

# Efeitos de confinamento quântico no transporte de gás de elétrons bidimensional de GaAs

R.F.Souza\*

Universidade Federal do ABC

(Orientador: Dr. Gustavo Michel Mendoza La Torre)

(Dated: 14 de junho de 2018)

Os efeitos de confinamento são estudados a partir de dispositivos conhecidos como *Quantum Point Contact* e *Open Quantum Dot* (transistores quânticos). Iniciamos com uma descrição dos dispositivos e apresentação do modelo adotado, em especial a discretização da equação de Schrödinger na aproximação da massa efetiva, seguida de uma discussão sobre o efeito da quantização da condutância. Apresentamos o método recursivo das funções Green, utilizado nas simulações computacionais e a partir dos resultados obtidos, discutimos outros efeitos resultantes do confinamento quântico, como o tunelamento ressonante, localização de estados, splitting e ressonâncias de Fano.

## I. DISPOSITIVOS QUÂNTICOS

*Quantum Point Contacts* (QPCs) e *Open Quantum Dots* (OQDs) são dispositivos quânticos (transistores) formados a partir de um gás de elétrons bidimensional (2DEG) em uma heterojunção *GaAs-AlGaAs* [Fig.1]. Estes sistemas são de dimensões mesoscópicas, onde o comprimento de onda de Fermi e as dimensões dos dispositivos são muito menores do que o livre caminho médio do elétron [1],[2]; são construídos através da técnica de epitaxia [3] de forma que não existam impurezas no dispositivo e portanto, não ocorram espalhamentos devido a outros centros espalhadores senão aos potenciais de confinamento. Estes dispositivos quânticos são muito importantes pelas diversas aplicações tecnológicas que podem ter, como na computação quântica como detectores de carga em qubits [4]. Nestes sistemas mesoscópicos, as dimensões espaciais são da ordem do comprimento de onda de De Broglie, desta forma estes sistemas são governados pelos efeitos de interferência quântica.

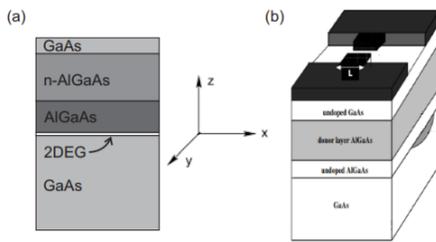


Figura 1. a) Heteroestrutura composta por *GaAs* e *AlGaAs*, com destaque para a região (interface) onde se forma o 2DEG. b) Os retângulos pretos representam os gates (técnica de split-gates). Um potencial aplicado aos gates altera a densidade de estados no 2DEG. Com a forma dos gates mostrados, geramos um QPC.

No plano  $x,y$  não há confinamento e a princípio, temos estados contínuos (2DEG), ver Fig.1. Porém, através da

técnica de *split-gate* podemos confinar o 2DEG em outras direções, no presente trabalho confinamos na direção  $y$  [Fig.1(b)]. Esta técnica nos permite também manipular a forma (geometria) do confinamento, criando *Quantum Wires* (QW), *Quantum Point Contacts* (QPC) e até geometrias compostas, como *Open Quantum Dots* (OQD) que são formados por um *dot* central e 2 *Quantum Point Contacts*, ver por exemplo a Fig.9.

Ao aplicar um potencial aos gates, altera-se a distribuição eletrônica do 2DEG [Fig.2], gerando confinamento lateral em uma região denominada região de espalhamento. De acordo com a forma geométrica da região de espalhamento, obtemos um QPC ou um OQD. Além da região de espalhamento, há 2 contatos, denominados fonte e dreno. A estes contatos é aplicada uma diferença de potencial  $\delta V$ , fazendo com que elétrons sejam transportados de um contato à outro (corrente  $I$  na Fig.2(a)).

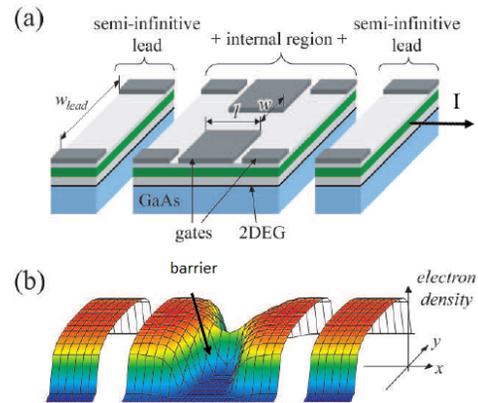


Figura 2. O potencial elétrico aplicado aos gates (a) altera a densidade de estados no 2DEG abaixo destes (b), criando barreiras de potencial confinando os elétrons

Devido ao confinamento na direção  $y$  (que chamaremos de direção transversal), surgem estados discretos nesta direção. Na outra direção (direção  $x$ , longitudinal), os estados são contínuos e pode-se gerar uma corrente que pode ser medida através da condutância ( $G = dI/dV$ ) ou do coeficiente de transmissão da onda associada ao

\* renato.souza87@aluno.ufabc.edu.br

elétron. É importante citar que as dimensões do 2DEG usados são menores do que o livre caminho médio do elétron e os materiais que compoem as heteroestruturas são considerados ideais, isto é, a heteroestrutura é composta por cristais perfeitos, periódicos e sem impurezas, de forma que a onda associada ao elétron sofra espalhamentos apenas devido aos potenciais aplicados aos gates.

## II. MÉTODOS E TÉCNICAS USADAS PARA MODELAR OS SISTEMAS

### A. Aproximação da Massa Efetiva ou da Função Envelope para Heteroestruturas de GaAs

Diferentemente de um elétron livre, aqui o elétron se encontra dentro de um material formado por  $N$  átomos em um arranjo periódico, isto significa que o elétron está sob influência de um potencial periódico associado aos átomos da rede cristalina do material. Portanto, para estudar o transporte eletrônico, a hamiltoniana do elétron deve levar estes efeitos em consideração. Através da aproximação *Tight Binding* convencional (ou ligação forte), podemos determinar a hamiltoniana do elétron sob efeito de um potencial periódico. De acordo com o modelo *Tight Binding*, a função de onda é uma combinação linear das funções dos orbitais dos átomos mais próximos, também chamados de *primeiros vizinhos* [5],[6],[7],[8]. Em outras palavras, se em um átomo isolado temos estados discretos, em um cristal as funções de onda podem se combinar e como consequência geram regiões ou *bandas* de energia permitidas e proibidas (*gaps*). As soluções da equação de Schrödinger devido a potenciais periódicos são conhecidas como funções de onda de Bloch [5],[8].

