad (8a)$$

$$S_b(x,t) = e \int_0^x E_{\Omega b}(u,t) du. \quad (8b)$$

NUMERICAL SIMULATION

A discrete update rule for one-dimensional Schrödinger's wave equation was implemented in a MATLAB program and is based on a technique developed by Fredkin

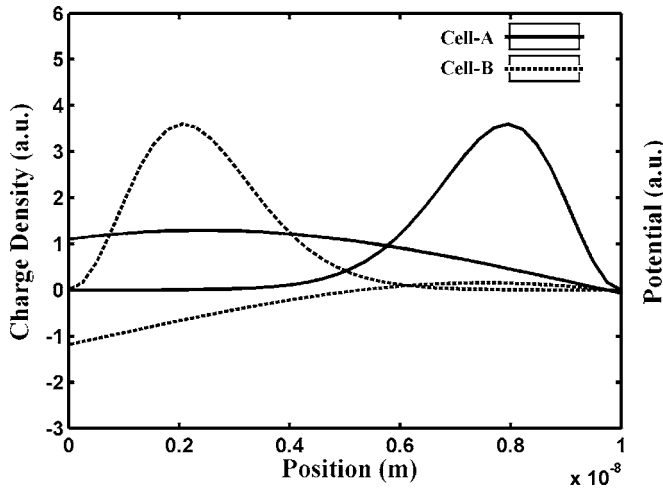


FIG. 3. Stationary state from charge repulsion.

and Barton in 1975, which is time reversible and also provides detailed energy conservation, as demonstrated by Feynman,⁵ for a nondissipative case. That same scheme has been adapted to dissipative cases and presented before for a single double-dot cell.³

The simple structure simulated in this work, as presented in Fig. 2, consists of a pair of double quantum dot cells coupled by effective capacitances between each dot and between every dot and a ground plane (conductive substrate). Each cell has a total length of 10 nm, with dots having 2 nm in diameter, and a tunneling barrier of 0.75 nm. The barrier height was chosen to have seven times the fundamental energy that an electron would have, confined to a 10 nm infinite potential well ($\sim 7 \times 0.0038$ eV). The cross-sectional area of each cell is defined to be 2.5×10^{-17} m².

In a first simulation the final probability charge distribution is obtained as shown in Fig. 3, for one of the two possible stationary states in a pair of cells, without quantum dots. Charge repulsion keeps the excess electrons in opposite sides of each cell. An Ohmic dissipation process forces the system from an arbitrarily chosen initial state to one of the two possible fundamental energy states.

A pair of quantum dots is included in each cell, represented by the one-dimensional wells. The wave functions for each excess electron, on each cell, are put initially in a self-consistent stationary fundamental state (~ 0.014 eV). The initial charge probability density functions can be observed in Fig. 4. Most of the fundamental electronic charge in cell a is in dot 1 (left), and most of the charge in cell b is in dot 4 (right). Almost no charge is present in dot 2 (cell a) and dot 3 (cell b), or outside the dots. The time-invariant potential profile observed by the excess electron, present in each cell, is the result of the choice of building materials. Next, a potential ramp is slowly applied to cell a, forcing a redistribution of probability charge density on both cells, as can be observed in Fig. 5. As the potential ramp slowly increases in magnitude, a tunneling process starts to occur, leaving the electrons inside each cell in a transitory state.

The damping potential, which here is Ohmic in nature, is not shown in Fig. 5 for the sake of clarity. However, that potential is present in all simulations, forcing the system to

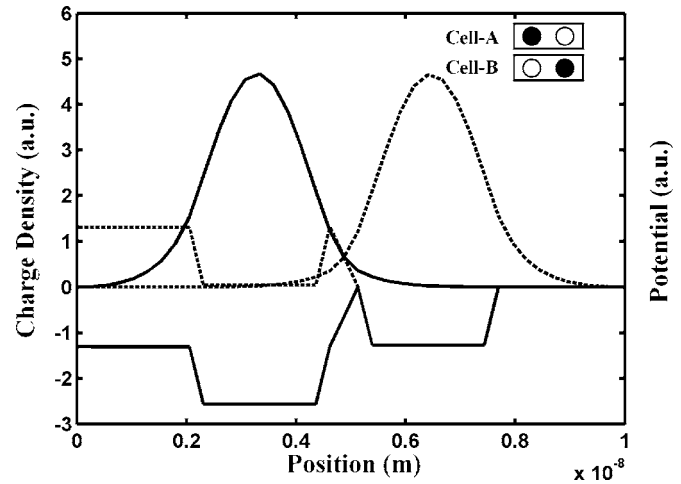


FIG. 4. Initial stationary state (10 nm cells).

minimize its total energy, and finally reducing the kinetic energy of each excess electron to zero. This will settle the wave functions to the other available stationary stable state, at the end of the process, when the potential ramp is slowly removed.

A superposition of states occurs during the forced transition as the ramp is applied. The electrons acquire some kinetic energy. The superposition of states generates an effective probability current density inside each cell. That current is progressively reduced due to the Ohmic dissipation process.

