

# **Simulação Computacional de Propriedades Dinâmicas de Heteroestruturas Semicondutoras**

Thiago Luiz Chaves de Melo

**Orientadora:** Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Euzi C. F. da Silva

**Banca:** Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Lucy V. C. Assali

Prof. Dr. Ronaldo Rodrigues Pelá

Prof. Dr. Sandro Martini

# POR QUE SIMULAR PROPRIEDADES DINÂMICAS?

---

**LNMS** está desenvolvendo dispositivos tais como:

- Fotodetectores de infravermelho
- Lasers de cascata quântica
- Células solares de cascata quântica

Simulações computacionais são úteis para:

- Análise do **desempenho** dos dispositivos
- Projetar **novos** dispositivos

Neste contexto nosso objetivo é:

Calcular propriedades dinâmicas como  
espectros de **fotocorrente e absorção**

# PRÉ-REQUISITOS

---

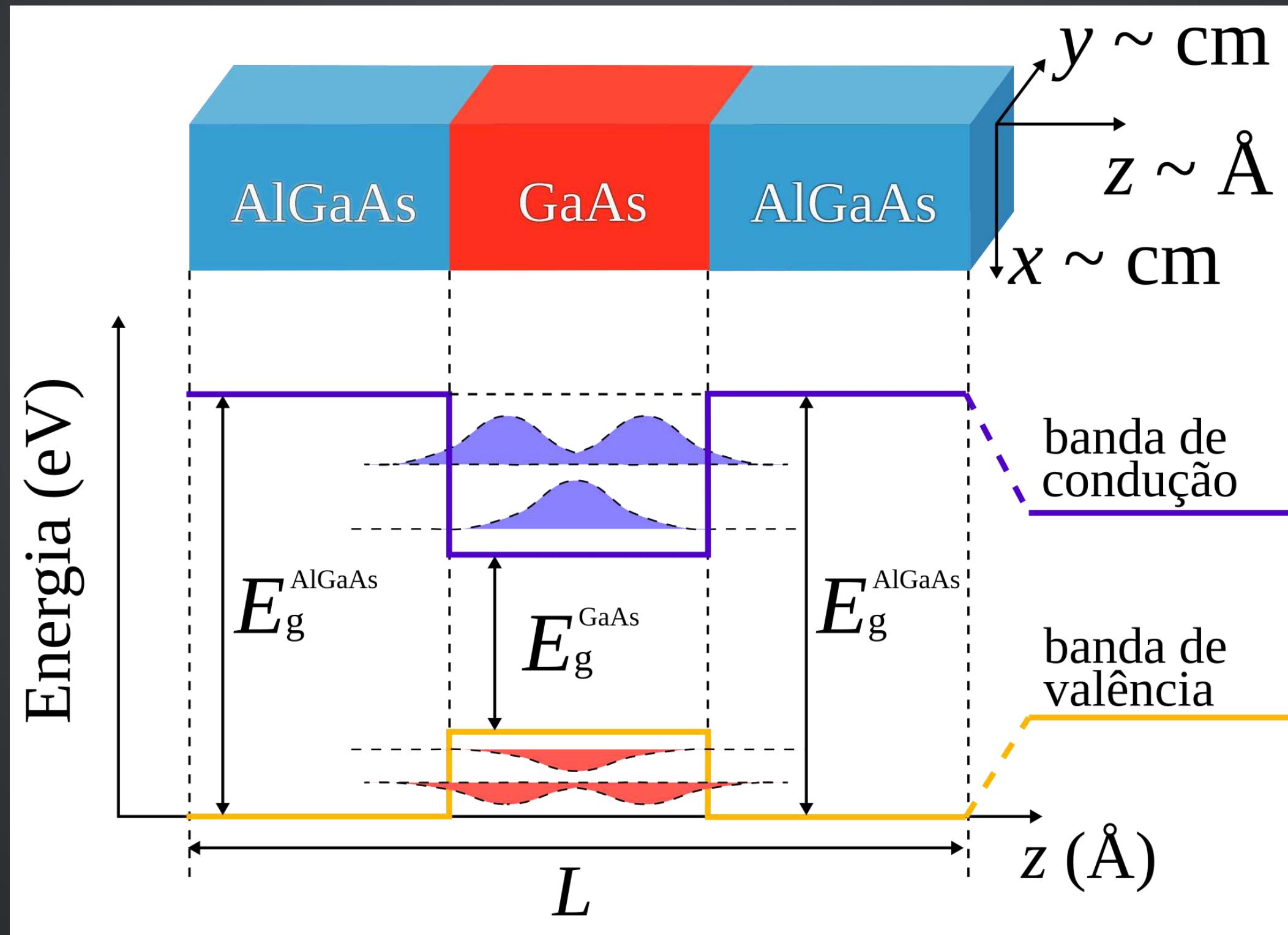
Requisitos para o cálculo das propriedades dinâmicas

- níveis de energia e autofunções para qualquer potencial em 1D (autovalores e autovetores)
- evolução temporal de um sistema quântico (equação diferencial parcial)

**Por que estes dois problemas?**

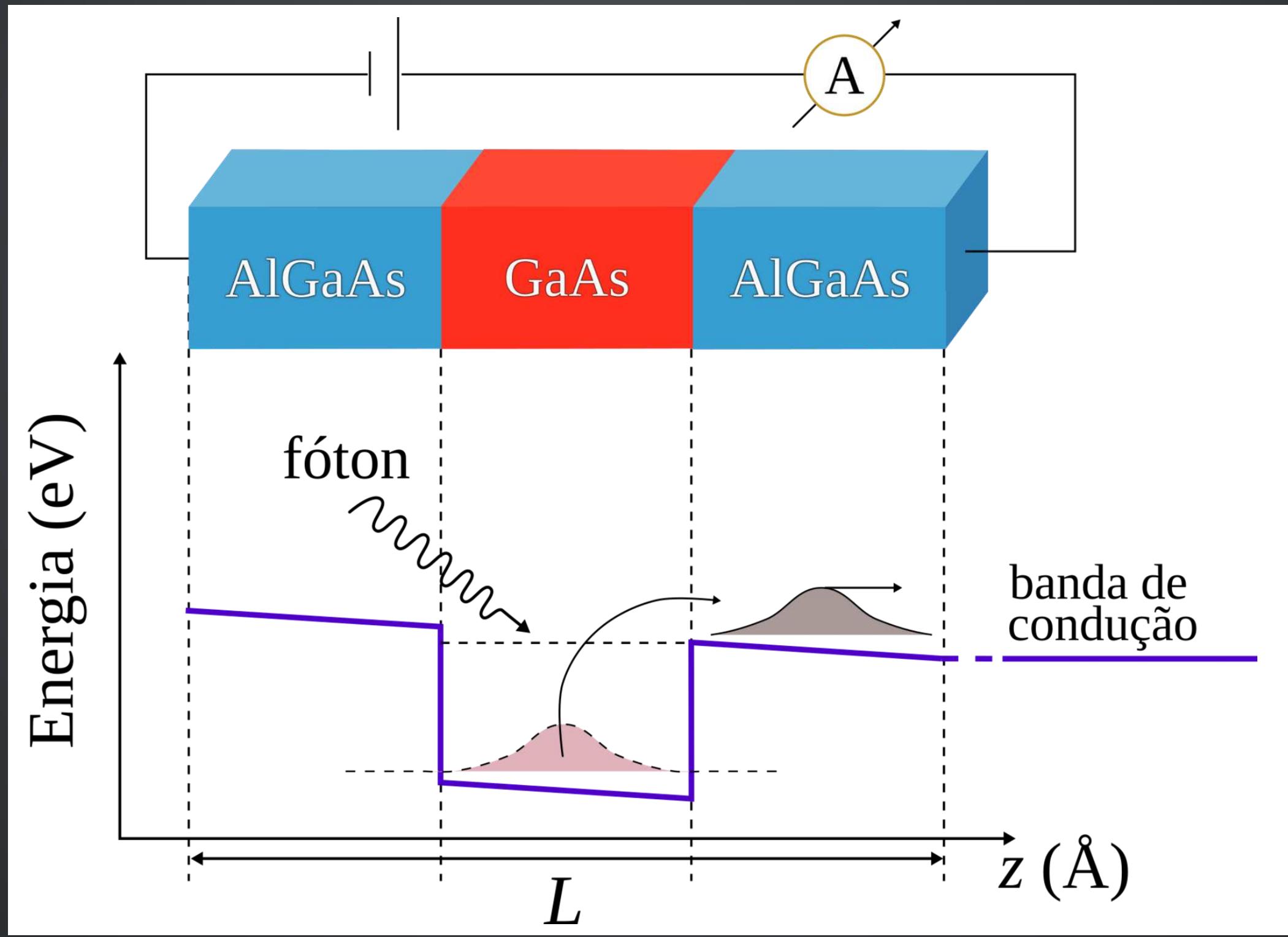
# PRÉ-REQUISITOS

HS dão origem a potenciais onde surgem níveis quantizados:



# PRÉ-REQUISITOS

Elétrons que absorvem fótons se movem pela estrutura:



# PRÉ-REQUISITOS

---

Neste trabalho estudamos alguns métodos numéricos:

- Autovalores e Autovetores
  - Ev. Tempo Imag. + Orto. de Gram-Schmidt
  - Iteração Inversa
- Equação Diferencial Parcial
  - Crank-Nicolson
  - Runge-Kutta
  - Split-Step FFT (Pseudo-Espectral)

Antes de abordar o cálculo das propriedades dinâmicas vamos começar por estes problemas individualmente



# PROCEDIMENTOS PARA TRATAMENTO NUMÉRICO DE UM SISTEMA QUÂNTICO

---

- Discretizar o espaço:

$$L = N \Delta z \rightarrow z_i = -L/2 + i\Delta z$$

- Discretizar o tempo:

$$t_j = j\Delta t$$

Isso permite que tenhamos amostras no tempo e espaço:

$$V(z_i, t_j) \quad \Psi(z_i, t_j) \quad m_e^*(z_i)$$

**Como escolher a discretização de espaço e tempo?**

# 1º ESTUDO: EVOLUÇÃO TEMPORAL DE UM PACOTE DE ONDA PLANA

---

Por que fazer este estudo?

- Testar a **qualidade** de diferentes discretizações
- Testar a **qualidade** dos diferentes métodos numéricos

Por que este sistema?

- É um sistema **simples** (potencial nulo)
- Possui **solução analítica** para comparação

**Como mensuramos a qualidade?**



# 1º ESTUDO: EVOLUÇÃO TEMPORAL DE UM PACOTE DE ONDA PLANA

---

Precisamos de métricas para **monitorar**:

- a **conservação da norma**, ou seja:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dz |\Psi(z, t)|^2 = \text{constante}$$

- a **coerência** da dispersão da onda com o princípio da incerteza de Heisenberg
- a **simetria** da função de onda, ou seja, a onda não pode se tornar oblíqua (no caso do pacote de onda plana)

Combinamos estas três métricas em uma única:

## Distância de Minkowski

Quanto menor o valor dessa métrica, maior a qualidade da evolução temporal.



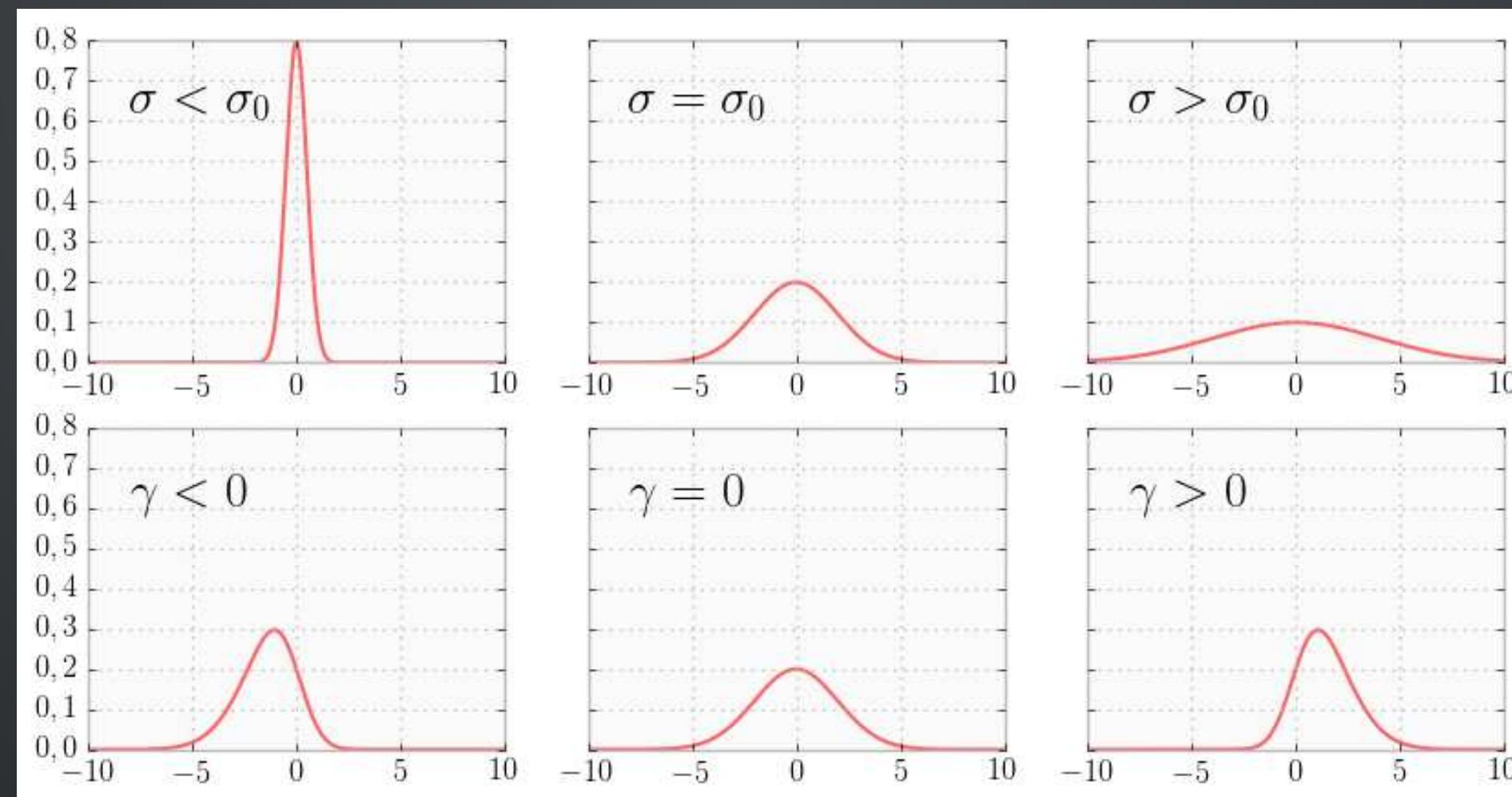
# 1º ESTUDO: EVOLUÇÃO TEMPORAL DE UM PACOTE DE ONDA PLANA

Detalhando um pouco mais as três métricas:

Conservação da Norma:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dz |\Psi(z, t)|^2 = \text{constante}$$

Dispersão e obliquidade:



# 1º ESTUDO: EVOLUÇÃO TEMPORAL DE UM PACOTE DE ONDA PLANA

---

Para cada método de evolução temporal:

- Crank-Nicolson
- Runge-Kutta
- Pseudo-Espectral

Evoluímos um pacote de onda de energia  $E=150$  eV da posição inicial  $-20.0$  Å até a posição final  $20.0$  Å, variando os seguintes parâmetros:

- $L = \{100, 250, 400, 550, 700, 850, 1000\}$  Å
- $N = \{256, 512, 1024, 2048, 4096\}$  pontos
- $\Delta t = \{1 \times 10^{-20}, 5 \times 10^{-20}, \dots, 1 \times 10^{-16}, 5 \times 10^{-16}\}$  s

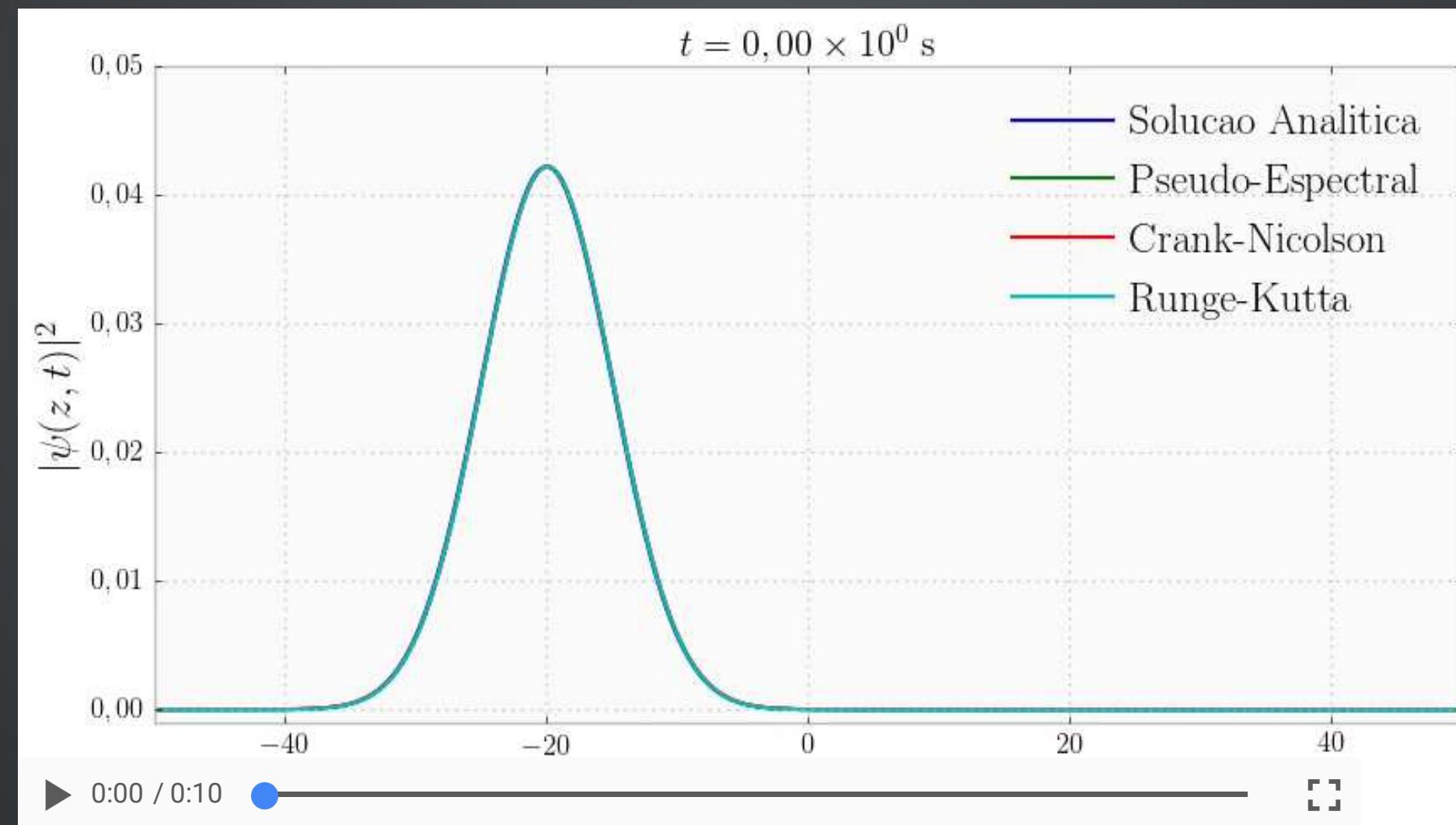
Isso totaliza **350 combinações** de  $\{L, N, \Delta t\}$  para cada método.  
O que é exatamente faz uma combinação ser boa ou ruim?



# 1º ESTUDO: EVOLUÇÃO TEMPORAL DE UM PACOTE DE ONDA PLANA

Evolução com parâmetros adequados:

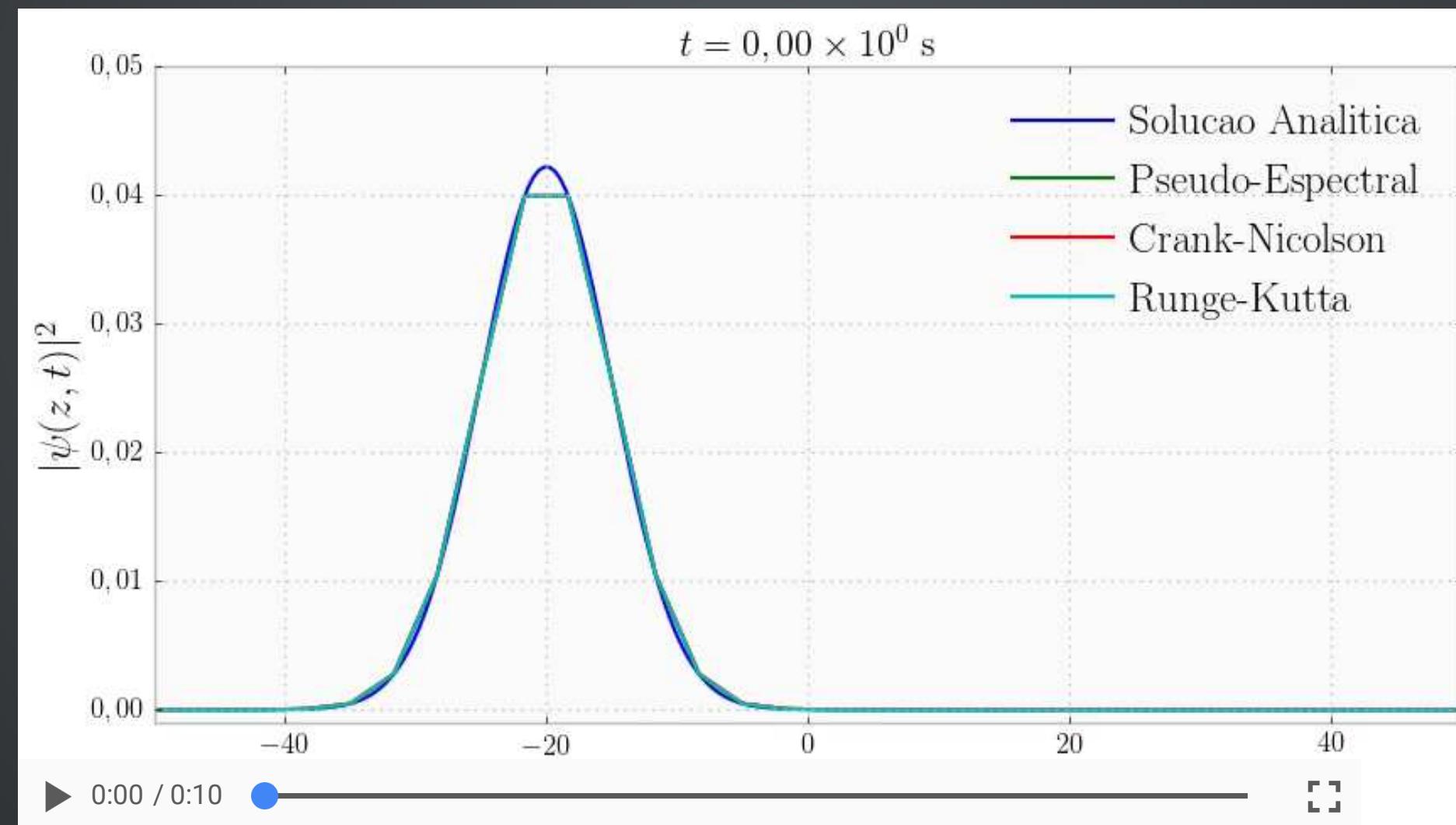
$$L = 100 \text{ \AA}, N = 1024 \text{ pontos e } \Delta t = 1 \times 10^{-18} \text{ s}$$