Resolvendo a equação de Schrödinger com condições de contorno periódicas, obtemos a equação (1), a qual define a estrutura de bandas. A integral que aparece em (1) é conhecida como integral de hopping e representa a interação entre um sítio e seus primeiros vizinhos. Em geral, a integral de hopping é um parâmetro ajustado de acordo com o experimento.

$$E(\vec{k}) = \epsilon_s + \sum_{\vec{\tau}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{\tau}} \int \phi_s^*(\vec{x}) \Delta V \phi_s(\vec{x} - \vec{\tau}) d\vec{x} \quad (1)$$

Na equação (1),  $\epsilon_s$  é a energia no átomo,  $\vec{k}$  é o vetor de onda no cristal,  $\vec{\tau}$  é um vetor de translação da rede,  $\phi_s(\vec{x})$  é a função de onda no cristal na posição dada por  $(\vec{x})$  e  $\Delta V$  é o potencial no cristal. A somatória é sobre os primeiros vizinhos. Na Fig.3 mostramos a estrutura de bandas que pode ser obtida com o modelo *Tight Binding* convencional. No eixo de simetria  $\Gamma$ , o fundo da banda de condução (indicada com uma seta) é aproximadamente parabólica. Podemos obter este resultado analiticamente efetuando o cálculo de (1). O resultado obtido é escrito em função de  $\cos(k)$  que pode ser expandido em série de Taylor, e para  $k$  pequeno (fundo da banda), obtemos um

perfil de banda proporcional a  $k^2$ , semelhante à partícula livre. Isto é comprovado experimentalmente ao analisar o perfil de bandas de energia do GaAs [Fig.3].

Como consequência de (1) na aproximação de  $k$  pequeno, obtemos um parâmetro conhecido como massa efetiva [5]:

$$m^* = -\frac{\hbar^2}{2\gamma(a_0)a_0^2} \quad (2)$$

Sendo  $\gamma(a_0)$  a integral de hopping e  $a_0$  o parâmetro de rede. Logo:

$$E(k) \approx \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (3)$$

Ou seja, o elétron (quasi-partícula) no fundo da banda de condução com perfil parabólico, se comporta como se fosse um elétron livre com massa efetiva  $m^*$ . Para o GaAs,  $m^* \approx 0.067m$ , sendo  $m$  a massa do elétron livre.

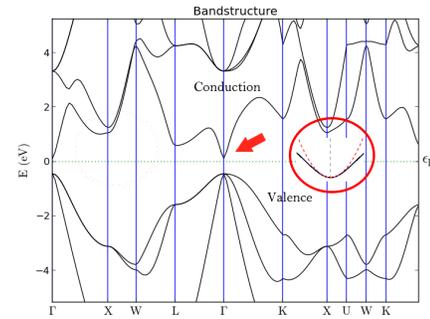


Figura 3. Relação de dispersão para o GaAs calculado através do método *Tight Binding*. As letras no eixo x representam alguns valores de interesse de  $k$ . Cada material possui um perfil característico de estrutura de bandas. Destaque para a região apontada pela seta vermelha, para valores de  $k$  pequenos, temos um perfil parabólico da banda de energia, indicando que o elétron se comporta como se fosse uma partícula livre (quasi-partícula).

O modelo *Tight Binding* faz parte de uma análise do ponto de vista atômico do material e serve apenas para mostrar que, com a modificação da massa do elétron para uma massa efetiva e para algum valor especial de  $\vec{k}$  (fundo da banda de condução) podemos utilizar a equação de Schrödinger como se o elétron fosse uma partícula livre (mesmo dentro do material). O hamiltoniano agora na aproximação de massa efetiva é dado por [9]:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla \cdot \frac{1}{m^*(\vec{r})} \nabla + V(\vec{r}) \quad (4)$$

Aqui a massa efetiva ( $m^*$ ) está representada no espaço da posição, mas com uma transformada de Fourier podemos passar para o espaço de momentos. Este Hamiltoniano, equação (4), é útil quando  $m^*$  é uma função da posição  $\vec{r}$ , por exemplo, quando se deseja calcular a transmissão através da heteroestrutura mostrada na Fig.1(a) ao

longo da direção  $z$ . Na direção  $z$  alternando GaAs e AlGaAs podem-se construir diodos de tunelamento ressonante (RTD) [10], nesses casos quando a quasi-partícula passa de GaAs para AlGaAs muda sua massa efetiva.

Uma análise numérica requer a discretização da equação de Schrödinger na aproximação da massa efetiva, utilizando o método de diferenças finitas, aproximando as primeiras e segundas derivadas que aparecem na equação (4). Diferente do caso do RTD, no 2DEG na aproximação da massa efetiva (ou função envelope), a massa torna-se constante e é denominada apenas por  $m^*$ .

Em duas dimensões (direção transversal  $y$  e longitudinal  $x$ ), o nosso Hamiltoniano aplicado em  $\psi(x, y)$  agora fica como:

$$H\psi(x, y) = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right] \psi(x, y) + V(x, y)\psi(x, y) \quad (5)$$

Utilizando os polinômios de Taylor [11] podemos escrever  $\psi(x + \Delta x, y)$  e  $\psi(x - \Delta x, y)$  como:

$$\begin{aligned} \psi(x + \Delta x, y) &= \psi(x, y) + \psi'_x(x, y)\Delta x + \frac{\psi''_x(x, y)\Delta x^2}{2} \\ \psi(x - \Delta x, y) &= \psi(x, y) - \psi'_x(x, y)\Delta x + \frac{\psi''_x(x, y)\Delta x^2}{2} \end{aligned} \quad (6)$$

Com  $\psi'_x$  e  $\psi''_x$  sendo a primeira e segunda derivada em relação a  $x$  respectivamente.

Somando as duas equações e isolando o termo da segunda derivada, obtemos:

$$\psi''_x(x, y) = \frac{1}{\Delta x^2} (\psi(x + \Delta x, y) - 2\psi(x, y) + \psi(x - \Delta x, y)) \quad (7)$$

Analogamente, obtemos para  $y$ :

$$\psi''_y(x, y) = \frac{1}{\Delta y^2} (\psi(x, y + \Delta y) - 2\psi(x, y) + \psi(x, y - \Delta y)) \quad (8)$$

Com estes resultados em mãos, podemos substituí-los em 5. Aqui, o parâmetro de rede  $a = \Delta x = \Delta y$  não é necessariamente o parâmetro de rede do cristal (que já está embutido no parâmetro de massa efetiva e é constante para o 2DEG). O parâmetro  $a$  é resultado apenas da discretização matemática pelo método das diferenças finitas.

