

CENTRO UNIVERSITÁRIO FEI
GUSTAVO JUSTO MONTESANI

**ANÁLISE, SIMULAÇÃO E MODELAGEM DE DISPOSITIVOS OBTIDOS POR
DEPOSIÇÃO DE MATERIAIS INTELIGENTES SOBRE ISOLANTE**

São Bernardo do Campo

2021

GUSTAVO JUSTO MONTESANI

**ANÁLISE, SIMULAÇÃO E MODELAGEM DE DISPOSITIVOS OBTIDOS POR
DEPOSIÇÃO DE MATERIAIS INTELIGENTES SOBRE ISOLANTE**

Dissertação apresentada no exame de qualificação ao Centro Universitário FEI, como parte dos requisitos necessários para obtenção do título de Mestre em Engenharia Elétrica. Orientado pelo Prof. Renato Giacomini.

São Bernardo do Campo

2021

Montesani, Gustavo Justo.

Análise, simulação e modelagem de dispositivos obtidos por deposição de materiais inteligentes sobre isolante / Gustavo Justo Montesani. São Bernardo do Campo, 2022.

111 p. : il.

Dissertação - Centro Universitário FEI.

Orientador: Prof. Dr. Renato Camargo Giacomini.

Coorientador: Prof. Dr. Rudolf Theoderich Buhler.

1. FEBID. 2. Materiais inteligentes. 3. Simulador numérico. 4. MIMTUN.
5. Geometria dos grãos. I. Giacomini, Renato Camargo, orient. II. Título.

Aluno: Gustavo Justo Montesani

Matrícula: 119301-0

Título do Trabalho: Análise, simulação e modelagem de dispositivos obtidos por deposição de materiais inteligentes sobre isolante.

Área de Concentração: Nanoeletrônica e Circuitos Integrados

Orientador: Prof. Dr. Renato Camargo Giacomini

Data da realização da defesa: 17/12/2021

ORIGINAL ASSINADA

Avaliação da Banca Examinadora:

O candidato apresentou seu trabalho à banca e demais presentes, tendo sido arguido por cada membro, dirimido as dúvidas e esclarecido todas as questões. A banca deliberou em separado e aprovou o candidato por unanimidade. As sugestões e críticas serão consideradas e deverá ser gerado um trabalho final no prazo regimental.

São Bernardo do Campo, / / .

MEMBROS DA BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Renato Camargo Giacomini

Ass.: _____

Profª. Drª. Milene Galeti

Ass.: _____

Prof. Dr. Sandro Martini

Ass.: _____

A Banca Julgadora acima-assinada atribuiu ao aluno o seguinte resultado:

APROVADO

REPROVADO

VERSÃO FINAL DA DISSERTAÇÃO

**APROVO A VERSÃO FINAL DA DISSERTAÇÃO EM QUE
FORAM INCLUÍDAS AS RECOMENDAÇÕES DA BANCA
EXAMINADORA**

Aprovação do Coordenador do Programa de Pós-graduação

Prof. Dr. Carlos Eduardo Thomaz

Dedico esse trabalho à minha família, que é o motor principal da minha vida.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus pela capacitação que me concedeu e contínua força para prevalecer contra os obstáculos da vida.

À minha família que é força motriz da minha vida, com todo seu incentivo e compreensão nos momentos fáceis e nos momentos difíceis.

Agradeço ao Professor Doutor Renato Giacomini por me acolher nessa jornada.

Agradecimentos especiais para o professor Rudolf Buhler que me instruiu ao longo do mestrado com paciência e dedicação e ao professor Marcos Puydinger que dedicou muitas horas do seu tempo para me instruir e explanar conceitos fundamentais desse trabalho.

Agradeço também ao Centro Universitário da FEI, que me concedeu a oportunidade de realizar esse trabalho.

“Não importa o que você faça, desde que você transforme alguma coisa, do jeito que era antes de você tocá-la, em algo que é como você depois que suas mãos passaram por ela”.
(BRADBURY, 2012)

RESUMO

A simulação de estruturas que experimentalmente são fabricadas por meio de deposição induzida por feixe de elétrons focalizados (do inglês, *focused-electron-beam-induced deposition*, FEBID) num simulador numérico TCAD contribui para o avanço em estudos com materiais inteligentes, uma vez que é possível fabricá-los fazendo uso desse método que dispensa a utilização de máscaras, necessárias nos métodos convencionais. Os materiais inteligentes se mostram úteis por variar uma ou mais de suas propriedades mediante a uma variação do meio em que estão inseridos. O *software* Atlas, utilizado para as simulações dos materiais inteligentes, foi concebido para realizar simulações de materiais semicondutores. Portanto, algumas novas propostas de uso e adaptações são realizadas no decorrer do trabalho.

Inicialmente, é feita a modelagem do dispositivo, ajustando os parâmetros dos materiais e também o ajuste do modelo MIMTUN, de tunelamento quântico, utilizado nas simulações. Adicionalmente, foram variadas as geometrias dos grãos contemplando grãos quadrados, hexagonais e também octogonais, como forma de simplificar as estruturas, viabilizar e acelerar as simulações.

As simulações contemplam a variação das distâncias dos grãos nas direções horizontal e vertical, bem como a variação da temperatura de simulação, seguidas de uma análise da confiabilidade das simulações pelas suas regressões de uma curva esperada. Os grãos octogonais possuem a resposta que mais se assemelha à resposta esperada por grãos circulares quando se considera a variação da distância.

Por fim, foi proposta uma aplicação do dispositivo simulado como um sensor de deformação mecânica aplicado a um veículo, contemplando uma pequena variação da distância entre os grãos gerando assim uma variação da resposta de corrente elétrica.

Palavras-chave: FEBID. Materiais inteligentes. Simulador numérico. MIMTUN. Geometria dos grãos.

ABSTRACT

The simulation of structures that are experimentally fabricated by means of focused-electron-beam-induced deposition (FEBID) in a TCAD numerical simulator contributes to advances in studies with smart materials, since it is possible to manufacture them using this method that does not require the use of masks, which are necessary in conventional fabrication processes. Smart materials are useful for varying one or more of their properties through a variation of the medium in which they are inserted. The Atlas software, used for the simulations of smart materials, was conceived to carry out simulations of semiconductor materials. So, some new use proposals and adaptations are carried out in the course of the work.

Initially, the modeling of the device is carried out, adjusting the parameters of the materials and also the adjustment of the MIMTUN model, of quantum tunneling, used in the simulations. Additionally, the grain geometries were varied, including square, hexagonal and octagonal grains, as a way of simplifying the structures, enabling and accelerating the simulations.

The simulations contemplate the variation of the grain distances in the horizontal and vertical directions, as well as the variation of the simulation temperature, followed by an analysis of the reliability of the simulations by their regressions of an expected curve. Octagonal grains have the response that most resembles the response expected by circular grains when considering the variation in distance.

Lastly, an application of the simulated device was proposed as a mechanical deformation sensor applied to the vehicle, contemplating a small variation in the distance between the grains, thus generating a variation of the electric current response.

Keywords: FEBID. Smart materials. Numerical simulator. MIMTUN. Grain geometry.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Esquema genérico de fabricação FEBID	28
Figura 2 - Diagrama esquemático de um sistema FEBID	29
Figura 3 - Injeção de precursor e deposição	30
Figura 4 - Ilustração da reação de dissociação	32
Figura 5 - Geração de elétrons secundários por colisão inelástica do feixe primário com os átomos constituintes do substrato.	33
Figura 6 - Geração de elétrons secundários por elétron retroespalhado.....	34
Figura 7 - Simulação de Monte-Carlo da trajetória de elétrons	35
Figura 8 - Exemplo de estrutura nanogranular tomada em microscópio eletrônico de transmissão sobre depósito de Co-C por FEBID.....	37
Figura 9 - Diagrama de regimes de transporte em materiais nanogranulares.	39
Figura 10 - Sensor de deformação mecânica.....	41
Figura 11 - Sensor de umidade	42
Figura 12 - Sensor de efeito Hall baseado em materiais granulares com alta sensibilidade. ...	43
Figura 13 - Exemplo da estrutura do dispositivo mostrando linhas e nós utilizado na simulação em duas dimensões.	46
Figura 14 – Adaptações para o grão de 6 nanômetros a fim de contornar a limitação do simulador.	48
Figura 15 – Medidas dos grãos hexagonal e octogonal.....	48
Figura 16 - Diagramas de bandas para os grãos	50
Figura 17 - Definindo afinidade eletrônica do isolante	51
Figura 18 - Espaçamento entre grãos em uma dimensão para o caso octogonal.....	53
Figura 19 - Distância de centro a centro para o deslocamento em duas dimensões para o caso octogonal	54
Figura 20 - Variação do deslocamento vertical entre os grãos de platina para a forma quadrada com o espaçamento de 2 nanômetros.	56
Figura 21 - Distância mínima em função da distância de centro a centro para grãos quadrados	58
Figura 22 – Variação do deslocamento vertical entre os grãos de platina para a forma hexagonal com o espaçamento de 2 nanômetros.	59
Figura 23 - Distância mínima em função da distância de centro a centro para grãos hexagonais	61

Figura 24 - Variação do deslocamento vertical entre os grãos de platina para a forma octogonal com o espaçamento de 2 nanômetros.	62
Figura 25 - Distância mínima em função da distância de centro a centro para grãos octogonais	64
Figura 26 - Variação da região que contempla a distância mínima entre grãos.....	65
Figura 27 - Gráfico comparativo das correntes elétricas resultantes da variação da região que contempla a distância mínima dos grãos	66
Figura 28 – Variação da distância mínima mantendo-se a altura do grão da direita.....	67
Figura 29 - Gráfico comparativo das correntes elétricas resultantes da variação da distância mínima dos grãos.....	67
Figura 30 – Níveis de condução e valência e aplicação de potencial para o caso dos grãos quadrados.....	69
Figura 31 - Exemplo de resposta de corrente elétrica com a variação da tensão, para o caso de grãos hexagonais e espaçamento entre grãos de 2 nm, acompanhada de sua regressão linear e desvio desta.....	71
Figura 32 - Nível de corrente e inclinação em função do MIMSLICEPTS	72
Figura 33 - Distâncias de centro a centro com variação horizontal nos grãos quadrados	73
Figura 34 - Correntes dos grãos quadrados considerando a variação das distâncias horizontais	74
Figura 35 - Inclinações em A/V dos grãos quadrados em função da distância de centro a centro e distância mínima dos grãos.....	75
Figura 36 - Distâncias de centro a centro com variação horizontal nos grãos hexagonais	76
Figura 37 - Correntes dos grãos hexagonais considerando a variação das distâncias horizontais	77
Figura 38 - Inclinações em A/V dos grãos hexagonais em função da distância de centro a centro e distância mínima dos grãos.....	78
Figura 39 - Distâncias de centro a centro com variação horizontal nos grãos octogonais	79
Figura 40 - Correntes dos grãos octogonais considerando a variação das distâncias horizontais	80
Figura 41 - Inclinações em A/V dos grãos octogonais em função da distância de centro a centro e distância mínima dos grãos.....	81
Figura 42 - Desvio quadrático normalizado da regressão linear para todos os casos de distância de centro a centro para as três geometrias de grãos.....	82
Figura 43 - Grãos cúbicos espaçados horizontalmente	83

Figura 44 - Gráfico comparativo das correntes provenientes do mecanismo de tunelamento com a corrente do mecanismo de condução clássico	85
Figura 45 - Correntes dos grãos para múltiplas temperaturas	86
Figura 46 - Gráfico tridimensional da corrente em função do espaçamento e da temperatura	87
Figura 47 - Gráfico tridimensional da condutância em função do espaçamento e da temperatura	88
Figura 48 - Erros quadráticos normalizados para várias temperaturas.....	89
Figura 49 - Veículo desenvolvido pelo projeto "Fórmula fei elétrico"	90
Figura 50 - Estrutura do veículo do projeto "Fórmula fei elétrico" com ênfase no local proposto para a proposta de aplicação.....	91
Figura 51 - Área preenchida de material dos cilindros vazados utilizados na construção do veículo do projeto "Fórmula fei elétrico"	93
Figura 52 - Variação da deformação mecânica em função da força unidirecional aplicada ao cilindro vazado	94
Figura 53 - Esboço de aplicação de força unidirecional ocasionando a variação da distância dos grãos.....	95
Figura 54 - Variação da corrente elétrica em função da distância entre os grãos quadrados e potencial fixo de 1mV	96
Figura 55 - Corrente elétrica de um par de nanogrãos quando submetidos a variação de força que o objeto de estudo experimentou	97
Figura 56 - Proposta para amplificar a corrente utilizando diversos pares de grãos nanométricos circundando o cilindro	98
Figura 57 - Esboço do posicionamento e afastamento dos grãos na superfície externa do cilindro	99
Figura 58 - Corrente elétrica de 3325000 pares de nanogrãos quando submetidos a variação de força que o objeto de estudo experimentou	100

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Lista contendo alguns precursores organometálicos e suas purezas máximas obtidas em processos de deposição por FEBID.	31
Tabela 2 – Reações elétron-precursor durante o processo de deposição por FEBID.	32
Tabela 3 - Valores para a distância de centro a centro dos grãos	55
Tabela 4 - Distâncias mínimas para os grãos quadrados	57
Tabela 5 - Distâncias mínimas para os grãos hexagonais	60
Tabela 6 - Distâncias mínimas para os grãos octogonais	63
Tabela 7 - Variação da corrente resistiva em função do espaçamento	84

LISTA DE SÍMBOLOS

a	Fator que multiplica o termo das abcissas da reta [adimensional]
A	Área da face do nanogrão cúbico [nm^2]
A_{Total}	Área total da vista frontal do cilindro [m^2]
A_{oca}	Área vazada da vista frontal do cilindro [m^2]
b	Fator que multiplica o termo das ordenadas da reta [adimensional]
c	Ponto de intersecção da reta [nm]
$\text{desl}Y$	Deslocamento vertical do centro do segundo grão [nm]
dist	Distância horizontal dos centros dos grãos [nm]
distcc	Distância de centro a centro dos grãos [nm]
distmin	Distância mínima entre as bordas dos grãos [nm]
$d_{P,P}$	Distância entre pontos [nm]
$d_{P,r}$	Distância de ponto a reta [nm]
espaçamento	Distância horizontal entre as bordas dos grãos [nm]
e^-	Elétron [adimensional]
E	Energia incidente do portador de carga [J]
E_i	Energia cinética inicial do elétron [J]
E_{Fl}	Nível de quase-Fermi do metal da esquerda [eV]
E_{Fr}	Nível de quase-Fermi do metal da direita [eV]
E_g	Banda proibida [eV]
E_r	Energia cinética residual do elétron, após colisão [J]
$E_{\text{vácuo}}$	Energia de vácuo [eV]
E_{Young}	Módulo de Young do material [Pa]
F	Força uniaxial [N]
g	Força de acoplamento [adimensional]
g_c	Força de acoplamento crítica [adimensional]
G	Condutância de tunelamento [$\text{C}^2/\text{eV s}$]

h	Constante de Planck [$\text{m}^2 \text{Kg/s}$]
H	Campo magnético perpendicular [A/m]
I	Corrente elétrica [A]
k_B	Constante de Boltzmann [$\text{m}^2 \text{kg/s}^2 \text{K}$]
L	Comprimento inicial [nm]
L_{ext}	Comprimento da circunferência externa [m]
M	Componente de magnetização na direção do campo magnético [A/m]
m_y	Massa efetiva da densidade de estados na direção y [Kg]
m_z	Massa efetiva da densidade de estados na direção z [Kg]
N_{esp}	Número de espaços que cabem um grão cúbico [adimensional]
N_F	Número de estados eletrônicos próximos ao potencial de Fermi [$1/(\text{eV nm}^3)$]
q	Carga elementar [C]
raio	Distância do centro do grão às bordas horizontal e vertical [nm]
r	Raio externo do cilindro [m]
R	Resistência [Ω]
r'	Raio interno do cilindro [m]
R_o	Constante Hall ordinária [m^3/C]
R_S	Constante Hall espontânea [m^3/C]
T	Temperatura [K]
$T(E)$	Probabilidade de transmissão [adimensional]
U	Diferença de potencial [V]
V	Volume do grão nanométrico [nm^3]
V_{pol}	Tensão de polarização [V]
x_a	Coordenada da abcissa do ponto a [nm]
x_b	Coordenada da abcissa do ponto b [nm]
x_p	Coordenada da abcissa do ponto [nm]

y_a	Coordenada da ordenada do ponto a [nm]
y_b	Coordenada da ordenada do ponto b [nm]
y_p	Coordenada da ordenada do ponto [nm]
α	Ângulo de inclinação da regressão linear [A/V]
Γ	Parâmetro de alargamento [eV]
δ	Espaçamento médio [eV]
ΔL	Comprimento final, após deformação mecânica [nm]
μ_o	Constante de permeabilidade magnética do espaço livre [Tm/A]
ρ	Resistividade [Ωm]
ρ_{EHE}	Resistividade Hall pelo efeito Hall extraordinário [Ωm]
ρ_H	Resistividade Hall [Ωm]
ρ_{OH}	Resistividade Hall pelo efeito Hall ordinário [Ωm]
σ	Estresse uniaxial [Pa]
χ_{is}	Afinidade eletrônica do isolante [eV]
Φ_{M1}	Função trabalho do metal 1 [eV]
Φ_{M2}	Função trabalho do metal 2 [eV]

LISTA DE ABREVIATURAS

2D	Bidimensional
3D	Tridimensional
EP	Elétron Primário
ERE	Elétron Retroespalhado
ES	Elétron Secundário
FEB	Focused-electron-beam
FEBID	Focused-electron-beam-induced deposition
FIB	Focused-ion-beam
MIMTUN	Metal-Insulator-Metal Direct Tunneling

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	25
2	CONCEITOS BÁSICOS.....	27
2.1	PROCESSO DE FABRICAÇÃO FEBID	27
2.1.1	Aspectos gerais.....	27
2.2	MATERIAIS INTELIGENTES	35
2.2.1	Estrutura nanogranular.....	36
2.2.2	Aplicação em sensores.....	40
2.2.2.1	<i>Sensor de deformação mecânica.....</i>	<i>40</i>
2.2.2.2	<i>Sensor de umidade.....</i>	<i>41</i>
2.2.2.3	<i>Sensor de campo magnético.....</i>	<i>42</i>
3	MATERIAIS E MÉTODOS	45
3.1	PROCESSO DE SIMULAÇÃO	45
3.1.1	Limitação geométrica do software	47
3.1.2	Modelo	49
3.2	DEFINIÇÕES.....	50
3.3	VARIAÇÃO DA DISTÂNCIA ENTRE GRÃOS	52
3.3.1	Distância mínima entre grãos quadrados.....	56
3.3.2	Distância mínima entre grãos hexagonais.....	58
3.3.3	Distância mínima entre grãos octogonais.....	62
3.4	INFLUÊNCIA DA ÁREA E DA DISTÂNCIA MÍNIMA	64
4	RESULTADOS	69
4.1	DEFINIÇÕES.....	69
4.2	VARIAÇÃO DA DISTÂNCIA ENTRE GRÃOS	73
4.2.1	Grãos quadrados.....	73
4.2.2	Grãos hexagonais.....	76
4.2.3	Grãos octogonais.....	78
4.2.4	Erro quadrático	81
4.3	RESISTIVIDADE	82

4.4	TEMPERATURA.....	86
5	PROPOSTA DE APLICAÇÃO.....	90
6	CONCLUSÕES.....	101
	PUBLICAÇÕES GERADAS.....	103
	REFERÊNCIAS.....	104
	APÊNDICE A – ARQUIVO DE SIMULAÇÃO COM GRÃO QUADRADO	109

1 INTRODUÇÃO

Materiais inteligentes são materiais que respondem de uma maneira previsível a mudanças do meio em que estão e os mesmos podem ser usados para construção de estruturas inteligentes (FARAG, 2019). Graças a recentes avanços na ciência dos materiais, a durabilidade e o desempenho de materiais inteligentes tem aumentado significativamente nas últimas décadas (RIZZELLO *et al.*, 2017).

Existem diversas formas de fabricar materiais inteligentes e a habilidade de manipular e processar materiais na escala nanométrica com excelente reprodutibilidade é vital para o avanço da área da nanotecnologia. Um método emergente com escrita direta (sem a utilização de máscaras) é o FEBID (RANDOLPH; FOWLKES; RACK, 2006). O método FEBID possibilita uma gama de aplicações com materiais nobres, como ouro, cobalto e platina, sendo esse último o foco deste trabalho.

Simulações numéricas podem ser usadas para reproduzir uma resposta elétrica de materiais inteligentes, incluindo respostas de resistividade para aplicações como sensores. Os dados coletados por meio de simulações são particularmente importantes, pois permitem a análise do campo elétrico, do potencial e permitem a análise dos parâmetros envolvidos na simulação com certa praticidade. Embora importantes, tais simulações podem ser excessivamente complexas e demoradas (JALIL, 2002). Este trabalho propõe uma abordagem utilizando um simulador numérico de dispositivo com modelos baseados em física, para simplificar as simulações sem comprometer os resultados, permitindo estimar a dependência elétrica do dispositivo em parâmetros físicos. Torna-se possível então analisar a alteração do comportamento elétrico do dispositivo, baseado em nanogrãos, pela variação de parâmetros, como geometria do grão, temperatura e distância entre grãos.

Este trabalho está dividido em seis capítulos. O primeiro é uma breve introdução sobre o que será discutido ao longo do trabalho. O segundo trata dos conceitos básicos do processo de fabricação FEBID e dos materiais inteligentes contemplando estruturas e aplicações dos mesmos. O terceiro capítulo aborda as simulações numéricas, apresentando as limitações do *software* utilizado e também o modelo de condução.

O quarto capítulo aborda as considerações feitas para as simulações e os resultados contemplando as formas de grãos abordadas neste trabalho e a variação da temperatura nos dispositivos, analisando também a confiabilidade das simulações e realizando um estudo da corrente proveniente do mecanismo de condução clássica. O quinto capítulo apresenta uma aplicação do dispositivo desenvolvido ao decorrer do trabalho, como um sensor de deformação

mecânica. O sexto e último capítulo contém a conclusão do trabalho juntamente a recapitulação dos principais tópicos e resultados. Em seguida a lista de publicações geradas ao longo da dissertação de mestrado, seguida pelas referências bibliográficas e pelo apêndice contendo um arquivo exemplo utilizado para a simulação do grão quadrado.

2 CONCEITOS BÁSICOS

Para uma compreensão mais profunda dos parâmetros das simulações (como a dimensão do tamanho de grão e dos materiais utilizados) se faz necessário o entendimento do processo de fabricação. Portanto, neste capítulo, são apresentados os conceitos do processo de fabricação FEBID, dos materiais inteligentes e exemplos de aplicação em sensores.

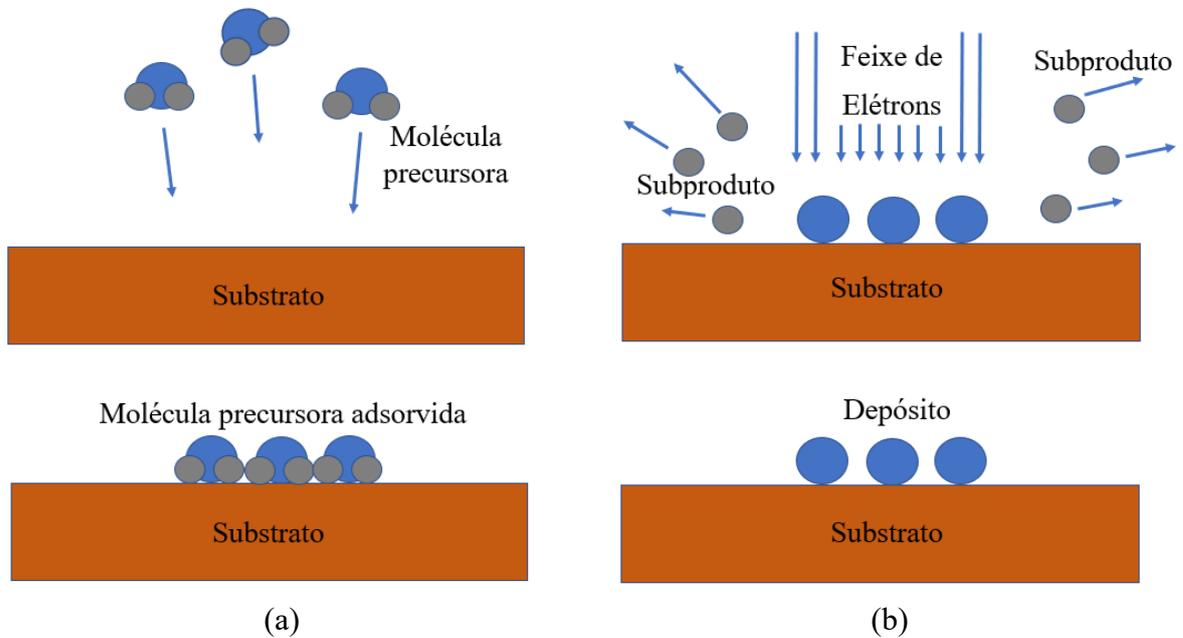
2.1 PROCESSO DE FABRICAÇÃO FEBID

A deposição induzida por feixe de elétrons focalizados (do inglês, *focused-electron-beam-induced deposition*, FEBID) é um método muito versátil de escrita direta que permite a deposição de estruturas 3D com resolução espacial nanométrica (UTKE; STANISLAV; PHILLIP, 2012). Tal método se mostra extremamente útil para o desenvolvimento de dispositivos em escalas nanométricas, permitindo o controle da área do substrato onde a deposição ocorre e também da forma que o depósito adquire.

2.1.1 Aspectos gerais

Os componentes mais importantes necessários para o processo de fabricação FEBID são o feixe de elétrons (gerado por um microscópio eletrônico de varredura) e o sistema de injeção de gás, que fornece as moléculas precursoras gasosas (KOLB, 2013). Nesse método, as moléculas precursoras injetadas na câmara são adsorvidas pelo substrato como visto na Figura 1 (a). Este, por sua vez, é exposto ao feixe de elétrons focalizados promovendo, assim, a deposição pela reação de dissociação, o que resulta num depósito sólido como visto na Figura 1 (b) e em um subproduto volátil que será bombeado para fora da câmara.

Figura 1 – Esquema genérico de fabricação FEBID

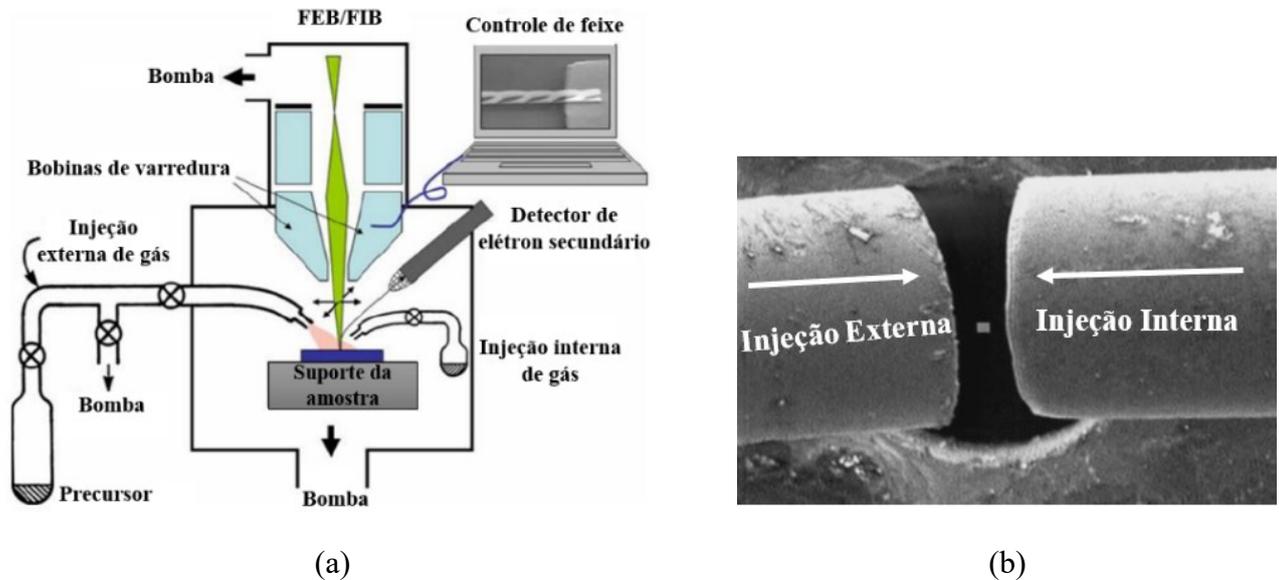


Fonte: Autor.

Legenda: No item a pode-se ver a injeção da molécula precursora seguida de sua adsorção pelo substrato e no item b é representado o feixe de elétrons focalizado que dissocia as moléculas em um depósito sólido e um subproduto volátil.

Um diagrama esquemático do processo de fabricação FEBID pode ser encontrado na Figura 2 (a). À esquerda do diagrama vemos o precursor armazenado e acoplado a um sistema de injeção de gás, o qual deve estar aquecido acima do ponto de fusão para fornecer um fluxo gasoso relativamente intenso. O precursor é então injetado na câmara pressurizada por uma agulha metálica, cujo diâmetro possui da ordem de centenas de micrometros, como apresentado na imagem de microscopia eletrônica de varredura da Figura 2 (b). À direita da Figura 2 (a), dentro da câmara, existe um sistema injetor de gás interno, que também pode fornecer um gás precursor ou um gás oxidante, também injetado por uma agulha metálica.

Figura 2 - Diagrama esquemático de um sistema FEBID



Fonte: Autor “adaptado de” Utke, Hoffman e Melngailis, 2008.

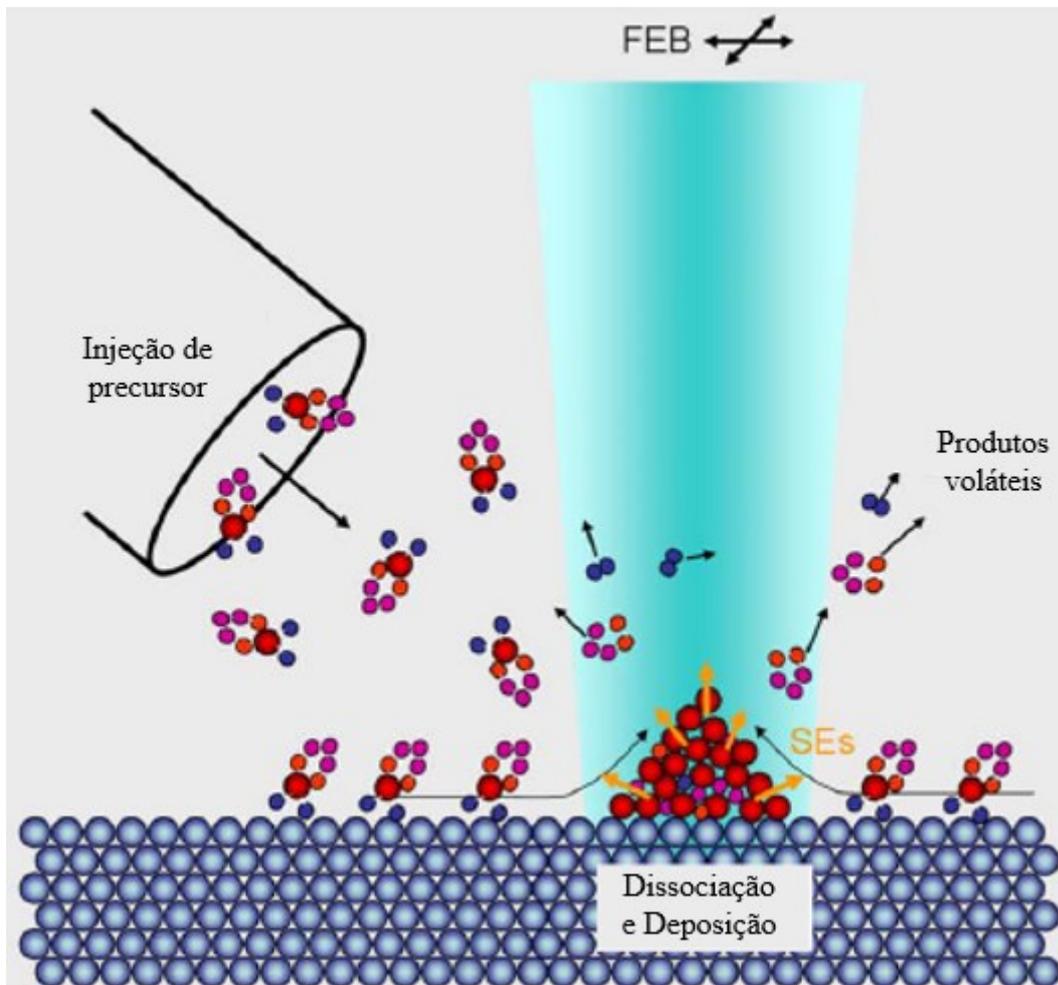
O emissor de elétrons é visto na região superior do sistema eletro-óptico do microscópio. O esquema contempla um emissor genérico, podendo emitir elétrons (*focused-electron-beam*, FEB) ou íons (*focused-ion-beam*, FIB), a depender do *setup* experimental. Porém, no caso FEBID, a fonte é exclusivamente de elétrons. O controle do feixe de elétrons é bastante preciso e de alta importância para a qualidade do dispositivo fabricado, pois alguns dos principais parâmetros que governam o processo de escrita do FEBID são a energia de feixe primária, e a dose de elétrons sobre o substrato, que é determinada por parâmetros como a corrente de emissão, o tempo de permanência (tempo que o feixe permanece num mesmo ponto da superfície durante a escrita do padrão), distância entre pontos de residência do feixe, além do número de vezes que o padrão é repetido na amostra (HUTH, Michael *et al.*, 2012). Esses fatores influenciam na geometria do material depositado e em sua composição química, o que, posteriormente, influencia em sua condutividade elétrica. Portanto, o controle de feixe é fundamental. O movimento do feixe de elétrons durante o processo de deposição é semelhante ao processo de varredura de microscopia eletrônica, percorrendo a amostra de acordo com o padrão desejado e a resolução alcançável da estrutura é influenciada pelo diâmetro e perfil do feixe (KOLB, 2013).