# 1º ESTUDO: EVOLUÇÃO TEMPORAL DE UM PACOTE DE ONDA PLANA

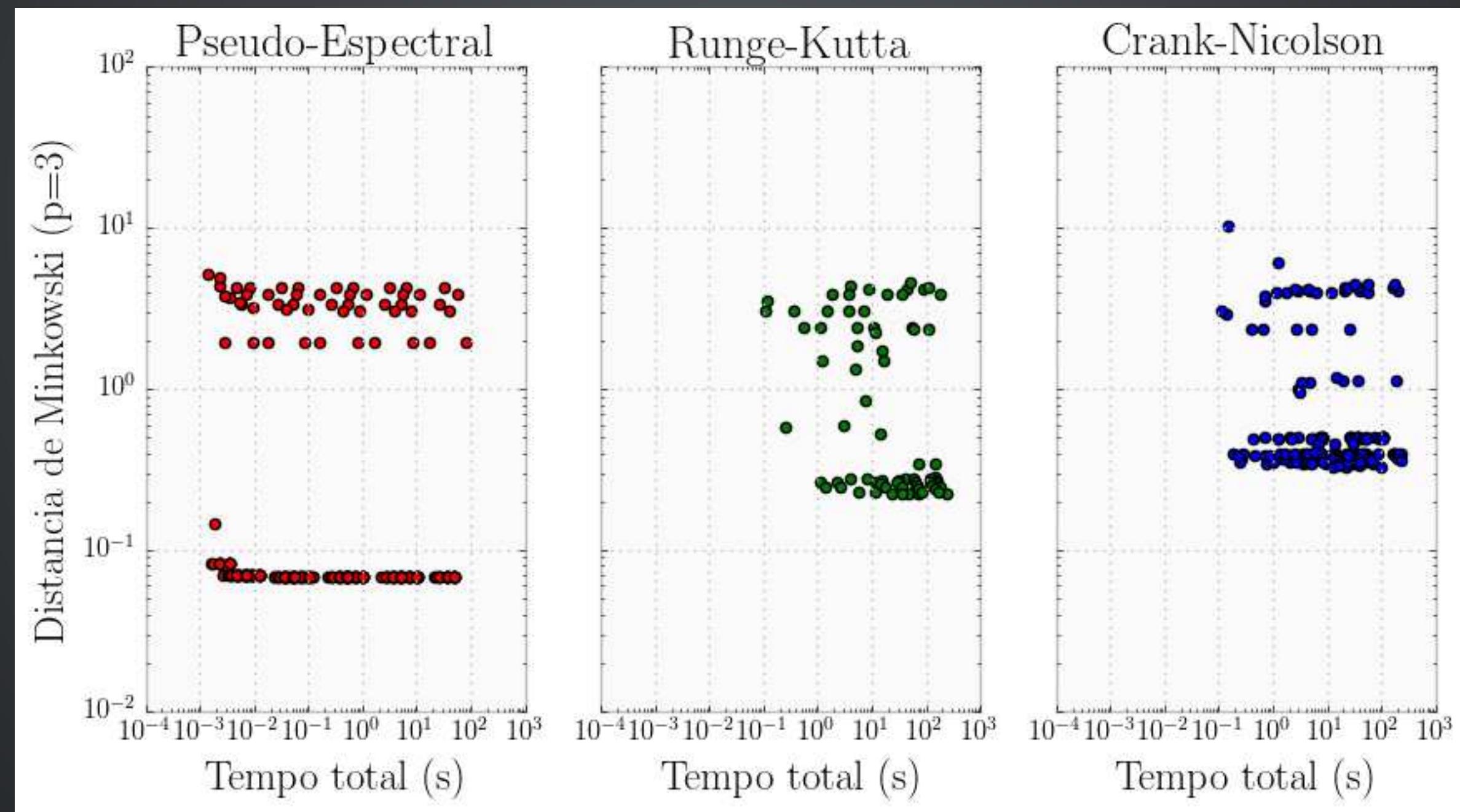
Evolução com parâmetros inadequados:

$$L = 850 \text{ \AA}, N = 256 \text{ pontos e } \Delta t = 1 \times 10^{-18} \text{ s}$$



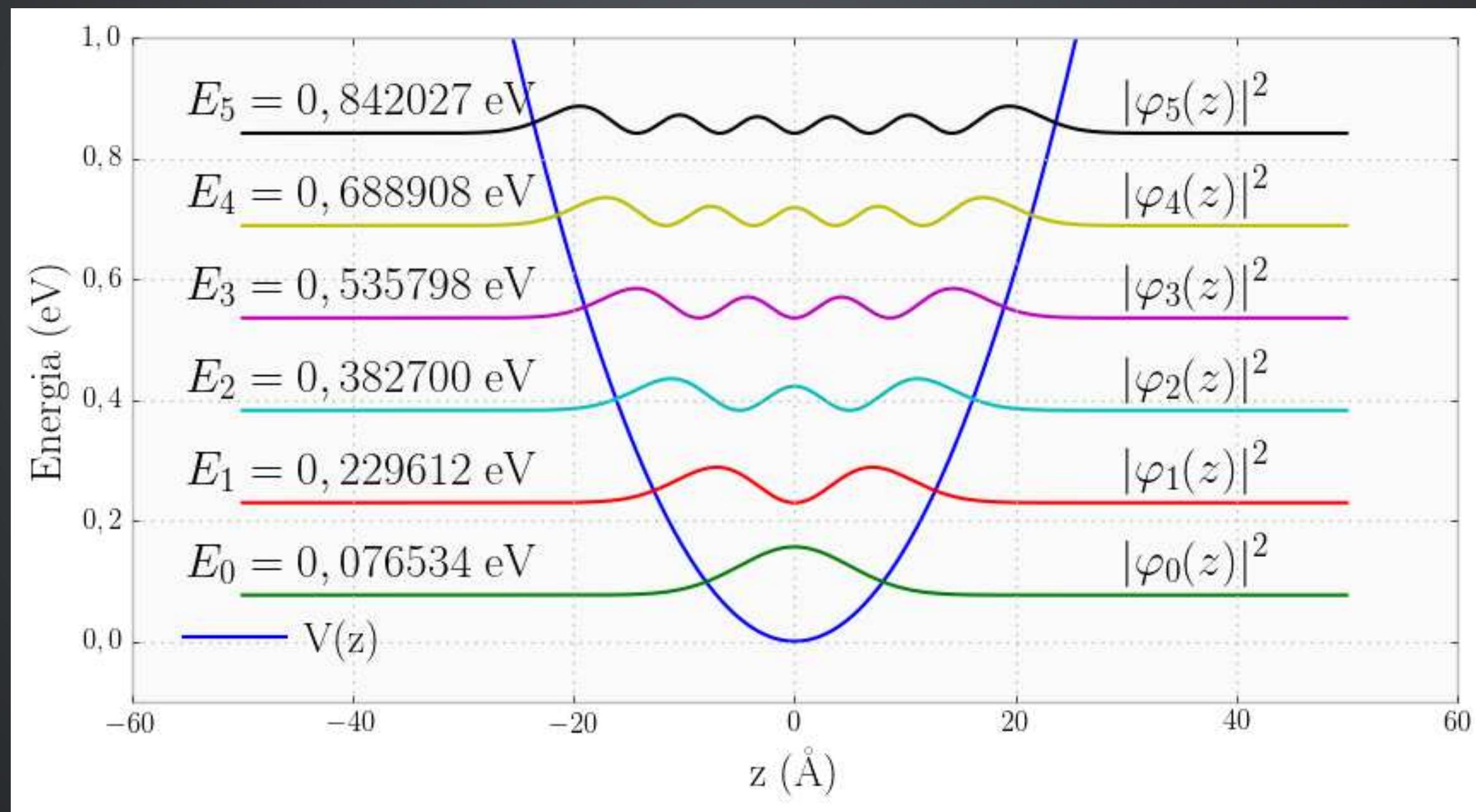
# 1º ESTUDO: EVOLUÇÃO TEMPORAL DE UM PACOTE DE ONDA PLANA

Realizando um estudo com todos os 3 métodos e as 350 combinações de parâmetros, obtivemos como resultado:



## 2º ESTUDO: AUTOVALORES E AUTOVETORES PARA OSCILADOR HARMÔNICO QUÂNTICO

$$V(z) = \frac{m_e \omega z^2}{2} \quad \omega = 2,32 \times 10^{14} \text{ rad/s}$$



## 2º ESTUDO: AUTOVALORES E AUTOVETORES PARA OSCILADOR HARMÔNICO QUÂNTICO

---

**Utilizamos o método Pseudo-Espectral com evolução em tempo imaginário e ortogonalização de Gram-Schmidt**

O que buscamos verificar?

- precisão no cálculo dos autovetores
- custo computacional para atingir determinada precisão

Por que este sistema?

- sistema simples
- com solução analítica para comparação

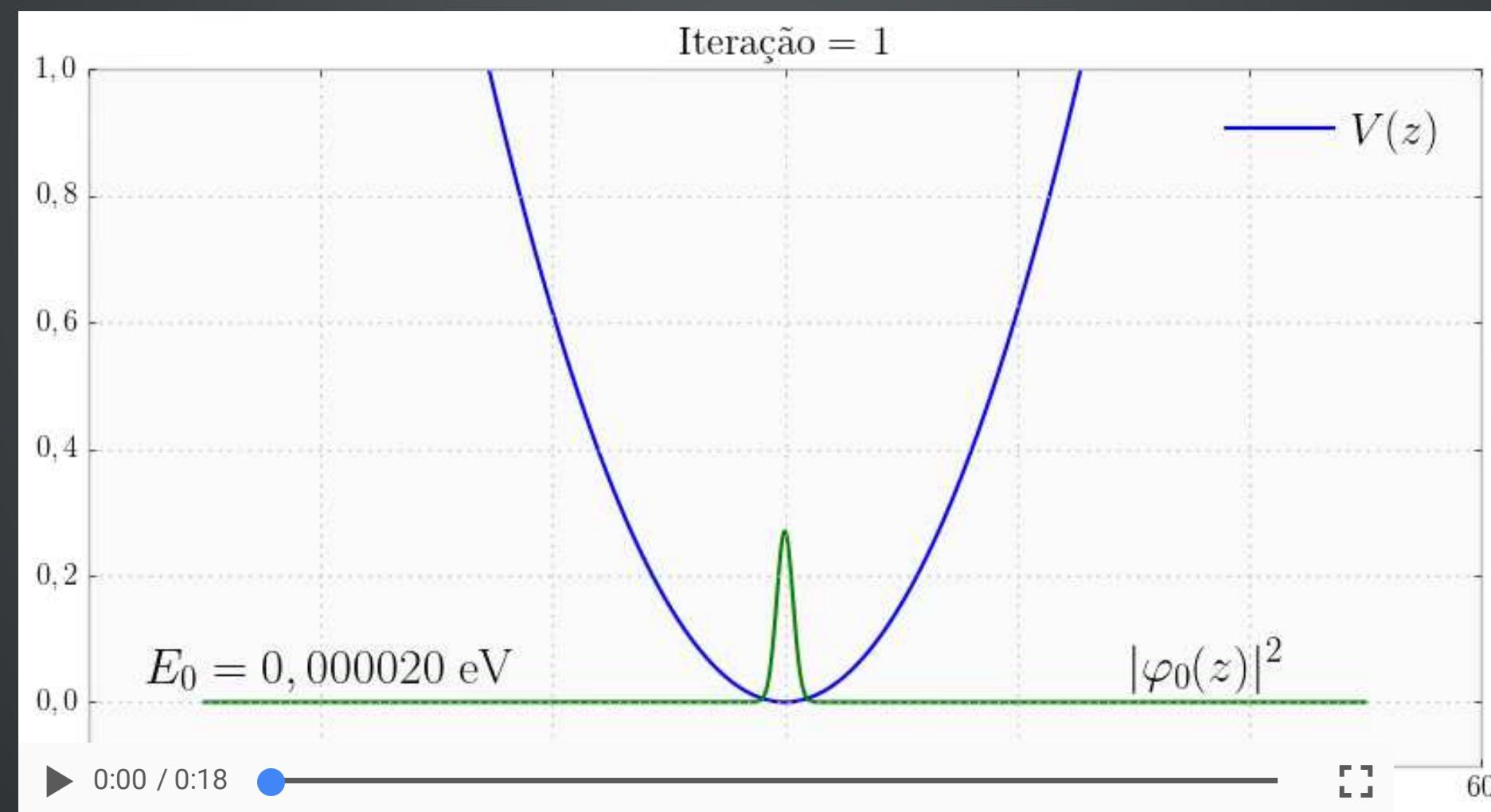
Qual a métrica de qualidade?

- distância euclidiana quadrada (quad. difer. ponto a ponto)



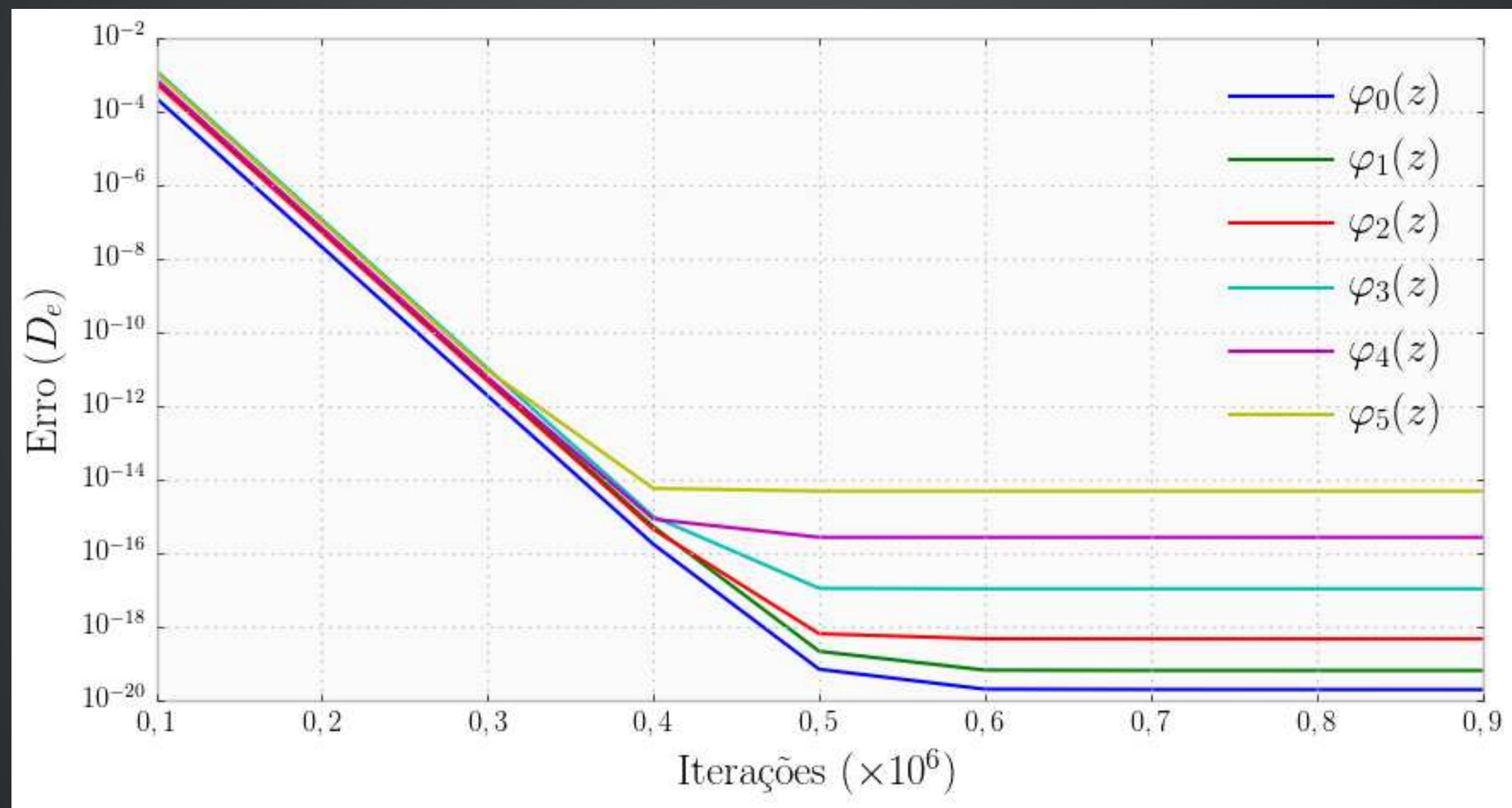
## 2º ESTUDO: AUTOVALORES E AUTOVETORES PARA OSCILADOR HARMÔNICO QUÂNTICO

Um exemplo de evolução com limite de  
100k iterações por autoestado



## 2º ESTUDO: AUTOVALORES E AUTOVETORES PARA OSCILADOR HARMÔNICO QUÂNTICO

Precisão por autoestado em função do número de iterações.



**Estamos convencidos de que o método é apropriado?**

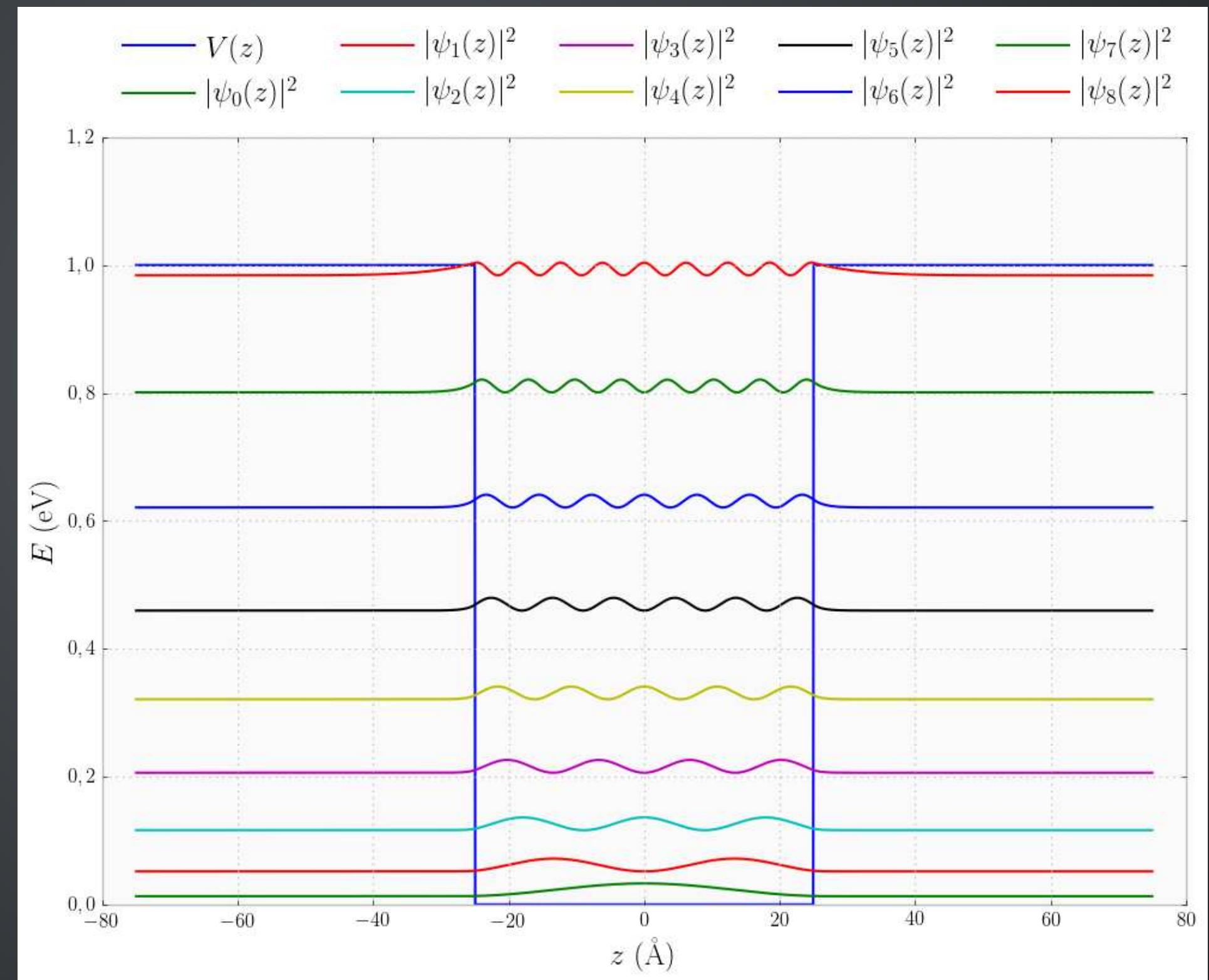


# 3º ESTUDO: AUTOVALORES E AUTOVETORES PARA POÇO QUADRADO FINITO

$$V(z) = \begin{cases} 0, & |z| \leq a/2 \\ V_b, & |z| > a/2, \end{cases}$$

$$L = 50 \text{ \AA}$$

$$V_b = 1.0 \text{ eV}$$



# 3º ESTUDO: AUTOVALORES E AUTOVETORES PARA POÇO QUADRADO FINITO

---

**Utilizamos o método Pseudo-Espectral com evolução em tempo imaginário e ortogonalização de Gram-Schmidt**

O que buscamos verificar?

- precisão no cálculo de autovalores

Por que este sistema?

- potencial semelhante ao de poços quânticos de heteroestruturas
- com solução analítica para comparação
  - solução analítica ainda se reduz a um problema numérico de achar raízes de equações! Ou seja, é "pseudo-analítica"

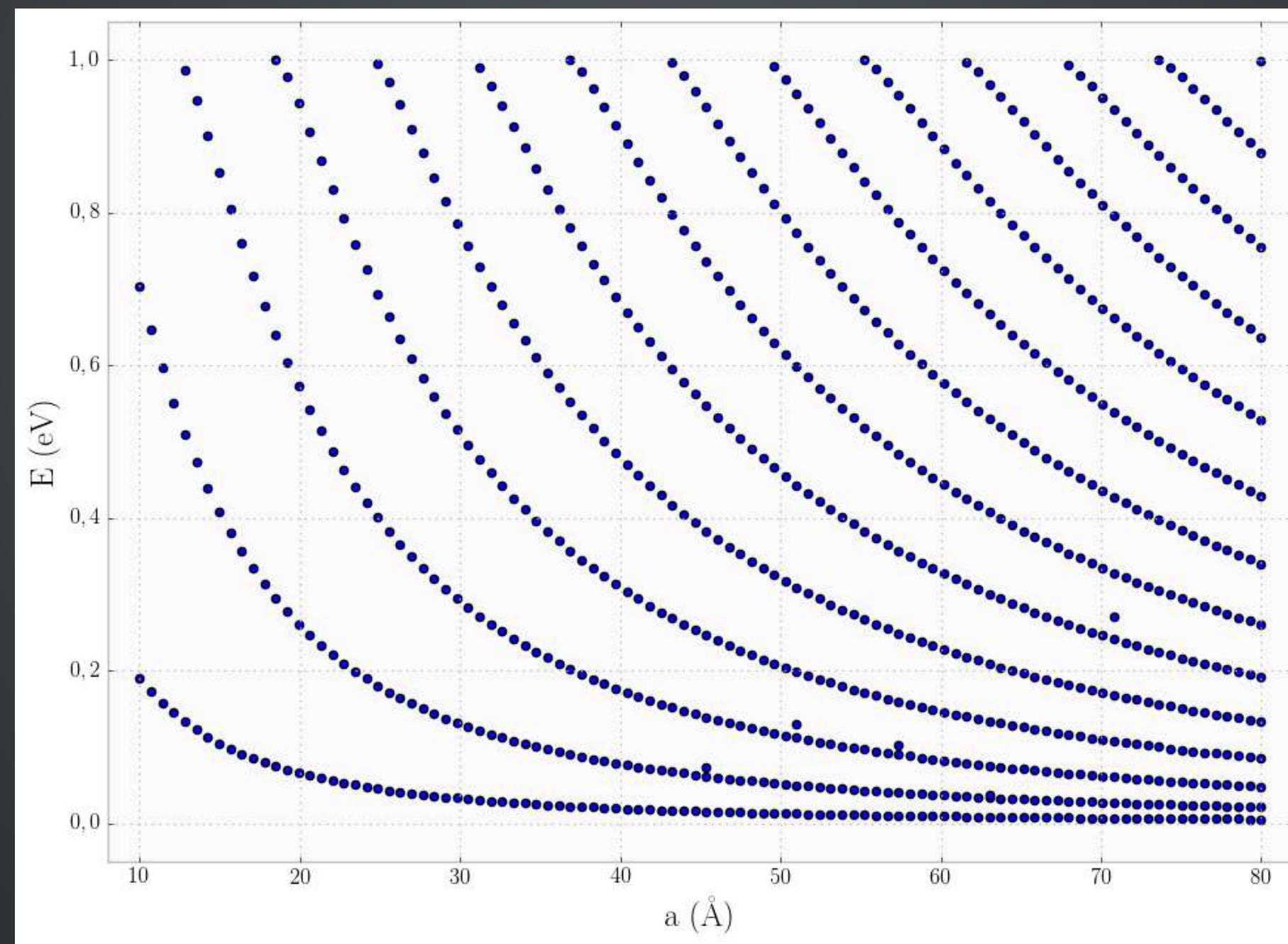
Qual a métrica de qualidade?