Substituindo as derivadas pelas aproximações obtidas com o método das diferenças finitas, temos:

$$\begin{aligned} H\psi(x, y) &= -\frac{\hbar^2}{2m^*a^2} [\psi(x, y + a) - 2\psi(x, y) + \psi(x, y - a) \\ &\quad + \psi(x + a, y) - 2\psi(x, y) + \psi(x - a, y)] \\ &\quad + V(x, y)\psi(x, y) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m^*a^2} [\psi(x, y + a) - 4\psi(x, y) + \psi(x, y - a) \\ &\quad + \psi(x + a, y) + \psi(x - a, y)] \\ &\quad + V(x, y)\psi(x, y) \end{aligned} \quad (9)$$

Neste momento, nosso sistema que antes era contínuo [Fig. 4(a)] agora está discretizado [Fig. 4(b)]. As coordenadas são transformadas  $(x, y) \rightarrow (x_m, y_n)$ , onde  $x_m = am$  e  $y_n = an$ . A função de onda em termos das coordenadas discretas e por fim, adotando a notação bra-ket é escrita como:

$$\psi(x, y) \equiv \psi(am, an) \equiv \psi_{m,n} \equiv |m, n\rangle \quad (10)$$

Reescrevendo (9) com esta notação e rearranjando os termos, obtemos:

$$\begin{aligned} H|m, n\rangle &= \left( -\frac{\hbar^2}{2m^*a^2} \right) [|m, n+1\rangle + |m, n-1\rangle] \\ &\quad + \left( -\frac{\hbar^2}{2m^*a^2} \right) [|m+1, n\rangle + |m-1, n\rangle] \\ &\quad \left( \frac{2\hbar^2}{m^*a^2} + V_{m,n} \right) |m, n\rangle \end{aligned} \quad (11)$$

Calculando os elementos de matriz deste Hamiltoniano  $\langle m', n' | H |m, n\rangle$ , obtemos uma matriz *Bloco Tri-diagonal*, como pode ser visto a seguir:

$$H = \begin{array}{c} \left( \begin{array}{ccc|c} m=1 & m=2 & m=3 & \\ \left( \begin{array}{ccc} \epsilon_s^{1,1} & V_y & 0 \\ V_y & \epsilon_s^{1,2} & V_y \\ 0 & V_y & \epsilon_s^{1,3} \end{array} \right) & \left( \begin{array}{ccc} V_x & 0 & 0 \\ 0 & V_x & 0 \\ 0 & 0 & V_x \end{array} \right) & \left( \begin{array}{ccc} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{array} \right) & m=1 \\ \left( \begin{array}{ccc} V_x & 0 & 0 \\ 0 & V_x & 0 \\ 0 & 0 & V_x \end{array} \right) & \left( \begin{array}{ccc} \epsilon_s^{2,1} & V_y & 0 \\ V_y & \epsilon_s^{2,2} & V_y \\ 0 & V_y & \epsilon_s^{2,3} \end{array} \right) & \left( \begin{array}{ccc} V_x & 0 & 0 \\ 0 & V_x & 0 \\ 0 & 0 & V_x \end{array} \right) & m=2 \\ \left( \begin{array}{ccc} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{array} \right) & \left( \begin{array}{ccc} V_x & 0 & 0 \\ 0 & V_x & 0 \\ 0 & 0 & V_x \end{array} \right) & \left( \begin{array}{ccc} \epsilon_s^{3,1} & V_y & 0 \\ V_y & \epsilon_s^{3,2} & V_y \\ 0 & V_y & \epsilon_s^{3,3} \end{array} \right) & m=3 \end{array} \right) \end{array} \quad (12)$$

Considerando  $M$  sítios longitudinais ( $m$ ) e  $N$  sítios transversais ( $n$ ), como mostrado na Fig.4(b), este Hamiltoniano é uma matriz de  $(M \times N)^2$  elementos, na qual cada ponto  $m$  tem associado uma sub-matriz de sítios transversais. O ponto longitudinal  $m$  define uma cadeia transversal e  $n$  define um ponto da cadeia transversal.  $V_y$  é o hopping entre os pontos da cadeia transversal e  $V_x$  é o hopping que acopla as cadeias transversais vizinhas. Aqui,  $\epsilon_s^{m,n}$  é a energia de sítio na posição  $(m, n)$  [Fig.4(b)]. Devido à simetria do sistema,  $V_x = V_y = V$ . Da mesma maneira,  $\epsilon_s^{m,n} = \epsilon_s$ . A matriz da equação (12), exemplifica um sistema com 3 cadeias transversais ( $m = 1, m = 2$  e  $m = 3$ ), cada uma com 3 sítios (sub-matrizes diagonais).

Os valores das energias de sítio e hopping obtidas de (11) são:

$$\epsilon_s = \frac{2\hbar^2}{m^*a^2} + V(x, y) \quad (13)$$

$$V = -\frac{\hbar^2}{2m^*a^2} \quad (14)$$

Desta forma, estamos mostrando que a discretização da equação de Schrödinger (na aproximação da massa efetiva) nos leva diretamente para um Hamiltoniano discreto que tem a forma de um Hamiltoniano Tight Binding (TB). Este Hamiltoniano TB não é atomístico, nosso Hamiltoniano TB encontrado aqui com discretização, representa a discretização do comportamento contínuo da função de onda da quasipartícula eletrônica (função de onda envelope). Assim nosso Hamiltoniano discreto, será chamado de Hamiltoniano TB na aproximação da massa efetiva.

### B. Modelo Tight Binding na aproximação da massa efetiva

Inicialmente modelamos um sistema 2DEG contínuo confinado em um fio composto por 3 partes: 2 contatos semi-infinitos (fios quânticos) ( $C_L$  e  $C_R$ ) e uma região central (de espalhamento) [Fig.4(a)]. Este sistema é conhecido como *Quantum Wire (QW)* [10].

A discretização deste sistema como visto anteriormente resulta em um conjunto de sítios  $(m, n) \equiv (x, y)$  [Fig.4(b)]. O Hamiltoniano TB deste sistema na representação de cadeias transversais  $H_{mm}$  tem a seguinte forma:

$$H_T = \begin{bmatrix} H_{11} + \sum^L & V & 0 & \dots & 0 \\ V & H_{22} & V & 0 & 0 \\ 0 & V & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & V \\ 0 & 0 & 0 & V & H_{MM} + \sum^R \end{bmatrix} \quad (15)$$

Aqui, o Hamiltoniano total ( $H_T$ ) é escrito em função dos hamiltonianos das cadeias transversais  $H_{mm}$ .  $\sum^{R(L)}$  são chamadas de auto-energias [12] e descrevem os efeitos dos contatos quânticos ( $C_L$  e  $C_R$ ) no dispositivo. O sistema consiste em  $M$  cadeias transversais com  $N$  sítios cada uma. O potencial  $V$  (hopping) acopla as cadeias  $m$  uma a uma. O Formato de  $H_{mm}$  e de  $V$  pode ser visto na matriz (12).