Em geral, a estrutura da molécula precursora consiste num átomo ou íon funcional central rodeado por ligantes (KOLB, 2013). Esse átomo ou íon funcional está relacionado com o depósito (no caso deste trabalho depósito metálico) que o processo tem como objetivo.

Também é importante considerar que o processo de dissociação do precursor é fortemente dependente da energia do feixe de elétrons (HUTH, M.; PORRATI; DOBROVOLSKIY, 2018). Portanto para cada precursor há uma energia que otimiza a deposição, embora elas sejam tipicamente a ordem de alguns elétron-volts.

A Figura 3 esboça a injeção do precursor, a dissociação e a deposição. Na lateral esquerda da figura temos o precursor sendo injetado pela agulha, o precursor então é adsorvido pela superfície do substrato e submetido ao feixe de elétrons primários, que desencadeiam as diversas reações que causam a dissociação das moléculas precursoras e que geram um produto volátil e um depósito metálico.

Figura 3 - Injeção de precursor e deposição



Fonte: Autor “adaptado de” Utke, Hoffmann and Melngallis, 2008.

Atualmente, há um grande número de diferentes precursores em uso, os quais, cobrem uma ampla gama de aplicações em processos de fabricação por FEBID. Alguns exemplos de

materiais precursores que resultam em depósitos metálicos podem ser vistos na Tabela 1, onde a porcentagem exibida na segunda coluna é a porcentagem de metal do depósito resultante e, o valor restante é composto essencialmente dos ligantes da molécula precursora (predominantemente carbono e oxigênio). Esses ligantes são provenientes de eventos de dissociação parcial da molécula precursora, fazendo com que a molécula parcialmente fragmentada seja enterrada junto com a porção não volátil (metal). Esse processo torna o material resultante do processo de deposição por FEBID parcialmente contaminado, o que, em alguma medida, reduz a capacidade de condução elétrica (UTKE; STANISLAV; PHILLIP, 2012).

Tabela 1 – Lista contendo alguns precursores organometálicos e suas purezas máximas obtidas em processos de deposição por FEBID.

Precursor	Porcentagem máxima de metal	Impurezas
$Me_3CpMePt(IV) + O_2$	$Pt \approx 100at. \%$	C
$Co_2(CO)_8$	$Co, 93at. \%$	C, O
$Fe(CO)_5$	$Fe, 76at. \%$	C, O
$HCo_3Fe(CO)_{12}$	$Co_3Fe, 84at. \%$	C, O
$W(CO)_6$	$W, 50at. \%$	C, O

Fonte: Autor “adaptado de” Huth, Porrati e Dobrovolsky, 2018.

O fluxo do precursor é fundamental no processo de fabricação do dispositivo e deve ser devidamente controlado. A proporção de elétrons e proporção de precursores, em conjunto com o tempo de residência do elétron no substrato (*dwel time*) são fatores que determinam o regime de crescimento (HUTH, M.; PORRATI; DOBROVOLSKIY, 2018), ou seja, a relação do número de elétrons pelo número de moléculas precursoras influencia as propriedades químicas finais do depósito.

Dependendo da energia dos elétrons, diversos eventos podem resultar da colisão entre o elétron e o precursor organometálico injetado na câmara e adsorvido pelo substrato. A Tabela 2 lista os eventos mais relevantes na fabricação por FEBID.

Tabela 2 – Reações elétron-precursor durante o processo de deposição por FEBID.

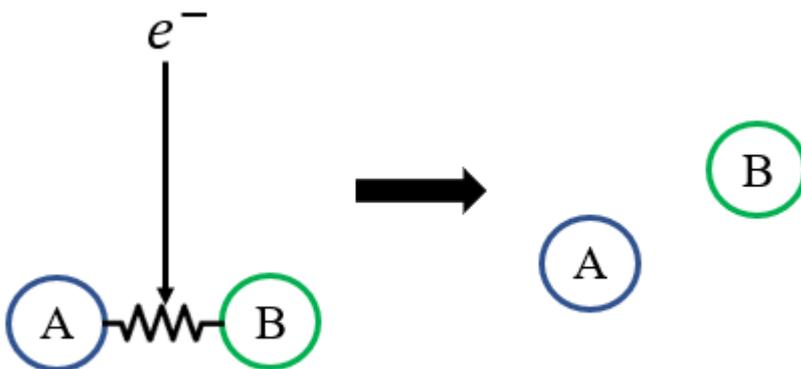
Reações	Processo
$e^-(E_i) + AB \rightarrow AB + e^-(E_f)$	Espalhamento elástico
$e^-(E_i) + AB \rightarrow AB(v) + e^-(E_r)$	Excitação vibracional
$e^-(E_i) + AB \rightarrow AB^* + e^-(E_r)$	Excitação eletrônica
$e^- + AB \rightarrow A + B^-$	Dissociação por anexo de elétron
$e^- + AB \rightarrow A + B + e^-$	Dissociação neutra
$e^- + AB \rightarrow A + B^+ + 2e^-$	Ionização dissociativa
$e^- + AB \rightarrow A^- + B^+ + e^-$	Dissociação bipolar

Fonte: Autor “adaptado de” Utke, Stanislav e Phillip, 2012.

Legenda: A tabela lista as reações mais relevantes na interação elétron-precursor, sendo que na esquerda de cada reação nós temos o estado antes da interação e na direita de cada reação o estado logo após a interação. Onde E_i é a energia inicial do elétron do feixe, E_r é a energia residual do elétron após a interação, v é a excitação vibracional que a molécula recebe após a interação e * é a excitação de um elétron pertencente a molécula que é excitado para um nível energético superior.

O processo de FEBID depende da interação dos elétrons do feixe primário com as moléculas precursoras, mas também com o substrato, sendo um processo estatístico. Todos os eventos associados a essa interação, como listado na Tabela 2, ocorrem em alguma proporção, sendo que os eventos que primariamente contribuem para a deposição são os quatro últimos, onde ocorre efetivamente a dissociação, como visto na Figura 4.

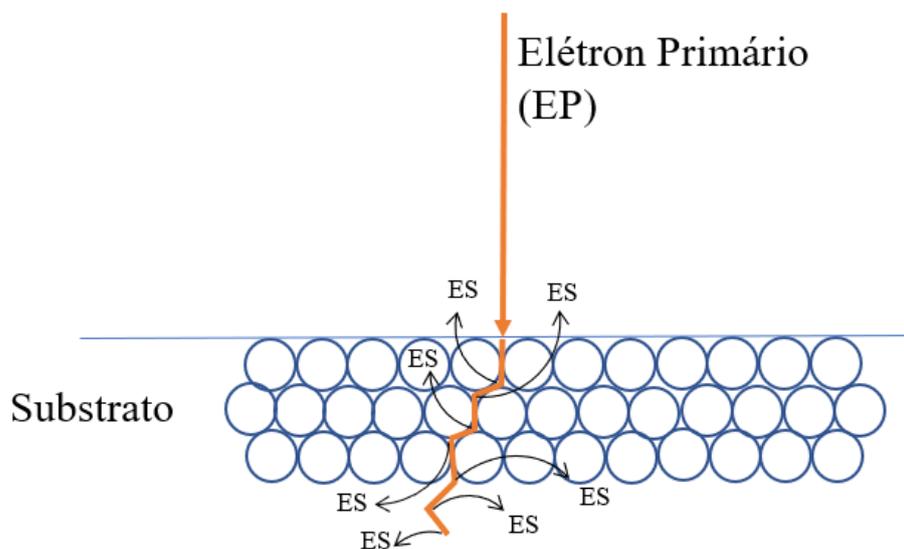
Figura 4 - Ilustração da reação de dissociação



Fonte: Autor.

Os elétrons primários, isto é, que estão contidos no feixe primário de elétrons (com energia da ordem de keV), interagem com a superfície do substrato de maneira elástica e inelástica. Um dos produtos das colisões inelásticas é a geração de elétrons secundários, tipicamente com energia da ordem de alguns eV até 50 eV. Sabe-se que a seção de choque para o evento de dissociação da molécula precursora é inversamente proporcional à energia do elétron interagente e é maximizada em energias em torno de alguns eV. Logo, os elétrons secundários (ES) são os agentes primários da dissociação da molécula como indicado na Figura 5. Os elétrons retroespalhados pelo feixe (colisões elásticas) e os elétrons do feixe primário também contribuem para o evento da fragmentação da molécula organometálica, porém em menor proporção (UTKE; STANISLAV; PHILLIP, 2012).

Figura 5 - Geração de elétrons secundários por colisão inelástica do feixe primário com os átomos constituintes do substrato.

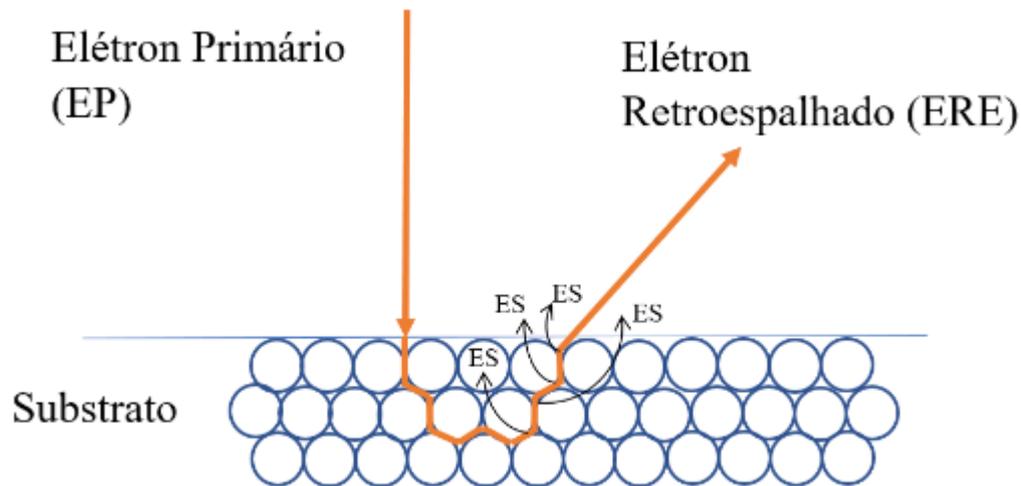


Fonte: Autor.

Por sua vez, o espalhamento elástico, proveniente das colisões elásticas, desviam as trajetórias dos elétrons primários, e podem redirecioná-los para a superfície (espalhamento alto ângulo), os quais escapam do substrato e são chamados de elétrons retroespalhados (ERE), além de possuírem energia na mesma ordem de grandeza da energia do elétron primário. Da mesma forma que os elétrons primários sofrem colisões inelásticas e geram elétrons secundários, os elétrons retroespalhados também sofrem dos mesmos efeitos. A Figura 6 esboça essa situação. É importante ressaltar que os elétrons retroespalhados, em seu caminho para fora do substrato,

podem colidir inelasticamente com os átomos do próprio substrato, gerando uma cascata de elétrons secundários e mudando sutilmente sua trajetória, como mostrado na Figura 6.

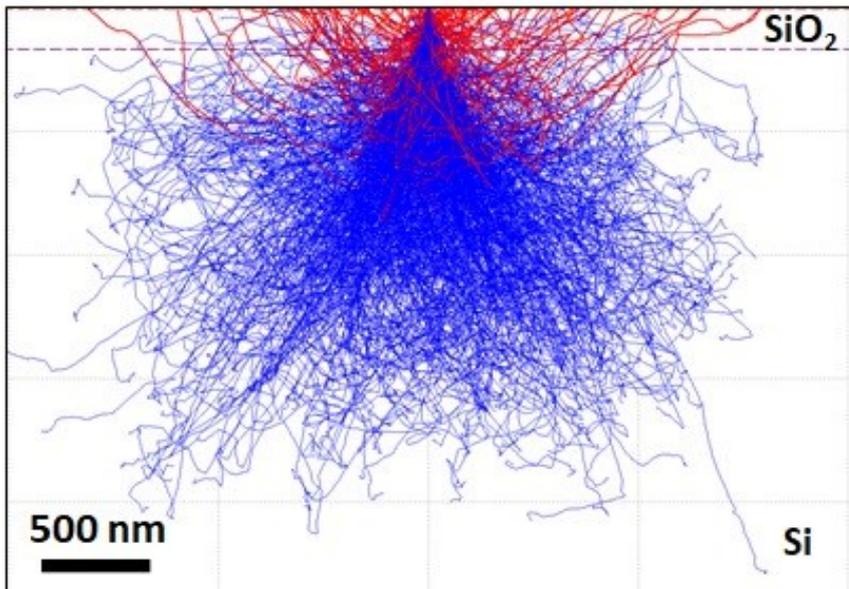
Figura 6 - Geração de elétrons secundários por elétron retroespalhado



Fonte: Autor

Para exemplificar a geração de elétrons retroespalhados por meio de colisões provenientes da interação de elétrons primários e um substrato, temos a Figura 7 que é uma simulação de Monte-Carlo extraída de (PUYDINGER, 2017) para a trajetória de elétrons, executada no software CASINO. A energia dos elétrons primários foi de 20 KeV, o número de elétrons primários foi de 2000, a largura do feixe foi de 10 nm e o óxido de silício possui profundidade de 200 nm. As linhas azuis são as trajetórias dos elétrons primários após sucessivas colisões inelásticas (que geram cascatas de elétrons secundários), enquanto as linhas vermelhas são os elétrons retroespalhados, que, como já mencionado, escapam do substrato em alto ângulo através de colisões elásticas.

Figura 7 - Simulação de Monte-Carlo da trajetória de elétrons



Fonte: Puydinger, 2017

O número de elétrons secundários e elétrons retroespalhados são função da composição do substrato e também da inclinação da trajetória dos elétrons primários (PUYDINGER, 2017). Cada elétron primário e elétron retroespalhado provoca uma cascata de elétrons secundários, que não estão expostos na Figura 7, porém são fundamentais para as reações de dissociação do precursor na superfície do substrato. Observe que todas as trajetórias de elétrons primários e retroespalhados são segmentadas, que é o efeito da mudança da trajetória após um evento de colisão inelástica com um átomo da rede cristalina do substrato, portanto gerando uma cascata de elétrons secundários.

2.2 MATERIAIS INTELIGENTES

Materiais inteligentes têm propriedades físicas que podem ser alteradas ou controladas por estímulos externos, como campos elétricos ou magnéticos, luz, temperatura ou estresse mecânico (NIJHOLT; MINUTO, 2017). Graças a essas alterações em suas propriedades, pode-se usar materiais inteligentes para a fabricação de diversos tipos de dispositivos, como sensores, nano atuadores e elementos de dispositivos em robótica.

Os materiais inteligentes podem ajudar a melhorar diversos sistemas com aplicações miniaturizadas de transdutores eletromecânicos, que podem ter alta densidade e eficiência energética, baixo consumo de energia, baixo custo e escalabilidade (RIZZELLO *et al.*, 2017).

Como bem definido em (NECIB *et al.*, 2015) existem dois grupos principais em que os materiais inteligentes podem ser compreendidos:

- Materiais sensitivos: quando o material é apto para trazer ao sistema informações do meio em que está inserido;
- Materiais adaptáveis: quando o material é apto para reproduzir uma ação que modifica o comportamento o sistema.

Caso o material tenha ambas as características, ou seja, possa coletar informações do meio e reproduzir uma ação modificando o sistema, esse material é chamado de adaptativo.

De acordo com (GUPTA; TIRTH; SRIVASTAVA, 2006) diversas áreas podem se beneficiar dos avanços em pesquisas de materiais inteligentes, como: Indústria de alimentos, construção civil, aeroespacial, transporte marítimo e ferroviário e tecnologia têxtil. O leque de aplicações para materiais inteligentes é bastante vasto e suas vantagens são bastante chamativas. Para aplicações em ligas com efeito de memória de forma pode-se atingir alta vida mesmo com falhas de fadiga (FARSANGI *et al.*, 2017), possuem comportamento elástico, capacidade de amortecimento e alta resistência (BAHL *et al.*, 2020). Em aplicações piezoelétricas, vemos resposta em altas frequências (WANG *et al.*, 2019) e ainda capaz de gerar sinais elétricos com a aplicação de força mecânica (LI; HUANG; MORITA, 2019) para aplicações em sensoriamento. Para aplicações de fibra óptica, a utilização de materiais inteligentes permite maior suporte de largura de banda, alta capacidade de carga, imunidade à interferência eletromagnética e escutas, redução do espaço e resistência a materiais corrosivos.(BAHL *et al.*, 2020). Vemos que diversas aplicações recebem melhorias com as pesquisas e utilização de materiais inteligentes.

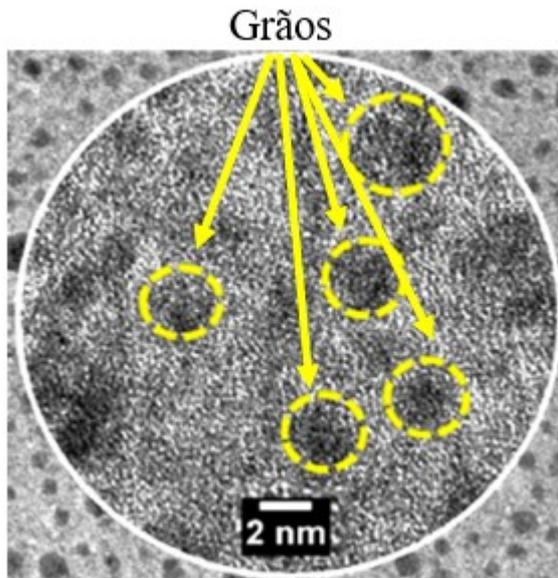
A composição estrutural dos depósitos feitos pelo método FEBID pode ser dividida em três categorias: amorfa; nano granular (ou nano compósito); e policristalina. Dependendo da microestrutura as propriedades físicas (como transporte elétrico e magnetismo) variam substancialmente (HUTH, Michael *et al.*, 2012). O objetivo de estudo deste trabalho envolve a estrutura nano granular, portanto esta será melhor desenvolvida.

2.2.1 Estrutura nanogranular

As estruturas nanogranulares provenientes da fabricação pelo método FEBID com precursores organometálicos consistem em grãos metálicos envoltos numa matriz dielétrica composta, em geral, por uma grande quantidade de carbono, grãos estes que estão sujeitos ao

acoplamento eletrônico intergranular.(HUTH, Michael *et al.*, 2012). Pode-se ver um exemplo de uma estrutura nanogranular na Figura 8.

Figura 8 - Exemplo de estrutura nanogranular tomada em microscópio eletrônico de transmissão sobre depósito de Co-C por FEBID.



Fonte: Autor “adaptado de” Puydinger et al, 2016

Legenda: Os grãos estão apresentados em cor escura, destacados em amarelo na imagem, e a matriz amorfa baseada em carbono em cor mais clara.

Como os grãos metálicos estão separados uns dos outros num meio isolante (o carbono amorfo), o mecanismo de condução entre os grãos é o tunelamento. Tunelamento é um fenômeno quântico na qual uma partícula penetra uma barreira potencial maior do que a energia total da partícula. E o tunelamento pode ser reforçado ou enfraquecido pela distância entre grãos e pela temperatura do dispositivo.

O acoplamento de tunelamento intergranular (ou condutância de tunelamento) G é o principal parâmetro de controle que governa as propriedades eletrônicas dessa classe de material (HUTH, M.; PORRATI; DOBROVOLSKIY, 2018). A condutância de tunelamento é definida como a probabilidade, finita, de tunelamento entre grãos de dimensões nanométricas. Normalmente a condutância de tunelamento é normalizada pela condutância quântica para então resultar na força de acoplamento g como visto na equação 1.

$$g = \frac{G}{\left(\frac{2q^2}{h}\right)} \quad (1)$$

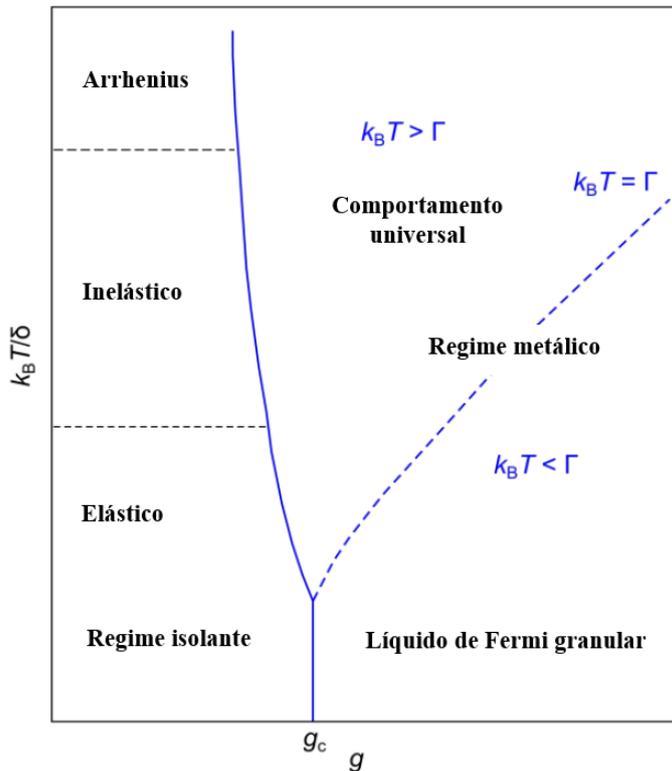
Onde h é a constante de Planck e q é a carga elementar. Uma outra variável importante é o espaçamento médio δ , que descreve a diferença dos níveis eletrônicos próximos ao potencial químico e pode ser representado matematicamente pela equação 2.

$$\delta = \frac{1}{N_F V} \quad (2)$$

Onde N_F é o número de estados eletrônicos próximos ao potencial de Fermi e V é o volume do grão nanométrico.

A Figura 9 demonstra as diferentes classificações de transporte existentes nos dispositivos nano granulares com a dependência da temperatura e da força de acoplamento. A distância entre grãos altera o parâmetro g (força de acoplamento), conforme aumenta-se a distância entre grãos, diminui-se a força de acoplamento, torna-se mais improvável o tunelamento, portanto para uma mesma temperatura, aumentar a distância entre grãos resulta numa queda da corrente elétrica no dispositivo. Por outro lado, ao reduzir-se a distância entre os grãos, aumenta-se a probabilidade de tunelamento e a força de acoplamento, logo, para uma mesma temperatura, diminuir a distância entre os grãos resulta num aumento da corrente elétrica do dispositivo. Essas variações podem ser vistas no gráfico, no parâmetro g . No momento em que os grãos se tocam fisicamente, temos a chamada percolação granular e, como consequência, a condução elétrica é tipicamente metálica. O termo g_c é a força de acoplamento crítica, onde, a baixas temperaturas, ocorre a migração do regime isolante para o regime metálico (BELOBORODOV; LOPATIN; VINOKUR, 2004). A temperatura é uma variável importante no sistema, pois a mesma, juntamente com a força de acoplamento, define o regime de transporte no dispositivo nanogranular no eixo vertical do gráfico.

Figura 9 - Diagrama de regimes de transporte em materiais nanogranulares.



Fonte: Autor “adaptado de” Kolb, 2013

Além disso, outra característica relevante nos dispositivos nano granulares proveniente da interação entre os grãos é que os níveis de energia próximos ao potencial químico são ampliados devido ao acoplamento túnel, esse efeito é descrito pelo parâmetro de alargamento Γ que é descrito pela equação 3, porém não influencia nos regimes à esquerda de g_c .

$$\Gamma = g\delta \quad (3)$$

A condução por tunelamento pode ser subdividida em dois tipos de regimes de acoplamento, a condução por acoplamento forte e a condução por acoplamento fraco. O produto da força de acoplamento com o número de grãos vizinhos próximos de um grão define em qual regime o dispositivo atua (KOLB, 2013). Caso o produto resulte em um valor menor que 1, significa que o dispositivo é melhor descrito pelo regime de acoplamento fraco, caso o contrário, o dispositivo é melhor descrito pelo regime de acoplamento forte.

2.2.2 Aplicação em sensores

Como já mencionado, materiais inteligentes são capazes de modificar suas propriedades físicas espontaneamente como uma resposta natural a uma excitação interna ou externa ao material (NECIB *et al.*, 2015). Com essa capacidade sensitiva dos materiais é possível desenvolver sensores e melhorar o desempenho de diversas áreas com o avanço da nanotecnologia.

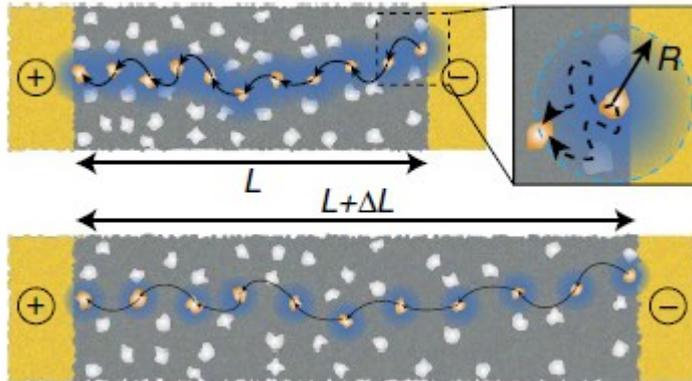
O sensoriamento é extremamente importante para o avanço das muitas áreas que utilizam a tecnologia para seus fins. Com os materiais inteligentes pode-se obter uma melhora no desempenho desse sensoriamento e também uma miniaturização do sistema, beneficiando ainda mais a aplicação. Muitas são as áreas de sensoriamento que são possíveis com materiais inteligentes. Como exemplo podemos citar o sensoriamento de deformação mecânica, umidade, e campo magnético.

2.2.2.1 Sensor de deformação mecânica

O tensionamento mecânico e sua relação com materiais semicondutores cristalinos tem motivado intensas pesquisas e estudos científicos pelo mundo. O conceito de alterar a mobilidade dos portadores (elétrons ou lacunas) de acordo com o tensionamento mecânico aplicado não é algo novo, como vemos em (WELSER; HOYT; GIBBONS, 1994). Esse tipo de abordagem se mostrou útil não apenas no sensoriamento, mas também na própria adoção de materiais tensionados pela indústria de semicondutores, presente, então, em circuitos integrados de ponta.

Com os avanços nas pesquisas de materiais inteligentes, torna-se possível fabricar sensores de tensionamento mecânico não apenas com silício e não mais alterando a mobilidade dos portadores, mas sim por meio de tunelamento entre grãos de platina numa matriz amorfa de carbono, como visto em (DUKIC *et al.*, 2016).

Figura 10 - Sensor de deformação mecânica



Fonte: Autor “adaptado de” Duckic et al, 2016

Legenda: Pode-se ver uma estrutura de óxido (região cinza) com os nanogrãos depositados (regiões brancas). A figura ilustra o tensionamento mecânico de forma a aumentar o comprimento total do dispositivo aumentando consequentemente a distância média entre os grãos. A medida R é o raio de tunelamento que inicialmente é maior que a distância entre grãos, porém após a deformação, se torna menor que a distância.

Conforme a tensão mecânica deforma o dispositivo cujo comprimento inicial é L para um novo comprimento $L + \Delta L$, a distância média dos grãos de platina também aumenta, e a condução que ocorre por tunelamento de um grão para outro é dificultada, portanto a corrente elétrica no dispositivo é alterada, possibilitando assim um sensor de deformação mecânica com materiais inteligentes.

2.2.2.2 Sensor de umidade

Sensoriamento de gás, tanto para detecção específica de gases como para monitoramento de umidade, possui diversas aplicações, como: fornos, equipamentos de ar condicionado, controle industrial, emissões de veículos entre outros (JIMÉNEZ-CADENA; RIUS; RIUS, 2007; NITTA; TERADA; FUKUSHIMA, 1982).

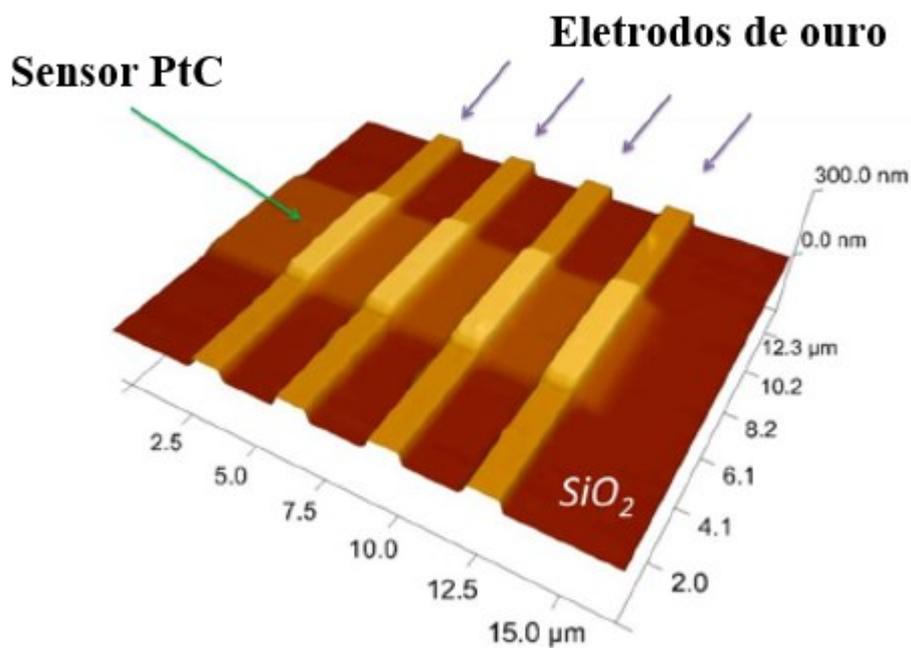
Diversos conceitos podem ser utilizados para projetar sensores de umidade que podem ser classificados como: resistivos, óticos, sensíveis à massa e capacitivos (FENNER; ZDANKIEWICZ, 2001). O método mais comum de medição de umidade para sensores comerciais atualmente é o capacitivo (LAZARUS *et al.*, 2010).

O método de medição capacitiva se aproveita da alta constante dielétrica da água. Sendo ela muito maior que a da maioria dos polímeros, causa uma mudança drástica na capacitância

do dispositivo. Como há uma variação de capacitância pela fração volumétrica da água, se torna possível a medição da umidade.

Com a tecnologia dos materiais inteligentes, é possível fabricar sensores de umidade não dependentes da variação da capacitância do dispositivo, mas sim da variação da corrente de tunelamento entre grãos condutores. Corrente essa, modulada pela presença de umidade absorvida pela superfície do sensor. O sensor da Figura 11 possui inúmeros grãos nanométricos de platina na região indicada pela seta verde.

Figura 11 - Sensor de umidade



Fonte: Autor, “adaptado de” Kolb, 2013

A alteração específica das propriedades dielétricas pela adsorção das moléculas gasosas de água, que são polares, muda a probabilidade de tunelamento entre os grãos de platina e portanto modifica a corrente elétrica (KOLB *et al.*, 2013).

2.2.2.3 Sensor de campo magnético

O sensoriamento magnético em escala nanométrica possui uma gama de aplicações partindo de leitores de disco rígido (FREITAS *et al.*, 2007) e atingindo o desenvolvimento de instrumentação para diagnósticos médicos (TOGAWA *et al.*, 2006). Com uma ampla necessidade, o desenvolvimento desses sensores é de grande utilidade para as diversas áreas.