- diferença relativa dos autovalores (%)



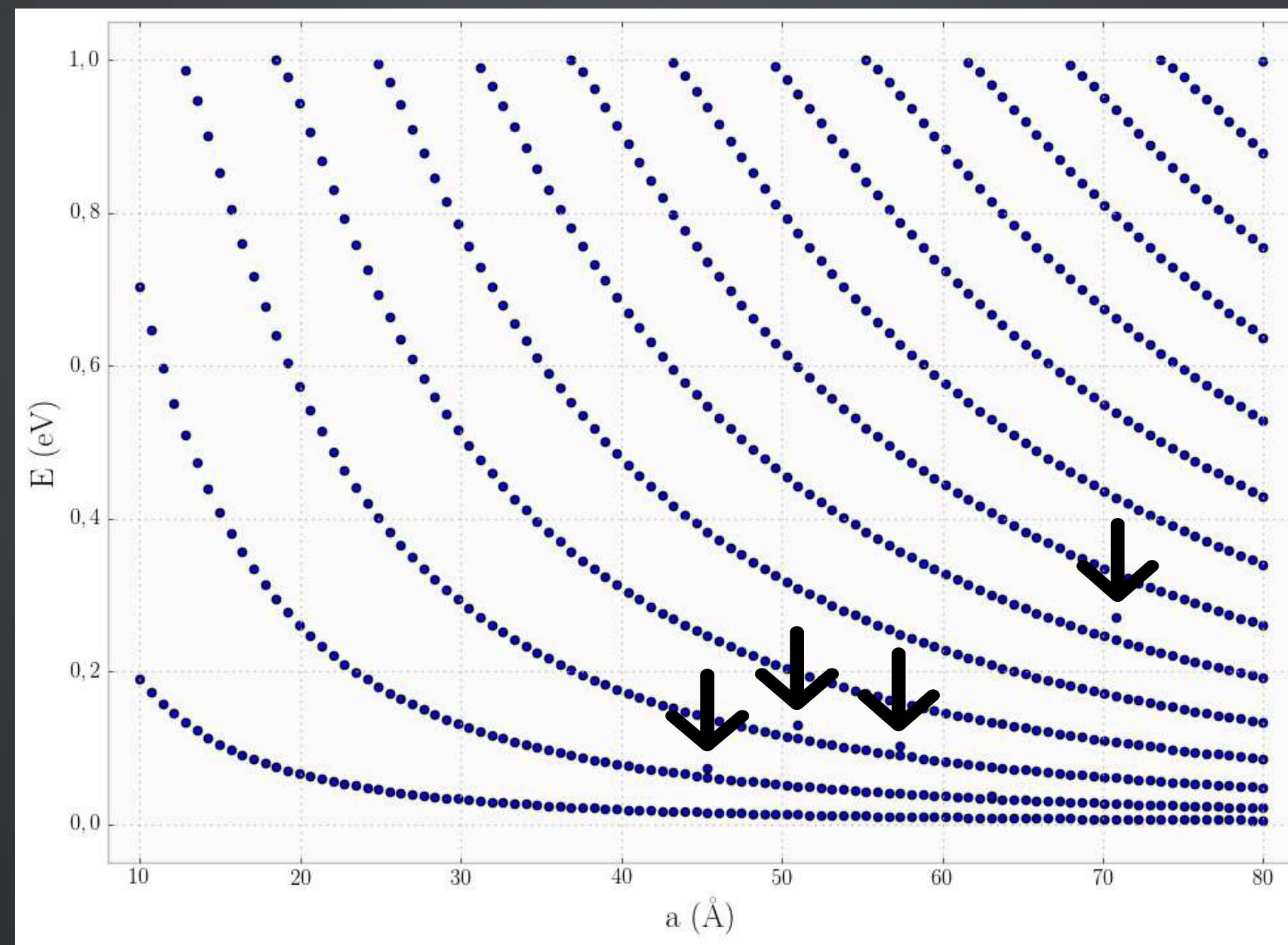
# 3º ESTUDO: AUTOVALORES E AUTOVETORES PARA POÇO QUADRADO FINITO

Níveis de energia obtidos por solução pseudo-analítica para poços de 1,0 eV de altura com diferentes larguras.



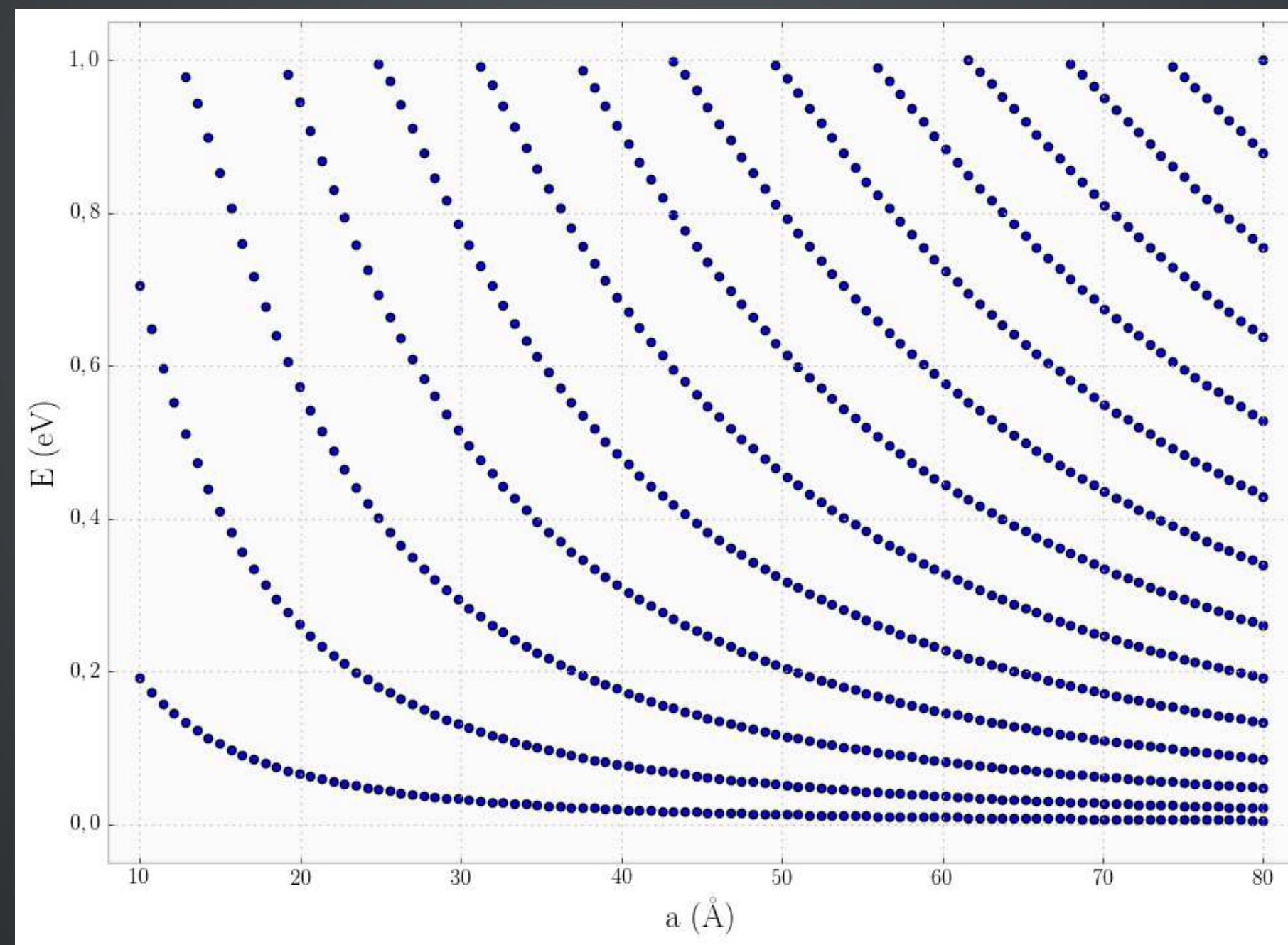
# 3º ESTUDO: AUTOVALORES E AUTOVETORES PARA POÇO QUADRADO FINITO

Níveis de energia obtidos por solução pseudo-analítica para poços de 1,0 eV de altura com diferentes larguras.



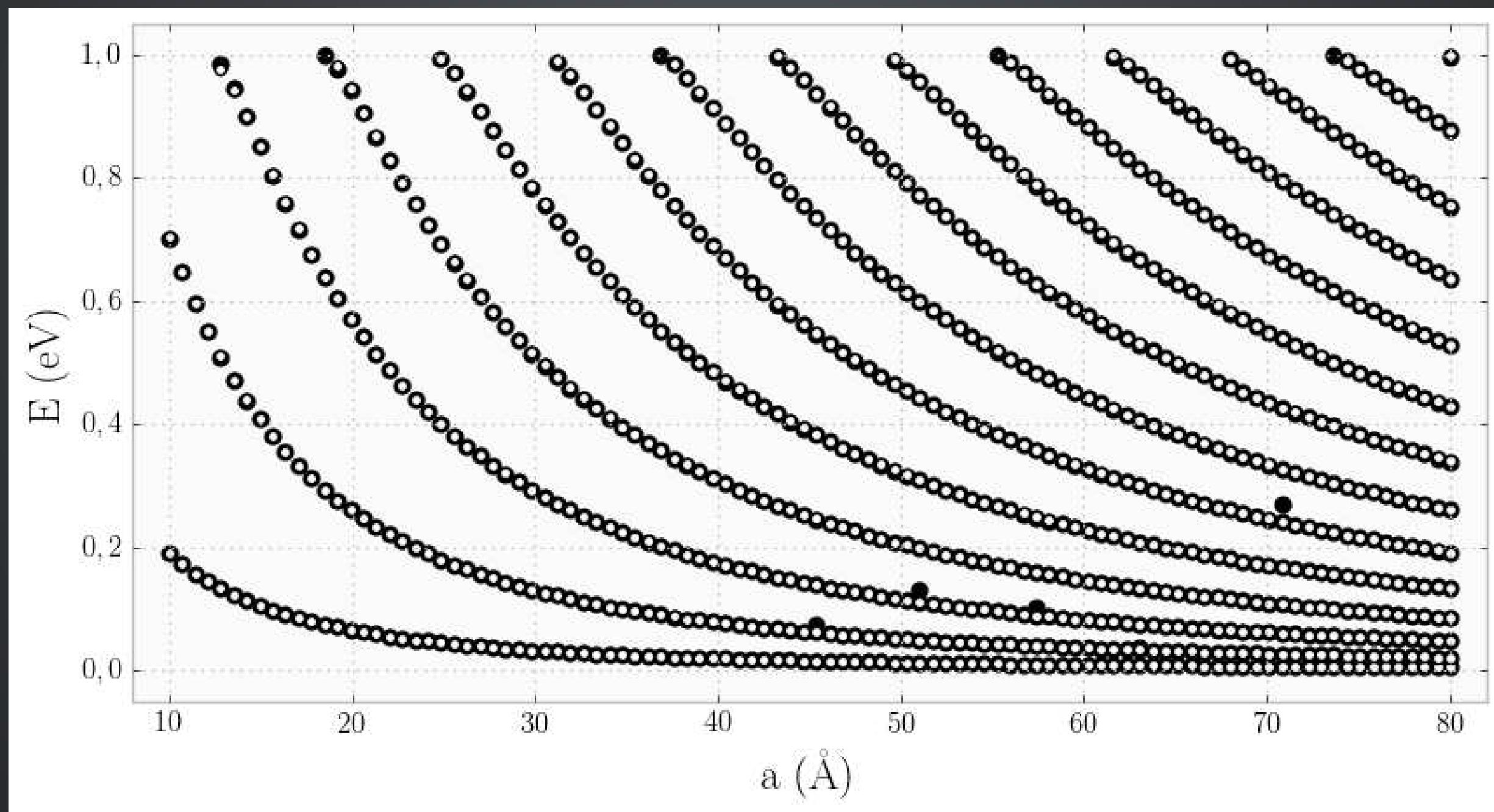
# 3º ESTUDO: AUTOVALORES E AUTOVETORES PARA POÇO QUADRADO FINITO

Níveis de energia obtidos pelo método Pseudo-Espectral para poços de 1,0 eV de altura com diferentes larguras.



# 3º ESTUDO: AUTOVALORES E AUTOVETORES PARA POÇO QUADRADO FINITO

**Sobreposição** dos níveis de energia obtidos por solução pseudo-analítica e pelo método Pseudo-Espectral:



# 3º ESTUDO: AUTOVALORES E AUTOVETORES PARA POÇO QUADRADO FINITO

Autoenergias de um elétron de massa  $m_e$  dentro de poço quântico de altura 1.0 eV e largura 50.0 Å.

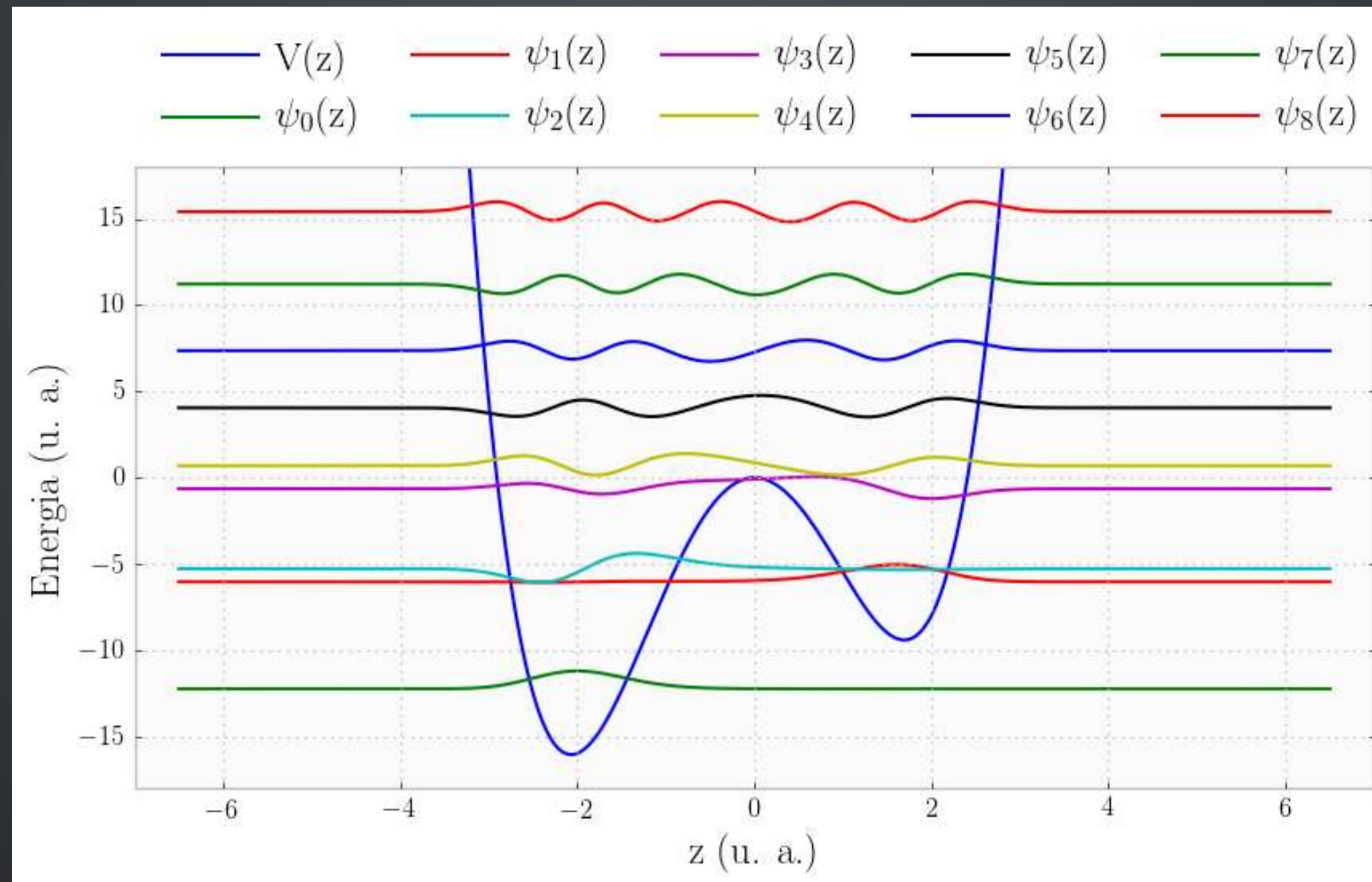
Nível	Val. Analítico (eV)	Val. Numérico (eV)	Erro (%)
0	0,012937	0,012952	0,111857
1	0,051700	0,051752	0,101488
2	0,116129	0,116235	0,091498
3	0,205930	0,206108	0,086792
4	0,320603	0,320874	0,084524
5	0,459298	0,459678	0,082735
6	0,620440	0,620929	0,078811
7	0,800413	0,801022	0,076099
8	0,982859	0,984052	0,121385

**Estamos convencidos de que o método é apropriado?**



# 4º ESTUDO: AUTOVALORES E AUTOVETORES PARA POÇO DUPLO ASSIMÉTRICO

$$V(z) = -k_2 z^2 + k_3 z^3 + k_4 z^4$$



# 4º ESTUDO: AUTOVALORES E AUTOVETORES PARA POÇO DUPLO ASSIMÉTRICO

---

**Utilizamos o método Pseudo-Espectral com evolução em tempo imaginário e ortogonalização de Gram-Schmidt**

O que buscamos verificar?

- cálculo de autovalores
- perfil dos autovetores

Por que este sistema?

- solução reportada na literatura por dois grupos de autores
  - já foi abordado pelo método pseudo-espectral
  - possui uma solução analítica obtida através de algumas aproximações

Qual a métrica de qualidade?

- diferença relativa com os autovalores dos autores (%)



# 4º ESTUDO: AUTOVALORES E AUTOVETORES PARA POÇO DUPLO ASSIMÉTRICO

**Utilizamos o método Pseudo-Espectral com evolução em tempo imaginário e ortogonalização de Gram-Schmidt**

*Solution of the Schrödinger equation by a spectral method*

M.D. Feit, J.A. Fleck and A. Steiger, J. of Computational Phys. 47, 412-433 (1982).

- perfil de autovalores

Por que este sistema?

- solução reportada na literatura por dois grupos de autores
  - já foi abordado pelo método pseudo-espectral
  - possui uma solução analítica obtida através de algumas aproximações

Qual a métrica de qualidade?

- diferença relativa com os autovalores dos autores (%)



# 4º ESTUDO: AUTOVALORES E AUTOVETORES PARA POÇO DUPLO ASSIMÉTRICO

**Utilizamos o método Pseudo-Espectral com evolução em tempo imaginário e ortogonalização de Gram-Schmidt**

*Solution of the Schrödinger equation by a spectral method*

M.D. Feit, J.A. Fleck and A. Steiger, J. of Computational Phys. 47, 412-433 (1982).

- perfil de autovalores  
Por que este sistema?

*Evaluation of transition probabilities in a double asymmetric potential well,*

N.I.Zhirnov and A.V. Turev, Optics and Spectroscopy 47, 480-484 (1979).

- solução reportada na literatura por dois grupos de autores
  - já foi abordado pelo método pseudo-espectral
  - possui uma solução analítica obtida através de algumas aproximações

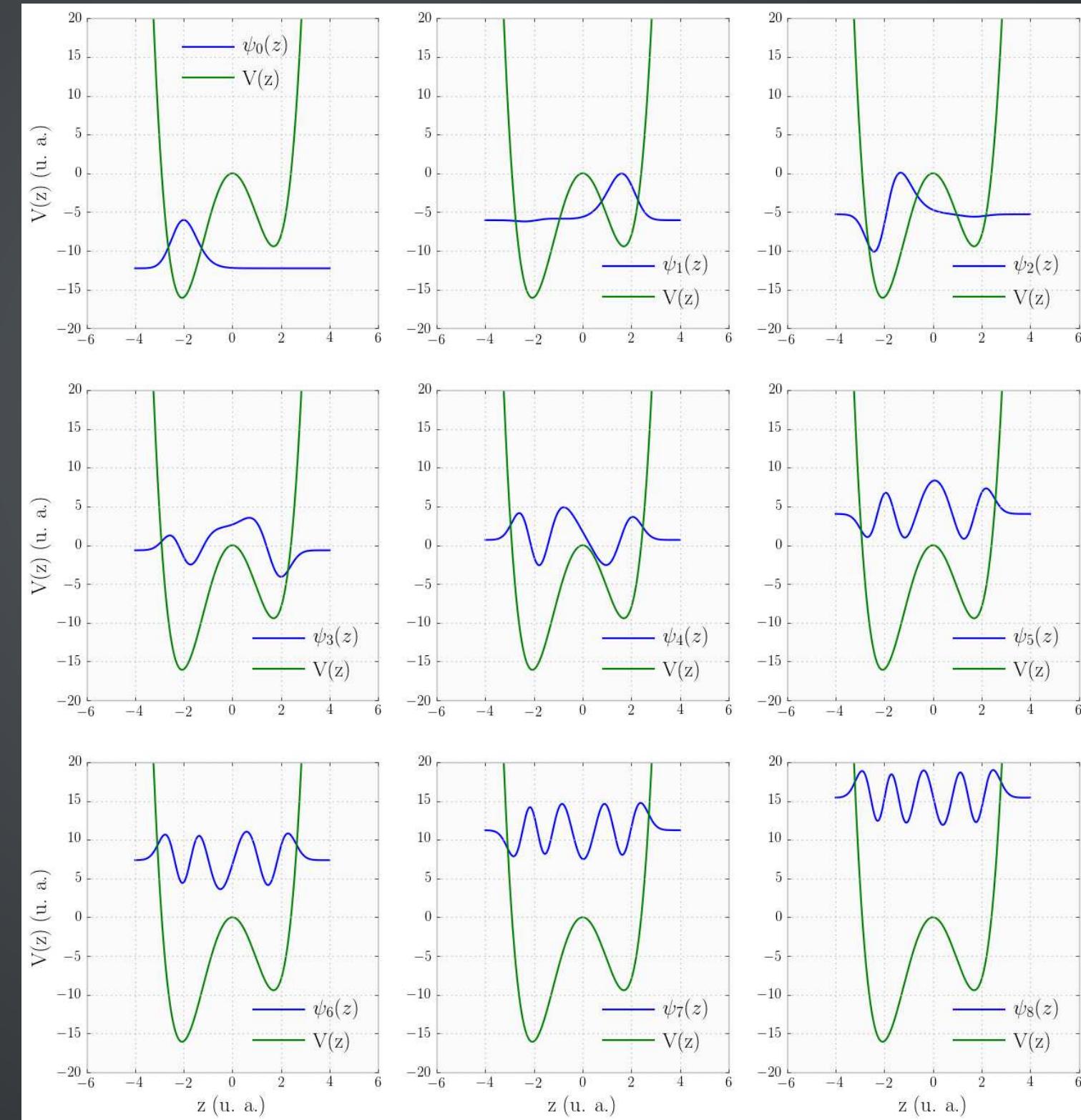
Qual a métrica de qualidade?