Separando o sistema desta maneira, podemos utilizar o método recursivo das funções de Green para calcular a condutância através do sistema [13],[14].

A condutância é calculada a partir das amplitudes de probabilidades de transmissão entre a cadeia de entrada ( $\ell$ ) e a de saída ( $r$ ) do sistema [Fig.4(c)]. Estas cadeias contém toda a informação dos contatos  $C_{L(R)}$  [Fig.4(b)] obtidos através do cálculo das funções de Green dos fios semi-infinitos [14] ou das auto-energias [12]. Assim o Hamiltoniano TB, equação (15), fica finito e a função de

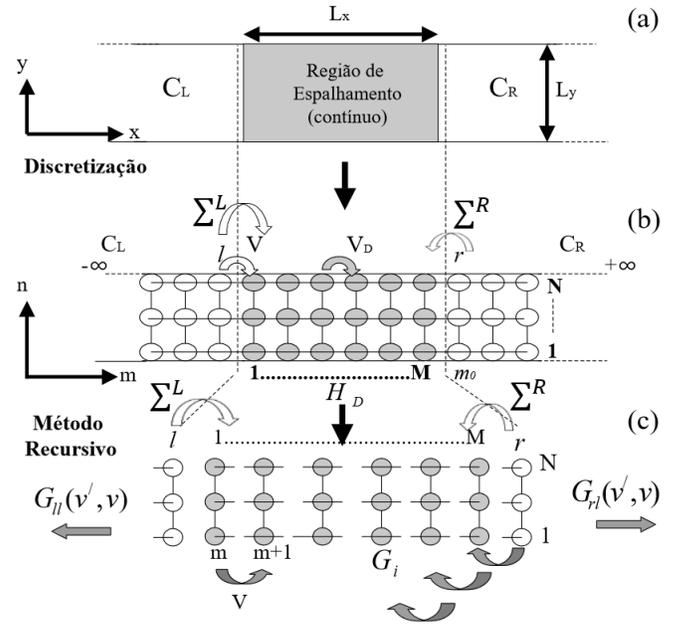


Figura 4. Modelo geral de estudo. Todos os dispositivos estudados estão divididos em 3 regiões: 2 contatos semi-infinitos ( $C_L$  e  $C_R$ ) e uma região de espalhamento (a princípio contínua) (a). Em (b) representamos o modelo discretizado, através da discretização da equação de Schrodinger, gerando uma matrix  $M \times N$ . Em (c) mostramos um esquema representativo do método recursivo das funções de Green da rede. Aqui o sistema é desacoplado em cadeias transversais para calcular de forma rápida as funções de Green que permitirão encontrar os coeficientes de transmissão. As cadeias  $r$  e  $l$  representam os contatos, o espalhamento faz com que o elétron seja emitido num modo de saída ( $\nu'$ ) que a cadeia  $r$  permite, depois deste contato ( $C_R$ ) não teremos mais espalhamento. Assim toda a informação necessária dos contatos quânticos fica contida nas cadeias  $l$  (entrada) e  $r$  (saída). Para cada cadeia temos um  $H_i$  (hamiltoniano da cadeia desacoplada  $i$ ) que permite o cálculo de  $G_i$  (função de Green da cadeia  $i$ ), depois podemos unir estes  $G_i$  de forma recursiva começando por  $r$  e terminando com  $l$  usando a equação de Dyson. [2]

Green  $G_{r\ell}$  que une a entrada ( $\ell$ ) e a saída ( $r$ ) é uma sub-matriz da matriz total de Green, que é definida como:

$$G_T = [EI - H_T]^{-1} \quad (16)$$

Onde  $E$  é a energia das quasi-partículas eletrônicas incidentes e  $I$  é uma matriz unitária. Na representação de cadeias transversais, matriz (15), a sub-matriz  $G_{r\ell}$  é definida como  $G_{r\ell} = \langle r | G_T | \ell \rangle = G_{M1}$  (Em (15), 1 é a entrada e  $M$  a saída). Os elementos desta sub-matriz são dados por  $\langle n' | G_{M1} | n \rangle = G_{M1}(n', n)$ , na base de sítios transversais. Para calcular a condutância, utilizamos a equação de Landauer-Büttiker [15],[16]. Esta equação utiliza funções de Green (elementos de  $G_{M1}$ ) em uma base de modos transversais ( $\nu', \nu$ ). A mudança de base de  $G_{M1}$  de sítios transversais para modos transversais é realizada com uma transformação unitária [17],[14].

Em geral, o contato quântico  $C_L$  faz incidir na região de espalhamento, ondas quantizadas pelo confinamento transversal, cada onda com um número quântico  $\nu$  (modo de entrada):  $\chi_n^\nu = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \text{sen} \left[ \frac{\pi\nu n}{N+1} \right]$ . Depois do espalhamento, a onda atinge o contato  $C_R$ , assumindo um dos modos de saída ( $\nu'$ ) permitidos por este contato.

Assim, a condutância quântica contabiliza todas as probabilidades da quasi-partícula de ser espalhada de um modo  $\nu$  à um modo  $\nu'$ . Com isto, a condutância definida pela equação de Landauer-Büttiker, na linguagem Tight Binding, pode ser escrita como [16],[1],[18],[19],[20]:

$$\sigma(E) = \frac{2e^2}{h} \sum_{\nu'} \left( \sum_{\nu} |t_{\nu'\nu}(E)|^2 \right) \quad (17)$$

onde,

$$t_{\nu'\nu}(E) = 2i|V_x| \sqrt{\sin\theta_{\nu'} \sin\theta_{\nu}} e^{i(\theta_{\nu'} - \theta_{\nu})} G^+(E) \quad (18)$$

é a amplitude de probabilidade de se passar de um modo  $\nu$  à um modo  $\nu'$ ,  $G^+(E) = \langle \nu' | U^+ G_{r\ell}(n', n) U | \nu \rangle$  com  $U$  sendo a matriz unitária de transformação entre a base de sítios transversais ( $n', n$ ) e a base de modos transversais ( $\nu', \nu$ ).  $\theta_{\nu(\nu')} = \cos^{-1} \left[ \frac{E - \epsilon_{\nu(\nu')}}{2V_x} + 1 \right]$ , resultado da banda tipo Tight Binding nos contatos ( $C_L, C_R$ ).

Em geral, a equação de Landauer-Büttiker faz a ligação entre uma propriedade macroscópica com propriedades quânticas, neste caso, entre a condutância  $[\sigma(E)]$  e a amplitude de probabilidade  $[t_{\nu'\nu}(E)]$  [18].