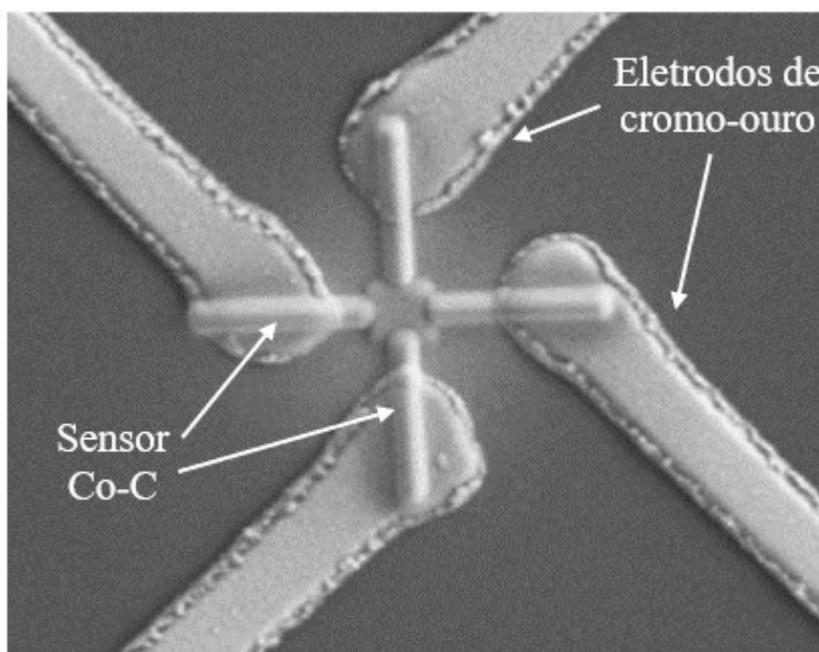
Uma forma de monitorar campos magnéticos é pela utilização da resistividade Hall ρ_H , que possui duas componentes, uma é a contribuição ordinária do efeito Hall e está associada a densidade de cargas dos portadores (ρ_{OH}) e a outra é a contribuição extraordinária relacionada a magnetização do material ferromagnético (ρ_{EHE}) como visto na equação (4).

$$\rho_H = \rho_{OH} + \rho_{EHE} = \mu_0(R_0H + R_S M) \quad (4)$$

Onde H é a intensidade campo magnético aplicada na direção perpendicular do dispositivo e da corrente elétrica no mesmo, M é o componente de magnetização na direção do campo, μ_0 é a constante de permeabilidade magnética do espaço livre e R_0 e R_S são as constantes Hall ordinária e espontânea.

Uma forma de utilizar a resistividade Hall para sensoriamento magnético com materiais inteligentes em escala nanométrica é vista em (GABUREAC *et al.*, 2010) com a deposição de grãos de cobalto numa matriz amorfa de carbono, pode-se ver um exemplar de sensor na Figura 12. Trata-se de um sensor de alta sensibilidade, que é tão maior quanto maior for o teor de carbono. Nesse sentido, vemos como a incorporação de impurezas no material metálico pode ser favorável para aplicações dos sistemas granulares. Os eletrodos são de cromo e ouro e o sensor é composto por cobalto e carbono.

Figura 12 - Sensor de efeito Hall baseado em materiais granulares com alta sensibilidade.



Como a resistividade Hall ordinária (que é gerada pela força de Lorentz agindo nos portadores de carga) é inversamente proporcional a densidade de carga, a mesma se mostra desconsiderável quando comparada a resistividade extraordinária. Por outro lado, a contribuição extraordinária da componente Hall é dependente da magnetização do material. Portanto, a medida elétrica do parâmetro Hall em materiais magnéticos pode fornecer a assinatura magnética do material, como dureza magnética, campo coercivo e magnetização remanente, além do tipo de interações intergranulares.

Para aumentar a resistividade extraordinária e tornar o dispositivo um bom sensor magnético é possível alterar o tamanho dos grãos e o distanciamento médio entre eles.

3 MATERIAIS E MÉTODOS

Simulações numéricas computacionais são ferramentas complementares utilizadas nos dias de hoje por engenheiros e pesquisadores com o objetivo de compreender melhor a influência de diversos parâmetros em dispositivos. Sem a necessidade da fabricação para analisar a influência da geometria, espaçamento, materiais e muitas outras características nos dispositivos, os simuladores se mostram uma ferramenta poderosa para análise e projeto de dispositivos, podendo esses últimos serem fabricados e comparados com os dados computacionais.

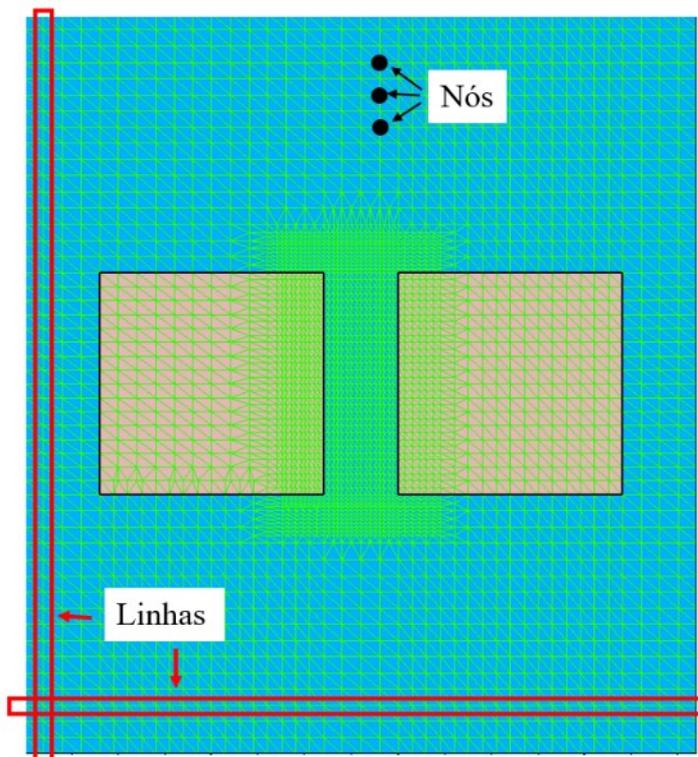
O *software* de simulação utilizado neste trabalho foi o simulador ATLAS (ATLAS, 2018) versão 5.26.1.R, da empresa Silvaco, que é um *software* para simulação de dispositivos semicondutores que utiliza modelos de simulação baseados em conceitos físicos ou modelos empíricos, realizando simulações de dispositivos em duas dimensões ou três dimensões.

O *software* Atlas possui um conjunto de modelos disponíveis que abrangem as diversas simulações principalmente baseadas em semicondutores. Porém, o *software* não foi desenvolvido para simular materiais inteligentes e em dimensões nanométricas. Sendo assim, algumas considerações são feitas ao decorrer do trabalho para adaptar as simulações à realidade dos dispositivos. Essa é justamente uma das principais contribuições a serem alcançadas por este trabalho.

3.1 PROCESSO DE SIMULAÇÃO

Os métodos numéricos comumente consideram o objeto estudado como um conjunto de pontos, chamados de nós, que são formados pela intersecção de linhas ao longo dos eixos X, Y e Z (caso a simulação seja tridimensional). O conjunto de nós e linhas é chamado de grade. Podemos ver um exemplo de grade, que está na cor verde, em duas dimensões na Figura 13.

Figura 13 - Exemplo da estrutura do dispositivo mostrando linhas e nós utilizados na simulação em duas dimensões.



Fonte: Autor

Tanto a grade quanto a geometria do dispositivo foram construídas utilizando a ferramenta DevEdit (DEVEDIT, 2013), que é um editor de estruturas de dispositivos e grades de pontos, as quais são utilizadas pelo simulador numérico ATLAS.

As equações do simulador são resolvidas pelos métodos numéricos para cada elemento da grade. Essas equações são os modelos que podem ser físicos, empíricos ou uma mistura de ambos. O simulador possui um abrangente conjunto de modelos disponíveis para implementar nas simulações, como estímulos elétricos contínuos e alternados, dependência total do tempo, aquecimento da estrutura e dissipadores, estatísticas de Fermi-Dirac e Boltzmann, mobilidade, contatos ôhmicos, recombinação entre outros (ATLAS, 2018).

A geometria da grade é definida pelo usuário no arquivo de entrada do simulador. É recomendável ter uma grade fina, ou seja, uma grade mais densa em locais onde o mecanismo de condução ocorre com maior intensidade e ter uma grade mais espaçada, ou seja, menos densa em locais onde a condução ocorre com menor intensidade. Dessa forma é possível extrair uma resposta precisa do simulador sem sobrecarregá-lo.

Os dados coletados das simulações numéricas são particularmente importantes, pois permitem análises do campo elétrico, do potencial elétrico ao longo do dispositivo e, em alguns casos, da densidade de corrente elétrica no mesmo. Com os simuladores é possível reproduzir respostas elétricas de materiais inteligentes, aplicando certas simplificações, como respostas resistivas para aplicações em sensores.

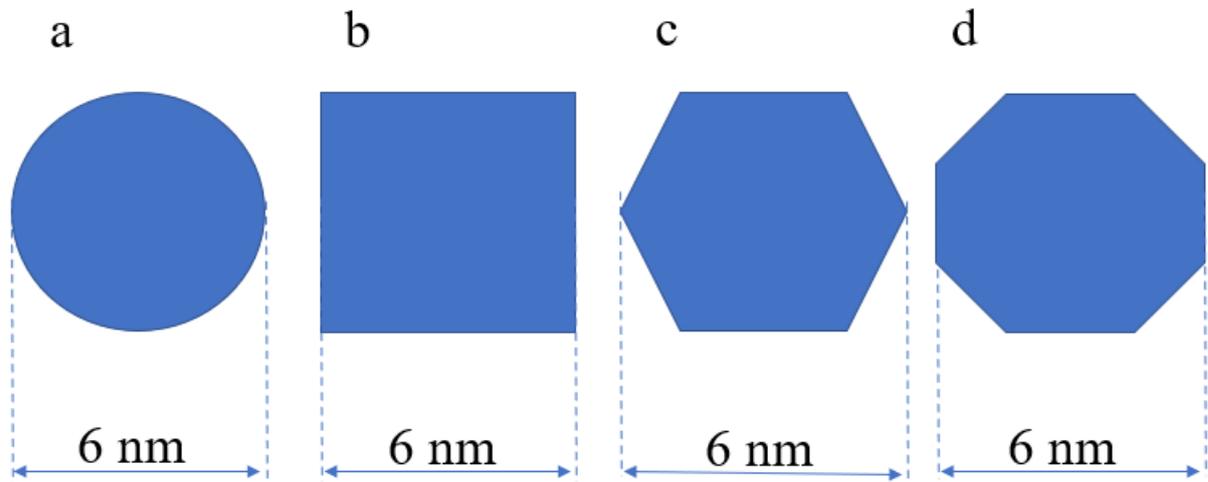
Para a realização das simulações, além da criação da grade se faz necessária a criação da estrutura física e suas características, como material da estrutura, geometria do material, concentração de dopantes, polarização e modelos aplicados na estrutura.

3.1.1 Limitação geométrica do software

Para construir as regiões de óxido e metal no simulador foi utilizada a função *polygon*, presente na ferramenta DevEdit, que exige como parâmetros os pontos dos vértices de um polígono.

A Figura 14 mostra as possíveis representações de grãos da estrutura. Fisicamente, os grãos são um conjunto de átomos agrupados de forma aleatória, como na imagem da Figura 8. Nessa figura, sugere-se a aproximação das estruturas por círculos. Dada a natureza discreta da grade, as estruturas curvas são representadas nos simuladores de dispositivos por polígonos (em grades retangulares) ou descritas em coordenadas polares ou cilíndricas. A representação adotada neste trabalho é a cartesiana (retangular), uma vez que as estruturas esféricas e circulares utilizadas não são concêntricas. Se fossem, certamente a descrição polar ou esférica seria conveniente. Uma solução comumente adotada para representar a curvatura em grades retangulares é a função *polygon* do simulador os vértices de um polígono com muitos lados, pois dessa forma a estrutura se assemelha a uma estrutura curva. A Figura 14 (a) mostra a representação circular, incompatível com a grade retangular. É importante lembrar que há limitações de dimensões mínimas (1 nm) e de complexidade, o que impede o uso de polígonos muito complexos. O uso de polígonos regulares tem algumas alternativas. A primeira delas com o grão em formato quadrado como visto na Figura 14 (b), a segunda com o grão em formato hexagonal como visto na Figura 14 (c) e, por fim, a terceira delas com o grão em formato octogonal como visto na Figura 14 (d). O valor para o diâmetro do grão foi adotado como sendo 6 nanômetros, baseado em dispositivos reais encontrados na literatura como em (DUKIC *et al.*, 2016; KOLB, 2013; RANDOLPH; FOWLKES; RACK, 2006).

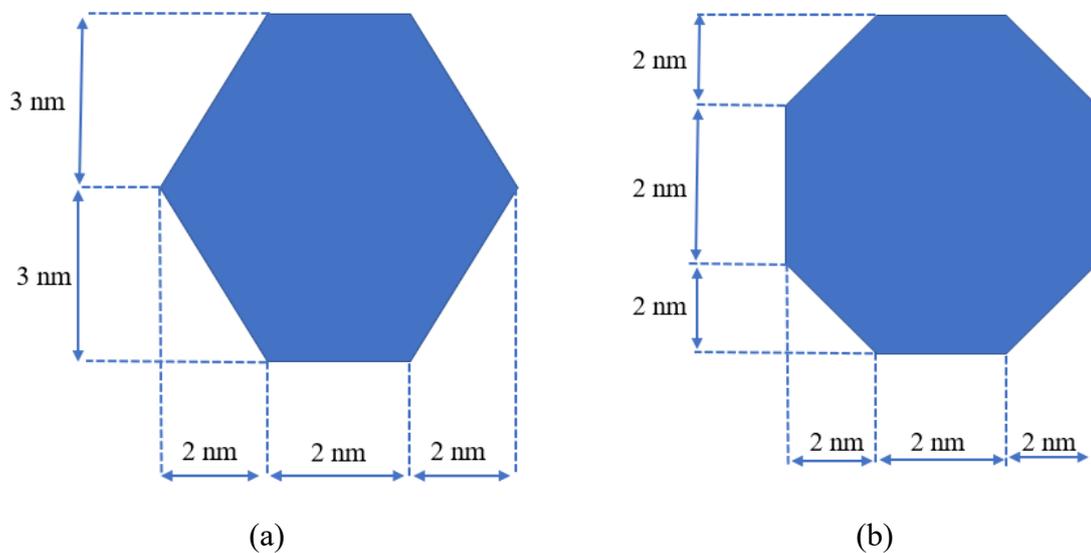
Figura 14 – Adaptações para o grão de 6 nanômetros a fim de contornar a limitação do simulador.



Fonte: Autor.

Para a forma de grão quadrada, ambos os lados possuem 6 nm de comprimento, porém, para os casos hexagonal e octogonal foram utilizadas, respectivamente, as dimensões da Figura 15 (a) e (b).

Figura 15 – Medidas dos grãos hexagonal e octogonal.



Fonte: Autor.

3.1.2 Modelo

O simulador dispõe de diversos modelos físicos que são incorporados às simulações de acordo com a necessidade, tornando a simulação precisa e aplicável. O modelo de condução utilizado nesse trabalho foi o MIMTUN, que calcula os caminhos de tunelamento entre os eletrodos e obtém as correntes de tunelamento usando o modelo quântico de tunelamento direto que é descrito pela equação 5 (ATLAS, 2018).

$$J = \frac{qkT}{2\pi^2\hbar^3} \sqrt{m_y m_z} \int T(E) \ln \left[\frac{1 + \exp\left(\frac{E_{Fr} - E}{kT}\right)}{1 + \exp\left(\frac{E_{Fl} - E}{kT}\right)} \right] dE \quad (5)$$

onde J é a densidade de corrente elétrica, m_y e m_z são as massas efetivas na direção lateral, E é a energia incidente (perpendicular) do portador de carga e T(E) é a probabilidade de transmissão de um elétron ou uma lacuna fluir pela barreira potencial formada pelo óxido. E_{Fr} e E_{Fl} são os níveis de quase-Fermi de cada lado da barreira.

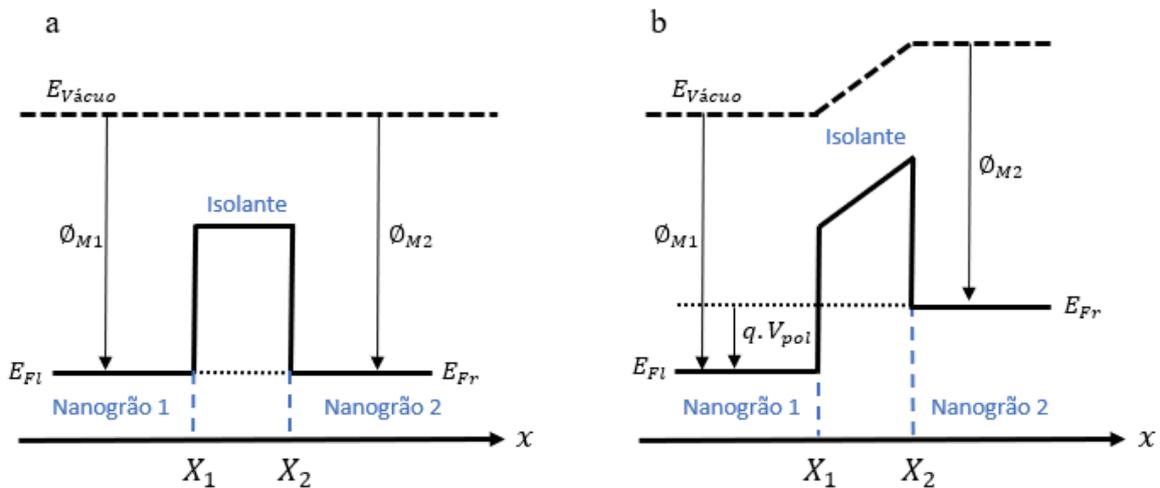
O modelo considera o tunelamento elástico e suporta o tunelamento tanto por uma única camada de óxido quanto por mais de uma camada de óxido entre os eletrodos. Porém, o modelo opera apenas em duas dimensões, não sendo possível realizar as simulações em três dimensões.

Os limites de integração são determinados de acordo com a curvatura do diagrama de bandas de energia e a probabilidade de transmissão é calculada usando um método de matriz de transferência para resolver a equação de Schrodinger. O método usa uma aproximação gradual do potencial. É recomendado o uso de uma grade fina na direção do tunelamento (ATLAS, 2018).

As simulações contemplam duas estruturas de bandas de energia. A primeira estrutura pode ser vista na Figura 16 a, onde não há potencial externo aplicado a nenhum eletrodo, e como ambos os eletrodos são do mesmo material, possuem a mesma função trabalho e então mesmo nível de Fermi (condição de equilíbrio), logo não há corrente de tunelamento. Pode-se analisar esse efeito na equação 5, pois a razão interna ao logaritmo neperiano será 1 e, portanto, a corrente simulada será zero. A segunda estrutura pode ser vista na Figura 16 b onde há potencial externo aplicado ao Eletrodo 1 (V_{pol}) e, portanto, alteração no nível de Fermi nesse

eletrodo alterando o termo interno ao logaritmo neperiano da equação 5 e também há alteração na probabilidade de tunelamento.

Figura 16 - Diagramas de bandas para os grãos



Fonte: Autor

Legenda: Diagramas de banda para os nanogrãos onde a figura (a) mostra o estado de equilíbrio e a figura (b) mostra o estado de equilíbrio perturbado com a aplicação de potencial externo V_{pol} .

Na Figura 16 temos que ϕ_{M1} e ϕ_{M2} são as funções trabalho dos metais dos eletrodos, X_1 e X_2 são os limites do isolante, q é a carga elementar e V_{pol} é a tensão aplicada ao Eletrodo 1.

3.2 DEFINIÇÕES

Todas as simulações foram realizadas com temperatura de 300K, a não ser quando indicado o contrário.

As simulações propostas contemplam grãos de platina de diferentes formas envoltos numa matriz dielétrica de carbono amorfo. O *software* Silvaco não possui carbono amorfo como um de seus isolantes. Portanto, se fez necessária a adaptação de outro material isolante, no caso o dióxido de silício, alterando suas propriedades.

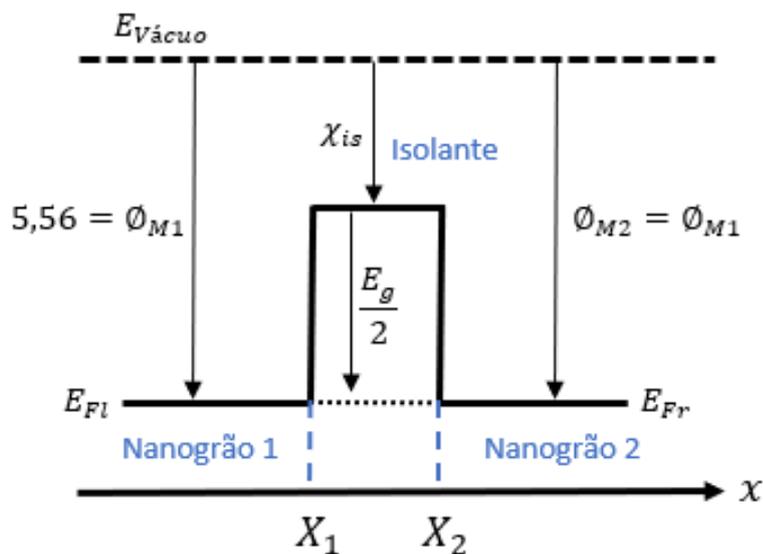
Primeiramente, a energia de banda proibida do carbono amorfo deve ser inserida no simulador. Para tal, foi estimada de (ROBERTSON, 2002) como sendo 1,4eV, a média para o carbono amorfo “duro”, com baixo teor de hidrogênio.

Prosseguindo, como visto na equação 5, as massas efetivas de elétrons e lacunas no óxido são fundamentais e devem ser inseridas no código de entrada do simulador, especificadas na adaptação do óxido. De acordo com (TITANTAH; LAMOEN, 2004) temos que a massa efetiva dos elétrons no carbono amorfo é de 0,87 e assim como assumido em (SILVA, 2003) foi adotada massa efetiva de lacunas com o mesmo valor da massa efetiva dos elétrons.

No caso do grão, composto de platina, é necessário inserir a função trabalho. Porém, há diversas funções trabalho para a platina, pois a função trabalho depende de fatores como a orientação cristalográfica. Para uma estimativa então foi tirada a média dos valores apresentados em (SCHMÜSER; DOHLUS; ROSSBACH, 1979) resultando em 5,56 eV. Essa média foi tirada para não particularizar a solução para um dispositivo específico, sendo possível alterar esses valores para um caso conhecido de um dispositivo fabricado.

Para então atingir a condição de equilíbrio vista na Figura 16 a, é necessário calcular a afinidade eletrônica do isolante. Para tal, temos a Figura 17 com o diagrama de bandas, onde χ_{is} é a afinidade eletrônica do isolante, ϕ_{M1} e ϕ_{M2} são as funções trabalho de ambos os grãos de platina, portanto possuem valor de 5,56eV e E_g é a energia de banda proibida (em inglês *Band gap*) definida para o isolante.

Figura 17 - Definindo afinidade eletrônica do isolante



Para a definição da afinidade eletrônica basta realizar a circuitação que resulta na equação 6:

$$\chi_{is} = \phi_{M1} - \frac{E_g}{2} \quad (6)$$

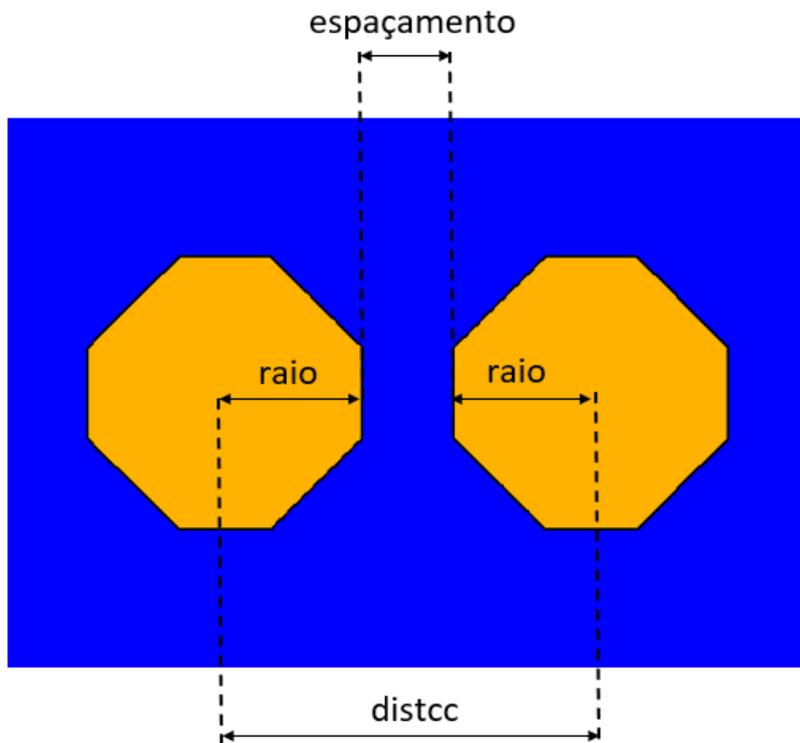
Substituindo os valores descobre-se que $\chi_{is} = 4,86eV$. Esse novo dado também foi inserido no isolante adaptado no simulador.

3.3 VARIAÇÃO DA DISTÂNCIA ENTRE GRÃOS

Um dos fatores estudados neste trabalho foi a variação da distância entre os grãos de platina para cada formato de grão, para então estudar como a forma do grão e como a distância entre grãos influenciam a corrente elétrica.

A Figura 18 mostra o esquema do espaçamento entre grãos para o caso octogonal, mas que é seguido por cada forma de grão. No esquema, podemos ver três medidas: raio (valor conhecido e equivalente a 3nm), espaçamento (valor variável) e distcc (distância de centro a centro).

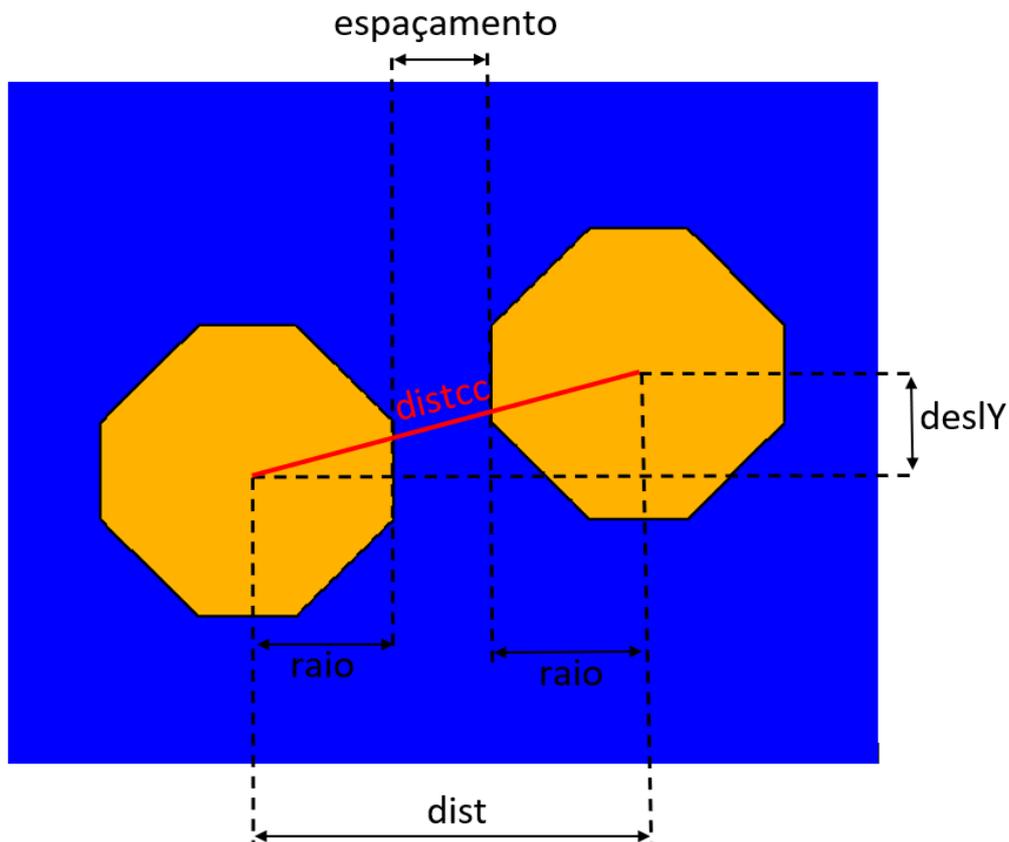
Figura 18 - Espaçamento entre grãos em uma dimensão para o caso octogonal



Fonte: Autor.

Como o simulador possui a limitação espacial de 1 nm para a grade, variar apenas o valor do espaçamento resultaria em passos de distância de centro a centro de 1 nm, que alteram fortemente o nível de corrente não permitindo uma análise mais precisa. Para então contornarmos essa limitação, foram realizadas simulações com o esquema da Figura 19, onde há variação da distância de centro a centro em duas dimensões.

Figura 19 - Distância de centro a centro para o deslocamento em duas dimensões para o caso octogonal



Fonte: Autor.

Nesse segundo caso, temos cinco medidas: raio (valor conhecido e equivalente a 3nm), espaçamento (valor variável), dist (valor que mede a distância entre os centros dos grãos no eixo horizontal), deslY (valor que mede a distância entre os centros dos grãos no eixo vertical, também variável) e distcc (distância de centro a centro, destacada em vermelho no desenho).

Para calcularmos o valor de distcc no caso do espaçamento em duas dimensões, ou seja, quando deslY é diferente de zero, basta utilizarmos a equação de Pitágoras para um triângulo retângulo onde distcc é a hipotenusa. Assim sendo, temos a equação 7.

$$distcc = \sqrt{dist^2 + deslY^2} \quad (7)$$

Porém sabemos que dist é a soma de dois raios dos grãos com o espaçamento entre eles, portanto temos que a distância entre os grãos é dada pela equação 8.

$$distcc = \sqrt{(6 + espaçamento)^2 + deslY^2} \quad (8)$$

Vale lembrar que todos os valores devem ser utilizados em nanômetros e que o valor 6 surge na equação pela soma dos dois raios.

Utilizando essa equação, podemos gerar a Tabela 3 que condensa os espaçamentos utilizados neste trabalho.

Tabela 3 - Valores para a distância de centro a centro dos grãos

Espaçamento	deslY	distcc
1	0	7
1	2	7,28
1	3	7,62
2	0	8
2	2	8,25
2	3	8,54
3	0	9
3	2	9,22
3	3	9,49
4	0	10

Fonte: Autor.

Não foram utilizados valores com deslY=1, pois a distância de centro a centro dos grãos se assemelhava muito a distância de centro a centro com deslY=0 resultando em níveis de corrente e inclinações também muito semelhantes, as simulações foram realizadas, porém não inseridas no trabalho, pois dificultavam a leitura dos gráficos sem alterar as conclusões tiradas dos mesmos.

O último parâmetro importante é a distância mínima entre os grãos que varia tanto com a geometria dos grãos quanto com os deslocamentos horizontal e vertical dos mesmos. Esse parâmetro é fundamental, pois o tunelamento é fortemente afetado pela distância mínima entre os grãos.

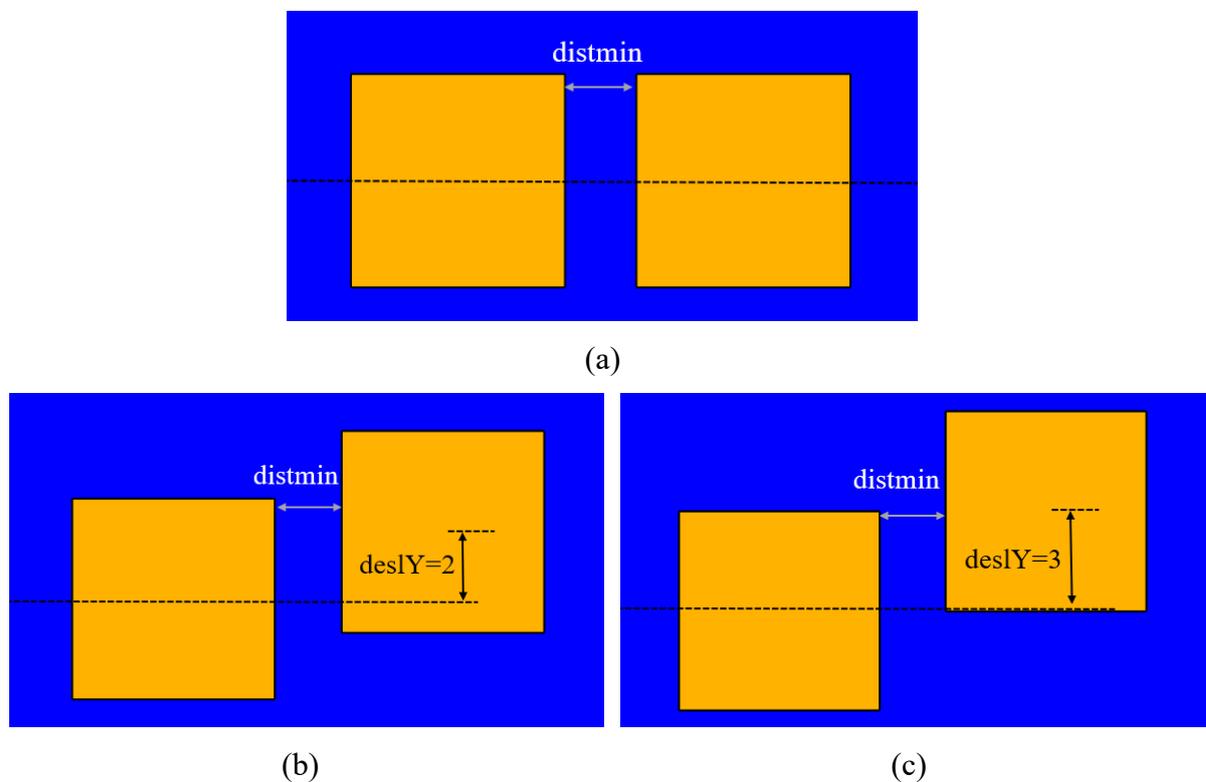
A corrente de tunelamento é proporcional à probabilidade de transmissão. (ERBIL, 2020), tornando essa uma variável fundamental para a compreensão do dispositivo. A probabilidade de transmissão é inversamente proporcional à exponencial da distância entre os

eletrodos (LING; SANNY; MOEBS, 2020), tornando a distância mínima entre os grãos uma variável extremamente influente no dispositivo. Portanto, os pontos com menor distância no dispositivo serão responsáveis pelo maior fluxo de corrente no mesmo.