- diferença relativa com os autovalores dos autores (%)



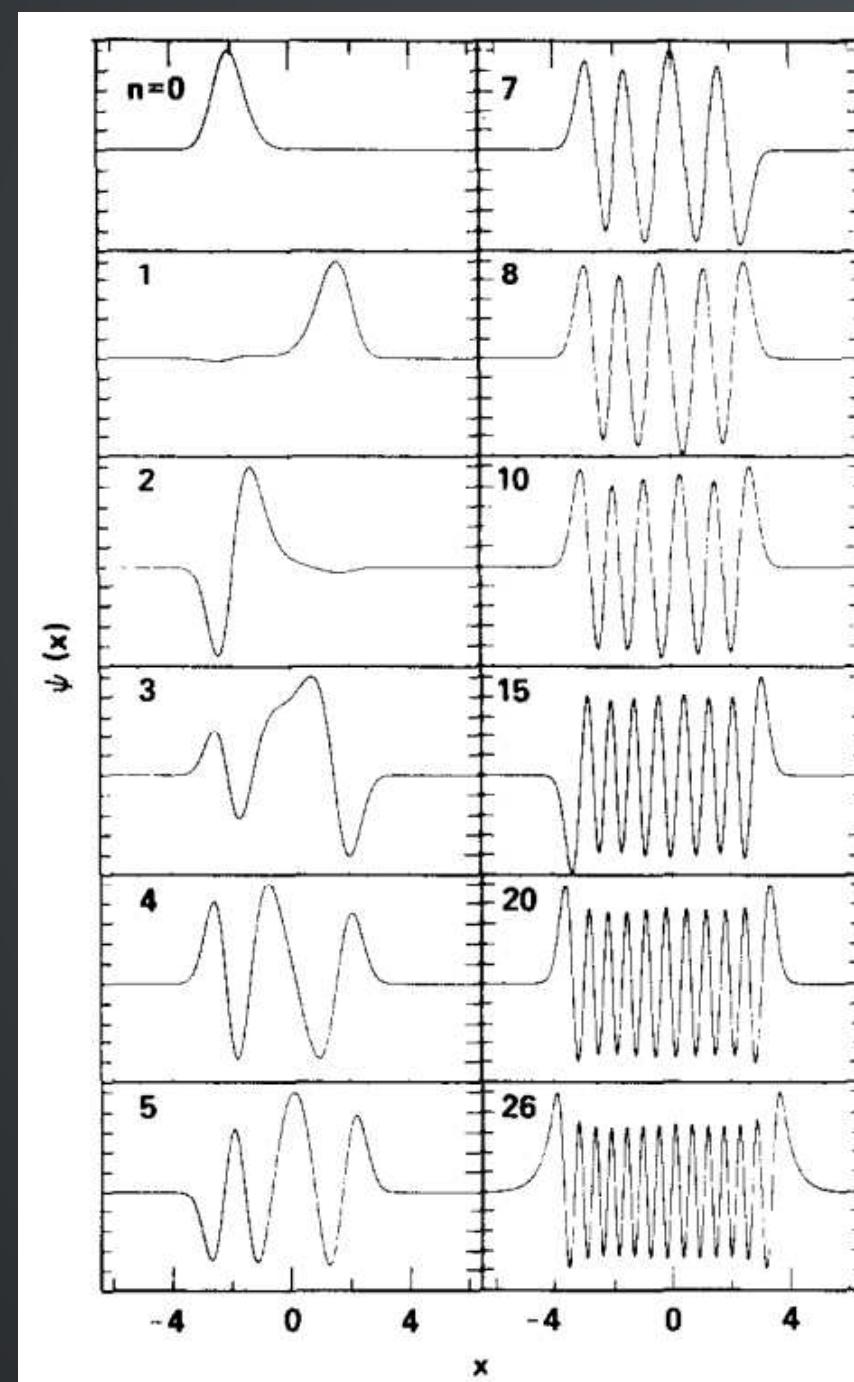
# 4º ESTUDO: AUTOVALORES E AUTOVETORES PARA POÇO DUPLO ASSIMÉTRICO

Primeiros 9  
autoestados  
deste potencial

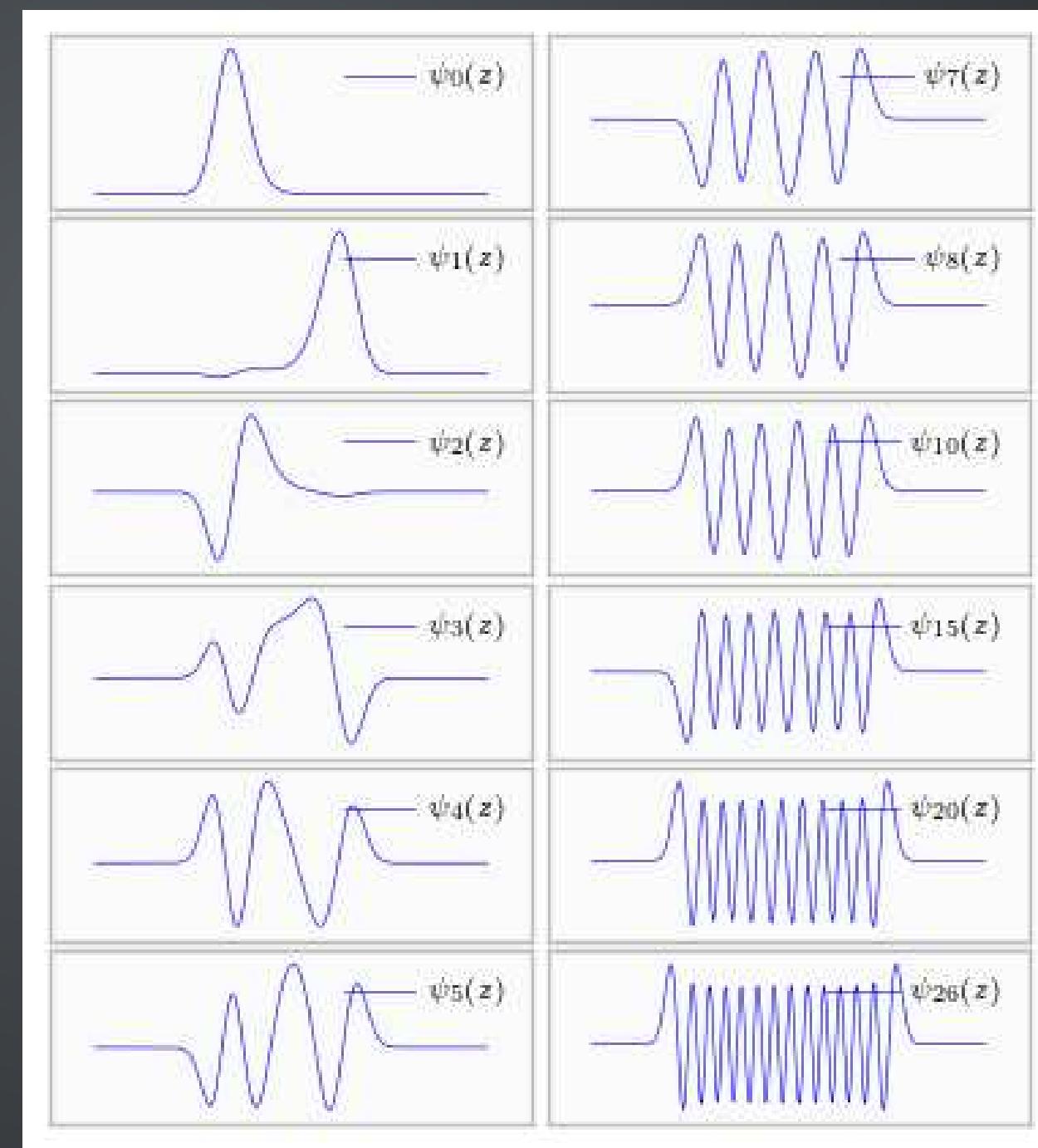


# 4º ESTUDO: AUTOVALORES E AUTOVETORES PARA POÇO DUPLO ASSIMÉTRICO

Feit et al (1982)

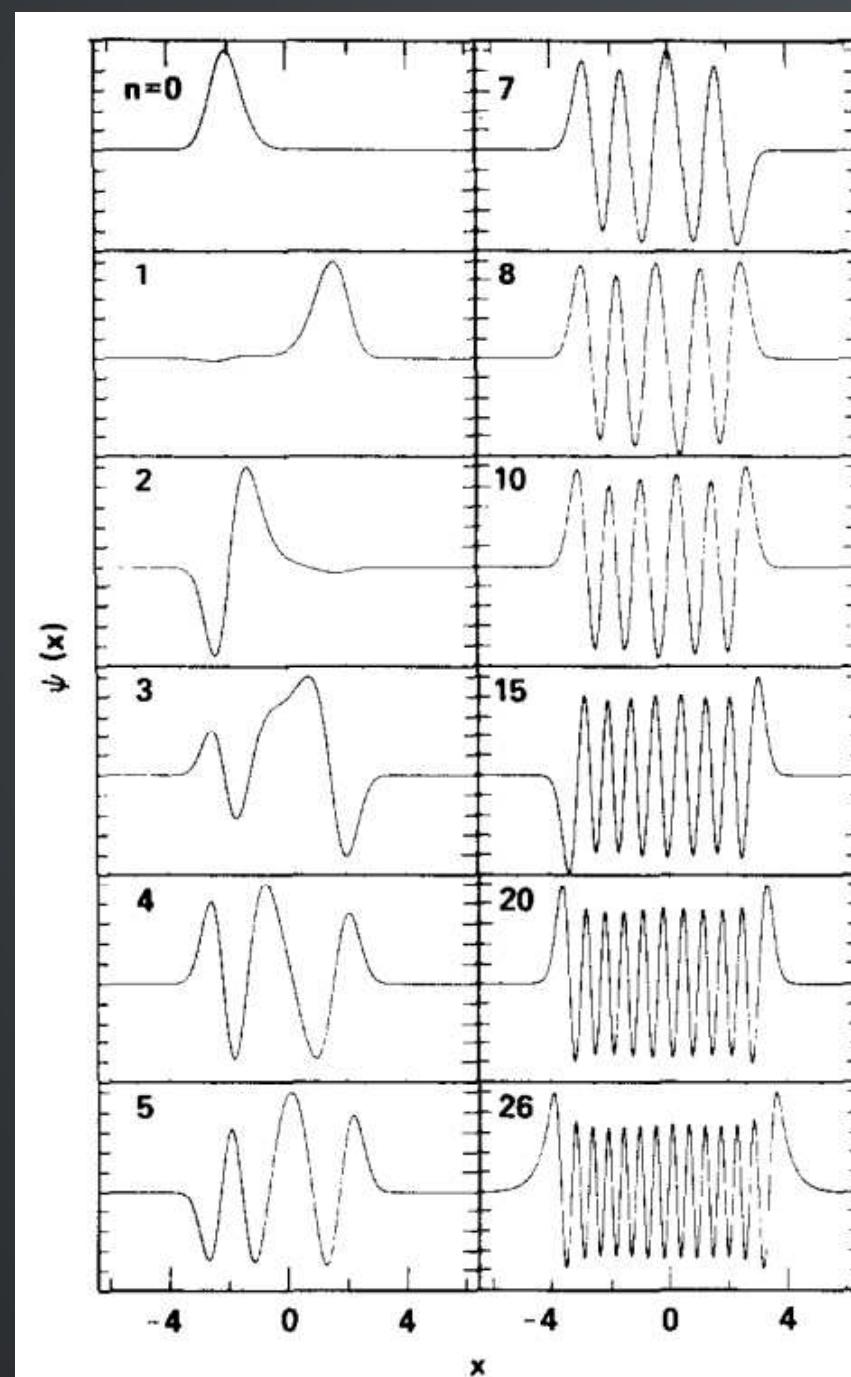


Nosso procedimento

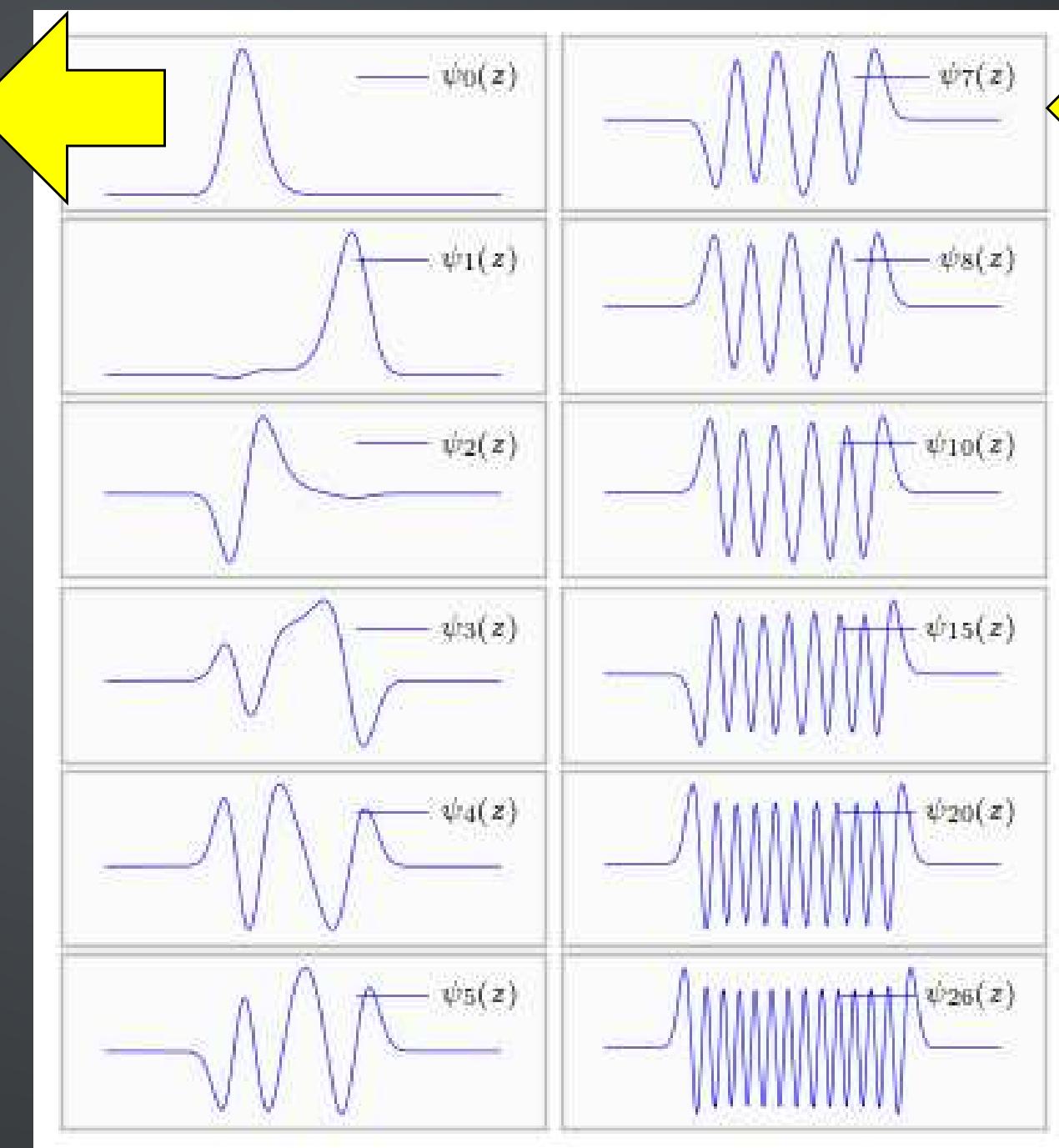


# 4º ESTUDO: AUTOVALORES E AUTOVETORES PARA POÇO DUPLO ASSIMÉTRICO

Feit et al (1982)

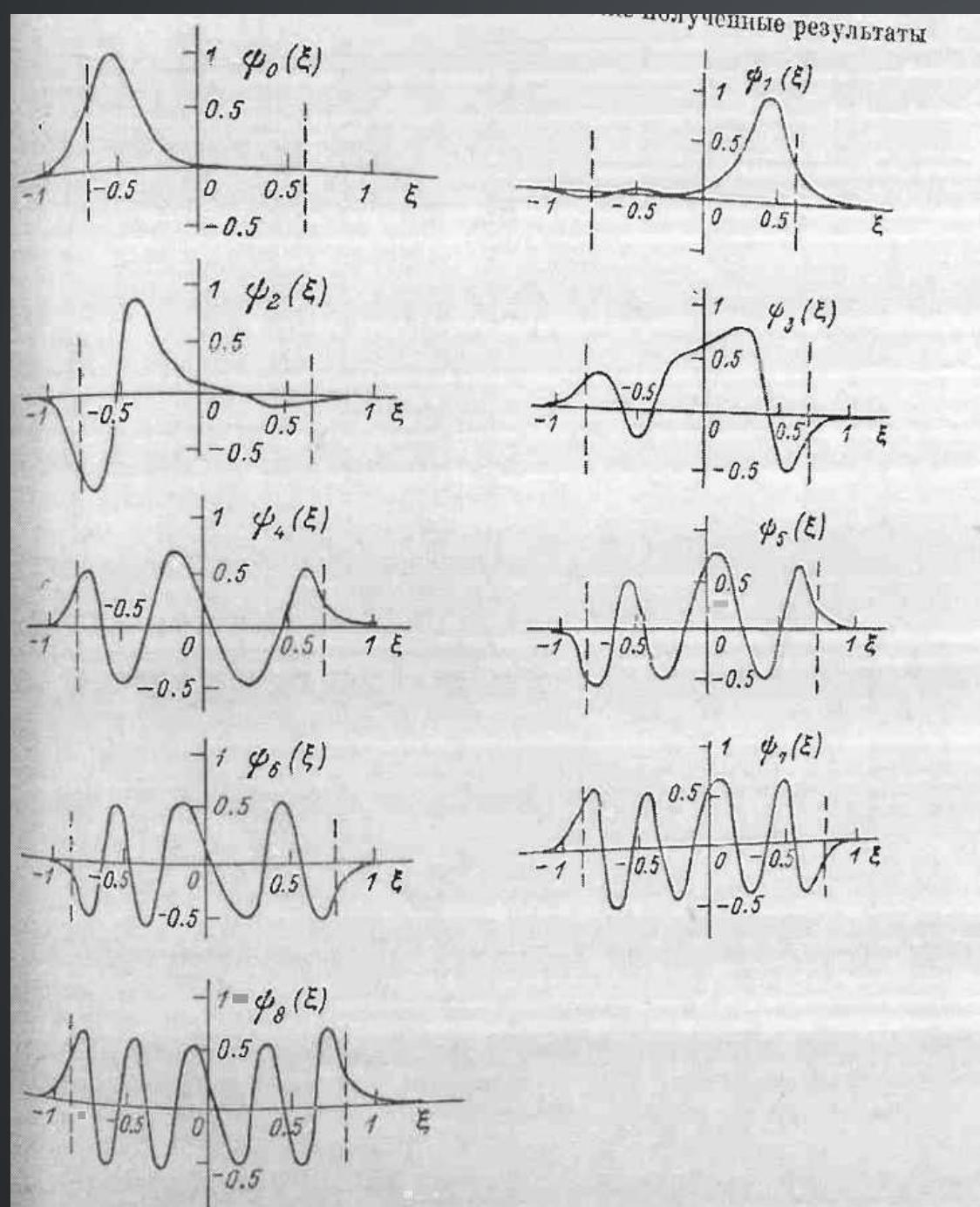


Nosso procedimento

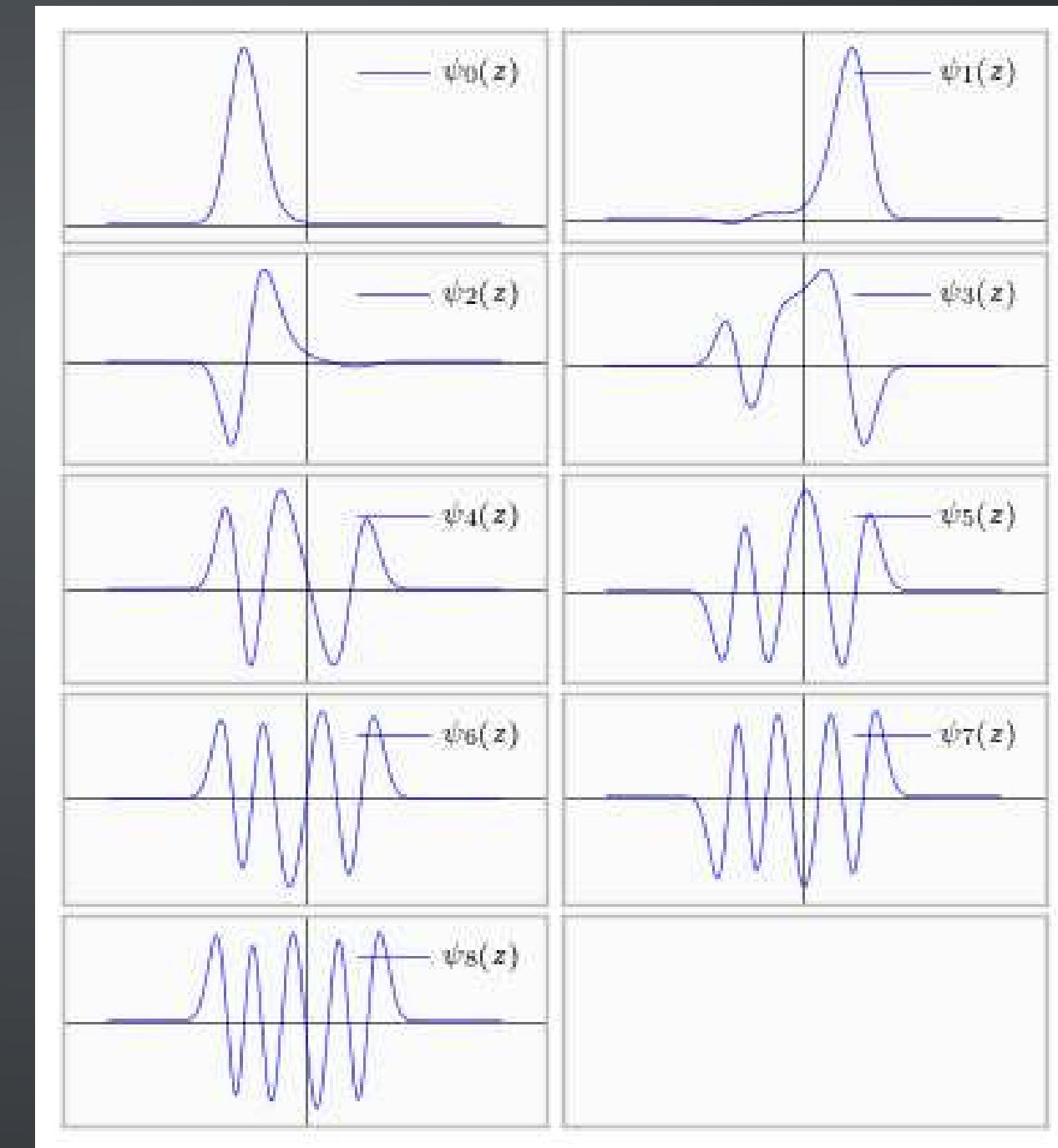


# 4º ESTUDO: AUTOVALORES E AUTOVETORES PARA POÇO DUPLO ASSIMÉTRICO

Zhirnov and Turev (1979)

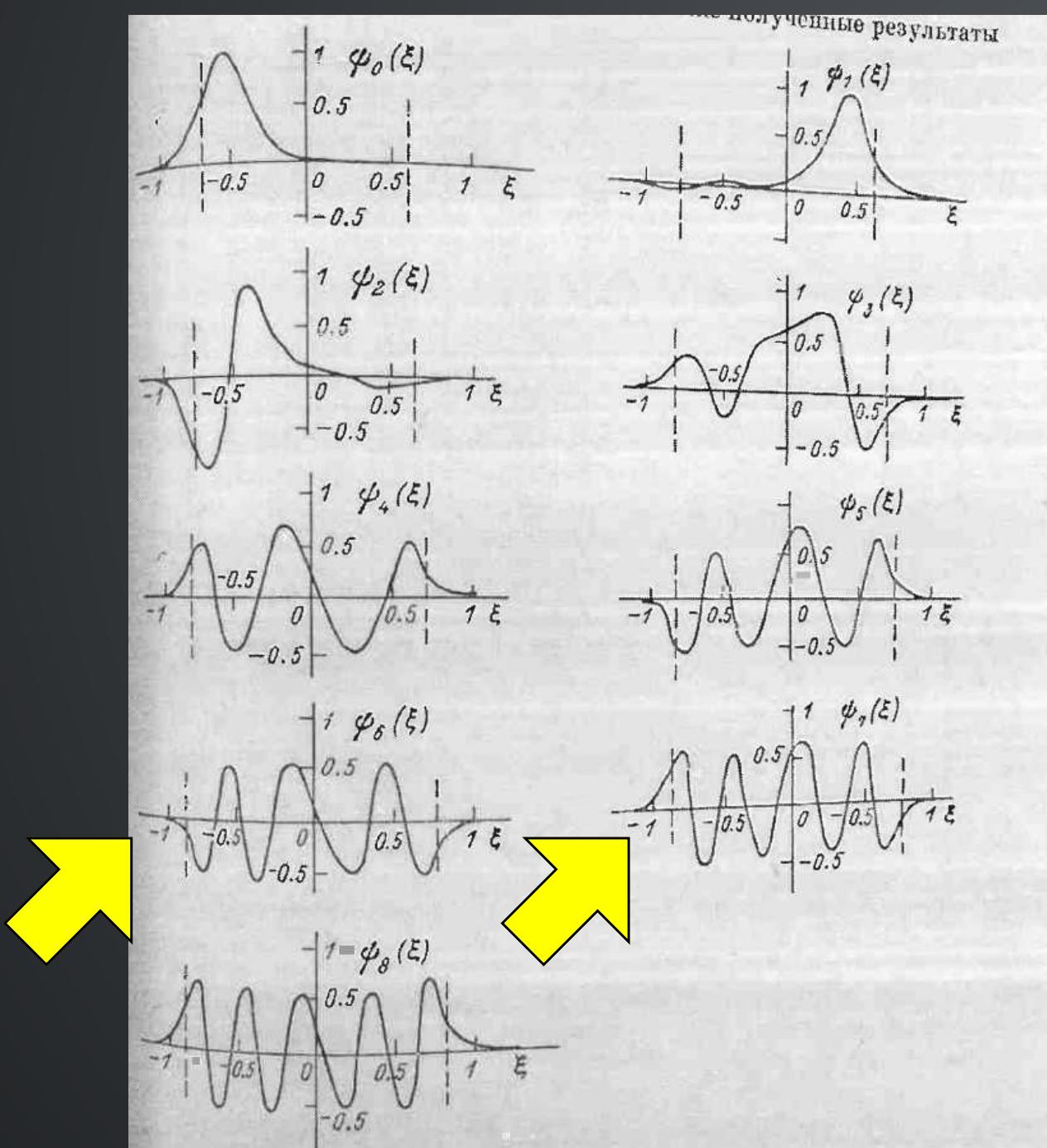


Nosso procedimento

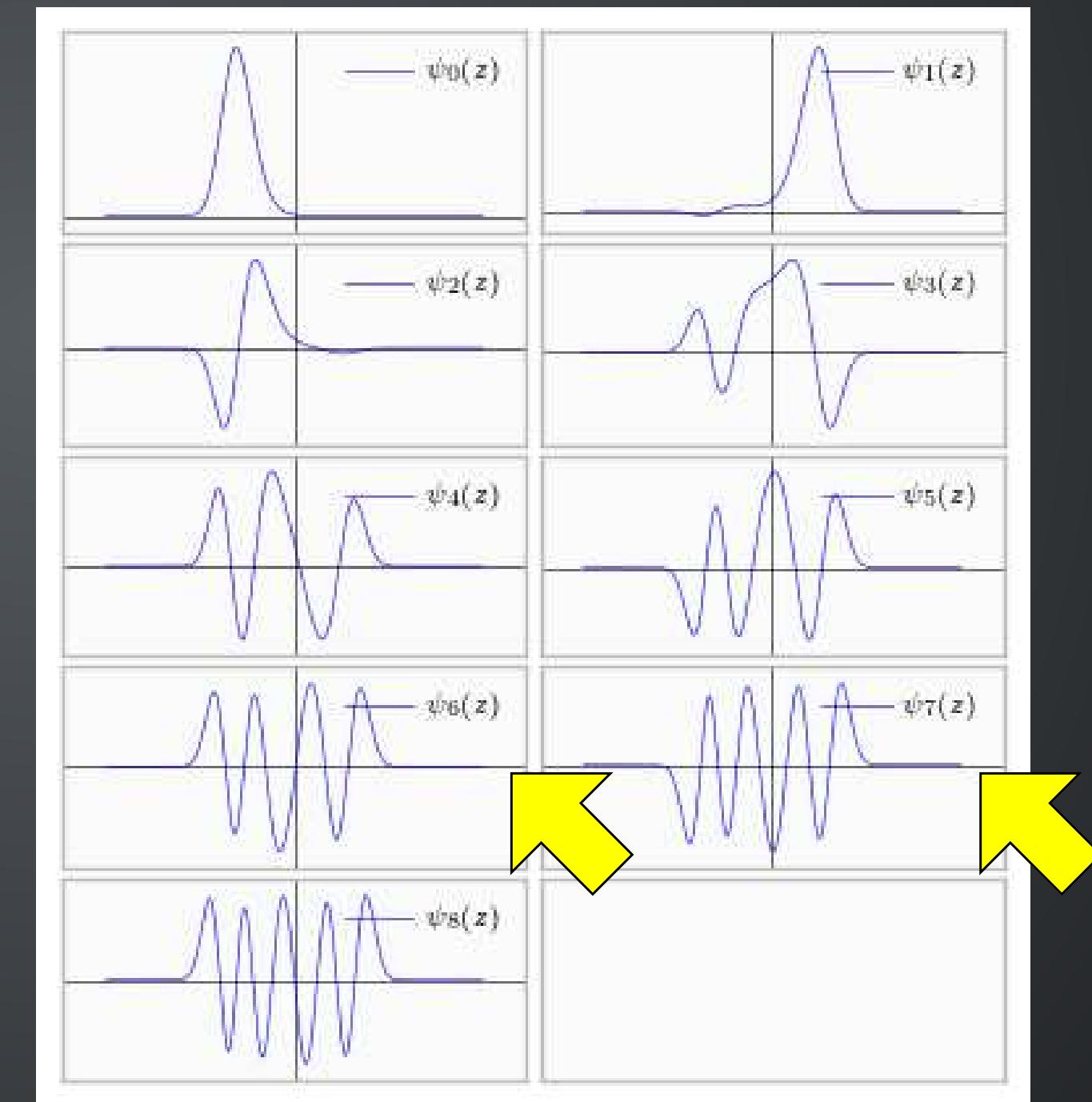


# 4º ESTUDO: AUTOVALORES E AUTOVETORES PARA POÇO DUPLO ASSIMÉTRICO

Zhirnov and Turev (1979)