### C. Método recursivo das Funções de Green na Rede Tight Binding

Conforme visto, o Hamiltoniano do sistema contém  $(M \times N)^2$  elementos. Para obter resultados que possam ser comparados quantitativamente com o experimento, deve-se construir sistemas grandes (grande número de cadeias transversais  $M$  e de sítios transversais  $N$ ), em geral,  $M, N > 100$ . Inversões de matrizes [no nosso caso, a matriz (16)] são processos computacionais muito custosos e, dependendo das configurações do computador pode até ser impossível [21]. O método recursivo das funções de Green entra como uma alternativa para diminuir o tempo de processamento das inversões de matrizes. Neste método, ao invés de calcular a matriz de Green total ( $G_T$ ), calcula-se apenas o elemento de matriz necessário, por exemplo o  $G_{r\ell} = \langle r | G_T | \ell \rangle$ . Podemos reescrever (16) como:

$$G_T = [E - H_D - \sum^L - \sum^R]^{-1} \quad (19)$$

Onde  $H_D$  tem a forma de (12) (região de espalhamento isolada, sem efeitos dos contatos quânticos).  $\sum^{L(R)} = V^+ G_{L(R)} V$  são as auto-energias que descrevem os efeitos dos contatos ( $C_L, C_R$ ) na região de espalhamento ( $H_D$ ).

Na base de modos transversais, os propagadores ( $\tilde{G}_{L(R)}$ ) dos contatos isolados são [14]:

$$\langle \nu' | \tilde{G}_{L(R)} | \nu \rangle = \frac{e^{i\theta_{\nu}}}{|V_x|} \delta_{\nu', \nu} \quad (20)$$

Estas matrizes ( $\tilde{G}_{L(R)}$ ) definem os modos transversais de entrada e de saída (cadeias  $\ell$  e  $r$  em Fig.4(c)) usando funções de Green. A região do dispositivo ( $H_T$ ) é desacoplada em  $M$  cadeias transversais com  $N$  sítios cada [Diagonal de (15)]. A matriz de Green para uma cadeia transversal é obtida de [2]:

$$G_{m,m} = [(E + i\eta)\mathbf{I} - H_{m,m}]^{-1} \quad (21)$$

O propagador *entre* a cadeia de entrada e a de saída é calculado acoplando (21) de cada cadeia do dispositivo, com base na equação de Dyson [22],[2]:

$$G = G_0 + G_0 V G \quad (22)$$

A aplicação do método recursivo inicia-se em um dos contatos, eq. (20) no caso, no contato à direita (cadeia  $M$ ) [Fig. 4(b)]. Em seguida, acopla-se todas as cadeias contidas no dispositivo ( $H_D$ ) até chegar na cadeia inicial ( $m = 1$ ) [Fig. 4(c)]. As equações recursivas para adicionar as cadeias transversais da região do dispositivo, são dadas partindo da equação (22), calculando os elementos de matriz e contabilizando apenas a interação entre primeiros vizinhos. As equações recursivas são escritas como [14],[13]:

$$G_{m+1,m} = G_{m+1,m+1}^R V (1 - G_{m,m}^L \sum)^{-1} G_{m,m}^L \quad (23)$$

$$G_{m,m} = (1 - G_{m,m}^L \sum)^{-1} G_{m,m}^L \quad (24)$$

Onde:  $\sum = V G_{m+1,m+1}^R V$ .

Em geral, a cadeia  $M$  ( $G_{m+1,m+1}^R$ ) na direita [ver Fig. 4(c)] é adicionada à cadeia  $M - 1$  ( $G_{m,m}^L$ ) na esquerda. Isto gera uma nova cadeia  $G_{m,m}$  que agora contém os efeitos da cadeia  $G_{m+1,m+1}$ . Esta nova  $G_{m,m}$  será agora uma  $G_{m+1,m+1}^R$  que será adicionada à cadeia que fica a sua esquerda, ou seja, à cadeia  $M - 2$  (nova cadeia  $G_{m,m}^L$ ), e assim sucessivamente como esquematizado na Fig.4(c).

## III. RESULTADOS

Os resultados numéricos foram obtidos com o desenvolvimento de um software em linguagem *Python* fazendo uso da biblioteca matemática *numpy* e da biblioteca gráfica *matplotlib*, baseado nos resultados de [2]. As dimensões do sistema são dadas em números de sítios de cadeias transversais e longitudinais. Os resultados estão classificados em 3 tipos: Confinamento em uma dimensão, confinamento em duas dimensões e sistemas acoplados. Cada tipo permite uma análise de um efeito de confinamento no transporte eletrônico.

### A. Confinamento em uma dimensão: QW e QPC

Neste tipo de confinamento estudamos 2 dispositivos (QW e QPC). No QW, temos apenas 1 tipo de cadeia transversal (com a mesma quantidade de sítios) que se repete ao longo do dispositivo (inset da Fig.5). As simulações com QW consistiram em estudar a relação da condutância  $\sigma(E)$  com o tamanho das cadeias transversais do dispositivo (ou largura do QW, dada por  $W$  em números de sítios transversais). Experimentalmente,  $W$  é alterado pelos potenciais dos gates [Fig.1(b)]. Como não há fontes de espalhamento no dispositivo, pode-se observar patamares bem definidos de condutância  $\sigma(E)$  [Fig.5]. Cada patamar está associado ao acoplamento entre um estado transversal (discreto) com um estado longitudinal não confinado, onde a energia das quasi-partículas no QW é dada por:

$$E = E_n + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} \quad (25)$$

Aqui  $E_n$  são as energias devidas ao confinamento transversal. O início de cada patamar é associado com  $E_n$  (do confinamento transversal) enquanto que a largura do patamar é associada com a banda contínua da direção longitudinal  $x$ . Em Fig.6, observamos que cada banda ou canal de transporte, contribui com um *quanta* de condutância dada por  $2e^2/h$  [coeficiente da equação (17)]. Em geral, cada banda contribui com um modo de transporte  $\nu'$  (canal), o qual está associado com uma probabilidade de transmissão [somatórios na equação (17)]. Na Fig.5, mostramos que com o aumento da largura  $W$  do QW, mais canais de transporte contribuem na mesma janela de energia.

Para o QPC, temos 2 tipos de cadeias transversais, uma para os contatos e outra para a região de espalhamento. Os contatos são definidos similarmente a um QW, ou seja, todos os sítios da cadeia tem energia de sítio  $\epsilon_s = 2\hbar^2/m^*a^2$ . Por outro lado, a cadeia que define a região central de espalhamento de largura  $W$  (região central mais escura no inset da Fig.7), tem sítios com energia  $\epsilon_s$ , enquanto que os sítios acima e abaixo de  $W$  (regiões brancas) são  $\epsilon_s + V_0$ , com  $V_0$  sendo a altura da barreira de potencial que gera confinamento transversal (a qual pode ser gerada por gates metálicos). Por fim, as 3 regiões (2 contatos e 1 região de espalhamento) são parametrizadas com a quantidade de cadeias transversais presentes em cada região.