3.3.1 Distância mínima entre grãos quadrados

Exclusivamente no caso dos grãos quadrados a variação vertical do segundo grão não afeta a distância mínima entre os grãos, lembrando que a variação máxima na vertical é de 3 nm. Como podemos ver na Figura 20, para os três casos abordados de deslocamento vertical, a distância mínima permanece a mesma.

Figura 20 - Variação do deslocamento vertical entre os grãos de platina para a forma quadrada com o espaçamento de 2 nanômetros.



Fonte: Autor.

Legenda: Variação do deslocamento vertical com espaçamento de 2 nm onde o deslocamento vertical em (a) é de 0 nm, em (b) é de 2 nm e em (c) é de 3 nm. Todos os três casos possuem a mesma distância mínima que é equivalente ao espaçamento.

Portanto as distâncias mínimas para os grãos quadrados em função do espaçamento e do deslocamento vertical podem ser vistas na Tabela 4 podendo-se compará-las com as distâncias de centro a centro de cada caso.

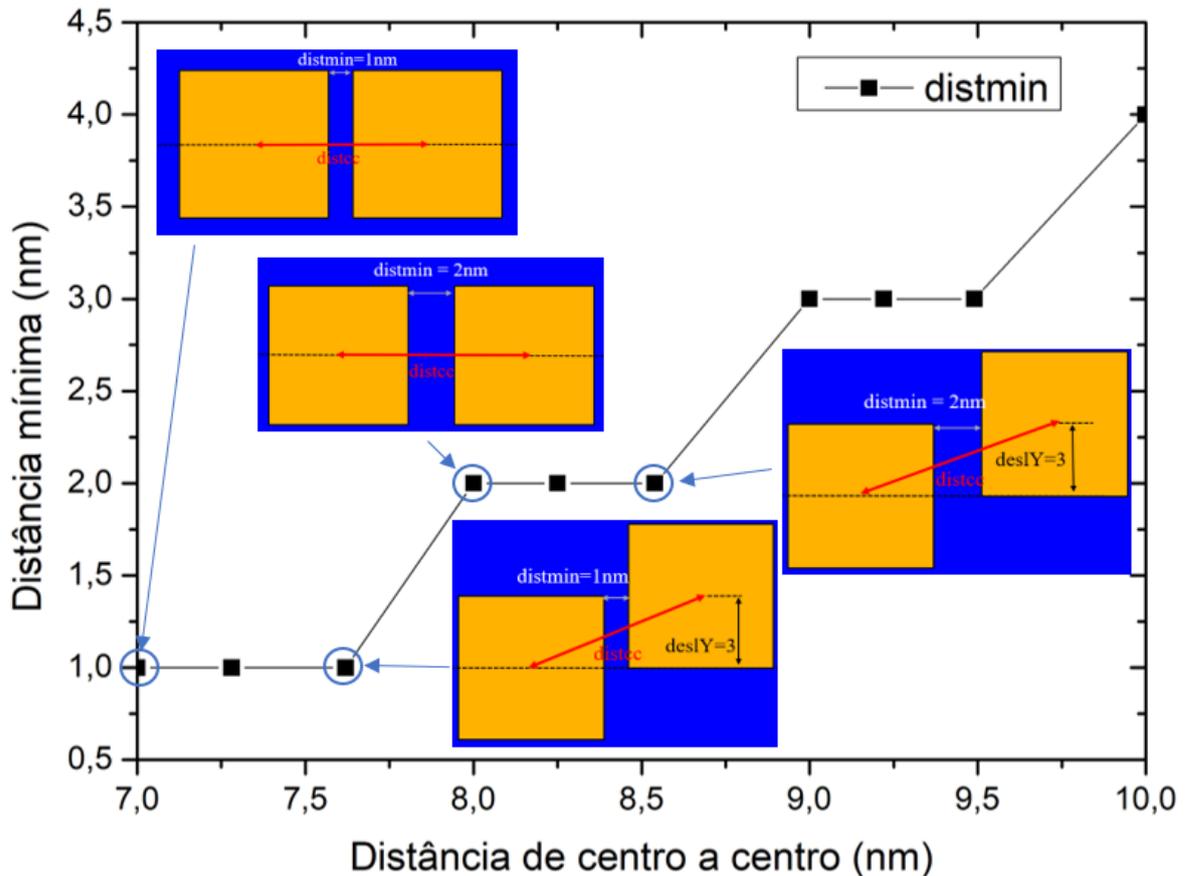
Tabela 4 - Distâncias mínimas para os grãos quadrados

Espaçamento	deslY	distcc	Distância mínima (nm)
1	0	7	1
1	2	7,28	1
1	3	7,62	1
2	0	8	2
2	2	8,25	2
2	3	8,54	2
3	0	9	3
3	2	9,22	3
3	3	9,49	3
4	0	10	4

Fonte: Autor.

Sendo assim é possível gerar o gráfico da Figura 21 onde podemos contemplar a variação da distância mínima pela variação da distância de centro a centro.

Figura 21 - Distância mínima em função da distância de centro a centro para grãos quadrados



Fonte: Autor.

Legenda: Gráfico da distância mínima em função da distância de centro a centro para os grãos de geometria quadrada, contendo exemplos de estrutura do simulador onde as linhas vermelhas indicam a distância de centro a centro e as linhas brancas a distância mínima.

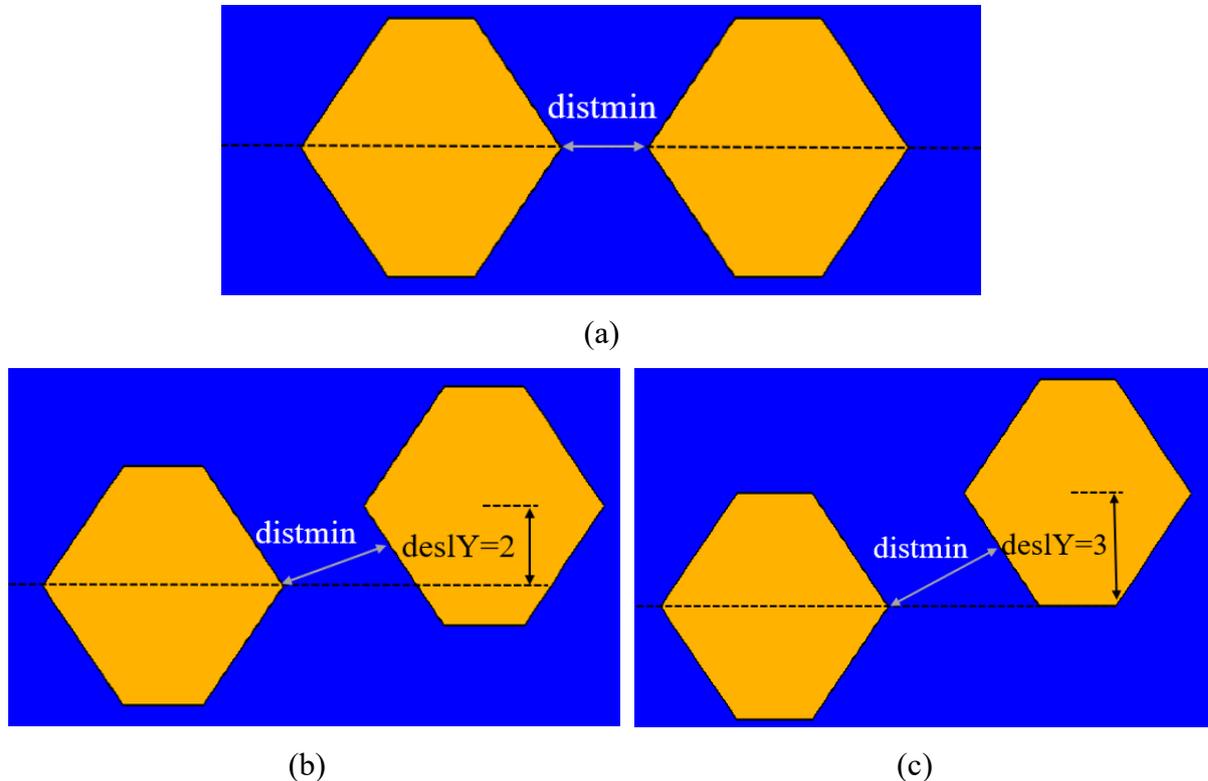
No gráfico pode-se ver alguns exemplos das estruturas, dos grãos quadrados, geradas pela simulação e visualizadas pela ferramenta TonyPlot. Em vermelho vemos as distâncias de centro a centro que aumentam conforme deslocamos os grãos e em branco vemos as distâncias mínimas que permanecem constantes nos deslocamentos verticais, porém variam nos deslocamentos horizontais do segundo grão.

3.3.2 Distância mínima entre grãos hexagonais

Para o caso dos grãos hexagonais, a variação vertical do segundo grão provoca uma alteração na distância mínima entre os grãos. Para calcular essa distância mínima se faz necessária a divisão em dois casos. O caso onde os grãos estão com deslocamento vertical nulo,

portanto a distância mínima é equivalente ao espaçamento como no caso da Figura 22 (a), e no caso onde há deslocamento vertical não nulo, como visto nos casos (b) e (c).

Figura 22 – Variação do deslocamento vertical entre os grãos de platina para a forma hexagonal com o espaçamento de 2 nanômetros.



Fonte: Autor.

Legenda: Variação do deslocamento vertical com espaçamento de 2 nm, onde o deslocamento vertical em (a) é de 0 nm, em (b) é de 2 nm e em (c) é de 3 nm.

Quando há deslocamento horizontal, o método para calcular a distância mínima foi por meio da equação de distância de ponto a reta, vista na equação 9.

$$d_{p,r} = \left| \frac{a(x_p) + b(y_p) + c}{\sqrt{a^2 + b^2}} \right| \quad (9)$$

Onde $d_{p,r}$ é a distância do ponto à reta, a é o fator que multiplica o termo das abcissas da reta, b é o fator que multiplica o termo das ordenadas da reta, c é o ponto de intersecção da reta e x_p e y_p são respectivamente as coordenadas de abscissa e ordenada do ponto.

A equação da reta foi calculada para cada caso considerando a diagonal inferior esquerda do grão da direita e o ponto para todos os casos foi considerado o vértice mais à direita do grão da esquerda.

Portanto as distâncias mínimas para os grãos hexagonais em função do espaçamento e do deslocamento vertical podem ser vistas na Tabela 5 podendo-se compará-las com as distâncias de centro a centro de cada caso.

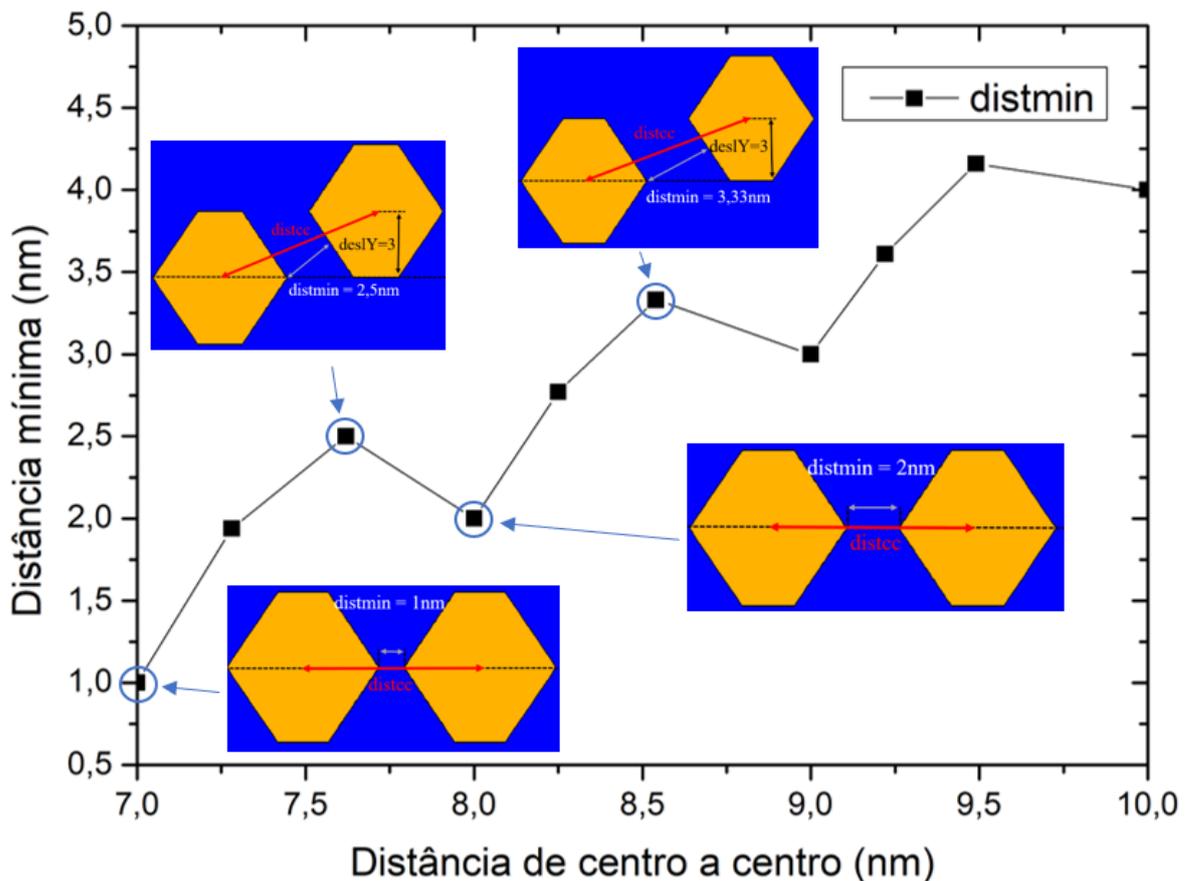
Tabela 5 - Distâncias mínimas para os grãos hexagonais

Espaçamento (nm)	deslY (nm)	distcc (nm)	Distância mínima (nm)
1	0	7	1
1	2	7,28	1,94
1	3	7,62	2,5
2	0	8	2
2	2	8,25	2,77
2	3	8,54	3,33
3	0	9	3
3	2	9,22	3,61
3	3	9,49	4,16
4	0	10	4

Fonte: Autor.

Sendo assim é possível gerar o gráfico da Figura 23 onde podemos contemplar a variação da distância mínima pela variação da distância de centro a centro.

Figura 23 - Distância mínima em função da distância de centro a centro para grãos hexagonais



Fonte: Autor.

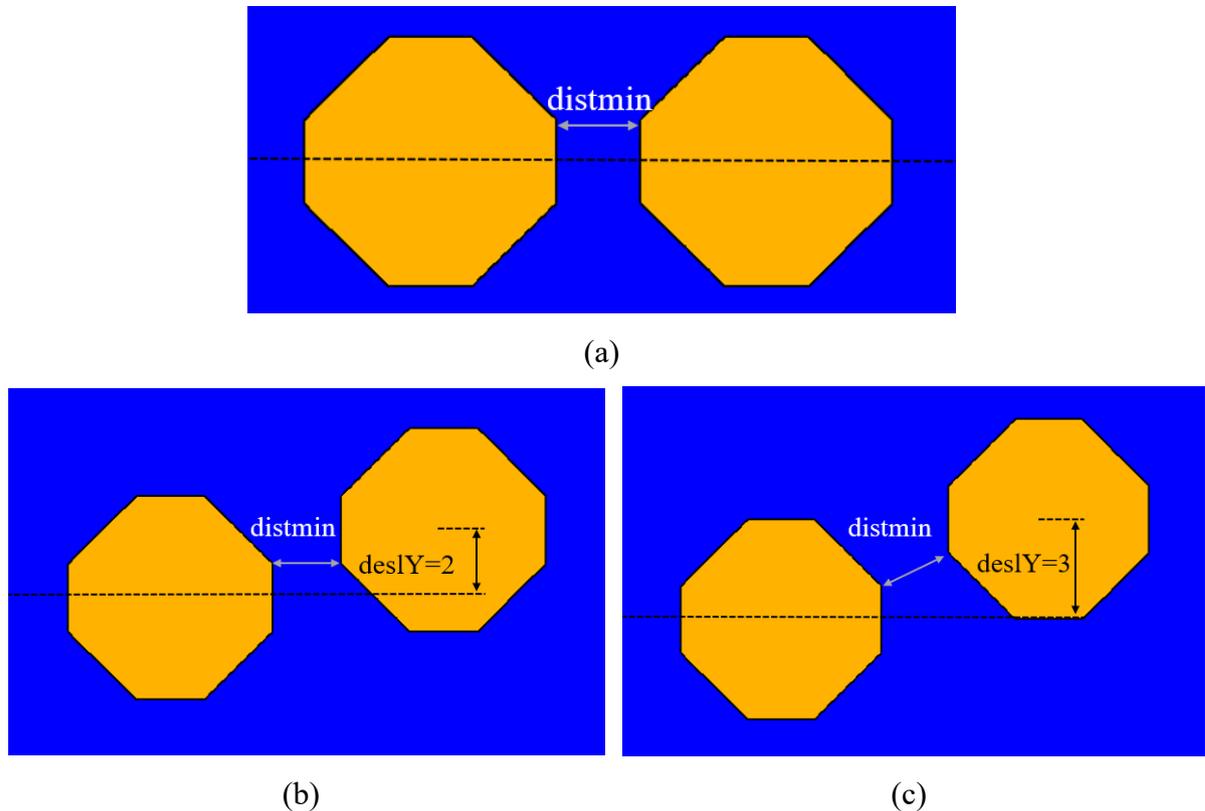
Legenda: Gráfico da distância mínima em função da distância de centro a centro para os grãos de geometria hexagonal, contendo exemplos de estrutura do simulador onde as linhas vermelhas indicam a distância de centro a centro e as linhas brancas a distância mínima.

No gráfico pode-se ver alguns exemplos das estruturas, dos grãos hexagonais, geradas pela simulação e visualizadas pela ferramenta TonyPlot. Em vermelho vemos as distâncias de centro a centro que aumentam conforme deslocamos os grãos e em branco vemos as distâncias mínimas que aumentam e diminuem nos deslocamentos verticais e horizontais. Pela geometria do grão hexagonal, deslocar verticalmente o segundo grão em até 3 nanômetros aumenta a distância mínima conforme aumenta-se a distância de centro a centro, porém, quando o segundo grão volta para a posição horizontal, mas com maior espaçamento, embora a distância de centro a centro aumente, a distância mínima diminui, causando o efeito de serrilhado no gráfico. Esse efeito ocorre do terceiro para o quarto ponto do gráfico, do sexto para o sétimo e do nono para o décimo.

3.3.3 Distância mínima entre grãos octogonais

Para o caso dos grãos octogonais a variação vertical do segundo grão também provoca uma variação a distância mínima entre os grãos. Para calcular a distância mínima para deslocamentos verticais do grão octogonal, também se faz necessária a divisão em dois casos. O primeiro caso ocorre quando os grãos estão com deslocamento vertical nulo ou com deslocamento vertical de 2 nm, sendo a distância mínima equivalente ao espaçamento como visto na Figura 24 nas imagens (a) e (b), e o segundo caso ocorre quando há deslocamento vertical de 3 nm, como visto na imagem (c) da mesma figura.

Figura 24 - Variação do deslocamento vertical entre os grãos de platina para a forma octogonal com o espaçamento de 2 nanômetros.



Fonte: Autor.

Legenda: Variação do deslocamento vertical com espaçamento de 2 nm onde o deslocamento vertical em (a) é de 0 nm, em (b) é de 2 nm e em (c) é de 3 nm.

Para o segundo caso o método para calcular a distância mínima entre os grãos foi por meio da distância de ponto a ponto, como segue a equação 10.

$$d_{p,p} = \sqrt{(x_b - x_a)^2 + (y_b - y_a)^2} \quad (10)$$

Onde $d_{p,p}$ é a distância entre os pontos, x_b e y_b são as coordenadas de abcissas e ordenadas do segundo ponto e x_a e y_a são as coordenadas de abcissas e ordenadas do primeiro ponto.

A equação foi aplicada para os casos onde $deslY=3$ considerando como primeiro ponto o vértice superior da aresta mais à direita do grão à esquerda e como segundo ponto o vértice inferior da aresta mais à esquerda do grão à direita, como pode ser visto na Figura 24 (c).

Portanto as distâncias mínimas para os grãos octogonais em função do espaçamento e do deslocamento vertical podem ser vistas na Tabela 6 podendo-se compará-las com as distâncias de centro a centro de cada caso.

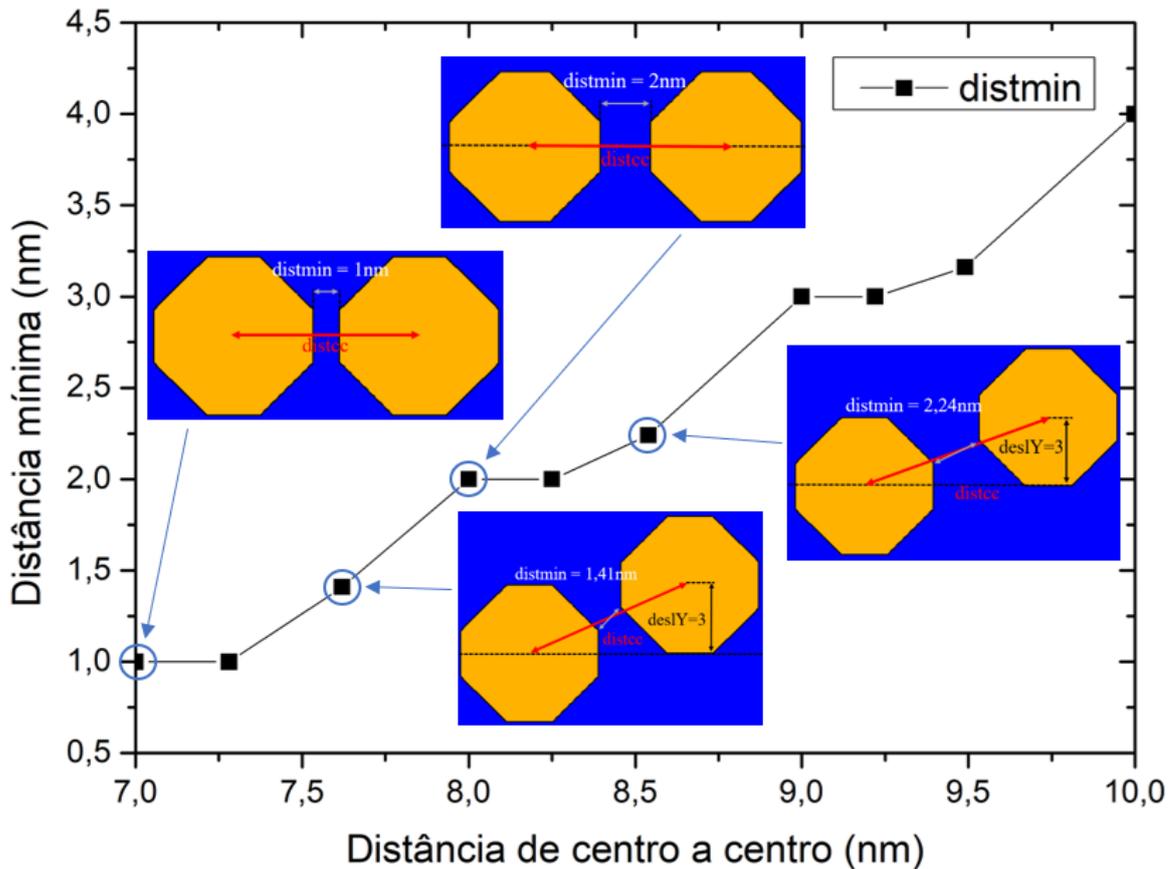
Tabela 6 - Distâncias mínimas para os grãos octogonais

Espaçamento (nm)	deslY (nm)	distcc (nm)	Distância mínima (nm)
1	0	7	1
1	2	7,28	1
1	3	7,62	1,41
2	0	8	2
2	2	8,25	2
2	3	8,54	2,24
3	0	9	3
3	2	9,22	3
3	3	9,49	3,16
4	0	10	4

Fonte: Autor.

Sendo assim é possível gerar o gráfico da Figura 25 onde podemos contemplar a variação da distância mínima pela variação da distância de centro a centro.

Figura 25 - Distância mínima em função da distância de centro a centro para grãos octogonais



Fonte: Autor.

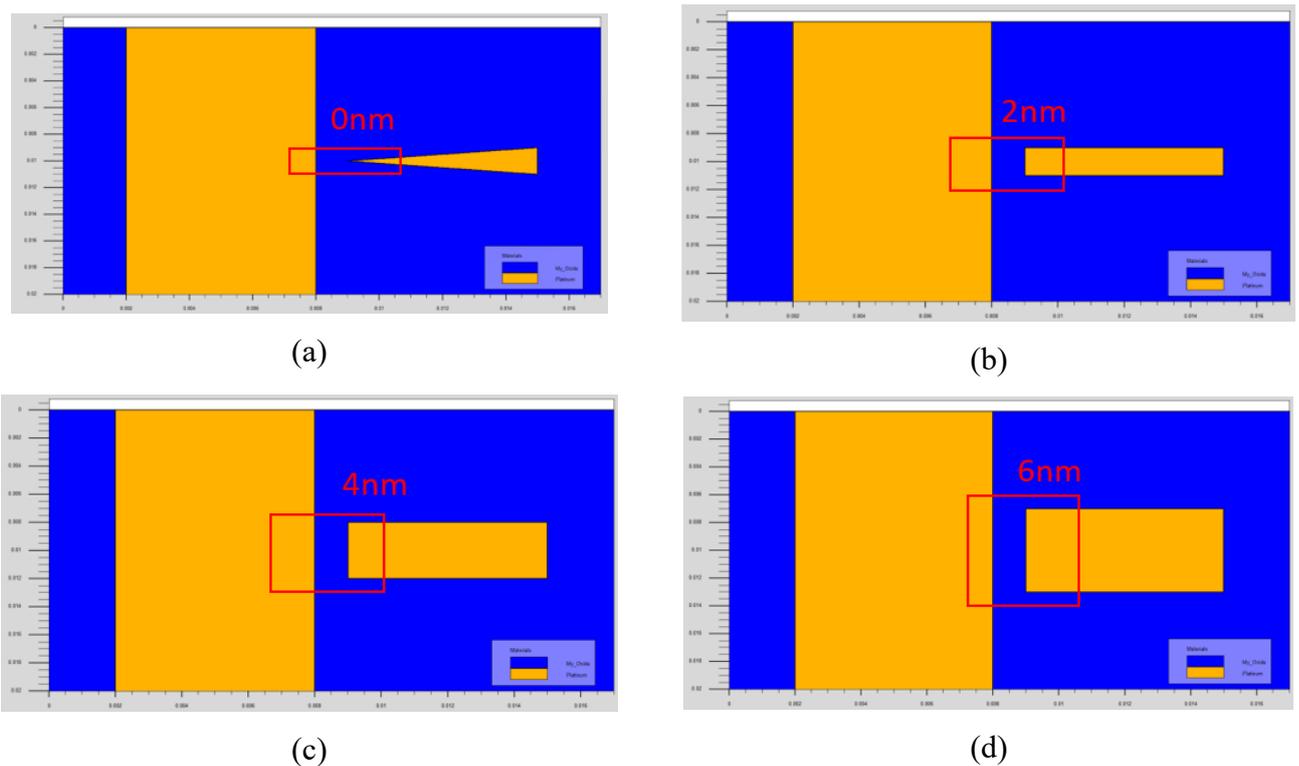
Legenda: Gráfico da distância mínima em função da distância de centro a centro para os grãos de geometria octogonal, contendo exemplos de estrutura do simulador onde as linhas vermelhas indicam a distância de centro a centro e as linhas brancas a distância mínima.

No gráfico pode-se ver alguns exemplos das estruturas, dos grãos hexagonais, geradas pela simulação e visualizadas pela ferramenta TonyPlot. Em vermelho vemos as distâncias de centro a centro que aumentam conforme deslocamos os grãos e em branco vemos as distâncias mínimas que aumentam ou permanecem constantes pela variação vertical do segundo grão. Pela geometria do grão octogonal, deslocar verticalmente o segundo grão em 2 nanômetros não altera distância mínima, porém aumenta-se a distância de centro a centro. O deslocamento vertical do segundo grão em 3 nanômetros varia tanto a distância mínima quanto a distância de centro a centro.

3.4 INFLUÊNCIA DA ÁREA E DA DISTÂNCIA MÍNIMA

A fim de analisar e demonstrar a influência da distância mínima e da área na corrente elétrica, as estruturas da Figura 26 foram desenvolvidas e simuladas. Em todas as simulações a distância mínima é idêntica e equivalente a 1 nanômetro bem como a temperatura é de 300 K. O eletrodo da esquerda preenche toda a região vertical da simulação e sofre aplicação de potencial externo de 1mV. Os quadrados vermelhos destacam, em cada caso, a região entre os grãos que contempla a distância mínima e são acompanhados, também em vermelho, do valor da altura do grão que contempla essa distância.

Figura 26 - Variação da região que contempla a distância mínima entre grãos



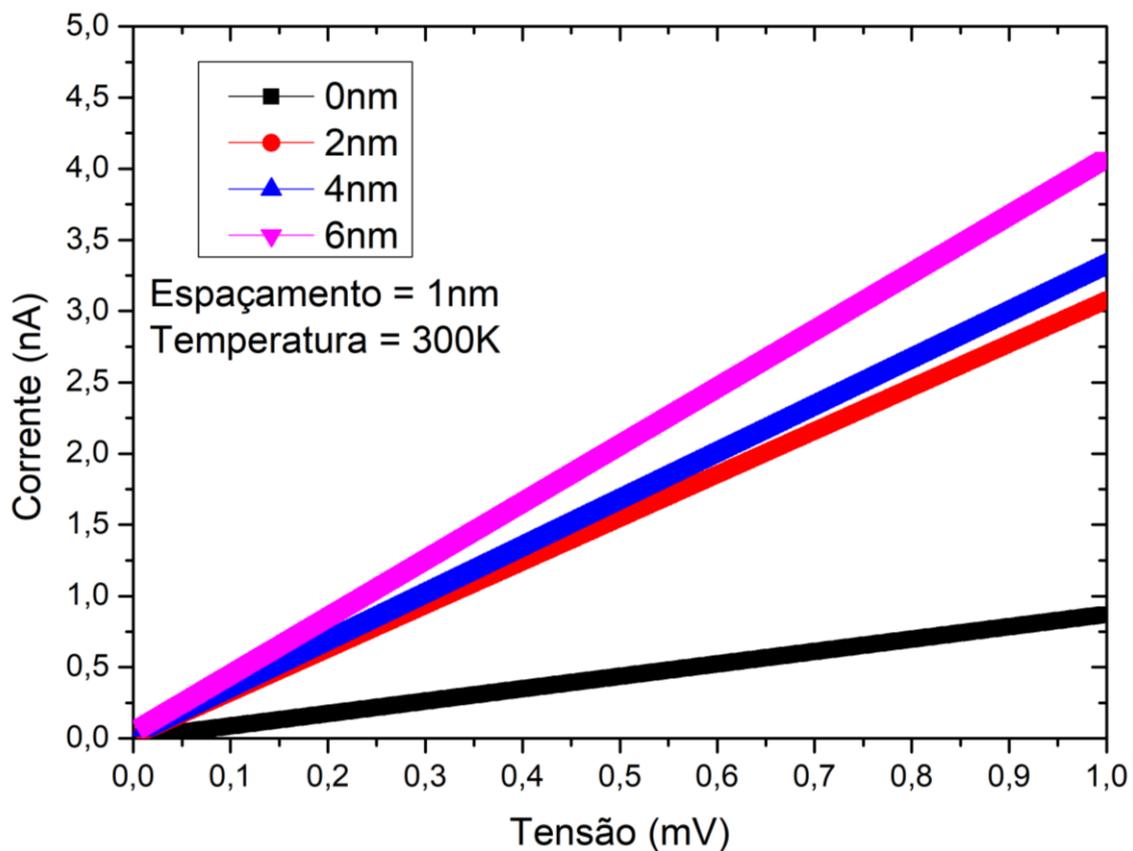
Fonte: Autor.