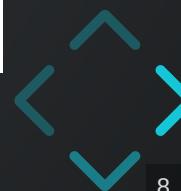


Nosso procedimento



# 4º ESTUDO: AUTOVALORES E AUTOVETORES PARA POÇO DUPLO ASSIMÉTRICO

Nível	Feit (numer.)	Zhirnov (anal.)	Este Trabalho	Dif. Feit (%)	Dif. Este Trab (%)
0	-12,258438	-12,258834	-12,258799	0,002945	0,000286
1	-6,045418	-6,045714	-6,045687	0,004449	0,000450
2	-5,286089	-5,286997	-5,286859	0,014564	0,002608
3	-0,646627	-0,647016	-0,646541	0,013302	0,073523
4	0,691204	0,690148	0,690390	0,117904	0,035095
5	4,053229	4,052007	4,052355	0,021568	0,008580
6	7,368937	7,367064	7,367668	0,017224	0,008202
7	11,235521	11,232955	11,233904	0,014394	0,008445
8	15,431918	15,428466	15,429861	0,013331	0,009039

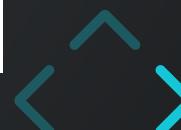


# 4º ESTUDO: AUTOVALORES E AUTOVETORES PARA POÇO DUPLO ASSIMÉTRICO

Nível	Feit (numer.)	Zhirnov (anal.)	Este Trabalho	Dif. Feit (%)	Dif. Este Trab (%)
0	-12,258438	-12,258834	-12,258799	0,002945	0,000286
1	-6,045418	-6,045714	-6,045687	0,004449	0,000450
2	-5,286089	-5,286997	-5,286859	0,014564	0,002608
3	-0,646627	-0,647016	-0,646541	0,013302	0,073523
4	0,691204	0,690148	0,690390	0,117904	0,035095
5	4,053229	4,052007	4,052355	0,021565	0,008580
6	7,368937	7,367064	7,367668	0,017224	0,008202
7	11,235521	11,232955	11,233904	0,014394	0,008445
8	15,431918	15,428466	15,429861	0,013331	0,009039

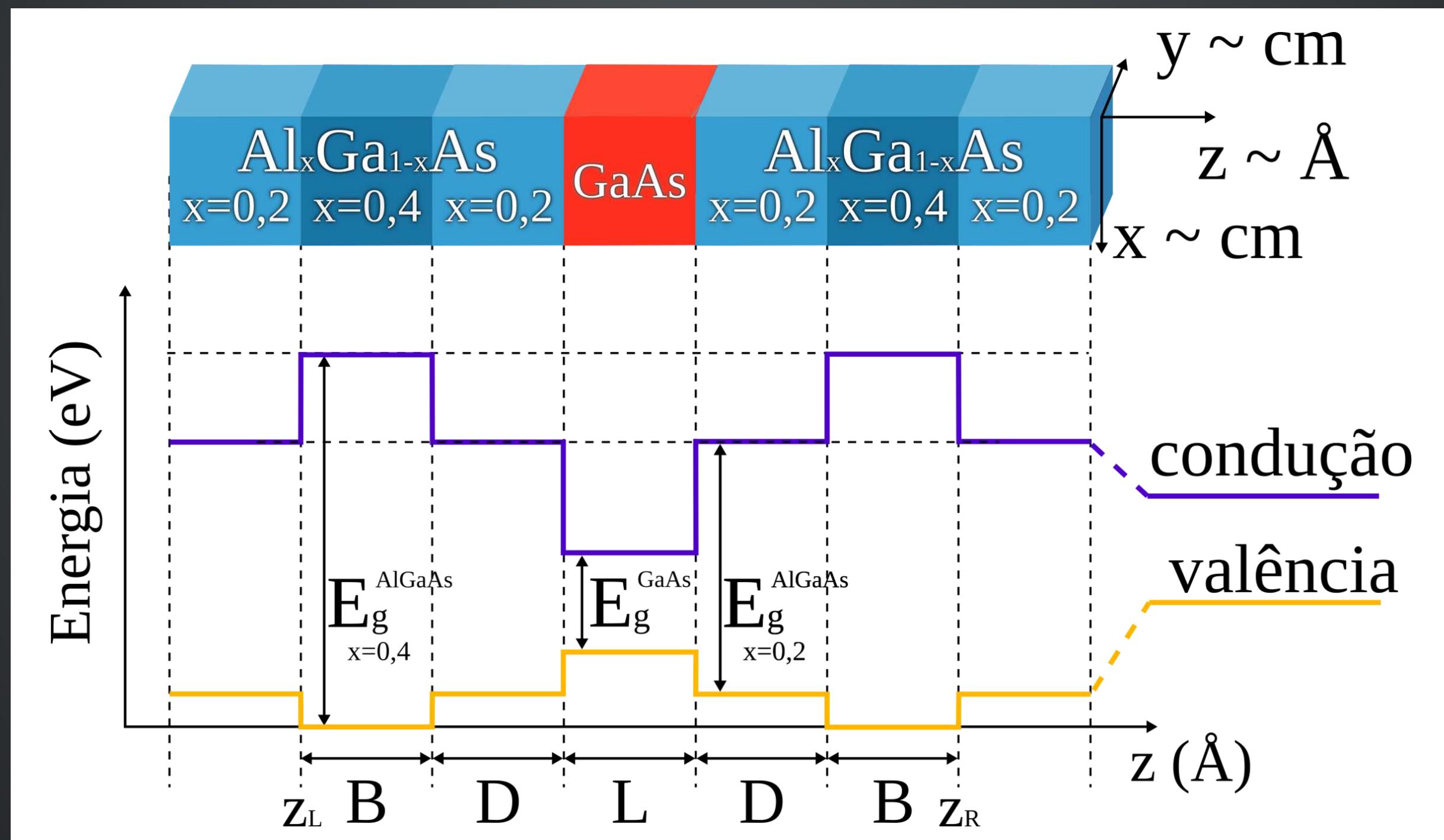
# 4º ESTUDO: AUTOVALORES E AUTOVETORES PARA POÇO DUPLO ASSIMÉTRICO

Nível	Feit (numer.)	Zhirnov (anal.)	Este Trabalho	Dif. Feit (%)	Dif. Este Trab (%)
0	-12,258438	-12,258834	-12,258799	0,002945	0,000286
1	-6,045418	-6,045714	-6,045687	0,004449	0,000450
2	-5,286089	-5,286997	-5,286859	0,014564	0,002608
3	-0,646627	-0,647016	-0,646541	0,013302	0,073523
4	0,691204	0,690148	0,690390	0,117904	0,035095
5	4,053229	4,052007	4,052355	0,021563	0,008580
6	7,368937	7,367064	7,367668	0,017224	0,008202
7	11,235521	11,232955	11,233904	0,014394	0,008445
8	15,431918	15,428466	15,429861	0,013331	0,009039



# 5º ESTUDO: FOTOCORRENTE E ABSORÇÃO EM POÇO COM DUPLA BARREIRA

Perfil de potencial do poço com dupla barreira



# 5º ESTUDO: FOTOCORRENTE E ABSORÇÃO EM POÇO COM DUPLA BARREIRA

---

Por que um poço com dupla barreira?

- Especialistas sugerem que diminui corrente de escuro:

*Infrared photocurrent with one- and two-photon absorptions in a double-barrier quantum well system*

M.H. Degani, M.Z. Maialle, P.F. Farinas and N. Studart, J. Appl. Phys. 110, 104313 (2011)

- Para termos uma base de comparação para nossos resultados



# 5º ESTUDO: FOTOCORRENTE E ABSORÇÃO EM POÇO COM DUPLA BARREIRA

Por que um poço com dupla barreira?

- Especialistas sugerem que diminui corrente de escuro:

*Infrared photocurrent with one- and two-photon absorptions in a double-barrier quantum well system*

M.H. Degani, M.Z. Maialle, P.F. Farinas and N. Studart, J. Appl. Phys. 110, 04313 (2011)

- Para termos uma base de comparação para os resultados

**No contexto de fotodetectores, corrente de escuro é um fenômeno indesejado onde existe um corrente elétrica mesmo sem a incidência de radiação, por efeitos térmicos ou por criação e aniquilação de elétrons e buracos**



# 5º ESTUDO: FOTOCORRENTE E ABSORÇÃO EM POÇO COM DUPLA BARREIRA

---

Por que calcular espectros de fotocorrente e absorção?

- parâmetros para análise de fotodetectores
- espectro de absorção indica a frequência onde elétrons absorvem fótons
- espectro de fotocorrente indica corrente elétrica devida a elétrons que excitam e tunelam por uma das barreiras
- estas duas informações são complementares



# 5º ESTUDO: FOTOCORRENTE E ABSORÇÃO EM POÇO COM DUPLA BARREIRA

---

Nós calculamos

- Autovalores e Autovetores
  - Evolução em tempo imaginário + ortogonalização de Gram-Schmidt
  - Iteração Inversa
- Evolução temporal
  - Split-Step FFT (Pseudo-Espectral)
    - A massa efetiva pode ser considerada constante por toda a estrutura, como pontuado pelos autores



# 5º ESTUDO: FOTOCORRENTE E ABSORÇÃO EM POÇO COM DUPLA BARREIRA

---

Como se calcula o espectro de fotocorrente?

1. Aplicação de bias sobre estrutura
2. Cálculo de autovalores e autovetores
3. Estado inicial: estado fundamental
4. Aplicação do campo elétrico (perturbação)
5. Evolução temporal do estado inicial sob influência do campo elétrico

Este procedimento é repetido para campos elétricos com diferentes frequências.

O que esperamos ver?



# 5º ESTUDO: FOTOCORRENTE E ABSORÇÃO EM POÇO COM DUPLA BARREIRA

---

Elétron excitado pode tunelar:

- A diferença de potencial estabelece direção preferencial
- Elétron que tunela "anda" em direção ao limite do sistema

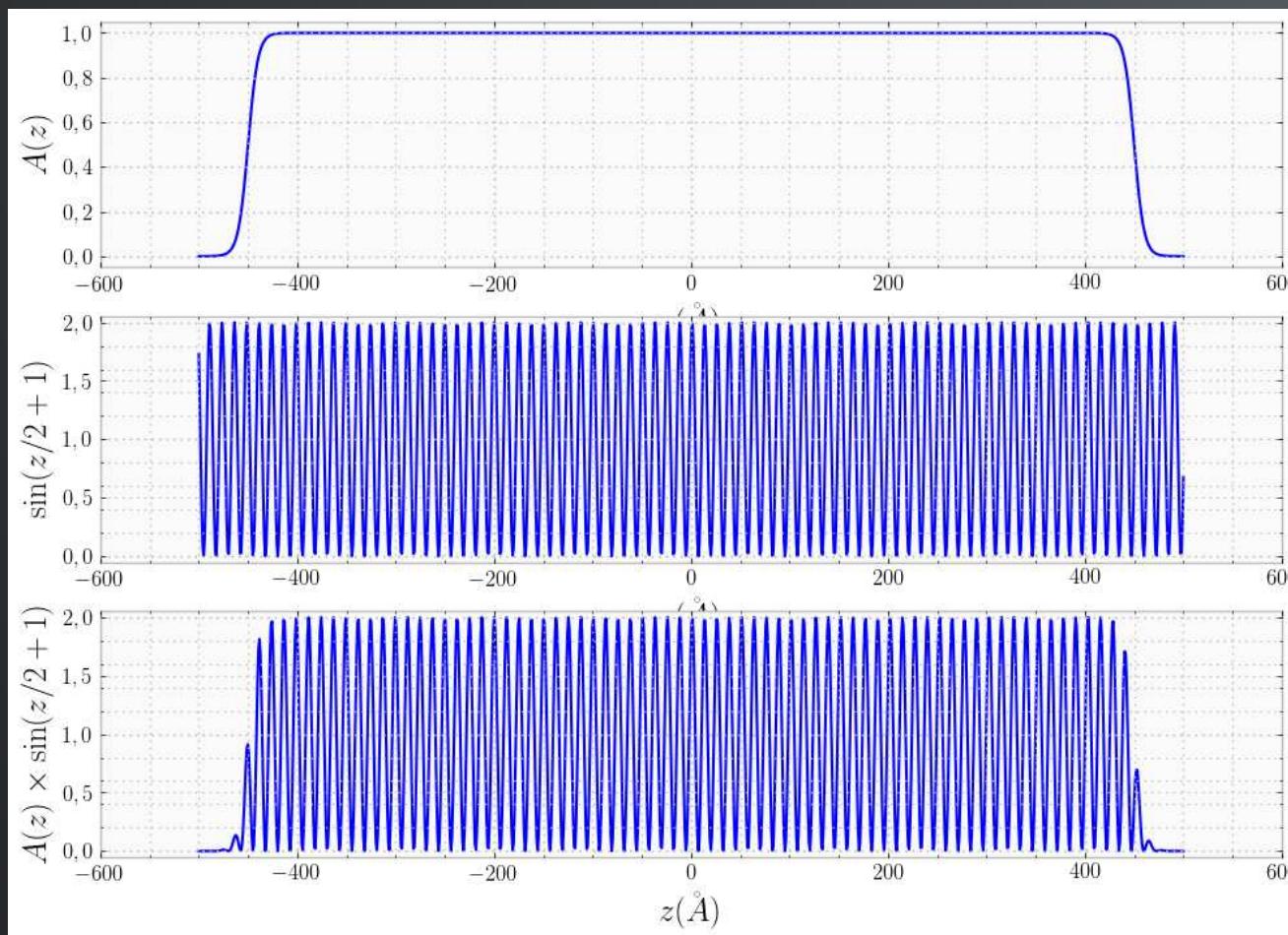
Mas e quando o elétron atinge o limite?



# 5º ESTUDO: FOTOCORRENTE E ABSORÇÃO EM POÇO COM DUPLA BARREIRA

Potencial absorvedor evita a onda chegar nas extremidades:

- Diversos autores sugerem potencial óptico (imaginário)
- em nossos testes, para o método Pseudo-Espectral, este abaixo funcionou melhor
- ajustar parâmetros não é tarefa fácil



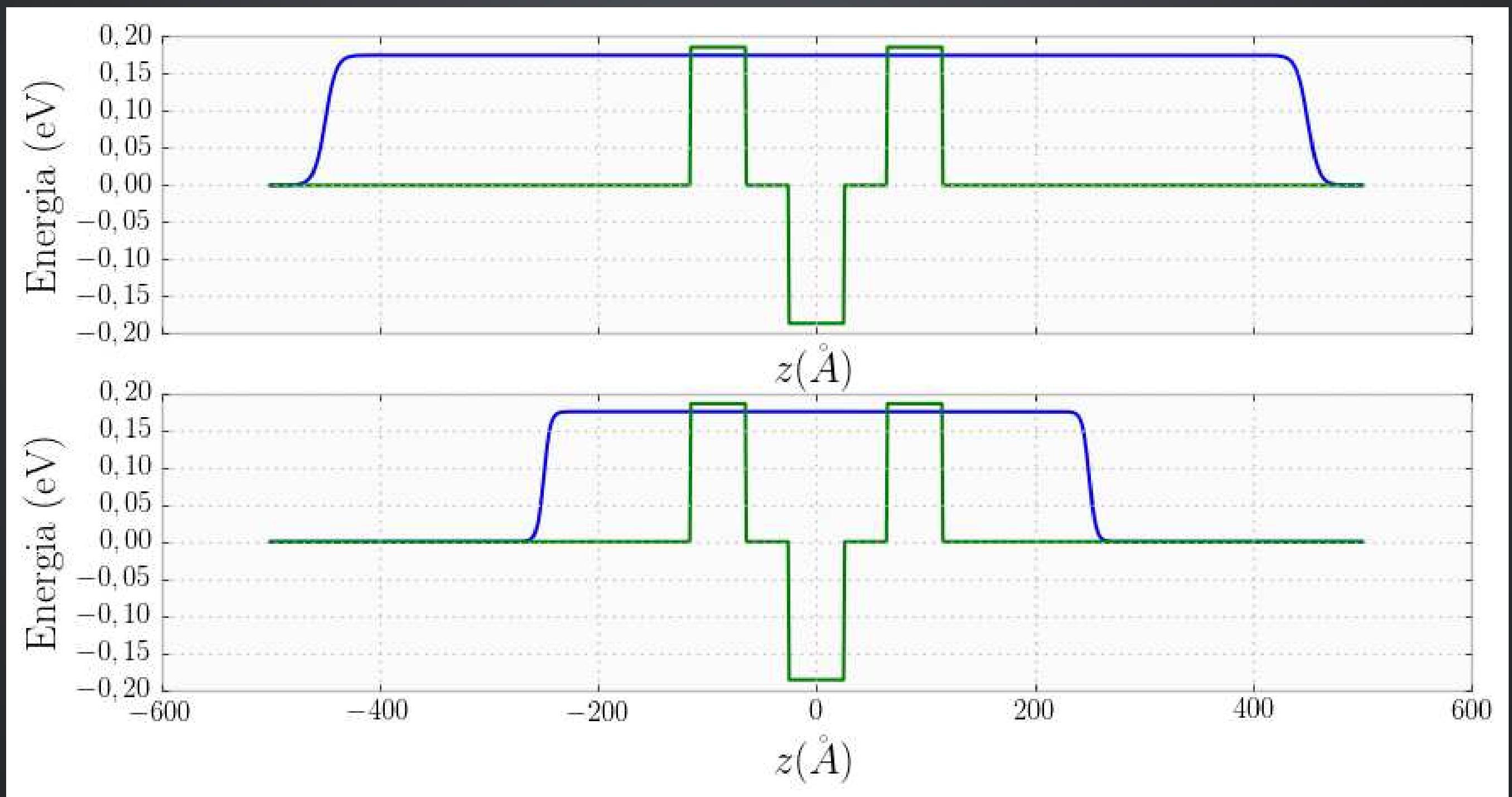
Precisamos de um grid maior para fotocorrente e um menor para absorção

Fizemos ajustes na base da tentativa e erro



# 5º ESTUDO: FOTOCORRENTE E ABSORÇÃO EM POÇO COM DUPLA BARREIRA

Possibilidades de ajuste para o potencial absorvedor

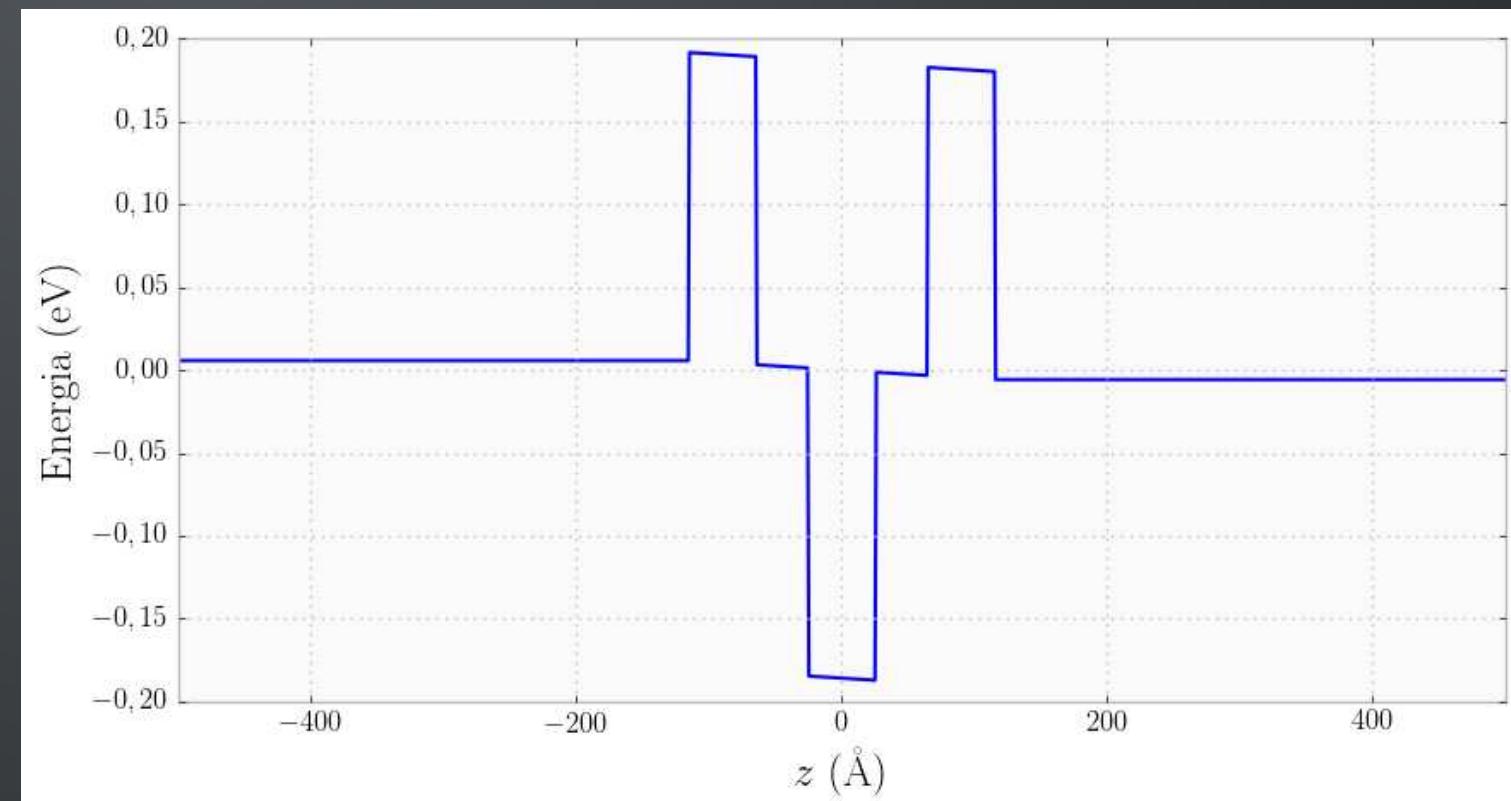
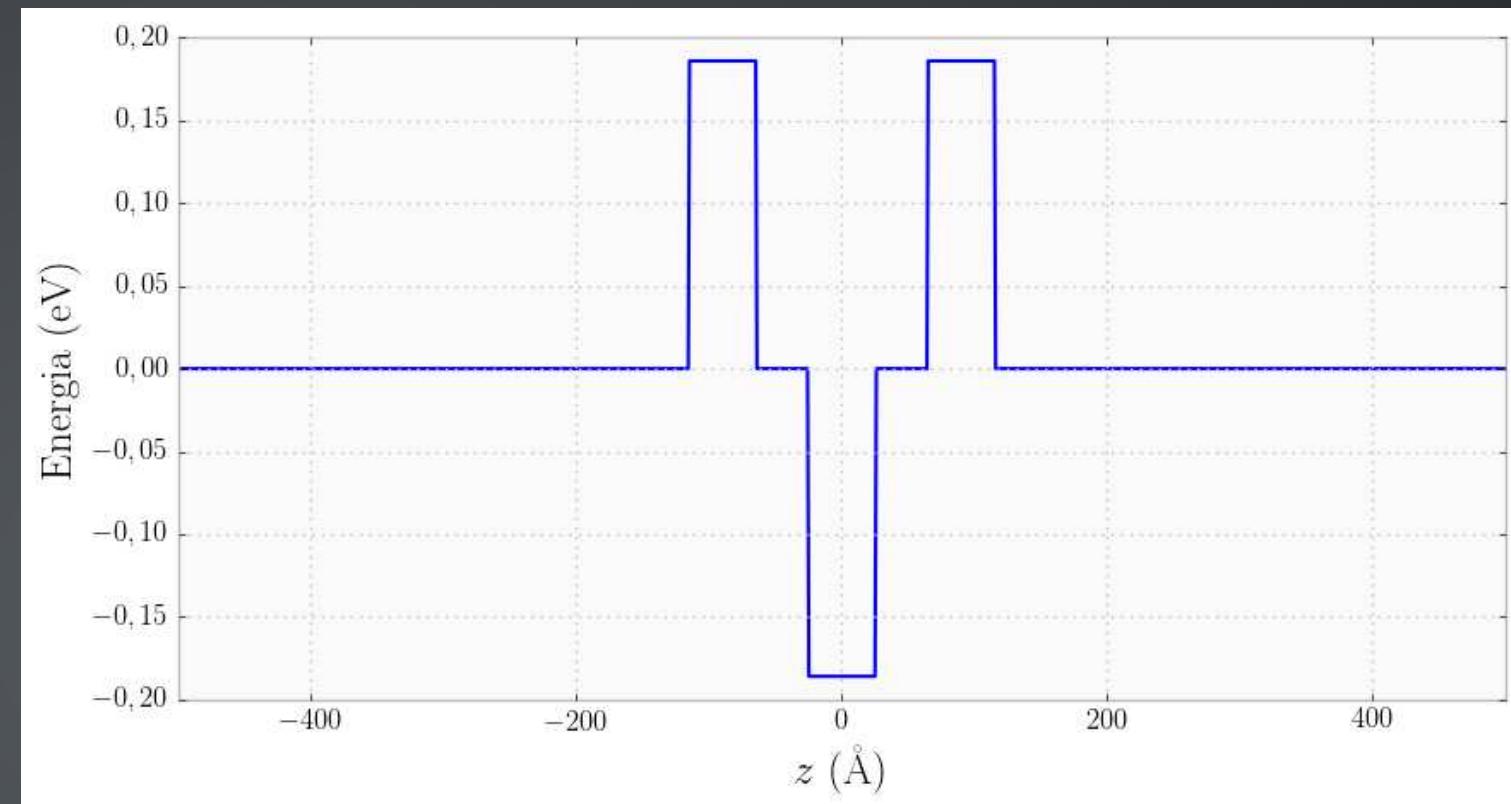