In Fig. 6 the potential ramp is being removed, and the inversion of state is clearly observed. Some of the electronic charge is still leaking to the right of dot 2 in cell a due to the presence of the potential ramp. Finally, the potential ramp is completely removed and the cell pair is now in the final opposite stationary state, as observed in Fig. 7.

The complete state transition dynamics can be closely and better observed from Fig. 8, which plots the probability current density versus time in the middle of the tunneling barrier. It is clearly seen that the tunneling events in both cells are highly correlated and are separated by a short time interval ($\sim 5 \times 10^{-13}$ s). Tunneling current's amplitude de-

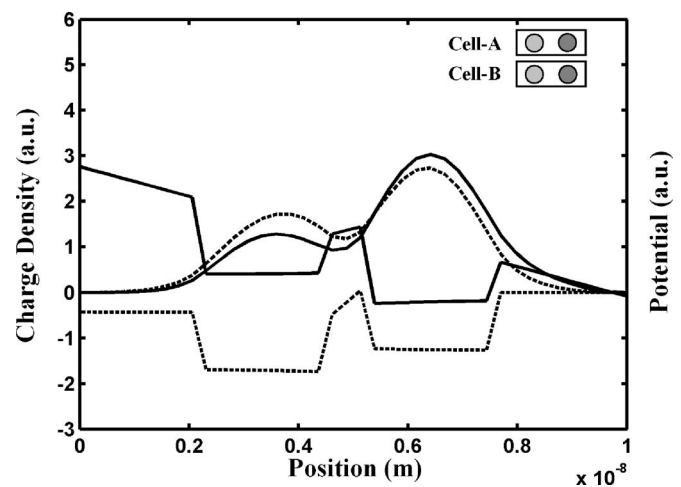


FIG. 5. Tunneling event (10 nm cells).

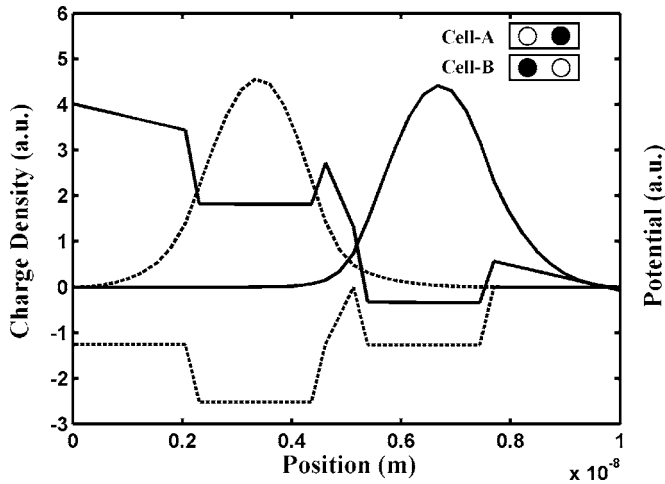


FIG. 6. Inversion of states (10 nm cells).

increases rapidly with time, and the complete transition may take just a few picoseconds, with an arbitrary choice for the value of effective conductivity in the cell. The same transition dynamics can be observed in Fig. 9, where total charge is plotted versus time for dot 1 (cell a) and dot 3 (cell b), which are both on the left side of each respective cell.

It is observed from Fig. 9 that the maximum value of total charge, in each dot, approaches the expected value of the fundamental electronic charge (1.602×10^{-19} C). Minimum charge values approach zero at the initial and final stationary states. Bistability is therefore clearly demonstrated.

In this simulation, a conductivity value of 8×10^4 S/m was used. This value was verified to be the best trade-off between overdamped and underdamped behaviors in that kind of cell.

CONCLUSION

In this work, a one-dimensional, single charge, linear transport dynamics model has been proposed for coupled quantum dots, which includes an Ohmic dissipation process.

The proposed one-dimensional model has been applied in obtaining a simple formulation for the behavior dynamics