Legenda: Nas figuras pode-se ver a variação da área que contempla a distância mínima, iniciando-se em 0 nanômetros, ou seja, um único ponto na figura (a), passando por 2 nanômetros na figura (b), 4 nanômetros na figura (c) e por fim 6 nanômetros na figura (d).

No caso da Figura 26 (a) temos apenas um ponto do grão da direita que contempla a distância mínima, por ser apenas um ponto essa região é de 0 nanômetros, já na figura (b) temos um grão retangular com 2 nanômetros de altura, sendo assim, 2 nanômetros que contemplam a distância mínima entre os grãos. Para a figura (c) grão possui 4 nanômetros de altura e para a figura (d) 6 nanômetros sendo esses também os valores da região que contempla a distância mínima.

As respostas de corrente elétrica para cada um dos casos da Figura 26 podem ser vistas na Figura 27. É possível inferir pelo gráfico que a área influencia na corrente elétrica, porém não de forma linear. Como pode-se ver, ao dobrarmos a região de 2 nanômetros para 4 nanômetros temos o dobro da região, porém, não temos o dobro da corrente elétrica. O mesmo vale para o caso seguinte, o aumento de 4 nanômetros para 6 nanômetros, aumentando assim 50% da região, não reflete esse aumento na corrente elétrica.

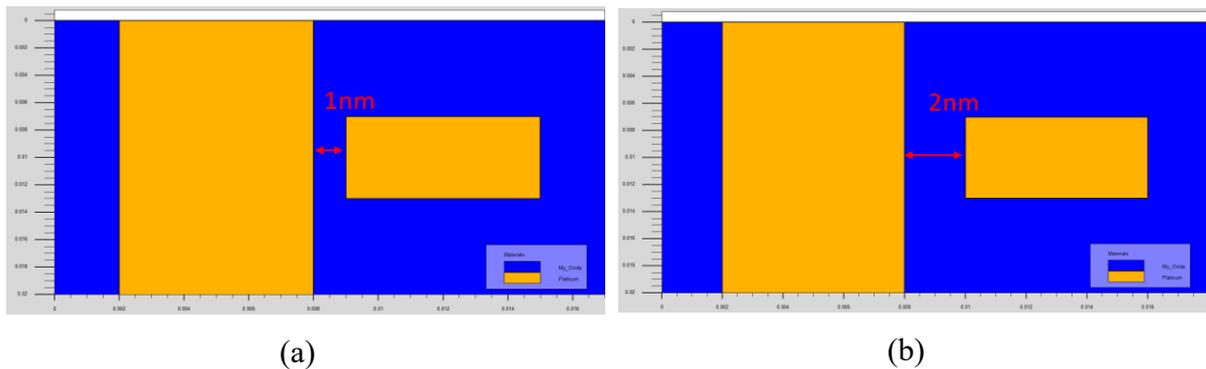
Figura 27 - Gráfico comparativo das correntes elétricas resultantes da variação da região que contempla a distância mínima dos grãos



Fonte: Autor.

Pode-se notar, contudo que a distância mínima possui uma influência bastante considerável, sendo fator determinante da intensidade da corrente elétrica. Visando variar o parâmetro da distância mínima, foram desenvolvidas e simuladas as duas estruturas da Figura 28. Ambas possuem grãos de dimensões idênticas, mesma temperatura nas simulações e mesma aplicação de potencial externo. Porém na figura (a) a distância mínima, destacada em vermelho, é de 1 nanômetro e a na figura (b) a distância mínima, também destacada em vermelho, é de 2 nanômetros.

Figura 28 – Variação da distância mínima mantendo-se a altura do grão da direita

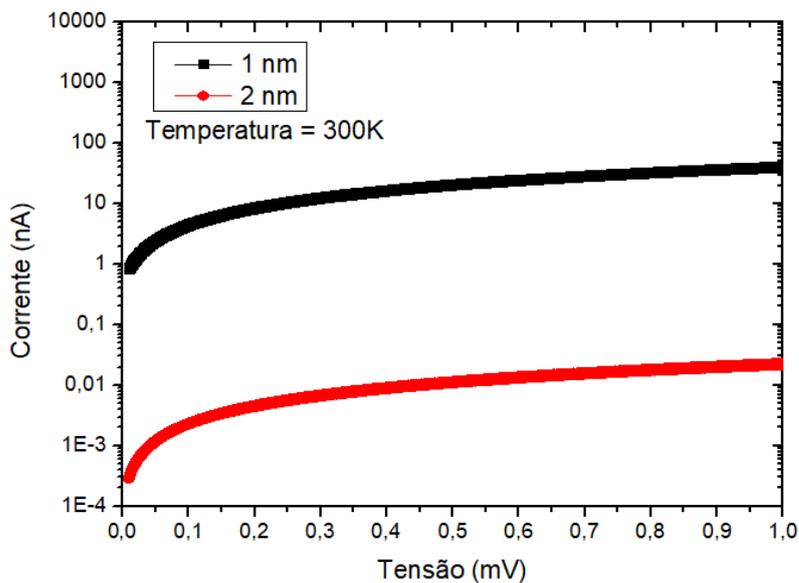


Fonte: Autor.

Legenda: Variação da distância mínima, deslocando-se o grão da direita. A figura (a) possui distância mínima de 1 nanômetro e a figura (b) com distância mínima de 2 nanômetros.

As respostas de corrente elétrica para os dois casos da Figura 28 podem ser vistas na Figura 29. É possível concluir pelo gráfico, que vale ressaltar está com o eixo vertical na escala logarítmica, que a variação da distância mínima dos grãos metálicos provoca uma alteração exponencial na corrente elétrica do dispositivo.

Figura 29 - Gráfico comparativo das correntes elétricas resultantes da variação da distância mínima dos grãos



Fonte: Autor.

Esse estudo nos mostra que ambos os efeitos, a saber, a variação da área que contempla a distância mínima e a própria distância mínima, influenciam na corrente elétrica, porém com intensidades diferentes. Com intensidade exponencial, a distância mínima rege a ordem de grandeza da corrente elétrica, já a área possibilita uma variação da corrente elétrica, mas em escala muito menor, não atingindo a relação linear.

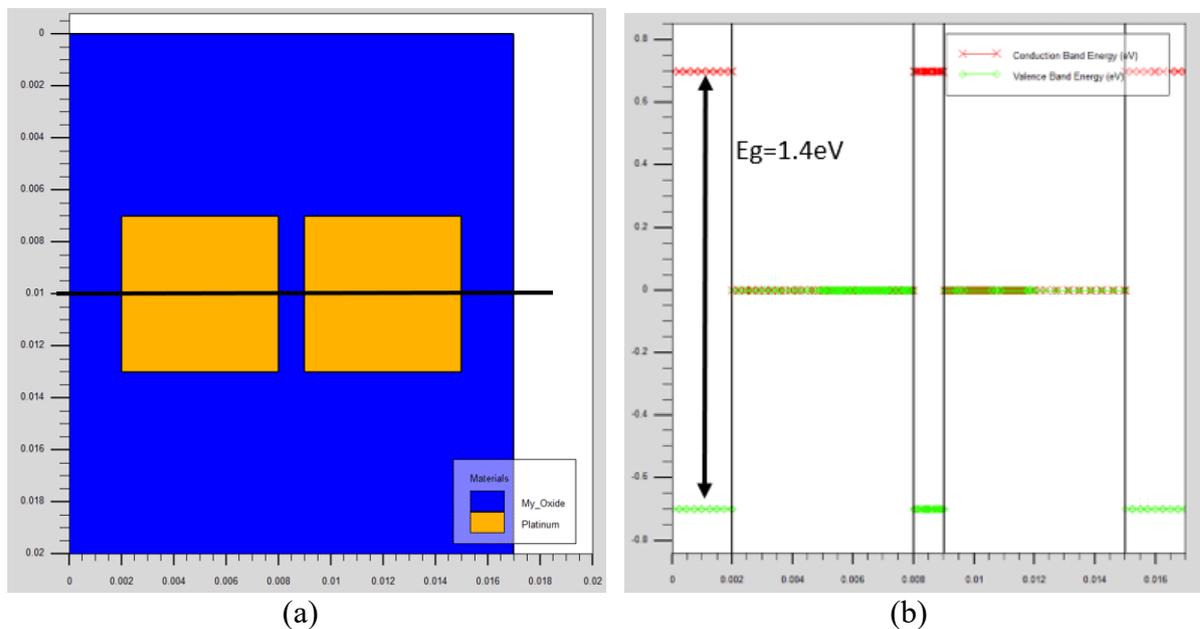
4 RESULTADOS

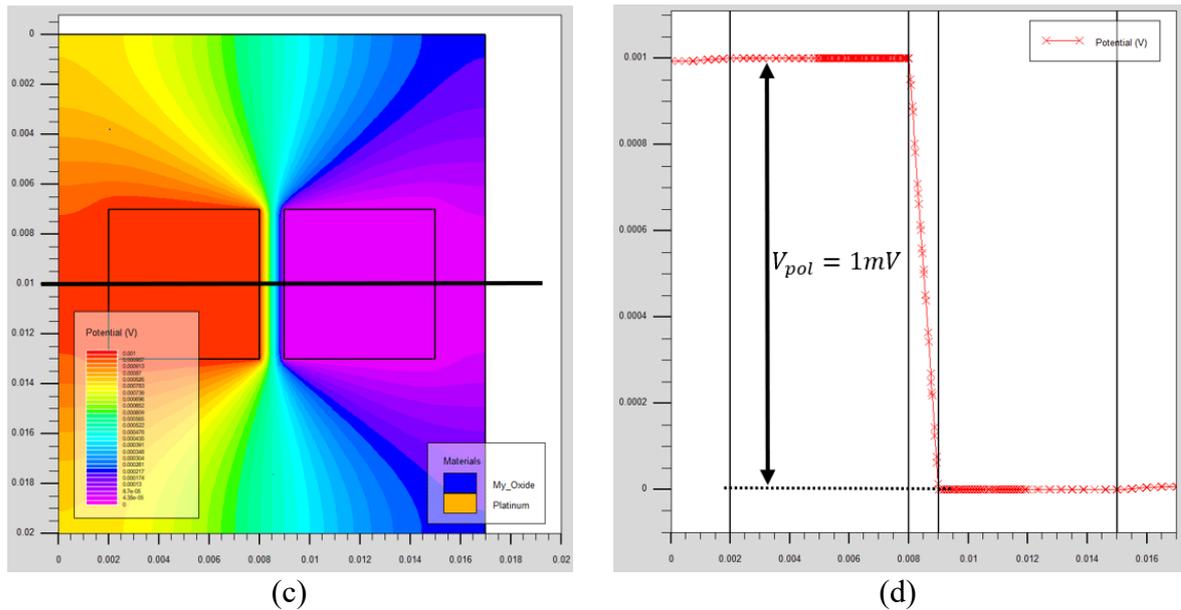
Neste capítulo, serão apresentados os resultados encontrados para as formas de grão estudadas, bem como a temperatura e também o erro quadrático de cada caso.

4.1 DEFINIÇÕES

A Figura 30 (a) mostra um arquivo de saída do simulador que foi aberto pela ferramenta TonyPlot, em azul temos o isolante adaptado e em amarelo vemos os grãos quadrados de platina, também adaptados com a função trabalho no simulador. Vemos também que há uma linha horizontal preta que simboliza um corte horizontal, no qual podemos ver os níveis de condução e valência de cada material, como visto na Figura 30 (b). Nas regiões extremas e no centro temos o óxido, como pode-se ver a banda proibida desse caso é de 1,4eV como determinado, sendo que a banda de condução está em 0,7 eV positivo e a banda de valência com 0,7 eV negativo. Já os metais se encontram nas regiões onde os níveis de condução e de valência estão sobrepostos e como são eletrodos sem aplicação potencial possuem o valor de zero potencial. Os mesmos efeitos podem ser vistos nos grãos hexagonais e octogonais.

Figura 30 – Níveis de condução e valência e aplicação de potencial para o caso dos grãos quadrados.





Fonte: Autor

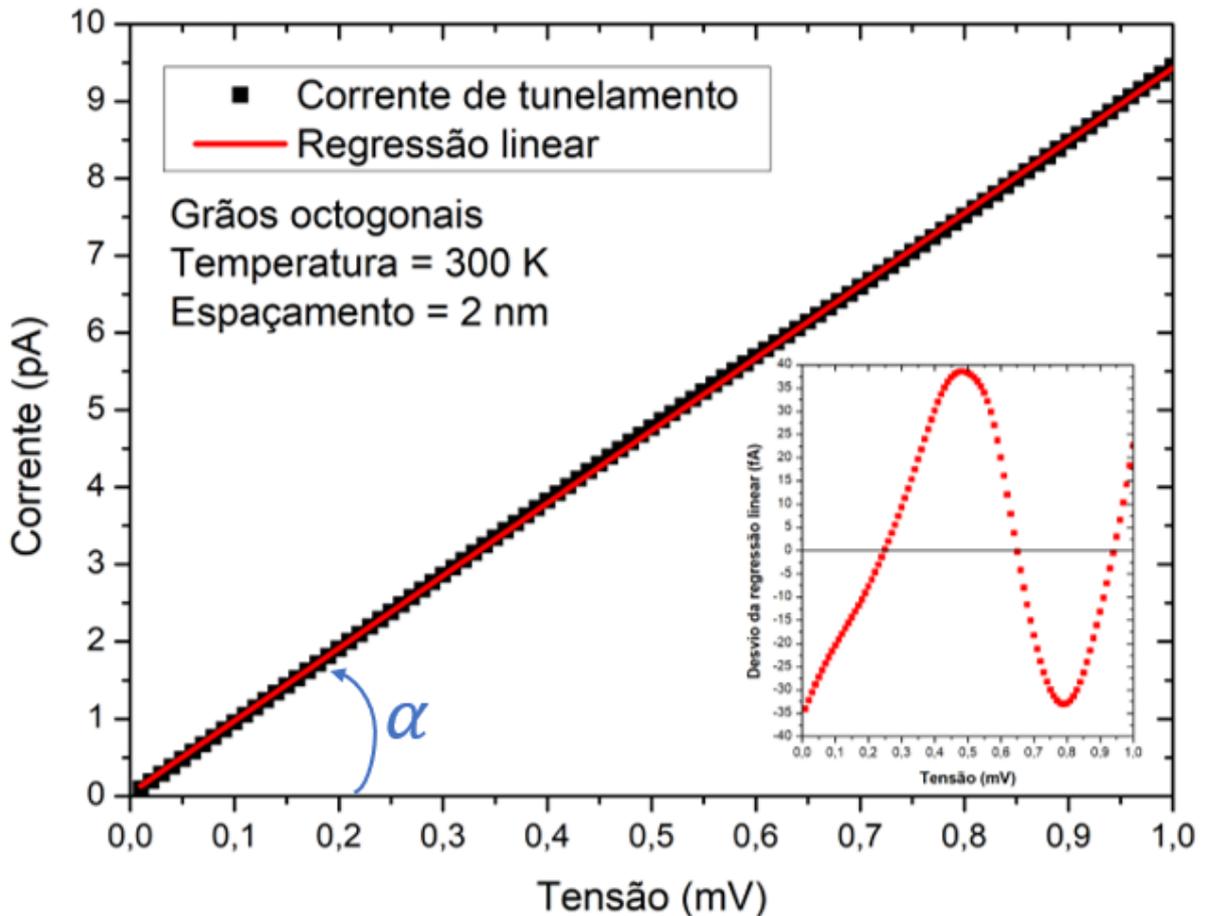
Legenda: Na figura (a) temos um arquivo de estrutura de saída visualizado na ferramenta TonyPlot. Na figura (b) pode-se ver as bandas de condução e valência do corte horizontal explicitado na figura (a). A figura (c) mostra os grãos após a aplicação de potencial de 1mV. A figura (d) mostra o potencial no corte explicitado na figura (c).

A Figura 30 (c) mostra a distribuição potencial após a aplicação de potencial externo de 1mV, que será o potencial aplicado em todas as simulações, bem como uma linha horizontal preta simbolizando um corte horizontal, no qual pode-se ver a distribuição potencial na figura (d). Antes da aplicação externa de potencial não havia diferença de potencial entre os grãos.

Durante o decorrer deste trabalho diversas respostas elétricas de corrente serão comparadas pela variação da distância entre os grãos de platina e também pela variação da temperatura da simulação.

Como as respostas das simulações são praticamente lineares, foi aplicada a regressão linear nos dados de corrente por tensão a fim de extrairmos a inclinação da reta. Pode-se ver na Figura 31, a título de exemplo, a corrente simulada na curva preta, a regressão linear em vermelho e o ângulo α cuja tangente é a inclinação da reta destacada em azul. Além disso, o gráfico do desvio da regressão linear é apresentado na região inferior do lado direito da figura.

Figura 31 - Exemplo de resposta de corrente elétrica com a variação da tensão, para o caso de grãos hexagonais e espaçamento entre grãos de 2 nm, acompanhada de sua regressão linear e desvio desta.

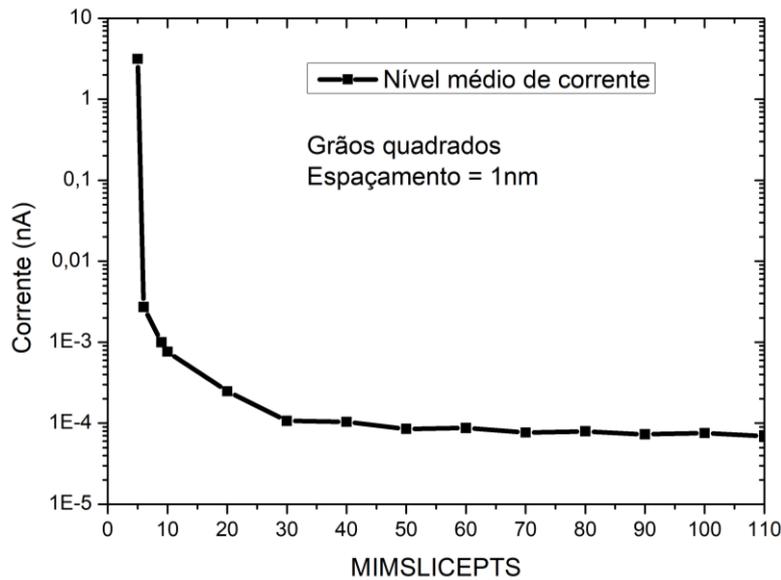


Fonte: Autor.

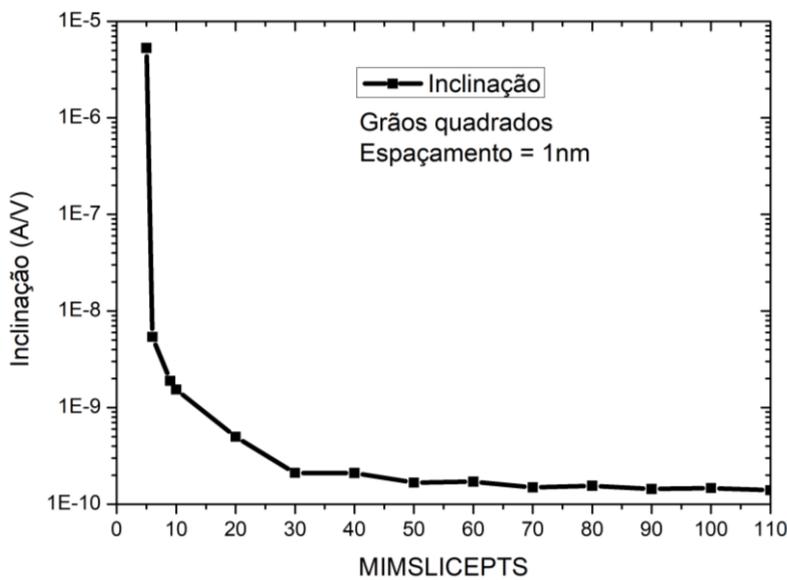
Legenda: Corrente elétrica com a variação da tensão, para o caso de grãos hexagonais e espaçamento entre grãos de 2 nm em quadrados pretos. A regressão linear dessa curva é apresentada na linha vermelha. Por fim, o desvio da regressão linear é apresentado no canto inferior direito em quadrados vermelhos.

Um parâmetro que o modelo utilizado (MIMTUN) possui é o “MIMSLICEPTS” que define o número de pontos utilizados para realizar a interpolação na grade para os cálculos de corrente elétrica do modelo. Quanto maior o valor utilizado, mais precisa é a simulação (pois irá interpolar mais pontos), mas também exigirá maior processamento resultando num tempo maior de simulação. É preciso então utilizar um valor que apresente alta confiabilidade da simulação, mas ao mesmo tempo não aumente muito o tempo da mesma. Para tal, algumas simulações foram feitas variando o valor do MIMSLICEPTS e comparando o nível médio de corrente, como visto na Figura 32 (a), e a inclinação da reta da corrente elétrica em função da tensão, como visto na Figura 32 (b).

Figura 32 - Nível de corrente e inclinação em função do MIMSLICEPTS



(a)



(b)

Fonte: Autor.

Legenda: Na figura (a) vemos a variação da corrente em nanoampères em função da variável MIMSLICEPTS inserida no simulador, na figura (b) vemos a variação da inclinação das regressões lineares da corrente elétrica por tensão elétrica ao variar o MIMSLICEPTS.

Como pode-se ver, há uma grande variação tanto na corrente quanto na inclinação para valores de MIMSLICEPTS baixos, convergindo para um valor quando a variável está definida em aproximadamente 30 ou superior, porém ainda com algumas oscilações. Para garantias de uma simulação precisa foi calculada a média móvel com intervalo de dois pontos tanto para a inclinação quanto para o nível de corrente e foi decidido utilizar o valor de MIMSLICEPTS

que possua uma variação inferior a 5% da média móvel para ambas as informações, esse valor corresponde ao MIMSLICEPTS igual a 90.

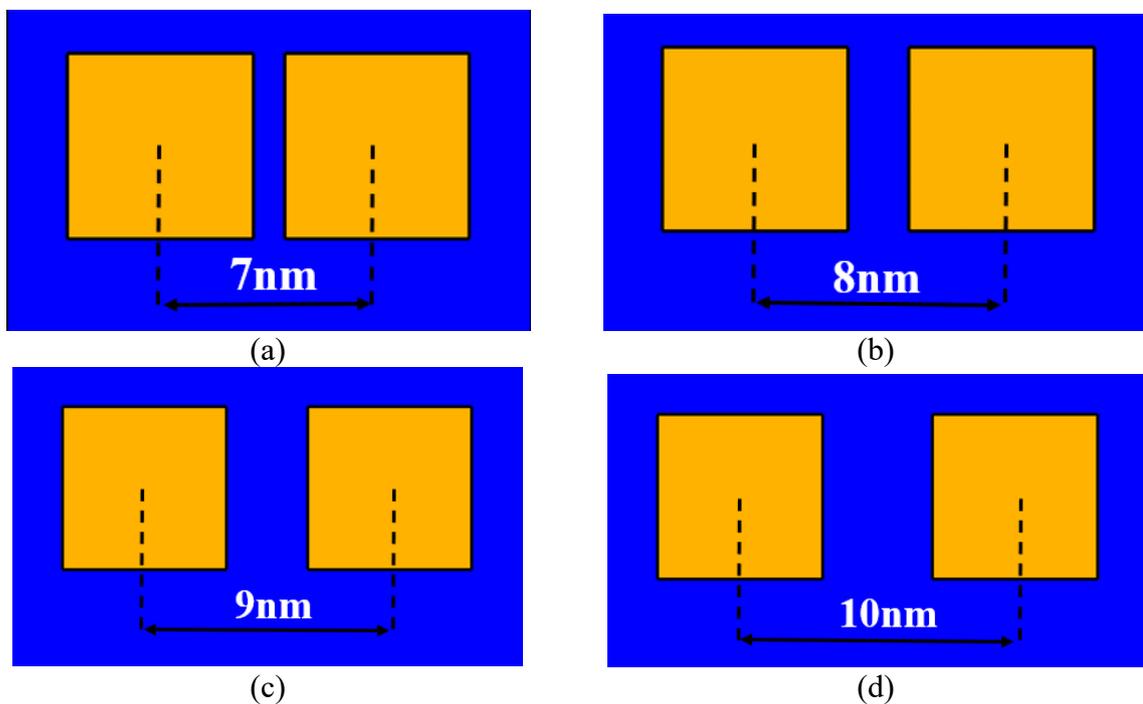
4.2 VARIAÇÃO DA DISTÂNCIA ENTRE GRÃOS

Nesta seção, será apresentada a variação da distância vertical e horizontal dos grãos para as três geometrias., bem como um comparativo de corrente e da inclinação de cada caso.

4.2.1 Grãos quadrados

Iniciando o estudo pelos grãos quadrados podemos ver as estruturas extraídas do *software* TonyPlot com variação horizontal na Figura 33.

Figura 33 - Distâncias de centro a centro com variação horizontal nos grãos quadrados



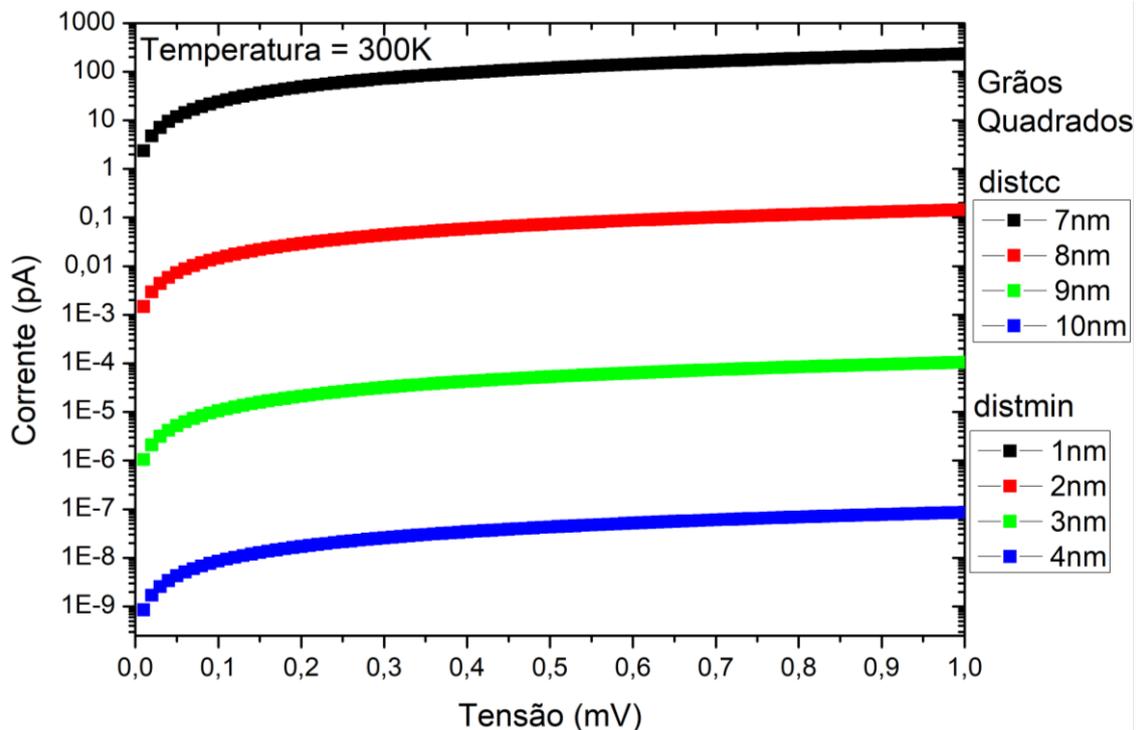
Fonte: Autor.

Legenda: Variação da distância entre grãos de platina para a forma quadrada onde a distância de centro a centro em (a) é de 7 nm, em (b) é de 8 nm, em (c) é de 9 nm e em (d) é de 10 nm.

As correntes de cada uma das simulações podem ser vistas na Figura 34, onde pode-se ver uma queda brusca de corrente para cada nanômetro de afastamento entre os grãos metálicos.

Como os grãos quadrados possuem uma área maior nas laterais dos grãos que são responsáveis pela condução, seu valor de corrente é superior às demais formas de grãos.

Figura 34 - Correntes dos grãos quadrados considerando a variação das distâncias horizontais



Fonte: Autor.

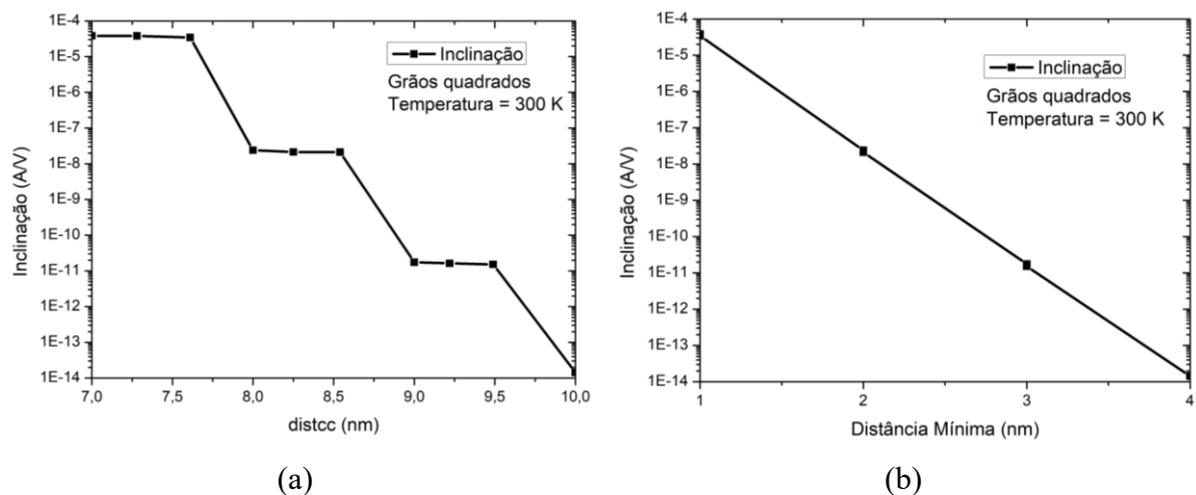
Legenda: O gráfico mostra as correntes elétricas para o caso dos grãos quadrados espaçados apenas horizontalmente com o passo de 1 nanômetro, que é limitado pelo simulador. No gráfico pode-se ver a variação da corrente para as distâncias de centro a centro (legenda superior) ou as distâncias mínimas (legenda inferior).

As distâncias mínimas para os deslocamentos verticais no caso dos grãos quadrados são sempre as mesmas e equivalem ao espaçamento entre os grãos como pode ser visto na Figura 20. Como os grãos quadrados possuem sempre a distância mínima, as correntes elétricas para as variações verticais são muito semelhantes.

Após realizar a regressão linear de cada simulação dos grãos quadrados e extrair a inclinação de cada uma das correntes elétricas em função do potencial, foram criados dois gráficos que podem ser vistos na Figura 35. No gráfico (a) pode-se ver que existem inclinações com níveis quase planos que são sucedidos por uma redução do valor da inclinação, seguida novamente de um nível quase plano. Os níveis quase planos ocorrem pelo fato de as distâncias mínimas serem iguais nos deslocamentos verticais dos grãos quadrados. Como a distância mínima é a mesma, a probabilidade de transmissão máxima não é afetada, produzindo um fluxo

de corrente semelhante para os deslocamentos verticais. Há uma redução na corrente elétrica quando o segundo grão quadrado é deslocado verticalmente (já que há uma variação na área do grão que contempla a distância mínima), porém essa mudança não é tão perceptível no gráfico, pois o eixo vertical está em escala logarítmica de forma a abranger todos os casos simulados. A redução do valor da inclinação é bastante perceptível quando há uma variação de distância horizontal, fazendo assim a distância mínima aumentar e então a probabilidade de transmissão ser bruscamente reduzida. Com a probabilidade de transmissão menor, a corrente é menor, reduzindo assim a inclinação da regressão linear da corrente do dispositivo.

Figura 35 - Inclinações em A/V dos grãos quadrados em função da distância de centro a centro e distância mínima dos grãos.