# 5º ESTUDO: FOTOCORRENTE E ABSORÇÃO EM POÇO COM DUPLA BARREIRA

Calculando a fotocorrente

1. Aplicação de bias
2. Autovalores e autovetores
3. Estado inicial  $\psi(z, 0) = \psi_0(z)$
4. Campo elétrico (perturbação)
5. Evolução temporal

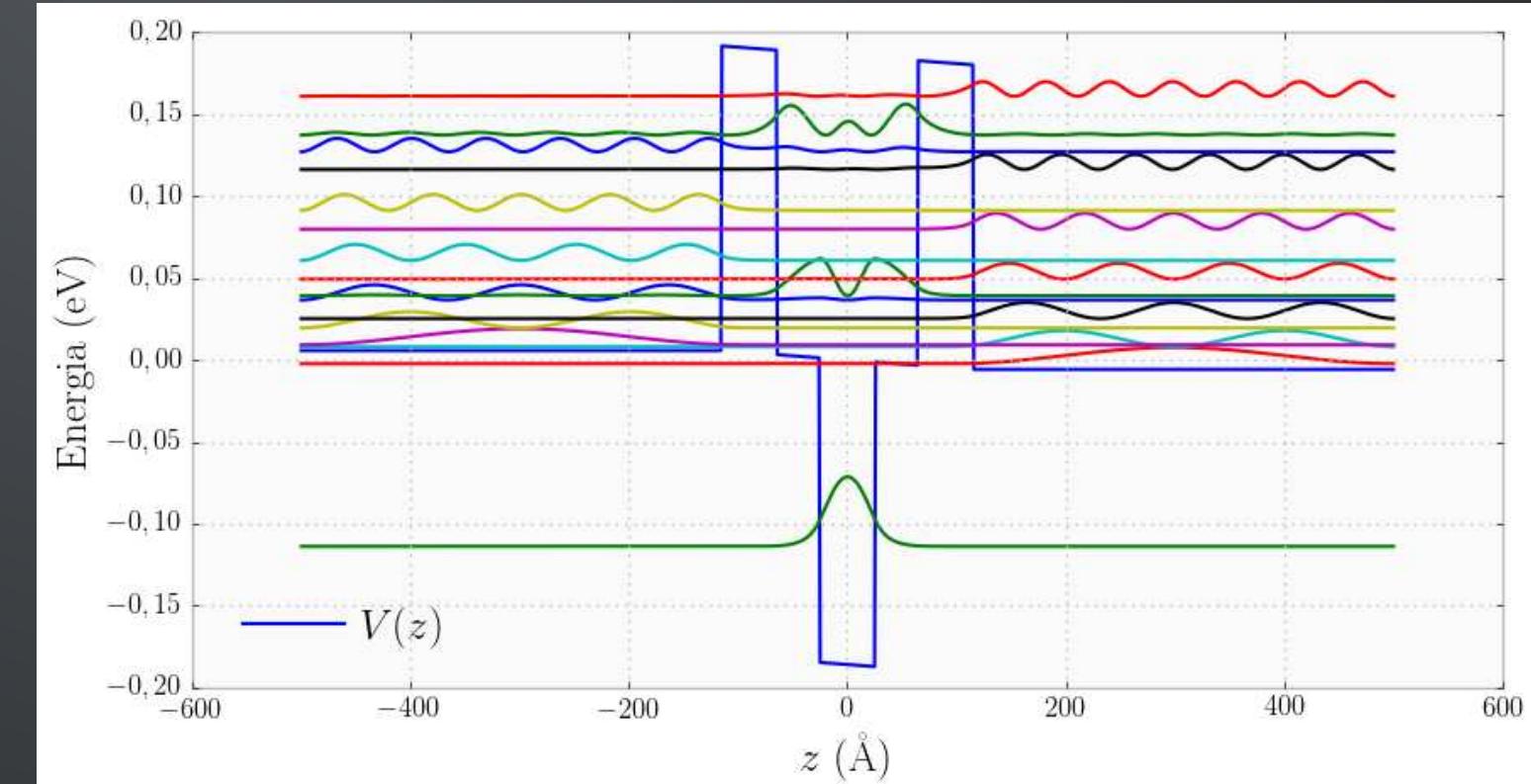
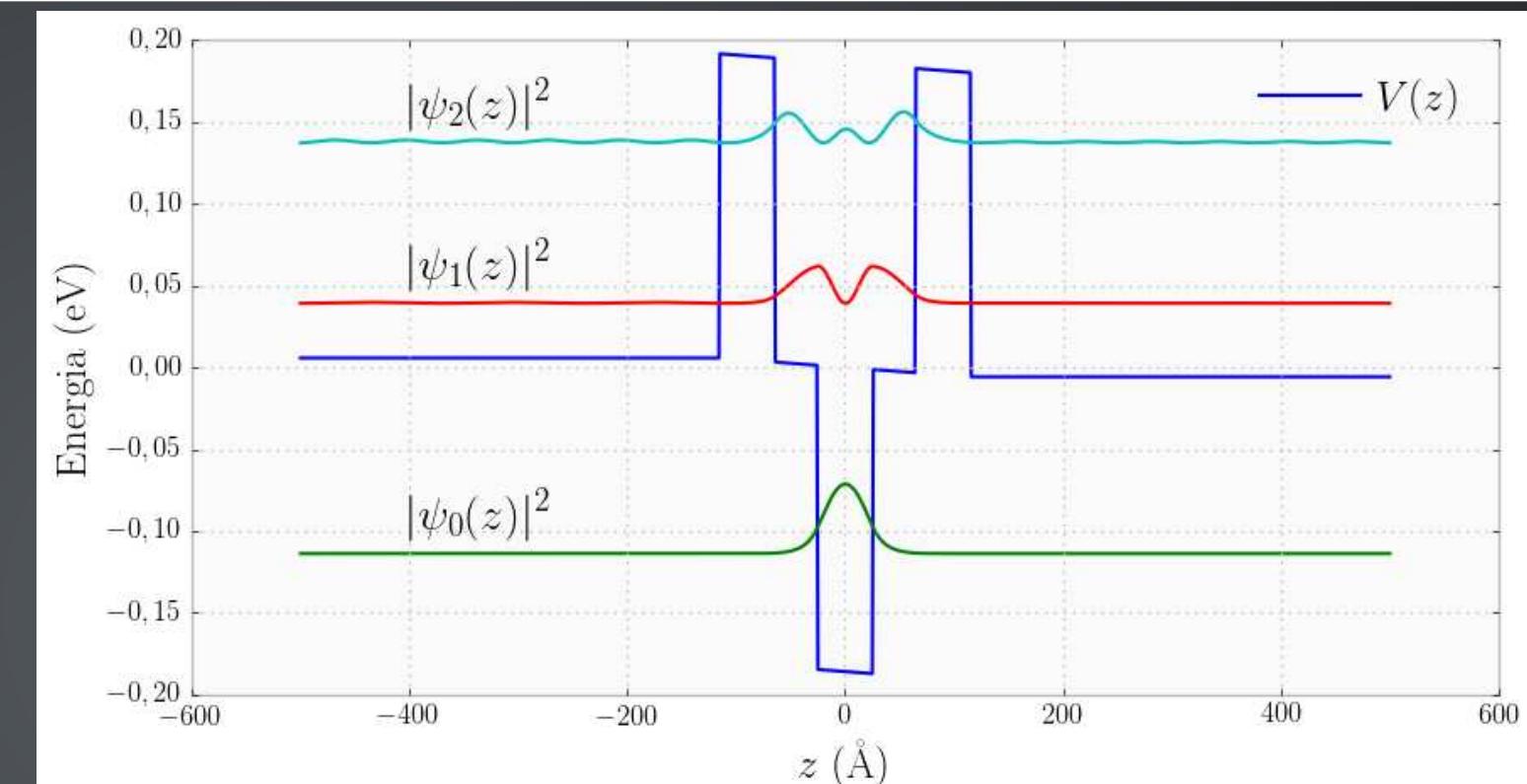
$$V'(z) = V(z) - eF_{\text{est}}z$$



# 5º ESTUDO: FOTOCORRENTE E ABSORÇÃO EM POÇO COM DUPLA BARREIRA

Calculando a fotocorrente

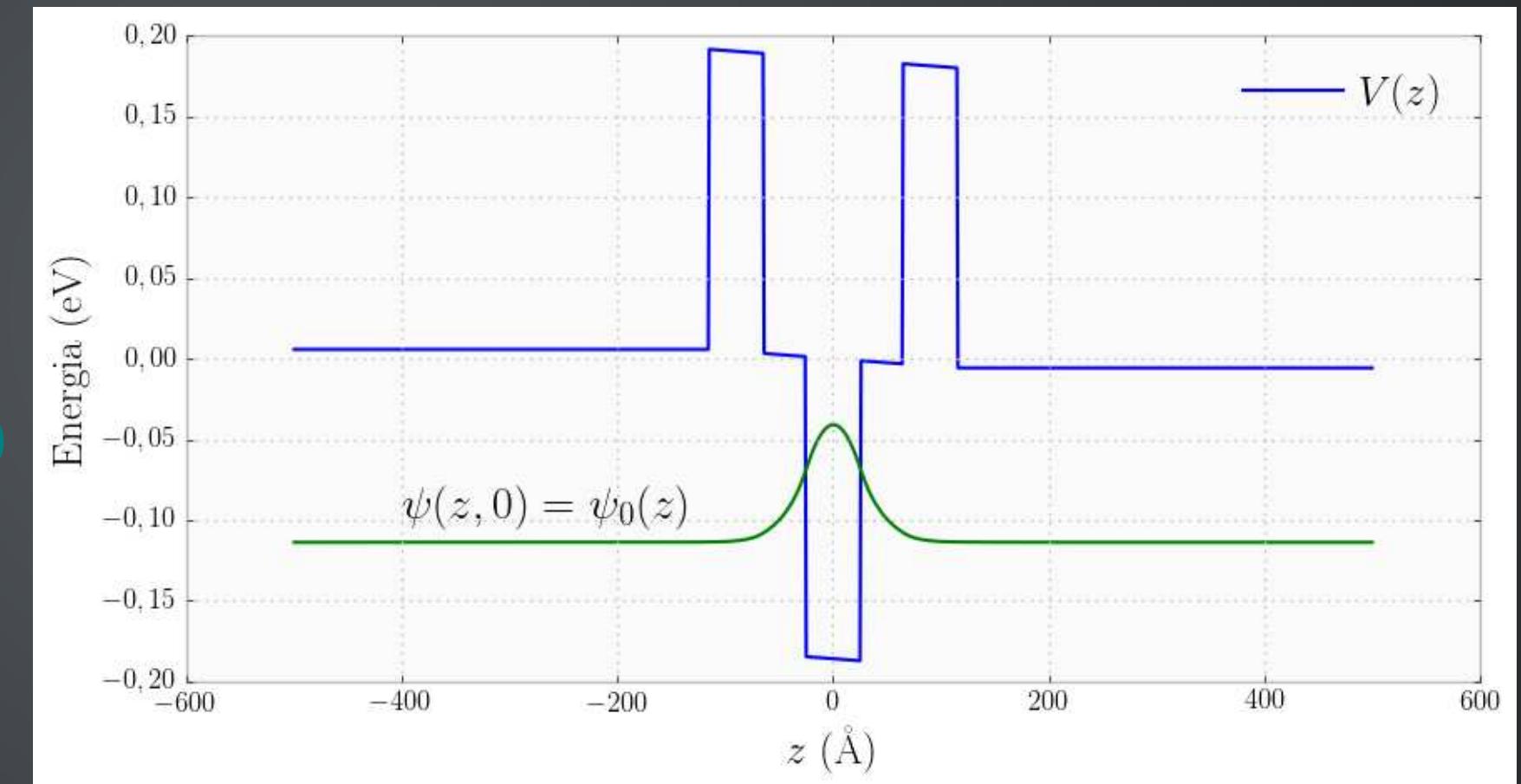
1. Aplicação de bias
2. Autovalores e autovetores
3. Estado inicial  $\psi(z, 0) = \psi_0(z)$
4. Campo elétrico (perturbação)
5. Evolução temporal



# 5º ESTUDO: FOTOCORRENTE E ABSORÇÃO EM POÇO COM DUPLA BARREIRA

Calculando a fotocorrente

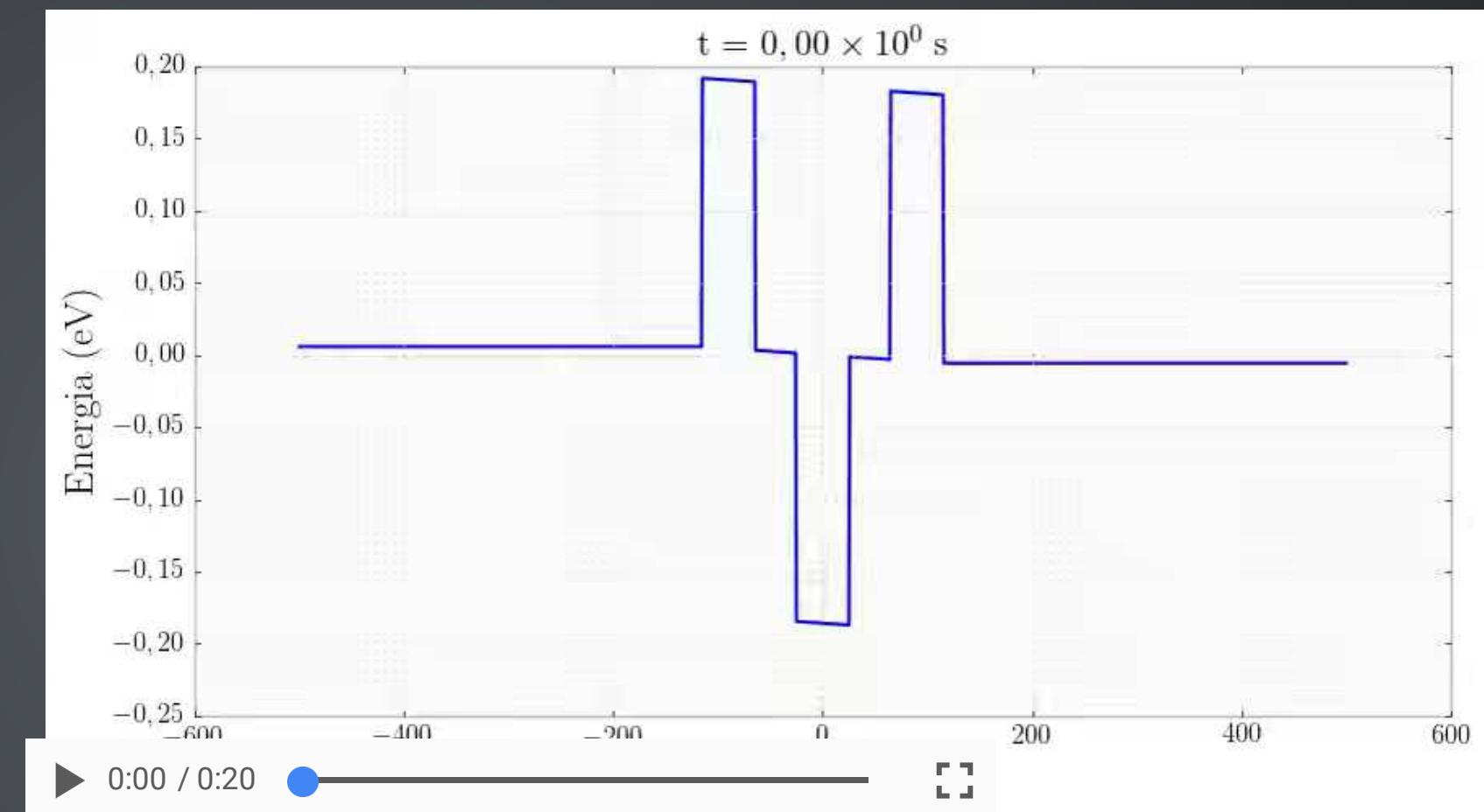
1. Aplicação de bias
2. Autovalores e autovetores
3. Estado inicial  $\psi(z, 0) = \psi_0(z)$
4. Campo elétrico (perturbação)
5. Evolução temporal



# 5º ESTUDO: FOTOCORRENTE E ABSORÇÃO EM POÇO COM DUPLA BARREIRA

Calculando a fotocorrente

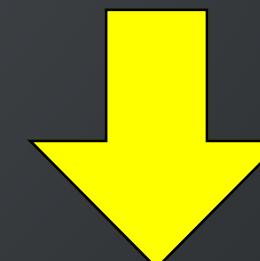
1. Aplicação de bias
2. Autovalores e autovetores
3. Estado inicial  $\psi(z, 0) = \psi_0(z)$
4. Campo elétrico (perturbação)
5. Evolução temporal



$$V'(z) = V(z) - eF_{\text{est}}z$$



$$\omega = 2\pi\nu = \frac{2\pi c}{\lambda}$$



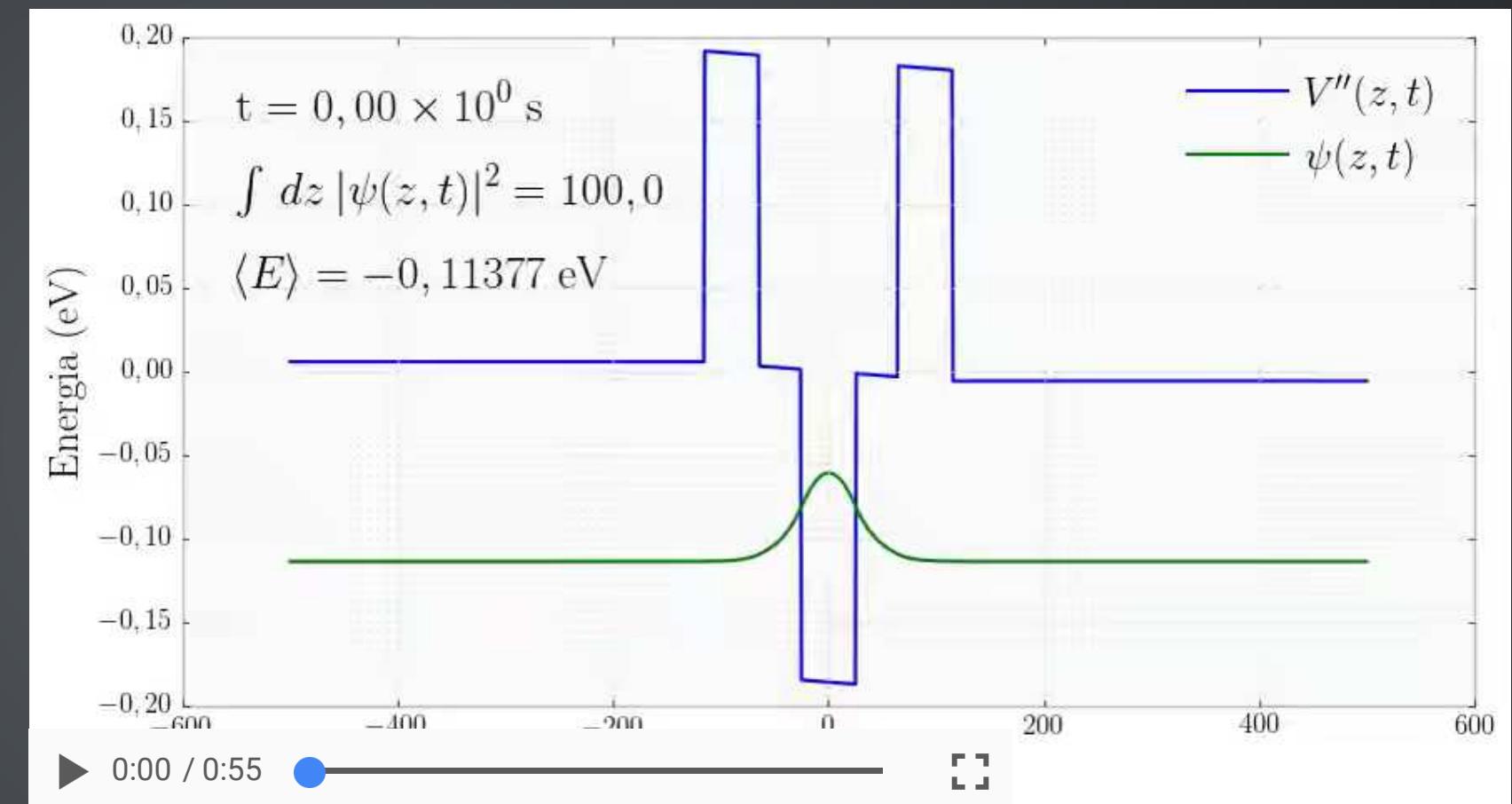
$$V''(z) = V(z) - eF_{\text{est}}z + eF_{\text{osc}} \sin(\omega t)$$

$$\lambda \gg L$$

# 5º ESTUDO: FOTOCORRENTE E ABSORÇÃO EM POÇO COM DUPLA BARREIRA

Calculando a fotocorrente

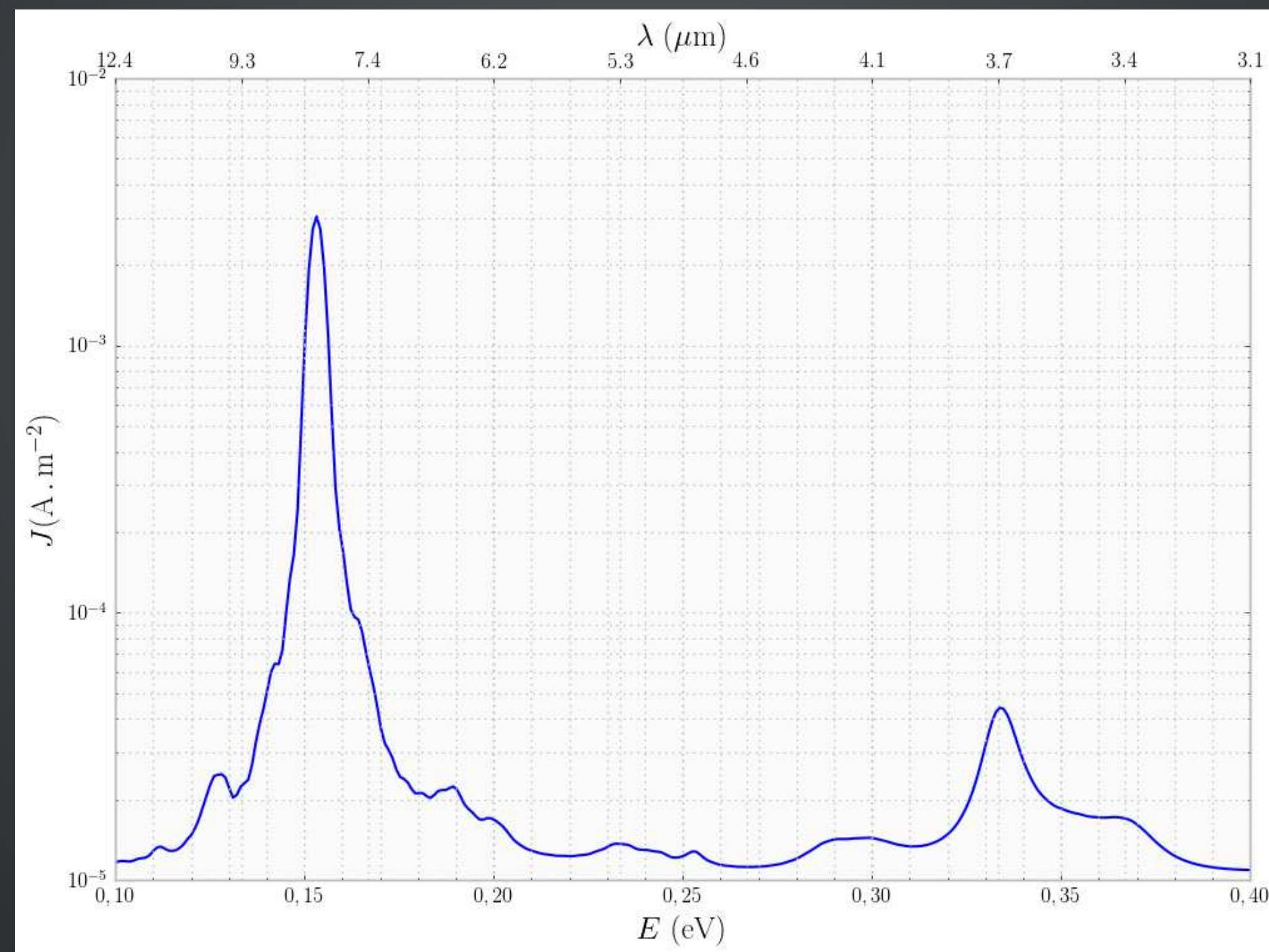
1. Aplicação de bias
2. Autovalores e autovetores
3. Estado inicial  $\psi(z, 0) = \psi_0(z)$
4. Campo elétrico (perturbação)
5. Evolução temporal



$$\lambda \approx 8,1 \mu\text{m} \implies \omega \approx 2,32 \times 10^{14} \text{ rad/s} \implies E \approx 153 \text{ meV}$$

# 5º ESTUDO: FOTOCORRENTE E ABSORÇÃO EM POÇO COM DUPLA BARREIRA

Densidade de corrente em função da energia do campo elétrico



# 5º ESTUDO: FOTOCORRENTE E ABSORÇÃO EM POÇO COM DUPLA BARREIRA

---

Como se calcula o espectro de absorção?