Conforme esperado, obtivemos os patamares de condutância para cada estado discreto na região de espalhamento do QPC (Fig.7 e Fig.8). Pode-se observar também a relação das dimensões da região de espalhamento com a interferência, resultado do espalhamento das ondas pelas barreiras formadas pelos gates. Com o aumento de  $W$  (Fig.7) aumenta-se o número de canais que contribuem no transporte ( $E_n \propto W^{-1}$ ). No limite onde  $W$  se aproxima das dimensões dos contatos, diminuímos o espalhamento na região central do dispositivo, diminuindo

assim as ondulações observadas nos patamares de condutância. Conforme aumentamos  $W$ , as ondulações diminuem e tendem às soluções observadas no QW (Fig.5). A variação de  $L$  (Fig.8) não reflete no número de canais para o transporte. Aumentando  $L$  observa-se um aumento no número de ondulações nos patamares, pois ocorrem mais espalhamentos no QPC devido aos potenciais de confinamento dos gates. No limite de  $L \rightarrow 0$  temos uma diminuição das ondulações e novamente nos aproximamos das soluções para o QW (Fig.5).

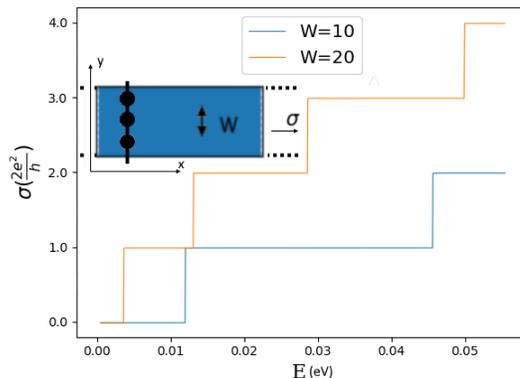


Figura 5. Resultado das simulações com QW. Aqui vemos os patamares de condutância para 2 tamanhos de cadeias transversais dadas em número de sítios. A quantidade de patamares está relacionada com a quantidade de modos transversais existentes no QW, que por sua vez dependem da quantidade de sítios transversais. O perfil de patamares *perfeitos* mostra que não há espalhamentos no QW.

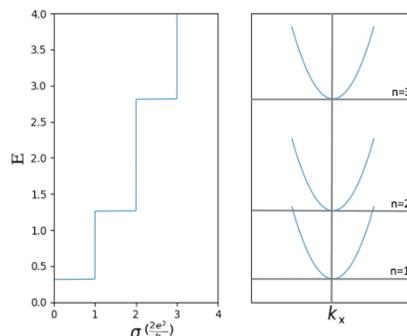


Figura 6. Patamares de condutância observados em um QW e a relação com as bandas de energia. Aqui observamos que cada patamar está associado com a contribuição de uma banda parabólica [eq.(25)], ou canal de transporte. Cada canal contribui com um *quanta* de condutância  $2e^2/h$ .

### B. Confinamento em duas dimensões: OQD

Para os OQDs (caixas quânticas abertas), foram feitas simulações modificando simultaneamente o tamanho das cadeias transversais  $W$  dos QPCs de entrada e saída

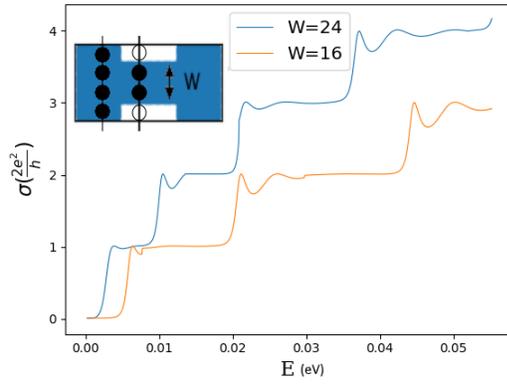


Figura 7. No QPC a variação de  $W$  influencia também no número de canais que contribuem para o transporte eletrônico através do dispositivo. Diferente do QW, no QPC são observadas ondulações nos patamares.

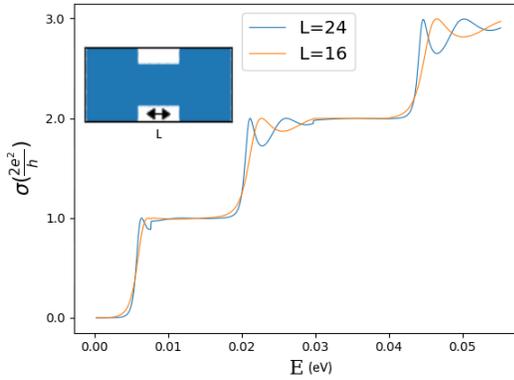


Figura 8. A variação de  $L$  altera a quantidade de ondulações nos patamares de condutância do QPC, devido aos espalhamentos que ocorrem dentro do dispositivo. Um confinamento virtual ocorre na direção  $x$  por causa do QPC de comprimento  $L$ .

(Fig.9), e também modificando a área da *caixa* central (Fig.10). Além disso, os lados da caixa central possuem as mesmas dimensões  $L$ , isto é, o dot central é quadrado. No limite de  $W \rightarrow 0$  temos uma caixa quântica bidimensional fechada (QD) e as soluções da equação de Schrödinger são dadas por:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^*} \left( \frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} \right) \quad (26)$$

O espectro de energia discreta e a falta de propagação livre são as principais características de um QD. Devido a este fato, são chamados de átomos artificiais [23]. No caso de  $L_x = L_y = L$ , temos que mais de uma função de onda corresponde a mesma energia total, neste caso o nível de energia é degenerado. Assim, a degenerescência é resultado da simetria do dispositivo. No caso do OQD, a abertura da caixa ( $W \neq 0$ ) quebra a degenerescência. As energias discretas associadas ao *quantum dot*

aberto podem ser vistas em Fig.9 e Fig.10 como picos estreitos (estados ressonantes ou quasi-ligados), associados com tunelamento ressonante através dos estados da caixa. Pode-se observar também a contribuição dos canais contínuos presentes nos QPCs em forma de patamares, que se acoplam aos estados discretos da caixa quântica. Os picos sobrepostos aos patamares indicam um fraco acoplamento entre os estados discretos (canal discreto) com os estados contínuos, resultando em uma superposição dos dois canais para o transporte. Já os *dips* indicam que o acoplamento entre os estados do OQD e dos QPCs geraram estados localizados que não contribuem para o transporte. A largura de linha do pico ressonante  $\Delta E$  está relacionada ao *tempo de vida* de transição da quasi-partícula naquele estado através do princípio da incerteza  $\tau \approx \frac{\hbar}{2\Delta E}$ . Além disso, a largura  $\Delta E$  diz o quão confinado é o estado. Por exemplo, na Fig.9 mostramos que  $\Delta E$  diminui quando fechamos a caixa quântica. Por outro lado, na Fig.10 mostramos que o aumento da área da caixa quântica faz diminuir as energias dos estados discretos, em concordância com a equação (26)