Fonte: Autor

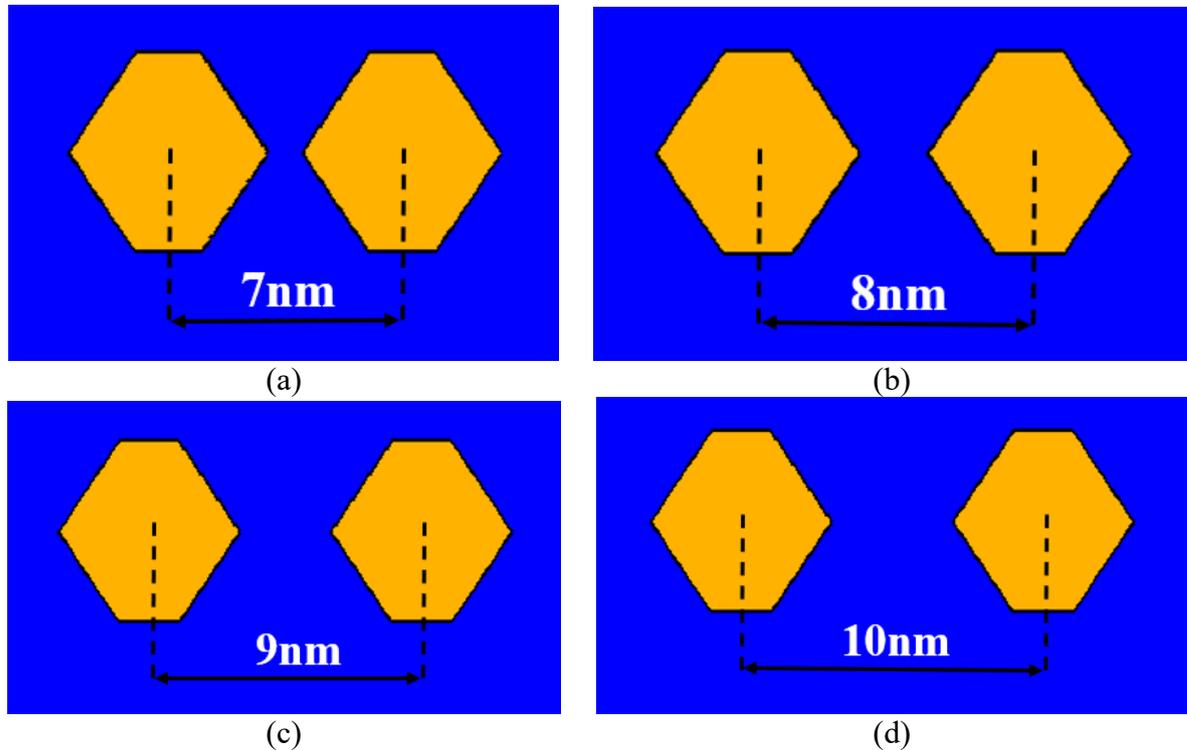
Legenda: O gráfico (a) contempla a inclinação em A/V de cada simulação dos grãos quadrados em função da distância de centro a centro dos grãos. O gráfico (b) contempla a inclinação também em A/V, porém, em função da distância mínima entre os grãos.

No gráfico (b), pode-se ver alguns pontos sobrepostos, pois como já citado, as distâncias mínimas são iguais para os deslocamentos verticais e possuem valores de corrente semelhantes, logo possuem valores de inclinação igualmente semelhantes, novamente não é perceptível a variação da inclinação para deslocamentos verticais pelo fato do eixo vertical estar em escala logarítmica, portanto no gráfico esses pontos se sobrepõem.

4.2.2 Grãos hexagonais

Continuando o estudo, agora pelos grãos hexagonais, podemos ver as estruturas extraídas do *software* TonyPlot com variação horizontal na Figura 36.

Figura 36 - Distâncias de centro a centro com variação horizontal nos grãos hexagonais

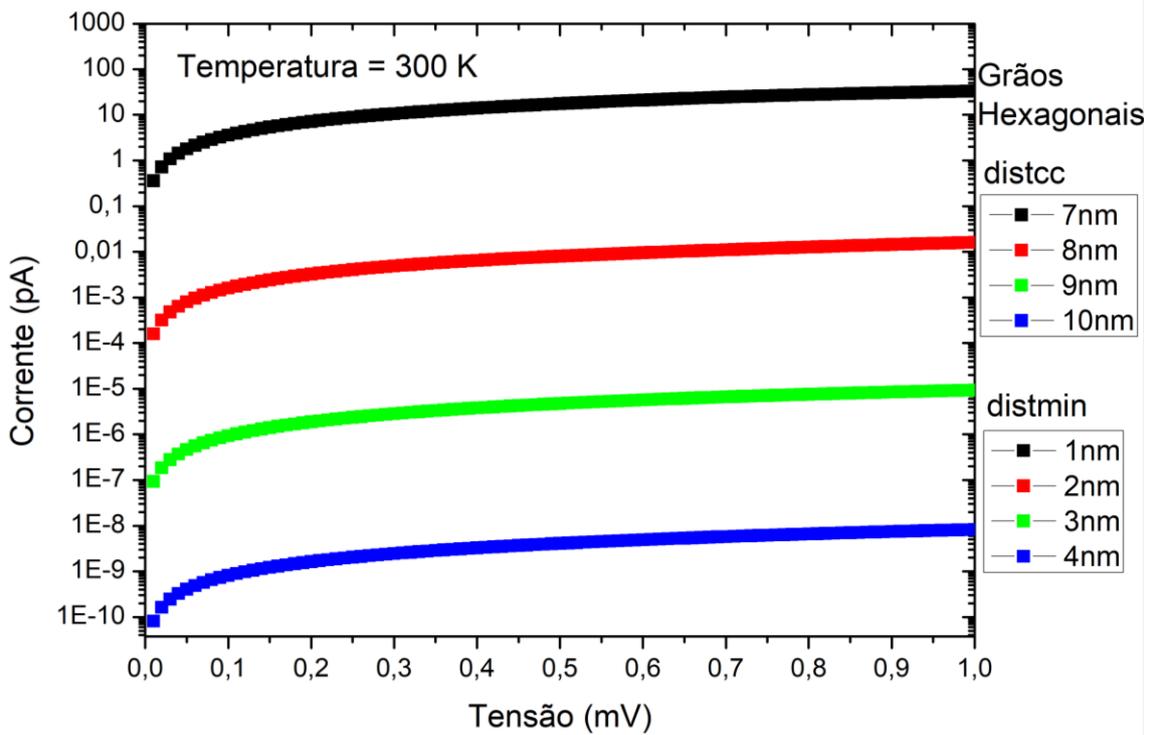


Fonte: Autor.

Legenda: Variação da distância entre grãos de platina para a forma hexagonal onde a distância de centro a centro em (a) é de 7 nm, em (b) é de 8 nm, em (c) é de 9 nm e em (d) é de 10 nm.

As correntes de cada uma das simulações podem ser vistas na Figura 37, onde assim como no caso quadrado pode-se ver uma queda brusca de corrente para cada nanômetro de afastamento entre os grãos metálicos. Como os grãos hexagonais possuem uma área menor nas laterais dos grãos que são responsáveis pela condução, seu valor de corrente é inferior às demais formas de grãos.

Figura 37 - Correntes dos grãos hexagonais considerando a variação das distâncias horizontais



Fonte: Autor.

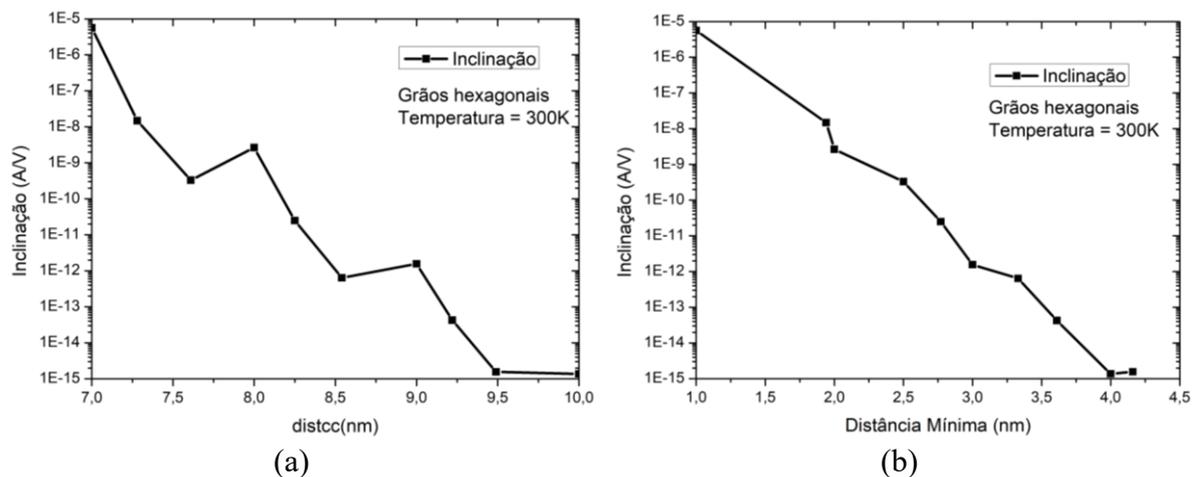
Legenda: O gráfico mostra as correntes elétricas para o caso dos grãos hexagonais espaçados apenas horizontalmente com o passo de 1 nanômetro, que é limitado pelo simulador. No gráfico pode-se ver a variação da corrente para as distâncias de centro a centro (legenda superior) ou as distâncias mínimas (legenda inferior).

As distâncias mínimas para os grãos hexagonais em função do espaçamento e do deslocamento vertical podem ser vistas na Tabela 5 podendo-se compará-las com as distâncias de centro a centro de cada caso.

Após realizar a regressão linear de cada simulação dos grãos hexagonais e extrair a inclinação de cada uma das correntes elétricas em função do potencial, foram criados dois gráficos que podem ser vistos na Figura 38. No gráfico (a) pode-se ver que existe uma tendência de queda da inclinação com alguns pontos fora dessa tendência, sendo esses pontos o $\text{distcc}=8$ (quarto ponto do gráfico) e $\text{distcc}=9$ (sétimo ponto do gráfico). Isso ocorre por conta da geometria dos grãos, que afeta as distâncias mínimas e distâncias de centro a centro em cada um dos casos. Por exemplo, ao consultarmos a Tabela 5 para o caso de $\text{distcc}=8$ temos uma distância mínima de 2 nm e o ponto imediatamente anterior a ele é o $\text{distcc}=7,62$, porém com distância mínima de 2,5 nm. Como já apresentado, a distância mínima entre os grãos influencia fortemente na probabilidade de transmissão e esta, por sua vez, influencia fortemente na corrente, portanto mesmo com o aumento da distância de centro a centro houve uma diminuição

na distância mínima, fazendo a corrente ser maior para o caso que a distância de centro a centro é maior, provocando esse efeito de aumento na inclinação visto do terceiro ponto para o quarto ponto do gráfico. O mesmo evento ocorre em $distcc=9$, há um aumento na distância de centro a centro, porém há também uma redução da distância mínima, logo, a corrente aumenta, provocando o efeito visto do sexto para o sétimo ponto.

Figura 38 - Inclinações em A/V dos grãos hexagonais em função da distância de centro a centro e distância mínima dos grãos



Fonte: Autor

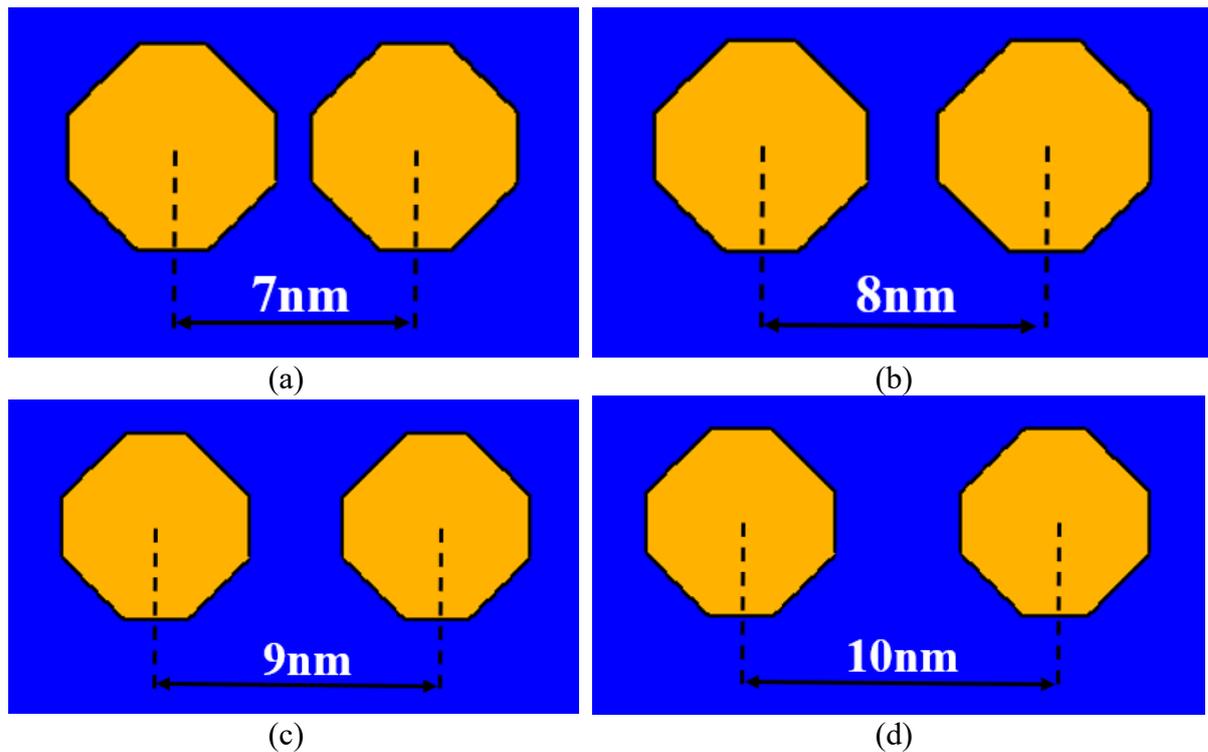
Legenda: O gráfico (a) contempla a inclinação em A/V de cada simulação dos grãos hexagonais em função da distância de centro a centro dos grãos. O gráfico (b) contempla a inclinação também em A/V, porém, em função da distância mínima entre os grãos.

No gráfico (b) pode-se ver uma tendência de queda da inclinação do dispositivo de grãos hexagonais com o aumento da distância mínima e sem nenhum ponto sobreposto, o único caso que isso ocorre dentre as geometrias estudadas neste trabalho.

4.2.3 Grãos octogonais

Continuando o estudo, agora pelos grãos octogonais, podemos ver as estruturas extraídas do *software* TonyPlot com variação horizontal na Figura 39.

Figura 39 - Distâncias de centro a centro com variação horizontal nos grãos octogonais

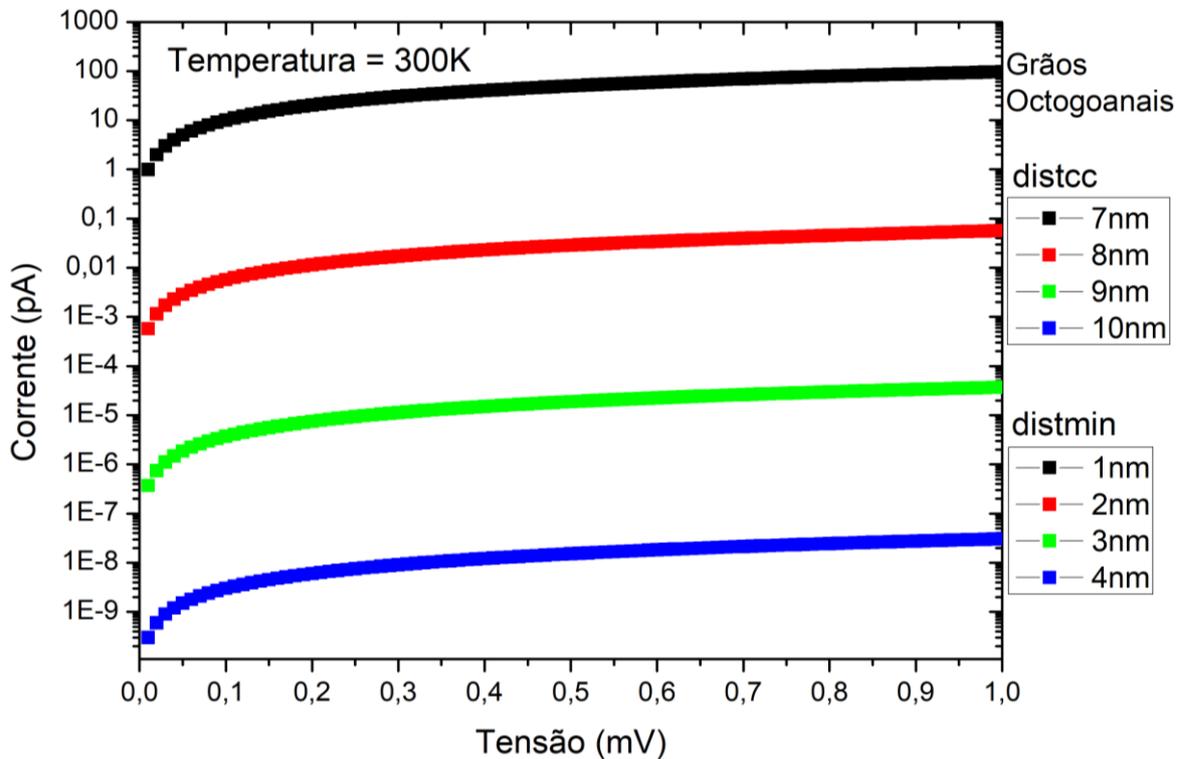


Fonte: Autor.

Legenda: Variação da distância entre grãos de platina para a forma octogonal onde a distância de centro a centro em (a) é de 7 nm, em (b) é de 8 nm, em (c) é de 9 nm e em (d) é de 10 nm.

As correntes de cada uma das simulações podem ser vistas na Figura 40, onde assim como nos casos quadrado e hexagonal pode-se ver uma queda brusca de corrente para cada nanômetro de afastamento entre os grãos metálicos. Como os grãos octogonais possuem uma área intermediária nas laterais dos grãos que são responsáveis pela condução, seu valor de corrente é também intermediário às demais formas de grãos.

Figura 40 - Correntes dos grãos octogonais considerando a variação das distâncias horizontais



Fonte: Autor.

Legenda: O gráfico mostra as correntes elétricas para o caso dos grãos octogonais espaçados apenas horizontalmente com o passo de 1 nanômetro, que é limitado pelo simulador. No gráfico pode-se ver a variação da corrente para as distâncias de centro a centro (legenda superior) ou as distâncias mínimas (legenda inferior).

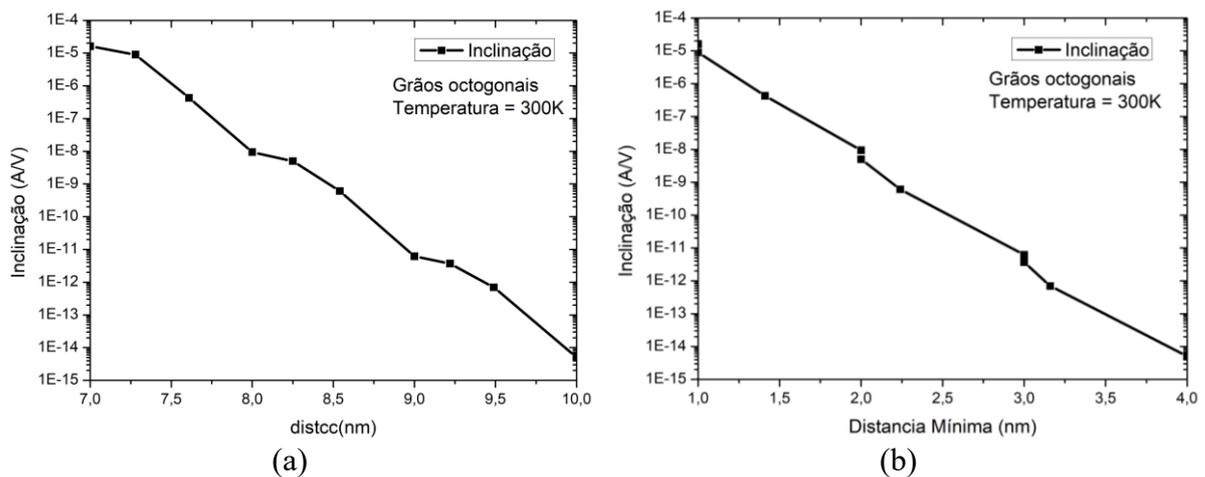
As distâncias mínimas para os grãos octogonais em função do espaçamento e do deslocamento vertical podem ser vistas na Tabela 6 podendo-se compará-las com as distâncias de centro a centro de cada caso.

Após realizar a regressão linear de cada simulação dos grãos octogonais e extrair a inclinação de cada uma das correntes elétricas em função do potencial, foram criados dois gráficos que podem ser vistos na Figura 41. No gráfico (a) pode-se ver uma tendência de queda para todas as distâncias entre os centros dos grãos, o único caso, dentre os explorados neste trabalho, onde isso ocorre e seria o comportamento esperado para grãos perfeitamente circulares. Isso ocorre no caso octogonal pelo fato de que para cada aumento em $distcc$, a distância mínima entre os grãos ou se mantém igual (com redução da área) ou aumenta, como visto na Tabela 6. Como já debatido, o aumento das distâncias mínimas entre os grãos afeta exponencialmente a probabilidade de transmissão e essa por sua vez afeta a corrente elétrica.

Nos casos onde as distâncias mínimas são iguais para os grãos octogonais, como nos pontos 1 e 2 do gráfico, ocorre um deslocamento vertical do segundo grão, reduzindo

fortemente a área que contempla a distância mínima entre os grãos, que antes era toda a lateral do grão octogonal e então passa a contemplar unicamente um ponto de cada grão. Essa redução da área indica uma redução na corrente elétrica, logo mesmo que a distância mínima se mantenha igual, a corrente é afetada com o aumento de distcc. Esse efeito pode ser visto no gráfico (a) do primeiro ponto para o segundo, do quarto para o quinto e do sétimo para o oitavo.

Figura 41 - Inclinações em A/V dos grãos octogonais em função da distância de centro a centro e distância mínima dos grãos



Fonte: Autor

Legenda: O gráfico (a) contempla a inclinação em A/V de cada simulação dos grãos octogonais em função da distância de centro a centro dos grãos. O gráfico (b) contempla a inclinação também em A/V, porém, em função da distância mínima entre os grãos.

No gráfico (b) pode-se ver uma tendência de queda da inclinação do dispositivo de grãos octogonais com o aumento da distância mínima, porém com alguns pontos sobrepostos pela questão já citada de se ter um mesmo valor de distância mínima para dois casos distintos de distância de centro a centro.

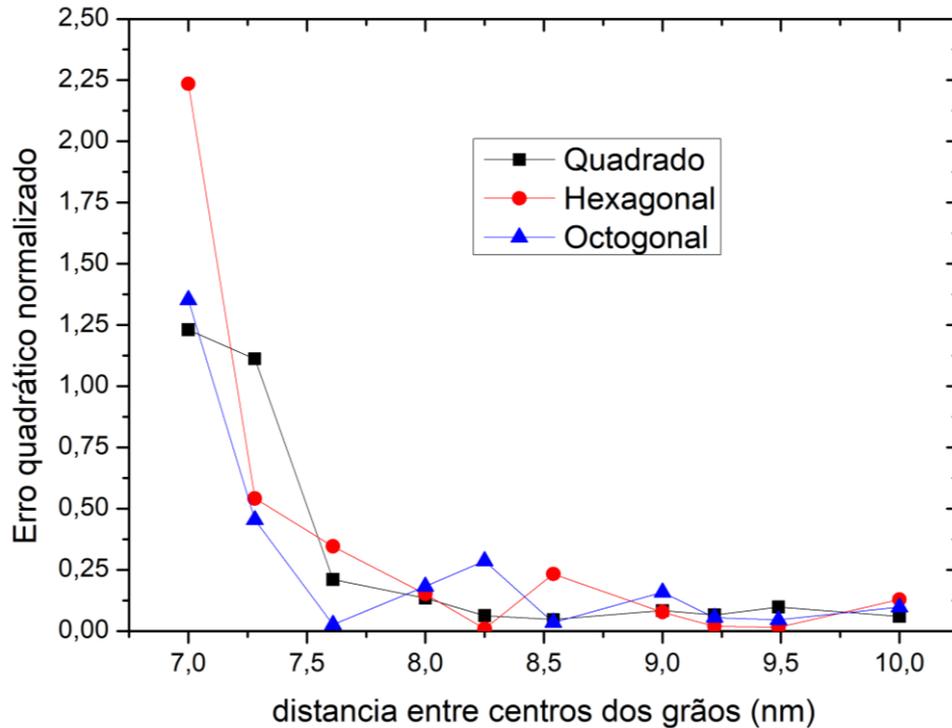
4.2.4 Erro quadrático

Todas as curvas de corrente resultantes das simulações para as diversas geometrias de grãos apresentadas neste trabalho se aproximam de retas, porém ao realizar a regressão linear temos o erro que aquela curva simulada possui em relação a reta da regressão como visto no canto inferior direito da Figura 31.

Para uma comparação coerente entre as formas de grãos, o erro foi normalizado pela corrente elétrica de cada caso. Porém, como o erro pode ser positivo ou negativo, para somar

todos os erros normalizados de uma mesma corrente, cada valor foi elevado ao quadrado e então somado, resultando no gráfico visto na Figura 42.

Figura 42 - Desvio quadrático normalizado da regressão linear para todos os casos de distância de centro a centro para as três geometrias de grãos



Fonte: Autor.

Legenda: Desvio quadrático normalizado da regressão linear para todos os casos de distância de centro a centro dos grãos e para as três geometrias de grãos.

Pode-se ver pelo gráfico do erro que para pequenas distâncias entre os centros dos grãos o erro é maior, conforme a camada de óxido aumenta, os erros quadráticos normalizados diminuem.

4.3 RESISTIVIDADE

O meio isolante no qual os grãos metálicos estão inseridos não é um isolante perfeito, permitindo uma condução clássica que segue a primeira lei de Ohm, de acordo a equação 10.

$$U = R * I \quad (10)$$

Onde R é a resistência que o meio oferece a passagem de corrente, I é a corrente elétrica que flui no meio e U é a diferença de potencial aplicada.

O dispositivo proposto neste trabalho terá, portanto, duas correntes concomitantes, uma delas pelo mecanismo de tunelamento entre os grãos e a outra pelo mecanismo clássico de condução. Para o correto funcionamento do dispositivo, a corrente proveniente do mecanismo quântico deve sobressair em relação a do mecanismo clássico, para tal, deve-se saber a ordem de grandeza da corrente clássica. A resistência pode ser calculada pela segunda lei de Ohm, de acordo com a equação 11.

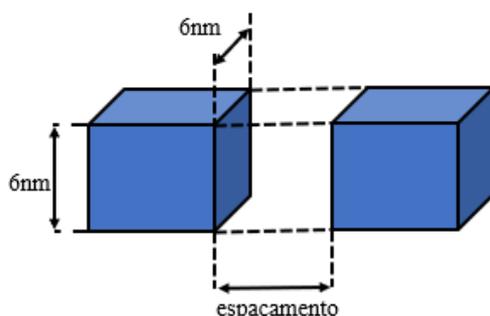
$$R = \frac{\rho \cdot \text{espaçamento}}{A} \quad (11)$$

Onde ρ é a resistividade do meio, A é a área e “espaçamento” é o comprimento do meio com a resistividade homogênea. Combinando as equações 10 e 11 temos a equação 12.

$$I = \frac{UA}{\rho \cdot \text{espaçamento}} \quad (12)$$

A diferença de potencial para a análise é a tensão máxima aplicada no dispositivo, sendo essa de 1 mV. A resistividade do carbono amorfo com baixo teor de hidrogênio é de $10^3 \Omega m$ de acordo com (FEDOROV *et al.*, 2014), que após a conversão para nanômetros equivale a $10^{12} \Omega nm$. Por fim, para o cálculo da área, será considerado o pior caso, ou seja, o caso onde há maior área (resultando na maior corrente), vale ressaltar que a maior corrente de condução clássica é fator limitante para o dispositivo. Para tal, utiliza-se os grãos cúbicos, pois possuem maior área com a mesma distância, e podem ser vistos na Figura 43.

Figura 43 - Grãos cúbicos espaçados horizontalmente



Fonte: Autor.

Pode-se aferir a área da face do grão cúbico que é de $36nm^2$. Portanto a equação 12 pode ser reescrita na forma da equação 13

$$I = \frac{1 * 10^{-3} * 36}{10^{12} * \text{espaçamento}} = \frac{36 * 10^{-15}}{\text{espaçamento}} \quad (13)$$

Onde o espaçamento deve ser inserido em nanômetros. Para as quatro distâncias puramente horizontais estudadas neste trabalho, pode-se gerar a Tabela 7 onde vemos a variação da corrente pelo espaçamento.

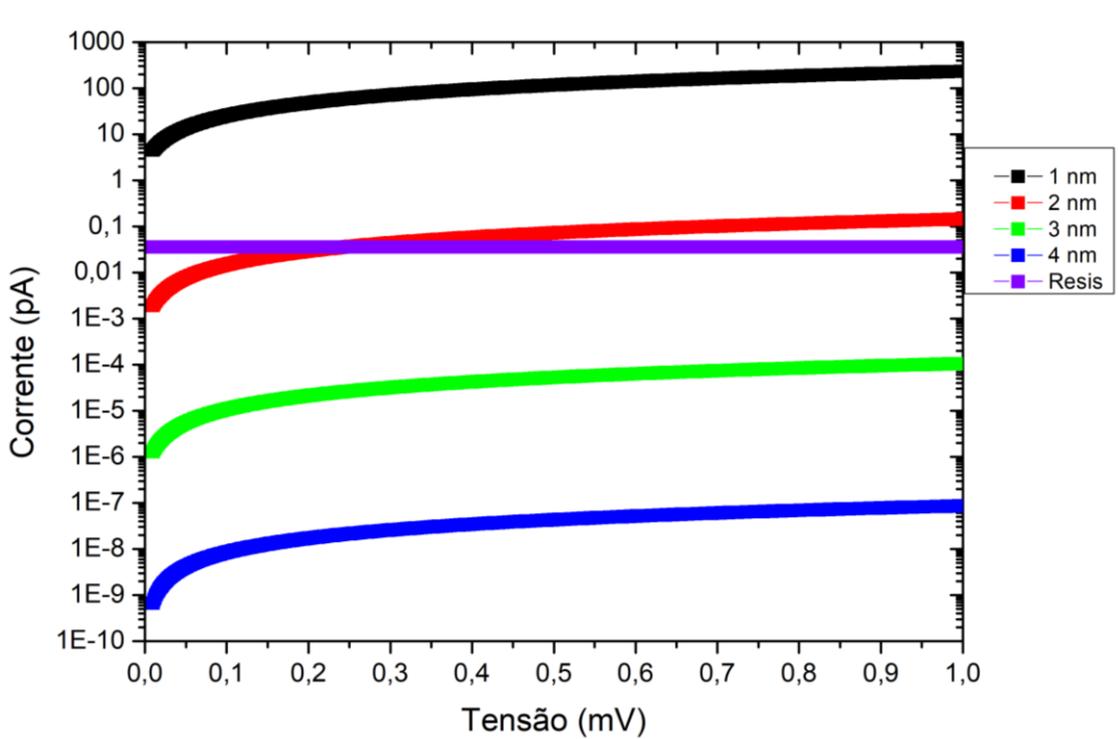
Tabela 7 - Variação da corrente resistiva em função do espaçamento

espaçamento	1nm	2nm	3nm	4nm
Corrente (fA)	36	18	12	9

Fonte: Autor.

Nota-se que a corrente proveniente do mecanismo clássico de condução varia de forma linear com o espaçamento dos grãos, diferente da corrente proveniente do mecanismo quântico, que varia de forma exponencial. Assumindo o caso mais crítico da corrente do caso clássico, temos que a intensidade de 36 fA. Se compararmos essa corrente com as anteriormente vistas, porém para o caso quântico dos grãos quadrados teremos o gráfico da Figura 44.

Figura 44 - Gráfico comparativo das correntes provenientes do mecanismo de tunelamento com a corrente do mecanismo de condução clássica



Fonte: Autor.

Podemos ver que o caso onde os grãos são afastados de 1 nanômetro (linha preta) possui uma corrente proveniente do mecanismo quântico de condução muito maior do que a corrente proveniente do mecanismo clássico, ou seja, a corrente final (que depende dos dois eventos) é controlada quase que inteiramente pelo mecanismo quântico, permitindo o dispositivo operar corretamente.

No caso em que comparamos o afastamento de 2 nanômetros (linha vermelha) com a corrente proveniente do mecanismo clássico, vemos que para a tensão de 1mV (diferença de potencial analisada) a corrente quântica é ligeiramente maior (quatro vezes), ou seja, há uma influência bastante grande da corrente de condução clássica na corrente total, não permitindo que o dispositivo opere corretamente.