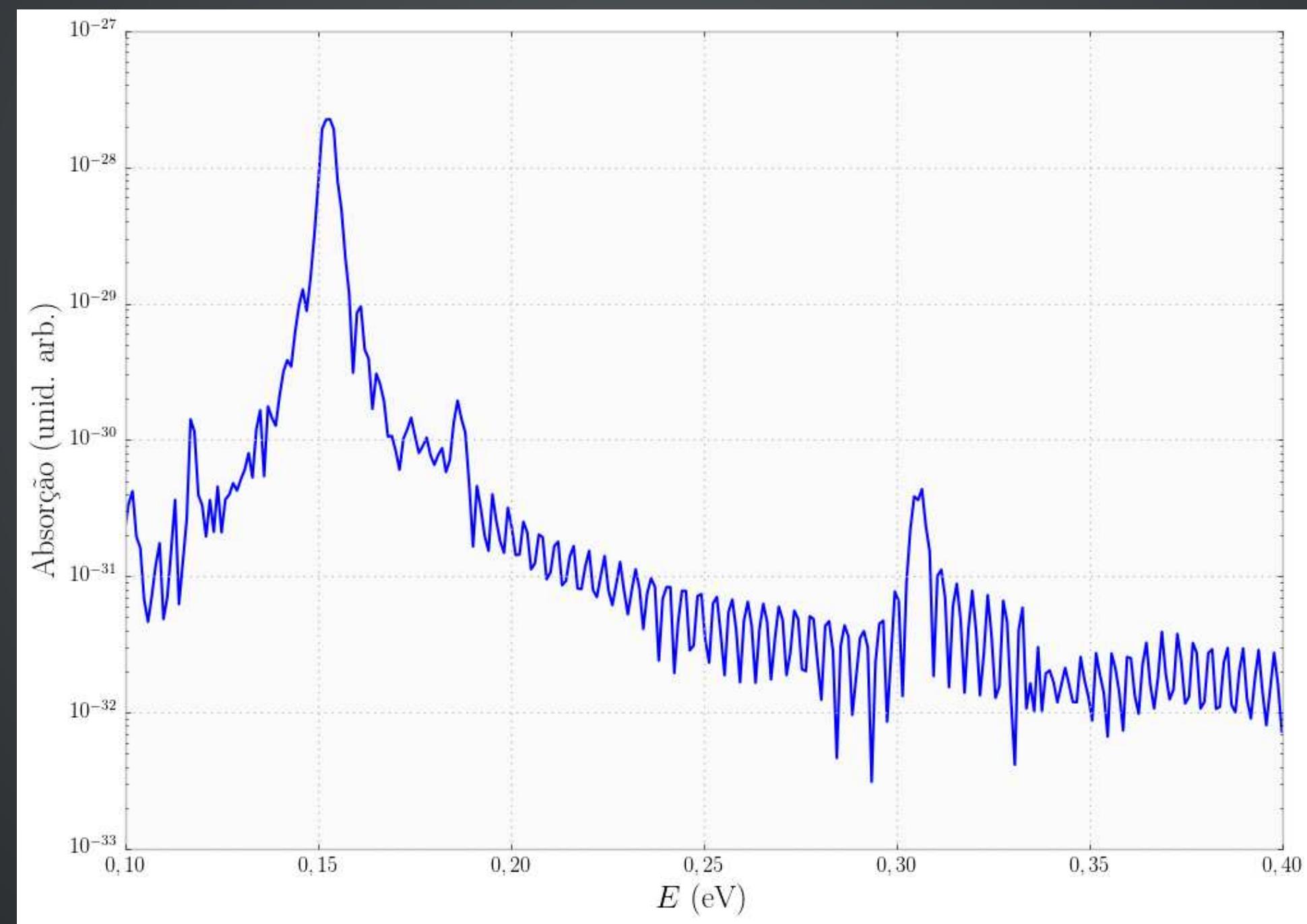
1. Cálculo de autovalores e autovetores
2. Estado inicial: estado fundamental
3. Aplicação do campo elétrico
4. Evolução temporal do Estado inicial sob influência do campo elétrico
5. Cálculo do overlap entre este estado que está evoluindo e a evolução temporal dos autoestados excitados

Este procedimento é repetido para campos elétricos com diferentes frequências.



# 5º ESTUDO: FOTOCORRENTE E ABSORÇÃO EM POÇO COM DUPLA BARREIRA

Espectro de absorção obtido com o mesmo potencial absorvedor



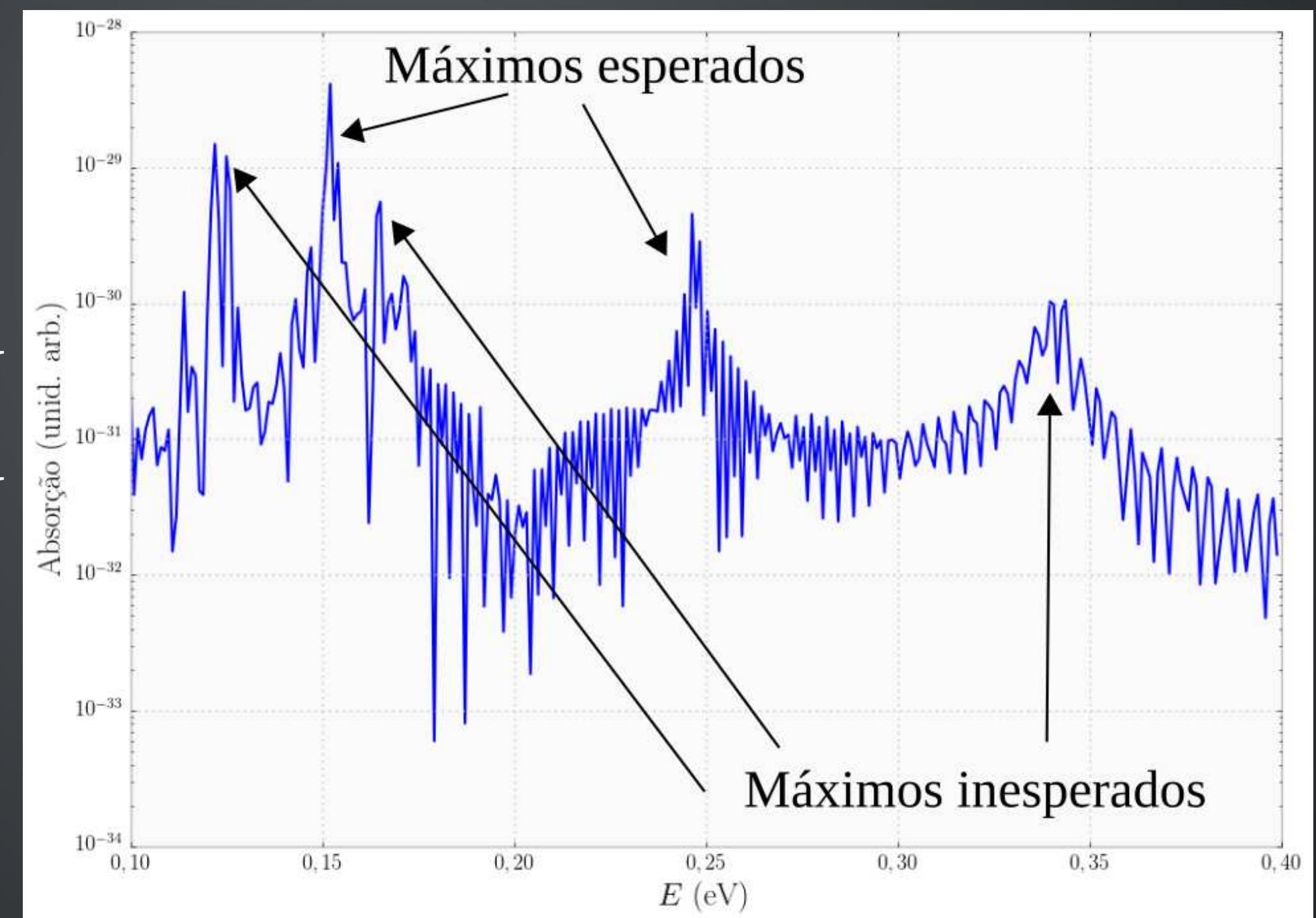
# 5º ESTUDO: FOTOCORRENTE E ABSORÇÃO EM POÇO COM DUPLA BARREIRA

Espectro de absorção com potencial absorvedor mais estreito

Esperados

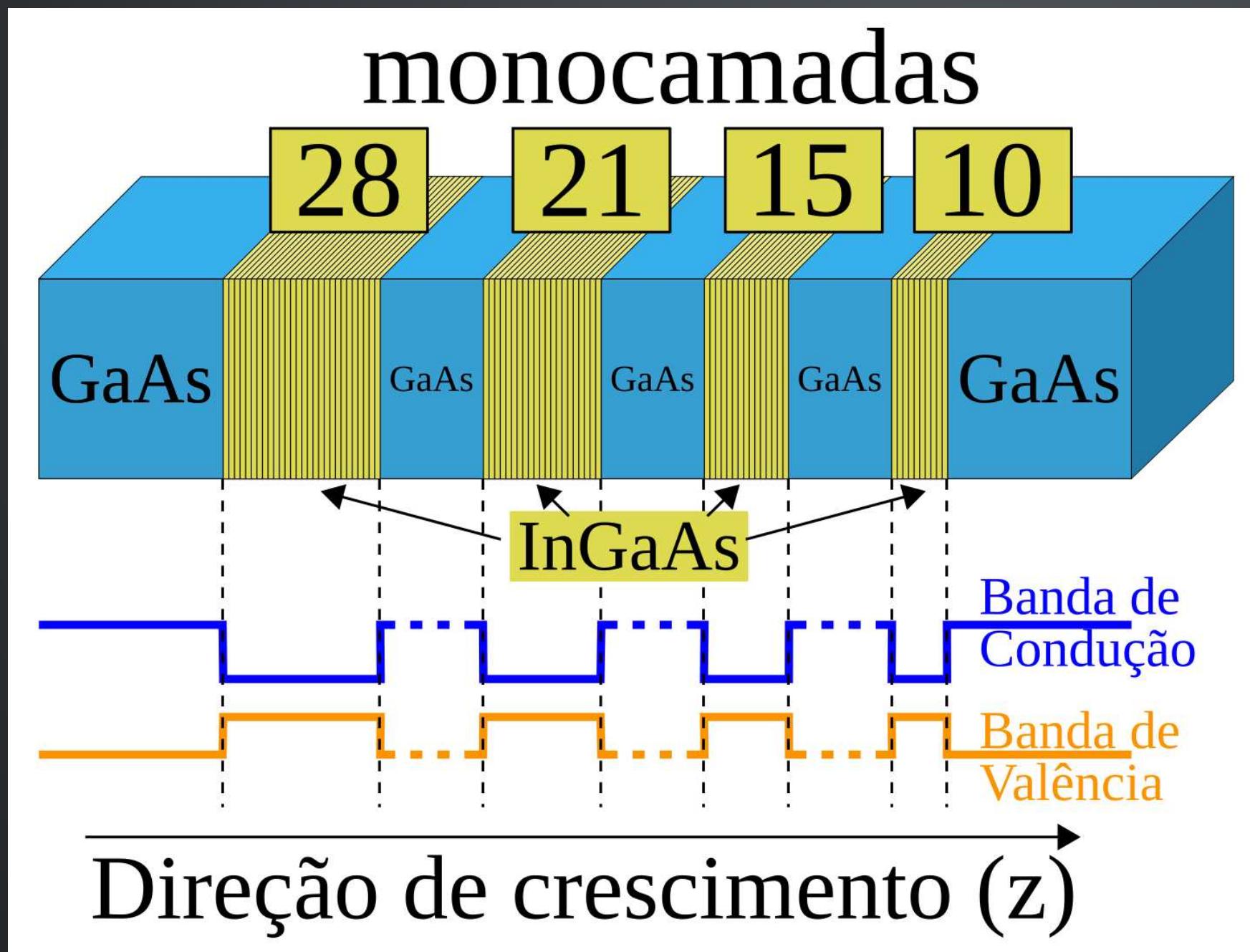
$$E_1 - E_0 \approx 153 \text{ meV}$$

$$E_2 - E_0 \approx 247 \text{ meV}$$



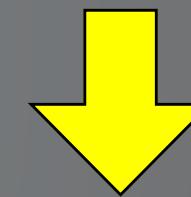
# 6º ESTUDO: NÍVEIS DE ENERGIA EM POÇOS DE InGaAs/GaAs COM TENSÃO E SEGREGAÇÃO

4 poços de  $\text{In}_{0,14}\text{Ga}_{0,86}\text{As}/\text{GaAs}$  foram crescidos no **LNMS-IFUSP**



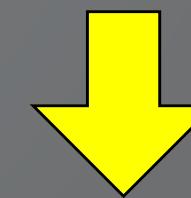
**Principal diferença:**

Efeitos de Tensão



Alteram o *GAP*

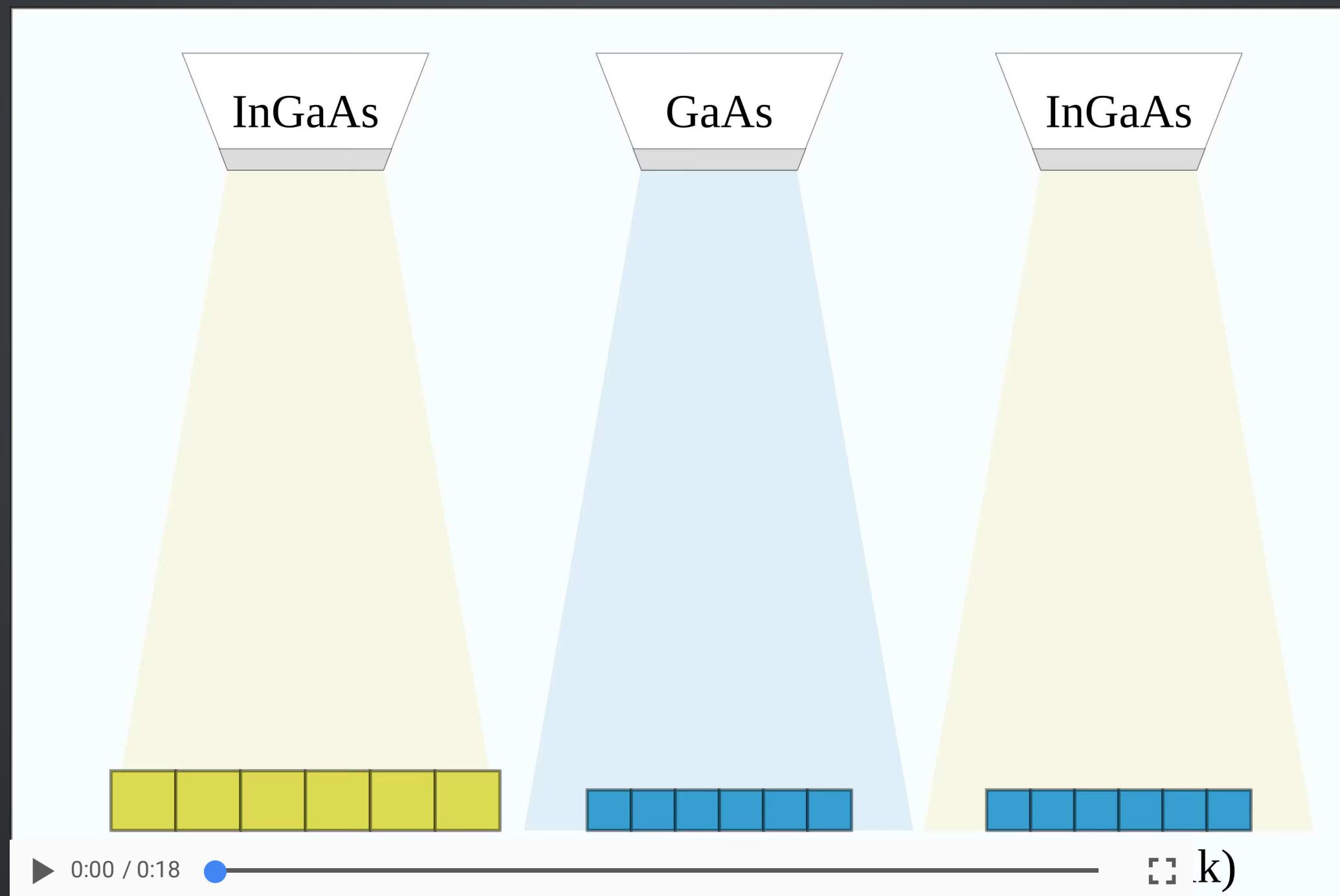
Efeitos de Segregação



Alteram o Perfil do Potencial

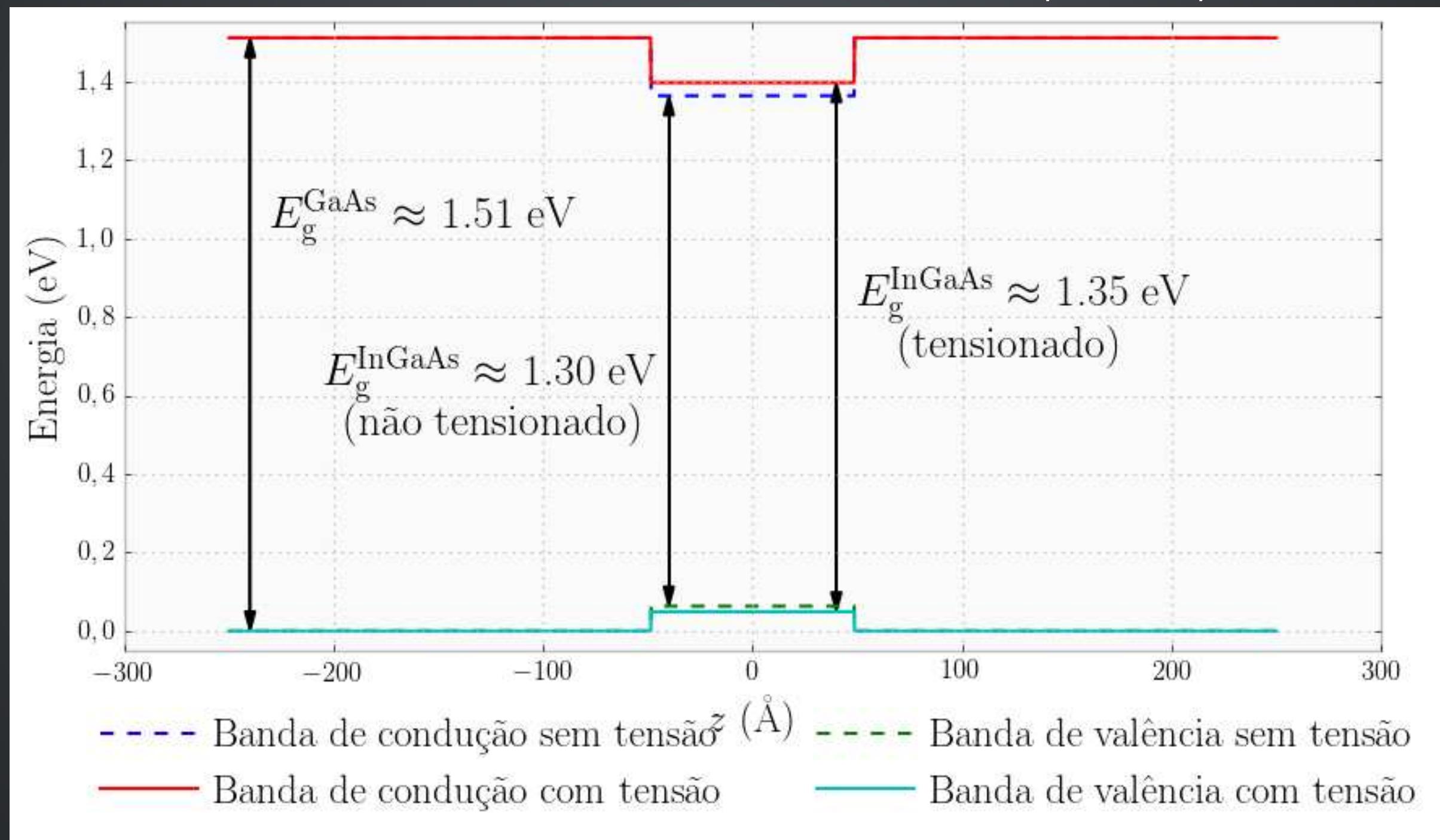
# 6º ESTUDO: NÍVEIS DE ENERGIA EM POÇOS DE InGaAs/GaAs COM TENSÃO E SEGREGAÇÃO

