

**113-023**

**PROPRIEDADES ELETRÔNICAS E DIELÉTRICAS DAS SUPER-REDES DE SnO<sub>2</sub>/TiO<sub>2</sub> (001) E (110): UMA NOVA NANOESTRUTURA HIGH-K**

Leite Alves, H.W.(1); Scolfaro, L.(2); Da Silva Jr., E.(3);

Universidade Federal de São João del Rei(1); Texas State University(2); Universidade Federal de Pernambuco(3);

O dióxido de estanho (SnO<sub>2</sub>) é um interessante composto para aplicações como eletrodos condutores transparentes, sensores de gás, óxidos magnético diluídos, dentre outras. Por outro lado, o dióxido de titânio (TiO<sub>2</sub>) tem atraído grande atração devido ao seu uso potencial em dispositivos fotovoltaicos e fotoativos, além do fato que é um material high-K. Portanto, o uso desses óxidos formando interfaces, conduz para o desenvolvimento de dispositivos de alta densidade de capacitância, que são necessários para várias aplicações em microeletrônica. A vantagem de criar super-redes de SnO<sub>2</sub>/TiO<sub>2</sub> é devido ao pequeno descasamento de seus parâmetros de rede (~ 3.10%). Neste trabalho foi usado a Teoria do Funcional Densidade na Aproximação da Densidade Local, técnicas de gradiente conjugado e o método da onda aumentada projetada, em conjunto com modelos de supercélula, para mostrar os resultados para as propriedades estruturais, dielétricas e eletrônicas, bem como do band offset das super-redes de (SnO<sub>2</sub>)<sub>n</sub>/(TiO<sub>2</sub>)<sub>m</sub> (001) e (110) para várias espessuras de SnO<sub>2</sub> (n) e TiO<sub>2</sub> (m), os quais estão em boa concordância com os dados experimentais disponíveis. Baseados nos resultados obtidos, foi verificado que os valores para a constante dielétrica perpendicular à direção de crescimento das super-redes possuem valores maiores que a do TiO<sub>2</sub>. Isso faz com que esse sistema seja aplicável em memórias tipo DRAM. Este trabalho conta com apoio financeiro da FAPEMIG.