Já para os casos de afastamento dos grãos de 3 e 4 nanômetros (linhas verde e azul respectivamente), ambas as correntes de tunelamento são bastante inferiores a corrente proveniente do mecanismo clássico, ou seja, a corrente final é controlada quase que inteiramente pelo mecanismo clássico, não permitindo o dispositivo operar corretamente.

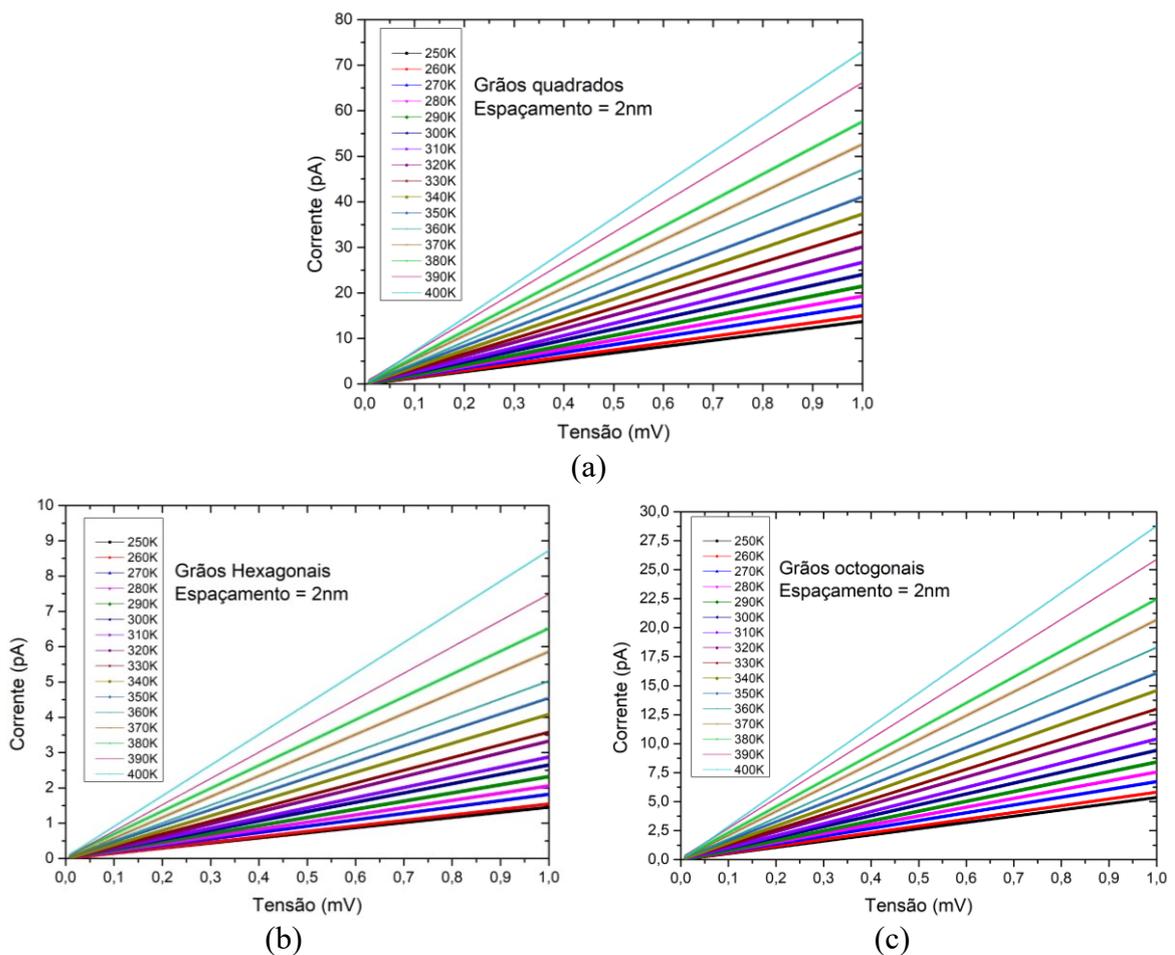
Portanto, para o dispositivo proposto operar corretamente, dadas as limitações, é necessário que o mesmo seja fabricado com distância entre grãos de 1 nanômetro. Vale ressaltar

que a análise feita para a corrente proveniente do mecanismo de resistividade é matemática, não sendo simulada, pois o modelo quântico utilizado opera corretamente apenas em casos onde há separação dos eletrodos por meio de óxido. Caso a simulação contenha corrente proveniente do mecanismo de resistividade, a condução por mecanismo quântico é anulada.

4.4 TEMPERATURA

Para cada geometria dos grãos, foram simulados dispositivos com temperaturas distintas para uma análise da influência da mesma no comportamento da corrente e também do erro quadrático. Temos como exemplo da influência da temperatura no nível de corrente e na inclinação da mesma para todas as formas de grão a Figura 45.

Figura 45 - Correntes dos grãos para múltiplas temperaturas



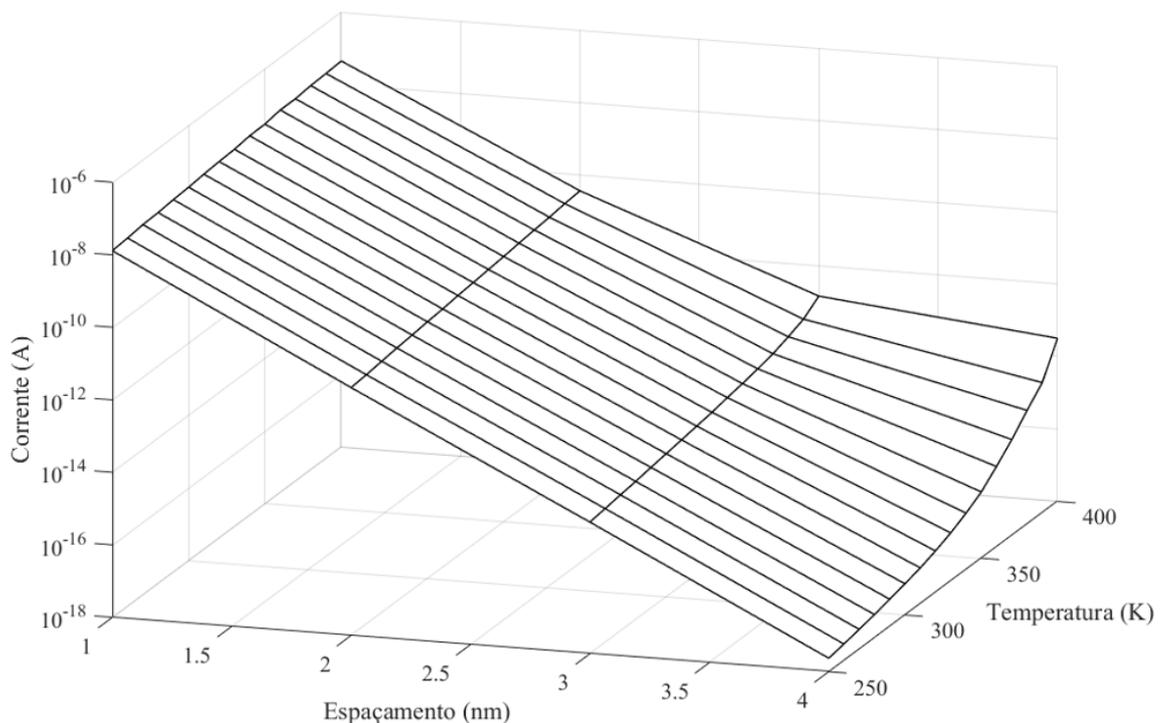
Fonte: Autor.

Legenda: Pode-se ver as correntes simuladas para todas as formas de grãos com espaçamento de 2nm com temperaturas variando de 250K a 400K, onde o gráfico (a) é para a geometria quadrado, o gráfico (b) é para a geometria hexagonal e o gráfico (c) é para a geometria octogonal.

Vemos que, para todos os casos, o nível de corrente aumenta com a elevação da temperatura. Deve-se lembrar também que, para todos os casos, o simulador considera o tunelamento elástico. Também é possível notar, assim como no estudo feito dos grãos, o grão quadrado é o que possui maior intensidade de corrente, o hexagonal é o grão com menor intensidade de corrente e o grão octogonal é o que possui intensidade de corrente intermediária.

De forma a analisarmos a influência da temperatura na corrente elétrica para as múltiplas possibilidades das distâncias dos grãos, gerou-se o gráfico 3D da Figura 46. Esse gráfico contém os eixos de temperatura, espaçamento e corrente elétrica média resultante para o caso dos grãos quadrados.

Figura 46 - Gráfico tridimensional da corrente em função do espaçamento e da temperatura



Fonte: Autor.

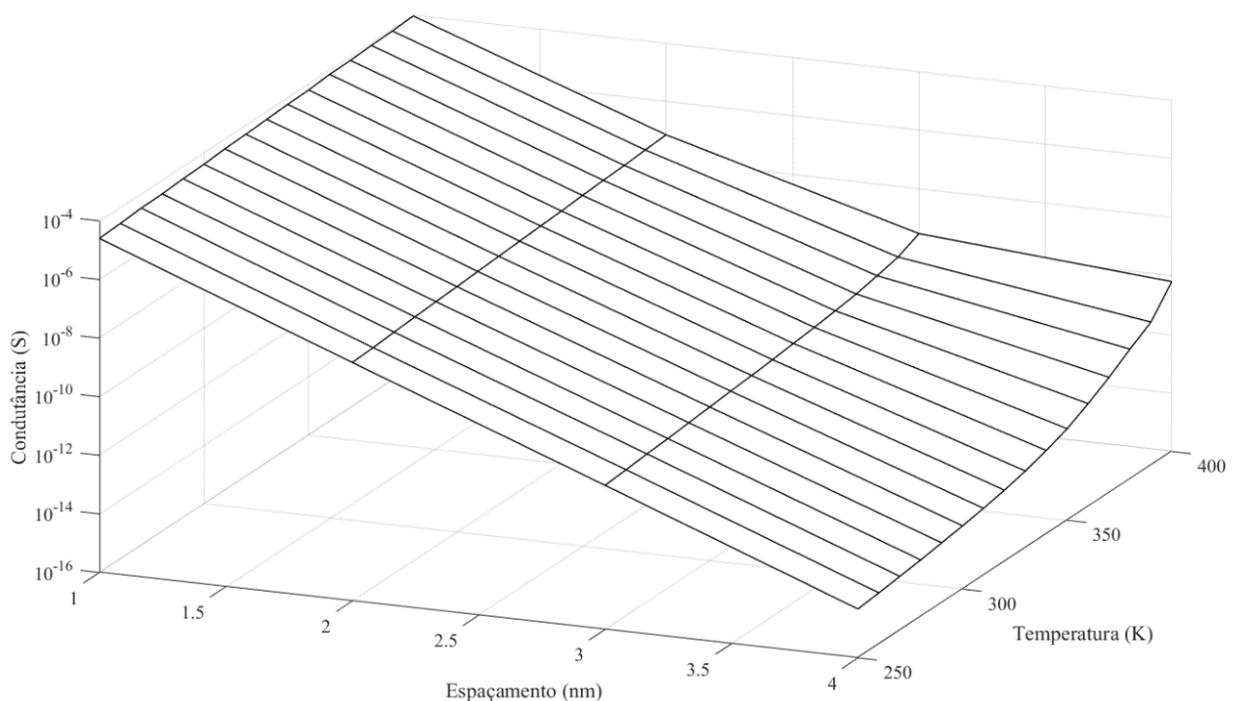
Legenda: O gráfico mostra a influência da temperatura e do espaçamento na corrente elétrica média para grãos quadrados. Os eixos são: Corrente, que está em logarítmico e Espaçamento e Temperatura, ambos lineares.

Pode-se notar que a corrente varia de forma exponencial com o espaçamento para temperaturas mais baixas, vale lembrar que o eixo vertical (da corrente elétrica) está em logarítmico. Porém, conforme a temperatura da simulação é elevada (eixo de profundidade), vemos cada vez menos o efeito da exponencial conforme avançamos no espaçamento. Na

temperatura de 250 K, vemos que há uma linha decrescente praticamente constante na corrente elétrica (indicando uma queda exponencial da mesma) ao logo do aumento do espaçamento. Essa linearidade (no gráfico logarítmico) mingua conforme avançamos no eixo da temperatura, para o caso de 400K, pode-se ver claramente que não há uma única linha de corrente elétrica ao longo do eixo do espaçamento, reduzindo assim o efeito exponencial que outrora o gráfico apresentava.

O mesmo efeito pode ser visto para numa análise semelhante, porém com a condutância do dispositivo, na Figura 47 pode-se ver um gráfico 3D da condutância em função do espaçamento e da temperatura. A condutância foi extraída pela inclinação da regressão linear de cada simulação.

Figura 47 - Gráfico tridimensional da condutância em função do espaçamento e da temperatura



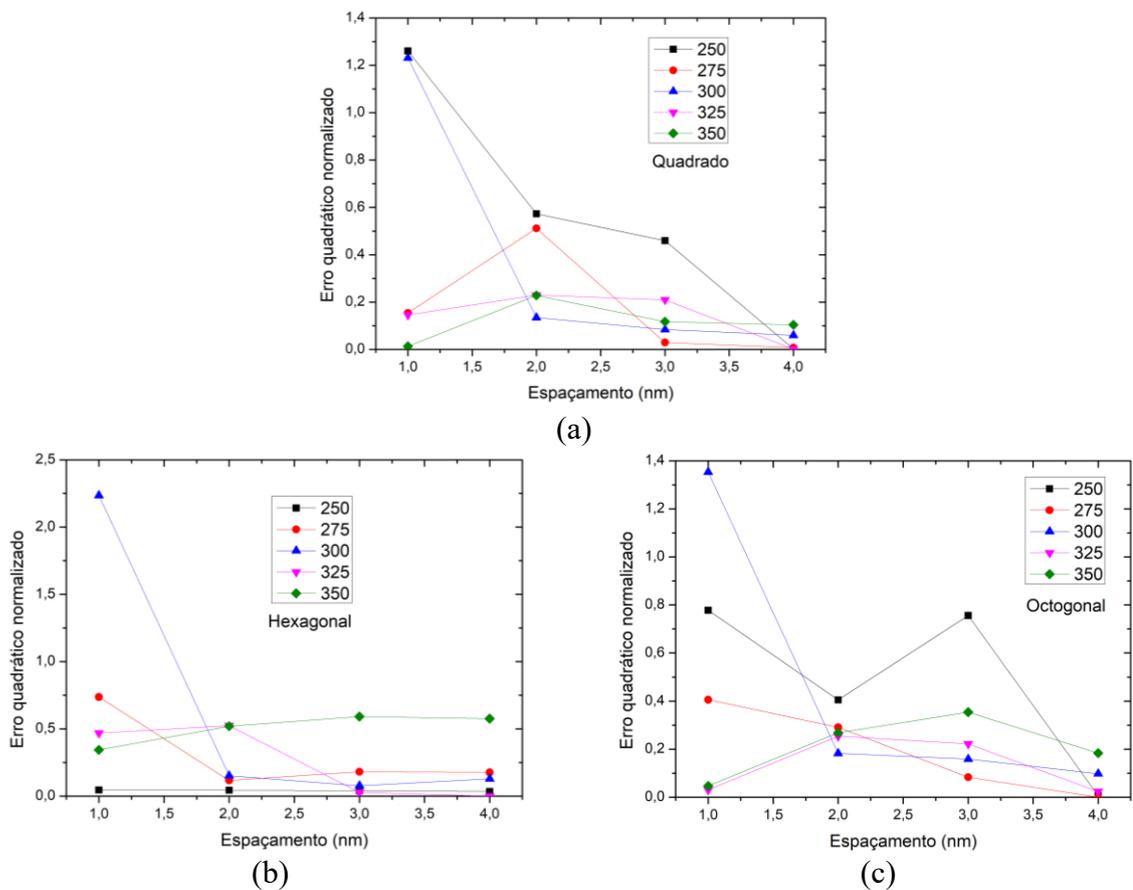
Fonte: Autor

Legenda: O gráfico mostra a influência da temperatura e do espaçamento na condutância para grãos quadrados. Os eixos são: Condutância, que está em logarítmico e Espaçamento e Temperatura, ambos lineares.

A forma do gráfico da condutância segue a da corrente elétrica, onde para baixas temperaturas nota-se um comportamento exponencial da condutância conforme aumenta-se o espaçamento. Porém, ao aumentarmos a temperatura, a condutância também perde a característica de queda exponencial, tornando-se notória essa perda em 400K.

A Figura 48 exibe os erros quadráticos normalizados de cada geometria de grão para múltiplas temperaturas em função do espaçamento (deslocamento horizontal) dos grãos, isso nos fornece a confiabilidade que as simulações oferecem quanto a linearidade.

Figura 48 - Erros quadráticos normalizados para várias temperaturas



Fonte: Autor.

Legenda: Erros quadráticos para temperaturas variando de 250 K à 350 K para todas as geometrias dos grãos. Sendo que o gráfico (a) corresponde ao grão quadrado, o gráfico (b) corresponde ao grão hexagonal e o gráfico (c) corresponde ao grão octogonal.

Pode-se ver que de forma geral o erro quadrático diminui com o aumento do espaçamento, portanto aumentando a espessura do óxido, aumenta-se também a confiabilidade da simulação, mesma conclusão obtida no estudo feito sobre o espaçamento sem mudança de temperatura.

5 PROPOSTA DE APLICAÇÃO

Como possível aplicação para o dispositivo proposto nesse projeto, sugerimos um sensor de deformação mecânica. Para objeto de estudo, temos o veículo do projeto “Fórmula fei elétrico”, desenvolvido no Centro Universitário da FEI, que concedeu os dados coletados experimentalmente para essa proposta de aplicação. O veículo pode ser visto na Figura 49.

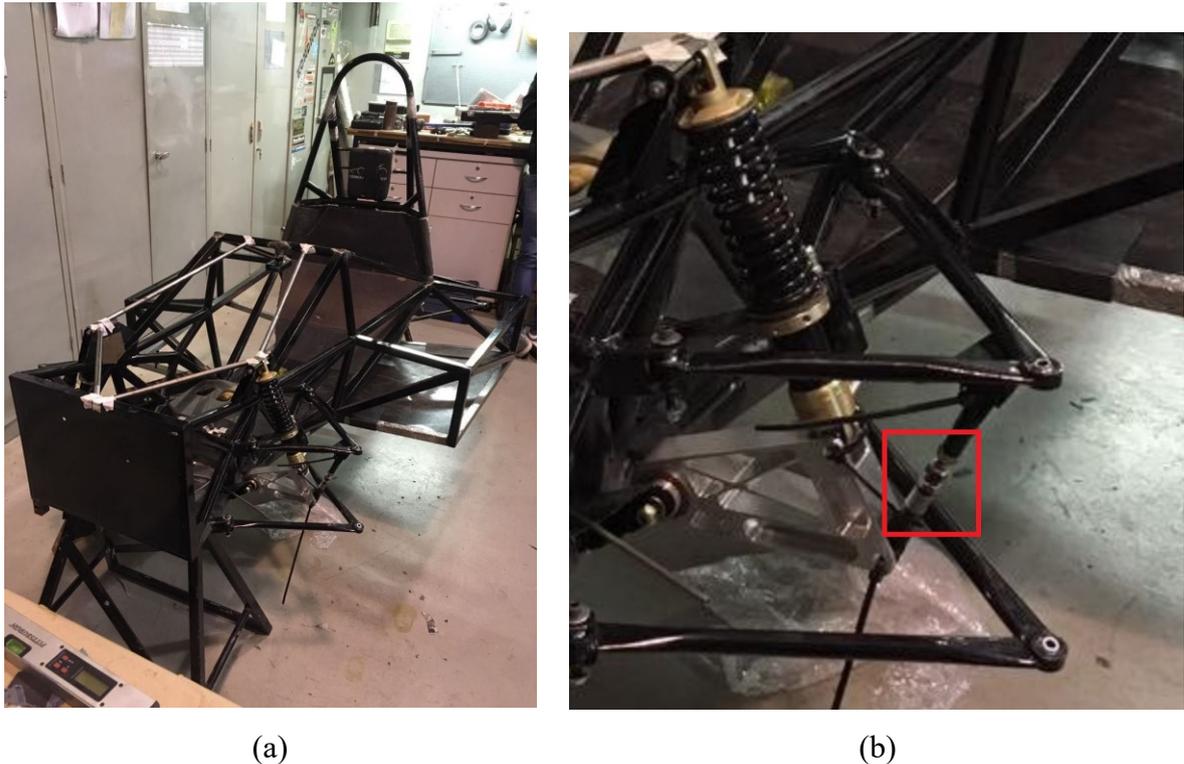
Figura 49 - Veículo desenvolvido pelo projeto "Fórmula fei elétrico"



Fonte: Autor.

A estrutura do veículo pode ser vista na Figura 50 (a), na figura (b) destaca a posição do sensor que coletou os dados de força aplicada em direção uniaxial no veículo que será o mesmo local onde propomos a aplicação do dispositivo desenvolvido nesse trabalho.

Figura 50 - Estrutura do veículo do projeto "Fórmula fei elétrico" com ênfase no local proposto para a proposta de aplicação



Fonte: Autor.

O sensor indicou uma variação de força de -400 N a 400 N (já descontando o peso do próprio veículo).

Uma maneira de correlacionar a variação do comprimento do dispositivo ao aplicar uma força sobre o mesmo (seja reduzindo o tamanho por compressão ou aumentando o tamanho por tração) é utilizando o módulo de Young, e sabe-se que o mesmo segue a equação 14.

$$E_{Young} = \frac{\sigma}{\varepsilon} \quad (14)$$

Onde "E" é o módulo de Young (em unidade de pressão), σ é o estresse uniaxial (também em unidade de pressão) e ε é a deformação proporcional, que é adimensional e pode ser encontrada pela razão da variação da distância pela distância inicial do dispositivo como visto na equação 15.

$$\varepsilon = \frac{\Delta L}{L} \quad (15)$$

Onde L é o comprimento inicial do dispositivo e ΔL é a variação do comprimento experimentado pelo dispositivo após a deformação mecânica.

Sabemos também que o estresse uniaxial é calculado pela razão da força aplicada pela área da seção transversal, isolando a deformação proporcional na equação 14 temos a equação 16.

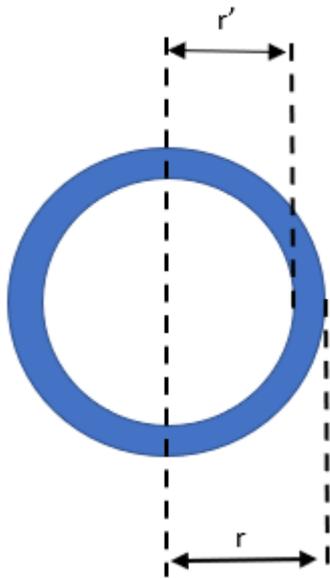
$$\varepsilon = \frac{\left(\frac{F}{A}\right)}{E} = \frac{F}{A * E_{Young}} \quad (16)$$

Combinando as equações 15 e 16 temos que a variação da deformação pode ser encontrada pela equação 17.

$$\Delta L = \frac{L * F}{A * E_{Young}} \quad (17)$$

Para a construção da estrutura vista na Figura 50, foram utilizados cilindros vazados de meia polegada. A área da seção transversal dos cilindros vazados pode ser vista em azul na Figura 51.

Figura 51 - Área preenchida de material dos cilindros vazados utilizados na construção do veículo do projeto "Fórmula fei elétrico"



Fonte: Autor.

Onde r é o raio do cilindro, r' é o raio da região interior vazada e a área destacada em azul é a região sólida, onde há material. A parede do tubo é de 0,8 mm.

Como o tubo é de meia polegada, seu diâmetro é de 12,7 mm, logo, seu raio externo r é dado por:

$$r' = r - 0,8 * 10^{-3} = 5,55 * 10^{-3} \text{ m}$$

Logo, para calcular a área sólida, basta calcularmos a área total do cilindro e subtrairmos da área oca, portanto temos:

$$A = A_{total} - A_{oca} = \pi[(6,35 * 10^{-3})^2 - (5,55 * 10^{-3})^2] = 2,991 * 10^{-5} \text{ m}^2$$

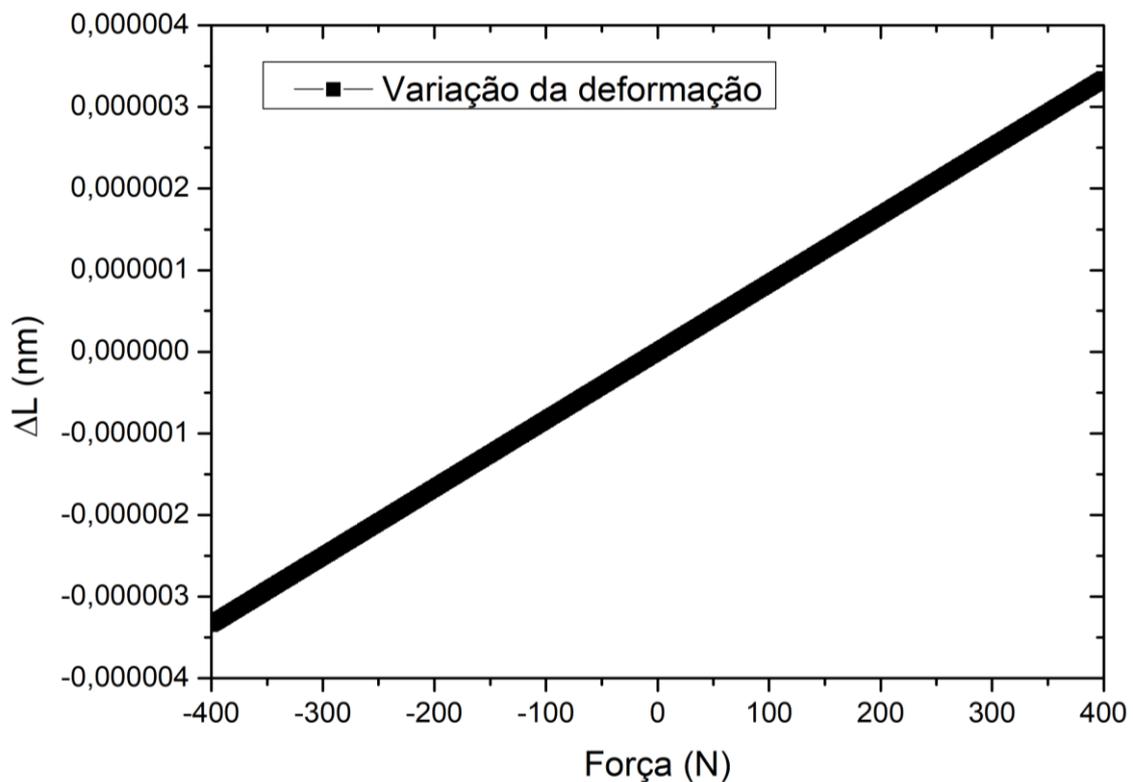
O objeto de estudo é feito de aço-carbono 1024, que possui módulo de Young de 200 GPa como visto em (BONIFAZ, 2018).

Portanto, aplicando os valores supracitados na equação 17 temos a equação 18.

$$\Delta L = \frac{L * F}{5,982 * 10^6} \quad (18)$$

Utilizando os grãos cúbicos com espaçamento de 0,5 nanômetro e a excursão da força experimentada pelo veículo, podemos, por meio da equação 18, encontrar a variação da distância dos grãos, como visto na Figura 52.

Figura 52 - Variação da deformação mecânica em função da força unidirecional aplicada ao cilindro vazado

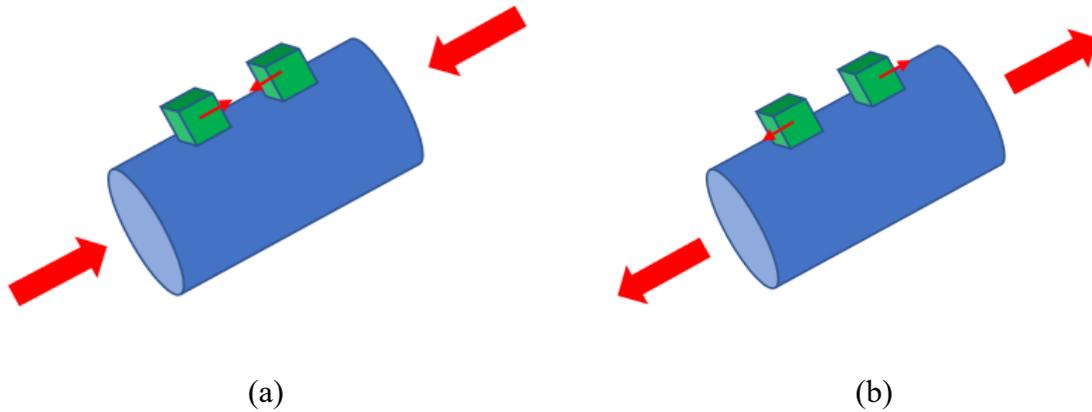


Fonte: Autor.

Conhecendo a variação da distância entre os grãos, é possível encontrar a variação da corrente que o dispositivo irá experimentar, sendo assim, converte-se uma medida de “stress” (que é mecânica) em uma medida de corrente (que é elétrica).

Considerando a variação da distância dos grãos na mesma direção da força aplicada ao tubo, pode-se considerar a aproximação e o afastamento apenas em uma direção como esboçado na Figura 53. O tubo é representado pelo cilindro azul e os grãos pelos cubos verdes, vale lembrar que a figura está fora de escala, os grãos são nanométricos. As setas vermelhas externas ao tubo representam a força aplicada ao mesmo, onde a figura (a) representa compressão e a figura (b) tração. As setas vermelhas nos cubos representam a movimentação dos grãos que se aproximam na tração e se afastam na compressão.

Figura 53 - Esboço de aplicação de força unidirecional ocasionando a variação da distância dos grãos

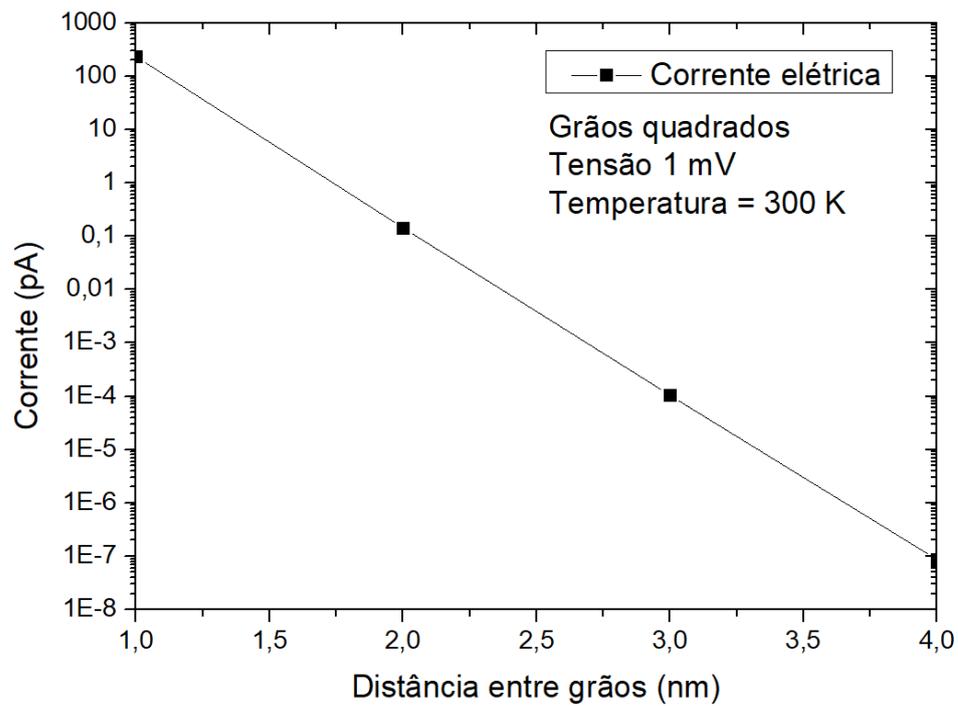


Fonte: Autor.

As simulações realizadas, como já abordado, possuem limitação de 1 nanômetro de afastamento dos grãos, isso nos impede de conhecer as correntes para cada variação do gráfico da Figura 52. Porém, com os dados de simulação da corrente em função das distâncias para uma dada tensão é possível realizar uma regressão exponencial da corrente pela distância e então descobrir a função que rege a mesma. Desta forma pode-se descobrir qual a variação da corrente elétrica pela variação dos grãos para valores intermediários aos passos permitidos pelo simulador.

Portanto, plotando o gráfico de corrente pelas distâncias entre grãos para uma dada tensão e temperatura, temos a Figura 54.