Tensão em InGaAs crescido sobre GaAs



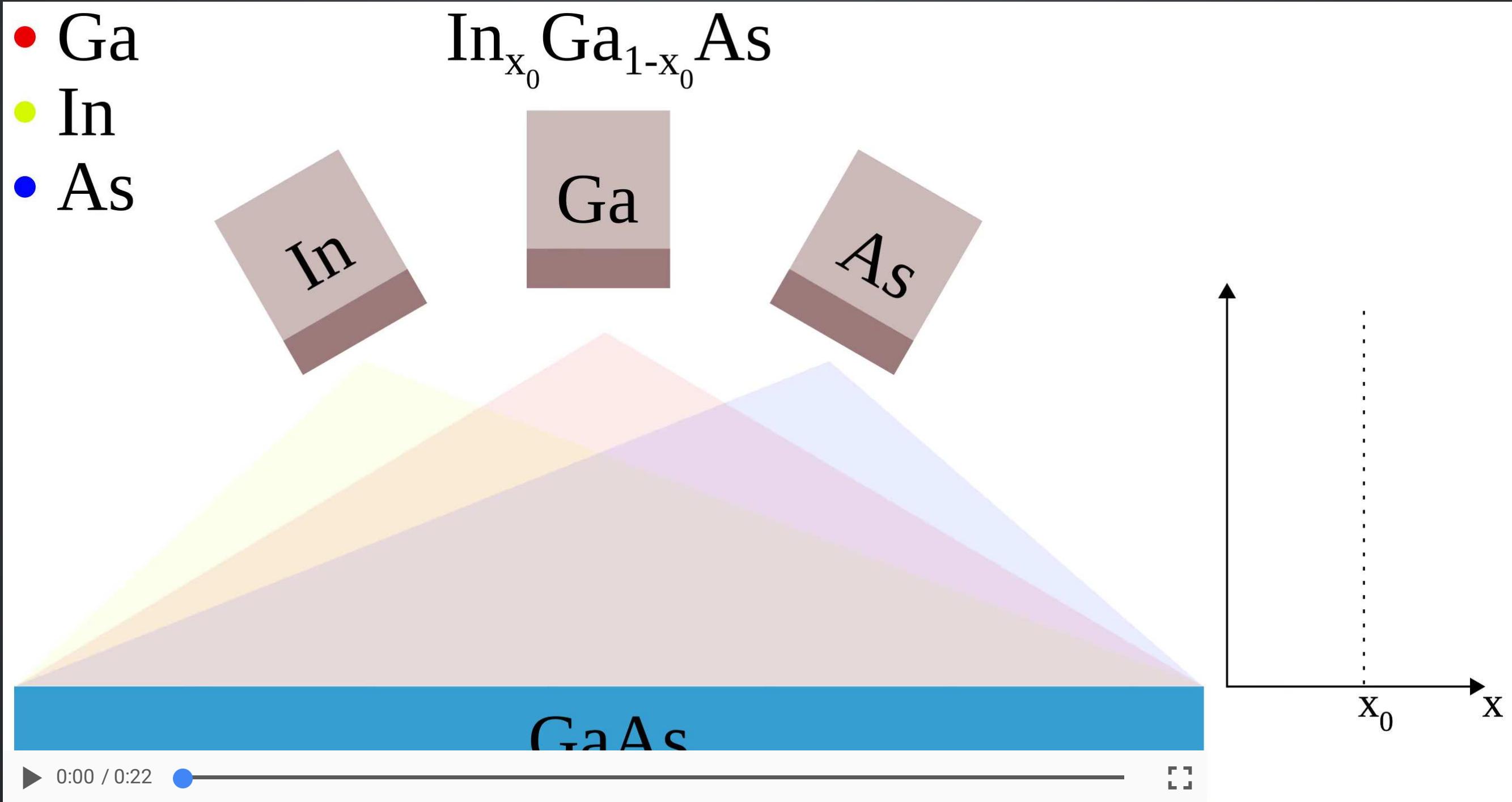
# 6º ESTUDO: NÍVEIS DE ENERGIA EM POÇOS DE InGaAs/GaAs COM TENSÃO E SEGREGAÇÃO

Tensão em InGaAs crescido sobre GaAs ( $\text{In}_{0,14}\text{Ga}_{0,86}\text{As}/\text{GaAs}$ )



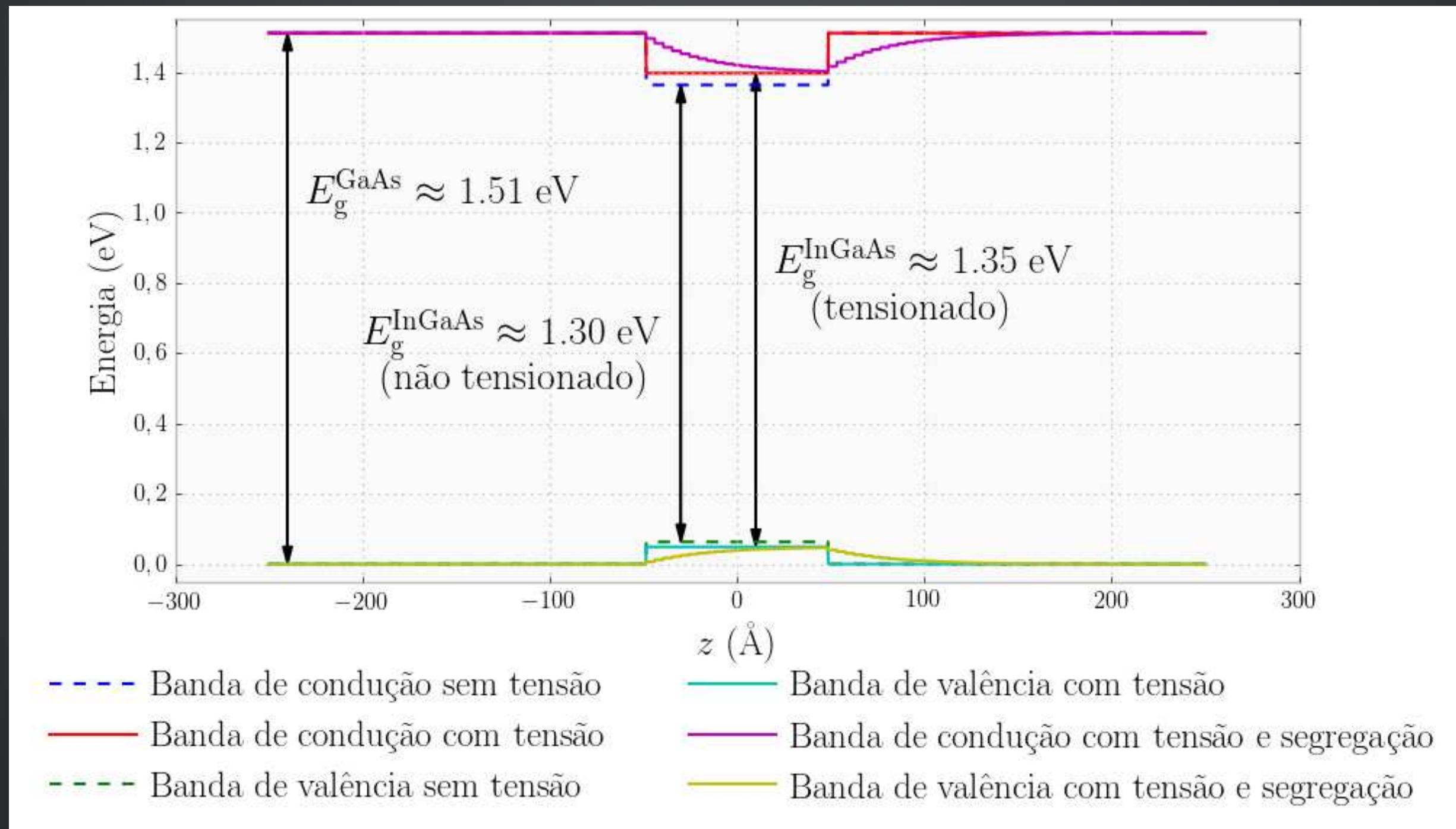
# 6º ESTUDO: NÍVEIS DE ENERGIA EM POÇOS DE InGaAs/GaAs COM TENSÃO E SEGREGAÇÃO

## Segregação de átomos de In



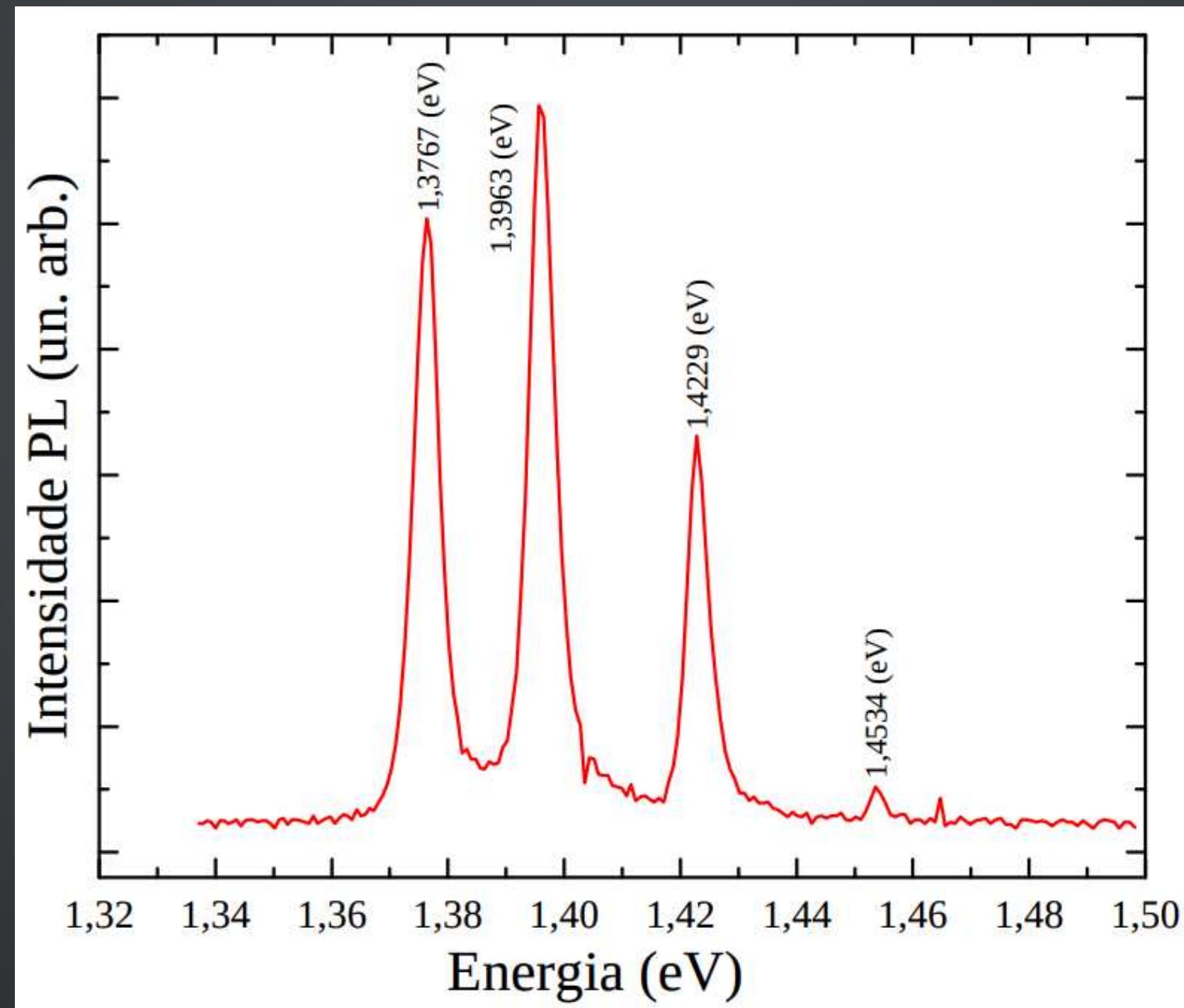
# 6º ESTUDO: NÍVEIS DE ENERGIA EM POÇOS DE InGaAs/GaAs COM TENSÃO E SEGREGAÇÃO

## Segregação de átomos de In ( $\text{In}_{0,14}\text{Ga}_{0,86}\text{As}/\text{GaAs}$ )



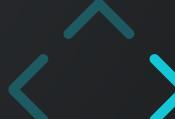
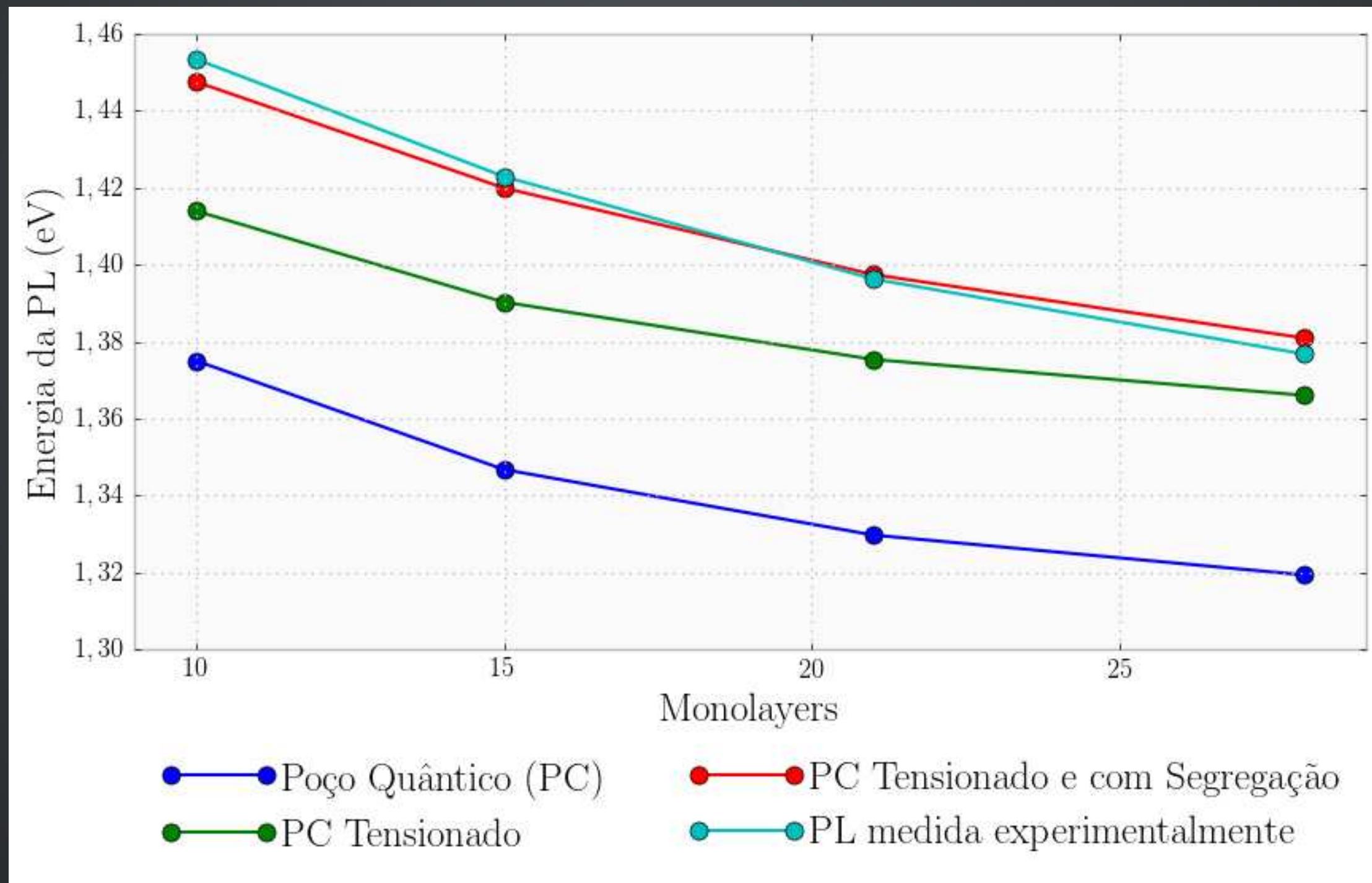
# 6º ESTUDO: NÍVEIS DE ENERGIA EM POÇOS DE InGaAs/GaAs COM TENSÃO E SEGREGAÇÃO

Fotoluminescência Experimental (PL) realizada a 77K



# 6º ESTUDO: NÍVEIS DE ENERGIA EM POÇOS DE INGaAs/GaAs COM TENSÃO E SEGREGAÇÃO

Comparação PL Experimental e resultados numéricos



# CONCLUSÃO

---

1. Podemos calcular propriedades dinâmicas com baixo custo computacional
2. A combinação de dois ou mais métodos numéricos torna o procedimento mais rápido e preciso
3. Obtivemos bom acordo com experimento para níveis de energia, seria interessante testarmos para fotocorrente

## PRÓXIMOS PASSOS

---

1. Calcular fotocorrente para uma estrutura crescida em laboratório e comparar resultado da teoria com experimento
2. Levar corrente de escuro em consideração
3. Calcular propriedades estáticas e dinâmicas de estruturas mais complexas como detectores e lasers de cascata quântica

# AGRADECIMENTOS

---



- Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Euzi C. F. da Silva
- Prof. Dr. Alain André Quivy (LNMS)
  - Dr. Sérgio Minoru Urahata
  - Thales Borrely dos Santos
  - Tiago Fernandes de Cantalice
- Prof. Dr. Alexander Gitman Levin
- Prof. Dr. Ronaldo Rodrigues Pelá

# DISTÂNCIA DE MINKOWSKI

---

$$D_p(\mathbb{X}(t), \mathbb{Y}(t)) = \left( \sum_{i=1}^3 |\mathbb{X}_i(t) - \mathbb{Y}_i(t)|^p \right)^{1/p}$$

$$\mathbb{X}(t) = (\mathbb{A}(t), \mathbb{S}(t), \mathbb{G}(t))$$

$$\begin{array}{l|l|l} \mathbb{A}(t) = \frac{\mathcal{A}(t) - \langle \mathcal{A}(t) \rangle}{\sigma(\mathcal{A}(t))} & \mathcal{A}(t) = \frac{A(t)}{A(0)} & A(t) = \langle z^0 \rangle(t) \\ \mathbb{S}(t) = \frac{\mathcal{S}(t) - \langle \mathcal{S}(t) \rangle}{\sigma(\mathcal{S}(t))} & \mathcal{S}(t) = \sigma(t) & \sigma(t) = \sqrt{\langle z^2 \rangle(t) - \mu^2(t)} \\ \mathbb{G}(t) = \frac{\mathcal{G}(t) - \langle \mathcal{G}(t) \rangle}{\sigma(\mathcal{G}(t))} & \mathcal{G}(t) = \gamma(t) & \gamma(t) = \frac{\langle z^3 \rangle(t) - 3\mu(t)\sigma^2(t) - \mu^3(t)}{\sigma^3(t)} \end{array}$$

$$\langle z^n \rangle(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^\dagger(z, t) z^n \Psi(z, t) dz$$

# PACOTE DE ONDA PLANA

---

$$\Psi(z, 0) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma_z^2}} \exp\left(ik_0 z - \frac{(z-z_0)^2}{4\sigma_z^2}\right)$$

$$\Psi(z, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left( \mathcal{F}[\Psi(z, 0)] e^{-i\omega(k)t} \right) e^{ikz} dk$$



# DISTÂNCIA EUCLIDIANA QUADRADA

---

$$D_e(\varphi_n, \psi_n) = \sqrt{\sum_i |\varphi_n(z_i) - \psi_n(z_i)|^2}$$

## EQUAÇÕES TRANSCEDENTais (PQF)

---

$$\tan\left(\sqrt{\frac{a^2 m_e^* E_n}{2\hbar^2}}\right) = \sqrt{\frac{(V_b - E_n)}{E_n}} \implies f(E_n) = \tan\left(\sqrt{\frac{a^2 m_e^* E_n}{2\hbar^2}}\right) - \sqrt{\frac{(V_b - E_n)}{E_n}} = 0$$

$$\cot\left(\sqrt{\frac{a^2 m_e^* E_n}{2\hbar^2}}\right) = -\sqrt{\frac{(V_b - E_n)}{E_n}} \implies g(E_n) = \cot\left(\sqrt{\frac{a^2 m_e^* E_n}{2\hbar^2}}\right) + \sqrt{\frac{(V_b - E_n)}{E_n}} = 0$$



# HAMILTONIANA POÇO COM BARREIRA DUPLA

---

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + V(z) - \begin{cases} ez_L(F_{est} + F_{osc} \sin(\omega t)) & \text{se } z \leq z_L \\ ez(F_{est} + F_{osc} \sin(\omega t)) & \text{se } z_L \leq z \leq z_R \\ ez_R(F_{est} + F_{osc} \sin(\omega t)) & \text{se } z \geq z_R \end{cases}$$

## POTENCIAL ABSORVEDOR

---

$$A(z) = \begin{cases} \frac{1}{1+\exp(-(z+0,45L)/5)} & \text{se } z \leq 0 \\ \frac{1}{1+\exp(-(0,45L-z)/5)} & \text{se } z > 0 \end{cases}$$



# FOTOCORRENTE

---

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \frac{e\hbar}{2im^*(\mathbf{r})} \left[ \Psi(\mathbf{r}, t) \vec{\nabla} \Psi^*(\mathbf{r}, t) - \Psi^*(\mathbf{r}, t) \vec{\nabla} \Psi(\mathbf{r}, t) \right]$$

$$I = \frac{1}{T} \int_0^T dt \left[ J(z_2, t) - J(z_1, t) \right]$$



# ABSORÇÃO

---

$$\sigma(\omega_f) = -\frac{8e\omega_f}{\varepsilon_0 c} \int_0^{T_0} dt \operatorname{Im} \{ \langle \Psi_0; t | z | 1; t \rangle \langle \Psi_0; t | 1; t \rangle \} \cos(\omega_f t) - \\ \frac{8e\omega_f}{\varepsilon_0 c} \int_0^{T_0} dt \operatorname{Im} \{ \langle \Psi_0; t | z | 2; t \rangle \langle \Psi_0; t | 2; t \rangle \} \cos(\omega_f t)$$

$$\langle \Psi_0; t | 1; t \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \Psi_0^*(z, t) \psi_1(z) e^{-iE_1 t/\hbar}$$

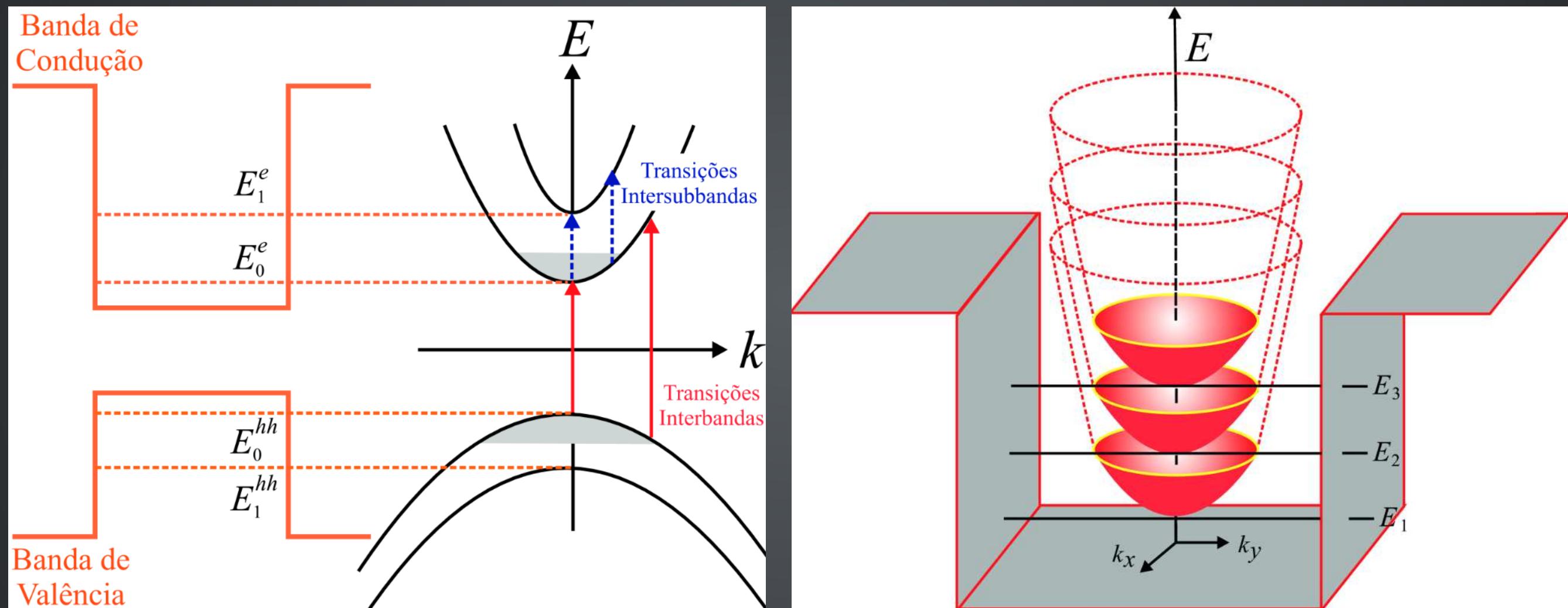
$$\langle \Psi_0; t | z | 1; t \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \Psi_0^*(z, t) z \psi_1(z) e^{-iE_1 t/\hbar}$$

$$\langle \Psi_0; t | 2; t \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \Psi_0^*(z, t) \psi_2(z) e^{-iE_1 t/\hbar}$$

$$\langle \Psi_0; t | z | 2; t \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \Psi_0^*(z, t) z \psi_2(z) e^{-iE_1 t/\hbar}$$



# POR QUE 1D?



- Função envelope
- Aproximação da massa efetiva

