

1

Introdução

1.1 Nanociência e nanotecnologia

A idéia de que a imensa variedade de matéria existente no universo pode ser reduzida a componentes mais simples já é conhecida há mais de 2500 anos, desde que os filósofos da Grécia antiga propuseram que todo corpo material era constituído de partículas indivisíveis a que chamavam de átomos. Nos dois últimos séculos foi demonstrada a existência de uma estrutura interna para os átomos. Estas estruturas mostraram ter uma íntima relação com certas propriedades atômicas como, por exemplo, a propriedade dos átomos de se ligarem para formarem moléculas e estruturas mais sofisticadas. Dentre estas estruturas destacamos as de escala nanoscópica, ou seja, estruturas cujas dimensões são da ordem de 10^{-9} metros. Por serem, em geral, constituídas de alguns poucos átomos, estruturas com estas dimensões não apresentam comportamento de natureza estatística e suas propriedades físicas devem ser estudadas com métodos baseados diretamente na mecânica quântica¹. O desenvolvimento desta teoria e o consequente avanço no sentido de melhor entender os fenômenos que ocorrem em escala nanoscópica levaram alguns cientistas a se perguntarem se seria de alguma forma possível manipular os processos que ocorrem nesta escala de modo que novos materiais, que não os encontrados na natureza, e com propriedades pertinentes do ponto de vista do desenvolvimento tecnológico, pudessem ser produzidos artificialmente^{2,5}. Esta possibilidade foi levantada pelo físico americano Richard Feynman em uma palestra intitulada 'Há muito espaço lá em baixo' apresentada em 1959 no Instituto de Física da Califórnia. Esta palestra marcou o início do que hoje se chama de nanociência e nanotecnologia. Nela Feynman sugeriu que num futuro não muito distante seria possível manipular os átomos¹ de forma direta e arranjá-los da maneira que bem se entendesse, desde que, é claro, as leis da física fossem respeitadas.

1.2 Análise e manipulação da matéria em escala nanoscópica. Microscópio de tunelamento e de força atômica

As previsões de Feynman começaram a se tornar realidade no início da década de 80 com o desenvolvimento dos chamados microscópicos

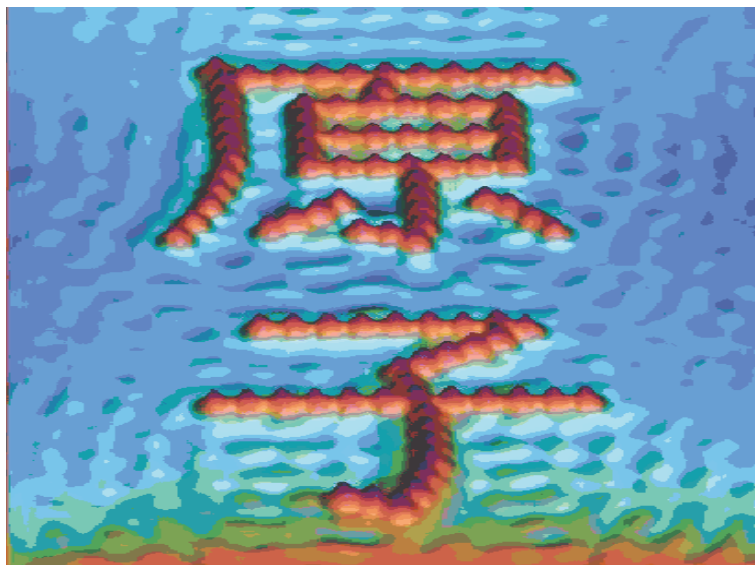


Figura 1.1: Átomos de Ferro sobre Cobre. (Fonte: IBM website)