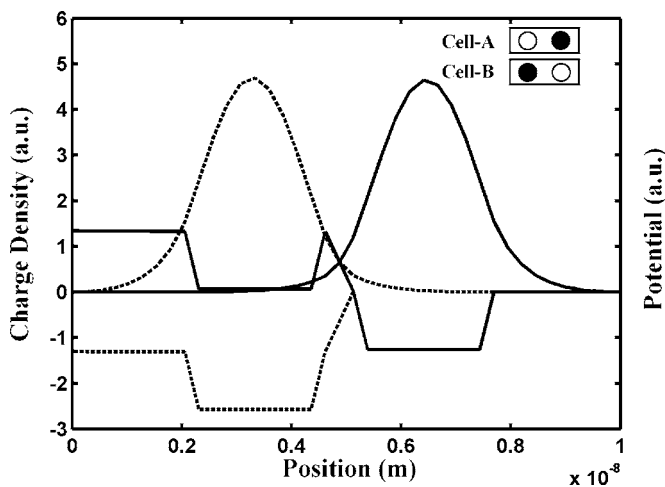
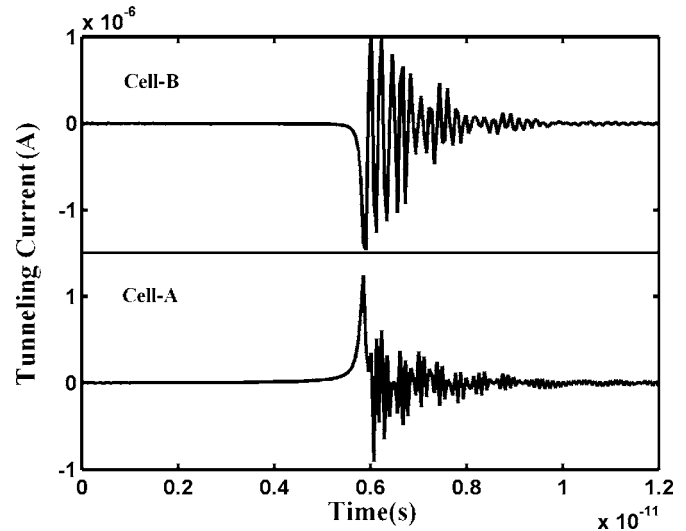


FIG. 7. Final stationary state (10 nm cells).

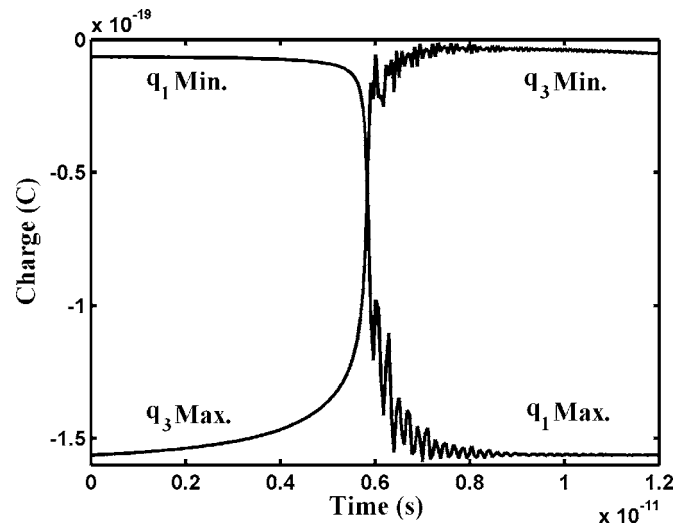
FIG. 8. State transition: charge (coulombs $\times 10^{-19}$) vs time ($s \times 10^{-11}$).

of coupled cells with pairs of quantum dots, using capacitive couplings, instead of solving Poisson's equation.

A numerical algorithm and methodology were implemented for the simulation of detailed state transition dynamics, represented by the time evolution of charge and current probability densities inside the cells.

With the present model and simulation technique, the settling time for a particular arrangement of a number of coupled quantum dot cells can be evaluated. This model allows the evaluation of device's dynamical behavior in relation to materials' properties. In that sense, it can be seen that the conductivity values play an important role in cell's dynamic behavior. The use of less conducting materials ($\sigma < 8 \times 10^4$ S/m) will result in an overdamped behavior, while highly conducting materials ($\sigma > 8 \times 10^4$ S/m) will result in an underdamped behavior.

In the near future, the refinement and application of the proposed model and simulation technique may be used to predict the dynamic behavior of coupled quantum dot cells in practical logic circuits and systems.

FIG. 9. State transition: tunneling current ($A \times 10^{-6}$) vs time ($s \times 10^{-11}$).

ACKNOWLEDGMENTS

The authors gratefully acknowledge CAPES-Brasil, CNPq-Brasil, and PADCT-Brasil for financial support.

¹G. Timp, *Nanotechnology* (Springer-Verlag, New York, 1999).

²C. S. Lent, P. D. Tougaw, and W. Porod, *Appl. Phys. Lett.* **62**, 714 (1993).

³M. V. Batistuta, M. F. Stella, H. Biagi, and J. C. da Costa, *Electrochemical Society Proceedings*, Proceedings of the 19th Symposium on Microelectronics Technology and Devices, SBMicro 2004, Porto de Galinhas, Brasil, 2004 (The Electrochemical Society, Pennington, NJ, 2004), PV 2004-

03, p. 151.

⁴A. O. Caldeira and A. J. Leggett, *Phys. Rev. Lett.* **46**, 4 (1981).

⁵*Feynman and Computation*, edited by A. J. G. Hey (Perseus Books, New York, 1999).

⁶A. O. Orlov, I. Amlani, G. Toth, C. S. Lent, G. H. Bernstein, and G. L. Snider, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 19 (1999).

⁷K. Walus and G. A. Jullien, *Proc. IEEE* **94**, 6 (2006).

⁸M. V. Batistuta, M. F. Stella, H. C. de Biagi, and J. C. da Costa, *IEEE Proceedings of NanoSingapore 2006* (IEEE, Piscataway, NJ, 2006), pp. 1–4.