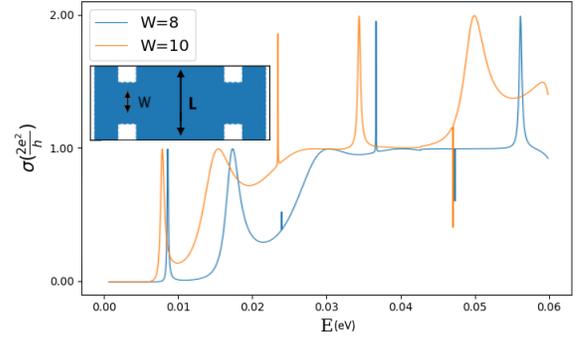


Figura 9. Condutância em um OQD em relação à variação do tamanho das cadeias transversais dos QPCs. Para  $W$  pequenos, nos aproximamos das soluções de uma caixa quântica, onde predominam estados discretos e bem localizados. Com o aumento de  $W$ , os estados do dot se acoplam aos estados dos QPCs, que possuem soluções contínuas e patamares de condutância. Conforme aumentamos  $W$ , nos aproximamos da solução de um QW

Gerando uma assimetria no QD, diminuindo a largura transversal  $L_y$  pode-se observar um pico ressonante conhecido como ressonância assimétrica de Fano [24] [25].

A quasi-partícula pode ser transmitida através de um estado discreto (OQD) ou através de um estado contínuo (QPC). A razão entre as probabilidades de transmissão através de um estado discreto e de um estado contínuo define um grau de acoplamento entre tais estados [25] e [24]:  $q = \frac{\langle \psi_D | T | i \rangle}{\langle \psi_C | T | i \rangle}$ . Onde  $|\psi_{D(C)}\rangle$  representa um estado discreto (contínuo) e  $|i\rangle$  um estado inicial. Na Fig.11 podemos observar ressonâncias simétricas (picos,  $q \rightarrow \infty$ ) e antirressonâncias (*dips*,  $q \rightarrow 0$ ). Quando  $q \rightarrow 1$ , temos contribuições praticamente iguais de transmissão devida aos estados discretos e contínuos. Nestas situações, temos ressonâncias de Fano assimétricas que indicam forte

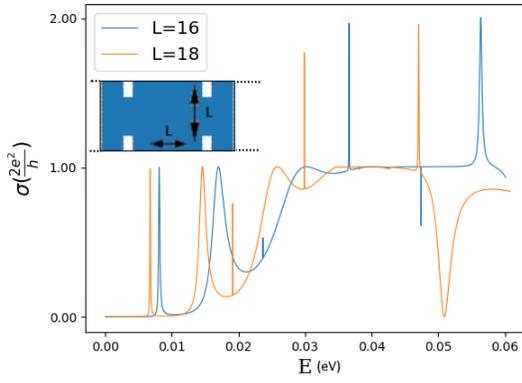


Figura 10. Com o aumento da área da caixa ( $L^2$ ), os estados discretos (picos ressonantes) são deslocados para menores energias.

acoplamento entre os estados discretos e contínuos. Em geral, uma ressonância assimétrica de Fano resulta do forte acoplamento entre um canal localizado e um canal contínuo. Observe nas Fig.9 e 10 que o terceiro estado discreto do sistema é muito confinado ( $\Delta E \rightarrow 0$ ), ou seja, muito localizado.

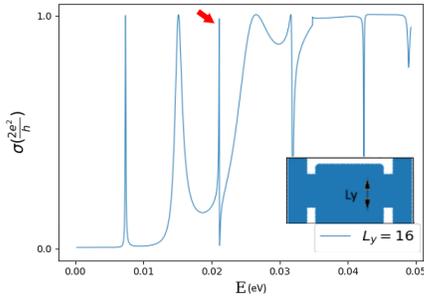


Figura 11. Ressonância de Fano assimétrica indicada com uma seta. A ressonância é relativa ao acoplamento do terceiro estado discreto do OQD (bem localizado) com o estado contínuo (patamar) do QPC.

### C. Sistemas acoplados

Nesta ultima parte, estudaremos um conjunto de  $n$  OQDs ( $n : 2, 3$ ) colocados em série e unidos mediante QPCs conectores de largura  $W$  e comprimento  $L$ , como mostrado nos insets das Figs.12,13,14 e 15.

Neste tipo de sistema, observamos a formação de minibandas de energia separadas por gaps de energia [26]. Uma analogia pode ser feita com o Tight Binding atômico. Onde os OQDs e os QPCs são análogos aos átomos e hopping entre primeiros vizinhos respectivamente [23]. Nos resultados apresentados a seguir (Figs. 12, 13, 14 e 15), temos a formação de uma primeira minibanda que é resultado do acoplamento entre os estados discretos de mais baixa energia dos OQDs (banda de estados

fundamentais). Em geral, o acoplamento de  $n$  estados é observado na condutância como um  $n$ -splitting (desdobramento), quanto maior seja a distância em energia entre os picos (maior largura de banda), maior será o acoplamento. Para o caso limite de desacoplamento entre os estados, um único pico será observado. O acoplamento pode ser aumentado, aumentando a largura  $W$  dos QPCs [Figs.12 e 14] ou diminuindo o comprimento  $L$  [Figs.13 e 15]. Por outro lado, a variação da largura transversal  $W$  [Figs. 12 e 14] dos QPCs que unem os OQDs altera o número de canais contínuos que contribuem para o transporte eletrônico para uma dada energia, por este motivo o patamar de condutância é deslocado. Já a variação da largura longitudinal  $L$  [Figs. 13 e 15] dos QPCs altera o acoplamento entre os OQDs e também as ondulações no patamar. Para baixos valores de  $L$ , observamos uma maior largura das minibandas de energia. Em geral, todos os efeitos discutidos para a primeira minibanda também podem ser observados para as outras minibandas, por exemplo, para a segunda minibanda estes efeitos ficam mais claros.