de varredura por sonda, dentre os quais hoje se incluem o microscópio de tunelamento e o microscópio de força atômica. O primeiro, baseado no comportamento quântico dos elétrons de tunelarem por uma barreira de potencial maior que sua energia (efeito túnel), consiste de uma minúscula ponta feita de material condutor que percorre toda a superfície da amostra que se pretende analisar. A ponta e o substrato onde fica a amostra ficam ligados por um circuito. Aplica-se uma tensão elétrica no circuito e abaixa-se a ponta do microscópio até que fique a apenas alguns nanômetros da amostra. Alguns elétrons tunelam por esta pequena distância fechando o circuito entre a ponta e a amostra e criando uma pequena corrente da ordem de alguns poucos nanoampères. A variação desta corrente à medida que a agulha do microscópio vai “varrendo a amostra” produz uma imagem que permite uma visualização da natureza e da disposição dos átomos desta amostra. Na ponta de um microscópio de força atômica está acoplado um pequeno fragmento de diamante. Esta ponta vai contornando a topologia da amostra e formando imagens como no microscópio de tunelamento. Além de simplesmente ‘enxergar’ os átomos, estes microscópios são capazes de movê-los, arrancando-os de um lugar e colocando-os em outro. De fato isso pode ser conseguido aumentando-se a tensão elétrica entre a ponta e a amostra o suficiente para que um átomo seja arrancado da amostra e fique grudado na ponta e, em seguida, invertendo-se a polaridade da corrente. Ao ser invertida a polaridade da corrente o átomo volta com força para a amostra ficando nela encravado. Na figura (1.1), por exemplo, temos a palavra átomo escrita pela deposição de átomos de ferro sobre um substrato de cobre com o auxílio deste

tipo de técnica.

Além de métodos baseados na deposição lenta e controlada de átomos sobre uma superfície polida e regular, como na figura (1.1), outra maneira de se obter dispositivos em escala nanoscópica é utilizando os chamados métodos de litografia¹¹. Com este tipo de método o dispositivo nanoscópico, ao invés de ser obtido átomo à átomo, como num quebra cabeças, é obtido por sucessivas etapas de corrosões químicas seletivas e extremamente precisas numa amostra de material nanoscópico. O domínio de técnicas como estas e a possibilidade de manufatura de objetos nanoscópicos vem despertando bastante interesse por parte de diversos setores da indústria de alta tecnologia. Dentre estes setores destacamos os ligados à produção de dispositivos micro-eletrônicos, em especial a dispositivos de armazenamento e de processamento de informações¹⁻⁷. De fato existe uma grande concentração de esforços nesta área visto que, a cada ano que passa, os computadores que chegam ao mercado estão absurdamente mais potentes e seus componentes, na mesma proporção, cada vez menores⁷.

Na seção a seguir discutiremos a estrutura eletrônica e de transporte em uma espécie de dispositivo como estes, a saber, os pontos quânticos, e apresentaremos uma teoria que explique os efeitos quânticos resultantes de sua baixa dimensionalidade.

1.3 Mecanismo de transporte em átomos artificiais. Bloqueamento de Coulomb

O desenvolvimento da nanotecnologia ocorrido nos últimos tempos, em especial no que diz respeito à tecnologia de semicondutores, tornou possível a fabricação de dispositivos eletrônicos¹, como pequenas "partículas" metálicas ou aglomerados de elétrons construídos a partir de estruturas semicondutoras de escala nanométrica^{2,3}. Por possuírem um número discreto de elétrons e espectro de energia quantizado, estes dispositivos, quando conectados a um circuito eletrônico, são chamados de átomos artificiais ou simplesmente de pontos quânticos. Uma das vantagens destes dispositivos é que, ao contrário dos átomos reais que encontramos na natureza, suas "cargas nucleares" podem ser controladas a partir de eletrodos metálicos^{2,4} o que, como veremos a seguir, é bastante interessante do ponto de vista tecnológico, pois nos permite um controle da quantidade de elétrons no átomo. Devido à sua baixa dimensionalidade, estes átomos apresentam um comportamento eletrônico bastante surpreendente, como por exemplo picos de condutância quando a carga nestes átomos é acrescida de um único elétron^{2-5,8-10}. Esta propriedade, como veremos um pouco mais adiante, é explicada a partir de