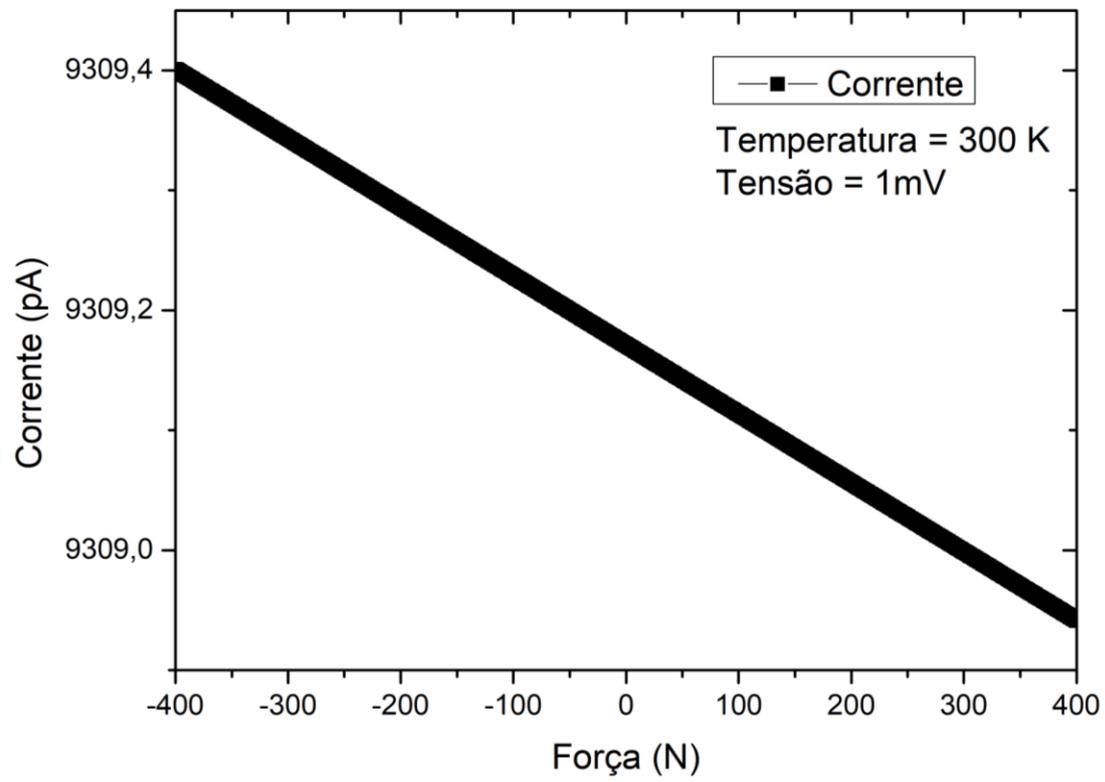
Figura 54 - Variação da corrente elétrica em função da distância entre os grãos quadrados e potencial fixo de 1mV



Fonte: Autor.

Aplicando a regressão exponencial e então inserindo os dados de deformação encontrados na Figura 52 encontramos a Figura 55 que é o gráfico da corrente em função da força aplicada no objeto de estudo.

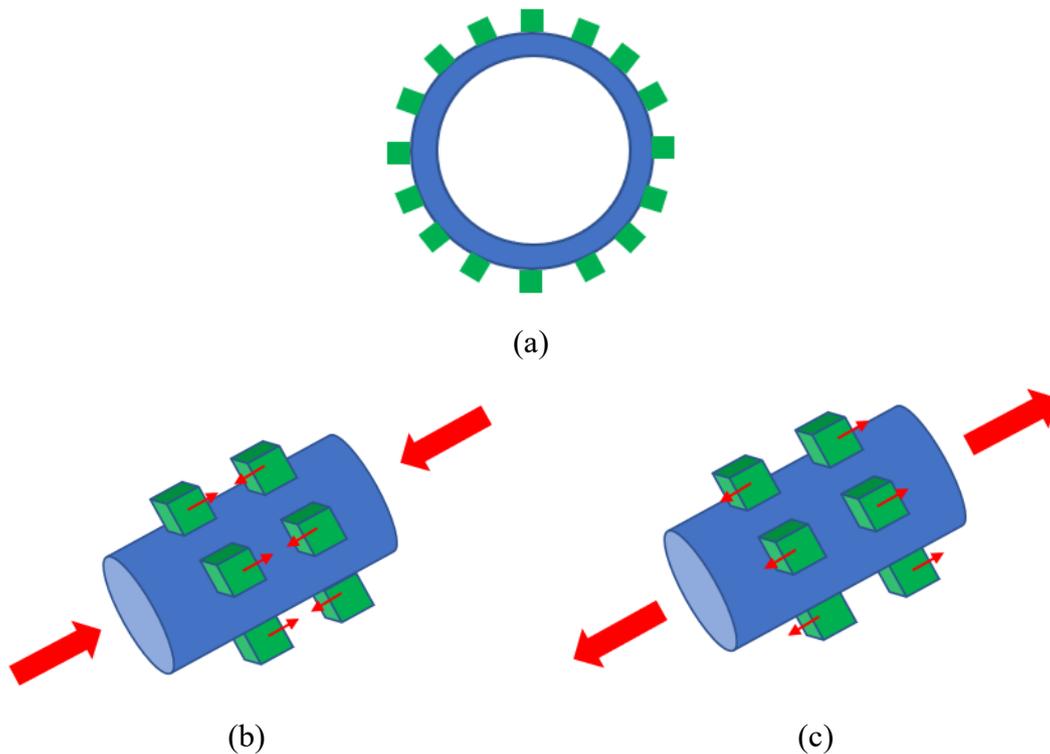
Figura 55 - Corrente elétrica de um par de nanogrãos quando submetidos a variação de força que o objeto de estudo experimentou



Fonte: Autor.

Lembrando que esse é o resultado para apenas um par de nanogrãos, sendo os mesmos de dimensões nanométricas. Para amplificar essa corrente, seria possível colocar milhares pares de nanogrãos operando em paralelo circundando o cilindro, a proposta segue a Figura 56 (a), que é a vista frontal do tubo metálico vazado e os grãos são os quadrados em verde (ressaltando que a imagem não está em escala). Nas figuras (b) e (c) os nanogrãos podem ser vistos como cubos verdes.

Figura 56 - Proposta para amplificar a corrente utilizando diversos pares de grãos nanométricos circundando o cilindro



Fonte: Autor.

As setas vermelhas externas ao tubo representam a força aplicada ao mesmo, onde a figura (b) representa compressão e a figura (c) tração. As setas vermelhas nos cubos representam a movimentação dos grãos que se aproximam na tração e se afastam na compressão.

Lembrando que o raio externo do tubo é de 6,35 mm, portanto o comprimento da circunferência externa (L_{ext}) é de:

$$L_{ext} = 2\pi r = 39,90 * 10^{-3} m$$

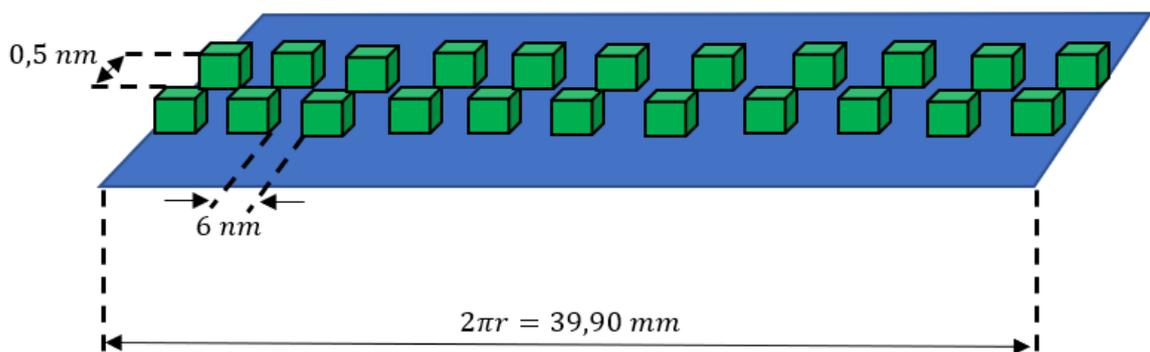
Como os grãos possuem 6 nm de comprimento, temos o seguinte número de espaços que caberiam grãos:

$$N_{esp} = \frac{39,90 * 10^{-3}}{6 * 10^{-9}} = 6650000$$

Porém, permitindo um espaçamento entre grãos (ao longo da circunferência do tubo) de 6 nanômetros (mesmo tamanho do grão), teremos metade dos espaços preenchidos por grãos e metade dos espaços vazios, portanto teremos 3325000 pares de grãos.

Ou seja, teremos cada grão afastado de seu par em 0,5 nm e cada par de grão afastado do próximo par em 6nm, a proposta pode ser vista na Figura 57, onde o plano na verdade é o cilindro aberto com comprimento de $2\pi r$. Vale ressaltar também que a figura simplifica a quantidade de grãos, já que é inviável desenhar a quantidade de pares de grãos proposta.

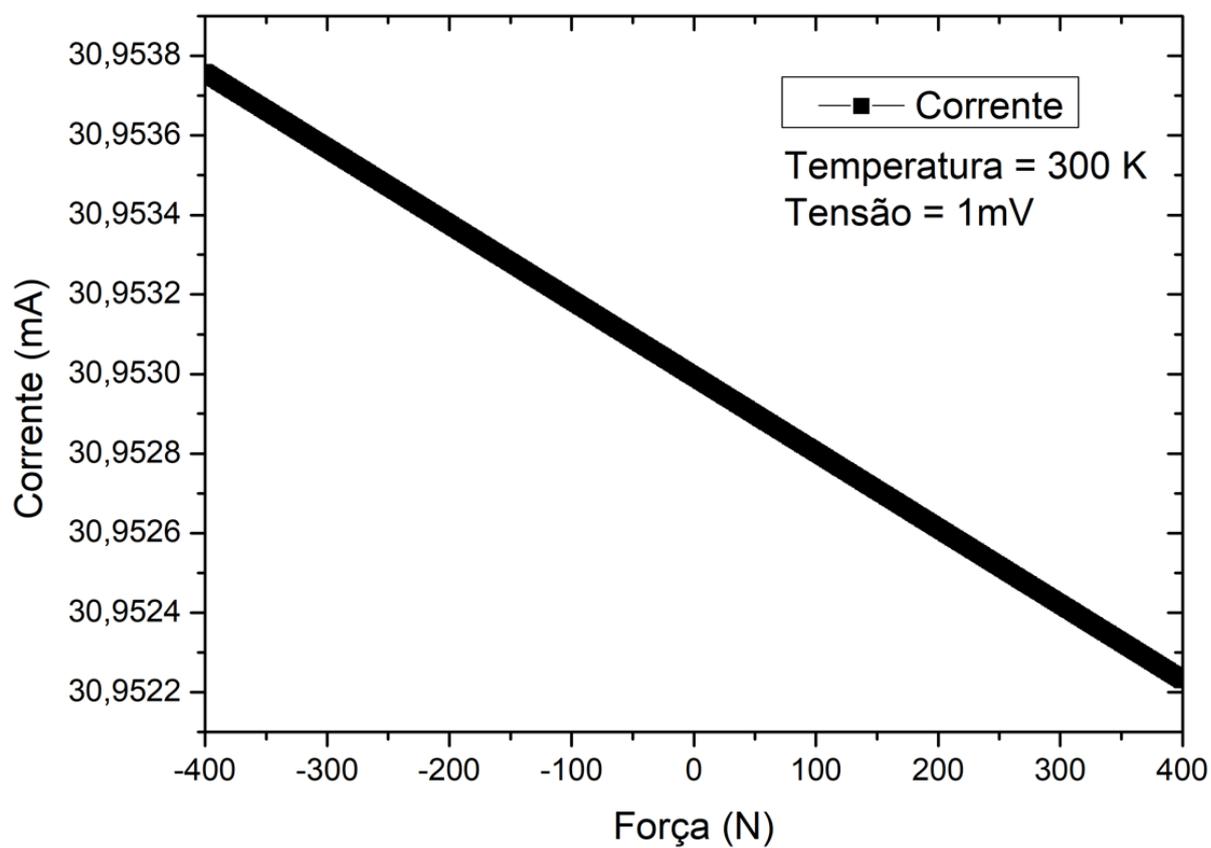
Figura 57 - Esboço do posicionamento e afastamento dos grãos na superfície externa do cilindro



Fonte: Autor.

Como a quantidade de pares de grão foi multiplicada por 3325000, a corrente também será multiplicada por 3325000 vezes, resultando no gráfico da Figura 58.

Figura 58 - Corrente elétrica de 3325000 pares de nanogrãos quando submetidos a variação de força que o objeto de estudo experimentou



Fonte: Autor

6 CONCLUSÕES

Neste trabalho, foi proposto simular dispositivos fabricados por FEBID em um simulador numérico bidimensional para formas de grão quadradas, hexagonais e octogonais estudando a influência das distâncias entre os centros de grãos e também as distâncias mínimas entre grãos. Também foi abordada a temperatura como variável e inserida no estudo das formas de grãos.

Nos formatos dos grãos, observou-se que o grão quadrado, por possuir maior área com a distância mínima, possui uma maior corrente de tunelamento, possuindo também uma relação corrente por tensão maior. Em seguida temos o grão octogonal, que possui uma área de distância mínima intermediária entre os três formatos de grão, possuindo assim correntes de intensidade menor do que o caso quadrado, porém maior que o caso hexagonal. O mesmo vale para a relação corrente por tensão. Por fim, os grãos hexagonais possuem uma intensidade de corrente e relação corrente tensão menores, pois sua área de distância mínima é extremamente reduzida, não favorecendo assim a condução.

Para as simulações numéricas, das geometrias dos grãos estudadas, a que mais se aproxima do formato circular é o formato octogonal, pois a inclinação da corrente elétrica pela tensão varia para cada deslocamento vertical e horizontal de forma semelhante a esperada para o caso circular.

Pode-se conferir que o erro quadrático é maior para simulações com espessuras de óxido de 1 nanômetro. Conforme a espessura de óxido aumenta, o erro quadrático tende a diminuir, nos garantindo uma maior confiabilidade na simulação. O mesmo ocorreu de forma geral quando variamos a temperatura para as múltiplas formas de grão, reafirmando o efeito observado.

Pode-se concluir também que como há uma condução clássica no dispositivo, deve-se fazer uma análise da ordem de grandeza da corrente proveniente desse mecanismo de condução para garantir que a corrente do dispositivo seja prioritariamente regida pelo tunelamento. Como visto, o para o caso dos grãos quadrados, apenas os grãos afastados de 1 nanômetro possuem corrente alta o suficiente para garantir o funcionamento em modo quântico.

Com a variação da temperatura pode-se observar o aumento na corrente de tunelamento para todos os casos de grão, bem como o aumento da relação corrente por tensão. Porém, o comportamento que inicialmente é visto com uma resposta exponencial para temperaturas mais baixas, passa a não responder de maneira exponencial para temperaturas mais altas.

Por fim, foi proposta a aplicação do dispositivo como um sensor de deformação mecânica no veículo “Fórmula fei elétrico” utilizando não apenas um par de grãos, mas alguns milhares deles para aumentar a corrente elétrica, um benefício que surge ao utilizarmos dispositivos de dimensões nanométricas.

Os trabalhos futuros podem aprofundar a relação do tunelamento com a variação da temperatura do dispositivo, desenvolvendo assim um sensor de temperatura. Uma outra forma de prosseguir com a pesquisa é implementar a equação de tunelamento do MIMTUN encontrada no ATLAS no simulador Sentauros, que possui uma grade adaptável e também permite a inserção de esferas no lugar dos grãos, tornando a simulação mais precisa. Pode-se implementar um número maior de grãos nas simulações e estudar o comportamento da corrente elétrica para um dispositivo com um número maior de grãos interagindo.

A simulação de fabricação por meio de Monte-Carlo é também uma opção interessante, visto que a fabricação dos dispositivos ocorre por meio da interação física dos elétrons do feixe com as moléculas precursoras e com o substrato. Pode-se também fabricar dispositivos na Universidade Estadual de Campinas e validar os dados de simulação com os dados experimentais, tanto para as simulações voltadas para a fabricação quanto as simulações voltadas ao desempenho elétrico.

PUBLICAÇÕES GERADAS

Electrical Conduction Simulation of Nanogranular Systems Using Conventional TCAD Semiconductor Numerical Simulator Tool; G. J. Montesani; M. V. P. Santos; L. P. B. Lima; A. L Perin; C. F. Pereira; R. T. Buhler; R. C. Giacomini; Workshop on Semiconductors and Micro & Nano Technology, SP, Brasil, 2021. (Apresentação Oral do Trabalho)

REFERÊNCIAS

ATLAS. **Manual do usuário ATLAS**. [S. l.: s. n.], 2018. vol. II.

BAHL, S.; NAGAR, H.; SINGH, I.; SEHGAL, S. Smart materials types, properties and applications: A review. **Materials Today: Proceedings**, vol. 28, no. xxxx, p. 1302–1306, 2020. DOI 10.1016/j.matpr.2020.04.505. Available at: <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.04.505>.

BELOBORODOV, I. S.; LOPATIN, A. V.; VINOKUR, V. M. Universal description of granular metals at low temperatures: Granular Fermi liquid. **Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics**, vol. 70, no. 20, p. 1–5, 2004. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.70.205120>.

BONIFAZ, E. A. Thermo-mechanical analysis in SAE-AISI 1524 carbon steel gas tungsten arc welds. **International Journal of Computational Materials Science and Surface Engineering**, vol. 7, no. 3–4, p. 269–287, 2018. <https://doi.org/10.1504/IJCMSSE.2018.095355>.

BRADBURY, R. **Fahrenheit 451**. [S. l.: s. n.], 2012.

DEVEDIT. *Devedit_Users1*. no. 408, p. 1–141, 2013. Available at: <https://mail.google.com/mail/u/0/%0Apapers3://publication/uuid/D2E392EF-1FAA-4F52-B13D-D3186A995C27>.

DUKIC, M.; WINHOLD, M.; SCHWALB, C. H.; ADAMS, J. D.; STAVROV, V.; HUTH, M.; FANTNER, G. E. Direct-write nanoscale printing of nanogranular tunnelling strain sensors for sub-micrometre cantilevers. **Nature Communications**, vol. 7, p. 1–7, 2016. <https://doi.org/10.1038/ncomms12487>.

ERBIL, H. H. Tunneling transmission coefficient from the external electric field barrier. vol. 4, no. 3, p. 122–125, 2020. <https://doi.org/10.15406/oajs.2020.04.00159>.

FARAG, S. G. Application of Smart Structural System for Smart Sustainable Cities. 56., Jan. 2019. **2019 4th MEC International Conference on Big Data and Smart City (ICBDSC)**

[...]. [S. l.]: IEEE, Jan. 2019. vol. 56, p. 1–5. DOI 10.1109/ICBDSC.2019.8645582. Available at: <https://ieeexplore.ieee.org/document/8645582/>.

FARSANGI, M. A. A.; COTTONE, F.; SAYYAADI, H.; ZAKERZADEH, M. R.; ORFEI, F.; GAMMAITONI, L. Energy harvesting from structural vibrations of magnetic shape memory alloys. **Applied Physics Letters**, vol. 110, no. 10, 2017. <https://doi.org/10.1063/1.4978258>.

FEDOROV, A. G.; KIM, S.; HENRY, M.; KULKARNI, D.; TSUKRUK, V. V. Focused-electron-beam-induced processing (FEBIP) for emerging applications in carbon nanoelectronics. **Applied Physics A: Materials Science and Processing**, vol. 117, no. 4, p. 1659–1674, 2014. <https://doi.org/10.1007/s00339-014-8628-4>.

FENNER, R.; ZDANKIEWICZ, E. Micromachined Water Vapor Sensors: A Review of Sensing Technologies. **IEEE Sensors Journal**, vol. 1, no. 4, p. 309–317, 2001. <https://doi.org/10.1109/7361.983470>.

FREITAS, P. P.; FERREIRA, R.; CARDOSO, S.; CARDOSO, F. Magnetoresistive sensors. **Journal of Physics Condensed Matter**, vol. 19, no. 16, 2007. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/19/16/165221>.

GABUREAC, M.; BERNAU, L.; UTKE, I.; BOERO, G. Granular Co–C nano-Hall sensors by focused-beam-induced deposition. **Nanotechnology**, vol. 21, no. 11, p. 115503, 19 Mar. 2010. DOI 10.1088/0957-4484/21/11/115503. Available at: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0957-4484/21/11/115503>.

GUPTA, P.; TIRTH, V.; SRIVASTAVA, R. K. Structural applications of smart materials in construction engineering using robotics. **1st International Conference on Industrial and Information Systems, ICIIS 2006**, no. August, p. 261–267, 2006. <https://doi.org/10.1109/ICIINFS.2006.347160>.

HUTH, M.; PORRATI, F.; DOBROVOLSKIY, O. V. Focused electron beam induced deposition meets materials science. **Microelectronic Engineering**, vol. 185–186, p. 9–28, 2018. DOI 10.1016/j.mee.2017.10.012. Available at: <https://doi.org/10.1016/j.mee.2017.10.012>.

HUTH, Michael; PORRATI, F.; SCHWALB, C.; WINHOLD, M.; SACHSER, R.; DUKIC, M.; ADAMS, J.; FANTNER, G. Focused electron beam induced deposition: A perspective. **Beilstein Journal of Nanotechnology**, vol. 3, no. 1, p. 597–619, 2012. <https://doi.org/10.3762/bjnano.3.70>.

JALIL, M. B. A. Tunneling magnetotransport in nanogranular-in-gap structure. **IEEE Transactions on Magnetics**, vol. 38, no. 5 I, p. 2613–2615, 2002. <https://doi.org/10.1109/TMAG.2002.803202>.

JIMÉNEZ-CADENA, G.; RIU, J.; RIUS, F. X. Gas sensors based on nanostructured materials. **Analyst**, vol. 132, no. 11, p. 1083–1099, 2007. <https://doi.org/10.1039/b704562j>.

KOLB, F. Development of a Humidity Sensor based on Focused Electron Beam Induced PtC Deposition. **Master Thesis**, no. May, p. 71, 2013. .

KOLB, F.; SCHMOLTNER, K.; HUTH, M.; HOHENAU, A.; KRENN, J.; KLUG, A.; LIST, E. J. W.; PLANK, H. Variable tunneling barriers in FEBID based PtC metal-matrix nanocomposites as a transducing element for humidity sensing. **Nanotechnology**, vol. 24, no. 30, 2013. <https://doi.org/10.1088/0957-4484/24/30/305501>.

LAZARUS, N.; BEDAIR, S. S.; LO, C. C.; FEDDER, G. K. CMOS-MEMS capacitive humidity sensor. **Journal of Microelectromechanical Systems**, vol. 19, no. 1, p. 183–191, 2010. <https://doi.org/10.1109/JMEMS.2009.2036584>.

LI, J.; HUANG, H.; MORITA, T. Stepping piezoelectric actuators with large working stroke for nano-positioning systems: A review. **Sensors and Actuators, A: Physical**, vol. 292, p. 39–51, 2019. DOI 10.1016/j.sna.2019.04.006. Available at: <https://doi.org/10.1016/j.sna.2019.04.006>.

LING, S.; SANNY, J.; MOEBS, B. Quantum Tunneling of Particles through Potential Barriers. 2020. Available at: [https://phys.libretexts.org/Bookshelves/University_Physics/Book%3A_University_Physics_\(OpenStax\)/Book%3A_University_Physics_III_-](https://phys.libretexts.org/Bookshelves/University_Physics/Book%3A_University_Physics_(OpenStax)/Book%3A_University_Physics_III_-)

[_Optics_and_Modern_Physics_\(OpenStax\)/07%3A_Quantum_Mechanics/7.07%3A_Quantum_Tunneling_of_Particles_through_Potential_Barrier.](#)

NECIB, B.; GHARBI, A.; LEBIED, A.; SAHLI, M. The smart materials and their applications in the engineering fields. **2015 5th National Symposium on Information Technology: Towards New Smart World, NSITNSW 2015**, 2015. <https://doi.org/10.1109/NSITNSW.2015.7176419>.

NIJHOLT, A.; MINUTO, A. Smart material interfaces: Playful and artistic applications (keynote paper). **2017 IEEE International Conference on Imaging, Vision and Pattern Recognition, icIVPR 2017**, , p. 2–7, 2017. <https://doi.org/10.1109/ICIVPR.2017.7890882>.

NITTA, T.; TERADA, J.; FUKUSHIMA, F. Multifunctional Ceramic Sensors: Humidity-Gas Sensor And Temperature-Humidity Sensor. **IEEE Transactions on Electron Devices**, vol. 29, no. 1, p. 95–101, 1982. <https://doi.org/10.1109/T-ED.1982.20664>.

PUYDINGER, M. **NOVEL DIRECT-WRITE MASKLESS NANOFABRICATION APPROACHES FOR APPLICATIONS IN SPINTRONICS, NANOWIRE-BASED NON-VOLATILE MEMORY AND MAGNETIC STORAGE**. 2017. 263 f. 2017.

RANDOLPH, S. J.; FOWLKES, J. D.; RACK, P. D. Focused, nanoscale electron-beam-induced deposition and etching. **Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences**, vol. 31, no. 3, p. 55–89, 2006. <https://doi.org/10.1080/10408430600930438>.

RIZZELLO, G.; RICCARDI, L.; NASO, D.; TURCHIANO, B.; SEELECKE, S. An overview on innovative mechatronic actuators based on smart materials. **2017 IEEE AFRICON: Science, Technology and Innovation for Africa, AFRICON 2017**, vol. 1, p. 450–455, 2017. <https://doi.org/10.1109/AFRCON.2017.8095524>.

ROBERTSON, J. Diamond-like amorphous carbon. **Materials Science and Engineering: R: Reports**, vol. 37, no. 4–6, p. 129–281, 2002. [https://doi.org/10.1016/s0927-796x\(02\)00005-0](https://doi.org/10.1016/s0927-796x(02)00005-0).
SCHMÜSER, P.; DOHLUS, M.; ROSSBACH, J. **Solid Surface Physics**. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 1979. vol. 85, (Springer Tracts in Modern Physics). DOI 10.1007/BFb0048918. Available at: <http://link.springer.com/10.1007/BFb0048918>.

SILVA, S. R. P. **Properties of Amorphous Carbon**. London: INSPEC, The Institution of Electrical Engineers, 2003.

TITANTAH, J. T.; LAMOEN, D. Determination of the electron effective band mass in amorphous carbon from density-functional theory calculations. **Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics**, vol. 70, no. 3, p. 2–5, 2004. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.70.033101>.

TOGAWA, K.; SANBONSUGI, H.; SANDHU, A.; ABE, M.; NARIMATSU, H.; NISHIO, K.; HANDA, H. Detection of magnetically labeled DNA using pseudomorphic AlGaAs/InGaAs/GaAs heterostructure micro-Hall biosensors. **Journal of Applied Physics**, vol. 99, no. 8, p. 0–3, 2006. <https://doi.org/10.1063/1.2162041>.

UTKE, I.; STANISLAV, M.; PHILLIP, R. **Nanofabrication Using Focused Ion and Electron Beams**. New York: Oxford University Press, 2012.

WANG, S.; RONG, W.; WANG, L.; XIE, H.; SUN, L.; MILLS, J. K. A survey of piezoelectric actuators with long working stroke in recent years: Classifications, principles, connections and distinctions. **Mechanical Systems and Signal Processing**, vol. 123, p. 591–605, 2019. DOI 10.1016/j.ymsp.2019.01.033. Available at: <https://doi.org/10.1016/j.ymsp.2019.01.033>.

WELSER, J.; HOYT, J. L.; GIBBONS, J. F. Electron mobility enhancement in strained-Si n-type metal-oxide-semiconductor field-effect transistors. **IEEE Electron Device Letters**, vol. 15, no. 3, p. 100–102, Mar. 1994. <https://doi.org/10.1109/55.285389>.

APÊNDICE A – ARQUIVO DE SIMULAÇÃO COM GRÃO QUADRADO

```
#####
#Inicia o devedit#
#####
go devedit

#declarando variaveis, todas em micrometros

#Valor do diametro considerado na simulacao
set diam = 0.006

#Valor do raio, metade do diametro considerado
#na simulacao. Lembrar de inserir um valor
#inteiro em nanometros
set raio = 0.003

#Valor do espacamento entre as bordas dos graos
set dist = 0.004

#Distancia horizontal entre o grao e a borda lateral da simulacao
set espX = 0.002

#Distancia vertical entre o grao da esquerda (eletrodo 1)
#e a borda superior da simulacao
set espy_g1 = 0.007

#Distancia vertical entre o grao da direita (eletrodo 2)
#e a borda superior da simulacao, variavel de controle
#para desalinhar os graos
set espy_g2 = 0.007

#Regiao de trabalho

work.area x1=0 y1=0 x2="$dist"+(2*$"diam")+(2*$"espX") y2=0.02

#regiao do oxido
#Tamanho do dispositivo na horizontal
set ox_xf="$dist"+(2*$"diam")+(2*$"espX")

#Preenchimento do espaco de trabalho com oxido
region reg=1 name=oxido material=UD1(My_Oxide) polygon="\
0,0 \
"$ox_xf",0 \
"$ox_xf",0.02 \
0,0.02\
"

#regiao do eletrodo 1

#Calculo das variaveis que determinam os vertices
#do primeiro grao
set g1_xi = "$espX"
set g1_yi = "$espy_g1"
set g1_xf = "$espX" + "$diam"
set g1_yf = "$espy_g1" + "$diam"

#Grao da esquerda (eletrodo 1)
region reg=2 name=catodo electrode.id=1 material=Platinum polygon="\
```

```

$"g1_xi","$g1_yi" \
$"g1_xi","$g1_yf" \
$"g1_xf","$g1_yf" \
$"g1_xf","$g1_yi" \
"

#regiao do eletrodo 2

#Cálculo das variáveis que determinam os vértices
#do primeiro grão
set g2_xi = "$espx" + "$diam" + "$dist"
set g2_yi = "$espy_g2"
set g2_xf = "$espx" + (2*$"diam") + "$dist"
set g2_yf = "$espy_g2" + "$diam"

#Grão da direita (eletrodo 2)
region reg=3 name=anodo electrode.id=2 material=Platinum polygon="\
$"g2_xi","$g2_yi" \
$"g2_xi","$g2_yf" \
$"g2_xf","$g2_yf" \
$"g2_xf","$g2_yi" \
"
#####
#grade#
#####
#grade dividida em 5 áreas, concentrando a grade
#fina na região de maior fluxo de corrente, ou seja
#entre os grãos

#grade 1
#lateral esquerda, até metade do grão 1
constr.mesh x1=0 y1=0 x2="$espx"+"raio" y2=0.02 maximum.height=0.0004 \
maximum.width=0.0004

#grade 2
#superior no meio, região de oxido
constr.mesh x1="$espx"+"raio" y1=0 x2="$espx"+"raio"+"diam"+"dist" y2="$espy_g2"-0.002
maximum.height=0.0004 \
maximum.width=0.0004

#grade 3
#Região entre os grãos, contempla metade dos grãos e óxido
#ÁREA MAIS IMPORTANTE, GRADE FINA
constr.mesh x1="$espx"+"raio" y1="$espy_g2"-0.002 x2="$espx"+"raio"+"diam"+"dist"
y2="$espy_g1"+"diam"+0.002 maximum.height=0.0001 \
maximum.width=0.0001

#grade 4
#inferior no meio, região de oxido
constr.mesh x1="$espx"+"raio" y1="$espy_g1"+"diam"+0.002 x2="$espx"+"raio"+"diam"+"dist"
y2=0.02 maximum.height=0.0004 \
maximum.width=0.0004

#grade 5
#lateral direita, desde metade do grão 2 até o final
constr.mesh x1="$espx"+"diam"+"dist"+"raio" y1=0 x2="$dist"+"(2*$"diam") + (2*$"espx") y2=0.02
maximum.height=0.0004 \
maximum.width=0.0004
Mesh Mode = MeshBuild

```

```
#####  
#Inicia o Atlas#  
#####  
go atlas  
  
#Definição do óxido, alterando suas propriedades  
material material=My_Oxide user.group=insulator user.default=oxide eg300=1.4 MC=0.87 MV=0.87  
affinity=4.86  
  
#Definição do metal (platina), alterando sua função trabalho  
contact name=catodo workfun=5.56  
contact name=anodo workfun=5.56  
  
#Inserir modelo, MIMSLICEPTS e temperatura de simulação  
models mimitun mimslicepts=90 temp=300  
  
solve init  
  
solve prev  
  
#Insere as informações de energia de valência  
#e condução das regiões no arquivo de saída  
output con.band val.band  
  
#Cria um arquivo log onde serão inseridos os  
#valores de tensão e corrente (nota, a corrente é  
#considerada pra um dispositivo com 1 micrometro de  
#comprimento no terceiro eixo)  
log outf=graos_quadrados.log  
  
#Realiza a polarização crescente de potencial  
#com o passo indicado  
solve name=catodo vstep=1e-5 vfinal=1e-3  
  
#Salva a estrutura que pode ser aberta pelo Tonyplot  
save outfile=graos_metalicos.str  
  
quit
```