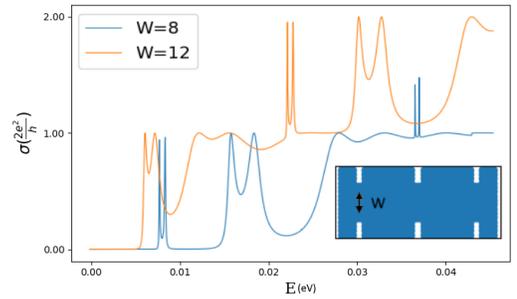


Figura 12. Acoplamento entre 2 OQDs. A variação de  $W$  altera o número de canais contínuos que contribuem para o transporte. O aumento de  $W$  melhora o acoplamento entre os OQDs.

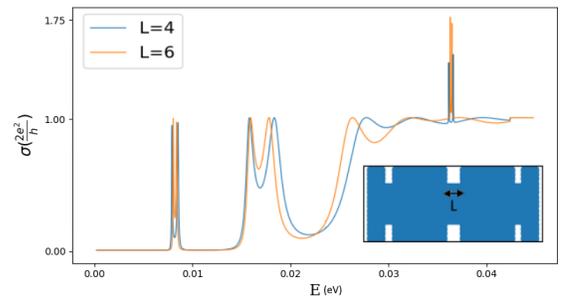


Figura 13. Acoplamento entre 2 OQDs. A diminuição de  $L$  aumenta o acoplamento dos estados discretos dos OQDs, gerando minibandas de maior largura.

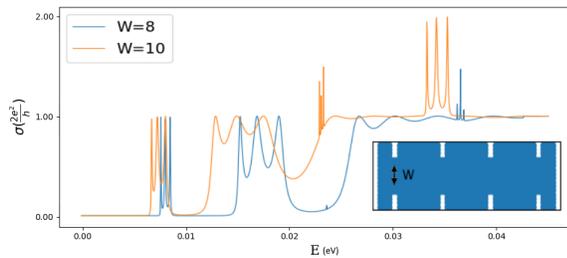


Figura 14. Acoplamento entre 3 OQDs. A variação de  $W$  altera o número de canais contínuos que contribuem para o transporte e controla a largura das mini-bandas.

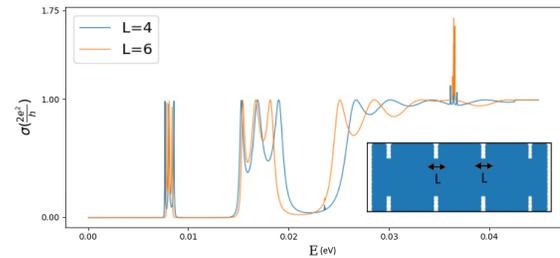


Figura 15. Acoplamento entre 3 OQDs. A variação de  $L$  aumenta (ou diminui) o acoplamento dos estados discretos dos OQDs, sem deslocamento apreciável do patamar contínuo.

#### D. Conclusões

A modelagem do 2DEG de GaAs usando o modelo Tight Binding na aproximação da massa efetiva, assim como o uso das técnicas recursivas de funções de Green, permitem a geração de algoritmos versáteis e rápidos, para o estudo de propriedades de transporte eletrônico. Estas propriedades de transporte são controladas por efeitos de interferência quântica. Uma espectroscopia das formas de linha observadas na condutância, como patamares, picos simétricos, ressonâncias de Fano, dips e splitting, permitem interpretar medidas experimentais.

- 
- [1] B. Van Wees, H. Van Houten, C. Beenakker, J. G. Williamson, L. Kouwenhoven, D. Van der Marel, and C. Foxon, *Physical Review Letters* **60**, 848 (1988).
  - [2] G. M. M. L. Torre, *Espectroscopia de Tunelamento em Sistemas Nanoscópicos de Transporte Balístico*, Ph.D. thesis, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP (2003).
  - [3] M. J. Manfra, “Molecular beam epitaxy of ultra-high quality algaas/gaas heterostructures: Enabling physics in low-dimensional electronic systems,” (2013).
  - [4] J. Lantz, V. Shumeiko, E. Bratus, and G. Wendin, *Physica C: Superconductivity* **368**, 315 (2002).
  - [5] C. Kittel, *Introduction to solid state physics* (Wiley, 2005).
  - [6] N. Ashcroft and N. Mermin, *Solid State Physics (Brooks Cole, 1976)* (1993).
  - [7] A. T. Paxton, Atomistic Simulation Centre, School of Mathematics and Physics, Queen’s University Belfast UK, 32.
  - [8] J. C. Slater and G. F. Koster, *Physical Review* **94**, 1498 (1954).
  - [9] L. E. Henrickson, K. Hirakawa, J. Frey, and T. Ikoma, *Journal of applied physics* **71**, 3883 (1992).
  - [10] D. K. Ferry, H. L. Grubin, C. Jacoboni, and A.-P. Jauho, *Quantum Transport in Ultrasmall Devices: Proceedings of a NATO Advanced Study Institute on Quantum Transport in Ultrasmall Devices, held July 17–30, 1994, in II Ciocco, Italy*, Vol. 342 (Springer Science & Business Media, 2012).
  - [11] J. Stewart, Cengage Learning **7** (2006).
  - [12] S. Datta, *Electronic transport in mesoscopic systems* (Cambridge university press, 1997).
  - [13] C. H. Lewenkopf and E. R. Mucciolo, *Journal of Computational Electronics* **12**, 203 (2013).
  - [14] D. Ferry and S. M. Goodnick, *Transport in nanostructures*, 6 (Cambridge university press, 1997).
  - [15] R. Landauer, *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter* **68**, 217 (1987).
  - [16] M. Büttiker, Y. Imry, R. Landauer, and S. Pinhas, *Physical Review B* **31**, 6207 (1985).
  - [17] J. Pendry, A. Prêtre, P. Rous, and L. Martín-Moreno, *Surface science* **244**, 160 (1991).
  - [18] H. Van Houten and C. Beenakker, arXiv preprint cond-mat/0512609 (2005).
  - [19] T. Lundberg, J. Frost, K. Berggren, Z. Ji, C. Liang, I. Castleton, D. Ritchie, and M. Pepper, *Semiconductor science and technology* **12**, 875 (1997).
  - [20] M. Büttiker, *Physical Review B* **41**, 7906 (1990).
  - [21] G. Klimeck, “Nanoelectronic modeling lecture 21: Recursive green function algorithm,” (2010).
  - [22] E. N. Economou, *Green’s functions in quantum physics*, Vol. 3 (Springer, 1990).
  - [23] F. Waugh, M. Berry, D. Mar, R. Westervelt, K. Campman, and A. Gossard, *Physical Review Letters* **75**, 705 (1995).
  - [24] U. Fano, *Phys. Rev.* **124**, 1866 (1961).
  - [25] A. E. Miroshnichenko, S. Flach, and Y. S. Kivshar, *Reviews of Modern Physics* **82**, 2257 (2010).
  - [26] J. Brum, *Physical Review B* **43**, 12082 (1991).