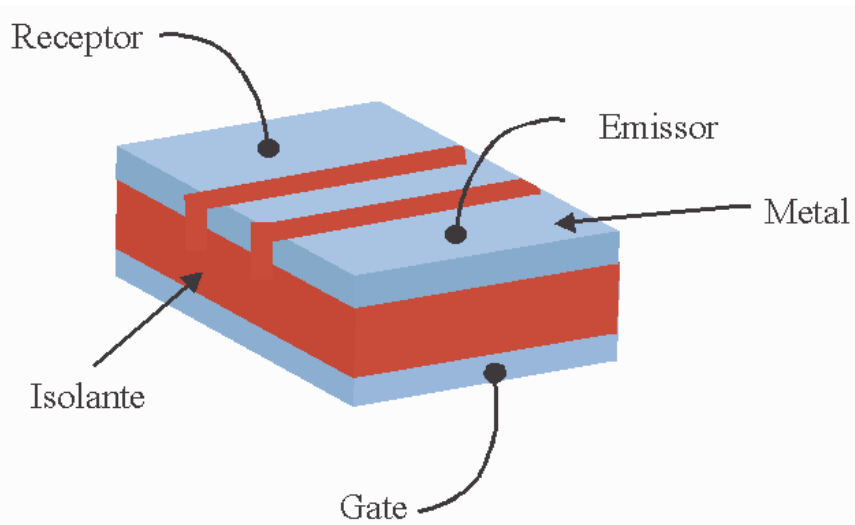


Figura 1.2: Átomo artificial metálico conectado a um circuito eletrônico por dois fios também metálicos(emissor e receptor). Funciona como um transistor de um elétron⁴.

um modelo teórico conhecido como Bloqueamento de Coulomb^{2,4}. Antes, a título de ilustração, vamos apresentar uma descrição esquemática de dois tipos de átomos artificiais.

O primeiro, mostrado na figura (1.2), é conhecido como átomo metálico² e consiste de uma "partícula" metálica de dimensões nanométricas onde encontram-se confinados alguns milhares de elétrons. A partícula é separada dos fios emissor e receptor (que a conectam com o resto do circuito) por duas finas camadas de material isolante através das quais os elétrons podem tunelar de modo a atravessar o dispositivo e gerar uma corrente eletrônica. Toda esta estrutura é acomodada num amplo e bem isolado eletrodo de metal, a partir do qual aplicamos o que chamamos de um potencial de porta.

A estrutura do segundo átomo artificial que iremos apresentar, mostrado na figura (1.4), é similar à do primeiro. A diferença é que, ao invés de uma "partícula" metálica, temos em sua parte superior dois eletrodos que são responsáveis pela criação de um campo onde os elétrons são confinados. As barreiras de potencial através das quais estes elétrons devem tunelar são mostradas na figura (1.3) e podem ter suas alturas controladas a partir dos eletrodos. Pelo fato de suas barreiras poderem ser controladas estes átomos são conhecidos como átomos de barreira controlada^{2,3}. Conceitualmente os elétrons confinados por estas barreiras desempenham a mesma função que os elétrons na partícula metálica do primeiro átomo que descrevemos, assim como estas barreiras exercem o mesmo papel que as finas camadas de material

condutor nestes átomos, com a vantagem de poderem ser manipuladas.

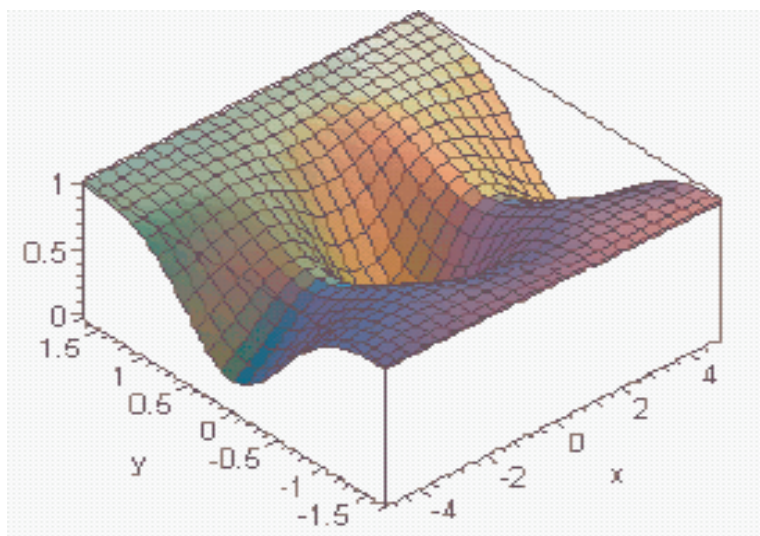


Figura 1.3: Barreiras de potencial produzidas pelos eletrodos na parte superior do átomo artificial de barreira variável.

As propriedades físicas de um determinado átomo existente na natureza podem, em geral, ser investigadas a partir de métodos de espectroscopia baseados na medida de sua energia de ionização e de sua afinidade eletrônica que representam, respectivamente, a energia mínima que seria necessária para que um elétron fosse arrancado do átomo e a energia que seria emitida se um elétron fosse por este capturado. O estudo das propriedades física de átomos artificiais como os descritos acima, em especial das propriedades de transporte, também podem ser baseadas na medida das energias envolvidas na flutuação do número de elétrons. Neste caso, ao invés de métodos de espectroscopia, estas energias são obtidas a partir da corrente eletrônica que atravessa o átomo. De fato, em estruturas como a destes átomos, o acréscimo de um único elétron se torna de extrema importância para o comportamento físico do sistema que, neste caso, se reflete no comportamento da corrente eletrônica que o atravessa^{2-5,8-10}. A sensibilidade destes dispositivos no que diz respeito à presença ou ausência de um único elétron é bastante interessante do ponto de vista tecnológico, visto que estes podem funcionar como transistores que, ao contrário dos convencionais que precisam de um número relativamente elevado de elétrons para funcionar, podem ser armados e desarmados com a passagem de um único elétron⁴.

Ao se fazer variar o potencial de porta V_g na base destes dispositivos

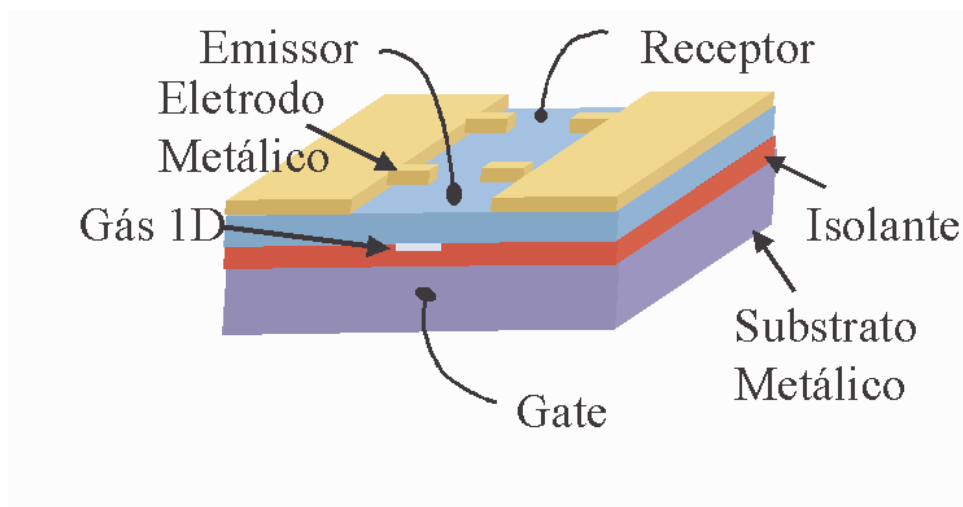


Figura 1.4: Átomo artificial de barreira variável conectado a um circuito eletrônico por dois fios metálicos(emissor e receptor). Também funciona como um transistor de um elétron.

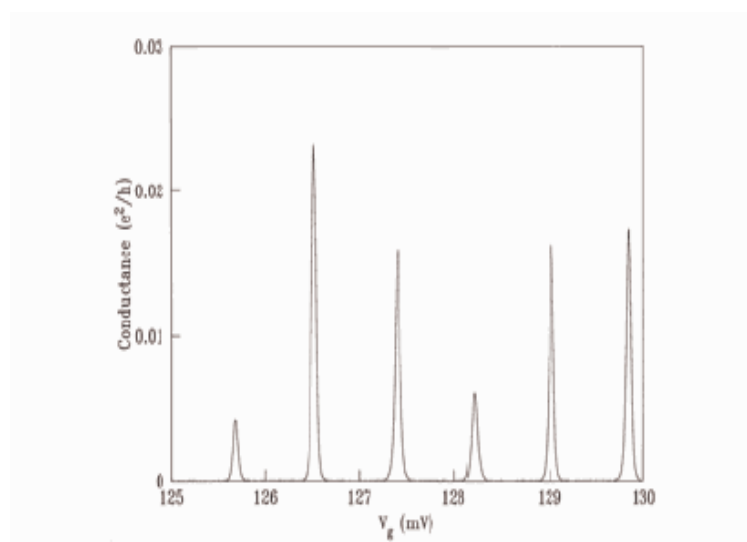


Figura 1.5: Condutância num átomo artificial(transistor de um elétron) em função do potencial de porta aplicado^{3,4}.

e aplicando-se um pequeno potencial V_{er} entre os fios receptor e emissor, apenas o suficiente para que os elétrons tunelem pelas barreiras, obtêm-se picos de ressonância quase que periódicos na corrente eletrônica medida em função de V_g , como mostra a figura (1.5) obtida do trabalho de U.Meirav³. Cada um destes picos resulta do acréscimo de um único elétron que tunela através das barreiras de potencial, e o período em que aparecem, como mostraremos a seguir, correspondem à energia necessária para que este elétron seja adicionado nesta região do dispositivo^{2,4}.

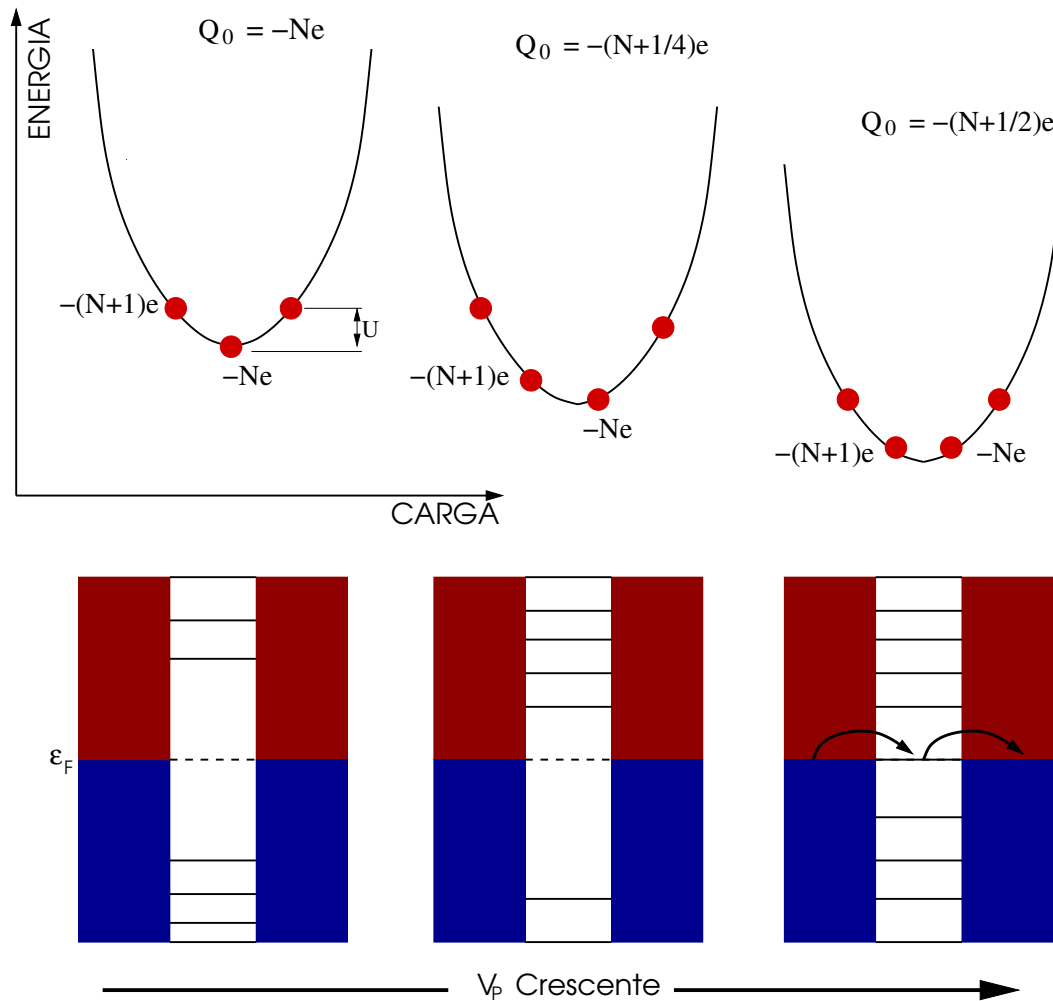


Figura 1.6: Esta figura mostra os níveis de energia ocupados pelas cargas que minimizam a energia na região de confinamento. O terceiro diagrama (da esquerda para a direita) mostra a degenerescência entre os estados correspondentes às cargas $Q = -Ne$ e $Q = -(N+1)e$ nesta região.

O comportamento relatado no parágrafo anterior para a corrente eletrônica que atravessa o dispositivo pode ser entendido pelo modelo teórico do bloqueamento de Coulomb. Para entender este modelo vamos supor que inicialmente não existem elétrons entre as barreiras de potencial produzidas no dispositivo. A mínima energia que seria necessária para permitir o fluxo

de elétrons por esta região, correspondendo à entrada de um único elétron na região entre as barreiras, é de $U = \frac{e^2}{C}$, onde C é a capacitância medida entre o local de confinamento e o resto do sistema. Assim, para que os elétrons tunelem pelas barreiras de potencial e o dispositivo seja atravessado por uma corrente, é necessária uma energia mínima de $\frac{e^2}{2C}$, que corresponde à barreira Coulombiana de bloqueamento. Assim, para que um elétron e um buraco tunelem pelas barreiras de potencial, suas energias devem estar, respectivamente, $\frac{e^2}{2C}$ acima e abaixo do nível de Fermi, o que resulta num gap de energia de $\frac{e^2}{C}$ no espectro de estados de tunelamento proveniente da quantização da carga. Este gap no espectro de tunelamento seria o análogo da diferença entre as energias de ionização e a elétron afinidade para os átomos artificiais².

Aplicando-se um potencial de porta na base do dispositivo e considerando neutra a região de confinamento temos que a energia de uma determinada carga Q colocada nesta região é dada por

$$E = QV_g + \frac{Q^2}{2C}, \quad (1.1)$$

onde, para $Q < 0$, o primeiro termo é atrativo, correspondendo à carga Q sob a ação do potencial positivo V_g e o segundo termo é repulsivo e corresponde à interação mútua entre os elétrons na zona de confinamento. O transporte eletrônico se dá de maneira que a energia E seja minimizada, o que ocorre quando a carga assume os valores $Q_0 = -CV_g$, valores estes que anulam $\frac{dE}{dQ}$ em (1.1). Se a carga Q não fosse quantizada o transporte ocorreria para cada valor de Q_0 obtido a partir de V_g . Como este não é o caso, Q_0 , assim como a energia E , devem assumir valores discretos. A figura (1.6) mostra que, quando $Q_0 = -Ne$, um número inteiro N de elétrons minimiza a energia E e, devido à repulsão eletrônica, é necessário uma diferença de energia $\frac{e^2}{2C}$ para que o número de elétrons seja acrescido ou diminuído de uma unidade, o que produz o chamado bloqueamento de Coulomb. O mesmo acontece para os demais valores de Q_0 mostrados nesta figura, exceto quando a carga Q_0 assume os valores $Q_0 = -(N + \frac{1}{2})e$. Para estes valores de Q_0 os estados para $Q = -Ne$ e para $Q = -(N + 1)e$ são degenerados de modo que o gap de energia no espectro de tunelamento desaparece e a corrente pode fluir. Escrevendo

$$CV_g = Q_0 = -(N + \frac{1}{2})e, \quad (1.2)$$

identificamos o período de $\frac{e^2}{C}$ nos picos de condutância medidos nos dispositivos do tipo dos que estamos apresentando², como aparecem na figura (1.5).

1.4 Transporte fora de equilíbrio. Os efeitos de um potencial externo

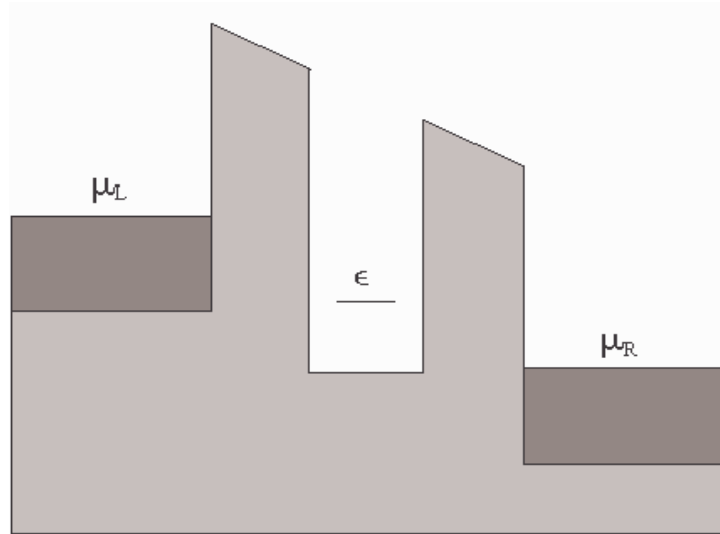


Figura 1.7: Representação esquemática do perfil de energia de um sistema constituído de um PQ conectado a dois reservatórios de elétrons.

Ao contrário do tem anterior quando o sistema estava submetido a um potencial infinitesimal, e respondia de forma linear à atuação do mesmo, apresentaremos agora um estudo qualitativo do transporte eletrônico através de um PQ sob a ação de um potencial externo finito. Esquemáticamente este sistema pode ser representado por uma dupla barreira de potencial, como a mostrada na figura (1.7). Neste esquema o PQ é representado pelo poço entre as barreiras que estão conectadas aos contatos e o potencial externo aplicado resulta ser igual à diferença entre os níveis de Fermi dos reservatórios, $V = \mu_L - \mu_R$. Consideramos inicialmente iguais os níveis de Fermi nos reservatórios. Nesta situação, sem sofrer a atuação de um potencial externo, o sistema se encontra num regime de equilíbrio termodinâmico. Com o nível de Fermi do reservatório da esquerda fixo(próximo da base da banda), o nível da direita vai sendo diminuído à medida que o sistema passa a sofrer a atuação de um potencial externo. Com a diminuição do nível de Fermi do reservatório da direita e o conseqüente aumento(em módulo) do potencial externo aplicado ao sistema, a autoenergia ϵ do poço começa a se deslocar para baixo segundo a relação

$$\epsilon = \epsilon_0 + \alpha(\mu_R - \mu_L), \quad (1.3)$$

onde μ_L e μ_R representam os reservatórios da esquerda e da direita, respectivamente, ϵ_0 o valor inicial da autoenergia local ϵ e $\alpha(\mu_R - \mu_L)$ uma

função que dá conta da queda de potencial no sistema entre os reservatórios da esquerda e da direita. Em princípio esta função α depende da distribuição de carga dentro do dispositivo quando submetido a uma diferença de potencial e deve ser calculada de forma autoconsistente. No caso das duas barreiras serem iguais a aproximação mais simples para esta função seria $\alpha(\mu_R - \mu_L) = \frac{1}{2}(\mu_R - \mu_L)$. O mecanismo de transporte começa a funcionar à medida que ϵ começa a penetrar pela região por baixo de μ_L . Com ϵ nesta região, elétrons provenientes do reservatório da esquerda começam a tunelar e ocupar estes níveis para depois tunelar através da segunda barreira, o que corresponde na realidade ao processo de carga do PQ e a conseqüente produção de uma corrente que atravessa o dispositivo. Em conformidade com o princípio de exclusão de Pauli o transporte de elétrons pelo PQ se dá com no máximo dois elétrons, um ocupando um estado de energia ϵ e outro ocupando um estado de energia $\epsilon + U$, onde U é a repulsão Coulombiana entre dois elétrons no mesmo PQ. O PQ começa a funcionar com um elétron logo no "início" do processo quando a energia (menor que U) entre ϵ e μ_L permite que um elétron do reservatório tunele pela barreira de potencial da esquerda. Quando esta energia $E = \mu_L - \epsilon$ for da ordem de U , um segundo elétron com estado de energia $\epsilon + U$, penetra na região entre as barreiras e o dispositivo passa a funcionar com dois elétrons no PQ. Na região em que ϵ passa pela base do reservatório da esquerda inicia-se um acentuado processo de descarga do PQ e, em conseqüência, o transporte eletrônico é rapidamente interrompido. Com ϵ por baixo da base do reservatório da esquerda, e o PQ completamente descarregado, podemos reduzir o potencial aplicado em cujo caso inicia-se um processo de subida deste nível de energia. Ao atingir novamente a região que corresponde a base do reservatório da esquerda inicia-se um rápido processo de recarga do PQ e o transporte eletrônico é rapidamente reestabelecido. Por efeitos não lineares devido à repulsão Coulombiana, a interrupção e a aparição da carga e da corrente quando aumentamos ou diminuimos (em módulo) a diferença de potencial, respectivamente, pode não aparecer para o mesmo valor do potencial aplicado¹²⁻¹⁶. Quando isto acontece o sistema tem uma biestabilidade já que, dependendo da sua história prévia, tem duas soluções para a corrente para o mesmo potencial aplicado. O mecanismo de transporte e a origem dos eventuais processos não lineares apresentados pelo sistema também poderiam ser abordados a partir de um sistema de dois PQ's, como representado na figura (1.8). Neste caso a topologia do sistema passa a ser importante no que diz respeito aos processos de descida e subida das autoenergias ϵ_1 e ϵ_2 , referentes aos PQ's (1) e (2) respectivamente. No caso dos PQ's estarem associados em paralelo com os reservatórios, estes níveis obedecem as relações

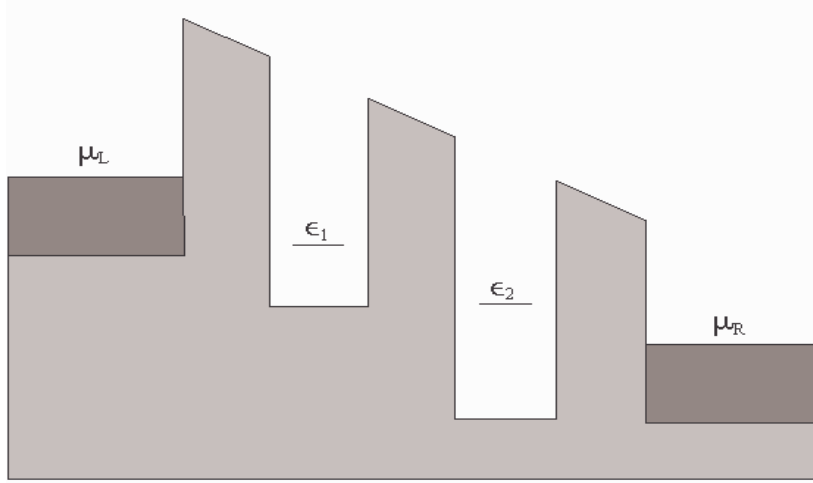


Figura 1.8: Representação esquemática do perfil de energia de um sistema de dois PQs conectados a dois reservatórios de elétrons.

$$\epsilon_1 = \epsilon_1^0 + \alpha(\mu_R - \mu_L) \quad (1.4)$$

$$\epsilon_2 = \epsilon_2^0 + \alpha(\mu_R - \mu_L), \quad (1.5)$$

onde ϵ_1^0 e ϵ_2^0 representam, respectivamente, as posições iniciais de ϵ_1 e ϵ_2 . Já para os PQ's associados em série

$$\epsilon_1 = \epsilon_1^0 + \alpha_1(\mu_R - \mu_L) \quad (1.6)$$

$$\epsilon_2 = \epsilon_2^0 + \alpha_2(\mu_R - \mu_L) \quad (1.7)$$

são as relações a serem obedecidas pelos níveis ϵ_1 e ϵ_2 . No caso das barreiras serem iguais a aproximação mais simples para estas funções seria $\alpha = \frac{1}{2}(\mu_R - \mu_L)$ para os PQ's em paralelo e $\alpha_1 = \frac{1}{3}(\mu_R - \mu_L)$ e $\alpha_2 = \frac{2}{3}(\mu_R - \mu_L)$ para os PQ's associados em série.

O trabalho que estamos propondo é dedicado ao estudo das propriedades físicas de dispositivos como os descritos nesta seção, mais especificamente, apresentamos uma investigação teórica de algumas das propriedades físicas subjacentes ao transporte eletrônico num sistema de dois pontos quânticos conectados a dois reservatórios de elétrons. Duas topologias são consideradas para este sistema. Uma na qual estes pontos estão conectados em série com relação a estes reservatórios e outra na qual estão conectados em paralelo. Em ambas as topologias investigamos o processo pelo qual estes pontos são carregados eletronicamente, assim como o comportamento da corrente pela qual são atravessados. No segundo capítulo trabalhamos com o sistema em equilíbrio. Neste capítulo, via equação de movimento calculamos as funções de Green, a partir das quais as cargas e as densidades de estados podem ser calculadas autoconsistentemente. No

terceiro capítulo, com o auxílio do formalismo de Keldysh, as expressões para as funções de Green fora de equilíbrio são encontradas. A partir destas obtemos uma expressão para a corrente que atravessa o sistema. O quarto capítulo é dedicado à apresentação e discussão dos resultados numéricos obtidos, e o quinto às conclusões finais.